

**Topologische Anregungen und externe Ladungen in
Yang-Mills-Theorien und Ising-Spin-Gläsern
bei endlichen Temperaturen**

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

der Fakultät für Mathematik und Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
Wolfgang Lutz
aus Reutlingen

2010

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Juli 2010
Dekan: Professor Dr. Wolfgang Knapp
1. Berichterstatter: Professor Dr. Hugo Reinhardt
2. Berichterstatter: Professor Dr. Kurt Langfeld
3. Berichterstatter: Professor Dr. Manfried Faber

Zusammenfassung

Die vorliegende Dissertation widmet sich der Untersuchung verschiedener physikalischer Systeme im Grenzbereich zwischen statistischer Physik und Quantenfeldtheorie mithilfe nicht-störungstheoretischer Methoden.

Im ersten Kapitel wird der von P.A.M. Dirac im Rahmen der Quantenelektrodynamik (QED) eingeführte Dressingformalismus zur Behandlung eichinvarianter Ladungen auf den Fall nicht-abelscher Eichtheorien ausgeweitet. Zunächst wird dazu eine Methode entwickelt, die es erlaubt, verschiedene Ansätze für den unbekannten Grundzustand einer Eichtheorie bei Anwesenheit eines Paares von statischen Ladungen miteinander vergleichen zu können. Dabei konzentrieren wir uns auf zwei Klassen von Zuständen, die eng mit der Wahl der axialen Eichung, sowie der Coulomb-Eichung verknüpft sind. Anhand der funktionalanalytisch zugänglichen QED wird gezeigt, dass der Vergleich der Persistenzamplituden von Zuständen, die durch Verwendung unterschiedlicher Dressings der Ladungen konstruiert werden können, auch im Rahmen der numerischen Behandlung der zugehörigen Gittereichtheorie mittels Monte-Carlo-Simulationen einen gangbaren Weg zur Untersuchung der Physik des Grundzustands darstellt. Nach einer Diskussion der Gribov-Ambiguität und der daraus resultierenden Grenzen für eine störungstheoretische Konstruktion von Dressings im Falle nicht-abelscher Eichtheorien wird der nicht-perturbative Zugang zunächst in zwei verschiedenen Realisierungsphasen einer $SU(2)$ -Eichtheorie mit fundamentalem Skalarfeld weiter verfolgt. Überraschenderweise wird der Coulomb-Zustand dabei beidesmal gegenüber dem axialen Zustand bevorzugt. Zuletzt steht die reine $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie im Kontinuumslimes auf dem Prüfstand. Es zeigt sich, dass der Überlapp des wahren Grundzustands im mesonischen Sektor mit dem axialen Zustand letztlich verschwindet, selbst wenn dessen string-artige Geometrie durch sukzessive Anwendung von Smearing-Schritten zu einem Flussschlauch endlicher Ausdehnung verändert wird. Die Kongruenz von Coulomb- und Grundzustand hingegen nimmt im Kontinuumslimes scheinbar kontinuierlich zu.

Im zweiten Kapitel wird die Rolle von Zentrumsvortices in der Theorie der starken und elektroschwachen Wechselwirkung bei endlichen Temperaturen studiert. Zunächst wird gezeigt, dass sich das in der Theorie der Quarks und Gluonen beobachtete Phänomen des *string breaking* im Rahmen des Random-Vortex-Modells auf eine Veränderung der Perkolationseigenschaften der Vortices zurückführen lassen sollte. In der anschließend durchgeführten numerischen Simulation einer vierdimensionalen $SU(2)$ -Eichtheorie mit dynamischem Skalarfeld in fundamentaler Darstellung konnte diese Vermutung bestätigt werden, was einen weiteren wichtigen Hinweis auf die Relevanz der in Direkter Maximale Zentrums-Eichung (DMCG) identifizierten Zentrumsvortices für die Beschreibung des Infrarot-Regimes der Theorie der starken Wechselwirkung liefert. Bei der Untersuchung des elektroschwachen Standardmodells bei endlichen Temperaturen hat sich gezeigt, dass eine sinnvolle Definition von Zentrumsvortices – im Gegensatz zu elementaren Z -Strings und Nambu-Monopole – auch in der dimensional reduzierten Theorie mit Hilfe von lokalen Operatoren möglich ist, die es erlaubt, Objekte zu detektieren, deren Dichte sich als invariant unter Renormierungsgruppen-Transformationen erweist. Die in der Nähe des elektroschwachen *crossover* durchgeführten Untersuchungen der Profilfunktionen und des Perkolationsverhaltens der vortex-artigen Defekte haben dabei erste Hinweise darauf geliefert, dass die Zentrumsvortices, die sich in der Hochtemperaturphase als deutlich erkennbare Inhomogenitäten im Eichfeldsektor der Theorie manifestieren, eine wichtige Rolle bei der Beschreibung des elektroschwachen Phasenübergangs spielen könnten.

Das dritte Kapitel widmet sich der Untersuchung frustrierter Systeme. Anhand des prototypischen zweidimensionalen Ising-Spin-Glases wird zunächst die Möglichkeit einer eichinvarianten Charakterisierung der Frustration durch die Dichte von \mathbb{Z}_2 -Vortices erläutert, was eine Klassifizierung verschiedener Instanzen von Spin-Gläsern unter dem Gesichtspunkt identischer thermodynamischer Eigenschaften ermöglicht. Die Rolle der Landau-Eichung bei der Berechnung der Energie des Grundzustands wird diskutiert, bevor diese als Funktion des neuen Komplexitätsparameters mit Hilfe des *minimal matching algorithm* von Edmonds exakt bestimmt wird. In anschließenden Simulationen von Spin-Gläsern bei endlichen Temperaturen wird ein Algorithmus eingesetzt, welcher in der Lage ist, der Eichinvarianz des jeweiligen Modells bei der Definition der zu aktualisierenden Cluster von Spins umfassend Rechnung zu tragen und eine effiziente numerische Behandlung dieser frustrierten Systeme in der Umgebung ihres jeweiligen pseudo-kritischen Punktes erlaubt. Nahe $T = 0$ erscheint dieser Cluster-Algorithmus aufgrund von stark anwachsenden Autokorrelationen für Untersuchungen des Grundzustands allerdings weniger gut geeignet zu sein. Die Dimensionsunabhängigkeit des Algorithmus ermöglicht es jedoch, diesen auch bei der Simulation der dimensional reduzierten Quantenchromodynamik in der Nähe ihrer kritischen Temperatur einzusetzen, da diese Theorie durch Einbettung von Ising-Spins auf ein frustriertes Spin-Modell in $d = 3$ Dimensionen mit dynamisch generierten Kopplungskonstanten abgebildet werden kann. In einer detaillierten Untersuchung des induzierten Modells hat sich zum einen die Effizienz des Cluster-Algorithmus in der Nähe des kritischen Punktes bestätigt, zum anderen wurde deutlich, dass die QCD bei hohen Temperaturen einem stark frustrierten statistischen System entspricht, während sie sich in der Phase gebrochener globaler Reflexionssymmetrie der adjungierten Skalarfelder bei niedrigeren Temperaturen als praktisch rein ferromagnetisches System erweist.

Gegenstand des letzten Kapitels ist die Untersuchung der Grundlagen des Standardmodells der elektroschwachen Wechselwirkung sowie die Frage nach einer Alternative zur Freisetzung von schwacher Isospinladung durch Kondensation der Bosonen des fundamentalen Higgs-Feldes. Zu diesem Zweck wird eine vierdimensionale $SU(3)$ -Eichtheorie mit dynamischem Skalarfeld in *adjungierter* Darstellung untersucht, welche nach Fixierung der Eichsymmetrie durch Wahl der Landau-Eichbedingung, sowie einer globalen unitären Eichbedingung einen Phasenübergang zweiter Ordnung ermöglicht, der mit der spontanen Brechung der residuellen globalen $SU(3)$ -Symmetrie einhergeht und auf eine Realisierungsphase führt, welche durch die residuelle Symmetriegruppe $H = SU(2) \times U(1)$ charakterisiert ist. Die vorliegenden Ergebnisse weisen darauf hin, dass die Kondensation der Bosonen des adjungierten Skalarfeldes während des Phasenübergangs denselben Effekt hervorruft, wie die Ausbildung eines Kondensats von fundamentalen Higgs-Bosonen bei der spontanen Symmetriebrechung im Modell von Glashow, Weinberg und Salam. Obwohl es sich beim schwachen Isospin um eine nicht-abelsche Symmetrie handelt, kann Materie, welche schwache Isospinladung trägt, im Rahmen der untersuchten effektiven Theorie dennoch frei beobachtet werden. In Verbindung mit den Untersuchungsergebnissen zum Spektrum dieser Theorie ergibt sich dabei ein sehr interessantes Bild. Neben vier massiven Anregungen im Eichfeldsektor, die mit den gebrochenen Generatoren assoziiert sind, treten scheinbar auch vier mit H assoziierte masselose Anregungen auf. Eine bestimmte Linearkombination derselben lässt sich dabei als Kandidat für ein physikalisches Photon interpretieren, welches auf eichinvariante Weise nachgewiesen werden konnte. An dem im Rahmen der vorliegenden Studie untersuchten Punkt im Phasendiagramm scheint somit eine effektive Quantenfeldtheorie vorzuliegen, die weder das Confinement-Phänomen, noch das Auftreten eines *mass gap* zeigt, obwohl die zugrunde liegende Symmetriegruppe H einen nicht-abelschen Faktor enthält.

Inhaltsverzeichnis

1	Der Grundzustand der Yang-Mills-Theorie	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Analytische Behandlung der QED	3
1.2.1	Quantisierung im Schrödinger-Bild	4
1.2.2	Dressing in der abelschen Theorie	6
1.2.3	Grundzustand und axialer Zustand	8
1.2.4	Ladungen in der QED: Confinement versus Deconfinement	10
1.2.5	Eine Methode zur Untersuchung des Grundzustands	12
1.3	Der Dressingformalismus auf dem Gitter	14
1.3.1	Eichfixierung und Dressingformalismus	14
1.3.2	Gitterformulierung der kompakten QED	17
1.3.3	Coulomb-Eichung und axiale Eichung	18
1.3.4	Sondierung des Grundzustands	20
1.4	Nicht-abelsches Dressing	25
1.4.1	Perturbative Konstruktion	25
1.4.2	Gribov-Kopien im Rahmen des Dressingformalismus	27
1.4.3	Nicht-perturbativer Zugang zum Dressingformalismus	30
1.5	Der Grundzustand im $SU(2)$ -Higgs-Modell	32
1.5.1	Numerische Ergebnisse für das $SU(2)$ -Higgs-Modell	33
1.6	Der Grundzustand der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie	35
1.6.1	Der axiale Zustand	35
1.6.2	Alternative Formen des Flusschlauchs: Die Smearing-Prozedur	38
1.6.3	Nicht-abelsches Coulomb-Dressing	41
1.7	Zusammenfassung und Ausblick	43
2	Topologische Anregungen in der Theorie der starken und elektro-schwachen Wechselwirkung	49
2.1	Einleitung	49
2.2	Dualität und Confinement durch Monopole	50
2.2.1	Der duale Supraleiter	50
2.2.2	Dualität und magnetische Monopole	51
2.2.3	Yang-Mills-Theorie und abelsche Eichungen	53
2.2.4	Einbettung topologischer Defekte	55
2.3	Confinement und Zentrumsvortices	57
2.3.1	Zentrums-Eichung und Zentrumsvortices	57
2.3.2	Das Random-Vortex-Modell: Perkolation und Confinement	61

2.4	Stringbreaking im Zentrumsvortex-Szenario	64
2.4.1	$SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit fundamentalem Higgs-Feld	66
2.4.2	Numerische Ergebnisse	67
2.5	Die Natur des elektroschwachen Phasenübergangs	75
2.5.1	Z -Strings, Nambu-Monopole und Zentrumsvortices	75
2.5.2	Dimensionale Reduktion und endliche Temperaturen	76
2.5.3	Die elektroschwache Theorie bei endlichen Temperaturen	79
2.5.4	Zentrumsvortices bei endlichen Temperaturen	81
2.5.5	Numerische Ergebnisse	81
2.6	Zusammenfassung und Ausblick	91
3	Ising-Spin-Gläser versus QCD bei endlichen Temperaturen	95
3.1	Einleitung	95
3.2	Die eichinvariante Klassifizierung von Ising-Spin-Gläsern durch Vortices	98
3.2.1	Der Grundzustand in Landau-Eichung	100
3.2.2	Die Energie des Grundzustands	101
3.3	Ein eichinvarianter Cluster-Algorithmus	105
3.4	Anwendung I: Thermische Energie und spezifische Wärme	108
3.5	Anwendung II: QCD bei endlichen Temperaturen	110
3.5.1	Diskretisierung und Einführung von Spin-Variablen	111
3.5.2	Numerische Ergebnisse	114
3.6	Zusammenfassung und Ausblick	124
4	Elektroschwache Wechselwirkung und freie Isospinladungen	127
4.1	Einleitung	127
4.2	Das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung	130
4.2.1	Globale Symmetrie und das Theorem von Goldstone	134
4.2.2	Eichsymmetrie und das Higgs-Phänomen	135
4.3	$SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie mit Skalarfeld in adjungierter Darstellung	139
4.3.1	Störungstheoretische Analyse	140
4.3.2	Diskretisierte Formulierung der Quantenfeldtheorie	142
4.4	Fixierung der Eichfreiheit: Landau-Eichung und globale unitäre Eichung	144
4.5	Numerische Ergebnisse zur Phasenstruktur	146
4.6	Das statische Potential eines Isospin-Doubletts	152
4.7	Spektroskopische Untersuchungen	158
4.7.1	Physikalische Zustände	158
4.7.2	Masselose Anregungen: Ein Kandidat für das Photon	160
4.7.3	Das Boson des adjungierten Skalarfeldes	166
4.7.4	Das Spektrum der Eichbosonen	169
4.8	Zusammenfassung und Ausblick	176
A	Diverses	181
A.1	Einheiten	181
A.2	Metriken	181
A.3	Notationskonvention	182
A.4	Fourier-Transformation	182

B Numerische Simulationen und Algorithmen	183
B.1 Markov-Prozesse und Monte-Carlo-Methoden	183
B.1.1 Metropolis-Algorithmus	184
B.1.2 Heatbath-Algorithmus	185
B.2 Heatbath-Algorithmen für Yang-Mills-Theorien	186
B.3 Algorithmen für Eichtheorien mit skalaren Feldern	188
B.3.1 $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit dynamischem Higgs-Feld	188
B.3.2 Die Verallgemeinerung des Algorithmus von Bunk	189
B.3.3 $SU(3)$ -Eichtheorie mit skalarem Feld in adjungierter Darstellung	190
B.4 Overrelaxation und mikrokanonische Reflexion	192
C Eichfixierung auf dem Gitter als Minimierungsproblem	195
C.1 Landau-Eichung und Coulomb-Eichung	195
C.1.1 Die Eichgruppen $U(1)$, $SU(2)$ & $SU(3)$	198
C.2 Direkte Maximale Zentrums-Eichung (DMCG)	201
C.2.1 Minimale Adjungierte Landau-Eichung und DMCG	203
D Gruppentheoretischer Anhang	205
D.1 Darstellungstheoretische Grundlagen	205
D.2 Nützliche Relationen für $SU(N)$	207

Kapitel 1

Der Grundzustand der Yang-Mills-Theorie

1.1 Einleitung

Eine bis heute offene Frage bei der Beschreibung der starken Wechselwirkung ist die Ursache für das Confinement-Phänomen, also der Beobachtung, dass Farbladungen nicht frei, sondern immer nur als Konstituenten insgesamt farbneutraler Systeme aufzutreten scheinen. Im Rahmen der Quantenchromodynamik als Theorie der starken Wechselwirkung wird dabei davon ausgegangen, dass der Einschluss von farbgeladenen Quarks in Hadronen bereits allein durch die Physik der Gluonen zu verstehen ist. Die gängige Vorstellung im Falle eines Mesons beispielsweise sieht dabei so aus, dass sich nach Einbringen eines Quark-Antiquark-Paares in das Vakuum der $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie eine Gluonenverteilung einstellt, welche die Ladungsquellen umgibt und die Gesamtenergie minimiert, wobei das Vakuum mit der Ausbildung eines gluonischen Flussschlauchs zwischen den Quellen reagiert, wenn man versucht, diese durch schrittweise Vergrößerung ihres Abstands voneinander zu trennen. Zwar ist die genaue Form dieser Reaktion des Vakuums nach wie vor unbekannt, ein reizvoller Aspekt bei der Annahme eines solchen *String*-Zustands ist aber zweifelsohne, dass die im Flussschlauch konzentrierte Energie linear mit der Länge des Schlauchs anwächst. Dadurch wird auf elegante Weise eine natürliche Erklärung für die Abwesenheit von farbgeladener Materie im Spektrum der Theorie der starken Wechselwirkung bereitgestellt. Tatsächlich gibt es eine Vielzahl von Hinweisen, die diese Vorstellung unterstützen. So hat sich bei der numerischen Untersuchungen diverser Yang-Mills-Theorien gezeigt¹, dass das Wilson'sche Inter-Quark-Potential $V(r)$ für große Abstände r zweier statischer Ladungen – bei Abwesenheit von dynamischen Quarks – tatsächlich linear mit r anwächst. Der Zustand, der dabei in die Konstruktion des sogenannten *Wilson-Loops* einfließt, ist ein insgesamt eichinvariantes und farbneutrales Objekt, in dem der gluonische Fluss auf einen infinitesimal dünnen Schlauch begrenzt ist. Bemerkenswert dabei ist allerdings, dass ein solcher *axialer Zustand* selbst bei kürzesten Abständen r weder die Identifizierung von eichinvarianten Konstituentenquarks zulässt, noch irgendwelche Hinweise auf einen Coulomb-artigen Potentialverlauf zeigt, der aufgrund der asymptotischen Freiheit der zugrunde liegenden Yang-Mills-Theorie zu erwarten wäre. Tatsächlich kann dieser Potentialverlauf jedoch bei kurzen Abständen der Quellen in numerischen Simulationen

¹Vergleiche etwa [BSS95] für den Fall der $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie, sowie die weiterführende Diskussion in der Einleitung zu Kapitel 4.

beobachtet werden, allerdings nur dann, wenn man mittels *overlap enhancement* [A⁺87] das *UV*-Verhalten der Gitterkonfigurationen, und damit faktisch die Gestalt des axialen Testzustands, verändert.

Obwohl der axiale Zustand also eichinvariant ist und damit die Grundvoraussetzung eines *physikalischen* Zustands erfüllt, können die zugehörigen Wilson-Loops jedoch nicht als Amplituden eines Prozesses interpretiert werden, der die zeitliche Entwicklung von *individuell* physikalischen Zuständen eines (statischen) Quarks bzw. Antiquarks beschreibt. Um einen Zustand konstruieren zu können, der eine solche Interpretation erlaubt, müsste es folglich die Möglichkeit geben, ein einzelnes Quark auf eichinvariante Art und Weise beschreiben zu können. Tatsächlich existiert ein solcher Zugang zur Konstruktion von Ladungen in Eichtheorien [LM97, BLM00a, BLM00b, ILM07]. Die grundlegende Idee geht dabei auf Dirac [Dir55] zurück, der das Konzept des sogenannten *Dressings* bei der Behandlung eines statischen Elektrons im Rahmen der QED bereits 1955 initiiert hat. Die Details der Konstruktion von zusammengesetzten Operatoren, die sowohl Materiefelder als auch Eichfelder beinhalten und zur Erzeugung von physikalischen Zuständen wohldefinierter Ladung geeignet sind, werden in Kapitel 1.2.2 diskutiert.

Es hat sich gezeigt, dass jede Eichfixierungsbedingung dazu verwendet werden kann, ein zugehöriges Dressing zu definieren und dadurch einen eichinvarianten Zustand zu konstruieren [LM97]. Im Falle statischer Ladungen erweist sich dabei die Coulomb-Eichung als besonders geeignet, da das Dressing in diesem Fall seine einfachste Form annimmt [BLM00a]. Diese Beobachtung führt nicht nur zu erheblichen Vereinfachungen bei der Konstruktion von Vielteilchenzuständen und der Auswertung interessierender Observablen, sondern ermöglicht es auch, eine Verbindung zwischen der Untersuchung von manifest eichinvarianten Zuständen auf dem Gitter und der Verwendung von analytischen Untersuchungsmethoden wie etwa dem funktionalen Hamilton-Zugang in Coulomb-Eichung [SS02, LS04, Szc04, FR04, AKKW06, SLR06, ERS07] oder der Untersuchung des nicht-abelschen Coulomb-Potentials [CZ02, Zwa03, GO03, LM04, NS06, NNS⁺06] herzustellen.

Das Ziel der vorliegenden Untersuchung ist es, neue Erkenntnisse zur Gestalt des Grundzustands von Yang-Mills-Theorien bei Anwesenheit eines Paares von statischen Testladungen unterschiedlichen Vorzeichens zu gewinnen und bereits dazu bestehende, gängige Vorstellungen auf ihre Tragfähigkeit hin zu überprüfen. Zu diesem Zweck soll zunächst eine Methode entwickelt werden, die es erlaubt, verschiedene Ansätze für den unbekannten Grundzustand miteinander zu vergleichen, um beurteilen zu können, inwiefern das jeweilige Modell in der Lage ist, die Physik des Grundzustands verschiedener Eichtheorien adäquat wiederzugeben. Dabei konzentrieren wir uns auf zwei Klassen von Zuständen, die eng mit der Wahl der axialen Eichung, sowie der Coulomb-Eichung verknüpft sind. Der *axiale Zustand*, den wir mit $|\chi\rangle$ bezeichnen wollen, beschreibt dabei ein insgesamt eichinvariantes Objekt, das durch Verbindung der statischen Ladungen mit einem gluonischen Flussschlauch entsteht und im Rahmen der QCD üblicherweise als Kandidat für ein sehr schweres Meson interpretiert wird. Der *Coulomb-Zustand* $|\Phi\rangle$ hingegen beschreibt im perturbativ zugänglichen Regime zwei individuell eichinvariante Ladungen [BLM00b]. In der Quantenelektrodynamik, die wir in Kapitel 1.2 behandeln wollen, handelt es sich dabei um den Grundzustand der Theorie. Da in diesem Fall explizite Rechnungen zum Verhalten von $|\Phi\rangle$ und $|\chi\rangle$ durchgeführt werden können, wird sich diese erste Untersuchung als ausgesprochen hilfreich dabei erweisen, um

eine Intuition für die relevanten Vorgänge zu entwickeln, die für das Verständis der Grundzustandsphysik in komplexeren Theorien wichtig werden wird. Insbesondere wird die Definition von $R(r, t)$ in Kapitel 1.2.5 als das Verhältnis der Persistenzamplituden zweier Zustände eine wesentliche Rolle spielen, denn diese Größe wird es uns ermöglichen, eine Verbindung von funktionalanalytischen und numerischen Methoden herzustellen. Durch einen Vergleich von Resultaten, die bei der Untersuchung der gewöhnlichen QED im Kontinuum, sowie der Deconfinement-Phase der kompakten QED_4 auf dem Gitter gewonnen wurden, werden wir uns davon überzeugen, dass die Untersuchung von $R(r, t)$ es uns auch in analytisch nicht mehr exakt zugänglichen Theorien erlauben sollte, unterschiedliche Ansätze für den wahren, noch unbekannten Grundzustand, miteinander zu vergleichen.

Die Ausweitung des Dressingformalismus auf den Fall nicht-abelscher Eichtheorien ist Gegenstand von Kapitel 1.4. Nach einer Diskussion der perturbativen Konstruktion von Dressings in Yang-Mills-Theorien wird die Rolle von Gribov-Kopien [Gri78, Sin78] erläutert, die bei der Fixierung unterschiedlicher Eichungen typischerweise auftreten. Aufgrund der bereits erwähnten Abwesenheit von farbgeladener Materie als asymptotischem Zustand im Spektrum der QCD, besitzt das Bild von eichinvarianten Konstituentenquarks innerhalb eines Hadrons offensichtlich nur einen begrenzten Gültigkeitsbereich. In [LM97, ILM07] wurde argumentiert, dass das Zusammenbrechen der Interpretation des Inter-Quark-Potentials bei großen Abständen als Wechselwirkung zwischen individuellen Quarks aufs Engste mit dem nicht-perturbativen Zusammenbrechen der Eichinvarianz der „bekleideten“ Ladungen verknüpft sei, was durch das Auftreten der Gribov-Ambiguität verursacht wird. Da aber andererseits in [HLLM07] gezeigt werden konnte, dass sich das Potential nach Mittelung über alle auftretenden Gribov-Kopien hervorragend aus der Persistenzamplitude des nicht-abelschen Coulomb-Zustands $|\Phi\rangle$ für alle Abstände der Quellen gewinnen lässt, stellt sich natürlich die Frage nach dessen Relevanz für die Physik des Grundzustands im mesonischen Sektor von Yang-Mills-Theorien.

Dieser Frage gehen wir zunächst in Kapitel 1.5 durch Untersuchung von zwei verschiedenen Realisierungsphasen einer $SU(2)$ -Eichtheorie mit skalarem Feld in fundamentaler Darstellung nach. Zuletzt steht in Kapitel 1.6 die einfachste Yang-Mills-Theorie $SU(2)$ auf dem Prüfstand. Dabei liegt der Fokus unserer Untersuchungen auf dem Verhalten der beiden oben diskutierten Ansätze $|\Phi\rangle$ und $|\chi\rangle$ für den Grundzustand im Kontinuumslimes.

1.2 Analytische Behandlung der QED

Quantenelektrodynamik ist die Theorie der Wechselwirkung von Licht und Materie. Die Eichfelder dieser abelschen $U(1)$ -Eichtheorie werden mit den Photonen assoziiert und die elektrisch geladene Materie wird durch fermionische Felder repräsentiert. In diesem Kapitel soll das Verhalten der Quantenelektrodynamik bei Anwesenheit von statischen externen Quellen untersucht werden. Dazu soll zunächst die Quantisierung der Theorie in funktionaler Schrödinger-Darstellung unter Vernachlässigung von dynamischen Fermionen besprochen werden, danach wird eine Einführung in den Dressingformalismus anhand dieser abelschen Eichtheorie gegeben.

1.2.1 Quantisierung im Schrödinger-Bild

Die Quantisierung der Elektrodynamik in Schrödinger-Darstellung soll im Folgenden kurz diskutiert werden. Wir verwenden die Weyl-Eichung, $A_0 = 0$ [Wey50], in welcher der Hamilton-Operator durch

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x \left[E_i(x)E_i(x) - A_i(x)(\delta_{ij}\partial^2 - \partial_i\partial_j)A_j(x) \right], \quad (1.1)$$

gegeben ist. Einführung von magnetischen Feldern der Form

$$B_i(x) = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k(x) \quad (1.2)$$

erlaubt die alternative Darstellung

$$H = \frac{1}{2} \int d^3x \left[\mathbf{E}^2(x) + \mathbf{B}^2(x) \right], \quad (1.3)$$

welche mit dem bekannten Ergebnis für freie Eichfelder übereinstimmt. Statische externe Quellen können durch die Einführung eines entsprechenden Kopplungsterms in der zugehörigen Lagrangedichte auf klassischer Ebene berücksichtigt werden. Die entsprechende Konstruktion wird in Kapitel 1.3.1 am Beispiel eines statischen Fermion-Anti-Fermion-Paares erläutert. In der quantisierten Theorie führt dies zum Auftreten eines Quellterms im Gauß'schen Gesetz, was ebenfalls weiter unten diskutiert wird. In Weyl-Eichung lässt sich die kanonische Quantisierung unmittelbar durchführen [Wey50, Jac80, Jac], da Eichpotentiale und elektrische Felder kanonisch konjugierte Variablen sind. Wir fordern also für den nicht-verschwindenden Kommutator von Operatoren, die zur selben Zeit ausgewertet werden

$$[\hat{A}_i(\mathbf{x}, t), \hat{E}_j(\mathbf{y}, t)] = i\delta_{ij}\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (1.4)$$

In der Schrödinger-Darstellung sind die Zustände $|\Psi, t\rangle$ (im Gegensatz zu den Operatoren) zeitabhängig und entwickeln sich gemäß der Schrödingergleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi, t\rangle = \hat{H}|\Psi, t\rangle \implies |\Psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\Psi, 0\rangle. \quad (1.5)$$

Die Zustände $|\Psi, t\rangle$ werden mit Wellenfunktionalen $\Psi[\mathcal{A}, t]$ identifiziert, die durch Bildung des Skalarproduktes der Zustände mit einem zeitunabhängigen Eigenzustand $|\mathcal{A}\rangle$ des Eichfeldoperators $\hat{A}_i(x)$ gewonnen werden:

$$|\Psi, t\rangle \leftrightarrow \Psi[\mathcal{A}, t] := \langle \mathcal{A} | \Psi, t \rangle, \quad \hat{A}_i(\mathbf{x}, t)|\mathcal{A}\rangle = \mathcal{A}_i(\mathbf{x})|\mathcal{A}\rangle \forall t. \quad (1.6)$$

Der Kommutator (1.4) kann auf dem Zustandsraum durch Diagonalisierung des Eichfeldoperators $\hat{A}_i(\mathbf{x})$ (zur Zeit $t=0$) und Forderung der Wirkungsweise von $\hat{E}_i(\mathbf{x})$ als Ableitung gemäß

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{A} | \hat{A}_i(\mathbf{x}) | \Psi, t \rangle &= \mathcal{A}_i(\mathbf{x})\Psi[\mathcal{A}, t], \\ \langle \mathcal{A} | \hat{E}_i(\mathbf{x}) | \Psi, t \rangle &= -i\frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i(\mathbf{x})}\Psi[\mathcal{A}, t], \end{aligned} \quad (1.7)$$

in direkter Analogie zur Ortsdarstellung in der gewöhnlichen Quantenmechanik realisiert werden. Die Eichfelder lassen sich mittels der Projektoren

$$T_{ij}(\mathbf{p}) = \delta_{ij} - \frac{p_ip_j}{\|\mathbf{p}\|^2}, \quad L_{ij}(\mathbf{p}) = \frac{p_ip_j}{\|\mathbf{p}\|^2}, \quad (1.8)$$

in transversale (T) und longitudinale (L) Anteile zerlegen, wobei $T + L = 1$, $T^2 = T$, $L^2 = L$ und $TL = 0$. Folglich sind transversale Felder in Orts- und Impulsdarstellung definiert durch

$$f_i^T(\mathbf{x}) = \int d^3y \, T_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) f_j(\mathbf{y}) \iff f_i^T(\mathbf{p}) = T_{ij}(\mathbf{p}) f_j(\mathbf{p}), \quad (1.9)$$

und Analoges gilt für die longitudinalen Teile. Bei der Quantisierung des vollen Eichpotentials muss die *Eichvarianz* des longitudinalen Anteils berücksichtigt werden. Eichinvarianz wird durch die Forderung nach Erfüllung des Gauß'schen Gesetzes auf dem Hilbertraum implementiert,

$$\langle \mathcal{A} | \partial_j \hat{E}_j(\mathbf{z}) | \Psi, t \rangle = -i \partial_j \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_j(\mathbf{z})} \Psi[\mathcal{A}, t] = \rho(\mathbf{z}) \Psi[\mathcal{A}, t], \quad (1.10)$$

wobei $\rho(\mathbf{z})$ die bereits erwähnte Ladungsdichte der externen Quellen bezeichnet. Man verifiziert leicht, dass aufgrund der Zerlegung

$$\frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i(\mathbf{x})} = T_{ik}(\mathbf{x}) \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_k^T(\mathbf{x})} + L_{ik}(\mathbf{x}) \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_k^L(\mathbf{x})} \quad (1.11)$$

das Gauß'sche Gesetz tatsächlich nur die longitudinalen Eichfreiheitsgrade betrifft, weswegen bei der Auswertung von (1.10) stets angenommen werden soll, dass sich die Ableitung auf $\mathcal{A}^L(\mathbf{x})$ bezieht. Der Hilbertraum wird somit auf den Raum der physikalischen Zustände eingeschränkt. Mittels der Projektoren (1.8) ist ebenfalls leicht nachzuweisen, dass sich der Hamilton-Operator in eine Summe aus transversalen und longitudinalen Anteilen zerlegen lässt, $H = H^T + H^L$, wobei

$$\begin{aligned} H^T &:= -\frac{1}{2} \int d^3z \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i^T(\mathbf{z})} \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i^T(\mathbf{z})} + \mathcal{A}_i^T(\mathbf{z}) \nabla^2 \mathcal{A}_i^T(\mathbf{z}), \\ H^L &:= -\frac{1}{2} \int d^3z \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i^L(\mathbf{z})} \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i^L(\mathbf{z})}. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Die Zerlegung (1.12) impliziert, dass die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators in Produkte von Wellenfunktionalen faktorisieren, $\Psi[\mathcal{A}, t] \rightarrow \Psi^L[\mathcal{A}^L, t] \Psi^T[\mathcal{A}^T, t]$, welche entweder ausschließlich von longitudinalen oder transversalen Feldern abhängen und daher separat untersucht werden können. Für die Konstruktion des Grundzustandswellenfunktionalen $\Psi_0[\mathcal{A}]$ im Vakuumsektor bedeutet dies, dass die Schrödinger-Gleichung in zwei Teile zerfällt,

$$H^T \Psi_0^T[\mathcal{A}^T] = E^T \Psi_0^T[\mathcal{A}^T], \quad (1.13)$$

$$H^L \Psi_0^L[\mathcal{A}^L] = E^L \Psi_0^L[\mathcal{A}^L]. \quad (1.14)$$

Die Lösung von (1.13) ist gegeben durch das Gauß'sche Wellenfunktional

$$\Psi_0^T[\mathcal{A}^T] := \text{Det}^{1/4} \sqrt{-\nabla^2} \exp \left[-\frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \mathcal{A}_i(-\mathbf{p}) \| \mathbf{p} \| T_{ij}(\mathbf{p}) \mathcal{A}_j(\mathbf{p}) \right]. \quad (1.15)$$

Die Determinante ist dabei im transversalen Sektor zu berechnen, und die Vakuumenergie ist durch

$$E^T := \epsilon_0 = \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \| \mathbf{p} \| \quad (1.16)$$

gegeben, welche die Gesamtenergie eines nicht-wechselwirkenden Photonengases darstellt, das den gesamten Raum ausfüllt. Die Lösung von (1.14) ist gegeben durch

$$\Psi_0^L[\mathcal{A}^L] := \text{Const.} \times \exp \left[\int d^3x J_i(\mathbf{x}) \mathcal{A}_i^L(\mathbf{x}) \right], \quad (1.17)$$

wobei $J_i(\mathbf{x})$ ein zunächst beliebiges Vektorfeld bezeichnet. Offensichtlich geht hier nur der longitudinalen Anteil von $J_i(\mathbf{x})$ ein und der zugehörige Energiebeitrag berechnet sich zu

$$E^L = -\frac{1}{2} \text{Tr}(J^2) := -\frac{1}{2} \int d^3x J_i(\mathbf{x}) J_i(\mathbf{x}). \quad (1.18)$$

Für den Grundzustand im Vakuumsektor ($\rho(\mathbf{z}) = 0$) folgt aus dem Gauß'schen Gesetz (1.10), welches ja Einschränkungen an die longitudinalen Eigenfunktionen stellt, dass J transversal sein muss, was sofort impliziert, dass die einzige Lösung $J = 0$ ist, und der Grundzustand im Vakuumsektor folglich unabhängig von \mathcal{A}^L sein muss. Bei der Berechnung der Norm des Grundzustands ergibt das Integral über \mathcal{A}^L daher als Faktor das (unendliche) Volumen der Eichgruppe, welches herauszuteilen ist und daher im Folgenden vernachlässigt wird, das transversale Integral hingegen ist korrekt normiert.

1.2.2 Dressing in der abelschen Theorie

Die Fermionen, die in der Lagrangedichte der QED auftauchen, sind selbst nicht eichinvariant und können daher auch nicht direkt mit physikalischen Objekten identifiziert werden. Dieses Problem wird im Rahmen des Dressingformalismus durch Einführung einer Funktion zu lösen versucht, die von den Eichfeldern abhängt und gewährleistet, dass der aus Fermionen und umgebenden Eichfeldern konstruierte Gesamtzustand ein eichinvariantes Objekt darstellt. Die Fermionen werden also mit speziellen Eichfeldkonfigurationen „bekleidet“, wobei die Terminologie wie bereits erwähnt auf Dirac [Dir55] zurückgeht, der die Idee des Dressings bei der Konstruktion einer statischen, eichinvarianten Ladung begründet hat.

In unserem Fall sind vorrangig jene Zustände von Interesse, die aus zwei schweren Fermionen aufgebaut sind und in der Form [Zar98b]

$$e^{W[\mathcal{A}]} q(\mathbf{x}_2) \bar{q}(\mathbf{x}_1) |0\rangle, \quad (1.19)$$

geschrieben werden können, wobei $q(\mathbf{x}_2)$ und $\bar{q}(\mathbf{x}_1)$ die Feldoperatoren eines Fermions am Ort \mathbf{x}_2 bzw. Anti-Fermions am Ort \mathbf{x}_1 darstellen und $|0\rangle$ den Vakuumzustand bezeichnet. Das Hauptaugenmerk liegt hierbei auf dem Funktional $W[\mathcal{A}]$, welches so gewählt wird², dass der Zustand unter residuellen Eichtransformationen der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j(\mathbf{x}) &\rightarrow \mathcal{A}_j^\lambda(\mathbf{x}) = \mathcal{A}_j(\mathbf{x}) + \partial_j \lambda(\mathbf{x}), \\ q(\mathbf{x}) &\rightarrow q^\lambda(\mathbf{x}) = e^{-ie\lambda(\mathbf{x})} q(\mathbf{x}), \\ \bar{q}(\mathbf{x}) &\rightarrow \bar{q}^\lambda(\mathbf{x}) = e^{ie\lambda(\mathbf{x})} \bar{q}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.20)$$

²Das Dressing besteht typischerweise aus einem „minimalen“ Anteil, der die Eichinvarianz gewährleistet, sowie einem „nicht-minimalen“ Anteil, der so gewählt wird, dass die schweren Fermionen statisch bzgl. Zeitentwicklung sind. In Weyl-Eichung ist dieser Anteil allerdings trivial. Für eine weiterführende Diskussion siehe auch [BLM00a, BLM00b].

welche nach Fixierung der Weyl-Eichung noch erlaubt sind, invariant bleibt. Diese Forderung impliziert, dass sich $W[\mathcal{A}]$ folgendermaßen transformieren muss:

$$W[\mathcal{A}^\lambda] = W[\mathcal{A}] + ie \lambda(\mathbf{x}_2) - ie \lambda(\mathbf{x}_1) . \quad (1.21)$$

Das Gauß'sche Gesetz impliziert ferner für Zustände der Form (1.19)

$$-\frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\delta}{\delta \mathcal{A}_i(\mathbf{x})} W[\mathcal{A}] = ie \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) - ie \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) . \quad (1.22)$$

Als Ansatz zur Lösung dieser Gleichung wählen wir

$$W[\mathcal{A}] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int d^3y_1 \dots d^3y_n \Gamma_{i_1 \dots i_n}(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n) \mathcal{A}_{i_1}(\mathbf{y}_1) \dots \mathcal{A}_{i_n}(\mathbf{y}_n) . \quad (1.23)$$

Unter der Annahme, dass die Integralkerne $\Gamma_{i_1 \dots i_n}$ symmetrisch bezüglich Permutationen der Argumente (i_j, \mathbf{y}_j) sind, beschränkt das Gauß'sche Gesetz die longitudinale Komponente Γ_i auf

$$-\frac{\partial}{\partial x^i} \Gamma_i(\mathbf{x}) := -\frac{\partial}{\partial x^i} \Gamma_i^L(\mathbf{x}) = ie \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) - ie \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) . \quad (1.24)$$

Außerdem folgt aus dem Gauß'schen Gesetz, dass die Integralkerne $\Gamma_{i_1 \dots i_n}$ für jeden Index $n \geq 2$ transversal sein müssen. Wir beschränken uns für den Moment auf denjenigen Anteil von $W[\mathcal{A}]$, der linear in \mathcal{A} ist. Durch Fourier-Transformation finden wir als Lösung von (1.24)

$$\Gamma_j^L(\mathbf{p}) = -\frac{e}{\|\mathbf{p}\|^2} p_j (e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_2} - e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_1}) . \quad (1.25)$$

Daher ist der longitudinale Beitrag das sogenannte „Coulomb-Dressing“

$$\begin{aligned} W[\mathcal{A}^L] &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \Gamma_j^L(-\mathbf{p}) \mathcal{A}_j(\mathbf{p}) = ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_2) - ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_1) \\ &= ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j^L(\mathbf{x}_2) - ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j^L(\mathbf{x}_1) , \end{aligned} \quad (1.26)$$

welches zuerst von Dirac als Konstruktion eines eichinvarianten, statischen Elektrons vorgeschlagen wurde [Dir55]. Die allgemeine Form eines Dressings, welches (zusammen mit den fermionischen Erzeugungsoperatoren) einen eichinvarianten Zustand eines Paares von Ladung und Anti-Ladung beschreibt, ist daher gegeben durch

$$\exp \left[ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_2) - ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_1) + J[\mathcal{A}^T] \right] , \quad (1.27)$$

wobei die transversalen Beiträge höherer Ordnung in den Eichfeldern gemäß (1.23) zum Funktional $J[\mathcal{A}^T]$ zusammengefasst wurden. Die Eichfelder \mathcal{A}_j können in den ersten beiden Termen in (1.27) auch durch ihren longitudinalen Anteil \mathcal{A}_j^L ersetzt werden. An dieser Stelle sollte nochmals betont werden, dass wir unter einem eichinvarianten Zustand mit wohldefinierter Ladung das Resultat der Wirkung eines nackten (Anti-)Fermion-Operators (oder mehrerer) auf das Vakuum in Verbindung mit einem Funktional des Eichfeldes verstehen wollen, das per Gauß'schem Gesetz (1.10) so zu konstruieren ist, dass das Eichfeld den Effekt der nackten Ladung(en) bei der Anwendung von Eichtransformationen (1.20) gerade kompensiert. Im Folgenden sollen nun verschiedene Formen von $J[\mathcal{A}^T]$ untersucht werden.

1.2.3 Grundzustand und axialer Zustand

Der longitudinale Anteil unserer Wellenfunktionale wird bereits durch das Gauß'sche Gesetz festgelegt. Dabei handelt es sich um das „Coulomb-Dressing“, welches Eigenzustand des longitudinalen Hamilton-Operators H^L ist. Den niedrigsten Eigenwert des transversalen Hamilton-Operators findet man für das Vakuumwellenfunktional (1.13). Der Grundzustand im Fermion–Anti-Fermion–Sektor ist daher gegeben ist durch eine Kombination aus [RT80, Jac, Zar98a]

$$\Phi[\mathcal{A}] := \exp \left[ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_2) - ie \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}_1) \right] \Psi_0^T[\mathcal{A}^T] \quad (1.28)$$

und den fermionischen Feldoperatoren, so dass $|\Phi\rangle = \Phi[\mathcal{A}] q(\mathbf{x}_2) \bar{q}(\mathbf{x}_1) |0\rangle$ einen Zustand minimaler Energie beschreibt, bestehend aus einer statischen, eichinvarianten Ladung bzw. Anti-Ladung. Der Erwartungswert des Hamilton-Operators

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle := E_C = \epsilon_0 + e^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1 - \cos \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)}{\|\mathbf{p}\|^2} \quad (1.29)$$

ist endlich für kleine Impulse, nach Regulierung der *UV*-Divergenz durch Einführung eines *Cut-Off* $\|\mathbf{p}\| < \Lambda$ findet sich für große Wert von Λ

$$E_C = \epsilon_0 + \frac{e^2 \Lambda}{2\pi^2} - \frac{e^2}{4\pi |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|} \left(1 + \mathcal{O}(\Lambda^{-1}) \right). \quad (1.30)$$

Der erste Term ist die bereits bekannte Vakuumenergie (1.16), und der zweite Term beschreibt die Selbstenergie der Quellen. Der dritte Term ist unabhängig vom *Cut-Off* und liefert das Coulomb-Potential zwischen den statischen Quellen. Der Grundzustand bei Anwesenheit eines Fermions und eines Anti-Fermions wird daher durch zwei Quellen beschrieben, die jeweils eichinvariant sind und von einem Coulomb-Feld umgeben werden.

Der Zustand (1.28) wurde als Produkt des Vakuumwellenfunktional $\Psi_0^T[\mathcal{A}^T]$ und des allgemeinen Dressings (1.27) für die einfachsten Wahl des transversalen Funktionalen, $J[\mathcal{A}^T] = 0$, gewonnen. Ein naheliegendes Konstruktionsprinzip für andere Arten von Dressings besteht daher in der Verwendung nicht-trivialer Funktionale $J[\mathcal{A}^T]$. In diesem Abschnitt soll ein Dressing untersucht werden, das durch

$$J[\mathcal{A}^T] = ie \int_C dz^i \mathcal{A}_i^T(z), \quad (1.31)$$

gegeben ist, wobei die Kurve C die fermionischen Quellen an den Orten \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 miteinander verbindet. Wählen wir für den Kurvenverlauf die direkte Verbindung

$$C = \{ z(s) = \mathbf{x}_1 + s(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) \mid s \in [0, 1] \} \quad (1.32)$$

so erhalten wir das sogenannte „axiale Dressing“ χ . Den Einheitsvektor in Richtung dieser Verbindungsachse $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ bezeichnen wir mit \mathbf{n} . Der Zusammenhang zwischen axialem Dressing und dem des Grundzustands (1.28) ist also gegeben durch

$$\chi[\mathcal{A}] = \exp \left[ie \int_C dz^i \mathcal{A}_i^T(z) \right] \Phi[\mathcal{A}], \quad (1.33)$$

folglich beschreibt $|\chi\rangle = \chi[\mathcal{A}] q(\mathbf{x}_2)\bar{q}(\mathbf{x}_1)|0\rangle$ ebenfalls einen eichinvarianten Zustand. Dies ist derselbe Zustand, den man im Zuge der üblichen Konstruktion eines *string*-artigen Zustands

$$\chi[\mathcal{A}] = \exp \left[ie \int_C dz^i \mathcal{A}_i(\mathbf{z}) \right] \Psi_0^T[\mathcal{A}^T], \quad (1.34)$$

durch eichinvariante Verbindung der ins Vakuum eingebrachten statischen Quellen erhält³. Dabei ist zu beachten, dass hier auch die longitudinalen Anteile des Eichfeldes in das Linienintegral eingehen. Eine Fourier-Transformation desselben führt nämlich bei Wahl der Kontur (1.32) auf

$$ie \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \left[\frac{(e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_2} - e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_1})}{i\|\mathbf{p}\|^2} p_j \mathcal{A}_j^L(p) + \frac{(e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_2} - e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}_1})}{i\mathbf{n}\cdot\mathbf{p}} n_j \mathcal{A}_j^T(p) \right], \quad (1.35)$$

wobei der erste Term gerade das bekannte Coulomb-Dressing (1.26) ergibt.

Der axiale Zustand $|\chi\rangle$ ist dabei kein Eigenzustand des Hamilton-Operators. Die Berechnung des Erwartungswertes liefert

$$\langle \chi | \hat{H} | \chi \rangle = \epsilon_0 - \frac{e^2 \Lambda}{4\pi^2} + \frac{e^2}{4\pi} \Lambda^2 |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| + \dots, \quad (1.36)$$

wobei wiederum der maximale Wert der Norm des Impulses durch Einführung eines *Cut-Off* $\|\mathbf{p}\| < \Lambda$ beschränkt wurde und im letzten Term diejenigen Beiträge angedeutet sind, die für $\Lambda \rightarrow \infty$ verschwinden. Wie in Gleichung (1.30) gibt es auch hier wieder die Vakuumenergie und einen Selbstwechselwirkungsbeitrag zum Gesamtenergie. Der dritte Term liefert ein für das Confinement-Phänomen charakteristisches Potential, die Fermionen scheinen also aufgrund des linear mit dem Abstand der Quellen anwachsenden Potentials eingeschlossen zu sein. Jedoch divergiert der Vorfaktor bei Entfernung des *Cut-Off*, daher handelt es sich bei $\chi[\mathcal{A}] q(\mathbf{x}_2)\bar{q}(\mathbf{x}_1)|0\rangle$ um einen unendlich hoch angeregten Zustand [HJ97]. Der Grund dafür ist in der Konstruktion des Flussschlauchs zu suchen, der die beiden Fermionen auf eichinvariante Weise miteinander verbindet. Die infinitesimal kleinen Ausdehnung des *strings* in den beiden Richtungen senkrecht zu \mathbf{n} führt im Endeffekt bei kleinen Abständen auf eine Divergenz der Form $\delta^2(0)$, welche vom (Quadrat des) *UV-Cut-Off* Λ^2 reguliert wird. Aus der klassischen Theorie ist bekannt, dass ein solcher Zustand instabil ist und durch Abstrahlung von Energie mit der Zeit in den energetisch bevorzugten Zustand zweier Quellen übergeht, die von einem Coulomb-Feld umgeben sind [PFS93]. Betrachtet man den Zusammenhang der beiden Zustände (1.33) unter diesem Gesichtspunkt, so liegt die Vermutung nahe, dass der zerstrahlende *string* aus der klassischen Theorie sein quantenmechanisches Analogon im transversalen, linienartigen Dressing findet.

Zur Untersuchung dieser Behauptung ist es nötig, die Zeitentwicklung der quantenmechanischen Zustände zu studieren, welche durch die Schrödinger-Gleichung diktiert wird. Im von uns gewählten Zugang, bei dem Zustände mit Wellenfunktionalen identifiziert werden, wird die Zeitentwicklung mittels des Schrödingerfunktionalen \mathcal{S} realisiert⁴,

$$\mathcal{S}[\mathcal{A}', \mathcal{A}, t] := \langle \mathcal{A}' | e^{-i\hat{H}t} | \mathcal{A} \rangle, \quad (1.37)$$

³Diese Beobachtung wird für das Verständnis des Zusammenhangs von Wilson-Loops und der Zeitentwicklung von Zuständen mit axialem Dressing – auch in der Formulierung auf dem Gitter – wichtig werden.

⁴Für die explizite Form des Schrödingerfunktionalen siehe beispielsweise [RT80, LNWW92].

und zwar durch Bildung eines Funktionalintegrals der Wellenfunktionale mit \mathcal{S}

$$\begin{aligned}\Psi[\mathcal{A}', t] &= \langle \mathcal{A}' | e^{-i\hat{H}t} |\Psi, 0\rangle = \int \mathcal{D}\mathcal{A} \langle \mathcal{A}' | e^{-i\hat{H}t} | \mathcal{A} \rangle \langle \mathcal{A} | \Psi, 0 \rangle \\ &= \int \mathcal{D}\mathcal{A} \mathcal{S}[\mathcal{A}', \mathcal{A}, t] \Psi[\mathcal{A}, 0].\end{aligned}\quad (1.38)$$

Für die Zeitentwicklung des axialen Zustands finden wir [HIL⁺08b]

$$\begin{aligned}\chi[\mathcal{A}, t] &= e^{-iE_C t} \Phi[\mathcal{A}] \exp \left[\frac{1}{2} \mathcal{N}(t) - \frac{1}{2} \mathcal{N}(0) \right. \\ &\quad \left. + e \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-i\|\mathbf{p}\|t} \left(\frac{e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_2} - e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}_1}}{\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}} \right) n_k \mathcal{A}_k^T(\mathbf{p}) \right]\end{aligned}\quad (1.39)$$

mit

$$\mathcal{N}(t) := e^2 \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\|\mathbf{p}\|} e^{-2i\|\mathbf{p}\|t} \left(\frac{1 - \cos \mathbf{p} \cdot (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)}{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2} \right) n_i T_{ij}(\mathbf{p}) n_j. \quad (1.40)$$

Der axiale Zustand zur Zeit t beinhaltet also zum einen den Coulomb-artigen Zustand $\Phi[\mathcal{A}]$, zum anderen einen zusätzlichen transversalen Beitrag sowie die zeitabhängige Normierung $\mathcal{N}(t)$. Bemerkenswert ist, dass in keinem der Ausdrücke für $\mathbf{n} \cdot \mathbf{p} = 0$ eine Divergenz auftritt, da die Differenz der Exponentialfunktionen im Zähler die üblicherweise in axialer Eichung vorhandenen Divergenzen zu regulieren scheint [KC]. Die Diskussion des Verhaltens des axialen Zustands für große Zeiten t setzt erneut die Regularisierung der auftretenden *UV*-Divergenzen durch Abschneiden der Impulsintegration voraus. Bei Anwesenheit eines solchen *Cut-Off* in (1.39) und (1.40) finden wir

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iE_C t} \chi[\mathcal{A}, t] = e^{-\mathcal{N}(0)/2} \Phi[\mathcal{A}]. \quad (1.41)$$

Dieses Resultat spiegelt also tatsächlich das aus der klassischen Theorie bekannte wider. Sowohl klassisch als auch quantenmechanisch „zerfällt“ der axiale Zustand im Limes $t \rightarrow \infty$ in den Coulomb-artigen Zustand. Die neben dem zeitlich oszillierenden Phasenfaktor auftretende Normierung garantiert die Wahrscheinlichkeitserhaltung, was im Rahmen der Diskussion der Überlappmatrixelemente von axialen und Coulomb-artigen Zuständen weiter unten nochmals aufgegriffen werden soll.

1.2.4 Ladungen in der QED: Confinement versus Deconfinement

Es wurde im vorigen Kapitel gezeigt, dass der Grundzustand der $U(1)$ -Eichtheorie bei Anwesenheit eines Paares von gegensätzlich geladenen Fermionen durch den mittels Coulomb-Dressing konstruierten Zustand (1.28) gegeben ist. Der niedrigste Energiebeitrag aufgrund der Wechselwirkung zwischen den elektrischen Ladungen ist dabei durch das bekannte Coulomb-Potential gegeben, was unsere Erwartungen für den Fall statischer Quellen bestätigt. Im Falle des mittels axialen Dressing konstruierten Zustands (1.34) hingegen generiert der (unendlich) dünne Flussschlauch, mit dem die fermionischen Quellen verbunden sind, ein linear mit dem Abstand zwischen den Ladungen anwachsendes Potential. $|\chi\rangle$ stellt dabei einen unendlich hoch angeregten und physikalisch wenig sinnvollen Zustand dar, der im Laufe der Zeit in den energetisch bevorzugten Grundzustand $|\Phi\rangle$ übergeht. Es läge daher nahe, den axialen Zustand einfach als unbrauchbar zu verwerfen, insbesondere da wir ja den Grundzustand in

dieser einfachen Theorie bereits exakt bestimmen konnten. Im Folgenden soll aber gezeigt werden, dass sich eine weitere Untersuchung der Unterschiede zwischen beiden Zuständen als fruchtbar für das Verständnis der Grundzustandsphysik in Theorien erweisen wird, von denen bekannt ist, dass sie das Confinement-Phänomen zeigen.

Der Zustand $\Phi[\mathcal{A}]q(\mathbf{x}_2)\bar{q}(\mathbf{x}_1)|0\rangle$ beschreibt zwei separat eichinvariante Fermionen, denn das Coulomb-Dressing (1.28) lässt sich in zwei Bestandteile faktorisieren,

$$\Phi[\mathcal{A}] = \exp\left[ie\frac{1}{\nabla^2}\partial_j\mathcal{A}_j(\mathbf{x}_2)\right]\exp\left[-ie\frac{1}{\nabla^2}\partial_j\mathcal{A}_j(\mathbf{x}_1)\right]\Psi_0^T[\mathcal{A}^T]. \quad (1.42)$$

Dabei stellt der erste Faktor das Dressing für $q(\mathbf{x}_2)$ dar, so daß wir ein insgesamt eichinvariantes Fermion erhalten, der zweite Faktor leistet dasselbe für $\bar{q}(\mathbf{x}_1)$. In einer Theorie ohne Confinement ist dies genau die Situation, die wir erwarten würden, nämlich die Existenz und Beobachtbarkeit einzelner Ladungen, welche sich daher durch individuell eichinvariante, asymptotische Zustände beschreiben lassen sollten. Im Gegensatz dazu existiert diese Faktorisierungseigenschaft für den axialen Zustand nicht. Jeder Versuch einer Faktorisierung des transversalen Anteils in (1.35), der aufgrund des linienartigen Beitrags (1.31) zum Dressing auftritt, führt auf Polstellen der Form, wie sie bei der Behandlung von Eichtheorien in axialer Eichung typischerweise auftreten [HIL⁺08b]. Ohne die Einführung von weiteren Regularisierungsvorschriften ist es folglich nicht möglich, den transversalen Anteil auf eindeutige Weise zu faktorisieren, und somit individuelle axiale Dressings zu konstruieren, die es uns ermöglichen würden, einer einzelnen Ladung (bzw. Anti-Ladung) einen Sinn zu verleihen.

Die physikalische Relevanz dieses Resultats ist folgende: Wir haben bereits gesehen, dass das axiale Dressing scheinbar auf einen Potentialverlauf führt, der für das Phänomen des Confinements typisch ist. Die sich anbietende physikalische Interpretation besteht nun darin, dass die Abwesenheit von individuell eichinvarianten Elektronen und Positronen in der Unmöglichkeit der Faktorisierung des Dressings zum Ausdruck kommt. Anstelle von individuellen Ladungen beschreibt der Testzustand $|\chi\rangle$ ja nur ein einziges elektrisch neutrales Objekt, zu dem die Konstituenten durch einen (unendlich) dünnen Flussschlauch zusammengebunden sind. Es ist daher interessant zu spekulieren, ob nicht der axiale Zustand in einer Theorie, die das Confinement-Phänomen zeigt, eine bessere Beschreibung des Grundzustands bietet als der Coulomb-artige Zustand.

Zur Überprüfung dieser Hypothese bietet sich die Untersuchung der kompakten QED an, welche als einfaches Modell einer Theorie mit Confinement zunächst von Polyakov [Pol75] eingeführt wurde. Hier wurde argumentiert, dass das zugehörige Gittermodell in vierdimensionaler Raumzeit einen Phasenübergang von einer Confinement-Phase zu einer Deconfinement-Phase aufweisen sollte, was später auch analytisch⁵ bewiesen werden konnte [BMK77, Pes78, Gut80]. Wir erwarten, dass sich das elektrische Feld in der Confinement-Phase in einem Flussschlauch bisher nicht näher zu spezifizierender Gestalt konzentrieren wird, der die beiden Quellen miteinander verbindet, was qualitativ vom Verlauf eines Coulomb-Feldes deutlich abweicht. Es besteht daher durchaus die Möglichkeit, dass der Grundzustand in dieser Phase signifikant von dem in Gleichung (1.28) angegebenen abweicht.

⁵Vgl. hierzu ebenfalls [Sei82] und [Kog83].

Wir stellen nun eine Methode vor, mit der es uns gelingen wird, die verschiedenen Ansätze für den Grundzustand miteinander zu vergleichen und somit Informationen über den wahren Grundzustand zu erhalten. Diese Methode soll im Folgenden bei der analytischen und numerischen Untersuchung der (kompakten) QED angewandt werden.

1.2.5 Eine Methode zur Untersuchung des Grundzustands

Unser Ziel ist es, einen Zustand $|\Psi\rangle$, der als Kandidat für den Grundzustand in Frage kommt, mit dem unbekannten, wahren Grundzustand $|\Omega\rangle$ vergleichen zu können. Als Maß für die Übereinstimmung kommt das Betragsquadrat der Überlappungsamplitude $|\langle\Omega|\Psi\rangle|^2$ in Frage. Dieser Überlapp kann für große Zeiten t aus der sogenannten Persistenzamplitude $\langle\Psi|e^{-i\hat{H}t}|\Psi\rangle$ extrahiert werden, denn nach Einfügen der Identität als Summe von Projektoren auf ein vollständiges Funktionensystem und Übergang zur euklidischen Raumzeit mittels Wick-Rotation (vgl. dazu etwa [Rot97, MM94, PS95]) erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle\Psi|e^{-i\hat{H}t}|\Psi\rangle &= \sum_n \langle\Psi|e^{-i\hat{H}t}|n\rangle\langle n|\Psi\rangle \\ &= \sum_n |\langle n|\Psi\rangle|^2 e^{-E_n t},\end{aligned}\tag{1.43}$$

wobei wie üblich E_n den Eigenwert von \hat{H} zum Eigenzustand $|n\rangle$ bezeichnet. Nach hinreichend großer Zeitentwicklung sind alle Beiträge, die von angeregten Zuständen herrühren, exponentiell unterdrückt, der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ entspricht also einem Grundzustandsprojektor [HI07]. Im Folgenden wollen wir zunächst das Verhältnis zweier Persistenzamplituden betrachten, da der von der Grundzustandsenergie bestimmte exponentielle Faktor für unsere Untersuchung des Überlapps der Testzustände mit dem Grundzustand nicht von Interesse ist. Betrachten wir also

$$R(r,t) := \frac{\langle\chi|e^{-i\hat{H}t}|\chi\rangle}{\langle\Phi|e^{-i\hat{H}t}|\Phi\rangle},\tag{1.44}$$

wobei $r := |\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1|$ den Abstand der beiden Quellen bezeichnet, die Teil der mittels (1.28) und (1.34) präparierten Zustände $|\Phi\rangle$ und $|\chi\rangle$ sind. Falls dieses Verhältnis für große Zeiten t kleiner als eins ist, so hat $|\Phi\rangle$ einen besseren Überlapp mit dem wahren Grundzustand, wohingegen $|\chi\rangle$ dem Grundzustand ähnlicher ist, falls das Verhältnis größer als eins ist.

In der gewöhnlichen, nicht-kompakten $U(1)$ -Theorie, die wir bisher studiert haben, kann (1.44) exakt berechnet werden und ist gegeben durch

$$\begin{aligned}R(r,t) &= e^{Ec t} \langle\chi|e^{-i\hat{H}t}|\chi\rangle \\ &= \exp\left[-e^2 \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{\|\mathbf{p}\|} (1 - e^{-\|\mathbf{p}\| t}) \left(\frac{1 - \cos(r \mathbf{n} \cdot \mathbf{p})}{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2}\right) n_i T_{ij}(\mathbf{p}) n_j\right], \\ &\rightarrow \exp[-\mathcal{N}(0)] \quad \text{für } t \rightarrow \infty.\end{aligned}\tag{1.45}$$

Dabei wurde in der ersten Zeile ausgenutzt, dass $|\Phi\rangle$ ein Eigenzustand des Hamilton-Operators ist. Die Abhängigkeit des zeitlichen Limes vom Abstand r der Quellen steckt in der UV -divergenten Konstante $\mathcal{N}(0)$, vgl. (1.40) im Limes $\Lambda \rightarrow \infty$, so dass der Überlapp formal verschwindet. Führen wir einen UV -Regulator ein, so ist $\mathcal{N}(0)$ positiv definit

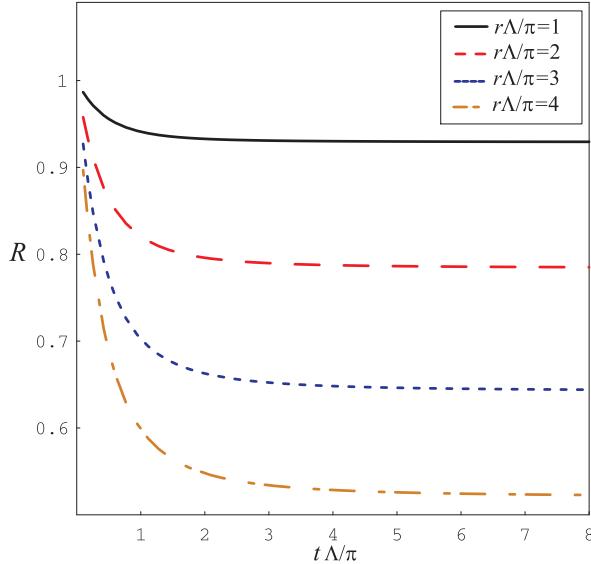


Abbildung 1.1: Das in Gleichung (1.44) definierte Verhältnis $R(r, t)$ in der nicht-kompakten QED im Kontinuum. Die Einheiten werden unterhalb von Gleichung (1.46) erläutert. Bei Zunahme des Abstands zwischen den Ladungen zeigt sich, daß der axiale Zustand eine zunehmend schlechtere Beschreibung des Grundzustands zu bieten vermag.

und somit gilt notwendigerweise $R(r, t) < 1$, was zu erwarten war, da es sich bei $|\chi\rangle$ um einen unrealistischen Testzustand, bei $|\Phi\rangle$ hingegen um den Grundzustand handelt. Schließlich ist festzuhalten, dass (1.45) bei Anwesenheit eines Regulators korrekterweise gegen das Betragsquadrat des Überlapps zwischen dem axialen und dem Coulomb-artigem Zustand konvergiert, dieser berechnet sich im Limes $t \rightarrow \infty$ zu

$$\langle \chi | \Phi \rangle = \exp[-\mathcal{N}(0)/2]. \quad (1.46)$$

In Abbildung 1.1 finden sich die Ergebnisse unserer Berechnungen des Verhältnisses (1.44). Um mit den Daten vergleichen zu können, die durch Gittersimulationen gewonnen wurden und im nächsten Abschnitt präsentiert werden, wurde $e^{-2} = 1.05$ gewählt. Längen werden in Einheiten von π/Λ gemessen. Die Wahl dieser dimensionslosen Einheiten bietet den Vorteil, dass $1/\Lambda$ mit der Gitterkonstanten in Verbindung gebracht werden kann; die Impulsintegration wird dabei auf $\|\mathbf{p}\| < \pi$ beschränkt. Zunächst ist festzustellen, dass $R(r, t)$ für alle gezeigten Werte von r und t kleiner ist als eins. Für feste Werte von r strebt $R(r, t)$ mit zunehmendem t rasch gegen den jeweiligen asymptotischen Wert $\exp[-\mathcal{N}(0)]$. Außerdem ist zu beobachten, dass sich das Verhältnis bei zunehmendem Abstand der Quellen r zu kleineren Werten hin verschiebt, und zwar für alle Zeiten t , insbesondere auch für den Grenzfall $t \rightarrow \infty$, der ja die Grundzustandsphysik sondiert. Eine Vergrößerung des Abstands r führt zur Ausbildung eines immer längeren Flussschlauchs, in dem immer mehr Energie konzentriert wird, was eine zunehmend schlechtere Beschreibung des wahren Grundzustands darstellt, dessen Coulomb-Felder radialsymmetrisch proportional zu $1/r$ abfallen.

Zuletzt wurde überprüft, wie sensibel diese Ergebnisse auf eine Änderung des zur Berechnung von $R(r, t)$ verwendeten Wertes des *Cut-Off* reagieren. Es konnte dabei festgestellt werden, dass sich bei einer weiteren Vergrößerung von Λ qualitativ nichts an dem in Abbildung 1.1 gezeigten Verhalten ändert. Die prinzipielle Frage nach der Abhängigkeit dieser Ergebnisse von der Wahl des Regularisierungsschemas wird in Kapitel 1.3.4 diskutiert werden. Dort werden wir die vorliegenden Ergebnisse mit Resultaten vergleichen können, die in einer diskretisierten Raum-Zeit nach Einführung eines Gitterregulators gewonnen werden konnten.

1.3 Der Dressingformalismus auf dem Gitter

Eine exakte analytische Behandlung der kompakten QED in $D = 3+1$ Dimensionen ist nicht möglich, obwohl die in unserem bisherigen Zugang gewählte Methode der Wellenfunktionale erfolgreich im Falle einer $D = 2+1$ dimensionalen Raumzeit angewandt werden konnte [KK95, Nol04]. Wir verändern daher unseren Zugang und erweitern unsere Untersuchungsmethoden um die Technik der Gittersimulation von Eichtheorien.

1.3.1 Eichfixierung und Dressingformalismus

Die für einen erfolgreichen Übergang von der funktionalen Kontinuumsformulierung zur Gitterformulierung entscheidende Frage ist, ob – und wenn ja, wie – es gelingen kann, den Dressingformalismus auf dem Gitter einzuführen. Es empfiehlt sich daher vor dem Übergang auf das Gitter noch einmal einen systematischen Blick auf die Konstruktion von Dressings im Rahmen der Kontinuumsformulierung zu werfen.

Die Lagrangedichte der Quantenelektrodynamik ist gegeben durch [CL84]

$$\mathcal{L}_{\text{QED}}(x) = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x) + \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi(x), \quad (1.47)$$

wobei der abelsche Feldstärketensor des Vektorpotentials $F_{\mu\nu}(x)$ und die kovariante Ableitung durch

$$F_{\mu\nu}(x) = (ie)^{-1}[D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) \quad (1.48)$$

$$D_\mu \psi(x) = [\partial_\mu + ieA_\mu(x)]\psi(x) \quad (1.49)$$

gegeben sind. Vektorpotential und Materiefelder transformieren sich unter lokalen Eichtransformationen $\Omega(x) = \exp[-ie\lambda(x)] \in U(1)$ gemäß

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu^\Omega(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega^{-1}(x) - ie^{-1}\Omega(x)\partial_\mu\Omega^{-1}(x) \quad (1.50)$$

$$\psi(x) \rightarrow \psi^\Omega(x) = \Omega(x)\psi(x) \quad (1.51)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}^\Omega(x) = \bar{\psi}(x)\Omega^{-1}(x). \quad (1.52)$$

Die Motivation für die Einführung von Dressings wurde bereits im vorigen Kapitel gegeben: Zwar ist die Lagrangedichte (1.47) per Konstruktion eichinvariant, die Materiefelder aber können *per se* aufgrund von (1.51) weder direkt mit eichinvarianten, physikalischen Observablen assoziiert werden, noch können sie allein als Erzeuger für Zustände mit wohldefinierter Ladung dienen. Dies gilt sowohl für dynamische, als auch für statische Fermionen, die uns im Folgenden bei der Untersuchung externer Quellen besonders interessieren werden.

Die Idee ist nun, stattdessen einen zusammengesetzten Operator der Form

$$\Psi[\mathcal{A}, \psi](x) := h[\mathcal{A}, x]\psi(x) \quad (1.53)$$

zu verwenden, wobei sich das Dressing $h[\mathcal{A}, x]$, welches auch als feldabhängige Eichtransformation begriffen werden kann, unter Eichtransformationen wie folgt transformieren soll:

$$h[\mathcal{A}, x] \rightarrow h[\mathcal{A}^\Omega, x] = h[\mathcal{A}, x]\Omega^{-1}(x). \quad (1.54)$$

Dadurch wird die Änderung des Materiefeldes unter Eichtransformationen (1.51) gerade kompensiert und das resultierende Objekt $\Psi[\mathcal{A}, \psi](x)$ ist eichinvariant. Dies ist die minimale Forderung, die ein zu konstruierendes Dressing erfüllen muss. Die Ausnutzung des engen Zusammenhangs, der zwischen Dressings und denjenigen Eichtransformationen besteht, die zur Realisierung einer Eichfixierungsbedingung notwendig sind, erlaubt dabei eine systematische Konstruktion von Dressings, die (1.54) erfüllen. Um dies zu verstehen ist es hilfreich, die Situation unter geometrischen Gesichtspunkten zu betrachten. Eine schematische Darstellung findet sich in Abbildung 1.2.

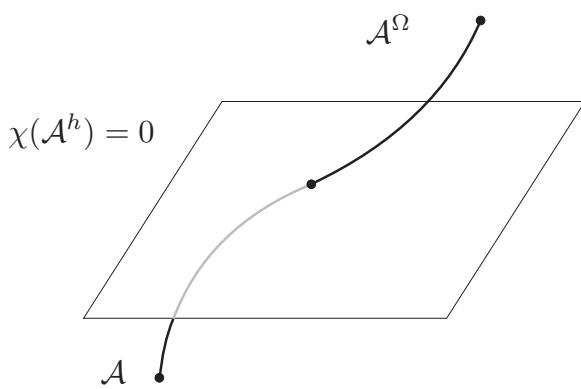


Abbildung 1.2: Die Schnittbedingung ermöglicht lokal die Auswahl eines eindeutigen Repräsentanten auf \mathcal{O}_A . Der Einfluss von Gribov-Kopien wird in Kapitel 1.4.2 diskutiert.

Es bezeichne $\chi(\mathcal{A}) = 0$ eine Eichfixierungsbedingung. Die Fixierung einer Eichung hat den Sinn, auf einem Orbit von Eichfeldkonfigurationen \mathcal{O}_A genau *einen* Repräsentanten auszuwählen, um zu einer Einschränkung des vollen Konfigurationsraum \mathcal{J} auf den Faktorraum $\mathcal{J}_0 = \mathcal{J}/\mathcal{G}$ bezüglich der Wirkung der Eichgruppe \mathcal{G} zu gelangen, der den eigentlichen Phasenraum der Theorie darstellt. Für jede Konfiguration $\mathcal{A} \in \mathcal{O}_A$ sollte demnach eine *eindeutige* Eichtransformation $h := h[\mathcal{A}]$ existieren, welche diese Konfiguration an diejenige Stelle auf dem Orbit transformiert, an der die Eichfixierungsbedingung $\chi(\mathcal{A}^h) = 0$

erfüllt ist. Dadurch gelangt man zu einer konkreten Beschreibung des Faktorraums, den man mit der Menge aller Eichfeldkonfigurationen, die diese sogenannte Schnittbedingung erfüllen, identifiziert.

Sei nun \mathcal{A}^Ω ein anderer Repräsentant auf dem Orbit, so überführt nun eine andere Eichtransformation $h^\Omega := h[\mathcal{A}^\Omega]$ diese Konfiguration in diejenige, welche die Eichfixierungsbedingung erfüllt, $\chi((\mathcal{A}^\Omega)^{h^\Omega}) = 0$. Die Eichtransformation h^Ω kann auch als Hintereinanderausführung zweier Eichtransformationen betrachtet werden, und unter der Annahme der Eindeutigkeit der Eichfixierungsbedingung folgt somit

$$(\mathcal{A}^\Omega)^{h[\mathcal{A}^\Omega]} := \mathcal{A}^{h[\mathcal{A}^\Omega]\Omega} = \mathcal{A}^{h[\mathcal{A}]} , \quad (1.55)$$

für jedes Ω , und folglich

$$h[\mathcal{A}^\Omega] \Omega = h[\mathcal{A}] \implies h[\mathcal{A}^\Omega] = h[\mathcal{A}] \Omega^{-1} . \quad (1.56)$$

Daher besitzt $h[\mathcal{A}]$ offenbar genau das gewünschte Transformationsverhalten eines Dressings.

Wählen wir nun im Falle der QED als eine mit der bereits fixierten Weyl-Eichung $A_0 = 0$ kompatiblen Bedingung beispielsweise die Coulomb-Eichung (für den longitudinalen Anteil der Eichfelder)

$$\chi^C(\mathcal{A}^h(x)) := \partial_j \mathcal{A}_j^h(x) = 0 , \quad (1.57)$$

so führt dies nach (1.50) auf die das Funktional $h[\mathcal{A}, x]$ bestimmende Gleichung

$$\partial_j \left(h(x) \mathcal{A}_j(x) h^{-1}(x) - \frac{i}{e} h(x) \partial_j h^{-1}(x) \right) = 0 , \quad (1.58)$$

die in der Schrödingerdarstellung auszuwerten ist, in welcher der zum Vektorpotential gehörende Operator Diagonalgestalt besitzt. Es ist leicht nachzurechnen, dass ein Ansatz der Form $h[\mathcal{A}](x) = \exp(iv[\mathcal{A}, \mathbf{x}])$ auf die bereits von Dirac [Dir55] angegebene Lösung

$$v[\mathcal{A}, \mathbf{x}] = e \frac{1}{\nabla^2} \partial_j \mathcal{A}_j(\mathbf{x}) \quad (1.59)$$

zur Beschreibung eines einzelnen, statischen Elektrons führt. Durch Verwendung von h^{-1} kann das physikalische Positron konstruiert werden, für einen Elektron-Positron-Zustand findet sich daher die bereits auf anderem Wege gewonnene Lösung (vgl. 1.28) wieder.

Durch Wahl unterschiedlicher Eichbedingungen können also systematisch unterschiedliche Dressings konstruiert werden, deren physikalische Bedeutung für die daraus konstruierten Zustände zu untersuchen bleibt. Für die beiden bisher betrachteten Dressings handelt es sich bei den zugehörigen Eichbedingungen um die Coulomb-Eichung (1.57) und um die axiale Eichung

$$\chi^A(\mathcal{A}^h(x)) := n_j \mathcal{A}_j^h(x) = 0 . \quad (1.60)$$

Erfüllen die Eichfelder bereits die jeweilige Eichfixierungsbedingung, so erweist sich das zugehörige Dressing als trivial:

$$h[\mathcal{A}, \mathbf{x}]|_{\chi(\mathcal{A}^h(x)=0)} = 1 . \quad (1.61)$$

Zur Vorbereitung des Übergangs von der Kontinuumsformulierung auf das Gitter wollen wir zuletzt die Behandlung von externen Ladungen im Rahmen des Pfadintegralformalismus kurz rekapitulieren. Dazu betrachten wir zunächst die Zustandssumme

$$\mathcal{Z}[j] = \int \mathcal{D}\mathcal{A} \exp \left[- \int d^4x \{ \mathcal{L}(x) + j_\mu(x) \mathcal{A}_\mu(x) \} \right] , \quad (1.62)$$

wobei $j_\mu(x)$ die Stromdichte der äußeren Quellen bezeichnet. Außerdem soll implizit angenommen werden, dass sowohl das Integrationsmaß, als auch die Lagragedichte in (1.62) eichfixierende Terme enthalten, die es uns ermöglichen, $\mathcal{Z}[j]$ in einer Eichung unserer Wahl auszuwerten. Zunächst soll die Quelle aus einem statischen Fermion, sowie einem Anti-Fermion im Abstand r voneinander bestehen. Wählen wir die Coulomb-Eichung (1.57), so reduziert sich das Dressing des Zustands (1.28) auf die Identität

$$|\Phi\rangle|_{\partial_i \mathcal{A}_i(x)=0} = |q(\mathbf{x}_2)\bar{q}(\mathbf{x}_1)\rangle := q(\mathbf{x}_2)\bar{q}(\mathbf{x}_1)|\Psi_0^T[\mathcal{A}^T]\rangle , \quad (1.63)$$

und die Erzeugung eines statischen Fermions am Ort \mathbf{x}_2 sowie eines Anti-Fermions am Ort \mathbf{x}_1 kann durch die Quellenfunktion

$$\rho(\mathbf{z}) := j_0(\mathbf{z}) = e [\delta(\mathbf{z} - \mathbf{x}_2) - \delta(\mathbf{z} - \mathbf{x}_1)] \quad (1.64)$$

beschrieben werden. Nehmen wir ferner an, dass dieser Zustand für einen Zeitraum T existieren soll, bevor die Ladungen schließlich wieder annihiliert werden, so berechnet sich die zugehörige Amplitude zu

$$\langle \Phi | e^{-\hat{H}T} | \Phi \rangle = \mathcal{Z}[0]^{-1} \int_{\partial_i \mathcal{A}_i=0} \mathcal{D}\mathcal{A} \exp \left[- \int d^4x \{ \mathcal{L}(x) + \rho(\mathbf{x}) \mathcal{A}_0(\mathbf{x}, t) \} \right] . \quad (1.65)$$

Führen wir schließlich noch sogenannte *kurze Polyakov-Linien*

$$P(\mathbf{x}, T) := \mathcal{T} \exp \left[ie \int_0^T dt A_0(t, \mathbf{x}) \right] \quad (1.66)$$

ein, so lässt sich die interessierende Persistenzamplitude als Zweipunkt-Funktion in der Form [HLLM07]

$$\langle \Phi | e^{-\hat{H}T} | \Phi \rangle = \langle P^C(\mathbf{x}_2, T) P^C(\mathbf{x}_1, T)^\dagger \rangle \quad (1.67)$$

schreiben, wobei die kurzen Polyakov-Linien in Coulomb-Eichung auszuwerten sind. Diese Konstruktion wurde ursprünglich von Marinari *et al.* [MPPT93] zur Untersuchung des asymptotischen Anteils des Inter-Quark-Potentials der $SU(3)$ -Eichtheorie auf dem Gitter eingeführt und im Folgenden auch bei der Untersuchung des (Farb-) Coulomb-Potentials zwischen statischen Quellen in diversen Theorien [GO03, GOZ04] erfolgreich eingesetzt. Unser Interesse hingegen richtet sich primär auf den Überlapp des Coulomb-artigen Zustands $|\Phi\rangle$, sowie des axialen Zustands $|\chi\rangle$ mit dem wahren Grundzustand $|\Omega\rangle$. Die Extraktion des statischen Inter-Quark-Potentials aus den Amplituden (1.43) wird daher nur zu Illustrationszwecken durchgeführt.

1.3.2 Gitterformulierung der kompakten QED

Auf dem Gitter sind die mit den Eichfeldern assoziierten Freiheitsgrade die Felder

$$U_\mu(x) = \exp(i\theta_\mu(x)) , \quad -\pi < \theta_\mu(x) \leq \pi , \quad (1.68)$$

welche auf den Verbindungen (*links*) zwischen den Gitterpunkten x des vierdimensionalen euklidischen Raum-Zeit-Gitters leben, und daher oft selbst als *Links* oder Link-Variablen bezeichnet werden. Die Zustandssumme der Theorie ist gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_\mu \exp \left[\beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} \cos(\theta_{\mu\nu}(x)) \right] , \quad (1.69)$$

wobei der Simulationsparameter β mit e , der nackten elektrischen Kopplungskonstanten, über $\beta = e^{-2}$ verknüpft ist und die auf Wilson zurückgehende Form der Wirkung verwendet wurde. Die sogenannten Plaquetten-Winkel sind dabei definiert durch

$$\theta_{\mu\nu}(x) := \theta_\mu(x) + \theta_\nu(x + \mu) - \theta_\mu(x + \nu) - \theta_\nu(x) . \quad (1.70)$$

In der Kontinuumsformulierung der QED kann der abelsche Wilson-Loop exakt berechnet werden [BBJ81, ZJ96] und das daraus gewonnene Potential stimmt in $D = 3 + 1$ Dimensionen mit dem erwarteten Coulomb-Potential überein. In der durch Einführung eines Gitters regularisierten Theorie besteht in zwei Grenzfällen die Möglichkeit, interessierende Observablen in Störungstheorie zu berechnen. Dabei handelt es sich um die Limites starker ($\beta \rightarrow 0$) und schwacher Kopplung ($\beta \rightarrow \infty$). Es zeigt sich, dass der Wilson-Loop in $D = 3 + 1$ Dimensionen für jede betrachtete Ordnung einer Entwicklung im Limes schwacher Kopplung ein Umfangsgesetz aufweist⁶, was einem asymptotisch konstanten Wert des Potentials entspricht, hingegen im Limes starker Kopplung einem Flächengesetz folgt, was einem linearen

⁶Der Beweis der Existenz einer Coulomb-Phase der Theorie in diesem Grenzfall wurde dabei unter Verwendung der Villain'schen Form der Wirkung geführt [Gut80].

Ansteigen des Potentials entspricht [Rot97, ZJ96]. Die perturbative Untersuchung weist also darauf hin, dass die Theorie in den beiden Grenzfällen in unterschiedlichen Phasen realisiert sein sollte.

Aufgrund der Kompaktheit des Definitionsintervalls der Freiheitsgrade (1.68) ermöglicht die $U(1)$ -Theorie auf dem Gitter das Auftreten magnetischer Monopole. Durch hochgenaue Messungen konnte gezeigt werden, dass für einen kritischen Wert von $\beta_{\text{crit}} = 1.0111331(15)$ in der $D = 3+1$ dimensionalen Theorie [VdF04] tatsächlich ein Phasenübergang auftritt. Unterhalb des Phasenübergangs ($\beta < \beta_{\text{crit}}$) führt das Auftreten der magnetischen Monopole mittels des dualen Meissner-Effekts [Pol75] zum Einschluss der elektrischen Ladungen, was durch Gittersimulation eindrucksvoll bestätigt werden konnte [DT80, SW92]. Am Phasenübergang fällt die Monopoldichte rapide ab und für $\beta \geq \beta_{\text{crit}}$ ist die Monopolbildung so stark unterdrückt, dass die Theorie in der gewöhnlichen Coulomb-Phase realisiert ist. In diesem Zusammenhang sollte darauf hingewiesen werden, dass die gewöhnliche QED am kritischen Punkt $\beta \rightarrow \infty$ der kompakten QED realisiert ist und der Phasenübergang erster Ordnung bei β_{crit} die Coulomb-Phase strikt von der Confinement-Phase trennt, welche daher keinen Kontinuumslices besitzt und somit letztlich als Artefakt der diskretisierten Formulierung anzusehen ist.

Unsere Simulationen wurden für die Parameterwerte $\beta = 1.0$ (Confinement-Phase), sowie $\beta = 1.05$ (Coulomb-Phase) auf Gittern der Größe 12^4 durchgeführt. Ein wichtiges Detail ist, dass offene Randbedingung für die räumlichen Richtungen, sowie periodische Randbedingungen in zeitlicher Richtung verwendet wurden. Dies erweist sich als notwendig, um die axiale Eichung auf dem Gitter richtig implementieren zu können, was weiter unten noch diskutiert wird. Um Randeffekte zu minimieren wurde daher bei allen Messungen immer ein Abstand von zwei Gitterkonstanten zum Rand eingehalten. Den Messergebnissen der untersuchten Observablen liegt in jeder der beiden Phasen ein Ensemble von je 20.000 Konfigurationen zugrunde. Diese wurden mittels des in Anhang B beschriebenen Heatbath-Algorithmus in Verbindung mit mikrokanonischen Reflexionen erzeugt, wobei ein sogenannter *supersweep* als Zusammenfassung eines Heatbath-Updates des gesamten Gitters, gefolgt von einer dreimaligen Anwendung des Algorithmus zur mikrokanonischen Reflexion der Link-Variablen definiert wurde. Zum Start der Simulationen wurden sowohl völlig geordnete (*cold*), als auch völlig ungeordnete (*hot*) Konfigurationen herangezogen und im Folgenden die Entwicklung des Systems ins thermische Gleichgewicht überwacht. Dabei konnte nachgewiesen werden, dass die Wahl der Ausgangskonfiguration nach einer Thermalisierungsphase von 1000 *supersweeps* in keiner der beiden Phasen einen nachweisbaren Einfluss auf die Messergebnisse hatte.

1.3.3 Coulomb-Eichung und axiale Eichung

Wie bereits diskutiert, erweisen sich die Korrelationsfunktionen von kurzen Polyakov-Linien der zeitlichen Ausdehnung T und räumlichem Abstand r als besonders relevant bei der Beschreibung der Zeitentwicklung eines Zustands, bestehend aus einem statischen Quark und Antiquark. Auf dem Gitter wird dabei die Propagation eines statischen Fermions am Ort \mathbf{x} über einen Zeitraum T hinweg durch die Polyakov-Linie

$$P^h(\mathbf{x}, T) := \prod_{t=0}^{T-1} U_4^{h[U]}(\mathbf{x}, t) \quad (1.71)$$

in Analogie zu (1.66) beschrieben, wobei $\{U_\mu^{h[U]}(x)\}$ die Links nach Fixierung der Coulomb-Eichung bezeichnet. Im Falle eines Anti-Fermions ist die hermitesch konjugierte Polyakov-Linie zu verwenden, so dass sich für die Persistenzamplitude $C_{\Phi\Phi}(r, T)$ des eichinvarianten Zustands $|\Phi\rangle$, bestehend aus einem statischen Fermion am Ort \mathbf{x}_2 sowie einem Anti-Fermion am Ort \mathbf{x}_1 im Abstand r der Ausdruck

$$C_{\Phi\Phi}(r, T) := \langle \Phi | e^{-\hat{H}T} | \Phi \rangle = \langle P^h(\mathbf{x}_2, T) P^h(\mathbf{x}_1, T)^\dagger \rangle \quad (1.72)$$

ergibt. Es ist dabei interessant zu beobachten, dass sich der Effekt von Eichtransformationen $\Omega(x) = \exp[i\alpha(x)]$, welche an den Link-Variablen gemäß

$$U_\mu(x) \rightarrow U_\mu^\Omega(x) = \exp[-i\alpha(x + \mu) + i\alpha(x)] U_\mu(x), \quad -\pi < \alpha(x) \leq \pi \quad (1.73)$$

durchgeführt werden, nur an den Enden der Polyakov-Linien bemerkbar macht. In Coulomb-Eichung ist das Dressing des eichinvarianten Coulomb-Zustands $|\Phi\rangle$ trivial und die gesamte Information über die ursprüngliche Konstruktion des Zustands steckt nun in den Enden der Polyakov-Linien. Genau dasselbe geschieht, wenn wir die Persistenzamplitude des axialen Zustands $|\chi\rangle$ untersuchen wollen. Wählen wir die axiale Eichung, so überträgt sich der Effekt des axialen Dressings von den Ladungen wieder auf die (Enden der) kurzen Polyakov-Linien. Im allgemeinen Fall betrachten wir also Korrelatoren von Polyakov-Linien, die in der Zeitschicht $x^4 = 0$ beginnen und bei $x^4 = T$ enden, wobei diese Zeitschichten in eine spezielle Eichung gebracht werden, was der Wahl des Dressings $h[U]$ für die Testladungen entspricht. In unserem Fall müssen daher sowohl die Coulomb-Eichung, als auch die axiale Eichung auf dem Gitter realisiert werden.

Die Fixierung der Coulomb-Eichung wurde dabei durch iterative Maximierung des eichfixierenden Funktionalen

$$\mathcal{F}[U^\Omega] = \sum_{\mathbf{x}, t} \sum_{i=1}^3 \operatorname{Re} U_i^\Omega(\mathbf{x}, t) \quad (1.74)$$

für jede Zeitschicht separat bezüglich $\alpha(x)$ implementiert. Die Details der numerischen Realisierung finden sich in Anhang C. Unseren Simulationen liegt ein Wert von $\delta^2 < 10^{-12}$ für das Abbruchkriterium der Eichfixierungsprozedur zugrunde, dabei ist zu beachten, dass die in die Definition von δ^2 eingehende Anzahl an Gitterpunkten aufgrund der Verwendung von offenen Randbedingung auf die Anzahl innerer Gitterpunkte $N_{\text{in}} = (N_t - 2)^3 \times N_t$, ($i = 1, 2, 3$), reduziert ist. Nach Abschluss der Eichfixierung existiert noch immer die Möglichkeit, rein zeitabhängige Eichtransformationen der Form

$$U_i(\mathbf{x}, t) \rightarrow U_i^\Omega(\mathbf{x}, t) = \Omega(t) U_i(\mathbf{x}, t) \Omega^\dagger(t), \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.75)$$

$$U_4(\mathbf{x}, t) \rightarrow U_4^\Omega(\mathbf{x}, t) = \Omega(t) U_4(\mathbf{x}, t) \Omega^\dagger(t + 1) \quad (1.76)$$

durchzuführen, welche mit der Eichbedingung verträglich sind. Dabei handelt es sich in jeder festen Zeitschicht um eine globale Symmetrietransformation. Da die Durchführung derartiger Eichtransformationen aber keinen Einfluss auf die von uns zu untersuchenden Größen (1.72) hat, war es nicht nötig, diese residuelle Eichfreiheit noch vollständig zu fixieren.

Während die Fixierung der Coulomb-Eichung ein nicht-lineares Optimierungsproblem darstellt, kann die Fixierung der axialen Eichung ohne Probleme direkt implementiert werden.

Die Eichfixierungsbedingung lautet

$$\mathcal{A}_3(x) = 0 , \quad \text{gleichbedeutend mit} \quad U_3^\Omega(x) = \mathbb{1} , \quad (1.77)$$

wobei der im Rahmen der analytischen Behandlung eingeführte Einheitsvektor \mathbf{n} nun in die 3–Richtung zeigen soll. Nehmen wir an, es gäbe N_3 Gitterpunkte in der 3–Richtung, und dass die Eichtransformationen gemäß

$$\Omega_k := \Omega(x_k) \quad \text{mit} \quad x_k := (x^1, x^2, ka, x^4) , \quad k = 1 \dots N_3 \quad (1.78)$$

nummeriert seien. Die entscheidende Beobachtung ist nun, dass die Eichtransformationen Ω_1 und Ω_{N_3} aufgrund der offenen Randbedingungen unabhängig voneinander sind, und es daher immer möglich ist, die Eichtransformation Ω_{k+1} so zu wählen, dass

$$U_3^\Omega(x_k) = \Omega_k U_3(x_k) \Omega_{k+1}^\dagger = \mathbb{1} \quad (1.79)$$

erfüllt ist⁷. Bis auf eine residuelle Eichfreiheit in der Wahl des unbestimmten Ω_1 ist die axiale Eichung in Richtung \mathbf{n} damit vollständig fixiert.

1.3.4 Sondierung des Grundzustands

Nachdem nun geklärt ist, wie der Dressingformalismus auf dem Gitter implementiert werden kann, soll nun die Relevanz verschiedener, im Rahmen des Dressingformalismus zu konstruierenden Testzustände für die Grundzustandsphysik erklärt werden, indem ihr Überlapp mit dem wahren Grundzustand durch Berechnung der in (1.44) definierten Größe $R(r, t)$ untersucht wird.

Zu diesem Zweck ist es sinnvoll, zunächst die folgende Matrix von Übergangssamplituden $C_{\psi'\psi} := \langle \psi' | e^{-\hat{H}t} | \psi \rangle$ einzuführen:

$$M(r, t) = \begin{pmatrix} C_{\Phi\Phi}(r, t) & C_{\chi\Phi}(r, t) \\ C_{\Phi\chi}(r, t) & C_{\chi\chi}(r, t) \end{pmatrix} . \quad (1.80)$$

Dadurch wird es uns ermöglicht, für feste Werte von r den minimalen Wert von t zu bestimmen, für welchen die Beiträge von angeregten Zuständen zu den Amplituden $C_{\psi'\psi}(r, t)$ bereits hinreichend unterdrückt sind, so dass wir tatsächlich den Überlapp mit dem Grundzustand extrahieren können (vgl. die Diskussion um 1.43). Die Berechnung der Determinante der Matrix M liefert im Limes großer Zeiten

$$e^{2E_0 t} \det[M(r, t)] \rightarrow \begin{vmatrix} |\langle \Omega | \Phi \rangle|^2 & \langle \chi | \Omega \rangle \langle \Omega | \Phi \rangle \\ \langle \Phi | \Omega \rangle \langle \Omega | \chi \rangle & |\langle \Omega | \chi \rangle|^2 \end{vmatrix} = 0 . \quad (1.81)$$

Weicht also der Wert der Determinanten von M (im Rahmen des statistischen Fehlers) noch wesentlich von Null ab, so ist dieser Grenzwert offensichtlich noch nicht erreicht, und es muss daher noch eine längere Zeitentwicklung der zu untersuchenden Zustände zugelassen werden.

Die Berechnung von $C_{\Phi\Phi}(r, t)$, dem Korrelator der Polyakov-Linien mit Coulomb-Dressing, stellt keine Schwierigkeit dar. Eine schematische Darstellung dieses Objekts findet sich in

⁷Universelle Lösbarkeit: $N_3 - 1$ Bedingungen für N_3 zu bestimmende Eichtransformationen.

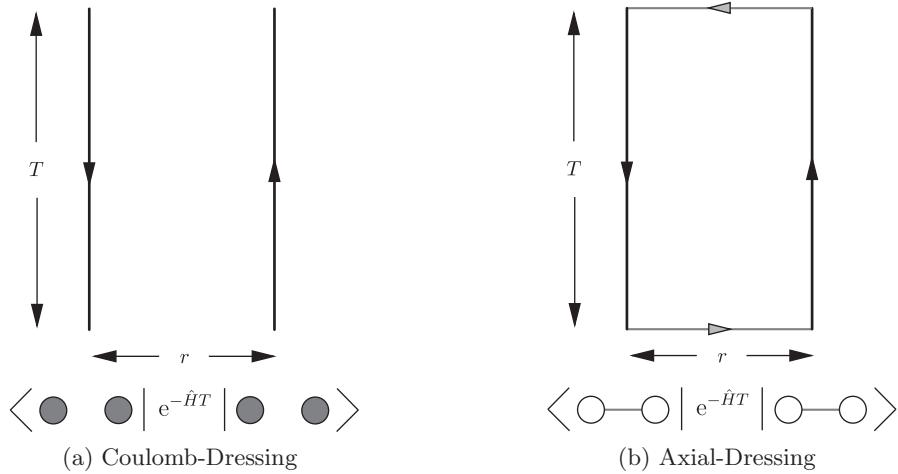


Abbildung 1.3: Darstellung der Persistenzamplituden auf dem Gitter. Zeitentwicklung im Falle (a) des Zustands $|\Phi\rangle$ in Coulomb-Eichung, sowie (b) des Zustands $|\chi\rangle$ in axialem Eichung.

Abbildung 1.3 (a). Die graue Schattierung der Ladungen soll dabei andeuten, dass sich das Dressing der Ladungen an den Enden der Polyakov-Linien bemerkbar macht, und zwar durch eben diejenigen Eichtransformationen, die insgesamt nötig waren, um Anfangs- und Endzeitsschicht in Coulomb-Eichung zu bringen.

Die Berechnung von $C_{\chi\chi}(r, t)$ läuft auf die Berechnung eines eichinvarianten Wilson-Loops hinaus. Dies wird folgendermaßen ersichtlich: Es bezeichne $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ den Korrelator zweier Polyakov-Linien von zeitlicher Ausdehnung t , welche in der von der Zeitrichtung und \mathbf{n} aufgespannten Ebene im räumlichen Abstand r parallel zueinander verlaufen,

$$P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)[U_\mu^\Omega], \quad \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + r\mathbf{n}, \quad (1.82)$$

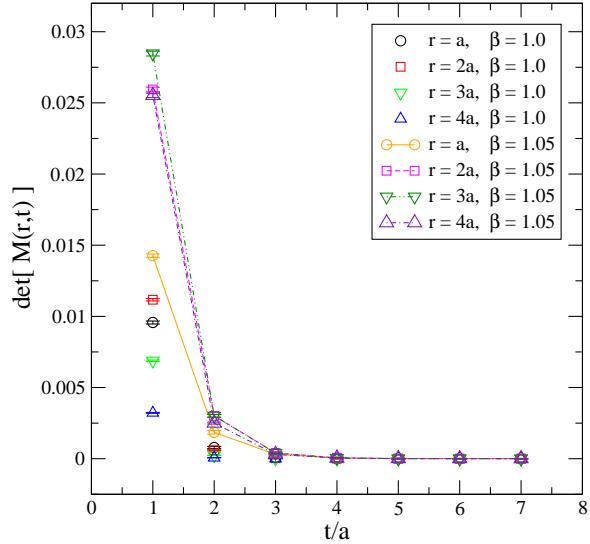
und mittels eichfixierter Link-Variablen $\{U_\mu^\Omega(x)\}$ konstruiert werden. Da es sich in axialem Eichung (1.77) bei den Links $U_3^\Omega(x)$ (aufgrund unserer Wahl $\mathbf{n} = \hat{e}_3$) um die Eins-Elemente der Gruppe handelt, kann dieser Korrelator auch zu einem $r \times t$ Wilson-Loop in der \hat{e}_3-t Ebene ergänzt werden. Da aber der Wilson-Loop offensichtlich eichinvariant ist, finden wir

$$P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)[U_\mu^\Omega] = W[U_\mu^\Omega] = W[U_\mu]. \quad (1.83)$$

Mit anderen Worten bedeutet dies, dass zum einen zur Berechnung der Persistenzamplitude des axialen Zustands die losen Enden der Polyakov-Linien zur Anfangs- und Endzeit auf direktem Wege in den jeweiligen Zeitschichten des Gitters durch Paralleltransporter $U_\mu(x)$ miteinander verbunden werden müssen, zum anderen, dass die Eichtransformation, welche alle Zeitschichten in axiale Eichung bringen soll, effektiv überhaupt nicht durchgeführt werden muss. Zur Herleitung des Wilson-Loop-Erwartungswertes als Ergebnis der Zeitentwicklung eines axialen Zustands im Rahmen der Kontinuumsformulierung wird auf Kapitel 4.6 verwiesen, eine schematische Darstellung der Situation findet sich in Abbildung 1.3 (b).

Das Vorgehen zur Berechnung der Nebendiagonalelemente der Matrix M ist nun ebenfalls unmittelbar offensichtlich. Im Falle des Korrelators $C_{\Phi\chi}(r, t)$, der den Zerfall des axialen

Abbildung 1.4: Die Determinante $\det[M(r, t)]$ der in (1.80) definierten Matrix $M[r, t]$. Die Ergebnisse der Simulationen für $\beta < \beta_{\text{crit}}$ sind durch Einzelsymbole dargestellt, für $\beta > \beta_{\text{crit}}$ wurden die verwendeten Symbole zur besseren Unterscheidbarkeit durch Linien miteinander verbunden.



in den mittels Coulomb-Dressing zu konstruierenden Zustand beschreibt, bedeutet dies, die beiden Polyakov-Linien in der Anfangszeitschicht durch Paralleltransporter miteinander zu verbinden, nicht aber in der Endzeitschicht, so dass die Gestalt des dabei entstehenden Objekts schematisch durch einen Bügel der Form \sqcup wiedergegeben werden kann. Analog dazu entspricht das durch \sqcap veranschaulichte Objekt dem Korrelator $C_{\chi\Phi}(r, t)$, wobei sich die Anfangszeitschicht in Coulomb-Eichung, die Endzeitschicht hingegen in axialer Eichung befindet.

In Abbildung 1.4 ist das Verhalten der Determinante $\det[M(r, t)]$ für verschiedene Werte von r als Funktion der Zeit t aufgetragen. Es ist zu beobachten, dass der Wert der Determinante für alle betrachteten Werte von r mit zunehmender Zeit sehr schnell sinkt und bereits um $t_{\min} = 3a$ sowohl unterhalb ($\beta = 1.0$), als auch oberhalb ($\beta = 1.05$) des Phasenübergangs effektiv auf Null abgefallen ist. Daher wird der bereits diskutierte „Limes großer Zeiten“ (vgl. 1.43) schon sehr früh erreicht, es sollte daher möglich sein, bereits nach einer relativ kurzen Zeitentwicklungsphase aus den Korrelatoren einen guten Überlapp mit dem Grundzustand extrahieren zu können. Für Zeiten $T > t_{\min}$ erwarten wir daher für die Persistenzamplituden des Coulomb- bzw. Axial-Zustands die Form

$$C_{\Phi\Phi}(r, T) = |\langle \Omega | \Phi \rangle|^2 e^{-E_0 T} \quad \text{bzw.} \quad C_{\chi\chi}(r, T) = |\langle \Omega | \chi \rangle|^2 e^{-E_0 T}, \quad (1.84)$$

wobei die Grundzustandsenergie E_0 im Falle sehr schwerer Quellen gerade durch das Potential $V(r)$, welches zwischen den statischen Testladungen herrscht, bestimmt wird.

Die Werte des Potentials $V(r)$, sowie die des Betragsquadrats der Überlappmatrixelemente, können aus den (fehlerbehafteten) Messwerten für die Persistenzamplituden (1.84) extrahiert werden. Zu diesem Zweck wurde für einen festen Wert des Abstands r der Quellen der negative Logarithmus des Erwartungswertes von $C_{\Phi\Phi}(r, T)$ bzw. $C_{\chi\chi}(r, T)$ gebildet, und mittels der Methode der gewichteten kleinsten Quadrate (siehe z.B. [PTVF07], Kapitel 15) eine Gerade an die auf diese Weise für verschiedene Werte von T erhaltenen Datenpunkte angepasst. Die Qualität eines solchen Fits kann durch die Überprüfung zweier Parameter kontrolliert werden: Q , die Güte des Fits (*Goodness-of-Fit*), sowie der Wert des reduzierte χ^2 , welcher üblicherweise mit χ^2/ν bezeichnet wird, wobei $\nu = N - 2$ die Anzahl der Freiheitsgrade (DoF) für einen linearen Fit an N Datenpunkte bezeichnet.

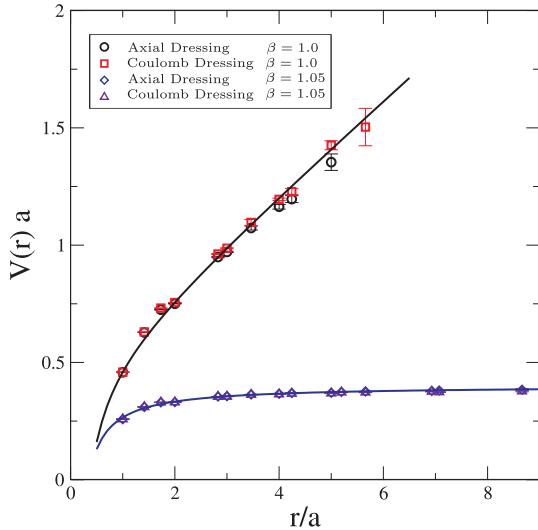


Abbildung 1.5: Das statische Potential in kompakter QED unterhalb ($\beta = 1.0$) und oberhalb ($\beta = 1.05$) des Phasenübergangs.

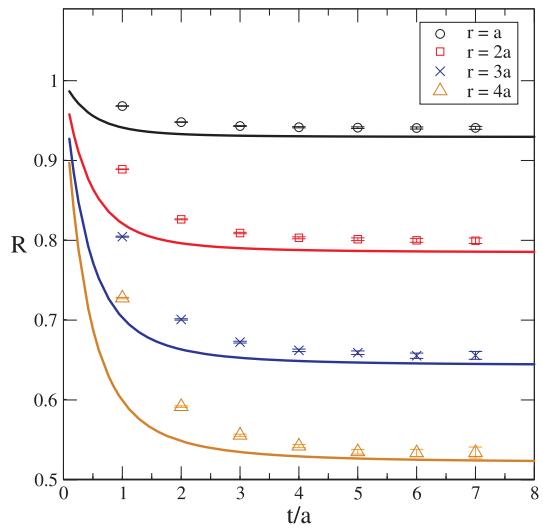


Abbildung 1.6: $R(r, t)$ in der Coulomb-Phase der kompakten QED. Analytische Erg. aus Abb. 1.1 sind zum Vergleich unterlegt.

Durch Messung des statischen Potentials konnte sowohl für den Fall der von axialen, als auch von Coulomb-artigen Dressings umgebenen Ladungen verifiziert werden, dass wir in unseren Simulationen, die bei den zwei verschiedenen Werten der (inversen) Kopplungskonstanten $\beta = 1.0$ und $\beta = 1.05$ durchgeführt wurden, tatsächlich die zwei verschiedene Realisierungsphasen der Theorie untersuchen, die für uns von Interesse sind. Diese Ergebnisse sind in Abbildung 1.5 zu sehen. Oberhalb des Phasenübergangs finden wir das für die Deconfinement-Phase erwartete Coulomb-Potential, unterhalb hingegen scheint das Potential linear mit dem Abstand der Quellen anzuwachsen (vgl. auch [Pan05] für weitere numerische Untersuchungen der Confinement-Phase der kompakten QED). Zur Illustration wurde jeweils noch ein Fit der beiden Sätze von Datenpunkten (ohne Berücksichtigung der statistischen Fehler) an einen Potentialverlauf der Form

$$V(r) = V_0 - \frac{\alpha}{r} + \sigma \cdot r \quad (1.85)$$

durchgeführt. Zu diesem Zweck wurden dabei sowohl für die Deconfinement-Phase (blau), als auch für die Confinement-Phase (schwarz) alle verfügbaren Datenpunkte herangezogen, unabhängig davon, aus welcher der beiden Persistenzamplituden (1.84) sie ursprünglich extrahiert worden sind. Die weitgehende Übereinstimmung der Datenpunkte aus den beiden Zugängen scheint die Untersuchungsergebnisse, die im Fall der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie [HLLM07] gewonnen wurden, auch für die kompakte QED zu bestätigen. Danach erweist sich der Korrelator (1.72) in Coulomb-Eichung als ein mit der Qualität des Wilson-Loops durchaus vergleichbares Werkzeug zur Untersuchung des vorherrschenden Potentials zwischen zwei statischen, gegensätzlich geladenen Quellen.

Die numerischen Ergebnisse für das Verhältnis des Überlapps $R(r, t)$ in der Coulomb-Phase ($\beta = 1.05$) sind in Abbildung 1.6 zu sehen – zum Vergleich wurden die analytischen Ergebnisse aus Abbildung 1.1 in die Graphik integriert. Bemerkenswert ist zunächst die gute Übereinstimmung zwischen der analytischen Lösung und den Gitterresultaten, obwohl die UV-Divergenzen auf ganz unterschiedliche Weise reguliert wurden. Die Isotropie des Raumes

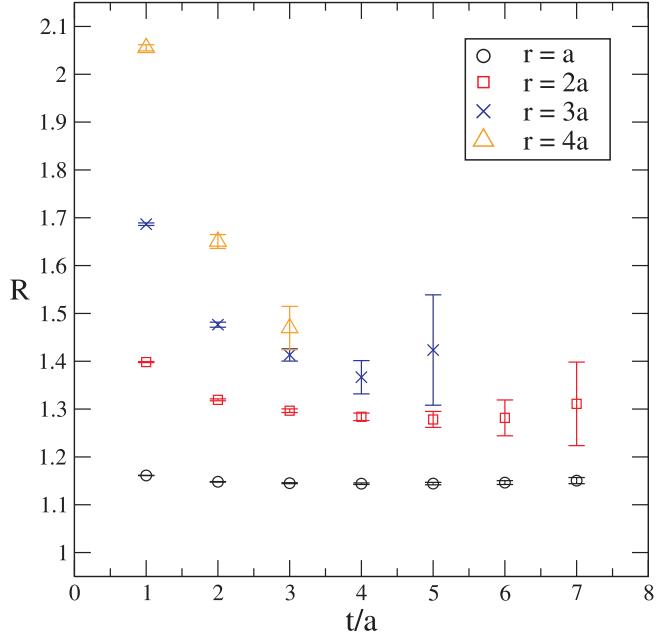


Abbildung 1.7: Das Überlappverhältnis $R(r,t)$ in der Confinement-Phase ($\beta = 1.00$) der kompakten QED. Gitter: 12^4 , Randbedingungen: räumlich offen, zeitlich periodisch.

in der Kontinuumsformulierung reduziert sich beim Übergang zur Gitterformulierung auf eine Invarianz des Raumes unter diskreten Symmetrietransformationen, die Elemente der kubischen Gruppe sind [MM94]. Dementsprechend fungiert die endliche Gitterkonstante $a(\beta)$, welche den Abstand benachbarter Netzebenen des Gitters charakterisiert, durch Beschränkung der Brioullin-Zone $B_4 = [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]^4$ in jeder Dimension des zugehörigen Impulsraums als *Cut-Off*, wohingegen bei den Rechnungen im Kontinuum eine $O(3)$ -symmetrische Einschränkung $\|\mathbf{p}\| < \Lambda$ verwendet wurde. In Übereinstimmung mit dem Verhalten der Determinanten von $M(r,t)$ (siehe Abbildung 1.4) beobachten wir, dass sich das Überlappverhältnis $R(r,t)$ in der Nähe von $t = 3a$ zu stabilisieren beginnt. Jenseits dieses Punktes bildet sich ein Plateau aus, und das Verhältnis nähert sich seinem asymptotischen Wert, und zwar um so schneller, je kleiner der Abstand r der Testladungen ist. Vergrößern wir diesen räumlichen Abstand, so kann dadurch das physikalisch interessantere Regime der langreichweiten Wechselwirkungen zwischen dem Ladungspaar studiert werden. In der Coulomb-Phase nimmt das Verhältnis $R(r,t)$, wie bereits anhand der analytischen Rechnungen gesehen, mit zunehmendem räumlichen Abstand r ab. Die Energie des axialen Zustands nimmt (nach Regulierung der UV-Divergenzen auf dem Gitter oder im Kontinuum) linear mit r zu, so dass dieser einen zunehmend schlechteren Überlapp mit dem Grundzustand – welcher ja der Coulomb-Zustand ist – aufweist.

Die gute Übereinstimmung von analytischen und numerischen Ergebnissen bei der Untersuchung der in der Coulomb-Phase realisierten kompakten QED ist ein Indiz dafür, dass der oben vorgestellte Zugang zum Dressingformalismus auf dem Gitter funktioniert und es die von uns betrachtete Größe $R(r,t)$ tatsächlich ermöglicht, zwei Ansätze für den Grundzustand miteinander zu vergleichen. Als nächstes wenden wir uns der Confinement-Phase zu, was auf dem Gitter ohne Probleme möglich ist.

Die Ergebnisse unserer Simulationen finden sich in Abbildung 1.7. Zunächst ist festzustellen, dass das Verhältnis nun stets größer als eins ist. Dies zeigt an, dass nun der axiale Zustand einen besseren Überlapp mit dem unbekannten Grundzustand hat. Zwar ist das in der Confinement-Phase gemessene Signal im Vergleich zu dem in der Deconfinement-Phase gemessenen um einiges weniger deutlich, jedoch kann man immer noch beobachten, wie sich im Überlappverhältnis $R(r, t)$ ein Plateau ausbildet, zumindest bis zu einem Abstand $r = 3a$ der Quellen. Für noch größere Abstände geht das Signal zunehmend im statistischen Rauschen verloren, unser Akzeptanzkriterium für die aus den Messungen extrahierten und in der Abbildung gezeigten Datenpunkte war ein relativer Fehler von weniger als 10%. Ein Trend ist jedoch klar erkennbar: Bei Vergrößerung von r nimmt auch das Überlappverhältnis weiter zu.

Offenbar unterscheiden sich also die beiden Realisierungsphasen der Theorie in Bezug auf den Grundzustand grundlegend voneinander. Intuitiv würde man vermuten, dass in einer Theorie ohne Confinement zwei einzelne, eichinvariante Ladungen den Grundzustand angemessen beschreiben sollten, wohingegen in einer Theorie mit Confinement der Grundzustand einem einzigen, insgesamt ungeladenen und eichinvarianten Objekt entsprechen sollte. Tatsächlich unterstützen unsere Ergebnisse diese Vorstellung. Oberhalb des Phasenübergangs ist die vierdimensionale kompakte QED in einer Deconfinement-Phase realisiert und der mittels Coulomb-Dressing konstruierte Testzustand wird klar bevorzugt. Unterhalb des Phasenübergangs hingegen bietet dieser Zustand aus individuellen, physikalischen Ladungen keine gute Beschreibung des Grundzustands mehr. Stattdessen scheint der insgesamt ungeladene, axiale Zustand, bei dessen Konstruktion zwei Ladungen durch einen dünnen Flussschlauch miteinander verbunden wurden (und dessen Divergenzen durch den endlichen Wert der Gitterkonstanten reguliert werden), dem wahren Grundzustand mehr zu ähneln.

1.4 Nicht-abelsches Dressing

1.4.1 Perturbative Konstruktion

Die Verallgemeinerung der $U(1)$ -Eichtheorie auf den Fall nicht-abelscher Eichtheorien geschieht zunächst durch die Identifizierung des Vektorpotentials $\mathcal{A}_i(x)$ mit $\mathcal{A}_i^a(x)T^a$. Dabei bezeichnet T^a die hermiteschen Generatoren der zur Eichgruppe G gehörenden Lie-Algebra. Die elektrische Kopplungskonstante e ($e < 0$) wird gemäß $e \rightarrow -g$ durch die zur Gruppe G gehörige ersetzt. Dadurch verändern sich die kovariante Ableitung (1.49), der Feldstärketensor (1.48) sowie die Transformation des Vektorpotentials (1.50) unter lokalen Eichtransformationen, für die nun eine Darstellung der Form $\Omega(x) = \exp[ig\lambda^a(x)T^a]$ gilt.

Unser Ziel ist die Untersuchung des Grundzustands in nicht-abelschen Eichtheorien bei Anwesenheit von statischen Ladungen. Dieser Zustand wird üblicherweise mit einem sehr schweren Meson identifiziert: Nach Einbringen eines sehr schweren Quarks bzw. Antiquarks in das Vakuum der reinen Yang-Mills-Theorie reagiert dieses durch Veränderung der gluonischen Feldverteilung, so dass sich ein insgesamt farbneutraler, eichinvarianter Zustand ausbildet. Die genaue Form der resultierenden gluonischen Hülle der Farbladungen ist noch immer unbekannt, zumindest für große Abstände dominiert aber die Vorstellung einer zigarrenförmigen Feldkonfiguration [BSS95]. Die einfachste Möglichkeit, einen solchen Zustand zu konstruieren, besteht in der (direkten) Verbindung der Quellen durch einen linienartigen gluonischen

Flussschlauch. Im Rahmen des Operatorformalismus ist dieser Zustand gegeben durch

$$|\chi\rangle = \bar{q}(\mathbf{x}_2) P \left\{ \exp \left[ig \int_{\mathbf{x}_2}^{\mathbf{x}_1} dz_j \mathcal{A}_j(\mathbf{z}) \right] \right\} q(\mathbf{x}_1) |0\rangle, \quad (1.86)$$

wobei $q(\mathbf{x})$ den Feldoperator eines schweren Fermions bezeichnet und die pfadgeordnete Exponentialfunktion des gluonischen Linienintegrals die Eichinvarianz des Zustands als Ganzes garantiert. Wie schon im Falle der bereits behandelten QED wollen wir annehmen, dass der Flussschlauch die beiden statischen Ladungen am Ort \mathbf{x}_1 und \mathbf{x}_2 auf direktem Wege miteinander verbinden möge, und bezeichnen den Zustand (1.86) daher als den nicht-abelschen axialen Zustand.

Eine Alternative zu dieser Konstruktion bietet die Verallgemeinerung von Diracs statischem Elektron [Dir55] auf ein statisches Quark in nicht-abelschen Eichtheorien [LM97]. Im Rahmen des Dressingformalismus kann dadurch ein Mesonenzustand konstruiert werden, welcher eine Identifizierung von individuellen, eichinvarianten Farbladungen zulässt und somit das im Rahmen der QCD zumindest für kleine Abstände erwartete Wechselwirkungsverhalten [LM97] angemessen wiederzugeben vermag. Die Konstruktion eines eichinvarianten Quarkzustands verläuft in kompletter Analogie zum abelschen Fall⁸, wobei das Eichpotential \mathcal{A} sowie die Eichtransformationen $\Omega(x)$ durch ihre nicht-abelschen Gegenstücke zu ersetzen sind. Aus der Coulomb-Eichbedingung (1.57) folgt die nicht-abelsche Version der Gleichung (1.58), welche durch Entwicklung in Potenzen der Kopplungskonstanten g eine störungstheoretische Konstruktion des Coulomb-Dressings $h(x)$, und somit einer statischen, eichinvarianten Ladung mit wohldefinierter Farbe ermöglicht [LM97, ILM07]. Die Beiträge niedrigster Ordnung zum nicht-abelschen Dressing

$$h[\mathcal{A}, \mathbf{x}] = \exp \left[i \sum_n g^n v_n[\mathcal{A}](x) \right] \quad (1.87)$$

berechnen sich zu

$$v_1 = \frac{\partial_i \mathcal{A}_i}{\nabla^2}, \quad v_2 = \frac{\partial_j}{\nabla^2} ([v_1, \mathcal{A}_j] + \frac{1}{2} [\partial_j v_1, v_1]). \quad (1.88)$$

Arbeiten wir in Coulomb-Eichung, so reduziert sich das Dressing auf die Identität im Farbraum (vgl. 1.61) und das Farbsingulett, welches aus zwei eichinvarianten, nicht-abelschen Ladungen im Abstand r voneinander besteht, wird durch den Zustand

$$|\Phi\rangle = \bar{q}^a(\mathbf{x}_2) q^a(\mathbf{x}_1) |0\rangle \quad (1.89)$$

beschrieben. Eine störungstheoretische Behandlung liefert bezüglich dieses Zustands für den Erwartungswert des Hamilton-Operators das Resultat

$$\langle \Phi | H | \Phi \rangle = \epsilon_0 - \alpha_s \frac{C_2(N)}{r} + \mathcal{O}(g^4), \quad \alpha_s = \frac{g^2}{4\pi}. \quad (1.90)$$

Dies ist der Beitrag niedrigster Ordnung zum bekannten statischen Inter-Quark-Potential, wobei die Selbstenergiebeiträge zu ϵ_0 zusammengefasst wurden und $C_2(N)$ den quadratischen Casimir-Operator (D.24) der fundamentalen Darstellung der $SU(N)$ bezeichnet.

⁸Die in Kapitel 1.3.1 gewählte Konvention unterscheidet sich von der in [LM97, ILM07, BLM00a, BLM00b] verwendeten durch die Ersetzung $\Omega(x) \rightarrow \Omega^{-1}(x)$ und entsprechenden Konsequenzen für das Transformationsverhalten des zu konstruierenden Dressings $h \rightarrow h^{-1}$.

In Störungstheorie höherer Ordnung treten neben den aus der Behandlung des abelschen Falles bekannten abschirmenden Strukturen auch die für die nicht-abelsche Natur der zugrundeliegenden Symmetriegruppe charakteristischen Anti-Screening-Effekte auf [BLM06]. Es ist bekannt, dass die Gluonen dabei sowohl in der Lage sind, die statischen Ladungen abzuschirmen, als auch den gegenteiligen Effekt hervorzurufen [Dre]. Es konnte von Lavelle und McMullen gezeigt werden [LM98], dass das Dressing (1.87) dabei für das Auftreten derjenigen Terme verantwortlich ist, die eine maßgebliche Erhöhung der Wechselwirkungsenergie verursachen. Es scheint folglich so zu sein, dass diejenige Gluonenkonfiguration, welche dazu beiträgt, die Quarkzustände eichinvariant werden zu lassen, auch die dominanten Beiträge zu den Anti-Screening-Effekten liefert, welche bei der perturbativen Untersuchung des Potentials auftreten. Die Screening-Effekte hingegen, welche ebenfalls in zweiter Ordnung einer störungstheoretischen Behandlung auftreten, können auf die eichinvarianten Beiträge der Gluonen zum „nicht-minimalen“ Dressing zurückgeführt werden, welches bereits in Kapitel 1.2.2 kurz erwähnt wurde⁹.

Die störungstheoretische Konstruktion des Coulomb-Dressings ermöglicht also scheinbar die Beschreibung individuell eichinvarianter Farbladungen. Die Verteilung der zugehörigen Gluonenfelder erstreckt sich dabei über den ganzen Raum. Da aber keine farbgeladenen Objekte in der Natur als asymptotische Zustände beobachtet werden, ist klar, dass jede Beschreibung einer individuellen, physikalischen Farbladung im nicht-perturbativen Regime zusammenbrechen muss. Im folgenden Abschnitt soll zunächst das zuerst von Gribov [Gri78] diskutierte Problem skizziert werden, mit dem man sich beim Versuch der Fixierung einer Eichung in nicht-abelschen Theorien konfrontiert sieht, anschließend sollen die daraus resultierenden Konsequenzen für die Konstruierbarkeit von Zuständen mit eindeutiger Farbladung erläutert werden.

1.4.2 Gribov-Kopien im Rahmen des Dressingformalismus

Der Ausgangspunkt der Untersuchungen von Gribov war die Frage nach der Eindeutigkeit eines Eichpotentials \mathcal{A} , für das eine die Eichung fixierende Bedingung $\chi(\mathcal{A}) = 0$ gestellt wird. Im Folgenden wollen wir uns auf den Fall der Coulomb-Eichung beschränken. Falls diese Bedingung eine eindeutige Fixierung der Eichung zulässt, so sollte es längs eines Eichorbits $\mathcal{O}_{\mathcal{A}}$ keine weitere Konfiguration geben, die der Transversalitätsbedingung genügt. Nehmen wir also an, es gäbe ein Eichpotential \mathcal{A} , das der Bedingung $\nabla \cdot \mathcal{A} = 0$ genügt, so sollte die einzige Lösung Ω der Gleichung $\nabla \cdot \mathcal{A}^{\Omega} = 0$ für ein gemäß (1.50) eichtransformiertes Potential \mathcal{A}^{Ω} (unter der Annahme geeigneter räumlicher Randbedingungen) die Identität sein. Dass dem nicht so ist, wurde von bereits 1978 von Gribov erkannt [Gri78], der zeigte, dass die Quantisierung von Yang-Mills-Theorien aufgrund der Uneindeutigkeit der Definition des Eichpotentials nicht ohne weiteres möglich ist, und einen Weg vorschlug, wie man dem heute allgemein als Gribov-Problem bekannten Phänomen des Auftretens von Eichkopien begegnen können sollte. Betrachten wir zu diesem Zweck die infinitesimale Form einer Eichtransformation $\Omega = \exp(ig\omega)$ des Potentials \mathcal{A} , dann führt eine linearisierende Entwicklung auf

$$\mathcal{A}^{\Omega} = \mathcal{A} + \mathbf{D} \omega , \quad (1.91)$$

⁹Vgl. hierzu auch [HLLM07] sowie die Resultate im abelschen Fall [BLMT02].

die infinitesimale Änderung von \mathcal{A} ist also durch die kovariante Ableitung von $\omega \in \mathfrak{su}(N)$ gegeben. Aus der Coulomb-Eichbedingung folgt

$$\nabla \cdot \mathbf{D}^{ab} \omega^b(\mathbf{x}) = 0 , \quad (1.92)$$

was als Eigenwertgleichung des (negativen) Faddeev-Popov-Operators $M := -\nabla \cdot D$ für den Eigenwert 0 aufgefasst werden kann. Der Definitionsbereich des Faddeev-Popov-Operators hängt vom Eichpotential \mathcal{A} ab, und es kann gezeigt werden, dass M in einer hinreichend kleinen Umgebung $K_\epsilon(\mathcal{A} = 0)$ des perturbativen Vakuums $\|\mathcal{A}\| = 0$ positiv ist und nur die triviale Lösung $\omega = 0$ des Problems (1.92) zulässt.

Es ist in diesem Zusammenhang interessant festzuhalten, dass sich der Faddeev-Popov-Operator im Falle der $U(1)$ -Eichtheorie auf den positiven Laplace-Operator $M = -\Delta$ reduziert, unabhängig vom Eichpotential. Mit der in (1.2.2) gewählten Notation erhält Gleichung (1.92) die Form

$$\Delta \lambda(\mathbf{x}) = 0 . \quad (1.93)$$

Fordern wir das Verschwinden von $\lambda(\mathbf{x})$ auf dem Rand des dreidimensionalen räumlichen Unterraums, so ist unter der Annahme offener Randbedingungen die einzige Lösung der Laplace-Gleichung gegeben durch die triviale Lösung, $\lambda(\mathbf{x}) = 0 \forall \mathbf{x}$. Somit ist die identische Eichtransformation die einzige Lösung von $\chi(\mathcal{A}^\Omega) = 0$, und folglich ist die $U(1)$ -Theorie in Coulomb-Eichung bei geeigneter Wahl der Randbedingungen frei von Gribov-Kopien.

Im Falle einer nicht-abelschen Eichtheorie besteht jedoch bei Vergrößerung der Norm von \mathcal{A} auch die Möglichkeit, dass M negative Eigenwerte entwickelt. Das Auftreten von Nullstellen der Determinante des Operators M signalisieren dabei das Überschreiten der Ränder von Gebieten Ω_m , in die der Phasenraum des Eichpotentials anhand der Anzahl m von negativen Eigenwerten des Faddeev-Popov-Operators unterteilt werden kann. Der Vorschlag von Gribov zur Vermeidung der auf die Mehrdeutigkeit des Eichpotentials zurückzuführenden Probleme bei der Auswertung von Funktionalintegralen bestand darin, die Integration im Raum der Eichfeldkonfigurationen auf das Gebiet Ω_0 zu beschränken. Dieses heute als *Gribov-Region* bekannte Gebiet ist die maximale Umgebung der Lösung $\mathcal{A} = 0$, in welcher $M > 0$ gilt. Das Auftreten der ersten Nullstelle der Determinante des Faddeev-Popov-Operators wird durch das Verschwinden des kleinsten Eigenwertes von M hervorgerufen und signalisiert das Erreichen des sogenannten ersten *Gribov-Horizonts*. Es stellt sich jedoch heraus, dass diese Art der Einschränkung des Integrationsgebietes noch immer nicht ausreichend ist, um eine eindeutige Fixierung der Eichung zu gewährleisten.

Um dies zu verstehen, betrachten wir die L^2 -Norm $\mathcal{F}_\mathcal{A}[\Omega] = \|\mathcal{A}^\Omega\|^2$ des Potentials \mathcal{A} auf E^4 bezüglich derjenigen Transformationen Ω , die eichäquivalente Konfigurationen auf $\mathcal{O}_\mathcal{A}$ ineinander überführen:

$$\mathcal{F}_\mathcal{A}[\Omega] = \text{Tr}(\mathcal{A}^\Omega \mathcal{A}^\Omega) := \int d^4x \sum_{\mu=1}^3 \text{tr}[\mathcal{A}_\mu^\Omega(x) \mathcal{A}_\mu^\Omega(x)], \quad \Omega(x) = \exp(ig\omega(x)) \quad (1.94)$$

Die Behauptung ist nun, dass durch Minimierung der L^2 -Norm, ausgehend von einer gegebenen Konfiguration \mathcal{A} , eine Konfiguration \mathcal{A}^Ω gewonnen werden kann, welche in der ersten

Gribov-Region Ω_0 zu liegen kommt. Zum Beweis entwickeln wir das eichtransformierte Potential bis zur zweiten Ordnung in $\omega(x)$

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_\mu^\Omega(x) &= \mathcal{A}_\mu(x) + \partial_\mu \omega(x) - ig[\mathcal{A}_\mu(x), \omega(x)] + \frac{ig}{2}[\omega(x), \partial_\mu \omega(x)] \\ &\quad - \frac{g^2}{2}\{\omega^2(x), \mathcal{A}_\mu(x)\} + g^2 \omega(x) \mathcal{A}_\mu(x) \omega(x) + \mathcal{O}(\omega^3) ,\end{aligned}$$

woraus sich für (1.94) die Form

$$\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[\Omega] = \mathcal{F}_{\mathcal{A}}[1] - 2 \operatorname{Tr}(\omega \partial \mathcal{A}) + \operatorname{Tr}(\omega [-\partial \mathbf{D}] \omega) + \mathcal{O}(\omega^3) \quad (1.95)$$

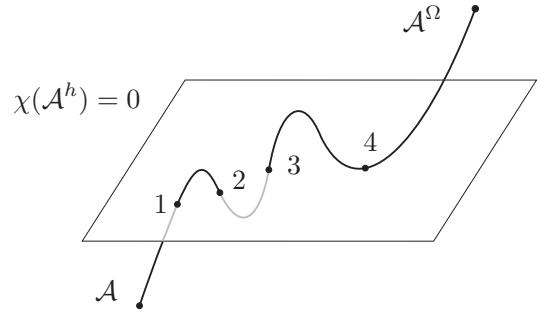
ergibt. Wird nun $\{\Omega\}$ so gewählt, dass $\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[\Omega]$ ein Minimum annimmt, so verschwindet zum einen die ersten Variation, was auf die Eichbedingung $\nabla \cdot \mathcal{A} = 0$ führt, zum anderen ist die Hesse-Matrix positiv definit, was der Positivität des Faddeev-Popov-Operators $M = -\nabla \cdot \mathbf{D}[\mathcal{A}^\Omega]$ in Coulomb-Eichung entspricht. Die Definition der Gribov-Region Ω_0 übersetzt sich also in die Menge aller Minima von $\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[\Omega]$. Da nun aber die Möglichkeit besteht, dass $\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[\Omega]$ mehrere *lokale* Minima längs eines Eichorbits $\mathcal{O}_{\mathcal{A}}$ besitzen kann, ist unmittelbar einsichtig, dass auch Ω_0 nicht frei von Kopien sein kann. Eine eindeutige Fixierung der Eichung gelingt durch die weitere Einschränkung des Integrationsgebietes auf die sogenannte *Fundamental Modular Region* (FMR), definiert als die Menge aller *absoluten* Minima von (1.94), die im Zuge der Minimierung längst der Eichorbits angenommen werden können. Die FMR ist eine konvexe Teilmenge von Ω_0 , welche die Konfiguration $\mathcal{A} = 0$ enthält. Auf das Problem der numerischen Implementierung einer solchen Eichfixierungsbedingung wird im Anhang C eingegangen. Es zeigt sich, dass eine systematische Wahl von Konfigurationen aus der FMR nicht möglich ist und daher im Vorfeld unklar ist, ob der ermittelte Repräsentant aus Ω_0 tatsächlich dem absoluten Minimum von $\mathcal{F}_{\mathcal{A}}[\Omega]$ entspricht.

Das Auftreten von Ambiguitäten beim Versuch der Fixierung einer Eichung beschränkt sich nicht nur auf die von Gribov [Gri78] studierte Situation der Coulomb-Eichung im Rahmen einer $SU(2)$ -Eichtheorie, sondern ist ein intrinsisches Problem linearer Eichungen in nicht-abelschen Theorien in einer Realisierungsphase ungebrochener Symmetrie [Sin78]. Die nun im Rahmen des Dressingformalismus zu diskutierenden Auswirkungen des Auftretens von Eichkopien besitzen daher allgemeinere Gültigkeit, die Coulomb-Eichung wurde in der vorliegenden Untersuchung ja aus dem einfachen Grund gewählt, dass statische Quellen beschrieben und ihre Wechselwirkung untersucht werden sollten.

Nehmen wir also für einen Moment an, dass die Eichfixierungsbedingung es erlauben würde, eine eindeutige Stelle auf dem Eichorbit $\mathcal{O}_{\mathcal{A}}$ auszuwählen (vgl. Abbildung 1.2), und nehmen wir ferner an, dass wir uns bereits an dieser Stelle befänden. In diesem Fall ist das Dressing trivial (1.61) und die Farbe des eichinvarianten Zustands $\Psi(x)$ ist durch diejenige des nackten Feldes $\psi(x)$ gegeben. Das Dressing wird also in diesem Sinne transparent, wenn die Eichfixierungsbedingung erfüllt ist. Die durch $\psi(x)$ vorgegebene Farbe bleibt auch dann erhalten, wenn man Eichtransformationen $\Omega(x)$ durchführt, die aus der durch $\chi(\mathcal{A}^h) = 0$ beschriebenen Untermannigfaltigkeit des Konfigurationsraums herausführen [ILM07]. Dabei wird sich zwar das Dressing verändern, die Gesamtfarbe von $\Psi(x)$ bleibt aber erhalten, denn $h[\mathcal{A}]$ kompensiert ja per Konstruktion den Effekt der Farbänderung der nackten Materiefelder, welche durch die Eichtransformationen $\Omega(x)$ hervorgerufen werden:

$$\Psi[\mathcal{A}^\Omega, \psi^\Omega](x) = h[\mathcal{A}^\Omega](x) \psi^\Omega(x) = h[\mathcal{A}](x) \Omega^{-1}(x) \Omega(x) \psi(x) = \Psi[\mathcal{A}, \psi](x) . \quad (1.96)$$

Abbildung 1.8: Die Eichfixierungsbedingung ist an mehreren Stellen längs des Eichorbits $\mathcal{O}_{\mathcal{A}}$ erfüllt. Gribov-Kopien treten auf, falls $\mathcal{O}_{\mathcal{A}}$ von der durch $\chi(\mathcal{A}^h) = 0$ beschriebenen Untermannigfaltigkeit des Konfigurationsraums mehr als einmal geschnitten (Punkte 1,2,3) oder tangiert wird (Punkt 4).



Dies gilt allerdings nur, solange $h[\mathcal{A}]$ auf die angewandten Eichtransformationen richtig zu reagieren vermag. Das unvermeidliche Auftreten von Eichkopien führt nun aber gerade zu einer Situation, in der dies nicht mehr länger gewährleistet ist. Die Situation ist in Abbildung 1.8 skizziert. Wird eine Eichtransformation $\Omega'(x)$ durchgeführt, die zwei Kopien ineinander überführt, die beide der Eichfixierungsbedingung genügen, so verändert sich dadurch auf jeden Fall das Materiefeld $\psi(x)$. Eine Änderung von $h[\mathcal{A}](x)$ tritt bei einer solchen Transformation aber nicht mehr unbedingt auf, da an beiden Stellen auf dem Eichorbit die Eichfixierungsbedingung erfüllt ist und beide Punkte gleichermaßen dazu herangezogen worden sein könnten, um ein Dressing zu konstruieren, das in der Schnittebene trivial wird. In diesem Fall finden wir für den Zustand $\Psi[\mathcal{A}, \psi]$ das Verhalten

$$\Psi[\mathcal{A}^{\Omega'}, \psi^{\Omega'}](x) = h[\mathcal{A}^{\Omega'}](x) \psi^{\Omega'}(x) = h[\mathcal{A}](x) \Omega'(x) \psi(x) \neq \Psi[\mathcal{A}, \psi](x). \quad (1.97)$$

Falls sich das Dressing beim Übergang von einer Kopie zur anderen doch ändern sollte, so ist ebenfalls unklar, ob dies zu einer Abschwächung, einer vollständigen Kompensation oder möglicherweise sogar zu einer Verstärkung des Effekts führen wird, der durch die Veränderung des Materiefeldes hervorgerufen wird. Das Verhalten des Dressings wird folglich unbestimmt. Die Voraussetzung dafür, einem Zustand eine wohldefinierte Farbladung zuordnen zu können, war die Eichinvarianz desselben, was die Konstruktion des Dressings und des zusammengesetzten Operators $\Psi(x)$ überhaupt motiviert hat. Die Eichinvarianz wurde durch die Transformationseigenschaften des Dressings garantiert, und diese wurden im hier vorgestellten Zugang zum Dressingformalismus aus der Annahme der Eindeutigkeit einer Eichfixierungsbedingung hergeleitet (vgl. die Diskussion in Abschnitt 1.3.1). Da in [LM97] gezeigt wurde, dass das Auftreten von Gribov-Kopien ab einer gewissen Skala eine Eichabhängigkeit des Dressings einer einzelnen Ladung induziert und somit die Konstruktion eines physikalischen Zustands wohldefinierter Farbe unmöglich macht, stellt sich natürlich die Frage nach der Relevanz des mittels (1.87) konstruierten Zustands für den nicht-perturbativen Bereich der Grundzustandsphysik.

1.4.3 Nicht-perturbativer Zugang zum Dressingformalismus

Zur Untersuchung dieser Fragestellung wollen wir wiederum die Methoden der numerischen Simulation von Gitterreichtheorien verwenden, wobei wir uns auf die einfachste Yang-Mills-Theorie (zunächst erweitert um ein komplexes skalares Feld) beschränken werden. Nicht-abelsche Dressings sollen dabei auf dem Gitter in kompletter Analogie zum abelschen Fall durch Fixierung von entsprechenden Eichungen realisiert werden. Die fundamentalen Objekte sind dabei Korrelatoren von nicht-abelschen Polyakov-Linien endlicher zeitlicher Ausdehnung. Für den Korrelator der Polyakov-Linien in axialer Eichung gilt die bereits im Rahmen der Behandlung des abelschen Falls (Abschnitt 1.3.4) angegebene Argumentation. Der Unterschied

bei der Berechnung von nicht-abelschen Wilson-Loops, die durch eichinvariante Verknüpfung der Enden der kurzen Polyakov-Linien entstehen, besteht in der Relevanz der Pfadordnung aufgrund der Nicht-Kommutativität der Link-Variablen. Die Entwicklung des axialen Zustands (1.86) über einen Zeitraum T wird im Wesentlichen durch den Erwartungswert des nicht-abelschen Wilson-Loop-Operators

$$W_\Gamma[\mathcal{A}] = \text{tr} P \left\{ \exp \left[ig \oint_\Gamma dz_j \mathcal{A}_j(z) \right] \right\} \quad (1.98)$$

beschrieben, sofern man für die Kontur Γ ein Rechteck von räumlicher Ausdehnung r und zeitlicher Ausdehnung T wählt. Im Falle des Coulomb-Dressings der statischen Testladungen ergibt sich

$$\mathcal{C}_{\Phi\Phi}(r, T) := \langle \Phi | e^{-\hat{H}T} | \Phi \rangle = \langle \text{tr} [P^h(\mathbf{x}_2, T) P^h(\mathbf{x}_1, T)^\dagger] \rangle, \quad (1.99)$$

wobei die Bildung der Spur ihren Ursprung in der Singulettstruktur des Zustands (1.89) in Coulomb-Eichung hat.

Eine erste Untersuchung der bereits angesprochene Fragestellung, welche Relevanz einem Zustand aus individuell eichinvarianten Ladungen für den nicht-perturbativen Bereich der Grundzustandsphysik beizumessen ist, wurde in [HLLM07] durchgeführt. Dabei wurde insbesondere untersucht, welchen Einfluss die im Rahmen der numerischen Fixierung der Coulomb-Eichung auftretenden Gribov-Kopien auf den Erwartungswert des Polyakov-Linienkorrelators (1.99) haben. Es hat sich gezeigt, dass das zwischen statischen Farbladungen herrschende Potential, welches aus dem untersuchten Erwartungswert extrahiert werden konnte, nicht nur im perturbativ zugänglichen Bereich, sondern auch darüber hinaus hervorragend mit dem aus der üblicherweise durchgeführten Analyse von eichinvarianten Wilson-Loops gewonnenen Verlauf übereinstimmt. Dies ist insofern bemerkenswert, als dass man aufgrund der oben ausgeführten Überlegungen erwarten würde, dass das Bild von der Wechselwirkung der durch Dressings wohldefinierten, individuellen Ladungen bei großen Abständen zusammenbrechen und mit dem Verlust eines verwertbaren Signals für den Potentialverlauf einhergehen sollte. Ferner wurde beobachtet, dass eine Mittelung über Gribov-Kopien keine nennenswerten Auswirkungen auf den Verlauf des Potentials hatte, wohl aber den Überlapp mit dem Grundzustand maßgeblich beeinflusst.

Eine mögliche Interpretation dieser Resultate besteht darin anzunehmen, dass die beiden Dressings $h^{-1}[\mathcal{A}, \mathbf{x}_1]$ für $\bar{q}(\mathbf{x}_1)$ und $h[\mathcal{A}, \mathbf{x}_2]$ für $q(\mathbf{x}_2)$ im nicht-perturbativen Regime gleichsam zu einem einzigen mesonischen Dressing für beide Ladungen „verschmelzen“, wobei der zugrunde liegende Mechanismus möglicherweise auf dem Auftreten von Gribov-Kopien bei der Konstruktion der individuellen Dressings beruhen könnte. Dadurch wäre der Coulombartige Zustand (1.89) in der Lage, jenseits einer Längenskala, unterhalb derer die störungstheoretische Behandlung und Beschreibung des Problems als Wechselwirkung individueller Ladungen gerechtfertigt erscheint, den Einschluss der Farbladungen zu beschreiben. Unter dieser Annahme stellt der Zustand (1.89) also einen aussichtsreichen Kandidaten für den Grundzustand im $q-\bar{q}$ -Sektor der Yang-Mills-Theorie dar. Tatsächlich existieren numerische Untersuchungen, die zeigen, dass das in Coulomb-Eichung berechnete nicht-abelsche Potential, welches eine obere Schranke für das volle Potential darstellt, im Gegensatz zur abelschen Theorie einen linearen Anstieg mit zunehmendem Abstand der Quellen voneinander aufweist [Zwa03, GOZ04].

1.5 Der Grundzustand im $SU(2)$ –Higgs-Modell

Bisher wurde der Überlapp der beiden untersuchten Zustände mit dem Grundzustand der kompakten QED oberhalb und unterhalb eines Phasenübergangs untersucht, der die zwei Realisierungsphasen dieser Theorie voneinander trennt. Idealerweise würden wir daher nun dieselbe Untersuchung im Falle einer nicht-abelschen Eichtheorie durchführen wollen, die sowohl eine Confinement-Phase, als auch eine Deconfinement-Phase aufweist. Im Falle der $SU(N)$ –Yang-Mills-Theorie zeigt jedoch die Berechnung der $\beta(g)$ -Funktion, dass es als Folge der asymptotischen Freiheit in $D = 4$ Dimensionen im Raum der Kopplungskonstanten g nur einen einzigen Fixpunkt, nämlich den (trivialen) UV-Fixpunkt $g \rightarrow 0$, gibt [ZJ96]. Daher existiert für die reine $SU(N)$ –Eichtheorie bei Abwesenheit von Materiefeldern für alle Werte von g nur eine einzige Realisierungsphase, und dies ist im Falle verschwindender Temperatur die Confinement-Phase. Für hohe Temperaturen T wird jedoch die Realisierung der Yang-Mills-Theorie in der Deconfinement-Phase erwartet, daher sollten Simulationen bei Temperaturen oberhalb und unterhalb einer kritischen Temperatur T_c die Möglichkeit eröffnen, Untersuchungen zum Verhalten der Überlappverhältnisse des axialen und Coulomb-artigen Zustands mit dem Grundzustand in zwei grundlegend verschiedenen Realisierungsphasen durchführen zu können. Es zeigt sich aber, dass dieses Vorgehen für die einfachste Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter nicht praktikabel ist, da im Falle der $SU(2)$ –Eichtheorie die kritische Temperatur näherungsweise $T_c \simeq 300$ MeV beträgt und die zeitliche Ausdehnung des Gitters zur Realisierung von Temperaturen oberhalb des Phasenübergangs soweit verkleinert werden müsste, dass dadurch eine ausreichende Unterdrückung von angeregten Zuständen bei der Berechnung von Amplituden der Form (1.43) nicht mehr gewährleistet werden kann [HIL⁺08b].

Als Alternative dazu verfolgen wir die Strategie, der $SU(2)$ –Yang-Mills-Theorie ein skalares Feld hinzuzufügen, welches sich unter der fundamentalen Darstellung der Eichgruppe transformiert¹⁰. Der Vorteil dieser Theorie besteht darin, dass keinerlei physikalisch motivierte Einschränkungen bezüglich der zeitlichen Ausdehnung des Gitters gemacht werden müssen, da die um ein skalares Feld erweiterte Theorie sowohl die Realisierung einer Confinement-Phase, als auch die Realisierung einer Phase ohne Farbeinschluss für verschwindende Temperaturen ermöglicht.

In Kapitel 2.4.1 werden wir die Diskretisierung einer $SU(2)$ –Eichtheorie mit Higgs-Feld $\phi(x)$ in fundamentaler Darstellung vornehmen. Neben der Erläuterung der von mir verwendeten Notationskonvention findet sich an dieser Stelle auch eine Diskussion des Phasendiagramms der Theorie. Für die folgende Untersuchung genügt es dabei zu wissen, dass durch Vergrößerung des Parameters κ ein Phasenübergang der Theorie von einer Quasi-Confinement-Phase in eine Higgs-Phase hervorgerufen werden kann, und dass die Stärke des Phasenübergangs mit zunehmendem Wert der (nackten) Selbstkopplungskonstanten λ abnimmt. Der Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$ im Potentialterm der Wirkung (2.44) geht mit der Einschränkung des radialen Freiheitsgrades des Higgs-Feldes auf $\rho(x) = 1 \forall x$ einher. Folglich reicht es bei der Untersuchung dieser Grenzfläche des dreidimensionalen Phasendiagramms am Temperaturnullpunkt aus, allein die Winkelvariablen (2.41) zu betrachten. Dies führt dazu, dass sich die bei der Simulation zu verwendende Wirkung auf die beiden Terme (2.39) und (2.42) reduziert, und diesen numerischen Vorteil wollen wir im Folgenden ausnutzen.

¹⁰Vergleiche Anhang D.

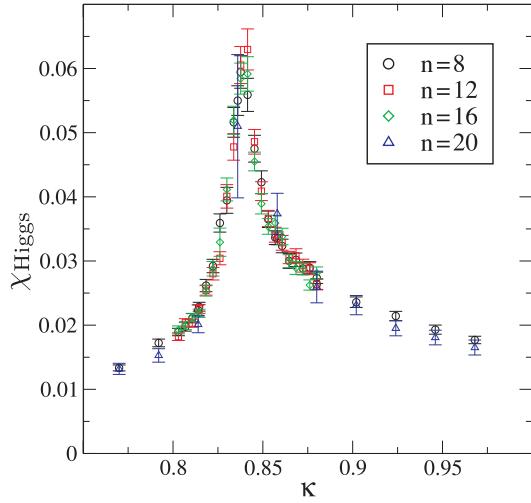


Abbildung 1.9: Die Suszeptibilität der Wirkung des Higgs-Felds χ_{Higgs} (1.100) als Funktion von κ . $\beta = 2.2$, Gitter: n^4 .

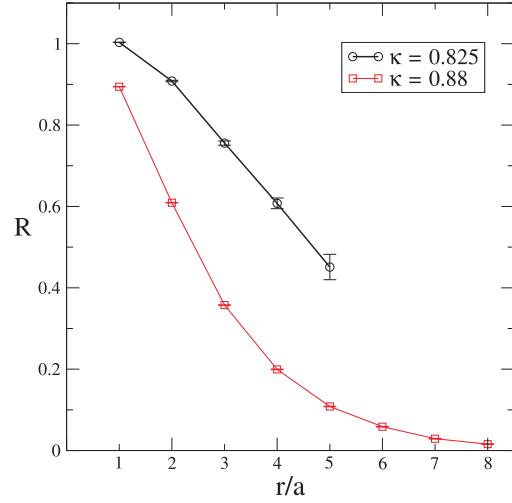


Abbildung 1.10: Das nicht-abelsche Überlappverhältniss $R(r,t)$ (1.44) im Limes großer Zeiten, $t_{\min} = 4a(\beta)$. Gitter: 16^4 .

1.5.1 Numerische Ergebnisse für das $SU(2)$ -Higgs-Modell

Die Simulationen wurden auf Gittern unterschiedlicher Größe durchgeführt, wobei der Wert der (inversen) Kopplungskonstanten auf $\beta = 2.2$ fixiert wurde¹¹. Um den Phasenübergangspunkt zu detektieren, wurden in einem ersten Schritt die Erwartungswerte der mittleren Plaquette und des Hopping-Terms (2.42) als Funktion von κ untersucht. Nach der groben Bestimmung des kritischen Wertes κ_c wurde in einem nächsten Schritt die Suszeptibilität χ_{Higgs} der mittleren Wirkung des Higgs-Feldes (2.42) in der Umgebung des vermuteten Phasenübergangs gemessen:

$$\chi_{\text{Higgs}} = \frac{1}{N^4} \left[\langle S_{\text{Higgs}}^2 \rangle - \langle S_{\text{Higgs}} \rangle^2 \right]. \quad (1.100)$$

Die Ergebnisse dieser Messungen, welche auf Gittern der Größe n^4 ($n = 8, 12, 16, 20$) durchgeführt wurden, finden sich in Abbildung 1.9. Die Suszeptibilität scheint praktisch unabhängig von der verwendeten Gittergröße zu sein und weist ein ausgeprägtes Maximum bei einem Wert des Hopping-Parameters κ auf, der zu $\kappa_c \approx 0.839(2)$ bestimmt wurde. Dieses Skalierungsverhalten von χ_{Higgs} mit der Größe des Gitters ist ein Indikator für das Vorliegen eines sogenannten *crossover* des Modells von der Quasi-Confinement-Phase in die Higgs-Phase bei κ_c und deckt sich mit unseren Erwartungen für die Ordnung des Phasenübergangs im Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$.

Um sicherzustellen, dass unterhalb und oberhalb des so bestimmten κ_c tatsächlich zwei verschiedene Realisierungsphasen der Theorie vorliegen, wurde das statische Potential aus dem sowohl für $\kappa = 0.825$, als auch für $\kappa = 0.88$ gemessenen Erwartungswert des Wilson-Loops extrahiert. Wie in Kapitel 2 erläutert wird, stellt die *string tension* σ aufgrund der analytischen Verbindung der beiden Phasen keinen echten Ordnungsparameter mehr dar, kann

¹¹Kleinere Werte von β wurden nicht betrachtet um die Effekte von Gitterartefakten möglichst klein zu halten, die im (nicht-universellen) *strong coupling* – Regime auftreten.

jedoch zumindest noch als Indikator für das Vorliegen der Quasi-Confinement-Phase ($\sigma \neq 0$), bzw. der Higgs-Phase ($\sigma \simeq 0$) dienen. Für $\kappa = 0.825$ konnten wir ein lineares Anwachsen des Potentials für große Abstände zwischen dem Quark-Antiquark-Paar beobachten [HIL⁺08b], wobei eine im Vergleich zur reinen $SU(2)$ –Yang-Mills-Theorie leicht reduzierte *string tension* aus den Daten extrahiert wurde. Das Phänomen des Stringbreakings wurde nicht beobachtet. Die für $\kappa = 0.88$ gemessenen Daten konnten hingegen sehr gut durch einen Fit beschrieben werden, der auf der Annahme eines reinen Coulomb-Potentials basiert. Für diesen Wert des Parameters κ ist also bereits die Higgs-Phase der Theorie realisiert. Beide Simulationen wurden auf Gittern der Größe 16^4 durchgeführt.

Als nächstes wurde für diese beiden Punkte im Phasendiagramm der Theorie das nicht-abelsche Analogon des in (1.44) definierten Verhältnisses $R(r, t)$ untersucht. Im Fall der Higgs-Phase ($\kappa = 0.88$) zeigte das Ergebnis deutliche Parallelen zum Verhalten von $R(r, t)$, welches in der Coulomb-Phase der $U(1)$ –Theorie gefunden wurde und in Abbildung 1.6 gezeigt wird: Der mittels Coulomb-Dressing konstruierte Zustand (1.89) weist also wiederum einen besseren Überlapp mit dem Grundzustand in dieser Phase auf, als es für den mittels axialem Dressing konstruierten Zustand (1.86) der Fall ist. Der asymptotische Wert von $R(r, t)$ wurde für alle untersuchten Abstände r der Quellen in dieser Phase bereits ab etwa $t_{\min} = 4a(\beta)$ erreicht [HIL⁺08b], anhand der in Abbildung 1.10 gezeigten Darstellung des Verhaltens von $R(r, t_{\min})$ (rote Quadrate, $\kappa = 0.88$) ist deutlich zu erkennen, dass der Überlapp des axialen Zustands mit dem wahren Grundzustand für große Abstände der Ladungen rasch gegen Null tendiert. Überraschend ist das Resultat unserer Untersuchungen zum Grundzustand in der Quasi-Confinement-Phase. Für $r = a(\beta)$ finden wir zwar einen (zeitlich) praktisch konstanten Wert für $R(r, t)$, der etwas größer als eins ist, mit zunehmendem Abstand der Quellen fällt das Überlappverhältnis jedoch wiederum auf Werte kleiner als eins ab. Obwohl das Signal wie im Falle der Untersuchung der Confinement-Phase der kompakten QED unterhalb von κ_c weniger deutlich ist, lassen unsere in Abbildung (1.10) zusammengefassten Ergebnisse (schwarze Kreise, $\kappa = 0.825$) den Schluss zu, dass der aus einem Quark bzw. Antiquark mit nicht-abelschem Coulomb-Dressing konstruierte Zustand (1.89) scheinbar auch in der Quasi-Confinement-Phase der Theorie in der Lage ist, die wesentlichen Merkmale des Grundzustands besser wiederzugeben als der axiale Zustand.

Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten wäre, dass der wahre Grundzustand durch einen Flussschlauch charakterisiert ist, dessen Profil sich in der Ebene orthogonal zur Verbindungsachse der Ladungen über mehrere Gitterkonstanten $a(\beta)$ erstreckt und daher durch den axialen Zustand (1.86), welcher ja eine Feldverteilung beschreibt, die eher als linienartig zu bezeichnen ist, nur ungenügend angenähert wird. Unsere Ergebnisse scheinen daher das traditionell vorherrschende Bild [Lus81] eines dicken Flussschlauchs zu bestätigen. Allerdings muss dabei berücksichtigt werden, dass bei den bisherigen Untersuchungen nur ein fester Wert der Gitterkonstanten $a(\beta)$ betrachtet wurde. Im nächsten Kapitel soll daher eine detaillierte Untersuchung zum Überlappverhalten der beiden Zustände (1.89) und (1.86) mit dem Grundzustand in der Confinement-Phase einer reinen Yang-Mills-Theorie durchgeführt werden, wobei insbesondere das Verhalten bei der Annäherung an den Kontinuumslimes der Theorie untersucht werden wird, um auszuschließen, dass Diskretisierungsartefakte bei der Interpretation unserer Ergebnisse eine Rolle spielen könnten.

1.6 Der Grundzustand der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie

Bevor wir die Details der Simulationen darlegen und unsere numerischen Ergebnisse sowie die daraus gewonnenen Erkenntnisse präsentieren werden, ist es hilfreich, sich nochmals kurz das Verhalten des analogen Zustands in der QED mit statischen Quellen in Erinnerung zu rufen.

In der analytisch zugänglichen Deconfinement-Phase der kompakten QED fällt der exakt bekannte Grundzustand mit dem mittels Coulomb-Dressing aus den zwei statischen Ladungen konstruierten Zustand zusammen. Berechnet man den Überlapp von Grundzustand und axialem Zustand (1.46), so findet man, dass dieser verschwindet. Wie bereits diskutiert ist der Grund hierfür in der infinitesimalen Ausdehnung des Flussschlauchs orthogonal zur Verbindungsachse der Ladungen zu suchen, in welchem das Eichfeld konzentriert ist. Reguliert man dieses divergente Verhalten bei kurzen Abständen durch Einschränkung der Impulsintegration auf $\|\mathbf{p}\| < \Lambda$, so findet sich für den Überlapp

$$|\langle \Omega | \chi \rangle|^2 = (r\Lambda)^{4\alpha/\pi} \exp [-\alpha r\Lambda + \dots], \quad (1.101)$$

wobei $\alpha = e^2/(4\pi)$, und im Exponenten noch Terme angedeutet sind, die für $\Lambda \rightarrow \infty$ endlich bleiben. Der Überlapp ist also eine Funktion von $r\Lambda$. Für große Werte von Λ dominiert das exponentiell abfallende Verhalten, so dass der Überlapp mit dem Grundzustand beim Entfernen des *Cut-Off* ($\Lambda \rightarrow \infty$) letztlich verschwindet.

1.6.1 Der axiale Zustand

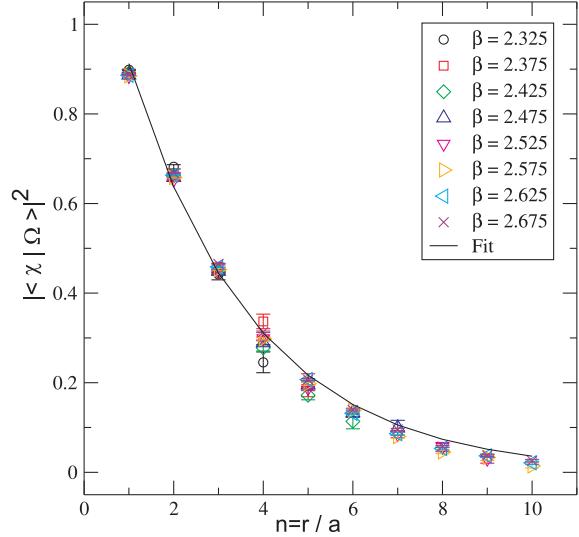
Wenden wir uns nun der Berechnung von Wilson-Loops in der reinen $SU(2)$ -Eichtheorie zu. Zur Messung der Persistenzamplituden wurde ein Ensemble von 1000 Konfigurationen herangezogen, welches mittels eines Algorithmus erzeugt wurde, der in seiner ursprünglichen Form auf Creutz [Cre80] zurückgeht und in Anhang B.2 beschrieben wird. Zusätzlich zu den lokalen Update-Schritten wurden mikrokanonische Reflexionen zur Erhöhung der Ergodizität des Algorithmus eingebaut, was inzwischen ebenfalls als Standard bei Monte-Carlo-Simulation der $SU(2)$ -Eichtheorie angesehen werden kann. Die Beschreibung des Verfahrens wurde ebenfalls in den Anhang verschoben und findet sich im Abschnitt B.4.

Im Rahmen der von uns durchgeföhrten Simulationen haben wir eine Kombination von drei *Heatbath sweeps* durch das gesamte Gitter, gefolgt von sieben mikrokanonischen Reflexionen zu einem sogenannten *supersweep* zusammengefasst. Es hat sich gezeigt, dass die Durchführung von 250 derartigen *supersweeps* auf Gittern der Größe 20^4 bei allen von uns untersuchten Gitterkonstanten $a(\beta)$ für das Erreichen des thermischen Gleichgewichts ausreichend war. Die nach dieser Thermalisierungsphase gemessenen Ergebnisse zeigten keinerlei Abhängigkeit mehr von der verwendeten Anfangskonfiguration. Alle Messungen wurden auf Gittern mit zeitlich periodischen und räumlich offenen Randbedingungen durchgeführt, wobei die einzelnen Konfigurationen eines Ensembles bei festem Wert des Parameters β Glieder einer Markov-Kette waren, die durch zehn *supersweeps* voneinander entfernt sind. Bei der Datenanalyse wurden alle Messwerte für die Persistenzamplitude, die mit einem relativen Fehler von mehr als 0.5 behaftet waren, verworfen. Wie im Falle der kompakten QED wurde versucht, die Daten mit einer Funktion der Form

$$\langle \Psi | e^{-HT} | \Psi \rangle = |\langle \Omega | \Psi \rangle|^2 e^{-V(r)T} \quad (1.102)$$

Abbildung 1.11: Der Überlapp des axialen Zustands mit dem Grundzustand für verschiedene Werte der Gitterkonstanten $a(\beta)$ als Funktion von $n = r/a$, der Anzahl an Gitterpunkten zwischen den Ladungen. Der Überlapp ist unabhängig vom Parameter β .

Gitter: 20^4 , Randbedingungen: räumlich offen, zeitlich periodisch.



in Einklang zu bringen. Dieser Ansatz ist sicherlich gerechtfertigt, sofern die bei der Entwicklung des Zustands $|\Psi\rangle$ verstrichene Zeit T bereits so groß ist, dass angeregte Zustände die Möglichkeit hatten, zu entkoppeln, und somit von diesen kein Beitrag mehr zur Persistenzamplitude zu erwarten ist (vergleiche auch die Diskussion um 1.43). Die Ergebnisse für den Überlapp des axialen Zustands $|\chi\rangle$ mit dem Grundzustand der Yang-Mills Theorie, die in den Abbildungen 1.11 und 1.12 zu sehen sind, wurden aus Messungen der Erwartungswerte von Wilson-Loops mit einer zeitlichen Ausdehnung von $T \geq 5a$ extrahiert, für die keine signifikante Abweichung von (1.102) mehr zu beobachten war. Das Vorgehen bei der numerischen Extrahierung der Betragsquadrate der Überlappmatrixelemente war dasselbe wie im Falle der abelschen Theorie (vgl. die Diskussion in Kapitel 1.3.4), die Akzeptanzkriterien für die durchgeföhrten linearen Fits waren $\chi^2/\nu < 3$ sowie $Q > 10^{-3}$.

Zunächst wollen wir den Überlapp des axialen Zustands mit dem Grundzustand als Funktion der dimensionslosen Größe n betrachten, die den Abstand der auf das Gitter gesetzten statischen Ladungen als Vielfaches der Gitterkonstanten $a(\beta)$ angibt. Unsere Ergebnisse finden sich in Abbildung 1.11 wieder, in der nur Datenpunkte gezeigt werden, deren relativer Fehler kleiner als 0.35 ist. Zunächst ist festzustellen, dass alle Datenpunkte in dieser Darstellung praktisch übereinander liegen. Der Überlapp scheint daher nur eine Funktion von n , und somit unabhängig von der verwendeten Gitterkonstanten zu sein. Nimmt man eine Anleihe beim Überlappverhalten des axialen Zustands in der $U(1)$ -Theorie (1.101), welches durch eine Funktion von $r\Lambda$ beschrieben wird, so ist denkbar, dass das Überlappverhalten im Falle der $SU(2)$ durch eine Funktion von r/a richtig wiedergegeben wird, da a^{-1} ja mit dem *UV-Cut-Off* auf dem Gitter in Verbindung gebracht werden kann. Das Ergebnis eines Fits der für die Parameterwerte $\beta = 2.625$ und $\beta = 2.675$ gemessenen Datenpunkte an eine Funktion der Form

$$|\langle \Omega | \chi \rangle|^2 = C \exp \left(-\lambda \frac{r}{a} \right) \quad (1.103)$$

ist als durchgezogene Linie in Abbildung 1.11 zu sehen. Zu beobachten ist eine sehr gute Übereinstimmung der Messdaten mit der für die Parameterwerte $C = 1.307$ und $\lambda = 0.359$ erhaltene Kurve, wobei die auftretenden Abweichungen (besonders deutlich für $n = 4$) mit zunehmendem Wert von β immer kleiner werden.

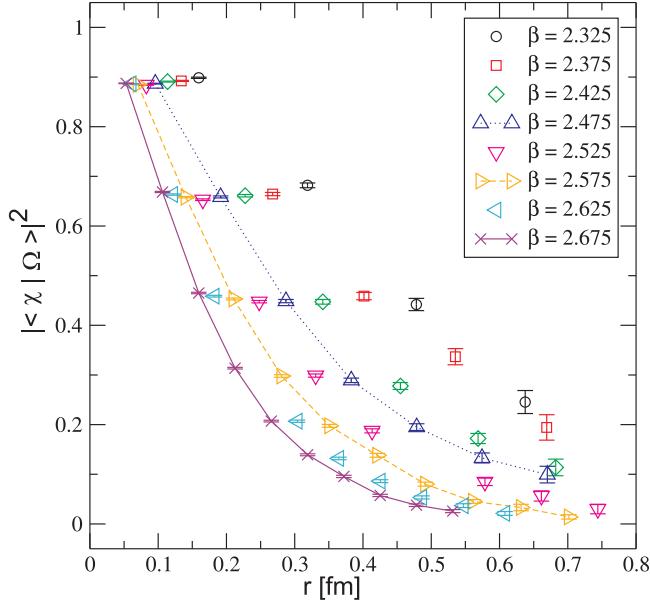


Abbildung 1.12:
Der Überlapp des
axialen Zustands
mit dem Grundzu-
stand als Funktion
des Abstands der
Ladungen r in physischen Einheiten. Zur Übersichtlichkeit wurden einige Datensätze durch Linien miteinander verbunden.

Der Kontinuumslimes $a \rightarrow 0$ entspricht für einen festen Abstand r der Ladungen dem Grenzwert $n \rightarrow \infty$. Unsere Simulationen zeigen eindeutig, dass der Überlapp des axialen Zustands mit dem Grundzustand mit zunehmendem n exponentiell abfällt. Es ist interessant festzuhalten, dass dieses Verhalten, genau wie auch die funktionale Abhängigkeit des Überlapps vom dimensionslosen Verhältnis r/a uns bereits bei der Untersuchung des analogen Zustands in der Deconfinement-Phase der $U(1)$ -Theorie in ähnlicher Weise begegnet ist (1.101). Obwohl die hier untersuchte $SU(2)$ -Eichtheorie (für alle Werte des Parameters β) in der Confinement-Phase realisiert ist, scheint der Überlapp des *string*-artigen Zustands mit dem Grundzustand bei der Annäherung an den Kontinuumslimes $a \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) auch hier aufgrund desselben Effekts zu verschwinden, der schon im Rahmen der Diskussion des unendlich angeregten axialen Zustands der QED mit statischen Ladungen beschrieben wurde. Die Ausdehnung des Raumbereichs, auf den der gluonische Fluss im Rahmen der Gitterformulierung beschränkt ist, ist in der Richtung transversal zu $\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1$ von der Größenordnung einer Gitterkonstanten. Wird diese bei der Annäherung an den Kontinuumslimes nun kontinuierlich verkleinert, bis im Grenzfall ein Flussschlauch infinitesimaler Dicke vorliegt, so gewinnen die dabei auftretenden *UV*-Artefakte zunehmend an Bedeutung, die den Überlapp stetig verkleinern und schließlich gänzlich verschwinden lassen.

Der Überlapp kann auch als Funktion des physikalischen Abstands der Quellen voneinander ausgedrückt werden. Dies setzt die Kenntnis einer dimensionsbehafteten Skala in der Theorie voraus. Im Falle der $SU(2)$ wird dabei üblicherweise die aus Experimenten zum Mesonspektrum gewonnene *string tension* $\sigma \simeq 440 \text{ MeV}^2$ verwendet. Die Umrechnung der in Gittereinheiten gemessenen Abstände in physikalische wurde durch Interpolation zwischen verschiedenen Werten der (dimensionslosen) *string tension* $\sigma a^2(\beta)$ durchgeführt, welche für eine Reihe von Werten der Kopplungskonstanten β bekannt sind. Diese Werte für $\sigma a^2(\beta)$, sowie die störungstheoretisch berechnete Ein-Loop-Interpolationsformel finden sich in [Lan07]. Das Ergebnis dieser Umrechnung ist in Abbildung 1.12 zu sehen, der Überlapp ist nun als Funktion von r für verschiedene Werte von β aufgetragen. Bei Vergrößerung von β nimmt der

Überlapp für alle Abstände r zwischen den Quellen ab. Falls sich dieser Trend auch für noch kleinere Gitterkonstanten als die hier von uns betrachteten weiter fortsetzen sollte, so hätte dies im Kontinuumslimes $\beta \rightarrow \infty$ das Verschwinden des Überlapps für jeden festen Wert von r zur Folge.

Interessanterweise widerspricht dieses Resultat einer von zwei Thesen, die in kürzlich veröffentlichten Arbeiten zur Gestalt des Flussschlauchs in der $SU(2)$ –Eichtheorie aufgestellt wurden. Zum einen wurde in [BGM07a, BGM07b] behauptet, dass der Flussschlauch sich mit zunehmender Entfernung der Quellen – für feste Gitterkonstante – vergrößert, zum anderen, dass die Zunahme der Dicke des Flussschlauchs für kleinere Gitterkonstanten ein untergeordneter Effekt sei, da die Breite des Schlauchs proportional zur Gitterkonstanten ist. Die Interpretation unserer Resultate steht in Einklang mit der ersten These, denn wir haben ja beobachtet, dass ein sehr dünner Flussschlauch eine eher unzureichende Beschreibung des Grundzustands zu bieten vermag, deren Qualität mit zunehmender Entfernung der Quellen noch weiter abnimmt. Die zweite Behauptung würde jedoch implizieren, dass der Flussschlauch der $SU(2)$ –Eichtheorie im Kontinuumslimes tatsächlich unendlich dünn sein müsste, da jede Zunahme an Profildurchmesser unterdrückt sein sollte. In [BGM07a, BGM07b] wurde berichtet, dass bei sukzessiver Verkleinerung der Gitterkonstanten ab einem Wert von $a \simeq 0.06$ fm ($\beta \simeq 2.600$) ein linearer Zusammenhang zwischen Gitterkonstanten und Dicke des Flussschlauchs beobachtet werden konnte. Die größten beiden in unseren Simulationen verwendeten Werte für β ermöglichen eine Untersuchung des besagten Bereichs sehr feiner Gitterkonstanten, dennoch zeigte sich beim Übergang zu Werten von $\beta \geq 2.600$ keinerlei Abweichung von dem für alle Diskretisierungen gefundenen exponentiell abfallenden Verhalten des Überlapps. Es gibt daher keinen Grund anzunehmen, dass der Überlapp des axialen Zustands mit dem wahren Grundzustand im Kontinuumslimes nicht verschwinden sollte, was wiederum bedeutet, dass ein Zustand, der durch Verbindung zweier Ladungen mittels eines dünnen Flussschlauchs konstruiert wurde, nicht geeignet ist, den Grundzustand der $SU(2)$ –Eichtheorie angemessen zu beschreiben.

1.6.2 Alternative Formen des Flussschlauchs: Die Smearing-Prozedur

Da ein dünner Flussschlauch scheinbar nicht dazu geeignet ist, die Gestalt des gluonischen Grundzustand bei Anwesenheit eines schweren $q\bar{q}$ –Paars angemessen zu beschreiben, stellt sich die Frage nach möglichen Alternativen, die eine weniger singuläre räumliche Verteilung des Gluonfeldes aufweisen. Wir haben bereits in der $U(1)$ –Theorie gesehen, dass die Ursache für das Verschwinden des Überlapps des axialen Zustands mit dem wahren Grundzustand in der infinitesimalen transversalen Ausdehnung des Flussschlauchs zu finden ist, und die numerischen Ergebnisse unserer Untersuchungen im Falle der $SU(2)$ –Eichtheorie legen eine ähnliche Interpretation nahe. Ein dickerer Flussschlauch sollte daher zu einem weniger dramatischen UV -Verhalten führen und es ist folglich zu erwarten, dass sich das Überlappverhalten dieser Zustände mit dem Grundzustand bei Zunahme der Dicke des Flussschlauchs verbessern wird.

Auf dem Gitter kann ein solcher Zustand durch „Verschmieren“ (*smearing*) eines infinitesimal dünnen Flussschlauchs präpariert werden [Tep87, BS92, A⁺87]. Dabei werden räumliche Links durch die Summe der umliegenden Bügel ersetzt, welche zuvor wieder auf ein $SU(2)$ –Gruppenelement projiziert wurde (vgl. B.15, B.18). Da während dieses Prozesses In-

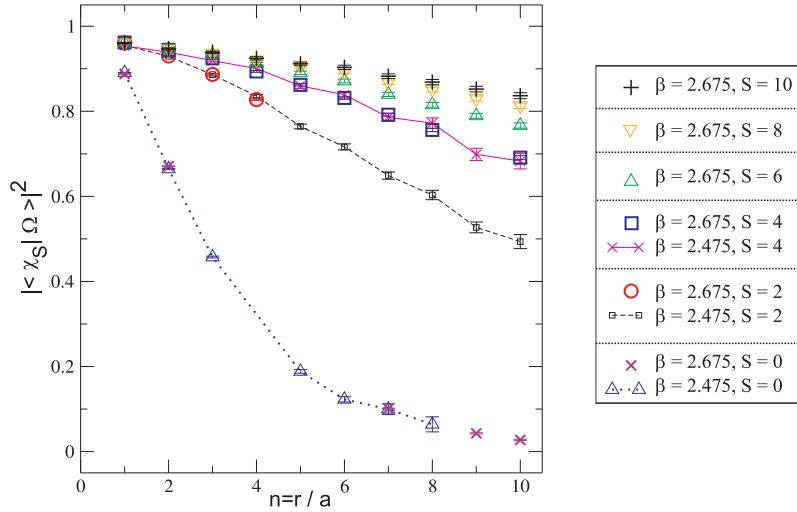


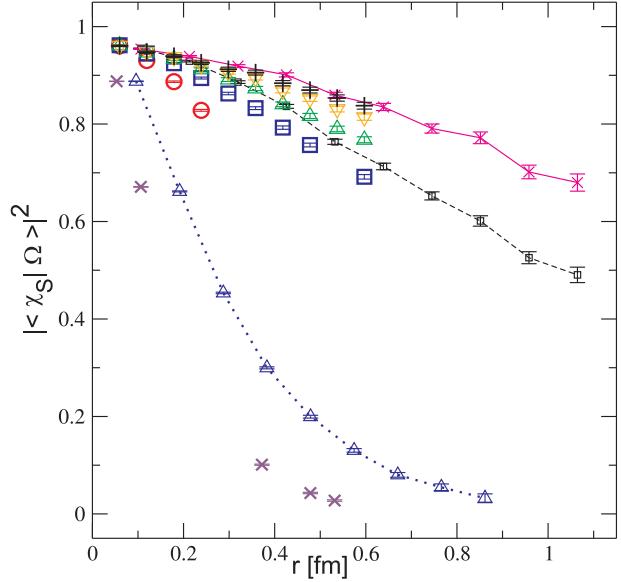
Abbildung 1.13: Überlapp der ausgeschmierten Zustände $|\chi_S\rangle$ mit der Grundzustand $|\Omega\rangle$ für verschiedene Werte der Gitterkonstanten $a(\beta)$. Für eine fixe Anzahl an *Smearing*-Schritten S sind die Daten unabhängig von der Kopplungskonstanten β .

formationen aus der Umgebung eines bestimmten Links gleichsam auf diesen übertragen werden, spricht man dabei auch von der Erzeugung von *fat links*. Der verschmierte axiale Zustand entsteht durch Ausschmieren derjenigen Links, welche die beiden Ladungen miteinander verbinden, was zur Folge hat, dass sich der gluonische Flussschlauch vergrößert bzw. an Durchmesser zunimmt. Es ist bekannt, dass die Genauigkeit von Messungen bei Verwendung von Operatoren, die zuvor einer Verschmierungsprozedur unterzogen wurden, im Vergleich zur Verwendung von nicht verschmierten Operatoren, deutlich zunimmt. Beispiele sind das Glueballspektrum [MP99], sowie das bereits mehrfach erwähnte statische Potential [JKM03], welches üblicherweise aus verschmierten Wilson-Loops extrahiert wird. Der Grund für die eintretende Verbesserung bei Verwendung von verschmierten Operatoren ist, dass die zugrundeliegenden Eichfeldkonfigurationen geglättet werden, bzw. die Operatoren die höheren Anregungen der Theorie zugunsten einer verbesserten Projektion auf den Grundzustand weniger gut detektieren können. Dadurch erklärt sich auch der in der englischsprachigen Literatur für die Verschmierungsprozedur synonym verwendete Terminus *overlap enhancement* – Vergrößerung des Überlapps mit dem Grundzustand. Wir erwarten daher, dass die Entfernung von *UV*-Moden durch Verschmierung des Flussschlauchs einen Zustand generiert, der eine bessere Beschreibung des Grundzustands bietet, als der bisher von uns betrachtete generische axiale Zustand $|\chi\rangle$.

Es ist ferner zu erwarten, dass eine wiederholte Durchführung der Verschmierungsprozedur schrittweise immer glattere Konfigurationen erzeugen wird, die einem immer weiter ausgedehnten Flussschlauch entsprechen. Die Anzahl dieser Verschmierungsschritte bezeichnen wir mit S und die zugehörigen Zustände mit $|\chi_S\rangle$. Für jeden Wert des Parameters β wurden 500 Konfigurationen erzeugt und in jeder dieser Konfigurationen wurden Zustände $|\chi_S\rangle$ für $S \in [1, 10]$ präpariert. Eine Zeitentwicklung von $T \geq 4a$ war ausreichend, um auf den Grundzustand projizieren und aus den verschmierten Wilson-Loops den Überlapp mit demselben extrahieren zu können. Zur Auswertung wurden keine Korrelatoren herangezogen, deren relativer Fehler größer als 0.5 war. Die Kriterien für den linearen Fit waren $\chi^2/\nu < 3$ und $Q > 10^{-2}$.

Abbildung 1.14: Der Überlapp der ausgeschmierten Zustände $|\chi_S\rangle$ mit dem Grundzustand $|\Omega\rangle$ als Funktion des Abstands der Quellen r in physikalischen Einheiten. Die Legende ist dieselbe wie die bereits in Abbildung 1.13 verwendete.

Gitter: 20^4 , Randbedingungen: räumlich offen, zeitlich periodisch.



Unsere Ergebnisse werden in Abbildung 1.13 als Funktion von r/a , und in Abbildung 1.14 als Funktion des physikalischen Abstands r gezeigt. Zum Vergleich wurden ebenfalls Ergebnisse der Untersuchung des axialen Zustands $|\chi\rangle$ ($S=0$) aus den Abbildungen 1.11 und 1.12 mit aufgenommen. Es ist zu erkennen, dass sich der Überlapp mit dem Grundzustand durch die schrittweise Durchführung der Verschmierung prozedur für festen Abstand der Quellen sukzessive erhöht. Wir erinnern uns, dass der Überlapp des axialen Zustands mit dem Grundzustand als Funktion von r/a unabhängig vom Wert des Parameters β war. Die Verallgemeinerung dieses für $S = 0$ gefundenen Resultats wird exemplarisch anhand der Kurven für die beiden Werte $\beta = 2.475$ und $\beta = 2.675$ für $S = 2$ und $S = 4$ in Abbildung 1.13 gezeigt. Für eine feste Anzahl an Verschmierungsschritten S weist der Überlapp keinerlei Abhängigkeit vom Wert des Parameters β auf und ist daher nach wie vor eine Funktion des dimensionslosen Verhältnisses $n = r/a$. Folgt man nun einer der Kurven in Abbildung 1.13 zu größeren Werten von n , so kann dies für festes r als Annäherung an den Kontinuumsliches verstanden werden. Jede der gezeigten Kurven fällt monoton bei Verkleinerung der Gitterkonstanten $a(\beta)$, wenn auch immer langsamer, je häufiger die Konfigurationen der Verschmierungsprozedur unterworfen wurden. Dies legt die Vermutung nahe, dass letztlich der Überlapp eines jeden Zustands $|\chi_S\rangle$ mit dem Grundzustand – unabhängig von S – für einen festen Wert des Abstands r der Quellen im Kontinuumsliches verschwinden wird.

Eine alternative Darstellung der Situation findet sich in Abbildung 1.14. Hier können die Auswirkungen der Verschmierungsprozedur für $S = 0, 2$ und 4 auf den Überlapp der entsprechenden Zustände mit dem Grundzustand im Kontinuumsliches ($\beta \rightarrow \infty$) für feste physikalische Abstände der Ladungen direkt abgelesen werden. Betrachtet man ein festes Level S , so liegen die auf einem feineren Gitter gemessenen Daten ($\beta = 2.675$, unverbundene Symbole) unterhalb der Kurve, welche zur Messung derselben Größe auf einem Gitter mit größerer Gitterkonstanten $a(\beta)$ gehören ($\beta = 2.475$, verbundene Symbole). In jedem der drei betrachteten Fällen zeigt ein vertikaler Schnitt bei festem r , dass eine Erhöhung der Anzahl an Verschmierungsschritten zwar den Überlapp der so präparierten Zustände bei fester Gitterkonstante $a(\beta)$ erhöhen kann, dieser sich jedoch bei der Annäherung an die Kontinuumformulierung

stets wieder verkleinert. Anders ausgedrückt, um einen festen Wert des Überlapps im Kontinuumslimes für ein bestimmtes r garantieren zu können, müsste die Anzahl an Verschmierungsschritten immer weiter erhöht werden.

Die räumliche Verteilung der gluonischen Felder verändert sich bei Erhöhung von S vom Extremfall eines infinitesimal dünnen Flussschlauchs hin zu einer räumlich immer weniger klar lokalisierten, die statischen Quellen umgebenden Verteilung. Da dies (für festes β) mit einer Erhöhung des Überlapps mit dem Grundzustand einhergeht, soll im nächsten Abschnitt ein Modell des Grundzustands betrachtet werden, von dem zu erwarten ist, dass die zugehörige Gluonenfeldverteilung den gesamten Raumbereich durchdringt, ohne dabei auf einer wie auch immer gearteten *Smearing*-Prozedur zu beruhen.

1.6.3 Nicht-abelsches Coulomb-Dressing

Die Berechnung der Persistenzamplitude eines Coulomb-artigen Zustands erfordert die Fixierung der Coulomb-Eichung und die Auswertung von Korrelatoren nicht-abelscher Polyakov-Linien, was in Kapitel 1.4.3 beschrieben wurde. Die Grundlage unserer Untersuchungen bilden dabei diejenigen Konfigurationen, die bereits bei der Untersuchung des axialen Zustands in der $SU(2)$ -Eichtheorie (Kapitel 1.6.1) verwendet wurden. Die verschiedenen Ensembles wurden anschließend durch iterative Minimierung des eichfixierenden Funktionals

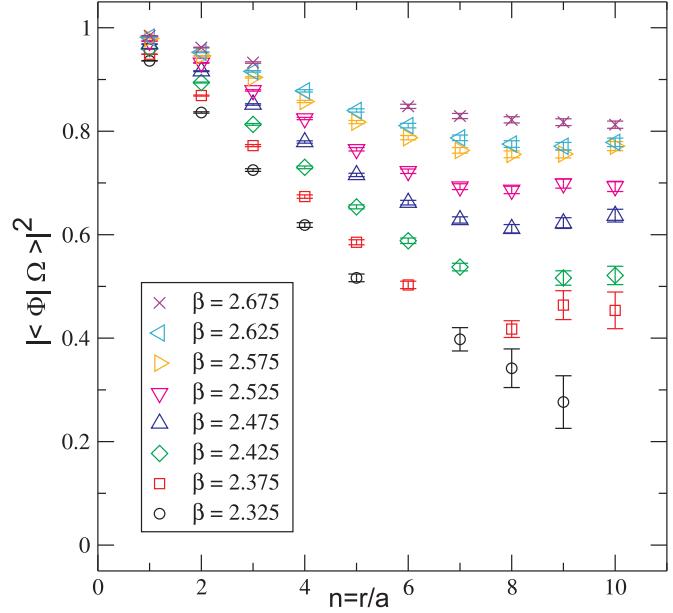
$$\mathcal{F}_U[\Omega] = \frac{1}{6N} \sum_{x=1}^N \sum_{i=1}^3 \text{Re} \operatorname{tr} [\mathbb{1} - U_i^\Omega(x)] \quad (1.104)$$

in Coulomb-Eichung gebracht. Die allgemeine Darstellung der eingesetzten numerischen Methoden zur Fixierung diverser Eichungen findet sich im Anhang C, die Konkretisierung auf den im Fall der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie in Coulomb-Eichung verwendeten *Iteration-Overrelaxation*-Algorithmus geschieht in Abschnitt C.1.1. Während des Eichfixierungsprozesses wurde die in Gleichung (C.11) definierte Größe δ^2 protokolliert, sobald diese einen Wert von $\delta^2 < 10^{-10}$ erreicht hatte, wurde die Iteration beendet.

Die Ergebnisse zum Verhalten des Überlapps von Coulomb- und Grundzustand als Funktion des Abstands $n = r/a$ der Quellen sind in Abbildung 1.15 zu sehen. Diese unterscheiden sich deutlich vom Überlappverhalten des Grundzustands mit dem axialen Zustand einerseits, wie auch mit den verschmierten Zuständen $|\chi_S\rangle$ andererseits. In den Abbildungen 1.11 und 1.13 ist zu sehen, dass alle Datenpunkte für einen festen Wert von S auf ein und derselben Kurve zu liegen kommen und durch eine von β unabhängige Funktion beschrieben werden können, die nurmehr vom Verhältnis r/a abhängt. Dies ist hier nicht mehr der Fall. Vielmehr erhöht sich der Überlapp des Coulomb-Zustands mit dem Grundzustand für jeden Wert von r/a , wenn wir den Wert von β erhöhen. Zu Beginn dieses Kapitels wurde darauf hingewiesen, dass die Ursache für die Parametrisierbarkeit des axialen Überlapps $|\langle\chi|\Omega\rangle|^2$ durch das dimensionslose Verhältnis r/a in der Geometrie des *string*-artigen Zustands und dessen *UV*-Verhalten zu finden ist. Da der Coulomb-Zustand keine derartige Struktur aufweist, ist es plausibel, dass *UV*-Artefakte keine dominierende Rolle spielen sollten und $|\langle\Phi|\Omega\rangle|^2$ separat von r und a abhängen kann.

Die in Abbildung 1.16 gezeigte Skalierung der Messdaten auf physikalische Abstände r der Quellen macht die Unterschiede zum Verhalten des axialen Zustands (sowie der durch Anwendung der *Smearing*-Prozedur aus diesem hervorgegangenen) nochmals auf besondere Weise

Abbildung 1.15: Der Überlapp des Coulomb-Zustands mit dem Grundzustand als Funktion der Gitterpunkte $n = r/a$ zwischen den statischen Quellen. Die Simulationen wurden unter Verwendung der Wilson'schen Wirkung durchgeführt, Messdaten wurden für $T \geq 3a$ erhoben. Bei der Annäherung an den Kontinuumsfall ($\beta \rightarrow \infty$) nimmt der Überlapp zu.



deutlich. Unsere Simulationen umfassen dabei eine Untersuchung des Überlappverhaltens bei Quellenabständen von etwa $r \simeq 1.6$ fm bis hinunter zu $r \simeq 0.05$ fm. Bei sehr kleinen Abständen ist der Überlapp des Coulomb-Zustands mit dem Grundzustand praktisch perfekt. Vergrößert man nun den Abstand der Quellen, so verringert sich der Überlapp zunächst, jedoch bei weitem nicht in dem Maße, wie es für den axialen Zustand (Abbildung 1.12) der Fall ist, dessen Überlapp mit dem Grundzustand exponentiell schnell abfällt. Darüber hinaus verschärft sich dieses Verhalten für zunehmende Werte von β noch, während die Skalierung im Falle des Coulomb-Überlapps dazu führt, dass praktisch alle Datenpunkte auf ein und derselben Kurve zu liegen kommen, was die Unabhängigkeit dieses Resultats von der jeweiligen Gitterkonstanten $a(\beta)$ anzeigt. Der Kurvenverlauf befindet sich bis hierher in Einklang mit den gängigen Erwartungen zur Gestalt des Grundzustands der Yang-Mills-Theorie bei Anwesenheit eines Paares von statischen Testladungen. Nimmt man nämlich an, dass sich ein mehr oder weniger schlanker, gluonischer Flussschlauch zwischen dem Quark-Antiquark-Paar ausbildet und dieses zu einem Meson verbindet, wenn man versucht, das Ladungspaar zu trennen, so dürfte die Beschreibung der Situation durch einen mittels Coulomb-Dressing konstruierten Zustand eher unangemessen sein. Schließlich entspricht dieser in störungstheoretischer Behandlung einem Zustand, der für kleine Abstände in führender Ordnung aus zwei individuellen, eichinvarianten Ladungen besteht¹².

Tatsächlich nimmt aber der Überlapp des nicht-perturbativen Analogons des Coulomb-Zustands (1.89) bei weiterer Vergrößerung von r nicht beliebig weit ab, sondern es tritt ein überraschendes Phänomen auf. Ab einem bestimmten physikalischen Abstand r_0 , dessen Wert von der verwendeten Gitterkonstanten $a(\beta)$ abhängt, stellt sich für $r > r_0$ ein nahezu konstanter Wert für $|\langle \Phi | \Omega \rangle|^2$ ein. Dieses Phänomen tritt für zunehmende Werte von β bei immer kleineren Werten von r_0 auf, wobei sich der zugehörige Grenzwert auf einem immer höheren Niveau stabilisiert. Bei den kleinsten von uns verwendeten Gitterkonstanten wird bereits eine Übereinstimmung mit dem Grundzustand von über 75% erreicht.

¹²Vgl. die Diskussion in Abschnitt 1.4.1.

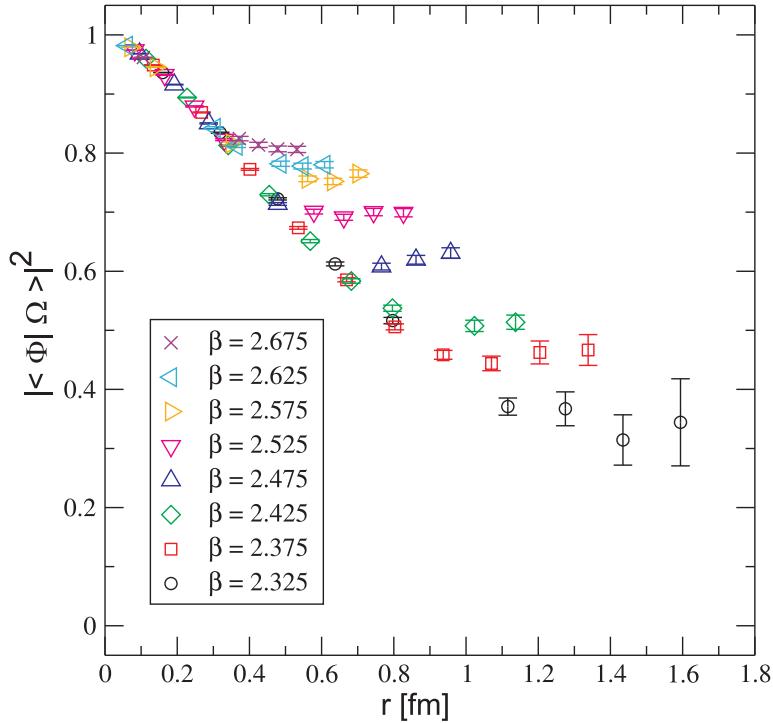


Abbildung 1.16: Der Überlapp des Coulomb-Zustands mit dem Grundzustand als Funktion des physikalischen Abstands der statischen Quellen. Wilson'sche Wirkung, Gitter: 20^4 .

Zur Überprüfung dieses Resultats wurden weitere Simulationen unter Verwendung einer sogenannten *improved action* [Lan07] für physikalische Abstände der statischen Ladungen von etwa $0.1 \text{ fm} \leq r \leq 0.9 \text{ fm}$ durchgeführt. Die dabei realisierten Verbesserungen beziehen sich im Vergleich zur Wilson'schen Gitterwirkung (2.39) auf das Skalierungsverhalten bei der Annäherung an den Kontinuumslimits sowie die Minimierung von Diskretisierungsartefakten, welche zur Brechung der Rotationssymmetrie der Theorie beitragen. Die Ergebnisse dieser detaillierten Untersuchung finden sich in [HIL⁺08a] und bestätigen unsere Resultate auf Basis der Wilson'schen Wirkung.

1.7 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel des vorliegenden Projektes war es, neue Erkenntnisse zur Gestalt des Grundzustands von Yang-Mills-Theorien bei Anwesenheit eines sehr schweren Paares von Testladungen unterschiedlichen Vorzeichens zu gewinnen und bereits bestehende Vorstellungen auf ihre Tragfähigkeit hin zu überprüfen. Zu diesem Zweck sollte eine Methode entwickelt werden, die es erlaubt, verschiedene Ansätze für den unbekannten Grundzustand miteinander vergleichen zu können, um zu beurteilen, inwiefern das jeweilige Modell in der Lage ist, die Grundzustandsphysik adäquat wiederzugeben.

Zu diesem Zweck wurde in einem ersten Schritt eine Untersuchung der Quantenelektrodynamik als einfachster Eichtheorie mit kontinuierlichen Symmetrietransformationen durchgeführt, da in diesem Fall der Grundzustand bei Anwesenheit von statischen Ladungen be-

kannt ist und die Theorie analytisch gelöst werden kann. Die beiden Ladungen werden dabei jeweils von einer Coulomb-artige Konfiguration des Eichfeldes umgeben, was zu einem lokal eichinvarianten, und somit physikalisch sinnvollen Zustand führt. Inspiriert durch die weit verbreitete Vorstellung zur Gestalt des Grundzustands im mesonischen Sektor der QCD wurde als nächstes ein Zustand betrachtet, der die lokale Eichinvarianz dadurch herstellt, dass Elektron und Positron durch einen (infinitesimal) dünnen Flussschlauch miteinander verbunden werden, in welchem das Eichfeld konzentriert ist. Es konnte gezeigt werden, dass dieser Zustand einem hoch angeregten Zustand in der QED entspricht, der im Laufe der zeitlichen Entwicklung zerstrahlt und in den Coulomb-artigen Grundzustand übergeht. Dieses Ergebnis befindet sich im Einklang mit der Vorstellung von zwei individuellen elektrischen Ladungen, die als Grundzustand der Quantenelektrostatik von einem Coulomb-artigen elektrischen Feld umgeben sind.

Eine systematische Konstruktion von Lösungen, die der Forderung nach lokaler Eichinvarianz genügen, geschieht mittels des Dressingformalismus, welcher auf Dirac zurückgeht und zunächst anhand der QED erläutert wurde. Anschließen wurde zum einen auf die Verbindung hingewiesen, die zwischen der Fixierung einer Eichung und der Konstruktion von verschiedenen Testzuständen im Rahmen des Dressingformalismus besteht, zum anderen wurde daraus eine konkrete Vorschrift zur Berechnung der Persistenzamplituden dieser Zustände im Rahmen eines numerischen Zugangs abgeleitet. Der Einführung des in Gleichung (1.44) definierten Verhältnisses $R(r, t)$ kommt dabei eine zentrale Bedeutung zu, denn beim Vergleich des axialen Zustands mit dem Coulomb-Zustand hat sich gezeigt, dass die Ergebnisse der analytischen Untersuchung der QED mit denjenigen aus einer Simulation der kompakten QED in der Deconfinement-Phase sehr gut übereinstimmen und daher davon auszugehen ist, dass wir mit $R(r, t)$ tatsächlich ein Werkzeug gefunden haben, das es uns ermöglicht, vergleichende Untersuchungen zur Gestalt des Grundzustands in Eichtheorien bei Anwesenheit von statischen Ladungen durchzuführen. Dies gilt insbesondere für den Fall nicht-abelscher Eichtheorien, die sich einem vollständig analytischen Zugang bislang entziehen.

Zunächst wurde jedoch eine weitere Simulation der kompakten $U(1)$ -Theorie durchgeführt, diesmal in der Confinement-Phase der Theorie. Unsere Resultate weisen darauf hin, dass der axiale Zustand gegenüber dem Coulomb-Zustand klar bevorzugt wird. Beim Überschreiten der Phasengrenze scheint also eine Umkehrung der Situation im Vergleich zur analytisch zugänglichen Deconfinement-Phase einzutreten. Dieses Resultat ist nicht allzu überraschend, beschreibt das axiale Dressing doch einen insgesamt elektrisch neutralen Zustand, für den die Frage nach einer einzelnen, eichinvarianten Ladung als Konstituent des Zustands ihren Sinn verliert und folglich nicht beantwortet werden kann, was üblicherweise als Indiz für das Confinement-Phänomen gewertet wird. Als nächstes wurde das Verhalten einer $SU(2)$ -Eichtheorie untersucht, die an ein fundamentales Skalarfeld gekoppelt wurde. Dieses Modell wurde ausgewählt, da es die Sondierung des Grundzustands einer nicht-abelschen Eichtheorie ermöglicht, die in zwei verschiedenen Realisierungsphasen vorliegen kann. Diese unterscheiden sich grundlegend voneinander, wie durch die Berechnung des statischen Potentials unterhalb und oberhalb des detektierten *crossover* gezeigt werden konnte. Unsere Resultate lassen den überraschenden Schluss zu, dass der Coulomb-artige Zustand $|\Phi\rangle$ gegenüber dem axialen Zustand $|\chi\rangle$ sowohl in der Deconfinement-Phase, als auch in der Confinement-Phase vom wahren Grundzustand bevorzugt wird.

Zur Klärung der Frage, ob die Geometrie des *string*-artigen Zustands alleinige Ursache dafür ist, dass der axiale Zustand keine gute Beschreibung des Grundzustands einer Yang-Mills-Theorie in der Confinement-Phase zu bieten scheint, oder ob es sich dabei möglicherweise um den Einfluss des Higgs-Feldes handelt, wurden weitere Simulationen einer reinen $SU(2)$ -Eichtheorie durchgeführt, wobei besonderes Augenmerk auf das Verhalten der Überlappmatrixelemente von $|\Phi\rangle$ und $|\chi\rangle$ mit dem Grundzustand bei Veränderung der Gitterkonstanten $a(\beta)$ während der Annäherung an den Kontinuumslimes gelegt wurde. Im Falle des axialen Zustands konnte dabei beobachtet werden, dass der Überlapp mit dem Grundzustand für alle betrachteten Abstände der Fermionen exponentiell mit dem *UV-Cut-Off* abnahm, der durch den Wert der inversen Gitterkonstante $a(\beta)^{-1}$ gegeben ist. Interessanterweise hatten wir dieses Verhalten schon bei der analytischen Untersuchung des axialen Zustands in der QED beobachtet. Tatsächlich entspricht dies genau dem im Kontinuumslimes der $U(1)$ -Eichtheorie in der Deconfinement-Realisierungsphase erwarteten Verhalten, denn die infinitesimale Ausdehnung des *Strings* orthogonal zur Verbindungsachse der Ladungen führt schließlich dazu, dass der Überlapp des axialen Zustands mit dem Grundzustand verschwindet. Eine Gluonenverteilung in Form eines dünnen Flussschlauchs, der sich nach Einbringen eines Paares von sehr schweren fermionischen Quellen in das Vakuum einer Yang-Mills-Theorie ausbildet, kann folglich als Modell des Grundzustands verworfen werden. Es ist in diesem Zusammenhang interessant, den Blick nochmals auf die Confinement-Phase der kompakten QED zu richten: Hier hat sich der axiale Zustand als eine gute Beschreibung des Grundzustands präsentiert, wobei eingeräumt werden muss, dass unsere Untersuchungen nur für eine einzige, feste Gitterkonstante durchgeführt wurden. Sollte sich das Ergebnis jedoch im Kontinuumslimes erhärten, so könnte dies einen wertvollen Beitrag zur Klärung der Frage nach den Unterschieden zwischen abelschem und nicht-abelschem Confinement leisten (siehe auch [Shi08]).

Auf dem Gitter besteht auf einfache Art und Weise die Möglichkeit, Testzustände zu präparieren, die einer „zigarrenförmigen“ Gluonenfeldkonfiguration entsprechen. Dazu wurden im Rahmen der *Smearing*-Prozedur gewöhnliche Links durch sogenannte *fat links* ersetzt, was dazu geführt hat, dass der Einfluss von *UV*-Moden zurückgedrängt wurde und das Profil des Flussschlauchs sich über mehrere Plaquetten erstrecken konnte. Unsere Untersuchungen haben gezeigt, dass der Einfluss des sogenannten *overlap enhancement* für eine feste Anzahl S von Verschmierungsschritten unabhängig von β ist, was zur Folge hat, dass der Überlapp eines Zustands $|\chi_S\rangle$ mit dem Grundzustand für einen festen Abstand der Quellen im Kontinuumslimes noch immer verschwindet, wenngleich durch eine Erhöhung von S dafür gesorgt werden kann, dass dieses Verhalten im Vergleich zum rein axialen Zustand $|\chi\rangle$ in abgemilderter Form auftritt. Die vorliegenden Ergebnisse geben Anlass zu der Vermutung, dass sowohl bei der Annäherung an der Kontinuumslimes, als auch bei der Verwendung von größeren Gittern, eine immer größere Anzahl an Verschmierungsschritten benötigt wird, um den Überlapp mit dem Grundzustand zu verbessern bzw. auf einem festen Niveau zu halten. An dieser Beliebigkeit zeichnet sich bereits ab, dass keiner der Zustände $|\chi_S\rangle$ als Kandidat für den wahren Grundzustand der Yang-Mills-Theorie im Kontinuum in Frage kommen kann. Es ist außerdem aufschlussreich, sich klarzumachen, dass die vorliegenden Ergebnisse ebenfalls als eine systematische Untersuchung zur Auswirkung des *overlap enhancement* von Wilson-Loop-Operatoren mittels *Smearing* interpretiert werden können. Ist man nämlich lediglich am Verlauf des statischen Potentials $V(r)$ interessiert, so genügt es nach Gleichung (1.102) theoretisch, einen Testzustand $|\Psi\rangle$ zu verwenden, der einen nicht-verschwindenden Überlapp

mit dem wahren Grundzustand hat. Die einfachste Annahme ist dabei der axiale Zustand (1.86), dies führt auf den gewöhnlichen Wilson-Loop¹³. Da aber das Signal-/Rauschverhältnis mit zunehmender Größe der Wilson-Loops immer schlechter wird, ist man darauf angewiesen, diesen Überlapp auf irgendeine Weise zu maximieren, damit der Wert des Potentials für große Abstände r der Quellen überhaupt noch aus den Erwartungswerten der Wilson-Loop-Operatoren extrahiert werden kann. Die *Smearing*-Prozedur ist dabei ein probates Mittel, welches zunächst vor allem bei der Untersuchung des Glueball-Spektrums eingesetzt wurde (vgl. [Rot97] §17.4), jedoch ist auch hier bekannt, dass sich der Überlapp mit dem Grundzustand im Kontinuumslimes stetig verringert, und daher eine immer größere Anzahl an *Blocking*-Schritten zur Erzeugung von *Fuzzy Links* eingesetzt werden muss, um den Vorfaktor der Exponentialfunktion in Gleichung (1.102) nicht zu klein werden zu lassen.

Zuletzt wurde der Coulomb-Zustand (1.89) untersucht, der in störungstheoretischer Behandlung zwei individuell eichinvariante Farbladungen beschreibt, die von nicht-abelschen Coulomb-Feldern umgeben sind. Da die Dressing-Konstruktion jedoch aufs Engste mit dem Auftreten von Gribov-Kopien im Rahmen der Coulomb-Eichfixierung verknüpft ist, steht zu erwarten, dass dieser Ansatz wesentliche nicht-perturbative Effekte aufweisen wird. Es konnte beobachtet werden, dass der Coulomb-Zustand $|\Phi\rangle$ für jeden Wert der verwendeten Gitterkonstanten $a(\beta)$ einen wesentlich besseren Überlapp mit dem Grundzustand aufweist, als dies für den axialen Zustand der Fall war. Dieses Ergebnis erwies sich als unabhängig von der Wahl der Wirkung, die zur Simulation der diskretisierten $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie verwendet wurde. Da der Überlapp bei einer Verkleinerung der Gitterkonstanten sogar noch zunimmt, kann nicht ausgeschlossen werden, dass es sich bei dem nicht-abelschen Coulomb-Zustand möglicherweise tatsächlich um den wahren Grundzustand des $q\bar{q}$ -Sektors im Kontinuumslimes der Yang-Mills-Theorie handelt. Ob sich der von uns beobachtete Trend bei der Annäherung an den Kontinuumsfall tatsächlich fortsetzt, müsste durch weitere Simulationen auf größeren Gittern bei feinerer Diskretisierung geklärt werden. Außerdem wäre es interessant, den Einfluss der Gribov-Kopien auf unsere Ergebnisse als Funktion der Gitterkonstanten systematisch zu untersuchen, um eine Antwort auf die Frage zu finden, welcher Mechanismus hinter der plötzlich einsetzenden Veränderung des Überlappverhaltens bei einer bestimmten Längenskala steckt, deren Wert von der verwendeten Gitterkonstanten abzuhängen scheint. Eine naheliegende Fortsetzung der vorgestellten Untersuchungen besteht sicherlich auch in der Anwendung des Dressingformalismus auf die Untersuchung von Ladungen in der $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie. Aufgrund ihrer besonderen Bedeutung für die Theorie der starken Wechselwirkung wäre es schließlich wünschenswert zu überprüfen, ob sich unsere Ergebnisse zur Gestalt des Grundzustands auch bei der Beschreibung von Mesonen in der QCD bestätigen lassen. Da man erwartet, dass $SU(N_c)$ -Yang-Mills-Theorien für große N_c eine duale Beschreibung als String-Theorie besitzen [tH74a], ist es interessant, nochmals über die Rolle des axialen Zustands in derartigen Theorien nachzudenken. Es wäre durchaus möglich, dass sich der axiale Zustand in diesem Grenzfall wieder als die bessere Alternative bei der Beschreibung des Grundzustands erweist. Ebenfalls vorstellbar ist, dass das optimale Dressing auf einer Art interpolierenden Eichung [tH71, tH81, CH86, LS89, LvN94] beruht, welche in der Lage ist – möglicherweise als Kompromiss zwischen axialer Eichung und Coulomb-Eichung – den idealen Kandidaten für den Grundzustand der jeweiligen $SU(N_c)$ -Yang-Mills-Theorie zu erzeugen.

¹³Die zugehörige Konstruktion wird im Detail in Kapitel 4.6 besprochen.

Zusammenfassend lässt sich konstatieren, dass unsere Untersuchungen zur Gestalt des Grundzustands im mesonischen Sektor der Yang-Mills-Theorie ein unerwartetes und sehr überraschendes Ergebnis geliefert haben. Die genaue Geometrie des wahren Grundzustands bleibt zwar nach wie vor unbekannt, das vorherrschende Bild eines dünnen gluonischen Flusschlauchs, der sich zwischen dem Fermionen-Paar ausbilden und auf diese Weise verhindern soll, dass die Ladungen voneinander getrennt werden können, hat sich jedoch nicht als uningeschränkt tragfähig erwiesen und muss daher möglicherweise revidiert werden.

Kapitel 2

Topologische Anregungen in der Theorie der starken und elektroschwachen Wechselwirkung

2.1 Einleitung

In Kapitel 1.3.2 wurde im Rahmen der Diskussion des Phasendiagramms der kompakten $U(1)$ -Eichtheorie darauf hingewiesen, dass die Kondensation *magnetischer Monopole* für das Auftreten des Confinement-Phänomens in dieser Theorie verantwortlich gemacht werden kann [Pol75], und dass dies in numerischen Simulationen auf eindrucksvolle Weise bestätigt werden konnte [DT80, SW92]. Der Übergang in die gewöhnliche Coulomb-Phase wird dabei durch eine rapide Änderung der Monopoldichte angezeigt, das Kondensat „schmilzt“ und die Theorie verliert ihre Confinement-Eigenschaften. Untersuchungen von nicht-abelschen Feldtheorien haben gezeigt, dass auch in diesem Fall unter Umständen Monopolkonfigurationen als Lösungen der zugehörigen Feldgleichungen gefunden werden können. Es zeigt sich, dass die Existenz derartiger Lösungen eng mit der Topologie der Gruppenmannigfaltigkeit und der Gestalt der Raumzeit verknüpft ist, welche die Grundlage der betrachteten Eichtheorien bilden. Es ist daher nicht verwunderlich, dass eine Klassifizierung der verschiedenen Lösungen auf einer topologischen Unterscheidung von Abbildungen aus der Gruppenmannigfaltigkeit auf den Rand der Raumzeit-Mannigfaltigkeit beruht, die mittels der sogenannten Homotopiegruppe $\pi_n(G)$ charakterisiert werden können.

Neben magnetischen Monopolen, die wir kurz anhand des sogenannten dualen Supraleiters als Modell des Vakuums der QCD und im Rahmen der Einbettung von topologischen Defekten in Yang-Mills-Theorien diskutieren werden, spielen auch sogenannte *Vortex-Lösungen* als topologische Anregungen in der Theorie der starken und elektroschwachen Wechselwirkung eine wichtige Rolle. In Kapitel 2.3 werden wir zunächst die Rolle von *Zentrumsvortices* in einem populären Mechanismus zur Erklärung des Confinement-Phänomens diskutieren. Davor ausgehend werden wir uns der Untersuchung des sogenannten *Stringbreaking-Phänomens* im Zentrumsvortexbild des Confinements in einem Modell der Theorie der starken Wechselwirkung mit dynamischen Materiefeldern widmen. Danach wenden wir uns in Kapitel 2.5 dem Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung bei endlichen Temperaturen zu. Dabei soll das Perkolationsverhalten der Zentrumsvortices in der Nähe des elektroschwachen

crossover mit dem der sogenannten *elektroschwachen Z-Strings* verglichen werden, die sich als topologisch instabile Vortex-Lösungen in die elektroschwache Theorie einbetten lassen und eine phänomenologisch höchst interessante Rolle im Rahmen von alternativen Bayogenese-Szenarien bei der Abkühlung des frühen Universums spielen könnten. Eine Untersuchung zum Verhalten der Dichte sowie einer Profilfunktion der Zentrumsvortices im Kontinuumslimes der Theorie in der symmetrischen Phase schließen diese Untersuchung ab.

2.2 Dualität und Confinement durch Monopole

2.2.1 Der duale Supraleiter

Die Idee des dualen Supraleiters als Modell des Vakuums der Quantenchromodynamik wurde im Wesentlichen durch die experimentelle Beobachtung eines Phänomens inspiriert, das bei der Untersuchung von Typ-II-Supraleitern in externen Magnetfeldern festgestellt werden kann. Während Supraleiter vom Typ I unterhalb einer kritischen Temperatur T_c in einem perfekten diamagnetischen Zustand realisiert sind und aufgrund des *Meissner-Ochsenfeld-Effektes* ein äußeres Magnetfeld komplett aus ihrem Inneren verdrängen, besteht für Supraleiter vom Typ II die Möglichkeit zum Übergang in die sogenannte *Shubnikov-Phase*, die durch die Ausbildung von räumlich recht klar begrenzten normalleitenden Bereichen innerhalb der Probe charakterisiert ist, in die das externe Magnetfeld eindringen kann. Diese sogenannten *Abrikosov-Vortices* bilden eine regelmäßige, gitterartige Struktur und ermöglichen es einem quantisierten magnetischen Fluss in ein ansonsten feldfreies Vakuum einzudringen¹. Da magnetische Feldlinien in einem Typ-II-Supraleiter in der Shubnikov-Phase also auf einen mehr oder weniger klar begrenzten räumlichen Bereich komprimiert werden, sollte dies auch für ein Magnetfeld gelten, das sich zwischen zwei magnetischen Elementarladungen unterschiedlichen Vorzeichens ausbildet. Stellt man sich also vor, dass magnetische Monopole in ein Shubnikov-Vakuum eingebracht werden, so wird das ursprünglich zu erwartende radiale Coulomb-Feld eines Monopols deformiert und schließlich aufgrund des Meissner-Ochsenfeld-Effekts in Kombination mit anderen Monopolfeldern die Gestalt von Flussschlüuchen annehmen, die sich zwischen den magnetischen Ladungen ausbilden.

Im Rahmen der Untersuchung des Grundzustands der Yang-Mills-Theorie in Kapitel 1 haben wir bereits gesehen, dass sich ein solches Bild als durchaus tragfähig für die Beschreibung des Confinement-Mechanismus erweisen kann, wobei hier die Rollen von (chromo-) magnetischen und elektrischen Ladungen und Feldern vertauscht werden müssen. Dies ist der Grund dafür, dass sich die Bezeichnung des nun noch genauer zu erläuternden Modells des Vakuums der QCD als *dualer Supraleiter* [tH75,Pol75,Man76] etabliert hat. Die Ursache für die Ausbildung eines supraleitenden Zustands in einem Festkörper liegt in der Kondensation von sogenannten Cooper-Paaren begründet. Jeweils zwei Elektronen bilden dabei durch phononische Wechselwirkung des Gitters ein Quasi-Boson, und dieser Bindungszustand sorgt dafür, dass sich eine Energielücke (*energy gap*) im Anregungsspektrum der Ladungsträger unterhalb des normalleitenden Zustands ausbilden kann. Dieser Phasenübergang wird also durch die Kondensation elektrischer Monopole, nämlich der Elektronen, angezeigt, und da sich diese in der supraleitenden Phase in einem quasi-bosonischen Zustand befinden, ist es nicht verwunderlich, dass die einfachste Beschreibung dieses Phänomens durch eine abelsche Eichtheorie geschieht, die

¹Eine elementare Diskussion der Abrikosov-Vortices im Rahmen der Landau-Ginzburg-Theorie der Supraleitung findet sich in [Fel98].

an ein komplexes Skalarfeld gekoppelt wird, das die elektrische Ladung $q = -2e$ trägt und das Auftreten des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung ermöglicht.

Für die Realisierung eines dualen Supraleiters als Modell des Vakuums der QCD, in welchem nun farb-elektrische Ladungen durch farb-elektrische Flussschlüsse zu mesonischen Zuständen gebunden werden können, müssen konsequenterweise farb-magnetische Ladungen existieren, welche die Rolle der Elektronen in einem gewöhnlichen Supraleiter bei der Ausbildung eines Cooper-Paar-Kondensats übernehmen. Daher ist es wichtig zu klären, unter welchen Umständen magnetische Monopole in Yang-Mills-Theorien auftreten können.

2.2.2 Dualität und magnetische Monopole

Beginnen wir zunächst mit einer Untersuchung der in Kapitel 1.3 definierten abelschen $U(1)$ -Eichtheorie. Bei Anwesenheit von elektrisch geladener Materie nehmen die Maxwell-Gleichungen in kovarianter Form die Gestalt

$$\partial_\mu F^{\mu\nu}(x) = j^\nu(x), \quad \partial_\mu *F^{\mu\nu}(x) = 0, \quad j^\nu(x) = e\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x) \quad (2.1)$$

an, wobei der duale Feldstärketensor als $*F^{\mu\nu}(x) = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\lambda\kappa}F_{\lambda\kappa}(x)$ definiert ist. Im Fall verschwindender elektrischer Ströme $j^\nu(x)$ besitzt die Theorie neben Lorentz- und Eichsymmetrie eine weitere Symmetrie unter der Dualitätstransformation²

$$D : F_{\mu\nu}(x) \rightarrow *F_{\mu\nu}(x) \iff D : \mathbf{E}(x) \rightarrow \mathbf{B}(x), \quad \mathbf{B}(x) \rightarrow -\mathbf{E}(x). \quad (2.2)$$

Fordern wir nun, dass auch bei Anwesenheit von elektrischen Quelltermen diese Symmetrie erhalten sein soll, so müssen die Gleichungen (2.1) durch Hinzufügen eines magnetischen Stroms $k^\nu(x)$ modifiziert werden. Ein solcher Term ist aber aufgrund der Bianchi-Identität für glatte Eichpotentiale $A_\mu(x)$ nicht zulässig, daher ist es notwendig, den Lösungsraum auf nicht-differenzierbare Eichfelder zu erweitern. Dabei stellt sich die Frage nach der Konsistenz einer solchen symmetrisierten Elektrodynamik angesichts der Kopplung an quantenmechanisch zu behandelnde Materiefelder. Eine erste Untersuchung dieser Art wurde von Dirac [Dir31] durchgeführt, die hier kurz erläutert werden soll. Ein magnetischer Monopol, lokalisiert im Ursprung des \mathbb{R}^3 , ruft das Feld

$$\mathbf{B}(r) = \frac{g}{4\pi r^2} \hat{e}_r \quad (2.3)$$

hervor, wobei g die magnetische Elementarladung bezeichnet. Ein solches Feld besitzt in Kugelkoordinaten eine Darstellung als Rotation des Eichpotentials

$$\mathbf{A}_N = \frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)} \hat{e}_\varphi \quad (2.4)$$

auf \mathbb{R}^3 , welches eine Singularität im Ursprung besitzt, die sich linienartig für $\vartheta = \pi$ ins Unendliche fortsetzt. Dieser sogenannte *Dirac-String* ist allerdings unphysikalisch, da sich seine Position als eichabhängig erweist und nur die Singularität im Ursprung physikalisch relevant ist. Die Konsistenz der resultierenden Quantentheorie eines geladenen Teilchens im Feld des magnetischen Monopols (2.3) wird durch das Dirac'sche Veto gewährleistet, nach dem die Trajektorie den *Dirac-String* nicht kreuzen darf.

²Im Minkowski-Raum \mathcal{M}_4 gilt $** = -1$, die Theorie ist somit anti-selbstdual.

In der Einleitung wurde bereits darauf hingewiesen, dass die Existenz und Charakterisierung von nicht-perturbativen Lösungen der Bewegungsgleichungen von Eichtheorien maßgeblich von der Topologie der Eichgruppe sowie (dem Rand) der Raumzeit-Mannigfaltigkeit abhängt, auf der die Eichtheorie definiert ist. Es lohnt sich daher, die Monopollösung von Dirac nochmals unter topologischen Gesichtspunkten zu betrachten. Diese alternative Formulierung geht auf Wu und Yang [WY75] zurück und macht von glatten Eichpotentialen Gebrauch, die in zwei verschiedenen offenen Umgebungen definiert sind, die den topologisch nicht-trivialen Raum $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\} \simeq S^2$ überdecken. Die Position des Monopols ist also aus der Mannigfaltigkeit ausgenommen. Die beiden Karten, welche die S^2 überdecken, werden als Nord- und Südhälfte des Atlas bezeichnet, da die Region, in der die beiden Karten überlappen, üblicherweise als der Äquator der Kugel gewählt wird. Dies ist zweckmäßig aber nicht zwingend, denn der geometrische Ort, an dem der *Dirac-String* die Kugeloberfläche durchstößt, ist ja nur in einer speziellen Eichung der Nord- bzw. Südpol der S^2 . Wählen wir also auf der Nordhälfte das Eichpotential (2.4) und auf der Südhälfte

$$\mathbf{A}_S = -\frac{g}{4\pi r} \frac{1 + \cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)} \hat{e}_\varphi , \quad (2.5)$$

so sind die Eichpotentiale in ihrer jeweiligen Karte wohldefiniert und ergeben eine stetige Feldstärke auf S^2 . Die Konstruktion nutzt die Invarianz der Feldstärke unter Eichtransformationen (1.50), die am Eichfeld durchgeführt werden können. Solange sich nämlich die Eichpotentiale in der Überlappregion der verschiedenen Karten nur um eine Eichtransformation unterscheiden, erhalten wir im abelschen Fall eine glatte Feldstärke auf ganz $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$. Im vorliegenden Fall besteht die Überlappregion aus dem Äquator $S^1 \simeq \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ bei $\vartheta_0 = \pi/2$ und die Differenz der Eichpotentiale ist gegeben durch

$$\mathbf{A}_N(\vartheta_0) - \mathbf{A}_S(\vartheta_0) = \nabla \lambda(\varphi) , \quad \lambda(\varphi) = \frac{g}{2\pi} \varphi . \quad (2.6)$$

Folglich ist durch $\Omega_{NS}(\varphi) = \exp(-ie\lambda(\varphi)) \in U(1)$ eine Übergangsfunktion definiert, die die magnetische Ladung des Monopols im Ursprung charakterisiert:

$$g = \oint_{S^2} \mathbf{B} \cdot d\sigma = \int_{S_N^2} \mathbf{B}_N \cdot d\sigma + \int_{S_S^2} \mathbf{B}_S \cdot d\sigma = \oint_{S^1} (\mathbf{A}_N - \mathbf{A}_S) \cdot d\mathbf{s} = \lambda(\varphi) \Big|_0^{2\pi} \quad (2.7)$$

Die Forderung nach Stetigkeit der Eichtransformationen führt auf die berühmte Quantisierungsbedingung [Dir31] für magnetische Ladungen:

$$\Omega_{NS}(0) = \Omega_{NS}(2\pi) \iff g = \frac{2\pi}{e} n , \quad n \in \mathbb{Z} . \quad (2.8)$$

Der entscheidende Punkt ist, dass die auf einem kompakten Intervall definierte Funktion $\lambda : [0, 2\pi] \mapsto \mathbb{R}$ nicht stetig sein muss, sondern i.A. Sprünge um $2\pi m, m \in \mathbb{Z}$ aufweisen kann. Die nach Gleichung (2.6) zu berechnenden Transformationen der Eichpotentiale können daher singulär werden. Zu beachten ist ferner, dass es sich bei $\lambda(\varphi)$ um eine Abbildung einer (räumlichen) S^1 auf die Gruppenmannigfaltigkeit der $U(1) \simeq S^1$ handelt. Daher kann die magnetische Ladung g auch als ein Element der ersten Homotopiegruppe $\pi_1(U(1)) = \mathbb{Z}$ interpretiert werden, die diese Abbildung charakterisiert.

Die erste numerische Untersuchung zur Detektierung von magnetischen Monopolen innerhalb der Konfigurationen einer kompakten abelschen Eichtheorie wurde von deGrand und Toussaint [DT80] durchgeführt. Dabei wurde eine Vorschrift angegeben, welche es erlaubt, den

mit den *Dirac-Strings* verknüpften magnetischen Fluss durch die Oberfläche eines elementaren Würfels zu bestimmen. Dabei wird angenommen, dass sich der gemäß Gleichung (1.70) berechnete Fluss durch eine elementare Plaquette aus zwei Teilen zusammensetzt, nämlich physikalischen Fluktuationen aus dem Intervall $[-\pi, \pi]$, sowie ganzzahligen Vielfachen von 2π , die dem Fluss eines *Dirac-Strings* entsprechen. Definiert man also

$$\bar{\theta}(x)_{\mu\nu} := [\theta(x)_{\mu\nu} - 2\pi n_{\mu\nu}(x)] \in [-\pi, \pi], \quad n_{\mu\nu}(x) \in \mathbb{Z}, \quad (2.9)$$

wobei $n_{\mu\nu}(x)$ die Anzahl der *Dirac-Strings* bezeichnet, die die elementare Plaquette $P_{\mu\nu}(x)$ durchstößt, so lässt sich die magnetische Ladung M innerhalb eines ausgedehnten Würfels \mathcal{C} berechnen als

$$M = \frac{1}{2\pi} \sum_{\partial\mathcal{C}} \bar{\theta}_{\mu\nu} = \frac{1}{2\pi} \sum_{c \in \mathcal{C}} \nabla_\mu \epsilon_{\mu\nu\kappa} \bar{\theta}_{\nu\kappa} = \sum_{c \in \mathcal{C}} \epsilon_{\mu\nu\kappa} \nabla_\mu n_{\nu\kappa}. \quad (2.10)$$

In der zweiten Gleichung, die das Analogon zu $M = \int_{V_c} \nabla \cdot \mathbf{B}$ auf dem Gitter darstellt, wird über alle elementaren Kuben c summiert, deren magnetische Ladungen sich zu der in \mathcal{C} enthaltenen Ladung addieren. Eine Alternative zu dieser sogenannten Typ-II-Konstruktion besteht dabei in der Verwendung von ausgedehnten Plaquetten $\bar{\theta}^{(k)}(x)_{\mu\nu}$, deren Verwendung in Kapitel 2.5 im Kontext einer möglichen Definition von elektroschwachen Z -Strings diskutiert werden wird. Zuletzt ist festzuhalten, dass eine Eichtransformation der Link-Variablen den Wert einer einzelnen Plaquette zu verändern vermag, nicht jedoch die Summe über eine geschlossene Oberfläche. In dieser Beobachtung manifestiert sich die Erkenntnis, dass dem Verlauf der *Dirac-Strings* keine physikalische Bedeutung beizumessen ist, die eingeschlossene magnetische Ladung jedoch eine eichinvariante Größe darstellt, die mithilfe von unphysikalischen Objekten bestimmt werden kann.

2.2.3 Yang-Mills-Theorie und abelsche Eichungen

Die Kompaktheit der $U(1)$ Eichgruppe ist notwendig und hinreichend für die Existenz von magnetischen Monopolen in der oben diskutierten abelschen Eichtheorie. Dabei wurde deutlich, dass die Topologie eine wesentliche Rolle für die Klassifizierung der nicht-perturbativen Lösungen spielt, die für das Confinement-Phänomen verantwortlich sein sollen. Eine Ausweitung der hier vorgestellten Techniken in Anwendung auf Yang-Mills-Theorien mit Eichgruppe $G = SU(N)$ ist nicht direkt möglich, da $\pi_1(SU(N)) = \{0\}$. Die Idee ist nun, sich auf eine abelsche Untergruppe zu konzentrieren, deren Kompaktheit aus der Einbettung in eine kompakte Eichgruppe G resultiert. Im Fall der $SU(N)$ handelt es sich um die Cartan-Untergruppe $H = U(1)^{N-1} \subset G$, deren $N-1$ Generatoren die größte abelsche Unteralgebra der $\mathfrak{su}(N)$ bilden. Diese können immer diagonal gewählt werden. Im Hinblick auf eine in Kapitel 4 zu besprechende Verallgemeinerung der hier diskutierten Ergebnisse auf Eichtheorien, deren volle Symmetriegruppe G durch das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung auf eine residuelle Symmetriegruppe H eingeschränkt wird, empfiehlt es sich, bereits an dieser Stelle den Coset G/H einzuführen, der all die Elemente aus G enthält, die nicht durch einen Eichtransformation $h \in H$ miteinander verknüpft sind. Schematisch lässt sich diese Zerlegung als

$$G = H \oplus HM_1 \oplus HM_2 \dots \quad (2.11)$$

darstellen, wobei die Mengen M_i Elemente enthalten, die zwar zu G , nicht aber zu H gehören und dabei untereinander verschieden sind. Die Existenz von magnetischen Monopolen ist gesichert, sofern die mit $\pi_2(G/H)$ bezeichnete zweite Homotopiegruppe von G/H nicht trivial ist,

und im Fall $G = SU(2)$ ist dies aufgrund von $\pi_2(SU(2)/U(1)) = \pi_1(U(1))$ gerade der Fall³. Das Interesse an den (maximal) abelschen Eichungen [tH81] resultiert nun aus der Annahme, dass sich durch Fixierung der vollen Symmetrie G der Theorie auf eine durch H beschriebene residuelle abelsche Symmetrie die wesentlichen Informationen über den Confinement-Mechanismus, die in den Eichfeldern enthalten sind, in den abelschen Freiheitsgraden konzentrieren lassen, auf die anschließend projiziert werden kann. Das Ergebnis dieser sogenannten abelschen Projektion auf die Cartan-Untergruppe ist eine effektive abelsche Eichtheorie, die aufgrund von $\pi_1(H) \neq \{0\}$ das Auftreten von magnetischen Monopolen erlaubt.

Konkretisieren wir diese Überlegungen zunächst für den Fall einer $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie. Die maximale abelsche Eichung (MAG) wird in der Gitterformulierung dieser Theorie durch Maximierung des eichfixierenden Funktionals

$$\mathcal{F}_U^{\text{MAG}}[\Omega] = \frac{1}{ND} \sum_{x=1}^N \sum_{\mu=1}^D \text{tr} \left[U_\mu^\Omega(x) \sigma^3 U_\mu^{\Omega\dagger}(x) \sigma^3 \right] \xrightarrow{\Omega} \max. \quad (2.12)$$

realisiert⁴. Dabei bezeichnet konventionsgemäß σ^3 die diagonale Pauli-Matrix innerhalb der $\mathfrak{su}(2)$ (siehe Anhang D.32). Das Funktional (2.12) ist invariant unter abelschen Eichtransformationen der Form $\Omega_A(x) = \exp[i\alpha(x)\sigma^3]$ mit $\alpha(x) \in [0, 2\pi[$, daher wird die $SU(2)$ Eichsymmetrie der Theorie bis auf eine $U(1)$ Untergruppe fixiert, deren Einbettung durch die Wahl der z -Richtung in $\mathfrak{su}(2)$ gegeben ist. Nach Abschluss der Eichfixierung sind die Links $U_\mu^\Omega(x)$ „so diagonal wie möglich“, d.h. die dominierenden Komponentenfunktionen in der Parametrisierung (D.33) sind $a_\mu^0(x)$ und $a_\mu^3(x)$. Die abelsche Projektion besteht nun in der Extraktion der Felder $\theta_\mu(x)$ aus den eichfixierten Links nach der Vorschrift

$$\theta_\mu(x) := \arg \left[[U_\mu^{\Omega_A}(x)]^{11} \right] = \arg [a_\mu^0(x) + i a_\mu^3(x)] , \quad \theta_\mu(x) \in [-\pi, \pi[. \quad (2.13)$$

Diese verhalten sich unter den residuellen abelschen Transformationen wie ein (kompaktes) abelsches Eichfeld:

$$\theta_\mu(x) \rightarrow \theta_\mu^{\Omega_A}(x) = \Omega_A(x) \theta_\mu(x) \Omega_A^\dagger(x + \mu) = [\theta_\mu(x) + \alpha(x) - \alpha(x + \mu)] \bmod 2\pi . \quad (2.14)$$

Diese Konstruktion eröffnet die Möglichkeit, das Konzept der sogenannten *abelschen Dominanz* in numerischen Simulationen der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie direkt testen zu können. Zur Extraktion des Potentials, das zwischen zwei statischen farbbelektrischen Ladungen vorherrscht, wird dabei der eichinvariante Wilson-Loop-Operator herangezogen. Da der Erwartungswert dieses Operators unabhängig von der gewählten Eichung ist, kann dieser insbesondere durch Verwendung von Konfigurationen berechnet werden, die sich in maximal abelscher Eichung befinden. Das Ergebnis wird mit dem Resultat einer zweiten Berechnung des Erwartungswertes des Wilson-Loop-Operators verglichen, wobei diesmal ausschließlich die durch abelsche Projektion (2.13) gewonnenen Felder $\theta_\mu(x)$ in die Berechnung einfließen. Dabei hat sich gezeigt [BBMPS96], dass der lineare Anstieg des Confinement-Potentials, der in der vollen $SU(2)$ -Eichtheorie gemessen wurde, zu 92% durch die Verwendung der Link-Variablen in abelscher Projektion reproduziert werden kann. Außerdem ließ sich ein Phänomen beobachten, dass als *Monopol-Dominanz* Eingang in die Literatur gefunden hat: Die gemessene

³Eine Diskussion des allgemeineren Theorems, das die Isomorphie von $\pi_2(G/H)$ zum Kern des natürlichen Homomorphismus von $\pi_1(H)$ nach $\pi_1(G)$ beweist, findet sich beispielsweise in [Ryd85].

⁴Vgl. [CGI98, DDFG⁺98] und die darin enthaltenen Referenzen.

abelsche string tension σ_A resultiert zu etwa 95% aus Konfigurationen, in denen magnetische Monopole nachgewiesen werden konnten. Weitere Hinweise auf die Relevanz der in abelschen Eichungen definierten Monopole für das Confinement-Phänomen sind das Skalierungsverhalten der Monopoldichte $\rho_m(\beta) \sim a^3(\beta)$, sowie die beobachteten Änderungen im Verhalten der Dichte beim Übergang der Theorie in die Deconfinementphase⁵. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die Kondensation von magnetischen Monopolen in der Confinement-Phase der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie durch numerische Untersuchungen, durchgeführt in maximal abelschen Eichungen, bestätigt werden konnte. Diese Resultate scheinen somit das Bild des dualen Supraleiters als Modell des Vakuums der Quantenchromodynamik zu unterstützen.

2.2.4 Einbettung topologischer Defekte

Werden zusätzliche skalare Felder an reine Yang-Mills-Theorien angekoppelt, so eröffnen sich neue Möglichkeiten, abelsche Eichungen für derartige Theorien zu definieren. Insbesondere erlaubt das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung, welches in Kapitel 4.2 ausführlich diskutiert wird, die Konstruktion von statischen Lösungen der Bewegungsgleichungen, die einer Monopolkonfiguration endlicher Energie entsprechen, ohne den Kunstgriff der abelschen Projektion bemühen zu müssen. Umgekehrt ermöglichen solche Theorien die Einbettung einer abelschen Theorie. In diesem Kapitel soll eine kurze Diskussion der Situation anhand des Georgi-Glashow-Modells [GG72] erfolgen.

Dabei handelt es sich um eine Yang-Mills-Theorie mit $G = SO(3)$ Eichsymmetrie, an die ein skalares Isovektorfeld $\phi^a(x)$ ($a = 1, 2, 3$) gekoppelt ist. Die Eichgruppe ist lokal isomorph zu $SU(2)$ und das Higgs-Feld transformiert sich somit unter der adjungierten Darstellung der Gruppe. In Kapitel 4.3 werden wir eine Erweiterung dieser Theorie durch Verwendung der Eichgruppe $SU(3)$ vornehmen. Die dort getroffenen Konventionen für die Parameter der Lagrangedichte (4.26) sollen auch hier beibehalten werden: Als Basis der Lie-Algebra $\mathcal{L}G$ wählen wir im vorliegenden Fall die Generatoren $T^a = \sigma^a/2$ ($a = 1, 2, 3$) und ersetzen in Koordinatendarstellung die Strukturkonstanten f^{abc} durch ϵ^{abc} . Für $m^2 < 0$ kann eine spontane Brechung der G -Symmetrie auftreten. Dabei entwickelt das adjugierte Skalarfeld $\Phi = \phi^a T^a$ einen Vakuumerwartungswert $\|\Phi_0\|^2 = -m^2/\Lambda$, der das Potential minimiert. Die Vakuumsmannigfaltigkeit ist durch $\mathcal{S}^2 \simeq G/H$ gegeben, wobei H die Gruppe der residuellen abelschen $U(1)$ -Symmetrie der Theorie bezeichnet. Diese ist realisiert durch Drehungen ($U(1) \simeq SO(2)$) in einer Ebene, welche den Vakuumerwartungswert Φ_0 des Isospinvektors invariant lassen. Da die Orientierung von $\Phi_0 \in \mathcal{L}G$ durch die Bedingung $V_{\text{tree}}(\Phi_0) = 0$ nicht festgelegt ist, kann diese Beliebigkeit ausgenutzt werden, um für den Einheitsvektor

$$n(x) = n^a(x) T^a, \quad n^a(x) := \frac{\phi^a(x)}{\|\Phi(x)\|}, \quad n^a(x) n^a(x) = 1 \quad (2.15)$$

eine spezielle Wahl zu treffen, welche die Einbettung von H in G charakterisiert und somit eine spezielle Eichung definiert. Im Folgenden wollen wir die Lösung (2.4) in die elektromagnetische Untergruppe H einbetten. Dazu wählen wir die sogenannte *unitäre Eichung* $n^a(x) = \delta^{a3}$ ($\forall x$), in der das Vektorpotential des magnetischen Monopols mit Dirac-String längs der negativen z-Achse als dritte Komponente im Isospinraum fungiert. Der Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes ist ebenfalls in diese Richtung orientiert. Insgesamt betrachten

⁵Eine Diskussion der wegbereitenden Arbeiten findet sich in [Sch01].

wir also die Konfiguration

$$A_0 = A_r = A_\vartheta = 0 , \quad A_\varphi = -\frac{g}{4\pi r} \frac{1 - \cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)} T^3 , \quad \Phi = \|\Phi_0\| T^3 . \quad (2.16)$$

Eine allgemeine Eichtransformation $\Omega(x) \in SU(2)$ kann durch die drei Euler'schen Winkel (α, β, γ) parametrisiert werden und besitzt die Darstellung

$$\Omega(x) = \exp \{i\alpha(x)T^3\} \exp \{i\beta(x)T^2\} \exp \{i\gamma(x)T^3\} . \quad (2.17)$$

Wird nun eine Eichtransformation des Potentials und des adjungierten Skalarfeldes gemäß der Gleichungen (1.50) und (4.43) für die spezielle Wahl $\gamma = -\alpha = \varphi, \beta = -\vartheta$ durchgeführt, so erhält man die von 't Hooft und Polyakov [tH74b,Pol74] angegebene asymptotische Lösung

$$A_0^a = 0 , \quad A_i^a = -\epsilon_{iab} \frac{x^b}{er^2} , \quad \phi^a = \|\Phi_0\| \frac{x^a}{r} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.18)$$

der Feldgleichungen des Georgi-Glashow-Modells. Diese sogenannte *Hedgehog*-Lösung beschreibt einen magnetischen Monopol im Ursprung des Koordinatensystems, wie sich durch die Berechnung der in Gleichung (4.91) definierten verallgemeinerten Feldstärke leicht zeigen lässt. Die Eichtransformation hat dafür gesorgt, dass der unphysikalische Dirac-String verschwunden ist und das kovariant konstante Skalarfeld am Rand des räumlichen Universums \mathcal{S}_∞^2 seinen Vakuumerwartungswert bei nicht-trivialen Randbedingungen annimmt. Dabei ist zu beachten, dass keinerlei abelsche Projektion vorgenommen werden musste. Die magnetische Ladung ist rein topologischer Natur, denn obwohl die Felder $A_\mu(x)$ und $\Phi(x)$ ausschließlich elektrische Ladung tragen, findet sich bei der Berechnung des magnetischen Stroms $k^\mu(x)$ mittels des zu (4.91) dualen Feldstärketensors nach (2.1) eine quantisierte erhaltene Ladung $M = 2g$, welche der zweifachen Ladung des Dirac'schen Monopols entspricht. Dies ist eine Folge der Charakterisierung der Vakuummannigfaltigkeit von Φ durch $\pi_2(G/H)$ als den geraden ganzen Zahlen [Har96]. Die Existenz der magnetischen Monopole in diesem Modell ist also eine Folge der Nichttrivialität der zweiten Homotopiegruppe von $SO(3)/U(1)$ und hängt nicht von der gewählten Eichung ab. Die unitäre Eichung hat sich dabei lediglich als besonders geeignet erwiesen, um magnetische Monopolkonfigurationen detektieren zu können.

In Kapitel 2.5.1 werden wir auf diesen Punkt nochmals zurückkommen. Dort wollen wir uns der Untersuchung von *Zentrumsvortices* und der Einbettung von sogenannten *Nambu-Monopolen* und *elektroschwachen Z-Strings* in das Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung bei endlichen Temperaturen zuwenden, die als topologische Defekte auf eich-invariante Weise charakterisiert und detektiert werden können. Zunächst soll jedoch noch ein weiteres Confinement-Szenario für die Theorie der *starken* Wechselwirkung diskutiert werden, welches auf der Annahme perkolierender Zentrumsvortices beruht. Insbesondere soll untersucht werden, ob diese kollektiven Freiheitsgrade in der Lage sind, neben dem Einschluss von Farbladungen auch das Phänomen des *Stringbreakings* zu erklären, welches sich in Streuexperimenten stark wechselwirkender Teilchen durch den Einfluss von dynamischer Materie in der Hadronisierung von angeregten farbneutralen Zuständen manifestiert.

2.3 Confinement und Zentrumsvortices

Ein alternativer Mechanismus zur Erklärung des Confinement-Phänomens basiert auf der bereits Ende der siebziger Jahre des vorigen Jahrhunderts entstandenen Vorstellung von kondensierenden Zentrumsvortices als den relevanten Freiheitsgraden in einer gluonischen Feldkonfiguration, welche das Vakuum einer Yang-Mills-Theorie durchziehen [tH78, Cor79, tH79, NO79]. Ein Vortex stellt in drei Dimensionen eine zylinderförmige Feldkonfiguration dar, welche quantisierten magnetischen Fluss trägt⁶. Handelt es sich um eine auf einer Eichgruppe G basierenden Theorie, so sind die möglichen Werte für das Flussquantum Φ im Falle eines Zentrumsvortex aufs Engste mit denjenigen Eichfeldern verknüpft, die aus dem Zentrum der Gruppe G stammen.

2.3.1 Zentrums-Eichung und Zentrumsvortices

Das *Zentrum* einer Gruppe G ist die Menge aller Elemente Z , die mit allen anderen Elementen der Gruppe kommutieren. Im Fall $G = SU(N)$ handelt es sich dabei um die zyklische Gruppe

$$\mathbb{Z}_N = \{\exp(2\pi i n/N) \mid n = 0, \dots, N-1\}. \quad (2.19)$$

Wie schon bei der Diskussion des dualen Supraleiters spielt offensichtlich auch hier wieder eine abelsche Untergruppe der $SU(N)$ eine entscheidende Rolle. Im Gegensatz zu den unphysikalischen Dirac-Strings ist es im Falle der Zentrumsvortices jedoch möglich, diese mithilfe des Wilson-Loop-Operators zu detektieren. Betrachten wir nämlich eine Kontur Γ , die den Rand des (räumlichen) Universums beschreibt, so wird ein Vortex, welcher die durch Γ berandete Ebene durchdringt, dadurch gänzlich umschlossen und es gilt

$$W_\Gamma[\mathcal{A}] = \text{tr } P \left\{ \exp \left[i \oint_\Gamma dz_\mu \mathcal{A}_\mu(z) \right] \right\} =: \exp[i \Phi(\Gamma)]. \quad (2.20)$$

Die Pfadordnung spielt für Eichfelder aus der Cartan-Algebra $\mathfrak{C}(G)$ keine Rolle und die Anwendung des Satzes von Stokes liefert im Exponenten gerade den magnetischen Fluss $\Phi(\Gamma) \in \mathfrak{C}(G)$ durch die von Γ berandete Fläche A . Fasst man den Wilson-Loop als eine ortsabhängige Eichtransformation fermionischer Felder auf, so beschreibt $W_\Gamma[\mathcal{A}]$ die Phasenänderung der Wellenfunktion $\Psi[\mathcal{A}]$, die sich beim Transport eines Fermions um den Vortex herum ergibt. Aufgrund der Quantisierungsbedingung (2.8) ist ein Dirac-String für Fermionen unsichtbar⁷, ein Zentrumsvortex kann jedoch nicht-trivialen Zentrumsfluss tragen und ist daher für den Wilson-Loop-Operator sichtbar. Dies bedeutet, dass das Eichpotential als reine Eichung $\mathcal{A}_\mu(z) = \Omega(z) \partial_\mu \Omega^{-1}(z)$ auf dem Rand Γ des Universums nicht global definiert sein kann, da sich ansonsten stets $\Phi(\Gamma) = 0$ ergeben müsste. Anstelle der kanonischen Konstruktion verschiedener Karten und der Verknüpfung der lokal definierten Potentiale durch Übergangsfunktionen, besteht eine äquivalente Möglichkeit darin, eine globale Abbildung der Form $\Omega : \Gamma \rightarrow G/Z$ zu definieren, welche auf G/Z eingeschränkt ist und somit das Auftreten von Sprüngen um ein Zentrumselement bei der Berechnung der sogenannten *Holonomie*

⁶Das klassische Beispiel ist die Nielsen-Olesen-Lösung im abelschen Higgs-Modell in $D = 2 + 1$. Diese stellt eine spezielle Verknüpfung des elektrisch geladenen Skalarfeldes mit dem Eichfeld dar, welche aufgrund der Randbedingungen zu einer statischen Konfiguration endlicher Energie pro Länge des Vortex führt, der innerhalb einer endlichen Querschnittsfläche ein Magnetfeld führt, und somit magnetischen Fluss $\Phi = \frac{2\pi}{e} n$ trägt [Ryd85, Fel98].

⁷Vgl. dazu auch die Diskussion des Aharonov-Bohm-Effektes in [Fel98].

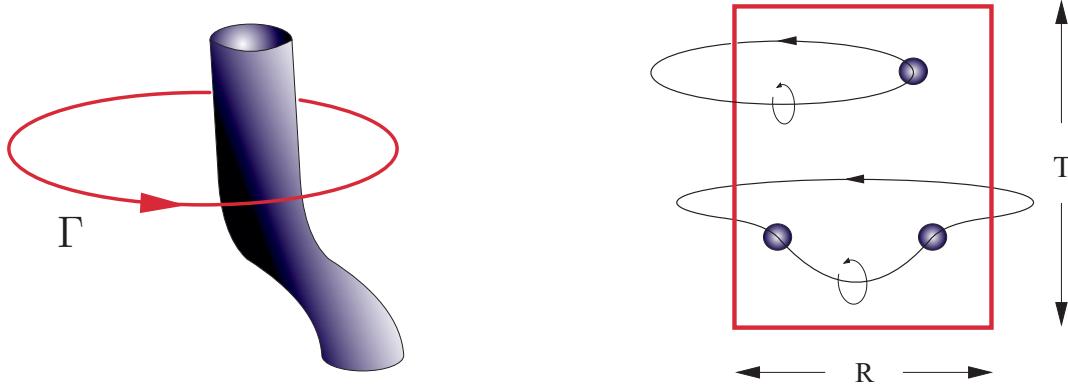


Abbildung 2.1: Links: Der Fluss $\Phi(\Gamma)$ eines (ausgedehnten) Zentrumsvortex wird von der Holonomie $W_\Gamma[\mathcal{A}]$ detektiert. Rechts: Eine rechteckige Kontur $\Gamma_{R \times T}$ wird auf triviale (unten) und nicht-triviale Weise (oben) von geschlossenen (dünnen) P -Vortices „gelinkt“.

(2.20) ermöglicht. Nimmt man bei der Betrachtung der Situation einen topologischen Standpunkt ein, so wird im vorliegenden Fall in Analogie zur Behandlung des Wu-Yang-Monopols die Position des unendlich dünnen Vortex, an dem eine Singularität auftreten könnte, aus der Mannigfaltigkeit ausgenommen, und die Charakterisierung der Zentrumsvortices auf dieser nicht-trivialen Mannigfaltigkeit geschieht durch $\pi_1(G/Z)$. Im Fall $G = SU(N)$ ist dies gerade $\pi_1(G/Z) = \mathbb{Z}_N$.

Konkretisiert auf $G = SU(2)$ bedeutet dies, dass das Zentrum (2.19) durch $\mathbb{Z}_2 = \{-1, +1\}$ gegeben ist, was einem Fluss von $\Phi(\Gamma) = 2\pi n T^3$ ($n \in \mathbb{N}$) entspricht, wobei n lediglich als $n \bmod 2$ definiert ist:

$$W_\Gamma[\mathcal{A}] = (-)^n \mathbb{1}. \quad (2.21)$$

Da Zentrumsvortices als Ränder von $(D-1)$ -dimensionalen Volumen geschlossene Flächen $\partial\Sigma$ der Dimension $(D-2)$ bilden, schneiden diese kohomologisch trivialen Flächen eine Wilson-Loop-Fläche sowohl in $D=4$, als auch in $D=3$ Dimensionen in einem Punkt. In letzterem Fall bilden Zentrumsvortices also geschlossene Linien. Folglich muss ein nicht-trivialer Beitrag, der von einem einzelnen Zentrumsvortex zum Fluss $\Phi(\Gamma)$ geliefert wird, von einer nicht-trivialen Verknüpfung (*Linking*) von Vortex und Wilson-Loop herrühren. Die Situation ist in Abbildung 2.1 skizziert.

Zur Detektierung der Zentrumsvortices auf dem Gitter fixieren wir zunächst die sogenannte *Direkte Maximale Zentrums-Eichung* (DMCG) durch iterative Maximierung des eichfixierenden Funktionalen

$$\mathcal{F}_U^{\text{DMCG}}[\Omega] = \frac{1}{ND} \sum_{x=1}^N \sum_{\mu=1}^D \left(\text{tr} [U_\mu^\Omega(x)] \right)^2 \xrightarrow{\Omega} \max. \quad (2.22)$$

Es ist dabei wichtig, festzuhalten, dass die Extremumsbedingung (2.22) auch nach Abschluss der Eichfixierung immer noch mit der Durchführung von Eichtransformationen verträglich ist, die aus dem Zentrum von G stammen. In Anhang C.2 wird neben der detaillierten Erläuterung des von mir verwendeten Algorithmus zur Fixierung der Direkten Maximalen Zentrums-

Eichung auch die Äquivalenz der DMCG zur sogenannten *Minimalen Adjungierten Landau-Eichung* (MALG) diskutiert, welche von „zentrumsblinden“ Eichpotentialen Gebrauch macht. Angesichts dieser Verbindung der beiden Eichbedingungen wird klar, dass durch (2.22) eine Theorie mit residueller \mathbb{Z}_2 -Symmetrie definiert werden kann. Dies ist mit der Definition der maximal abelschen Eichung und dem zugehörigen Funktional (2.12) zu vergleichen. Die Eichfreiheit wurde dort bis auf eine abelsche Untergruppe fixiert, auf welche anschließend projiziert wurde.

Nach Abschluss der Eichfixierung befindet sich jede der Link-Variablen $U_\mu^\Omega(x) \in SU(2)$ „so nahe wie möglich“ an einem der beiden Zentrumselemente der $SU(2)$. Zerlegen wir die Links in fundamentaler Darstellung gemäß

$$U_\mu^\Omega(x) = Z_\mu(x) \bar{U}_\mu(x), \quad (2.23)$$

wobei $\bar{U}_\mu(x)$ ein Element aus dem *Coset* $SU(2)/\mathbb{Z}_2 \simeq SO(3)$ bezeichnet⁸ und das sogenannte *Zentrumsfelder* $Z_\mu(x)$ gemäß

$$Z_\mu(x) := \text{sign} \{ \text{tr} [U_\mu^\Omega(x)] \}, \quad Z_\mu(x) \in \{-1, +1\} \quad (2.24)$$

definiert wird, so besteht im Falle der DMCG die sogenannte *Zentrumspunktion* darin, die eichfixierte Theorie auf eine effektive \mathbb{Z}_2 -Theorie zu reduzieren:

$$U_\mu^\Omega(x) \rightarrow Z_\mu(x) \in \{-1, +1\} \quad (2.25)$$

Berechnet man nun mithilfe dieser projizierten Freiheitsgrade die Plaquettenvariablen, die im nicht-abelschen Fall als

$$P_{\mu\nu}[U](x) := U_\mu(x) U_\nu(x + \mu) U_\mu^\dagger(x + \nu) U_\nu^\dagger(x) \quad (2.26)$$

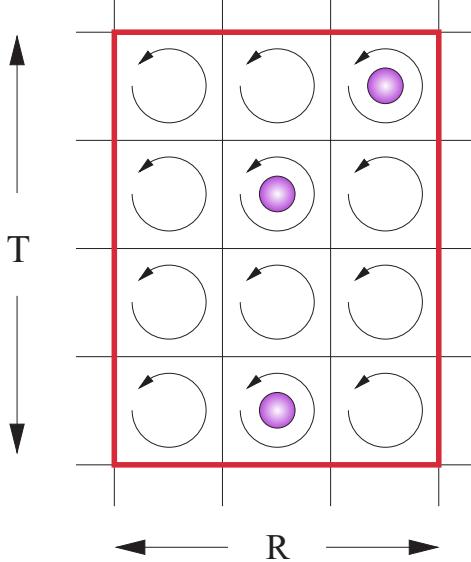
definiert sind, so ermöglicht dies die Detektierung von *dünnen* Vortices auf dem Gitter. Eine Plaquette

$$P_{\mu\nu}[Z](x) = Z_\mu(x) Z_\nu(x + \mu) Z_\mu(x + \nu) Z_\nu(x) \quad (2.27)$$

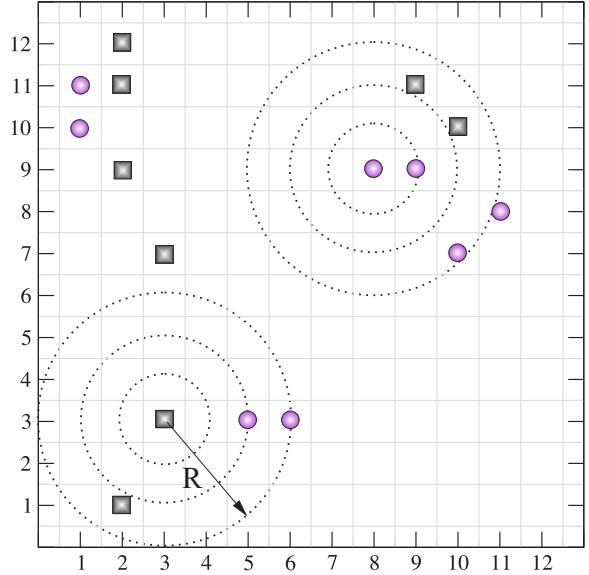
gilt im Fall einer auf der Gruppe $SU(2)$ basierenden \mathbb{Z}_2 -Theorie als von einem sogenannten *P-Zentrumsvortex* durchstoßen, wenn sie den Wert -1 annimmt, was dem (einzig) nicht-trivialen Fall $n = 1$ in (2.19) entspricht. Zentrumsvortices leben also auf dem dualen Gitter. Betrachtet man dreidimensionale Unterräume des Gitters, die sich als Schnitte durch die Raumzeit (sogenannte Raum- oder Zeitschichten) ergeben, so handelt es sich bei den Zentrumsvortices um verbundene Netzwerke negativer Links des dualen Gitters. In $D=4$ bilden die Vortices zusammenhängende Flächen, die durch negative Plaquetten des dualen Gitters beschrieben werden. Dabei handelt es sich stets um geschlossene Flächen. Dies ist eine Folge der Bianchi-Identität in Gitterfomulierung. Betrachten wir zur Illustration einen elementaren Würfel c innerhalb eines dreidimensionalen Schnittes. Da bei der Berechnung der Plaquetten, die die Oberfläche des Würfels bedecken, negative Links an den Kanten stets zu zwei Plaquetten beitragen, erhält man

$$\prod_{P_{\mu\nu} \in \partial c} P_{\mu\nu}[Z] = 1. \quad (2.28)$$

⁸Diese Elemente können durch „zentrumsblinde“ adjugierte Links (C.50) repräsentiert werden. Dadurch ist gewährleistet, dass der Zentrumsgehalt vollständig auf die Felder $Z_\mu(x)$ transferiert wird.



(a) Zentrumsvortices durchdringen drei elementare Plaquetten eines Wilson-Loops.



(b) Zur Definition der Wahrscheinlichkeit $p_{\text{odd}}(R)$ vgl. Kapitel 2.4.2, $R = r/a$.

Abbildung 2.2: (a) Nicht-trivialer Zentrumstransport entsteht durch eine ungerade Anzahl von P -Vortices (Kreise), die einen Wilson-Loop durchdringen. (b) Durchstoßpunkte zweier verschiedener Vortices (Kreise und Quadrate) in einer Ebene. Zweidimensionaler Schnitt durch eine typische Konfiguration. Gitter: 12^4 , $\beta = 2.3$, $\kappa = 0.533$, $\lambda = 0.5$.

Somit wird die Oberfläche eines Würfels stets von einer geraden Anzahl an Vortices durchstoßen. Dies ermöglicht das Auftreten von Netzwerken, die aus verzweigten Vortices bestehen können, immer aber sind diese geschlossen. Tatsächlich konnte eine Unterbrechung der Zentrumsvortextrajektorien in keiner unserer Untersuchungen bei der Lokalisierung derselben beobachtet werden. Die Invarianz der Plaquetten $P_{\mu\nu}[Z](x)$ unter Eichtransformationen $\Omega(x) \in \mathbb{Z}_2$ ermöglicht im Falle offener Randbedingungen eine vollständige Klassifizierung einer \mathbb{Z}_2 -Konfiguration, da es sich bei \mathbb{Z}_2 -Vortices in derartigen Systemen um die einzigen nicht-trivialen kollektiven Anregungen handelt. Dieser Punkt wird in Kapitel 3 bei der Konstruktion eines eichinvarianten Cluster-Algorithmus für Ising-Springläser (in $D = 2$) eine wichtige Rolle spielen und wir werden dort auf die Frage nach der Eindeutigkeit nochmals zurückkommen.

Die Bezeichnung P -Vortex für die mittels der oben beschriebenen Methode detektierten Objekte röhrt daher, dass nur die *projizierten* Zentrumsfelder in die Berechnung der Plaquetten eingehen. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass diese dünnen Vortices bei der Identifizierung von ausgedehnten Vortices, welche als die eigentlich physikalisch relevanten Freiheitsgrade angesehen werden und deren Querschnittsfläche sich über eine Vielzahl von Plaquetten erstrecken kann, eine wichtige Rolle spielen [DDFG⁺98]⁹. Wenden wir uns nun der Berechnung eines Wilson-Loops auf dem Gitter zu. In der zentrumsvorprojizierten \mathbb{Z}_2 -Theorie spielen dabei gerade die elementaren Plaquetten, welche die minimale Fläche A des durch die Kontur Γ charakterisierten Wilson-Loops überdecken, die entscheidende Rolle.

⁹Insbesondere ist es notwendig, ausgedehnte Vortices zu betrachten, um das sogenannte *Casimir-Scaling* der *string tension* [FGO98, Bal00] erklären zu können.

Da $\Gamma = \partial A$, gilt nach dem Satz von Stokes:

$$W_\Gamma[Z] = \prod_{l \in \Gamma} Z_l = \prod_{P \in A} P . \quad (2.29)$$

Folglich erhält der Wilson-Loop $W_\Gamma[Z]$ von jedem Vortex, der die minimale Fläche A durchstoßt, einen Faktor -1 als Beitrag. Eine Illustration der Situation findet sich in Abbildung 2.2a. Angesichts der Tatsache, dass die möglichen Messwerte des Wilson-Loop-Operators auf die Menge $\{-1, +1\}$ beschränkt sind, ist es höchst überraschend, dass die Fluktuationen in der Anzahl an Durchstoßpunkten n gerade in einer solchen Art und Weise auftreten sollten, dass bei der Berechnung des Erwartungswertes von $W_\Gamma[Z]$ ein Flächengesetz (*area law*) resultiert, was dem Confinement-Kriterium von Wilson entspricht. Tasächlich konnte aber nachgewiesen werden [DDFG⁺98], dass im Grenzfall großer Flächen eine weitestgehende Auslöschung der Beiträge von Wilson-Loops mit gerader und ungerader Anzahl von durchstoßenden Vortices auf eine solch subtile Weise geschieht, dass sich aus dem Erwartungswert $\langle W_\Gamma[Z] \rangle$ tatsächlich ein Confinement-Potential mit asymptotischer *string tension* extrahieren lässt, die mit der im Falle der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie gemessenen ausgezeichnet übereinstimmt [DDFG⁺98]. Außerdem konnte gezeigt werden, dass sich die Flächendichte ρ der Zentrumsvortices, die unter Zuhilfenahme der DMCG innerhalb der Vakuumfeldkonfigurationen identifiziert wurden, als eine physikalische Größe erweist, deren Skalierungsverhalten dem der *string tension* folgt und die im Kontinuumslimit einen wohldefinierten Wert annimmt [LRT98].

2.3.2 Das Random-Vortex-Modell: Perkolation und Confinement

Ein sehr attraktives Modell, welches eine einfache Erklärung für das Auftreten des Confinement-Phänomens im Zentrumsvortexbild zu geben vermag, ist das sogenannte *Random-Vortex*-Modell, in dem die zufällige Verteilung von Durchstoßpunkten der Vortices durch eine Ebene innerhalb der Raumzeit die entscheidende Rolle spielt.

Zur Erläuterung des Modells betrachten wir also einen Schnitt durch das Gitter, wobei die Fläche innerhalb der dadurch definierten Ebene den Flächeninhalt L^2 besitzen soll. Nehmen wir ferner an, dass N Durchstoßpunkte zufällig auf dieser Fläche verteilt seien, so ergibt sich für die Flächendichte $\rho = N/L^2$. Betrachten wir als nächstes einen von der Kontur Γ berandeten Wilson-Loop mit Fläche A , der in dieser Ebene zu liegen kommt, so ist die Wahrscheinlichkeit p , dass ein bestimmter Durchstoßpunkt innerhalb des Wilson-Loops zu finden ist, gegeben als das Verhältnis der Flächen: $p = A/L^2$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass genau n Durchstoßpunkte innerhalb des Wilson-Loops auftreten, ist durch die Binomialverteilung

$$P_N(n) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} \quad (2.30)$$

gegeben. Wie bereits diskutiert, liefert eine ungerade Anzahl an Durchstoßpunkten einen negativen Beitrag zum Erwartungswert des Wilson-Loop-Operators, wohingegen eine gerade Anzahl einen positiven Beitrag liefert. Daher finden wir

$$\langle W_\Gamma[Z] \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^N (-1)^n P_N(n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{2\rho A}{N}\right)^N = e^{-2\rho A} . \quad (2.31)$$

Die Flächendichte ρ wurde bei der Bildung des Grenzwertes konstant gehalten. Unter der Annahme völlig zufällig verteilter Durchstoßpunkte der Vortices findet sich also für den Erwartungswert (2.31) ein Flächengesetz, aus dem sich ein Confinement-Potential mit asymptotischer *string tension*

$$\sigma = 2\rho \quad (2.32)$$

extrahierten lässt. Ein Vergleich dieses Wertes mit dem in [LTER99] berichteten Ergebnis

$$\sigma = (1.4 \pm 0.1)\rho \quad (2.33)$$

in DMCG, weist darauf hin, dass die Durchstoßpunkte nicht völlig unkorreliert sein können. Tatsächlich konnte eine kurzreichweite attraktive Korrelation der Vortices nachgewiesen werden [ELRT98], die für diese Abweichung verantwortlich ist. Die Annahme der völligen Unabhängigkeit der Vortices sowie deren Durchstoßpunkte in einer Ebene stellt also den Idealfall in Bezug auf die Möglichkeit dar, ein Confinement-Potential zu generieren. Nimmt deren Korrelation zu, so sinkt der Wert der *string tension*. Es ist daher nicht verwunderlich, dass sich durch Modifizierung des Random-Vortex-Modells ebenfalls die Situation eines Umfangsgesetzes für den Erwartungswert des Wilson-Loop-Operators herbeiführen lässt, sofern man annimmt, dass die Durchstoßpunkte immer in Paaren auftreten, welche einen maximalen Abstand d besitzen sollen, der sehr viel kleiner als das Minimum der räumlichen bzw. zeitlichen Ausdehnung der Kontur Γ ist. Dadurch können von den zufällig auf der Ebene verteilten Paaren nur diejenigen einen nicht-trivialen Beitrag zum Erwartungswert (2.31) liefern, die in einem schmalen Streifen um Γ zu liegen kommen, wobei einer der Durchstoßpunkte innerhalb, der andere außerhalb des Wilson-Loops lokalisiert sein muss. Die Fläche dieses Streifens ist in erster Näherung proportional zum Umfang des Wilson-Loops und eine Rechnung analog zu (2.31) zeigt, dass sich für den Erwartungswert $\langle W_\Gamma[Z] \rangle$ ein Umfangsgesetz (*perimeter law*), und somit ein asymptotisch konstantes Potential ergibt [ELRT00].

Die Confinement-Phase einer effektiven \mathbb{Z}_2 -Theorie sollte also durch Vortices bzw. Netzwerke von Vortices charakterisiert werden können, die das gesamte Universum durchziehen. Dieses Verhalten wird als *Perkolation* bezeichnet. Tatsächlich wurde bei der Untersuchung des Phasenübergangs der $SU(2)$ –Yang-Mills-Theorie von der Confinement-Phase in die Deconfinement-Phase bei endlicher Temperatur festgestellt, dass sich das Verhalten der Zentrumsvortices signifikant ändert. Der Phasenübergangspunkt kann allein durch die Untersuchung der Zentrumsfelder $\{Z_\mu(x)\}$ bzw. der zugehörigen Vortexkonfigurationen bereits richtig reproduziert werden, und während die Verteilung der Vortexmaterie unterhalb von T_c tatsächlich auf einige wenige perkolierende Vortices beschränkt ist, tritt oberhalb der kritischen Temperatur eine Umverteilung hin zu vielen kleinen Vortices auf, die in sogenannten *Containern* endlicher Größe eingeschlossen werden können [ELRT00]. Der Deconfinement-Phasenübergang kann somit als Deperkolations-Phasenübergang im Zentrumsvortexbild verstanden werden, wenn man sich auf dreidimensionale räumliche Schnitte des Gitters konzentriert. Es ist interessant festzuhalten, dass diese Sichtweise eine intuitive Erklärung für das unterschiedliche Verhalten der (gewöhnlichen) *string tension* σ , sowie der in Analogie dazu definierten *räumlichen*¹⁰ *string tension* σ_s unter- und oberhalb des Phasenübergangs

¹⁰Diese wird aus dem Erwartungswert rein räumlicher Wilson-Loops extrahiert und ist als solche nicht mit der Zeitentwicklung eines Testzustands zweier Ladungen und dem zwischen diesen herrschenden Potential in Verbindung zu bringen.

ermöglicht [BFH⁺93]. Da eine Erhöhung der Temperatur auf dem Gitter durch eine Reduzierung der zeitlichen Ausdehnung $N_t a(\beta)$ des Gitters bei periodischen Randbedingungen für bosonische Felder realisiert wird, ist diese Richtung nun ausgezeichnet. Bei hohen Temperaturen findet eine Polarisierung der Zentrumsvortices statt. In [ELRT00] konnte gezeigt werden, dass sich die Deconfinement-Phase bei der Betrachtung eines räumlichen Schnittes durch das Gitteruniversum hauptsächlich durch kurze Vortices charakterisieren lässt, die sich um die „zeitliche“ Richtung des Gitters wickeln und residuelle transversale Fluktuationen aufweisen. Dadurch wird eine starke Korrelation der Durchstoßpunkte von Vortices in Wilson-Loops erzeugt, deren Kontur $\Gamma_{r \times t}$ in einer raum-zeitlichen Ebene liegt. Dies führt zum Verschwinden der „regulären“ *string tension* σ oberhalb von T_c , die räumlichen Wilson-Loops hingegen bleiben von dieser anisotropen Verteilung weitgehend unbeeinflusst [ELRT00]. Zuletzt soll erwähnt werden, dass sich auf einfache Art und Weise eine Modifizierung der thermalisierten und eichfixierten Konfigurationen $\{U_\mu^\Omega(x)\}$ durchführen lässt, welche es gestattet, die Zentrumsvortexstruktur aus den Vakuumkonfigurationen zu eliminieren [dFD99]:

$$\{U_\mu^\Omega(x)\} \rightarrow \{U'_\mu(x)\} := \{Z_\mu(x) U_\mu^\Omega(x)\} = \{\bar{U}_\mu(x)\}, \quad (2.34)$$

$$Z'_\mu(x) = \text{sign} \{ \text{tr} [U'_\mu(x)] \} = +1. \quad (2.35)$$

Dieses Verfahren ermöglicht eine zu (2.25) komplementäre Sichtweise und somit eine indirekte Untersuchung der Rolle der Zentrumsvortices. Dabei hat sich zum einen gezeigt, dass eine Präparierung von Konfigurationen in der oben beschriebenen Weise zur Wiederherstellung der chiralen Symmetrie führt und alle Konfigurationen nach Entfernen der Vortices verschwindende topologische Ladung besitzen [dFD99]. Zum anderen konnte festgestellt werden, dass die Zentrumsvortexstruktur des gluonischen Vakuums für den linear ansteigenden Anteil des Interquark-Potentials verantwortlich sein muss, da die Konfigurationen $\{U'_\mu(x)\}$ nicht mehr länger in der Lage sind, ein Confinement-Potential zwischen statischen Farbladungen aufrechtzuerhalten [DDFG⁺98]. Der Ursprung der topologischen Ladungen im Zentrumsvortexbild wird in [Rei02, RSTZ02] diskutiert. Dort wird auch eine Verbindung zur Dichte der Nullmoden des Dirac-Operators aufgezeigt, welche die entscheidende Rolle bei der Berechnung des chiralen Kondensats als Ordnungsparameter der spontanen chiralen Symmetriebrechung spielt [LMP⁺03, G⁺05]. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass die Nullmoden, bzw. die Dichte $\rho(\lambda)$ der Eigenmoden des Faddeev-Popov-Operators in Coulomb-Eichung zu sehr kleinen Eigenwerten λ , entscheidend von der Vortexstruktur des Vakuums beeinflusst werden [GOZ05b]¹¹. Dadurch wurde es möglich, eine Verbindung zwischen dem Confinement-Szenario von Gribov und Zwanziger einerseits, sowie dem Zentrumsvortexbild anderseits, aufzuzeigen [GOZ05a].

Eine vollständige Diskussion der Ergebnisse, die bei der Untersuchung des Zentrumsvortex-Modells bisher gewonnen werden konnten, kann und soll im Rahmen dieser Arbeit nicht stattfinden. Stattdessen haben wir uns auf die für die folgenden Untersuchungen wesentlichen Punkte beschränkt und verweisen zur Vervollständigung des Bildes auf den umfangreichen Übersichtsartikel von Greensite [Gre03].

¹¹Vergleiche hierzu auch die Diskussion der Rolle von Gribov-Kopien im Rahmen des Dressingformalismus in Kapitel 1.4.2.

2.4 Das Phänomen des Stringbreaking im Zentrumsvortex-Szenario

Die Bezeichnung *Stringbreaking* für das im Rahmen von Kollisionsexperimenten beobachtete Phänomen der Hadronisierung bringt z.B. im Falle eines Mesons die Vorstellung zum Ausdruck, dass der gluonische Flussschlauch, der die beiden farbgeladenen Konstituentenquarks miteinander verbindet, zerreissen wird, sofern die Anregungsenergie des Zustands hoch genug ist, um durch Paarerzeugung die Abschirmung der Farbladungen zu ermöglichen. Dabei verbinden sich die spontan erzeugten Quarks und Anti-Quarks gleichsam mit den losen Enden des gerissenen Flussschlauchs und sorgen auf diese Weise dafür, dass wiederum nur insgesamt farbneutrale asymptotische Zustände beobachtet werden können. Es ist daher zu erwarten, dass der Grundzustand in diesem Bereich eher durch zwei Mesonen beschrieben werden sollte, die sich jeweils als Kombination eines statischen Quarks mit einem leichten Anti-Quark (und umgekehrt) ergeben und über ein Yukawa-Potential miteinander in Wechselwirkung treten. Dieses Phänomen sollte jenseits einer Anregungsenergieschwelle von etwa $2m_f$ beobachtet werden können, wobei m_f die Masse des leichtesten Fermions bezeichnet.

Ob es sich bei dem Grundzustand im mesonischen Sektor der QCD tatsächlich um eine string-ähnliche Konfiguration handelt, muss angesichts der Ergebnisse unserer in Kapitel 1 vorgestellten Untersuchungen zwar bezweifelt werden, der Verlauf des statischen Potentials legt jedoch nach wie vor nahe, dass man der Gluonenkonfiguration, die sich um die Quellen herum ausbildet, für große Abstände r der Quellen eine konstante Energie pro Länge zuordnen kann. Auf jeden Fall ist das Phänomen ein Resultat des dynamischen Verhaltens von Quarks und Gluonen, so dass es nicht länger hinreichend ist, eine reine Yang-Mills-Theorie zu untersuchen. Vielmehr müssen dynamische Fermionen berücksichtigt werden, welche sich unter der fundamentalen Darstellung der $SU(N_c)$ transformieren und daher in der Lage sind, die statischen Farbladungen, die als Konstituenten eines Mesons in das Vakuum eingebracht werden, abzuschirmen. Eine schematische Darstellung der Situation findet sich im rechten Teil der Abbildung 2.3.

Die numerische Simulation der Quantenchromodynamik ist sehr aufwendig, da bei der Berücksichtigung von dynamischen Fermionen die Berechnung der Fermionen-Determinante unumgänglich wird¹². Da es sich dabei um ein höchst nicht-lokales Objekt handelt, ist dieser Schritt mit dem größten Aufwand innerhalb einer Monte-Carlo-Simulation verknüpft [MM94, Rot97], der nicht wie bei der sonst üblichen Beschränkung auf Rechnungen mit konstanter Fermionen-Determinante (*Quenching*) umgangen werden kann, weil es für das Auftreten des Stringbreaking-Phänomens gerade auf die Effekte der dynamischen Materie ankommt.

Eine Alternative zur *brute-force*-Untersuchung des vollen Problems besteht darin, sich einem vereinfachten Modell zuzuwenden, von dem zu erwarten ist, dass es die für das Verständnis des Stringbreaking-Phänomens wesentlichen Eigenschaften mit der Quantenchromodynamik teilt. Dabei handelt es sich um die $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie in $D = 4$ Dimensionen, an die ein skalares Feld in fundamentaler Darstellung angekoppelt wird. Die Komplexität des ursprünglichen Problems wird also durch die Verwendung eines dynamischen Skalarfeldes anstelle dynamischer Fermionen, sowie der Wahl von $N_c = 2$ statt $N_c = 3$ maßgeblich re-

¹²Vgl. auch die Diskussion in Kapitel 4.6.

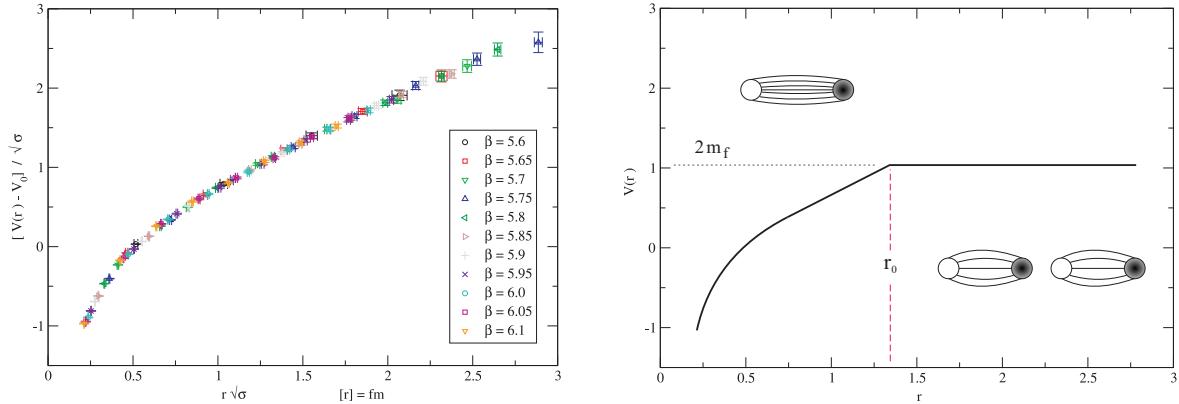


Abbildung 2.3: Links: Das skalierte statische Interquark-Potential im Fall der reinen $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie. Gitter: 16^4 , per. b.c. Rechts: Schematische Darstellung des Potentials, an dem sich das Phänomen des Stringbreaking erkennen lässt.

duziert. Tatsächlich konnte bei der Untersuchung dieses Modells das Stringbreaking-Phänomen beobachtet werden [KS98, PW98]. In einem strikten Sinne besitzt diese Theorie zwar weder eine Confinement-Phase noch eine Higgs-Phase, da aufgrund der analytischen Verbundenheit des Phasendiagramms kein thermodynamischer Phasenübergang existieren kann, der eine klare Trennung ermöglichen würde. Dies ist die Aussage eines Theorems, das von Osterwalder und Seiler [OS78], bzw. Fradkin und Shenker [FS79] formuliert wurde. Dennoch kann eine Unterscheidung zweier verschiedener Realisierungsphasen der Theorie vorgenommen werden, denn es existiert – als Fortsetzung der thermodynamischen Phasengrenzlinie, welche im *strong coupling* Regime ($\beta \rightarrow 0$) des Phasendiagramms einen Endpunkt besitzt – eine sogenannte „Kertész-Linie“ [Lan02], bei deren Überschreitung sich das Perkolationsverhalten der P -Vortices dramatisch ändert [BFGO04]¹³. Da perkolierende Vortices in einer reinen Yang-Mills-Theorie am Temperaturnullpunkt das Vorliegen eines Vakuums mit Confinement-Eigenschaften anzeigen, wird im Falle der vorliegenden Eichtheorie mit Higgs-Feld die dadurch charakterisierte Phase entsprechend als Quasi-Confinement-Phase bezeichnet. Jenseits der „Kertész-Linie“ weisen die Vortexcluster nur noch eine endliche Ausdehnung auf, was nach Kapitel 2.3.2 mit dem Verlust der Fähigkeit, ein Confinement-Potential zu generieren, einhergeht. Wir vermuten daher, dass genau diese endliche Ausdehnung der Cluster mit dem charakteristischen Abstand r_0 der statischen Quellen verknüpft sein sollte, an dem das asymptotisch linear anwachsende Confinement-Potential sich plötzlich ändert und einen konstanten Verlauf annimmt, wie es für Erwartungswerte von Wilson-Loops charakteristisch ist, die einem *perimeter law* folgen (vgl. Abbildung 2.3). Sollten die Zentrumsvortices also tatsächlich die für alle Aspekte des Confinement-Phänomens verantwortlichen Freiheitsgrade sein, so muss es möglich sein, diesen Potentialverlauf auch aus den Erwartungswerten von Wilson-Loops $W_T[Z]$ zu extrahieren, welche bezüglich reiner, durch Projektion gewonnener Zentrumsfeld-Konfigurationen $\{Z_\mu(x)\}$ berechnet werden.

Bevor wir uns der Untersuchung dieser Fragestellungen mit den Methoden der Gittersimulation zuwenden werden, soll zunächst die Diskretisierung der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit Higgs-Feld in fundamentaler Darstellung erläutert werden.

¹³Hier findet sich auch eine Skizze des Phasendiagramms der Theorie.

2.4.1 $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit fundamentalem Higgs-Feld

Die Zustandssumme \mathcal{Z} der euklidischen Quantenfeldtheorie auf einem hyperkubischen vierdimensionalen Gitter ist gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi \exp \left\{ -S[U, \Phi] \right\}. \quad (2.36)$$

In die Konstruktion des Gibbs'schen Maßes

$$d\mu(U, \Phi) = \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi \mathcal{Z}^{-1} \exp \left\{ -S[U, \Phi] \right\}, \quad (2.37)$$

geht dabei die Wirkung¹⁴

$$S[U, \Phi] = S_G[U] + S_{\text{Higgs}}[U, \Phi] + S_{\text{Pot}}[\Phi] \quad (2.38)$$

ein, welche in drei Anteile zerfällt. Der erste Term stellt die von Wilson [Wil74] eingeführte Wirkung der Eichfelder im Fall der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie dar,

$$S_G[U] = \beta \sum_P \left(1 - \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \operatorname{tr}[P[U]] \right\} \right), \quad \beta = \frac{4}{g^2}, \quad (2.39)$$

wobei über alle Plaquetten (2.26) des Gitters zu summieren ist. Das komplexe Higgs-Doublett

$$\phi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{pmatrix}, \quad \phi_k : T_4 \mapsto \mathbb{C}, \quad (k = 1, 2), \quad (2.40)$$

welches an die reine Eichtheorie gekoppelt werden soll, besitzt eine zweidimensionale Matrixdarstellung, die wir mit $\Phi(x)$ bezeichnen. Dies ermöglicht es, die vier reellen Freiheitsgrade des Higgs-Feldes auf einen radialen Anteil $\rho(x)$, sowie eine winkelabhängige Parametrisierung $\alpha(x) \in SU(2)$ abzubilden:

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \phi_1(x) & -\phi_2^*(x) \\ \phi_2(x) & \phi_1^*(x) \end{pmatrix} = \rho(x) \alpha(x), \quad \rho : T^4 \mapsto \mathbb{R}^+. \quad (2.41)$$

Für den Kopplungsterm existieren daher die beiden Darstellungen

$$S_{\text{Higgs}}[U, \Phi] = -\frac{\kappa}{2} \sum_{x, \mu} \operatorname{tr} \left[\Phi^\dagger(x) U_\mu(x) \Phi(x + \mu) \right], \quad (2.42)$$

$$S_{\text{Higgs}}[U, \phi] = -\frac{\kappa}{2} \sum_{x, \mu} \phi^\dagger(x) U_\mu(x) \phi(x + \mu) + c.c.. \quad (2.43)$$

Ähnliches gilt im Fall des Potentialterms, der sich auch als reines Funktional der Radialkomponente des Higgs-Feldes ausdrücken lässt:

$$S_{\text{Pot}}[\Phi] = \sum_x \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\Phi^\dagger(x) \Phi(x) \right] + \lambda \left(\frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\Phi^\dagger(x) \Phi(x) \right] - 1 \right)^2, \quad (2.44)$$

$$S_{\text{Pot}}[\rho] = \sum_x \rho(x)^2 + \lambda (\rho(x)^2 - 1)^2. \quad (2.45)$$

¹⁴Bis auf ein globales Vorzeichen für die Wirkung folgen wir der in [CGIS98a] gewählten Konvention.

Die Wirkung (2.38) ist invariant unter Eichtransformationen $\Omega(x) \in SU(2)$ der Form

$$\begin{aligned} U_\mu^\Omega(x) &= \Omega(x) U_\mu(x) \Omega^\dagger(x + \mu) , \\ \Phi^\Omega(x) &= \Omega(x) \Phi(x) . \end{aligned} \quad (2.46)$$

Um zu garantieren, dass sich das Gibbs-Maß (2.37) und somit auch die Zustandssumme \mathcal{Z} insgesamt invariant unter den Transformationen (2.46) zeigen, wird mit $\mathcal{D}U$ das invariante Haar'sche Maß auf der Gruppenmannigfaltigkeit der $SU(2)$ für die Integration eines jeden Links $U_\mu(x)$ des Gitters verwendet. Auch das Integrationsmaß für die skalaren Felder $\mathcal{D}\Phi$ erweist sich als invariant, was an der zweiten der beiden komplementären Darstellungen

$$\mathcal{D}\Phi = \prod_x \prod_{a=1}^4 d\phi^a(x) = \prod_x d\rho(x) \rho^3(x) \mathcal{D}\alpha(x) , \quad (2.47)$$

offensichtlich wird. $\mathcal{D}\alpha$ bezeichnet dabei wiederum das (linksinvariante) Haar'sche Maß (siehe Anhang B.2). Die Existenz dieser beiden Darstellungen in Verbindung mit der Zerlegung (2.41) ist insofern besonders für den numerischen Zugang interessant, als dass es dadurch möglich wird, eine Verbindung zwischen Eichfeldern und Higgs-Feldern herzustellen, die sich dazu nutzen lässt, bei der Simulation der Quantenfeldtheorie in beiden Sektoren zur Aktualisierung der Felder einen Hybrid-Algorithmus zu verwenden, der durch einfache Modifizierung des von Creutz [Cre80] angegebenen Heatbath-Algorithmus gewonnen werden kann. Die ausführliche Beschreibung des von uns eingesetzten Verfahrens findet sich in Anhang B.3, welches die Vorschläge von Bunk [Bun95] aufgreift.

2.4.2 Numerische Ergebnisse

Um den Effekt der Zentrumsvortices auf den Verlauf des Potentials $V(r)$ in der Nähe der Phasengrenzlinie studieren zu können, musste diese zunächst im Phasendiagramm der Theorie lokalisiert werden. Zu diesem Zweck wurden die Werte $\beta = 2.3$ und $\lambda = 0.5$ für die Kopplungs- konstanten im Sektor der Eich- bzw. Higgs-Felder fixiert und der Parameter κ variiert. Der Übergang von der Quasi-Confinement-Phase in die Quasi-Higgs-Phase wird dabei durch eine rasche Änderung des Erwartungswerts von thermodynamischen (lokalen), eichinvarianten Observablen wie beispielsweise der Energie der Eichfelder ($\sim P[U]$), der kinetischen Energie des Higgs-Feldes ($E_H \sim \sum_k \text{tr} [\Phi^\dagger(x) U_k(x) \Phi(x + k)]$) oder des Quadrats der zugehörigen Radialkomponente angezeigt. Die von uns verwendete Observable war

$$\rho^2 = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^N \frac{1}{2} \text{tr}[\Phi^2(x)] , \quad N = N_t \times N_s^3 , \quad (2.48)$$

welche sowohl für $\kappa \in [0.5, 0.6]$ auf einem Gitter der Größe 8^4 , als auch auf einem Gitter der Größe 12^4 im Intervall $\kappa \in [0.48, 0.6]$ gemessen wurde, wobei für jeden Wert des Hopping- Parameters in beiden Fällen ein Ensemble von 250 thermalisierten Konfigurationen verwendet wurde. Das Ergebnis wird im linken Teil der Abbildung 2.4 gezeigt. Der Phasenübergang scheint in der Nähe des Wertes $\kappa = 0.53$ aufzutreten, wobei sich bei der Betrachtung von $\langle \rho^2 \rangle$ allein keine wesentliche Abhängigkeit dieses Punktes von der verwendeten Gittergröße feststellen lässt. Als nächstes wurden die thermalisierten Konfigurationen in DMCG (erläutert im Anhang C.2) gebracht und die eichfixierten Feldkonfigurationen nach (2.25) anschließend

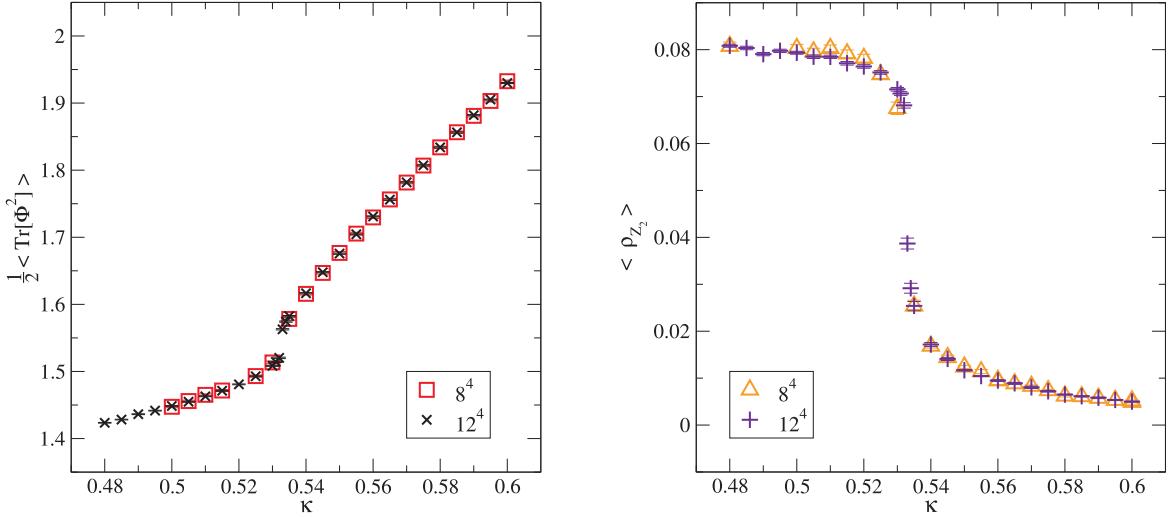


Abbildung 2.4: Lokalisierung des Phasenübergangs bzw. *crossover* auf Gittern unterschiedlicher Größe. Links: Das mittlere Quadrat der Radialkomponente ρ^2 des Higgs-Feldes. Rechts: Die Flächendichte ρ_{Z_2} der Zentrumsvortices. Periodische Randbedingungen, $\beta = 2.3$, $\lambda = 0.5$.

auf ihren Zentrumsgehalt projiziert. Dadurch lässt sich die planare Dichte ρ_{Z_2} der P -Vortices als das Verhältnis der Anzahl nicht-trivialer Plaquetten ($P_{\mu\nu}[Z](x) = -1$) zur Gesamtzahl aller Plaquetten des Gitters definieren:

$$\rho_{Z_2} = \frac{1}{N \cdot D(D-1)/2} \sum_P \delta_{(P[Z], -1)} . \quad (2.49)$$

Im Fall einer reinen $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie in $D = 4$ konnte gezeigt werden [LRT98], dass es sich dabei um eine physikalische Größe handelt, welche sich als invariant unter Renormierungsgruppen-Transformationen erweist und einen wohldefinierte Kontinuumslimes besitzt. Die Messergebnisse dieser Observable sind im rechten Teil der Abbildung 2.4 zu sehen. Der Übergang von der symmetrischen Quasi-Confinement-Phase in die Quasi-Higgs-Phase wird dabei von einem raschen Abfallen der Zentrumsvortexdichte von $\rho a^2(\beta) \sim 0.08$, was in etwa dem Wert der reinen Yang-Mills-Theorie ($\kappa = 0$) bei $\beta = 2.3$ entspricht, begleitet. Bei einer weiteren Vergrößerung des Hopping-Parameters nimmt die Dichte allmählich weiter ab und es ist zu erwarten, dass ρ_{Z_2} tief in der Quasi-Higgs-Phase letztlich vollständig verschwinden wird. Im Rahmen der von uns in dieser ersten Phase der Untersuchung angestrebten Genauigkeit ist festzustellen, dass das Auftreten einer Phasenänderung durch beide Observablen für den selben Wert von κ angezeigt wird, und dieses Ergebnis auch im Falle der Zentrumsvortexdichte nur minimal von der Größe des verwendeten Gitters abhängen scheint.

In einem nächsten Schritt sollen die Perkolationseigenschaften der Vortices untersucht werden. Dazu ist es zunächst notwendig, den Verlauf der Vortices innerhalb einer Konfiguration verfolgen zu können. Dabei stellen wir uns auf den Standpunkt, dass es hinreichend ist, zu diesem Zweck die P -Vortices heranzuziehen, da wir annehmen, dass deren Trajektorie in etwa mit dem Verlauf des Kerns eines Vortexprofils zusammenfällt, das die ausgedehnten, physikalischen Vortices charakterisiert. Es wurde bereits darauf hingewiesen, dass sich

Vortices in dreidimensionalen Schnitten durch eine vierdimensionale Raumzeit als linienartige Objekte charakterisieren lassen. Dementsprechend definieren wir einen Vortex-Cluster in einem solchen Schnitt als die Menge aller miteinander verbundenen negativen Links des zugehörigen dualen Gitters. Da es für die Trajektorien der Vortex-Cluster die Möglichkeit zur Verzweigung bzw. Selbstdurchdringung gibt, wurde zur Identifizierung derartiger Netzwerke von Clustern ein rekursiv operierender Algorithmus implementiert, wie er bei der Simulation von Spin-Systemen häufig eingesetzt wird. Die Details der Konstruktion eines solchen Cluster-Algorithmus werden wir in Kapitel 3 besprechen, dort wird ein sogenannter *Bond-Percolation*-Algorithmus im Rahmen der numerischen Behandlung eines zweidimensionalen Spin-Glas eingesetzt werden. Das Auftreten von Kreuzungs- und Verzweigungspunkten auf dem dualen Gitter kann durch die Untersuchung der zugehörigen elementaren Würfel des dreidimensionalen Schnittes durch das Originalgitter leicht detektiert werden. Dabei charakterisiert die sogenannte *Multiplizität* M die Anzahl der durchstoßenen Plaquetten, welche die geschlossene Oberfläche der besagten Würfel bilden. Da die Trajektorien der Vortices für $G = SU(2)$ stets geschlossen sind, gilt folglich $M \in \{0, 2, 4, 6\}$. In Abbildung 2.5 finden sich unsere Ergebnisse zur Messung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(M)$ der Multiplizität als Funktion des Hopping-Parameters. In der symmetrischen Phase sind etwa 80% aller elementaren Würfel in dreidimensionalen Schnitten durch das Gitter frei von Vortices ($M=0$). Falls Würfel jedoch von Vortices durchdrungen werden, so geschieht dies zu einem Großteil als einfaches Passieren ($M=2$), Verzweigungen erster Art ($M=4$) treten mit einer Wahrscheinlichkeit $p(4) < 1\%$ auf. Noch seltener war der Fall, dass die Oberfläche von elementaren Kuben komplett von sich verzweigenden Vortex-Clustern perforiert wurde. Berücksichtigt man die Dimension des verwendeten Gitters, so lässt sich vermuten, dass diese Verzweigungen zweiter Art ($M=6$) für $\mathcal{O}(1)$ elementare Würfel des Gitters zu beobachten sein sollte. Unsere Ergebnisse für $p(M)$ beim Übergang in die Pseudo-Higgs-Phase bestätigen nochmals das in Abbildung 2.4 gezeigte Bild, wonach die Dichte der Vortexmaterie für $\kappa > 0.53$ rasch abnimmt. Besonders deutlich nimmt die Wahrscheinlichkeit dafür ab, überhaupt einen elementaren Würfel der Multiplizität $M=6$ zu finden. Wie schon die Dichte $\rho_{\mathbb{Z}_2}(\kappa)$ signalisiert auch der Verlauf von $p(0)(\kappa)$, dass die Zentrumsvortices tief in der Pseudo-Higgs-Phase vollständig verschwinden werden.

Während die einzelnen Vortex-Cluster identifiziert wurden, wurde für jeden Cluster ein sogenannter *minimaler Container* des Volumens $V = \prod_i l_i$ (in Einheiten der Gitterkonstanten) konstruiert. Ausgehend von einem negativen dualen Link als Startpunkt auf einem Vortex wurde dabei die Ausdehnung des zugehörigen Containers ($l_i = 0 \forall i$ zu Beginn) in jeder der drei möglichen Richtungen \hat{e}_i immer dann um eins erhöht, wenn dies beim rekursiven Besuchen der Elemente des Clusters notwendig wurde, um diesen noch vollständig einschließen zu können. Perkolation der Cluster bedeutet also, dass sich als Erwartungswert der Containergröße gerade die maximal mögliche Größe ergeben muss. Legen wir periodische Randbedingungen für das Gitter zugrunde, so wird die maximale Kantenlänge eines Containers l_{\max} in einem (z.B. zeitlichen) dreidimensionalen Schnitt ($N_1 \times N_2 \times N_3$) durch

$$l_{\max}^2 = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{N_i}{2} \right)^2 \quad (2.50)$$

bestimmt. Dabei ist aus Isotropiegründen zu erwarten, dass der Erwartungswert der Kantenlänge von minimalen Containern für alle drei Dimensionen gleich sein sollte.

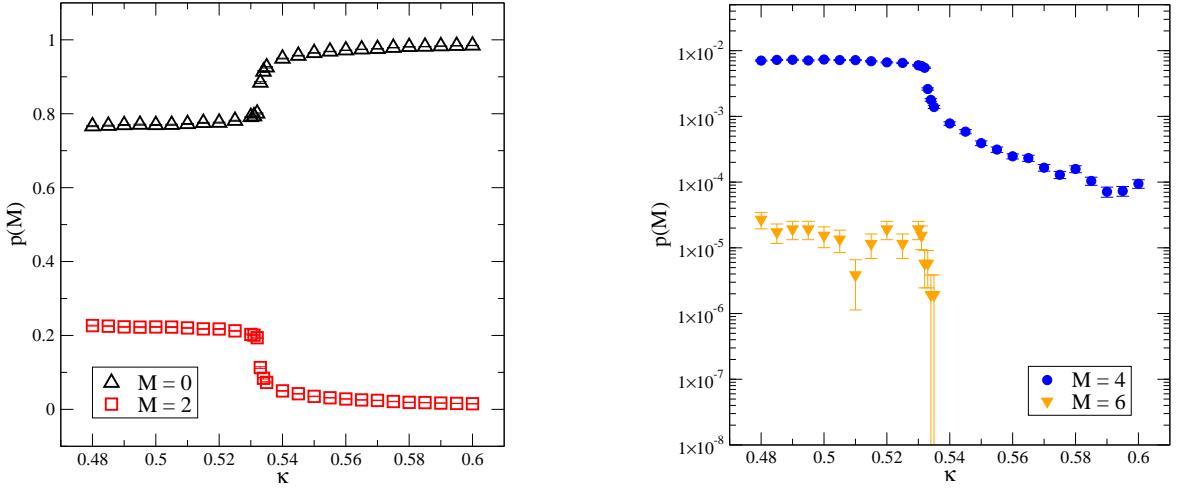
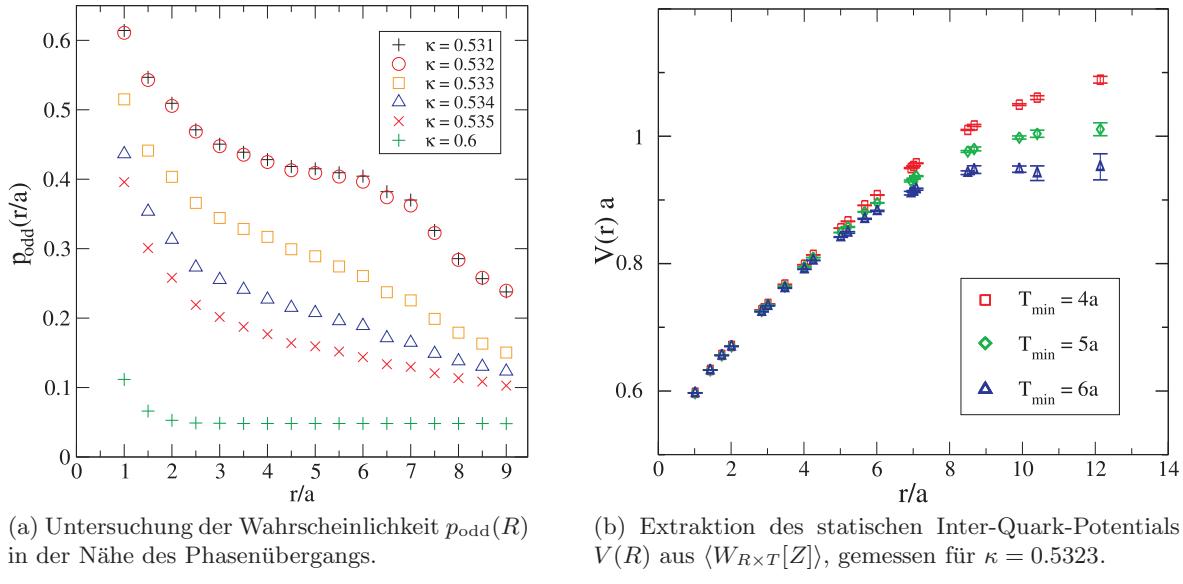


Abbildung 2.5: Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(M)$ der *Vortex-Intersection-Multiplicity* M für elementare Würfel als Funktion des Parameters κ . Gitter: 12^4 , $\beta = 2.3$, $\lambda = 0.5$.

In Kapitel 2.3.1 wurde zum einen bereits darauf hingewiesen, dass nicht-trivialer Zentrumsfluss, der einen Wilson-Loop durchsetzt, nur durch eine ungerade Anzahl an Durchstoßpunkten innerhalb einer von der Kontur Γ berandeten Fläche entstehen kann, zum anderen wurde bei der Diskussion des Random-Vortex-Modells in Kapitel 2.3.2 deutlich, dass gerade das subtile Ausbalancieren der beiden möglichen Messwerte, die für einen Wilson-Loop-Operator $W_\Gamma[Z]$ innerhalb der zentrumsprojizierten Theorie anfallen können, die zentrale Rolle für das Auftreten des Confinement-Phänomens im Zentrumsvortexbild spielt. Daher sollte die Untersuchung der Wahrscheinlichkeit $p_{\text{odd}}(R)$, in einer von einem Vortex durchstoßenen Ebene innerhalb einer Fläche $A = \pi R^2$ mit Zentrum in diesem Durchstoßpunkt eine insgesamt ungerade Anzahl von Durchstoßpunkten (auch anderer Vortices) zu finden, Aufschluss darüber geben können, ob in einer bestimmten Realisierungsphase der Theorie eine maximale Größe für (kreisförmige) Wilson-Loops existiert, innerhalb derer die Voraussetzungen des Random-Vortex-Modells für das Auftreten von Confinement noch erfüllt sind. Konkret wurde dazu für jedes Segment, das bei der rekursiven Identifizierung der Trajektorie eines Vortex besucht wurde, in der lokal dazu orthogonalen Ebene die Anzahl weiterer Vortexsegmente innerhalb von konzentrischen Kreisflächen mit (euklidischem) Radius $R = r/a$ bestimmt. Das Verhältnis aller auf diese Weise konstruierter Kreisflächen, die eine ungeraden Anzahl an Durchstoßpunkten aufwiesen, zur Anzahl aller derartigen Flächen stellt ein Maß für die oben beschriebene Wahrscheinlichkeit $p_{\text{odd}}(R)$ dar. Abbildung 2.2b illustriert die Situation anhand eines zweidimensionalen Schnittes durch eine exemplarisch ausgewählte Konfiguration.

Das Ergebnis unserer auf einem Gitter der Größe 16^4 durchgeführten Untersuchung der Wahrscheinlichkeit $p_{\text{odd}}(R)$ findet sich in Abbildung 2.6a. Für $\kappa = 0.6$ fällt $p_{\text{odd}}(R)$ rapide mit zunehmendem Abstand ab und nimmt bereits für $R \geq 2$ einen konstanten Wert an. Dies legt den Schluss nahe, dass es an diesem Punkt im Phasendiagramm der Theorie zwar noch eine endliche Anzahl von Zentrumsvortices gibt (vgl. Abbildung 2.4), deren Trajektorien sich aber nicht mehr über das gesamte Gitter erstrecken können. Vielmehr muss die Verteilung der Zentrumsvortices von einigen sehr kleinen Loops dominiert werden, deren Durchstoßpunkte in einer bestimmten Ebene im Mittel einen Abstand von weniger als zwei Gitterkonstanten

Abbildung 2.6: Gitter: 16^4 , $\beta = 2.3$, $\lambda = 0.5$, periodische Randbedingungen.

voneinander aufweisen. Nähert man sich dem kritischen Wert κ_c aus der Pseudo-Higgs-Phase kommend ($\kappa \rightarrow \kappa_c^+$), so verändert sich dieses Verhalten dahingehend, dass die Wahrscheinlichkeit, eine ungerade Anzahl an Durchstoßpunkten im Abstand R um einen Vortex herum zu finden, langsamer mit zunehmendem Radius der umgebenden Kreisfläche A abfällt. Betrachten wir also einen festen Wert von $R = r/a$, so kann daraus geschlossen werden, dass sich für $\kappa \rightarrow \kappa_c^+$ das Verhältnis der geraden Anzahl zur ungeraden Anzahl an Durchstoßpunkten dahingehend verändert, dass die für das Auftreten eines Flächengesetzes für den Erwartungswert eines Wilson-Loop-Operators mit Radius R notwendigen Fluktuationen in der Anzahl von positiven zu negativen Messwerten zunehmen sollten. Für $\kappa < 0.532$ ändert sich der Verlauf von $p_{\text{odd}}(R)$ praktisch nicht mehr, dieser scheint also charakteristisch für die Verteilung der Durchstoßpunkte der P -Vortices in der Quasi-Confinement-Phase zu sein. Die Ergebnisse unserer Untersuchung dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung legen daher die Vermutung nahe, dass sich für $0.532 < \kappa < 0.533$ eine signifikante Änderung im Perkolationsverhalten der Zentrumsvortices ergeben sollte.

Da es das Ziel der vorliegenden Untersuchung ist, herauszufinden, ob sich ein Zusammenhang zwischen der Verteilung der Zentrumsvortices bzw. der Änderung ihrer Perkolationseigenschaften und dem Auftreten des Stringbreaking-Phänomens in einer Yang-Mills-Theorie mit dynamischer Materie nachweisen lässt, wurde zu diesem Zweck als nächstes eine detaillierte Untersuchung des Grundzustandspotentials der vollen Theorie, sowie der durch Zentrumssprojektion (2.25) gewonnenen, effektiven \mathbb{Z}_2 -Theorie in dem nochmals verfeinerten Intervall $\kappa \in [0.5321, 0.5329]$ durchgeführt. Die Berechnung des Potentials $V(r)$ erweist sich dabei für Abstände $r > r_0$ der Quellen als schwierig [KS98], da der wahre Grundzustand in diesem Fall durch zwei kaum miteinander wechselwirkende Mesonen gegeben ist, und der üblicherweise verwendete Wilson-Loop-Operator – wie bereits in Kapitel 1 erläutert wurde – die zeitliche Entwicklung eines string-artigen axialen Zustands $|\chi\rangle$ beschreibt, dessen Überlapp mit dem wahren Grundzustand sich daher als gering herausstellt. Tatsächlich konnte gezeigt

werden [PW98], dass für $r \sim r_0$ das Phänomen des *level crossing* auftritt, wobei ein Übergang vom „String-Zustand“ zum „Zwei-Mesonen-Zustand“ als Kandidat für den Grundzustand stattfindet und sich der axiale Zustand für $r > r_0$ als erster angeregter Zustand erweist¹⁵. Die dabei verwendete *coupled channel* Methode erweist sich als sehr effizient bei der Suche nach dem wahren Grundzustand $|\Omega\rangle$, der durch Anwendung des Variationsprinzips zur Minimierung der Energie eines Ansatzes bestimmt wird, welcher als Superposition verschiedener Testzustände konstruiert wird. Dabei werden neben dem bereits erwähnten axialen Zustand, sowie dem zwei eichinvariante Mesonen repräsentierenden Zustand auch weitere Kandidaten, welche durch Anwendung verschiedener Smearing-Vorschriften aus diesen erzeugt wurden, in die Superposition mit einbezogen. Durch diese Vergrößerung der Basis des Raums der Testzustände wird es möglich, leichter zwischen Grundzustand und angeregten Zuständen unterscheiden zu können [LW90], insbesondere genügt eine immer kürzere Zeitentwicklung der Zustände, um deren Energie aus dem Studium von Matrix-Korrelationsfunktionen zuverlässig extrahieren zu können.

Obwohl sich dieses Verfahren inzwischen als Standard bei der spektroskopischen Untersuchung insbesondere angeregter Zustände etabliert hat, haben wir bei unseren Untersuchungen des Grundzustandspotentials bewusst auf den Einsatz dieser Methode verzichtet. Um zu verhindern, dass ein möglicherweise vorhandener Effekt der Zentrumsvortices auf das beobachtete Phänomen des Stringbreakings durch die Vermischung von Freiheitsgraden aus dem Eich- und Skalarfeldsektor verschleiert wird – was bei der Anwendung der verschiedenen Smearing- und Blocking-Prozeduren [A⁺87] zur Konstruktion der erweiterten Basis von Testzuständen [KS98] *de facto* geschieht – versuchen wir, den Effekt des erwartungsgemäß geringen Überlapps des axialen Zustands mit dem Grundzustand oberhalb der durch r_0 gesetzten Skala durch eine entsprechend höhere Anzahl an Messungen zu kompensieren und nehmen dabei ebenfalls in Kauf, dass ein Verzicht auf das üblicherweise eingesetzte *overlap enhancement* eine vergleichsweise lange Zeitentwicklung des Zustands erforderlich machen wird, bevor die minimale Energie verlässlich ermittelt werden kann. Zur Reduzierung des statistischen Fehlers nutzen wir bei der Berechnung von Erwartungswerten wie üblich die kubische Symmetrie des Gitters, sowie die aufgrund der periodischen Randbedingungen vorliegende Translationsinvarianz aus.

In Abbildung 2.6b ist der Verlauf des Potentials zwischen zwei statischen Quellen in der effektiven \mathbb{Z}_2 -Theorie zu sehen, der aus Erwartungswerten von Wilson-Loops $W_{R \times T}[Z]$ unter der Annahme verschiedener Werte T_{\min} für das Erreichen des *large time limit* extrahiert wurde. Die Erwartungswerte wurden dabei durch Messungen in einem Ensemble von 5000 Gitterkonfigurationen der Dimension 16^4 für den Wert $\kappa = 0.5323$ gewonnen und die Fit-Parameter für die Extraktion der Werte des Potentials $V(r)$ waren $Q > 10^{-3}$, sowie $\chi^2/\nu < 3$. Während der Verlauf für kleine Abstände r/a der Quellen in allen drei gezeigten Fällen übereinstimmt, ergibt sich für große Abstände eine Abweichung vom linearen Anstieg des Potentials. Erwartungsgemäß sinkt die Energie im Limes großer Zeiten, und es scheint, als würde dieser erst für $T_{\min} \geq 6a$ erreicht. Für den im Rahmen unserer Simulationen maximal zugänglichen Grenzfall $T_{\min} = 6a$ deuten unsere Resultate jedenfalls darauf hin, dass das Potential $V(r)$ ab $r_0 \sim 7a$ gegen einen asymptotisch konstanten Wert strebt, was sich grundlegend von dem Verlauf des Confinement-Potentials unterscheidet, welches man unter ausschließlicher Berücksichtigung der Zentrumsfreiheitsgrade einer reinen Yang-Mills-Theorie findet. Um zu klären,

¹⁵Vergleiche dazu auch die Diskussion der Rolle des axialen Zustands im Rahmen der QED in Kapitel 1.2.3.

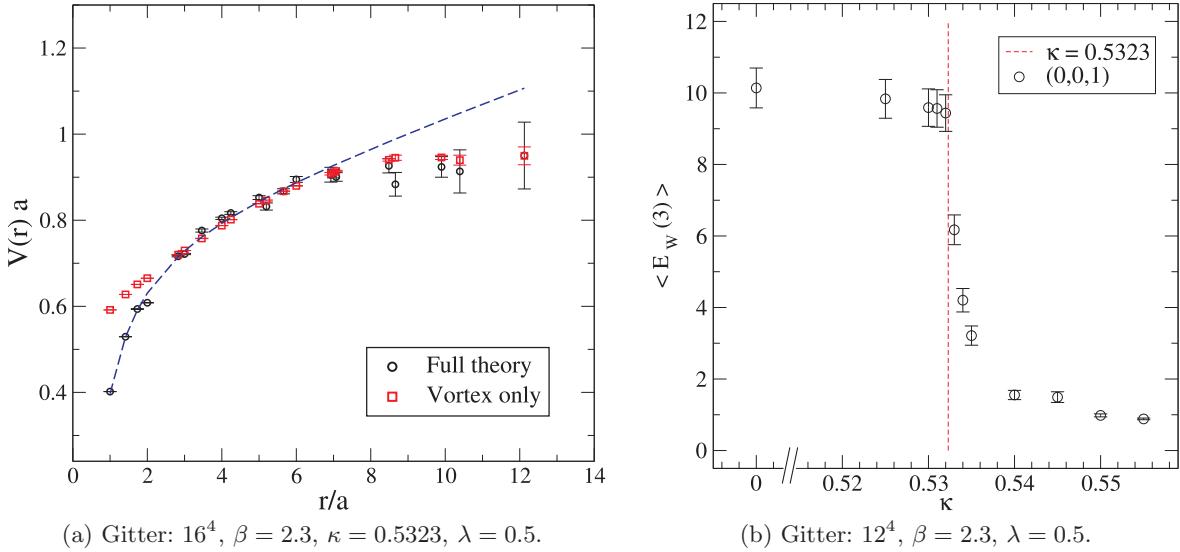


Abbildung 2.7: (a) Das Phänomen des Stringbreaking manifestiert sich im Potentialverlauf des Grundzustands sowohl in der Yang-Mills-Theorie mit dynamischem Skalarfeld, als auch in der Theorie der Zentrumsvortices. (b) Der Deperkolationsübergang wird durch ein Einbrechen der mittleren Containergröße angezeigt.

ob es sich bei diesem Ergebnis tatsächlich um ein Anzeichen des Stringbreaking-Phänomens im Zentrumsvortexbild des Confinement handelt, wurde unter Verwendung derselben Parameter das Potential $V_U(r)$ aus Erwartungswerten von Wilson-Loops $W_\Gamma[U]$ extrahiert, die diesmal in unprojizierten Konfigurationen $\{U_\mu(x)\}$ gemessen wurden. Das Ergebnis dieser Analyse wird in Abbildung 2.7a mit dem Verlauf des Potentials $V_{\mathbb{Z}_2}(r)$ verglichen, das für die effektive \mathbb{Z}_2 -Theorie gemessen wurde. In beiden Fällen wurde dabei die Annahme $T_{\min} = 6a$ zugrunde gelegt. Zusätzlich wurde zur besseren Orientierung ein Fit an die Datenpunkte eines statischen Confinement-Potentials (gestrichelte blaue Linie) in die Abbildung mit aufgenommen, das für $\beta = 2.3$ in einer reinen $SU(2)$ -Eichtheorie gemessen wurde.

Zunächst ist zu beobachten, dass das Potential $V_U(r)$ für $r < 7a$ praktisch genau dem Verlauf des Confinement-Potentials folgt. Für größere Abstände der Quellen hingegen stellen wir eine Abweichung fest: Während das Confinement-Potential weiterhin linear anwächst, folgt $V_U(r)$ eher dem Verlauf von $V_{\mathbb{Z}_2}(r)$, wobei sich die statistischen Unsicherheiten mit zunehmendem Wert von r ebenfalls zu vergrößern scheinen. Dies war zu erwarten und ist, wie oben bereits diskutiert, Ausdruck der Tatsache, dass der wahre Grundzustand oberhalb der Stringbreaking-Skala r_0 eine zunehmend geringere Ähnlichkeit mit dem axialen Testzustand aufweist. Offensichtlich müsste also die Anzahl der von uns durchgeföhrten Messungen noch weiter erhöht werden, um größere Sicherheit über das Verhalten des Potentials $V_U(r)$ in diesem Bereich zu gewinnen. Dies ist mit dem Ergebnis der in Abbildung 2.3 gezeigten Messung des Potentials der reinen $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie zu vergleichen. Durch die Verwendung einer *overlap enhancement* Prozedur, der die räumlichen Links unterworfen wurden, konnte das dort gezeigte Potential aus jeweils 100 Messungen für jeden Wert der Kopplungskonstanten β bei einem durchaus akzeptablen statistischen Fehler extrahiert werden. Vergleicht man in diesem Licht die Messergebnisse für $V_U(r)$ und $V_{\mathbb{Z}_2}(r)$ inclusive ihrer statistischen Fehler

im Bereich $r \geq 8a$ miteinander, so ist zu konstatieren, dass es vorteilhaft erscheint, sich bei der Beschreibung der Infrarotphysik auf die Zentrumsvortices als den relevanten Freiheitsgraden innerhalb der vollen Theorie zu stützen. Weiterhin ist festzustellen, dass sowohl die sogenannte *intermediäre string tension*, die aus $V_U(r)$ im Bereich des linearen Anstiegs (ca. $3a \leq r \leq 7a$) extrahiert werden könnte, mit der des Zentrumsvortex-Potentials in diesem Bereich übereinzustimmen scheint, als auch die Skala r_0 , an der sich $V_U(r)$ entscheidend verändert, richtig von den Vortices reproduziert werden kann. In diesem Zusammenhang ist es ebenfalls sehr interessant, sich das Verhalten der Vortex-Cluster in der Nähe des Phasenübergangs nochmals aus anderer Perspektive anzusehen.

Treten in einer Gitterkonfiguration sowohl perkolierende Vortices als auch Vortex-Cluster endlicher Ausdehnung auf, so sollten die (wenigen) perkolierenden Vortices noch immer in der Lage sein, ein Flächengesetz für den Erwartungswert des Wilson-Loop-Operators hervorzurufen. Bei der direkten Berechnung einer mittleren Containergröße würde dabei allerdings der entscheidende Effekt dieser wenigen perkolierenden Vortex-Clusters im Gegensatz zu den vielen Containern endlicher Ausdehnung nicht angemessen berücksichtigt werden. Diesem Faktum versuchen wir durch die Definition einer *gewichteten* mittleren Ausdehnung $E_w(j)$ der Vortex-Cluster (bezüglich der Richtung \hat{e}_j) Rechnung zu tragen, indem die Länge $L(i)$ der N_V verschiedenen, innerhalb einer Konfiguration detektierten, disjunkten Vortex-Cluster $V(i)$, berücksichtigt wird:

$$E_w(j) := \frac{\sum_{i=1}^{N_V} l_j(i) L(i)}{\sum_{i=1}^{N_V} L(i)}. \quad (2.51)$$

In Abbildung 2.7b ist der Erwartungswert der Kantenlänge der minimalen Container (2.51), exemplarisch für die \hat{e}_z -Richtung, als Funktion des Parameters κ aufgetragen. Die Messungen wurden auf einem Gitter der Größe 12^4 durchgeführt, wodurch sich bei der Betrachtung von dreidimensionalen Schnitten durch das Gitter nach Gleichung (2.50) eine maximale Kantenlänge von $l_{\max} \simeq 10.4$ ergibt. Dieser Wert stimmt sehr gut mit dem von uns für $\kappa = 0$ gemessenen Wert überein. Da die Vortices in dieser Realisierungsphase der Theorie bekanntermaßen das gesamte Gitteruniversum durchziehen, darf angenommen werden, dass die Definition der gewichteten Cluster-Ausdehnung in Gleichung (2.51) eine sinnvolle Möglichkeit zur Charakterisierung der Perkolationseigenschaften von Zentrumsvortices darstellt. Beim Übergang in die Quasi-Higgs-Phase nimmt die mittlere Ausdehnung $E_w(\kappa)$ rapide ab und für $\kappa \geq 0.54$ können die verbliebenen Vortices bereits in Containern mit einer Kantenlänge von weniger als zwei Gitterkonstanten untergebracht werden. Vergleicht man die Messwerte für die maximale Ausdehnung der Container unmittelbar unter- und oberhalb des Punktes $\kappa = 0.5323$, an dem die Untersuchung der Potentiale durchgeführt wurden, so ist es interessant darüber zu spekulieren, ob die Skala r_0 , bei der das Auftreten des Stringbreaking-Phänomens verortet wurde, möglicherweise in direktem Zusammenhang mit der maximalen Größe der Vortex-Cluster steht, die an diesem Punkt des Phasendiagramms der Theorie vorliegen. Die Vorhersagen des Random-Vortex-Modells geben jedenfalls Grund zur Vermutung, dass dies tatsächlich der Fall sein müsste. Zuletzt wurde verifiziert, dass ein Entfernen der P -Vortices aus den thermalisierten Konfigurationen gemäß (2.34) das Verschwinden des linearen Anteils des Potentials $V_U(r)$ (auch in einem intermediären Bereich des Quellenabstands) zur Folge hatte.

2.5 Die Natur des elektroschwachen Phasenübergangs

2.5.1 Z -Strings, Nambu-Monopole und Zentrumsvortices

Obwohl keine topologisch stabilen monopol- oder vortexartigen Defekte im Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung auftreten können [Ryd85], lassen sich dennoch *eingebettete* Defekte identifizieren, nämlich die sogenannten *Nambu-Monopole* [Nam77] und *elektroschwache Z -Strings* [Man83]. Letztere entsprechen den bereits in Kapitel 2.3 erwähnten Vortex-Lösungen von Abrikosov und Nielsen-Olesen, die mit der abelschen Untergruppe der $SU(2)$ verknüpft sind und dadurch in die Eichfelder der elektroschwachen Theorie eingebettet werden können¹⁶. Die grundlegenden Ideen zum Thema Einbettung und Detektierung dieser Objekte werden in Kapitel 2.5.3 erläutert, für eine ausführlichere Diskussion wird auf den umfangreichen Übersichtsartikel von Achucarro und Vachaspati [AV00] verwiesen.

Nachdem einerseits gezeigt werden konnte [GIS97], dass sich der elektroschwache Phasenübergang erster Ordnung im Rahmen des Glashow-Salam-Weinberg-Modells in einen fließenden Übergang in der Umgebung einer kritischen Temperatur T_c verwandelt, sofern die Masse des (hypothetischen) Higgs-Bosons größer als $M_H \simeq 73$ GeV ist, andererseits eine derart niedrige Masse aber experimentell ausgeschlossen werden kann [A⁺08], hat das Interesse an eingebetteten topologischen Defekten eine Renaissance erfahren. Diese spielen nämlich eine entscheidende Rolle in verschiedenen alternativen Szenarien zur Bayogenese im frühen Universum, die im Gegensatz zu den lange Zeit favorisierten Ideen¹⁷ (u.a. der sogenannte *bubble nucleation mechanism*) auf die Annahme eines hinreichend starken Phasenübergangs erster Ordnung verzichten können. Eines dieser alternativen kosmologischen Modelle geht dabei von perkolierenden elektroschwachen Z -Strings¹⁸ in der symmetrischen Hochtemperaturphase aus, die bei Unterschreitung einer kritischen Temperatur in stabile kleinere, nicht-trivial (*twisted*) geschlossene und miteinander verknüpfte Loops übergehen, welche eine von Null verschiedene Baryonenzahl tragen können und dadurch das Auftreten der Baryonenzahl-Asymmetrie im Universum erklären könnten [VF94]. Ob sich diese nicht-trivialen Feldkonfigurationen jedoch als stabil erweisen oder nicht, ist eine Frage der Dynamik bosonischer und fermionischer Quantenfelder, die an die klassischen Z -Strings koppeln können. Eine Untersuchung in $D = 2 + 1$ hat dabei gezeigt, dass eine energetische Stabilisierung der topologisch nicht geschützten Z -Strings ($\pi_1(SU(2)) = 0$) allein durch den fermionischen Sektor des GSW-Modells für realistische Werte der physikalisch relevanten Parameter N_c sowie m_t nicht möglich ist [GQW09]. Falls sich dieses Ergebnis auch in $D = 3 + 1$ Dimensionen unter Hinzunahme aller bosonischen Fluktuationen der Theorie bestätigen sollte, so erscheint es zumindest fraglich, ob die elektroschwachen Z -Strings tatsächlich einen wesentlichen Einfluss auf die Entwicklung des elektroschwachen Vakuums gehabt haben können, oder ob man nicht nach anderen Anregungen in der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung Ausschau halten muss, welche die Rolle der Z -Strings übernehmen könnten.

Wie die elektroschwachen Z -Strings, so müssen auch alternative Kandidaten, die magnetischen Fluss führen sollen, entweder geschlossen sein oder aber einen Bindungszustand mit einem Paar von Nambu-Monopolen unterschiedlichen Vorzeichens eingehen. Derartige abgeschlossene Strings, die auch als *Monopolium* bezeichnet werden, könnten den Kern einer insta-

¹⁶Vergleiche auch die Diskussion in Kapitel 2.2.4.

¹⁷Eine Übersicht findet sich in dem Artikel von Rubakov und Shaposhnikov [RS96].

¹⁸In der Literatur findet sich auch die Bezeichnung *kosmische Strings*.

bilen Sphaleron-Konfiguration [Man83] darstellen, welche unterhalb des *crossover* als einzige Konfiguration Übergänge zwischen Vakua mit verschiedenen Chern-Simons-Zahlen vermitteln kann. Tatsächlich wurden bei der Untersuchung von klassischen Sphaleron-Konfigurationen auf dem Gitter Anzeichen für das Vorliegen solcher Monopol-Antimonopol-Bindungszustände gefunden [CGI98]. Die dort eingeführten Operatoren zur Detektierung der (elementaren) Z -Strings und Nambu-Monopol-Ströme konnten später [CGIS98a] auch dazu verwendet werden, die Dynamik dieser Defekte in einem Modell der Glashow-Salam-Weinberg-Theorie im thermischen Gleichgewicht nahe T_c zu untersuchen. Dabei handelt es sich um das in $D=3$ Dimensionen definierte $SU(2)$ -Higgs-Modell, wobei das skalare Feld sich unter der fundamentalen Darstellung der Gruppe transformiert. Die Berücksichtigung der $U(1)_Y$ durch Verwendung eines nicht-trivialen Wertes für den Weinberg-Winkel θ_W würde dabei zu einer Kopplung zwischen der Hyperladungsgruppe und der abelschen Untergruppe der $SU(2)$ führen, was wiederum zur Folge hätte, dass neben den Z -Strings auch W -Strings als Lösungen der Theorie möglich würden. Der Einfluss der mit der Hyperladung Y assoziierten $U(1)$ -Eichgruppe auf die Natur des elektroschwachen Phasenübergangs bzw. *crossover* wurde in [KLRS97b] studiert, wobei sich gezeigt hat, dass dieser als eher gering einzuschätzen ist. Wie in [GQW09] wollen wir uns daher auch zunächst nur auf den Fall $\theta_W = 0$ beschränken, für den sich die W - und Z -Lösungen nur um eine globale Eichtransformation voneinander unterscheiden. Da der Einfluss von Fermionen auf die physikalisch relevanten Parameter der effektiven dreidimensionalen $SU(2)$ -Higgs-Theorie im Zuge der dimensionalen Reduktion ebenfalls berücksichtigt werden kann [KLRS96a, KLRS96b], gehen wir davon aus, dass dieses Modell bereits eine hinreichend gute Approximation für das elektroschwache Standardmodell bei endlichen Temperaturen und realistischen Higgs-Massen darstellt, so dass aus dem Studium dieser Theorie wichtige Erkenntnisse zum Verhalten der eingebetteten Defekte nahe des *crossover* gewonnen werden können.

Bevor wir uns der Untersuchung der Dynamik von Zentrumsvortices in der elektroschwachen Theorie während eines Abkühlungsvorgangs des Universums zuwenden wollen, soll zunächst noch das bereits erwähnte Konzept der dimensionalen Reduktion einer Quantenfeldtheorie erläutert werden.

2.5.2 Dimensionale Reduktion und endliche Temperaturen

Das Konzept der dimensionalen Reduktion beinhaltet die Annahme, dass sich die wesentlichen Eigenschaften einer $4D$ Theorie bei hohen Temperaturen im thermischen Gleichgewicht aus der Untersuchung einer einfacheren, effektiven $3D$ Theorie verstehen lassen sollten. Die Verbindung der beiden wird dabei durch das Studium der statischen bosonischen Green'schen Funktionen der vierdimensionalen Theorie, ausgewertet in einem sinnvoll gewählten Regime niedriger Energie, und einer Anpassung der Parameter der entsprechenden Green'schen Funktionen der ausschließlich bosonischen, effektiven Theorie hergestellt¹⁹. Auf die enge Verbindung von euklidischer Quantenfeldtheorie und klassischer statistischer Feldtheorie wurde bereits bei der Diskussion der Wick-Rotation in Kapitel 1 hingewiesen, es ist daher nicht verwunderlich, dass der Formalismus der imaginären Zeit auch im Rahmen der dimensionalen Reduktion eine entscheidende Rolle spielt.

¹⁹Die Unterscheidung der verschiedenen relevanten Energie- und Impulsregime, sowie die Einteilung der zugehörigen Anregungen in unterschiedliche „Gewichtsklassen“ bei hohen Temperaturen wird in der Arbeit von Kajantie *et al.* [KLRS96a] vorgenommen.

Um eine $D = d + 1$ dimensionale Quantenfeldtheorien bei endlichen Temperaturen T zu studieren, wird die zeitliche Dimension der zugrunde liegenden Mannigfaltigkeit kompaktifiziert, so dass diese topologisch äquivalent zu $\mathbb{R}^d \times S^1$ ist. Die Zustandssumme \mathcal{Z} eines solchen Systems berechnet sich bekanntermaßen als

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}[\exp\{-\beta \mathcal{H}\}] , \quad \beta := T^{-1} , \quad (2.52)$$

wobei \mathcal{H} den Hamilton-Operator der Quantenfeldtheorie bezeichnet und ein Einheitensystem gewählt wurde, in dem für die Boltzmannkonstante $k_B = 1$ gilt. Bezeichnen wir die fermionischen Felder mit $\psi(\mathbf{x}, t)$ und alle bosonischen Felder der Theorie mit $\chi(\mathbf{x}, t)$, so kann die Zustandssumme der Theorie als Funktionalintegral der Form

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\chi \exp\{-S[\chi, \psi]\} \quad (2.53)$$

ausgedrückt werden, wobei die bosonischen Felder periodische, die fermionischen Felder hingegen anti-periodische Randbedingungen bezüglich der imaginären Zeitrichtung \hat{e}_τ erfüllen:

$$\chi(\mathbf{x}, \tau=0) = \chi(\mathbf{x}, \tau=1/T) , \quad \psi(\mathbf{x}, \tau=0) = -\psi(\mathbf{x}, \tau=1/T) . \quad (2.54)$$

Die quantenmechanische Zustandssumme (2.53) kann also als Zustandssumme einer klassischen statistischen Feldtheorie in $d + 1$ Dimensionen gedeutet werden, wobei die endliche Temperatur, bei der die Quantenfeldtheorie betrachtet wird, gerade durch die endliche Ausdehnung $L_t = 1/T$ der „zeitlichen“ Dimension realisiert wird:

$$T = \frac{1}{L_t} = \frac{1}{N_t a(\beta)} . \quad (2.55)$$

Eine euklidische Quantenfeldtheorie am Temperaturnullpunkt entspricht folglich einer klassischen statistischen Feldtheorie im thermodynamischen Grenzfall. Führt man nun bei endlichen Temperaturen eine partielle Fourier-Zerlegung der Quantenfelder durch

$$\chi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \chi_n(\mathbf{x}) \exp\{iw_n^b \tau\} , \quad \psi(\mathbf{x}, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_n(\mathbf{x}) \exp\{iw_n^f \tau\} , \quad (2.56)$$

so ergeben sich aufgrund von (2.54) für die Matsubara-Frequenzen der bosonischen bzw. fermionischen Felder in zeitlicher Richtung die Moden $\omega_n^b = 2n\pi T$ und $\omega_n^f = (2n+1)\pi T$ ($n \in \mathbb{Z}_0$). Diese werden auf *tree level* mit den Massen der Felder $\chi_n(\mathbf{x})$ und $\psi_n(\mathbf{x})$ der d -dimensionalen Theorie identifiziert [KLRS96a]. Die sogenannten *nicht-statischen* Moden ($n \neq 0$ für Bosonen und alle fermionischen Moden) sind im Grenzfall hoher Temperaturen T stark unterdrückt, daher wurde zunächst angenommen [AP81], dass sich diese sogenannten „superschweren“ Beiträge vollständig ausintegrieren lassen müssten. Dadurch lässt sich gemäß

$$\exp\{-S_{\text{eff}}[\varphi(\mathbf{x})]\} := \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\chi_{n \neq 0} \exp\{-S[\chi, \psi]\} \quad (2.57)$$

eine effektive d -dimensionale Theorie allein für die *statische* Mode $\varphi(\mathbf{x})$ ($n = 0$) definieren, die sich durch eine Entwicklung von $S_{\text{eff}}[\varphi(\mathbf{x})]$ störungstheoretisch behandeln lassen sollte²⁰.

²⁰In führender Ordnung findet sich $S_{\text{eff}}[\varphi] = L \int d^d \mathbf{x} \mathcal{L}(\varphi(\mathbf{x}))$.

Es wurde allerdings schon früh erkannt [Lan89], dass sich als Folge der Integration neue Wechselwirkungen für die statische Mode ergeben, was zu Problemen bei einer systematischen Entwicklung bereits auf 2-Loop-Ebene führt, da die Massen der verschiedenen Felder, die Bestandteil der ursprünglichen vierdimensionalen Theorie waren, unterschiedliche temperaturabhängige Korrekturen erfahren können. Im Rahmen des bereits erwähnten *matching approach* [KLRS96a] zur dimensionalen Reduktion wird dieses Problem insofern umgangen, als dass bei der Berechnung der Diagramme, die zum Erreichen einer vorgegebenen Genauigkeit beim Abgleich der $D = 4$ und $D = 3$ Parameter betrachtet werden müssen, interne Linien zu allen auftretenden Massenskalen (leicht, schwer und super-schwer) berücksichtigt werden.

Die Verallgemeinerung dieser Überlegungen auf den Fall nicht-abelscher Eichtheorien bei endlichen Temperaturen ist mit einigen Schwierigkeiten behaftet. Diese resultieren vor allem daraus, dass die Anzahl der Feldkomponenten von der Dimension der Raumzeit abhängig ist und die Isolierung der statischen Mode dadurch erschwert wird, dass die Zerlegung der Felder in ihre Fourier-Komponenten eichabhängig ist [ZJ00]. Im Fall einer vierdimensionalen reinen Yang-Mills-Theorie bei asymptotisch hohen Temperaturen findet man als Ergebnis der dimensionalen Reduktion eine effektive dreidimensionale Yang-Mills-Theorie, die an ein zusätzliches Skalarfeld gekoppelt ist, welches sich unter der adjungierten Darstellung der Gruppe transformiert [LMR92, KLM⁺94]. Die zugehörige effektive Wirkung liest sich als

$$S_{\text{eff}}[\mathbf{A}, A_0] = S_{\text{YM}}^{3d}[\mathbf{A}] + S_{\text{adj}}[\mathbf{A}, A_0] + S_{\text{int}}[A_0], \quad (2.58)$$

wobei die räumlichen Komponenten des Eichfeldes zu \mathbf{A} zusammengefasst wurden und das adjungierte Higgs-Feld konventionsgemäß mit $A_0(\mathbf{x}) = A_0^a(\mathbf{x})T^a$ bezeichnet wird, um anzudeuten, dass dies ein Relikt aus der Integration der nicht-statischen Moden ist und aus der temporalen Komponente des Eichfeldes stammt. Die Wirkung der dreidimensionalen Yang-Mills-Theorie ist durch

$$S_{\text{YM}}^{3d}[\mathbf{A}] = \frac{1}{2g_3^2} \int d^3\mathbf{x} \text{ tr}[F_{ij}(\mathbf{x})F_{ij}(\mathbf{x})], \quad g_3^2 = g^2(T)T \quad (2.59)$$

gegeben, wobei die zugehörige Kopplungskonstante $g_3(T)$ – im Gegensatz zur temperatur- bzw. energieabhängigen Kopplungskonstanten $g(T)$ der ursprünglichen vierdimensionalen Theorie – nicht mehr länger dimensionslos ist. Der kinetische Term des adjungierten Higgs-Feldes $A_0(\mathbf{x})$ ist gegeben durch

$$S_{\text{adj}}[\mathbf{A}, A_0] = \int d^3\mathbf{x} \text{ tr}[[D_i(\mathbf{A}), A_0(\mathbf{x})][D_i(\mathbf{A}), A_0(\mathbf{x})]], \quad (2.60)$$

und der letzte Beitrag, welcher die quadratische und quartische (Selbst-)Wechselwirkung des Higgs-Feldes beschreibt, ist das Result einer Integration der nicht-statischen Moden in 1-Loop-Näherung [Lan89]:

$$S_{\text{int}}[A_0] = \int d^3\mathbf{x} m_D^2 \text{ tr}[A_0^2(\mathbf{x})] + \lambda_3 \text{ tr}[A_0^2(\mathbf{x})]^2 \quad (2.61)$$

Werden weitere Diagramme höherer Ordnung berücksichtigt, so erfahren die Parameter g_3 , λ_3 , sowie die Debye-Masse m_D Korrekturen, die sich im Falle einer 2-Loop-Näherung in [KLRS97a] finden. Für die Kopplungskonstante g_3 etwa ergibt sich eine Änderung der Form

$$g_3^2 = g^2(T) T (1 + \mathcal{O}(g^2)). \quad (2.62)$$

2.5.3 Die elektroschwache Theorie bei endlichen Temperaturen

Da wir daran interessiert sind, Ergebnisse zur Untersuchung der Dynamik von Zentrumsvortices in der elektroschwachen Theorie bei endlichen Temperaturen mit bereits vorliegenden Ergebnissen zur Entstehung und Dynamik von Z -Strings und Nambu-Monopolen vergleichen zu können, studieren wir wie in [CGIS98a] als eine erste Approximation der Theorie das dreidimensionale $SU(2)$ -Higgs-Modell mit der Wirkung

$$\begin{aligned} S[U, \Phi] = & \beta \sum_P \left(1 - \frac{1}{2} \operatorname{Re} \{ \operatorname{tr}[P[U]] \} \right) \\ & - \frac{\kappa}{2} \sum_{x,k} \operatorname{tr} [\Phi^\dagger(x) U_k(x) \Phi(x+k)] + \sum_x \rho(x)^2 + \lambda (\rho(x)^2 - 1)^2 . \end{aligned} \quad (2.63)$$

Dabei verwenden wir die in Kapitel 2.4.1 eingeführten Konventionen für das Higgs-Feld $\Phi(x)$. Die Parameter β, κ, λ können mit den (dimensionsbehafteten) Parametern $g_3, m_3(g_3^2)$ und λ_3 der super-renormierbaren $SU(2)$ -Kontinuumstheorie mit fundamentalem Higgs-Feld in $D=3$ Dimensionen in Verbindung gebracht werden [KLRS96a]. Die Kopplungskonstante g_3 sowie die Selbstkopplung λ_3 sind Renormierungsgruppeninvariante, die renormierte Masse $m_3(g_3^2)$ der Kontinuumstheorie wird an der Skala $\mu_3 = g_3^2$ ausgewertet. Die Temperaturabhängigkeit von g_3 (siehe Gleichung 2.62) führt zu einer Temperaturabhängigkeit von m_3 , was dazu führt, dass über eine Veränderung des Parameters κ die Temperatur geregelt werden kann. Wir verwenden die in [GIS97] eingeführten Konventionen und betrachten die dimensionslosen Verhältnisse

$$\beta = \frac{4}{a g_3^2}, \quad \lambda = \frac{\lambda_3}{g_3^2} \frac{\kappa^2}{\beta} = \frac{1}{8} \left(\frac{M_H^*}{80 \text{ GeV}} \right)^2 \frac{\kappa^2}{\beta}, \quad (2.64)$$

wobei die Selbstkopplungskonstante des Higgs-Feldes durch die Masse M_H^* des zugehörigen Bosons²¹ ausgedrückt werden kann. Der Kontinuumslimes der diskretisierten Theorie wird entlang der „Linien konstanter Physik“ der Kontinuumstheorie durch Vergrößerung von β erreicht, wobei sowohl das dimensionslose Verhältnis λ_3/g_3^2 (M_H^*), als auch $m_3(g_3^2)/g_3^2$ (κ) konstant gehalten werden müssen.

Wie bereits in Kapitel 2.2.4 angedeutet, können Nambu-Monopole und Z -Strings im Falle des elektroschwachen Standardmodells bei endlichen Temperaturen auf eichinvariante Weise detektiert [CGIS98a] bzw. in dieses eingebettet werden [Nam77]. Dazu wird zunächst das zusammengesetzte adjungierte Einheitsvektorfeld

$$n(x) = n^a(x) \sigma^a, \quad n^a(x) := -\frac{\phi^\dagger(x) \sigma^a \phi(x)}{\phi^\dagger(x) \phi(x)} \quad (2.65)$$

definiert, das die Rolle des adjungierten Skalarfeldes bei der Definition des 't Hooft-Polyakov-Monopols im Georgi-Glashow-Modell übernimmt und die Orientierung der ungebrochenen abelschen Untergruppe innerhalb von G anzeigt. Unter Verwendung der neuen, projizierten Linkfelder

$$V_\mu[U, n](x) := U_\mu(x) + n(x) U_\mu(x) n(x + \mu) \quad (2.66)$$

lässt sich der eichinvariante Fluss

$$\bar{\theta}_{\mu\nu}[U, n](x) := \arg (\operatorname{tr}[(1 + n(x)) P_{\mu\nu}[V](x)]) \in [-\pi, \pi] \quad (2.67)$$

²¹Näherungsweise gleich der physikalischen Masse des Higgs-Bosons M_H für $T = 0$.

berechnen (vgl. dazu auch Gleichung 2.9), wobei die nicht-abelsche Plaquette $P_{\mu\nu}[V](x)$ aus den Links (2.66) gemäß Gleichung (2.26) zu berechnen ist und auf $n(x)$ projiziert wird.

Der Sinn dieser Konstruktion erschließt sich, wenn die Theorie in unitärer Eichung betrachtet wird, welche durch

$$n^a(x) = \delta^{a3}, \quad \phi^u(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \phi(x) \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

bestimmt ist. In dieser Eichung sind die Felder (2.66) diagonal

$$V_\mu^u[U, \sigma^3](x) = \begin{pmatrix} e^{i\theta_\mu^u(x)} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta_\mu^u(x)} \end{pmatrix}, \quad \theta_\mu^u(x) = \arg(U_\mu^{11}(x)), \quad (2.69)$$

und die Phasen $\theta_\mu^u(x)$ stellen ein kompaktes abelsches Eichfeld bezüglich der residuellen abelschen Eichtransformationen

$$\Omega_A(x) = e^{-i\alpha(x)\sigma^3}, \quad \alpha(x) \in [0, 2\pi[\quad (2.70)$$

dar. Die Nambu-Monopole sind also die topologischen Defekte des kompakten abelschen Feldes und die Auswertung von (2.67) in unitärer Eichung führt auf die abelsche Plaquette, die üblicherweise direkt unter Verwendung der Felder $\theta_\mu^u(x)$ in maximal abelscher Eichung nach Projektion konstruiert wird [CGI98]. In unitärer Eichung kann die Ladung der Nambu-Monopole innerhalb eines elementaren Würfels \mathcal{C} dann durch die in Kapitel 2.2.2 besprochene Standardprozedur von deGrand und Toussaint [DT80] definiert werden:

$$j_C = -\frac{1}{2\pi} \sum_{p \in \partial\mathcal{C}} \bar{\theta}_p, \quad \bar{\theta}_p = \theta_p - 2\pi m_p. \quad (2.71)$$

In dieser Eichung lassen sich die Z -Strings als die topologischen Vortexdefekte in den abelschen Matriefeldern $\phi^u(x)$ (den unteren Komponenten des Higgs-Doublets 2.40) auffassen. Unter der residuellen Transformation (2.70) gilt $\phi(x) \rightarrow e^{i\alpha(x)}\phi(x)$, folglich trägt das Feld $\phi(x)$ elektrische Ladung eins bezüglich des abelschen Eichfeldes $\theta_\mu^u(x)$. Auf dem Gitter lassen sich die Z -Strings durch nicht-triviale Messwerte für den sogenannten Z -Vortizitäts-Operator

$$\sigma_{\mu\nu}(x) := \frac{1}{2\pi} (\chi_{\mu\nu}(x) - \bar{\theta}_{\mu\nu}(x)) \quad (2.72)$$

detektieren, wobei die eichinvariante Definition der Felder

$$\chi_\mu(x) = -\arg(\phi^\dagger(x)V_\mu(x)\phi(x+\mu)) \quad (2.73)$$

zur Berechnung der zugehörigen Plaquette $\chi_{\mu\nu}(x)$ verwendet wird. Die Auswertung der Konstruktion in unitärer Eichung verdeutlicht nochmals die Quantisierung des Flusses, der von den Z -Strings getragen wird [CGI98]. Ein Z -String ist dabei definiert als die Kollektion aller verbundenen nicht-trivialen Links auf dem dualen Gitter, denen Plaquetten des Originalgitters mit einer von Null verschiedener Vortizität (2.72) entsprechen. Die Trajektorien der Z -Strings sind dabei entweder geschlossen, oder beginnen und enden an Positionen, an denen Nambu-Monopole bzw. Anti-Monopole lokalisiert sind.

An dieser Stelle soll nochmals die Eichinvarianz der gesamten Konstruktion zur Detektierung der Nambu-Monopole (2.71) sowie der Z -Strings (2.72) auf dem Gitter betont werden. Die unitäre Eichung (2.68) wurde dabei nur zu Illustrationszwecken gewählt und muss bei der konkreten Untersuchung der Feldkonfigurationen des Gitters nicht fixiert werden.

2.5.4 Zentrumsvortices bei endlichen Temperaturen

Die eichinvarianten Definitionen der Operatoren zur Detektierung von elementaren Nambu-Monopolen (2.67) und Z -Strings (2.72) eröffnen folglich die Möglichkeit, sowohl das Verhalten dieser eingebetteten Defekte, als auch die Rolle und Dynamik von Zentrumsvortices anhand derselben Konfigurationen einer Gittersimulation des elektroschwachen Standardmodells bei endlichen Temperaturen zu studieren. Dazu muss jedoch zunächst geklärt werden, auf welche Weise Zentrumsvortices in derartigen Konfigurationen zu detektieren sind.

Eine Zerlegung des eichfixierenden Funktionals (2.22) in einen Anteil, welcher ausschließlich Eichfelder räumlicher Natur beinhaltet, sowie einen Anteil für rein zeitartige Links, legt die Konstruktion eines analogen Funktionals zur Definition einer DMCG bei endlichen Temperaturen nahe:

$$\mathcal{F}_U^{\text{DMCG}}[\Omega] = \frac{1}{4N} \sum_{x=1}^N \left[\sum_{i=1}^3 \left(\text{tr} [U_i^\Omega(x)] \right)^2 + \left(\text{tr} [U_0^\Omega(x)] \right)^2 \right]. \quad (2.74)$$

Da die Spur der zeitartigen Link-Variablen im letzten Term invariant unter zeitunabhängigen Eichtransformationen ist, kann die DMCG in $D=3+1$ Dimensionen für *eine feste Zeitschicht* als Eichbedingung für die dimensional reduzierte Theorie herangezogen werden:

$$\mathcal{F}_U^{\text{DMCG}_{3d}}[\Omega(\mathbf{x})] = \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^3 \left(\text{tr} [U_i^\Omega(\mathbf{x})] \right)^2 \xrightarrow{\Omega} \max. \quad (2.75)$$

Offensichtlich besteht eine Verbindung zwischen den flächenhaften Vortices einer vierdimensionalen Theorie bei endlichen Temperaturen, sowie den geschlossenen Vortexfilamenten der zugehörigen dreidimensionalen Theorie: Letztere ergeben sich als Schnitte durch die geschlossenen Vortexflächen in einer festen Zeitschicht der vierdimensionalen Theorie. Bei der iterativen Maximierung des Funktionals (2.75) werden neben den Eichfeldern auch alle an die dreidimensionale Yang-Mills-Theorie gekoppelten Skalarfelder einer entsprechenden Eichtransformation unterworfen.

2.5.5 Numerische Ergebnisse

Zunächst waren wir daran interessiert, das Verhalten der Dichte von Z -Strings, Nambu-Monopolen und Zentrumsvortices im Bereich des *crossover* der Theorie zu untersuchen. Dabei wurde eine Higgsmasse von $M_H^* = 100$ GeV angenommen und Simulationen auf Gittern der Größe 20^3 für die Parameterwerte $\beta = 8$ und $\kappa \in [0.34, 0.36]$ durchgeführt, wobei die Selbstkopplungskonstante λ nach Gleichung (2.64) berechnet wurde. Für jeden Wert des Parameters κ wurde ein Ensemble von 1000 Konfigurationen mit demselben Algorithmus erzeugt, der schon bei der Untersuchung der vierdimensionalen Theorie in Kapitel 2.4.1 eingesetzt wurde. Autokorrelationen stellten dabei kein Problem dar. Der iterativen Fixierung der modifizierten DMCG (2.5.4) wurde ein Abbruchkriterium von $\delta^2 < 10^{-10}$ zugrunde gelegt.

In Abbildung 2.8 sind die Erwartungswerte der drei Operatoren

$$\rho_m = \frac{1}{L^3} \sum_c |j_c|, \quad \rho_{Z-\text{String}} = \frac{1}{3L^3} \sum_p |\sigma_p|, \quad \rho_{\mathbb{Z}_2} = \frac{1}{3L^3} \sum_p \delta_{(P[Z], -1)} \quad (2.76)$$

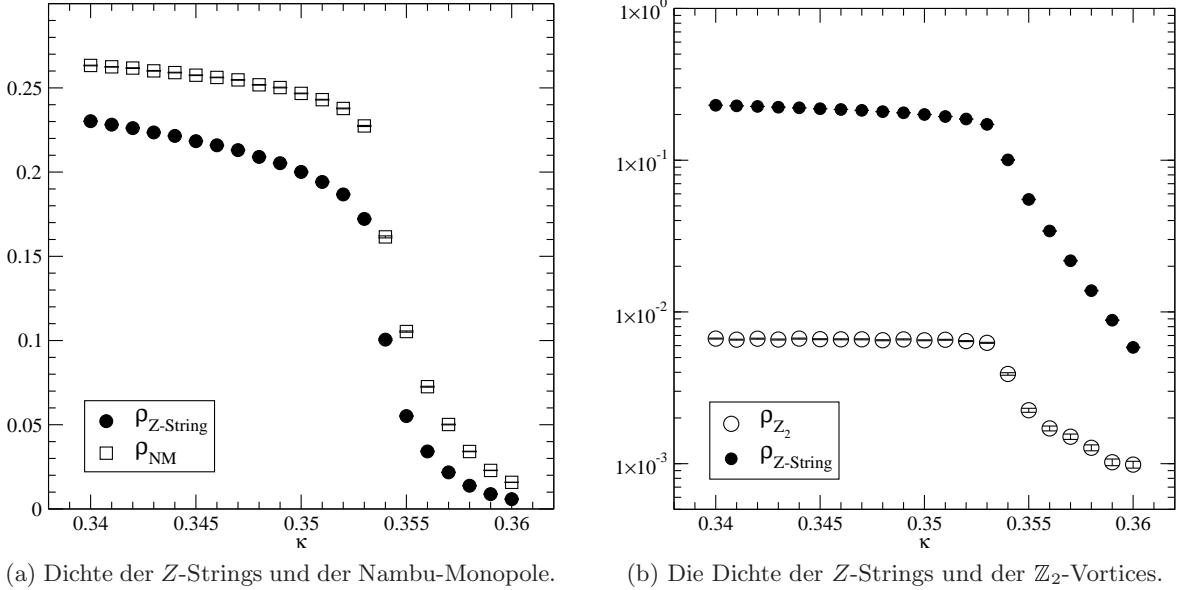


Abbildung 2.8: Die Dichten der Nambu-Monopole, Z -Strings und Zentrumsvortices in der Nähe des elektroschwachen *crossover*. Gitter: 20^3 , $\beta = 8$, $M_H^* = 100$ GeV.

zu sehen, wobei die Ladung der Nambu-Monopole j_C und die Vortizität der Z -Strings σ_p in jeder Konfiguration nach (2.71) und (2.72) berechnet wurden. Zur Untersuchung der Dichte der \mathbb{Z}_2 -Vortices wurde der in Gleichung 2.49 definierte Operator für $D = 3$ herangezogen.

Die Dichten der Nambu-Monopole und Z -Strings in Abbildung 2.8a zeigen als Funktion des Parameters κ ein ähnliches Verhalten. In der symmetrischen Phase scheinen in etwa ein Viertel aller Plaquetten bzw. elementaren Würfel von elektroschwachen Z -Strings durchstoßen bzw. von Nambu-Monopolen besetzt zu sein. Beide Dichten nehmen bei der Annäherung an den *crossover*-Bereich kontinuierlich ab, wobei sich ein Wendepunkt des Funktionsverlaufs ausmachen lässt, an dem die Dichten ρ_m und $\rho_{Z\text{-String}}$ etwa auf die Hälfte ihres asymptotischen Werts in der symmetrischen Phase abgefallen sind. Dieser Punkt liegt bei $\kappa_c \approx 0.353$. Dringt man weiter in die geordnete Phase vor, so nehmen sowohl ρ_m als auch $\rho_{Z\text{-String}}$ exponentiell ab, was am Verhalten der Z -String-Dichte in Abbildung 2.8b illustriert wird. Ein Vergleich mit dem Verhalten von ρ_{Z_2} zeigt, dass sich die Dichte der Zentrumsvortices in der symmetrischen Phase über einen weiten Bereich des Parameters κ annähernd konstant verhält und mindestens eineinhalb Größenordnungen kleiner zu sein scheint als die Dichte der (elementaren) Z -Strings. Dabei ist zum einen bemerkenswert, dass der Übergang in die geordnete Phase scheinbar bei derselben Temperatur durch eine Änderung von ρ_{Z_2} angezeigt wird, wie sie bei der Untersuchung der eichunabhängig definierten Z -Strings (und Nambu-Monopole) gefunden wurde, zum anderen sinkt die Dichte der Zentrumsvortices bei abnehmenden Temperaturen nicht so schnell, wie dies für die Z -Strings der Fall ist.

Als nächstes wurde das Perkolationsverhalten der Zentrumsvortices untersucht. Da sich gezeigt hat, dass der Übergang der Theorie von der symmetrischen Hochtemperatur-Phase in eine kältere, geordnete Phase von einem Deperkolationsübergang der Z -Strings begleitet wird,

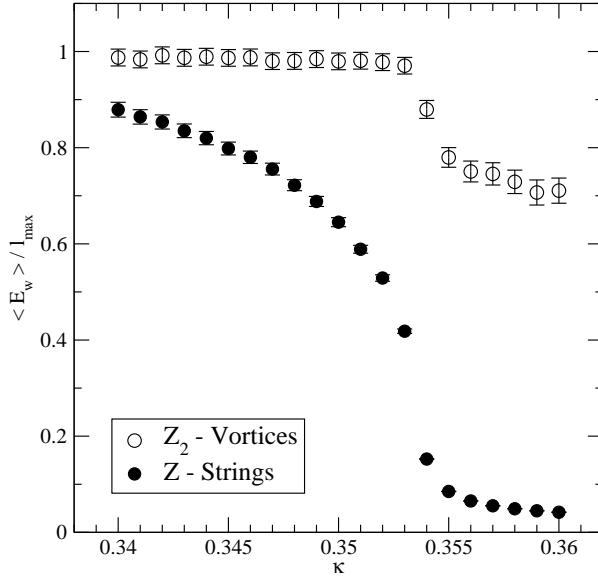


Abbildung 2.9: Die gewichtete Cluster-Ausdehnung (2.51), normiert bezüglich der maximalen Ausdehnung l_{\max} (2.50) der Cluster und gemittelt über alle drei möglichen Orientierungen. Der *crossover* bei $\kappa_p \simeq 0.353$ lässt sich an der Änderung des Perkolationsverhaltens der Zentrumsvortices sehr gut erkennen. Für die Z -Strings ist das Verhalten weniger deutlich ausgeprägt.

Gitter: 20^3 , $\beta = 8$, $M_H^* = 100$ GeV.

und zwar sowohl im Falle eines echten thermodynamischen Phasenübergangs (für unrealistisch kleine Higgs-Massen bzw. Selbstkopplungen) [CGIS98a], als auch im Fall des realistischeren *crossover* [CGIS98b], ist es interessant zu untersuchen, ob sich dieser Umstrukturierungsprozess auch in der Topologie der Zentrumsvortices beobachten lässt. Dazu betrachten wir die bereits in Kapitel 2.4.2 definierte gewichtete Cluster-Ausdehnung $E_w(j)$ (2.51) und vergleichen unsere Resultate mit den Ergebnissen zur Messung der z.B. in [CGIS98a] definierten Perkolationswahrscheinlichkeit C . In Abbildung 2.9 werden die Erwartungswerte der mittleren Cluster-Ausdehnung für die Zentrumsvortices und Z -Strings – normiert auf die maximal mögliche Containergröße (2.50) nach Mittelung über alle möglichen räumlichen Orientierungen – miteinander verglichen. Im Fall der Zentrumsvortices erweist sich diese Observable als hervorragend dazu geeignet, den Übergang von der symmetrischen Phase der Theorie, in der tatsächlich perkolierende Vortices vorliegen, in die unsymmetrische Phase zu detektieren. Der Deperkolationsübergangspunkt wird von einem Abfallen der normierten Cluster-Ausdehnung vom Wert eins bei $\kappa_p \simeq 0.353$ angezeigt und scheint mit dem kritischen Wert κ_c , an dem sich die Dichte der Zentrumsvortices ändert, übereinzustimmen. Während sich das System weiter abkühlt, tritt eine signifikante Änderung in der Verteilung der Zentrumsvortices auf, die wir folgendermaßen interpretieren: Die Anzahl der detektierten Vortices nimmt ab und diese organisieren sich statt in einem Netzwerk von perkolierenden Filamenten (mit einer Verzweigungshäufigkeit von ca. 2%) in kleineren Clustern, die praktisch keinerlei Verzweigungspunkte mehr aufweisen und deren mittlere Ausdehnung sich bei etwa 70% des betrachteten Gittervolumens zu stabilisieren scheint. Die Ausdehnung der Z -String-Container hingegen ist für $\kappa > 0.355$ bereits auf einen Wert kleiner 0.1 abgefallen, was einer Länge von ca. zwei Gitterkonstanten entspricht. Dies steht in Einklang mit den in [CGIS98b] berichteten Beobachtungen, wonach zu erwarten ist, dass sich ein Großteil der Z -Strings in einem hinreichend weit von κ_p entfernten Bereich im Phasendiagramm der Theorie mit einem Paar von Nambu-Monopolen gegensätzlichen Vorzeichens verbunden hat, und dass dieser Monopolium-Bindungszustand, der als Kern einer Sphaleronkonfiguration interpretiert werden kann [CGI98], eine maximale Ausdehnung von etwa zwei Gitterkonstanten aufweist.

In diesem Zusammenhang ist es interessant festzuhalten, dass eine genaue Bestimmung von κ_p die Verwendung von nicht-lokalen Defekt-Operatoren $\sigma_P^{(k)}$ und $j_c^{(k)}$ für ausgedehnte Z -Strings und Nambu-Monopole mit einer zunehmenden Anzahl an sogenannten Blocking-Schritten $k \in \mathbb{N}$ [CGIS98a] erforderlich macht, um eine Stabilisierung des Grenzwertes im Kontinuumslices der Theorie zu erreichen. Unser Ergebnis zur Untersuchung der Perkolationseigenschaften der Z -Strings in Abbildung 2.9 liefert ebenfalls einen Hinweis auf dieses Phänomen: Während für die Zentrumsvortices bereits eine recht klare Trennlinie zwischen den Phasen perkolierender und nicht mehr perkolierender Vortices angezeigt wird, ist der Übergang im Falle der elementaren Z -Strings für $\beta = 8$, also weit entfernt vom Kontinuumslices, noch sehr fließend. Die mittlere Cluster-Ausdehnung verhält sich dabei gewissermaßen komplementär zur Perkolationswahrscheinlichkeit C . Während letztere als echter Ordnungsparameter (im thermodynamischen Limes) den Deperkolationsübergang bei κ_p durch ein Abfallen auf den Wert Null signalisiert [CGIS98a], zeigt der (normierte) Erwartungswert von E_w im Fall der Zentrumsvortices das Vorliegen einer Phase perkolierender Vortices durch einen maximalen Wert von eins für $\kappa \leq \kappa_p$ an.

Sollte es sich bei den Z -Strings und Zentrumsvortices tatsächlich um physikalisch relevante Freiheitsgrade handeln, so müsste sich ihr Auftreten in der elektroschwachen Theorie bei endlichen Temperaturen zumindest dahingehend bemerkbar machen, dass es in unmittelbarer Nähe ihrer Trajektorien zu Inhomogenitäten in der Energiedichte des Eichfeldes kommt. Darüber hinaus steht im Fall der Z -Strings zu erwarten, dass diese auch einen Einfluss auf das Higgs-Feld haben dürften, da die klassischen Vortex-Lösungen im Kontinuum in ihrem Zentrum durch $\|\phi(0)\| = 0$, sowie asymptotisch durch $\lim_{r \rightarrow \infty} \|\phi(r)\| = \phi_0$ charakterisiert sind²². Diese Vermutung konnte im Fall der Z -Strings bereits in entsprechenden Gittersimulationen der Theorie bestätigt werden [CGIS99, CIS00]. Um die Situation auch im Fall der Zentrumsvortices zu klären, haben wir Messungen der Energiedichte $E^g(\tilde{x})$ der Eichfelder, sowie des mittleren Betragsquadrats $\rho^2(\tilde{x})$ des Higgs-Feldes

$$E^g(\tilde{x}) = 1 - \frac{1}{2} \text{tr}[P[U](\tilde{x})], \quad \rho^2(\tilde{x}) = \frac{1}{4} \sum_{x \in \partial P} \rho^2(x) \quad (2.77)$$

durchgeführt. Dabei bezeichnet \tilde{x} den Ort einer Plaquette auf dem dualen Gitter. Die Vorschrift zur Berechnung der Feldenergiedichte entlang der Trajektorie eines Vortex (*Core*) ist offensichtlich, da dessen Kern ja gerade durch Plaquetten mit nicht-trivialer Vortizität definiert ist. Im Fall des Higgs-Feldes wird das arithmetische Mittel aller vier $\rho^2(x)$ gebildet, die an den Ecken einer von einem Vortex durchstoßenen Plaquette P ausgewertet werden. In die Berechnung des Mittelwertes außerhalb der Vortices (*Bulk*) gehen definitionsgemäß alle Plaquetten der equilibrierten Gitterkonfigurationen mit trivialer Vortizität ($\sigma_P = 0, \sigma_P^{\mathbb{Z}_2} = 1$) ein.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Abbildung 2.10 zusammengefasst. Zunächst ist festzustellen, dass sich das Betragsquadrat des Higgs-Feldes (Abb. 2.10a) im Innen- und Außenbereich nur im Falle der Z -Strings maßgeblich voneinander unterscheidet. Dabei finden wir im Inneren einen kleineren Wert für $\langle \rho^2 \rangle$ als außerhalb, wobei sich dieser Effekt beim Übergang in die Higgs-Phase der Theorie noch weiter verstärkt. Eine mögliche Erklärung

²²Vergleiche dazu auch die Untersuchungen in $D = 2 + 1$ zur Stabilität von elektroschwachen Strings, charakterisiert durch verschiedene Profilfunktionen $f_H(\rho)$ und $f_G(\rho)$ im Fall $T = 0$ [GQW09].

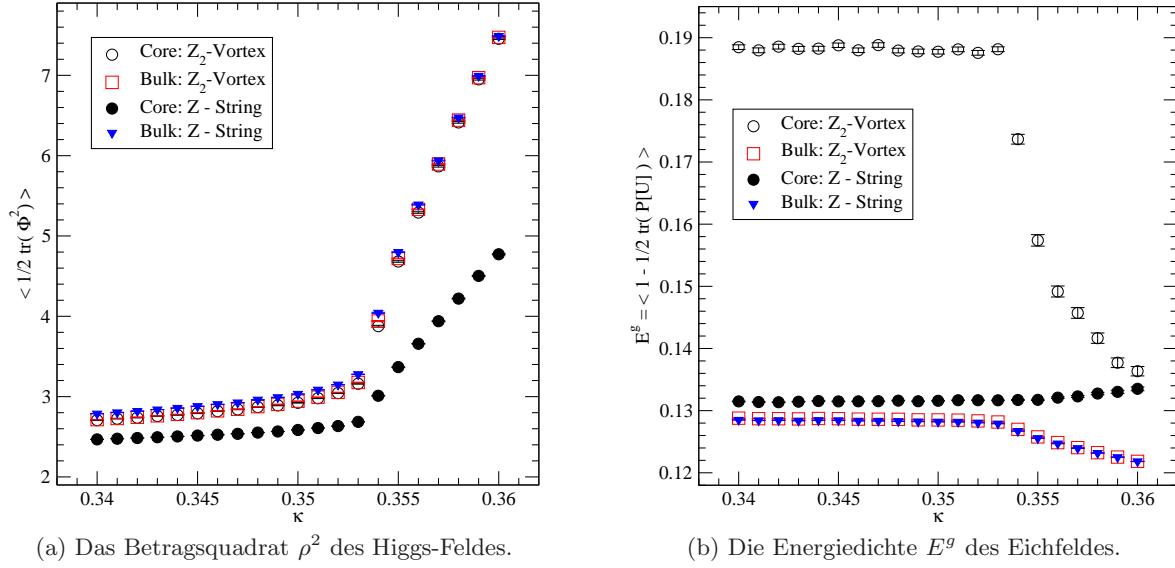


Abbildung 2.10: Das Verhalten des Higgs-Feldes und der Energiedichte des Eichfeldes in unmittelbarer Nähe (*Core*) und außerhalb (*Bulk*) des Zentrums der Z -Strings und \mathbb{Z}_2 -Vortices. Gitter: 20^3 , $\beta = 8$, $M_H^* = 100$ GeV.

dafür wurde in [CGIS98b] gegeben: Wie in Abbildung 2.8 zu sehen, nimmt die Dichte der Defekte oberhalb des *crossover* ab, was dazu führt, dass sich die Zentren der Z -Strings in dieser Phase weniger stark überlappen können und somit eine Unterscheidung zwischen Innen- und Außenbereich besser möglich wird. Außerdem wurde darauf hingewiesen, dass dem Absolutwert des Erwartungswertes von ρ^2 aufgrund von additiven Renormierungskorrekturen keine Bedeutung beigemessen werden kann, lediglich die Differenz zwischen den quantenmechanischen Mittelwerten des Betragsquadrates von $\phi(x)$ im Inneren und Äußeren der Z -Strings spielt für den Kontinuumslimes eine Rolle. Dass das Higgs-Feld von der Anwesenheit der Zentrumsvortices in den thermalisierten Konfigurationen praktisch keinerlei Notiz nimmt, ist nicht weiter verwunderlich, da sich das zur Fixierung der DMCG herangezogene Funktional (2.75) einzig und allein auf den Eichfeldsektor der Theorie bezieht. Folgerichtig zeigt sich der Einfluss der Zentrumsvortices auf die Verteilung der Energiedichte aber in diesem Sektor umso deutlicher. Aus Abbildung 2.10b geht hervor, dass in den Zentrumsvortices im Vergleich zur Umgebung eine deutliche Konzentration der Energie des Eichfeldes stattfindet. Vergleicht man jeweils die Differenz der Energiedichte im Innen- und Außenbereich von Zentrumsvortices und Z -Strings miteinander, so ist festzustellen, dass die in den Zentrumsvortices konzentrierte Energie des Eichfeldes in der symmetrischen Phase um mehr als eine Größenordnung höher liegt als im Fall der Z -Strings. Außerdem ist dabei zu beachten, dass in dieser Phase zusätzlich $\rho_{\mathbb{Z}_2}/\rho_{Z-\text{String}} < 10^{-1}$ (vgl. Abb. 2.8) gilt. Die Zentrumsvortices scheinen also gewissermaßen deutlich „kontrastreicher“ zu sein als die Z -Strings. Unterhalb der kritischen Temperatur tritt eine interessante Veränderung der Situation auf: Die Differenz der Energiedichte zwischen Core und Bulk nimmt im Falle der Zentrumsvortices ab, für die Z -Strings hingegen beobachten wir eine Zunahme derselben. Dies ist insofern erstaunlich, als dass die Abkühlung des (Gitter-) Universums wie in Abbildung 2.8 gezeigt in beiden Fällen von einer Abnahme der jeweiligen Dichte $\rho_{\mathbb{Z}_2}$ bzw. ρ_Z begleitet wird. Möglicherweise spielt

daher das *Profil* der beiden Arten von Strings eine wichtige Rolle bei der Erklärung dieses Verhaltens, da bei der Berechnung von $\rho_{\mathbb{Z}_2}$ bzw. ρ_Z ja nur der Kern der jeweiligen Vortices herangezogen wurde, diese aber vielleicht eine viel größere (radiale) Ausdehnung besitzen als angenommen und somit auch das Ergebnis der Berechnung der zugehörigen Bulk-Energie korrigiert werden muss. Des Weiteren ist durchaus vorstellbar, dass für $\kappa > 0.36$ noch eine Stabilisierung des (sinnvoll definierten) Energiegehalts der Defekte eintreten könnte, so dass sowohl Z -Strings als auch Zentrumsvortices eine Rolle bei der Beschreibung des Kosmos nach dem elektroschwachen Übergang in eine kältere Phase spielen könnten. Um zu einer Entscheidung über die physikalische Relevanz der mit den hier vorgestellten Methoden detektierten Defekte zu gelangen, muss letztlich überprüft werden, ob eine solche Energiedifferenz einen wohldefinierten Kontinuumslimes besitzt.

Zur Überprüfung dieser Thesen soll in einem ersten Schritt eine detaillierte Untersuchung der Profilfunktionen der (elementaren) Z -Strings und Zentrumsvortices durchgeführt werden. In [CIS00] wurden dazu Korrelationsfunktionen der Form

$$C_\rho(R) = \langle \sigma^2(\tilde{x}) \rho^2(\tilde{y}) \rangle, \quad C_E(R) = \langle \sigma^2(\tilde{x}) E^g(\tilde{y}) \rangle, \quad R = \|\tilde{x} - \tilde{y}\| \quad (2.78)$$

vorgeschlagen, die es gestatten, sogenannte „Quanten-Vortex-Profile“ der Z -Strings in der Nähe des elektroschwachen *crossover* zu messen. Dabei ist zu beachten, dass zum einen die Messwerte der in (2.77) definierten Operatoren $E^g(\tilde{y})$ und $\rho(\tilde{y})$ unabhängig von der Wahl einer bestimmten Eichung sind, zum anderen der von dem in Gleichung (2.72) definierte Defekt-Operator $\sigma(\tilde{x})$ längs einer jeden Trajektorie der linienartigen elementaren Defekte angenommene Wert eine Konstante ist. Zur Untersuchung der Profilfunktion der Zentrumsvortices greifen wir bei der Berechnung der Korrelatoren in Gleichung (2.78) für $\sigma(\tilde{x})$ auf den in Gleichung (2.27) definierten Operator zurück, dessen einziger nicht-trivialer Messwert (-1) sogar für jede mögliche Trajektorie identisch ist. Die dualen Plaquetten \tilde{x} und \tilde{y} sind Elemente derselben Ebene, die stets lokal orthogonal zur Richtung des untersuchten Segments eines String bzw. Vortex orientiert ist. Die Korrelationsfunktionen (2.78) messen also auf eichinvariante Weise die radiale Verteilung der Energie und des Modulus der Eich- und Higgs-Felder bezüglich eines Ursprungs, der im Fall der Zentrumsvortices durch Wahl der DMCG und anschließender Projektion auf die Zentrumsfelder lokalisiert wird, im Fall der Z -Strings sogar ohne Fixierung einer Eichung bestimmt werden kann. Die Profilfunktionen erhalten dabei sowohl Beiträge von Quantenfluktuationen, als auch von thermischen Fluktuationen, die sich besonders unterhalb der kritischen Temperatur bemerkbar machen.

Unsere Messergebnisse der Vortex-Profilfunktionen (2.78) für Z -Strings und \mathbb{Z}_2 -Vortices werden in Abbildung 2.11 miteinander verglichen. Im Fall von $C_\rho(R)$ (Abb. 2.11a) finden wir zum einen eine Bestätigung unserer Beobachtung, dass sich das Higgs-Feld als „blind“ gegenüber Zentrumsvortices erweist, und zwar unabhängig von der Realisierungsphase der Theorie. Zum anderen deutet der Verlauf von $C_\rho^Z(R)$ im Falle der Z -Strings darauf hin, dass deren Profil sich über einen Radius von mehreren Gitterkonstanten R_0 hin verändert, bevor der asymptotische Wert angenommen wird, der mit dem der *Bulk*-Messungen (vgl. Abb. 2.10a) übereinstimmt. Das Profil erfährt eine deutliche Veränderung beim Überqueren des *crossover*-Bereichs in Richtung abgekühlte Phase, so nimmt zum einen der mittlere Profilradius von $R_0 \simeq 3a$ ($\kappa=0.348$) auf $R_0 \simeq 5a$ ($\kappa=0.355$) zu, zum anderen vergrößert sich der Unterschied zwischen den Werten des Korrelators im Zentrum und weit davon entfernt. Es scheint jedenfalls so zu sein, als ob sich das Profil der (elementaren) Z -Strings über eine so große Fläche um den

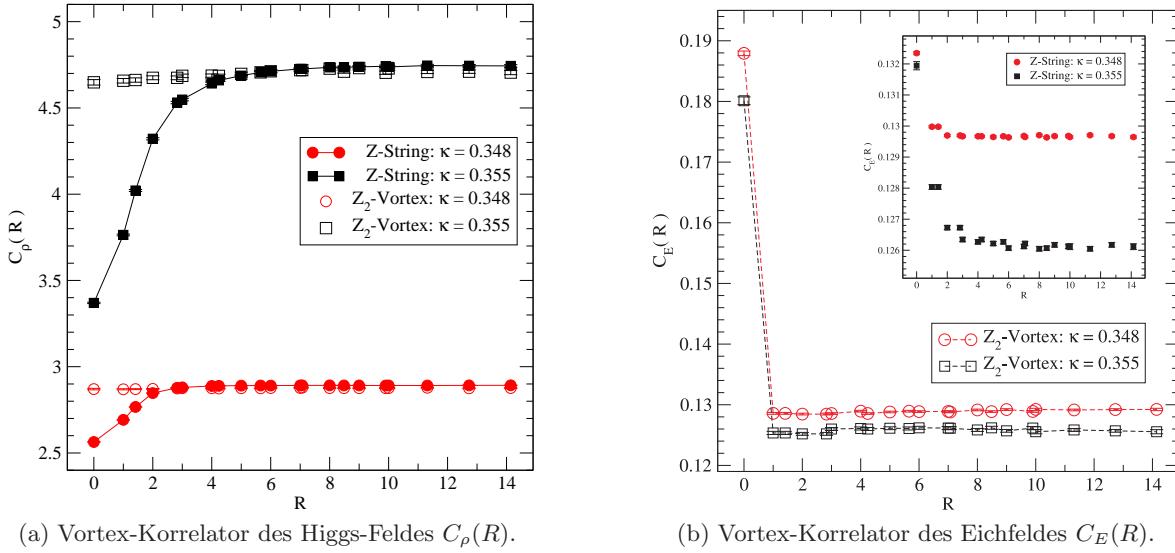


Abbildung 2.11: Die Vortex-Profile $C_\rho(R)$ und $C_E(R)$ oberhalb ($\kappa = 0.348$) und unterhalb ($\kappa = 0.355$) der crossover-Temperatur T_c . Gitter: 20^3 , $\beta = 8$, $M_H^* = 100$ GeV.

auf eichinvariante Weise (2.72) detektierten Kern herum erstreckt, als dass dies auch unter der Annahme der hier verwendeten relativ grobkörnigen Diskretisierung der dimensionale reduzierten Theorie noch nachweisbar ist. Im Gegensatz dazu finden wir für das Profil der durch Zentrumsprojektion in DMCG (2.75) definierten Vortices, dass $C_E^{\mathbb{Z}_2}(R)$ in Abbildung 2.11b bereits im Abstand $R_0 = a$ auf den asymptotisch konstanten Bulk-Wert abgefallen ist. Falls für $C_E^{\mathbb{Z}_2}(R)$ ein ähnliches Verhalten wie für $C_\rho^Z(R)$ beim Übergang in die Higgs-Phase gelten sollte, so scheint die hier verwendete Gitterkonstante jedenfalls noch zu groß zu sein, als dass es möglich wäre, ein etwaiges stetiges Abfallen von $C_E^{\mathbb{Z}_2}(R)$ über einen größeren Radius (in physikalischen Einheiten) als in der symmetrischen Phase feststellen zu können. Möglicherweise offenbart sich ein solches Verhalten also erst durch Simulationen bei kleineren Gitterkonstanten. Für die Z -Strings zeigt die Funktion $C_E^Z(R)$, eingebettet in Abbildung 2.11b, hingegen einen Verlauf, der zusammen mit $C_\rho^Z(R)$ an das Profil einer klassischen Vortex-Lösung erinnert: Die Energie des Eichfeldes nimmt im Zentrum ihr Maximum an – wobei gleichzeitig der Betrag des Higgs-Feldes ein Minimum aufweist – und fällt über eine charakteristische Länge R_0 mit zunehmendem Abstand vom Kern auf einen asymptotisch konstanten Wert ab, wobei gleichzeitig der Betrag des Higgs-Feldes über eine vergleichbare Skala hin anwächst.

Bevor wir uns mit der Frage beschäftigen können, ob sich für die Zentrumsvortices möglicherweise ein ähnlicher Profilverlauf wie für die Z -Strings bei einer sehr viel höheren Auflösung nachweisen lässt, muss zunächst geklärt werden, ob sich den hier untersuchten P -Vortices im Rahmen des elektroschwachen Standardmodells bei endlichen Temperaturen überhaupt eine physikalisch sinnvolle Bedeutung im Kontinuumslimes geben lässt. Bei der Untersuchung des Perkolationsverhaltens der Z -Strings im Kontinuumslimes des diskretisierten $SU(2)$ -Higgs-Modells hat sich nämlich gezeigt, dass es erforderlich ist, die Konstruktion von den elementaren Defekt-Operatoren der Form (2.72) und (2.71) auf sogenannte *ausgedehnte* Operatoren [CGIS98a] zu verallgemeinern, um zu einer Perkolationstemperatur zu gelangen, die sich

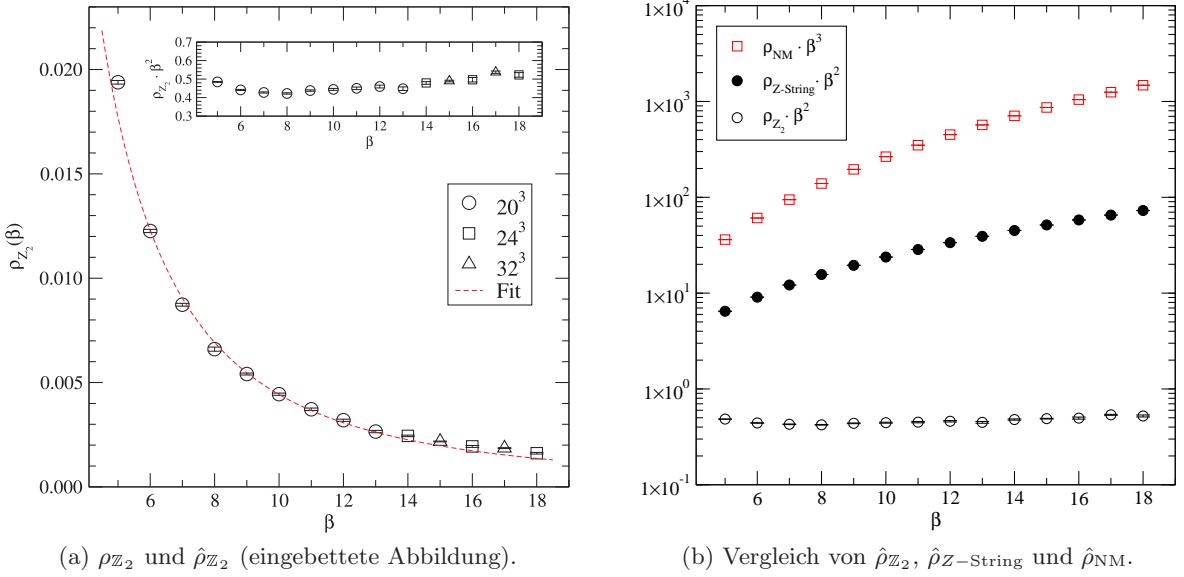


Abbildung 2.12: Das Skalierungsverhalten der Dichten von Zentrumsvortices, Z -Strings und Nambu-Monopolen im Kontinuumslimes der Theorie in der symmetrischen Phase. $\kappa = 0.335$, $M_H^* = 130$ GeV.

als annähernd stabil gegenüber einer Erhöhung des Auflösungsvermögens des Gitter ($\beta \rightarrow \infty$) erweist [CGIS98b].

Um zu entscheiden, ob sich die Definition der P -Vortices in ihrer elementaren Form im Kontinuumslimes als sinnvoll erweist, soll eine Untersuchung der Skalierungseigenschaften der zugehörigen Dichte ρ_{Z_2} längs der Linien konstanter Physik, wie in Kapitel 2.5.3 beschrieben, durchgeführt werden. Ausgehend von einem durch $\kappa = 0.335$ charakterisierten Punkt in der symmetrischen Phase der Theorie bei fester Temperatur (konstantem g_3^2) wurde für die Simulationsreihe eine Higgs-Masse von $M_H^* = 130$ GeV gewählt und die Kopplungskonstante β im Intervall [5, 18] variiert. Die Selbstkopplungskonstante λ des Higgs-Feldes wurde dabei jeweils gemäß (2.64) berechnet. Da zu erwarten ist, dass sich die endliche Größe des Gitters aufgrund der relativen hohen Higgs-Masse sehr viel deutlicher bemerkbar machen wird als im Fall einer Higgs-Masse, die das Auftreten eines Phasenübergangs erster Ordnung erlaubt, wurde die Gittergröße bei der Annäherung an den Kontinuumslimes schrittweise erhöht, um das physikalische Volumen annähernd konstant zu halten. Nach (2.64) gilt $\beta \propto a^{-1}$, folglich sollte die Anzahl der Gitterpunkte bei einer Verdopplung von β ebenfalls verdoppelt werden, um das zugrunde liegende physikalische Volumen fix zu halten²³. Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe 20^3 , 24^3 und 32^3 durchgeführt und umfassten jeweils 1000 Messungen.

Im Hauptteil der Abbildung 2.12a zeigen wir die Ergebnisse zur Messung der dimensionslosen Dichte ρ_{Z_2} der Zentrumsvortices im Kontinuumslimes. Da es sich dabei nach (2.76) um die mittlere Anzahl der Zentrumsvortices pro Einheitsfläche in Einheiten der Gitterkonstanten

²³Die Konstruktion der k -fach ausgedehnten Operatoren $\sigma_P^{(k)}$ und $j_c^{(k)}$ in [CGIS98a] basiert auf dieser Skalierungsvorschrift.

a handelt, sollte die in *physikalischen* Einheiten gemessene Dichte $\hat{\rho}_{\mathbb{Z}_2}$ die Dimension einer inversen Fläche ($[a^{-2}]$) besitzen, und folglich

$$\rho_{\mathbb{Z}_2}(\beta) = \hat{\rho}_{\mathbb{Z}_2} a^2(\beta) \quad (2.79)$$

gelten. Das Verhalten der Gitterkonstanten $a(\beta)$ als Funktion des Simulationsparameters β findet sich in Gleichung (2.64). Die gestrichelte Kurve stellt dabei einen *least- χ^2 -fit* der für $\beta \in [8, 18]$ gemessenen Datenpunkte an eine Funktion der Form

$$f(\beta) = A_0 \beta^{-2}, \quad A_0 = 0.44292, \quad \chi^2 = 3.31 \cdot 10^{-6} \quad (2.80)$$

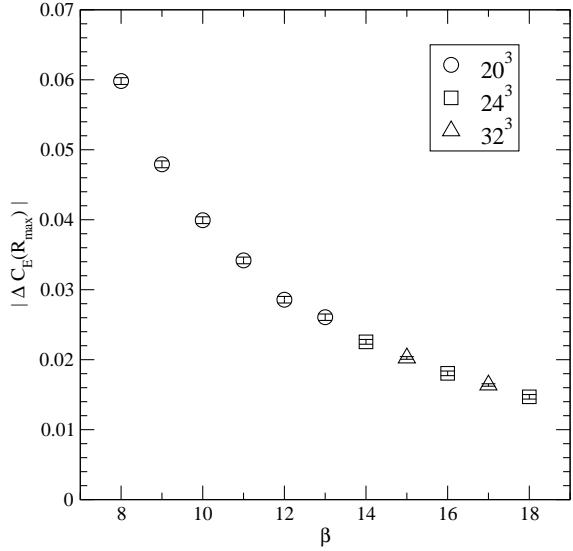
dar. Offensichtlich folgt die Dichte im Wesentlichen dem erwarteten Verlauf einer flächenhaften Größe längs der Linie konstanter Physik. Für die kleinsten Werte der untersuchten Gitterkonstanten ($\beta \geq 14$) kann das Auftreten von *finite-size*-Effekten in unseren Simulationen beobachtet werden: Wird die Anzahl N der Punkte des Gitters erhöht, so geht damit auch eine systematische Vergrößerung des Wertes von $\rho_{\mathbb{Z}_2}(\beta)$ einher. Obwohl dieser Effekt nicht allzu gravierend zu sein scheint, muss dennoch vermutet werden, dass zumindest die für $\beta < 14$ auf Gittern der Größe 20^3 erzielten Ergebnisse im thermodynamischen Limes noch merkliche Korrekturen erfahren werden. Umso erstaunlicher ist es, dass sich die Messdaten dabei so gut durch eine Funktion eines einzigen freien Parameters über das gesamte Intervall der inversen Kopplungskonstante beschreiben lassen. Eine komplementäre Sichtweise bietet die Messung der Dichte in natürlichen Einheiten ag_3^2 . Die Einbettung in Abbildung 2.12a zeigt dabei den mit β^2 multiplizierten Verlauf der Messdaten, was den Vorteil einer besseren Auflösung bietet und nach (2.79) einer Größe entspricht, die direkt proportional zur Dichte der Zentrumsvortices in physikalischen Einheiten $\hat{\rho}_{\mathbb{Z}_2}$ ist. Der Verlauf der Kurve gibt zum einen Grund zu der Annahme, dass die Zentrumsvortexdichte tatsächlich einen wohldefinierten Kontinuumslimes besitzen sollte, zum anderen wird hier auch nochmals deutlich, dass sich der tatsächliche Grenzwert vermutlich erst für Gitter $N > 32$ und $\beta > 18$ stabilisieren wird.

Neben $\rho_{\mathbb{Z}_2}$ wurden auch die beiden anderen in (2.76) definierten Dichten der elementaren Z -Strings und Monopole gemessen. In Abbildung 2.12b werden die auf physikalische Einheiten skalierten Größen $\rho_{Z\text{-String}} \beta^2 \propto \hat{\rho}_{Z\text{-String}}$ und $\rho_{NM} \beta^3 \propto \hat{\rho}_{NM}$ mit dem Verhalten der physikalischen Zentrumsvortexdichte $\hat{\rho}_{\mathbb{Z}_2}$ aus Abbildung 2.12a verglichen. Dabei zeigt sich ein gravierender Unterschied: Während sich $\rho_{\mathbb{Z}_2} \beta^2$ wie bereits gesehen annähernd konstant verhält, skalieren die Dichten der elementaren Z -Strings und Nambu-Monopole nicht mit der erwarteten Potenz zwei bzw. drei der Gitterkonstanten, wie es für physikalisch relevante Flächen- bzw. Volumendichten der Fall sein sollte, sondern scheinen im Kontinuumslimes zu divergieren.

Während sich also die elementaren Defekt-Operatoren im Fall der Z -Strings und Nambu-Monopole als ungeeignet für die Untersuchung der Gittertheorie im Kontinuumslimes erwiesen haben und durch zunehmend nicht-lokale Konstruktionen ersetzt werden müssen [CGIS98a], deuten unsere Ergebnisse zum Skalierungsverhalten von $\rho_{\mathbb{Z}_2}$ darauf hin, dass sich die Definition der elementaren P -Vortices als robust gegenüber einer Verfeinerung der Diskretisierung des Gittermodells erweist und die so detektierten Objekte durchaus eine physikalische Relevanz haben könnten. Daher scheint es sinnvoll zu sein, unter Verwendung der P -Vortex-Operatoren die bereits angesprochene Frage zu untersuchen, ob sich bei genauerer

Abbildung 2.13: Der Betrag der Differenz der Korrelationsfunktion $C_E(R)$ (2.78), berechnet im maximalem Abstand R_{\max} , sowie im Zentrum der \mathbb{Z}_2 -Vortices in der Hochtemperaturphase als Funktion der inversen Gitterkonstanten $\beta \sim a^{-1}$ für verschiedene Gittergrößen.

$$M_H^* = 130 \text{ GeV}, \kappa = 0.335.$$



Betrachtung auch eine Profilfunktion für die Zentrumsvortices messen lässt. Dazu wurde die Funktion $C_E(R)$ (2.78) längs der oben beschriebenen Linie konstanter Physik in der Hochtemperaturphase gemessen. Ein überraschendes Resultat war dabei, dass der Wert der Korrelationsfunktion $C_E(R)$ von einem Maximum am Ort des Kern in allen untersuchten Fällen bereits für $R = 1$ auf den asymptotischen Randwert abgefallen war. Dies legt die Interpretation nahe, dass sich die Gestalt der Zentrumsvortices in der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung bei endlichen Temperaturen signifikant von der Gestalt der Zentrumsvortices unterscheidet, die in der Theorie der starken Wechselwirkung für verschwindende Temperaturen eine Rolle spielen. Während in letzterer davon auszugehen ist, dass die P -Vortices nur als Indikator für den Ort des Kerns der räumlich weit ausgedehnten, dicken Vortices dienen, scheint es im Fall der elektroschwachen Theorie zumindest bei hohen Temperaturen in der symmetrischen Realisierungsphase so zu sein, als ob die Zentrumsvortices auf einen sehr klar begrenzten faser- oder schlauchförmigen Raumbereich beschränkt werden können, dessen Querschnittsfläche kleiner oder gleich der Fläche sein muss, die einer elementaren Plaquette der feinsten von uns untersuchten Rasterung des Gitters ($\beta = 18$) entspricht. Bis zu dieser maximal erreichbaren Auflösung konnte keine Abweichung von einem stufenförmigen Vortex-Profil nachgewiesen werden. Es bleibt die Frage zu klären, wie es sich mit dem „Kontrast“ der Zentrumsvortices im Kontinuumslimes verhält. Dazu wurde die Differenz

$$\Delta C_E(R_{\max}) = \|C_E(0) - C_E(R_{\max})\| \quad (2.81)$$

der Profilfunktionswerte am Ort des Vortex-Kerns und in maximaler Entfernung R_{\max} davon untersucht. Das Ergebnis ist in Abbildung 2.13 zu sehen. Dabei ist zu beobachten, dass die Differenz $\Delta C_E(R_{\max})$ über das gesamte untersuchte Intervall kontinuierlich abzunehmen scheint. Ob sich diese letztlich bei einem von Null verschiedenen asymptotischen Wert stabilisieren wird, oder ob im Kontinuumslimes anhand der Profilfunktion keine Unterscheidung mehr zwischen den Zentrumsvortices und der umgebenden Eichfeldkonfiguration möglich sein wird, lässt sich nicht mit Sicherheit sagen, zumal unsere Untersuchungsergebnisse zum Verhalten der Zentrumsvortexdichte im Kontinuumslimes gezeigt haben, dass der Einfluss der endlichen Größe des Gitters auf die Messergebnisse sicherlich noch nicht vernachlässigt werden kann und weitere Messungen im Bereich $\beta > 18$ durchgeführt werden müssen.

2.6 Zusammenfassung und Ausblick

Im vorliegenden Kapitel wurde die Rolle von Zentrumsvortices in der Theorie der starken und elektroschwachen Wechselwirkung bei endlichen Temperaturen studiert. Dabei konnte in einer Untersuchung der vierdimensionalen euklidischen $SU(2)$ -Eichtheorie mit dynamischem Skalarfeld in fundamentaler Darstellung nachgewiesen werden, dass sich das beobachtete Stringbreaking-Phänomen allein durch die Betrachtung von Zentrumsvortices als den relevanten Freiheitsgraden verstehen und beschreiben lässt. Die Beschreibung des Confinement-Phänomens als Resultat einer hinreichend zufällig flukutierenden Anzahl an Durchstoßpunkten von Zentrumsvortices durch eine von einer Wilson-Loop-Kontur berandeten Fläche im Rahmen des Random-Vortex-Modells hat die Konstruktion einer Observable motiviert, die es ermöglicht hat, die für das Auftreten eines Flächengesetzes für den Wilson-Loop-Operator notwendige Unkorreliertheit der Durchstoßpunkte in einer Ebene räumlich aufgelöst zu erfassen. Dadurch wurde es möglich, einen Punkt im Phasendiagramm zu bestimmen, an dem sich die Theorie gleichsam an der Schwelle zwischen zwei Realisierungsphasen, charakterisiert durch das Perkolationsverhalten der Zentrumsvortices, befindet. Das Studium des Potentials zwischen zwei externen statischen Farbladungen an diesem Punkt hat dabei einen starken Hinweis darauf geliefert, dass das Auftreten des Stringbreaking-Phänomens aufs Engste mit den Perkolationseigenschaften der Zentrumsvortices verknüpft sein sollte. Nach einem intermediären linearen Anstieg des Potentials mit zunehmendem Abstand der Quellen voneinander wurde eine plötzliche Veränderung zu einem asymptotisch konstanten Verlauf beobachtet, die bei einer Skala aufgetreten ist, die wir mit der mittleren gewichteten Größe der Cluster-Container identifizieren konnten. Innerhalb der Container liegt also gewissermaßen noch eine Realisierungsphase von perkolierenden Clustern vor, so dass eine Messung des statischen Potentials zwischen Farbladungen innerhalb der Wände eines solchen Containers den typischen Verlauf eines Confinement-Potentials zeigt. Außerhalb machen sich die zunehmenden Korrelationen zwischen den Durchstoßpunkten der Vortices in einer fest gewählten Ebene bemerkbar und man erhält ein Umfangsgesetz für den Erwartungswert eines in dieser Ebene positionierten Wilson-Loop-Operators, was zu dem beobachteten, praktisch konstanten Potentialverlauf im Außenbereich führt. Dieses Verhalten konnte im Infrarotbereich der Theorie allein durch die Untersuchung des Zentrumsanteils der Eichfelder in Direkter Maximaler Zentrums-Eichung (DMCG) reproduziert werden. Da anzunehmen ist, dass die von uns untersuchte Theorie wesentliche Eigenschaften der Quantenchromodynamik aufweist, können diese Ergebnisse als ein weiteres wichtiges Indiz für die Relevanz der Zentrumsvortices im Infrarotregime der Theorie der starken Wechselwirkung gedeutet werden.

Eine natürliche Fortsetzung der hier vorgestellten Untersuchungen bestünde zunächst darin, den Zusammenhang zwischen der Ausdehnung der perkolierenden Cluster und der String-breaking-Skala im Potential genauer zu untersuchen. Des Weiteren sind zumindest zweierlei Erweiterungsrichtungen des Projektes denkbar. Zum einen wäre es interessant, als nächstes Simulationen der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit dynamischen Fermionen statt eines Higgs-Feldes in fundamentaler Darstellung durchzuführen und die daraus resultierenden Unterschiede systematisch zu untersuchen. Zum anderen könnte zunächst der Materiefeld-Sektor unverändert bleiben, dafür aber die Eichgruppe auf den realistischeren Fall der $SU(3)$ für drei statt zwei verschiedener Farben der Quarks bzw. der skalaren Substitute verändert werden. Dies wäre insofern interessant, als die Untersuchung von Zentrumsvortices in der reinen $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie bisher zumindest in Bezug auf die Reproduzierbarkeit der

string tension der vollen Theorie im Vergleich zum Fall der $SU(2)$ noch keine vollständig überzeugenden Ergebnisse geliefert hat und es daher interessant wäre, den prinzipiellen Einfluss der skalaren Materie näher zu studieren. Zuletzt muss es natürlich das Ziel sein, das Stringbreaking-Phänomen im Vortex-Bild in der vollen vierdimensionalen $SU(3)$ -Eichtheorie mit realistischen dynamischen Fermionen zu studieren, um eine abschließende Aussage zur Relevanz der bisher sehr erfolgversprechenden Zentrumsvortices als kollektiven Freiheitsgraden machen zu können.

Im Rahmen der Untersuchungen zum elektroschwachen Standardmodell bei endlichen Temperaturen konnte festgestellt werden, dass eine sinnvolle Definition von Zentrumsvortices in der dimensional reduzierten Theorie mit Hilfe von lokalen Operatoren möglich ist, die es erlaubt, Objekte zu detektieren, deren Dichte sich als invariant unter Renormierungsgruppen-Transformationen erweist und daher einen wohldefinierten Kontinuumslimes besitzen sollte. Im Gegensatz zur Theorie der starken Wechselwirkung bei verschwindenden Temperaturen ist die in den Vortex-Freiheitsgraden lokalisierte Energie der Eichfeldkonfigurationen dabei auf einen räumlich sehr eng begrenzten Bereich eingeschränkt. Die in der Literatur berichtete topologische Signatur eines Deperkolationsübergangs der eingebetteten Z -Strings am elektroschwachen *crossover* konnte bestätigt werden und findet sich ebenfalls für die Zentrumsvortices wieder. Die Auflösung und Umstrukturierung eines weit verzweigten Netzwerkes von perkolierenden Zentrumsvortices, das noch bei hohen Temperaturen vorliegt, wird von einem Abfallen der Dichte in der kühleren Phase begleitet. Dieser Vorgang scheint langsamer abzulaufen, als es für die exponentiell geringer werdende Dichte der Z -Strings der Fall ist. Auch in Bezug auf die mittlere Größe der Cluster von Z -Strings und Zentrumsvortices in der Higgs-Phase konnte ein Unterschied festgestellt werden. Während unsere Daten mit den in der Literatur berichteten Beobachtungen zur Formierung von sehr kleinen Z -String-Loops und Nambu-Monopolium-Zuständen in hinreichend großer Entfernung vom Deperkolationspunkt in Einklang stehen, weisen unsere Ergebnisse im Fall der Zentrumsvortices darauf hin, dass sich die wenigen verbliebenen Vortices in Strukturen organisieren, die immer noch eine mittlere Ausdehnung von fast drei Vierteln des betrachteten (Gitter-) Universums besitzen und sich dieser Wert, wie auch die Dichte selbst, bei einer weiteren Abkühlung zu stabilisieren scheint. In derselben Untersuchung hat sich gezeigt, dass sich beim Studium von Profilfunktionen für die Z -Strings nach einer Mittelung über quantenmechanische und thermische Fluktuationen Anzeichen für die semi-klassische Natur dieser Objekte finden lassen. Im Vergleich dazu scheint das Auftreten von Zentrumsvortices in der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung das Higgs-Feld weder unter- noch oberhalb des *crossover* merklich zu beeinflussen, wohl aber sind die Zentrumsvortices in der Hochtemperaturphase anhand ihrer im Vergleich zu den Z -Strings deutlich höheren Energie als Inhomogenität im Eichfeldsektor sehr gut zu erkennen. Eine Untersuchung des Kontrastes im Kontinuumslimes hat dabei bisher kein eindeutiges Ergebnis geliefert. Die Durchführung einer solchen Untersuchung im Falle der Z -Strings würde die Verwendung von geblockten Vortizitäts-Defekt-Operatoren zwingend erforderlich machen, da gezeigt werden konnte, dass die Dichte der mittels elementarer Operatoren detektierten Z -Strings (und Nambu-Monopole) keinen Kontinuumslimes besitzt.

In diesem Zusammenhang wäre es interessant zu untersuchen, ob sich für den kritischen Wert κ_p des Deperkolationsübergangs im Kontinuumslimes derselbe Grenzwert bei der Verwendung von eichinvariant definierten, aber beliebig nicht-lokalen Operatoren als Ergebnis einer Blocking-Prozedur im Vergleich zur Verwendung der eichabhängigen, dafür aber lokalen

Zentrumsortex-Operatoren ergibt. Im Rahmen der in dieser ersten Untersuchung erreichten Genauigkeit scheint der Übergang jedenfalls in beiden Sektoren am selben Punkt im Phasendiagramm stattzufinden. Dies ist insofern interessant, als dass sich dadurch die Möglichkeit eröffnen könnte, ein neues Szenario zur Erklärung der Bayonenzahl-Asymmetrie auf Basis eines Deperkolationsübergangs entwerfen zu können, wobei die Rolle der Z -Strings nun von Zentrumsvortices eingenommen würde. Obwohl der Einfluss der $U(1)_Y$ auf die Stärke des elektroschwachen Phasenübergangs nur eine geringe Auswirkung hat, erscheint es dennoch lohnenswert, diese abelsche Gruppe in zukünftigen Untersuchungen der dimensional reduzierten $SU(2)$ -Higgs-Theorie mit zu berücksichtigen, um ein noch realistischeres Bild von der Natur des elektroschwachen *crossover* gewinnen zu können. Insbesondere wäre es interessant zu untersuchen, welchen Effekt die zusätzlich durch Mischung der beiden abelschen Anteile der elektroschwachen Eichgruppe auftretenden W -Strings auf die Zentrumsortexstruktur in dieser Theorie haben.

Kapitel 3

Ising-Spin-Gläser versus QCD bei endlichen Temperaturen

3.1 Einleitung

Spingläser sind magnetische Materialien, die sich als statistische Systeme mit einer ausgeprägten magnetischen Frustration charakterisieren lassen, welche entweder geometrischer Natur sein kann, oder auf ein konkurrierendes Verhalten von ferromagnetischen und anti-ferromagnetischen Wechselwirkungen der magnetischen Momente innerhalb eines Festkörpers zurückzuführen ist [BY86]. Während im ersten Fall die Struktur des Kristallgitters die entscheidende Rolle spielt¹, handelt es sich im zweiten Fall hauptsächlich um die Auswirkungen stochastischer Unordnung, wie sie in Form von zufälligen Dotierungen in Legierungen auftreten können. Die Frustration eines solchen Systems äußert sich also darin, dass es i.A. unmöglich ist, die Grundzustandskonfiguration der Spins in einem solchen Kristallgitter zu bestimmen, indem man sich ausschließlich auf die Auswirkungen lokaler Änderungen einzelner Spins konzentriert. Die Fluktuationen eines einzelnen Spins können mit anderen Worten die Umordnung eines Großteils der Spins des Gitters hervorrufen, während sich das System einem neuen energetischen Minimum annähert [AR98]. Die Folge ist, dass dieser Vorgang auf vielen verschiedenen Zeitskalen abläuft und insbesondere bei niedrigen Temperaturen davon auszugehen ist, dass sich der Weg ins thermische Gleichgewicht als extrem lang erweisen und über eine Reihe von metastabilen Zuständen führen wird. Bei hohen Temperaturen verhalten sich diese Systeme ähnlich wie paramagnetische Materialien. Wird die Temperatur abgesenkt, so tritt irgendwann ein Übergang in die sogenannte Spin-Glas-Phase auf, in der sich Domänen gleich orientierter Spins ausbilden, die den geordneten Zustand repräsentieren.

Seit der Einführung des zweidimensionalen Prototyps durch Edwards und Anderson [EA75] im Jahr 1975 wurden diverse Modifizierungen dieses Modells hinsichtlich ihrer Grundzustandseigenschaften mittels Monte-Carlo-Simulationen untersucht [MB79, MB80, MY82, OM85, HM85, RSB⁺96, MSKS97]. Neben der Erweiterung auf eine realistischere kubische Geometrie des Gitters wurde auch die Dimensionalität der Spin-Variablen erhöht und außer den Ising-Spins ($n=1$) auch XY -Modelle ($n=2$) und Heisenberg-Magnete ($n=3$) mit den unterschiedlichsten Arten und Verteilungen von Bindungen zwischen den Spins untersucht.

¹Ein klassisches Beispiel ist das von Wannier studierte planare Ising-Modell mit ausschließlich anti-ferromagnetischen Bindungen auf einem triangulären Gitter [Wan50].

Für alle drei Modelle konnte dabei gezeigt werden, dass sie einen Übergang in die Spin-Glas-Phase bei einer endlichen kritischen Temperatur $T_c > 0$ aufweisen, sofern die Bindungen zwischen den magnetischen Momenten an benachbarten Gitterplätzen einer Normalverteilung entstammen [BCF⁺00, LY03]. Auf einem $d = 2$ dimensionalnen Gitter hingegen kann es unter der Annahme einer solche Verteilung keinen Phasenübergang oberhalb von $T_c = 0$ geben, die untere kritische Dimension wurde zu $d_c > 2$ bestimmt [RSB⁺96]. Der Grundzustand am Temperaturnullpunkt erweist sich dabei als eindeutig. Anders sieht die Situation im Falle einer bimodalen Verteilung der Bindungen aus. In diesem generischen Modell nimmt die Wechselwirkung zwischen benachbarten magnetischen Momenten mit gleicher Wahrscheinlichkeit einen der diskreten Werte $\pm J$ an und der Grundzustand ist entartet [LGM⁺04]. Es war lange Zeit unklar, ob der Übergang in die Spin-Glas-Phase bei einer endlichen kritischen Temperatur stattfindet oder nicht [SM97, Hou01], bevor Hartmann und Young [HY01] letztlich zeigen konnten, dass eine geordnete Phase ebenfalls nur am Temperaturnullpunkt stabil ist. Die Theorie zeigt jedoch marginales Verhalten ($d_c = 2$) und eine sorgfältige Messung der kritischen Exponenten hat ergeben, dass die beiden Modelle für $T_c = 0$ in unterschiedliche Universalitätsklassen fallen. Eine entsprechende Untersuchung bei niedrigen, aber von Null verschiedenen Temperaturen hat erste Hinweise darauf geliefert [JLMM06], dass beide Modelle für endliche Temperaturen zu derselben Universalitätsklasse gehören könnten, wobei in einer nachfolgenden Untersuchung [KLC07] jedoch festgestellt wurde, dass zur Bestätigung dieser Hypothese weitere Simulationen auf deutlich größeren Gittern durchgeführt werden müssten.

Eine nahe liegende Verallgemeinerung dieses generischen bimodalen $\pm J$ -Modells besteht darin, die Wahrscheinlichkeit κ , mit der eine anti-ferromagnetische Wechselwirkung ($-J$) für eine bestimmte Bindung innerhalb des Gitters auftritt, zu verändern. Dies beschreibt beispielsweise eine Änderung des Mischungsverhältnisses zweier Komponenten einer Legierung. Folglich ist es aus experimenteller Sicht nahe liegend und durchaus sinnvoll, ein bestimmtes Spin-Glas durch das Verhältnis κ von anti-ferromagnetischen zur Gesamtzahl aller Bindungen innerhalb einer solchen Probe zu charakterisieren. Tatsächlich wird κ üblicherweise auch in numerischen Simulationen als der geeignete Parameter zur Messung der Frustration innerhalb einer bestimmten Realisierung oder *Instanz* des Modells herangezogen. Die Bindungen werden dabei als *quenched variables* aufgefasst, d.h. jede Instanz ist durch eine feste (räumliche) Verteilung der Bindungen gegeben und bezüglich dieses Hintergrunds, der durch einen bestimmten Wert von κ charakterisiert werden kann, wird dann die Thermodynamik der Spin-Variablen untersucht. Die Berechnung von statistischen Mittelwerten interessierender Observablen geschieht dabei in zwei Schritten. Zum einen wird ein *thermisches Mittel* $\langle \dots \rangle$ bezüglich einer festen Instanz berechnet, zum anderen ist über die verschiedensten Realisierungen der *Unordnung* im Gitter $[\dots]_{\text{av}}$ zu mitteln. Dies entspricht der Untersuchung verschiedener Proben eines Materials, das durch ein festes Verhältnis von ferromagnetischen zu anti-ferromagnetischen Bindungen charakterisiert ist, deren räumliche Anordnung innerhalb des Festkörpers sich aber von Instanz zu Instanz stark unterscheiden kann. Die Grenzfälle $\kappa = 0$ sowie $\kappa = 1$ entsprechen dabei einem rein ferromagnetischen bzw. anti-ferromagnetischen Ising-Modell. In beiden Fällen kann der Grundzustand exakt berechnet werden und weder der Ferromagnet, dessen Grundzustand einer Konfiguration von parallelen Spins entspricht, noch der Anti-Ferromagnet mit einer schachbrettartigen Grundzustandskonfiguration zeigen Anzeichen für das typische Verhalten eines Spin-Glasses. Aus diesem Grund gelten Instanzen mit $\kappa \approx 0.5$ üblicherweise als besonders schwierig zu handhaben, da man bei der Untersuchung dieser

„echten“ Spin-Gläser besonders häufig mit dem bereits diskutierten nicht-lokalen Verhalten des Modells konfrontiert wird.

Neben der üblichen Charakterisierung durch den Parameter κ gibt es noch eine alternative Möglichkeit, die verschiedenen Instanzen eines frustrierten Ising-Modells zu klassifizieren. Diese beruht auf einer Entdeckung, die zuerst von Bieche *et al.* [LBR80] berichtet wurde und anschließend von Nishimori *et al.* [Nis81, NS83] in erweiterter Form dazu genutzt werden konnte, exakte Resultate bei der Untersuchung des Modells für spezielle Werte der Temperatur und Dotierung zu gewinnen: Da das bimodale Ising-Modell eine („versteckte“) \mathbb{Z}_2 -Eichsymmetrie besitzt, kann sich bei einer entsprechenden Transformation der Spin- und Bindungsvariablen eine dramatische Änderung sowohl in der Anordnung, als auch insbesondere in der Anzahl der anti-ferromagnetischen Bindungen innerhalb des Gitters ergeben, ohne dass sich bestimmte Observablen wie beispielsweise die thermische Energie oder die spezifische Wärme des Systems ändern würden, da diese Größen eichinvariant sind. Folglich können verschiedene Instanzen zu ganz unterschiedlichen Werten von κ genau dieselben physikalischen Eigenschaften aufweisen, weshalb eine alternative Klassifizierung wünschenswert erscheint, welche diese thermodynamischen Gemeinsamkeiten betont.

Das Ziel der vorliegenden Untersuchung ist es, die Konsequenzen dieser \mathbb{Z}_2 -Eichsymmetrie des Modells zunächst in $d = 2$ Dimensionen näher zu untersuchen. Zur Quantifizierung der Frustration des bimodalen Ising-Modells wird dazu eine eichinvariante Kenngröße vorgeschlagen. Dabei handelt es sich um die Vortex-Dichte ρ , d.h. den Bruchteil nicht-trivialer Plaquetten innerhalb einer festen Instanz, die uns bereits im vorigen Kapitel bei der Behandlung einer zentrumsprojizierten Eichtheorie begegnet ist. Zunächst bestimmen wir die exakte Energie des Grundzustands im Rahmen des alternativen Klassifizierungsschemas als Funktion des Parameters ρ , wobei ein sogenannter *minimum-weight perfect matching* Algorithmus zum Einsatz kommt. Anschließend wenden wir uns der Untersuchung des frustrierten Ising-Modells bei endlichen Temperaturen in der Nähe des (pseudo-) kritischen Punktes β_c mit den Methoden der Monte-Carlo-Simulation zu. Es wird gezeigt, dass der von Kessler und Bretz [KB90] vorgeschlagene Algorithmus tatsächlich in der Lage ist, Cluster von Spins auf eichinvariante Weise zu konstruieren und zur Aktualisierung vorzuschlagen. Dies stellt eine der Grundvoraussetzungen für die erfolgreiche Anwendbarkeit derartiger Algorithmen auf Spin-Glas-Probleme dar, da die physikalisch relevanten Observablen eichinvariant und folglich Funktionen von ρ sind. Als erste Anwendung untersuchen wir das Verhalten der spezifischen Wärme bei einer Veränderung der Frustration des Systems und verifizieren die Unabhängigkeit der Ergebnisse von einer speziellen Wahl der Eichung.

Als weitere Anwendung untersuchen wir das Verhalten der Quantenchromodynamik in ihrer dimensional reduzierten Form in der Nähe der kritischen Temperatur T_c . Das Modell besitzt eine globale \mathbb{Z}_2 -Symmetrie, was die Einführung zusätzlicher Freiheitsgrade im Skalarfeldsektor der Theorie motiviert und eine Abbildung derselben auf ein dreidimensionales Ising-Spin-Glas mit dynamisch generierten Bindungen ermöglicht, das mittels einer Erweiterung des bereits diskutierten Cluster-Algorithmus auf den Fall $d = 3$ in der Nähe des Phasenübergangs simuliert werden kann. Eine Analyse der Autokorrelationszeiten verschiedener Observablen runden die Untersuchungen zur Effizienz des Cluster-Algorithmus im Kontext nicht-abelscher Eichtheorien mit Skalarfeldern in adjungierter Darstellung ab.

3.2 Die eichinvariante Klassifizierung von Ising-Spin-Gläsern durch Vortices

Die Zustandssumme des zu untersuchenden frustrierten Ising-Modells in d Dimensionen ist durch

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}[U, \sigma]) = \sum_{\{\sigma_x\}} \exp\left(\beta \sum_{\ell=\langle xy\rangle} U_\ell \sigma_x \sigma_y\right) \quad (3.1)$$

gegeben, wobei die Spins $\sigma_x \in \{-1, +1\}$ in einem d -dimensionalen Gitter angeordnet sind und nur in Wechselwirkung mit ihren nächsten Nachbarn stehen sollen. Im Exponenten wird dabei über alle diese mit $\ell = \langle xy \rangle$ bezeichneten Verbindungen zwischen benachbarten Gitterplätzen x und y summiert. Die Frustration des Modells, die sich für verschwindende Temperaturen ($\beta \rightarrow \infty$) bemerkbar macht, röhrt daher, dass sowohl ferromagnetische ($U_\ell > 0$) als auch anti-ferromagnetische ($U_\ell < 0$) Wechselwirkungen zwischen den Spins des Gitters auftreten können. Im Folgenden untersuchen wir ein Modell mit bimodaler Verteilung der sogenannten *Bonds* $U_\ell \in \{-1, +1\}$, welche üblicherweise durch den Parameter $\kappa \in [0, 1]$ charakterisiert wird, der den Bruchteil der anti-ferromagnetischen Bonds des Gitters angibt. Dabei legen wir den Fall offener Randbedingungen zugrunde und beschränken uns zunächst auf ein planares Gitter.

In der Einleitung wurde bereits erwähnt, dass schon früh die Möglichkeit erkannt wurde, dass Bond-Verteilungen zu ganz unterschiedlichen Werten von κ dennoch dieselben thermodynamischen Eigenschaften aufweisen sollten [LBR80, Nis81, NS83]. Der Grund dafür liegt in der besagten \mathbb{Z}_2 -Eichsymmetrie des Modells, denn sowohl die Zustandssumme (3.1), als auch Observablen wie beispielsweise die innere Energie oder die Wärmekapazität, die sich als (logarithmische) Ableitungen von \mathcal{Z} ergeben,

$$\langle E(\beta) \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z} = -\left\langle \sum_{\ell=\langle xy\rangle} \sigma_x U_\ell \sigma_y \right\rangle, \quad (3.2)$$

$$C_V(\beta) = \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \mathcal{Z} = \frac{1}{N} \left[\langle E^2(\beta) \rangle - \langle E(\beta) \rangle^2 \right], \quad (3.3)$$

sind *invariant* unter den folgenden Eichtransformationen $\Omega_x \in \mathbb{Z}_2$ der Spin- und Bond-Variablen:

$$\sigma_x^\Omega = \Omega_x \sigma_x \quad (3.4)$$

$$U_{\langle xy \rangle}^\Omega = \Omega_x U_{\langle xy \rangle} \Omega_y^{-1}. \quad (3.5)$$

Betrachten wir eine bestimmte Konfiguration von Spins $\{\sigma_x\}$ auf einer bestimmten *Instanz* eines Spin-Glases, die durch die Verteilung der Bonds $\{U_\ell\}$ bestimmt wird. Führt man nun eine Eichtransformation durch, so resultiert daraus eine neue Konfiguration von Spins $\{\sigma'_x\}$, die auf einer *anderen* Instanz $\{U'_\ell\}$ des Spin-Glases definiert ist, wobei die alten und neuen Spin- und Bondverteilungen gerade in einer solchen Weise aufeinander abgebildet werden, dass sich die beiden Zustände in thermodynamischer Hinsicht nicht unterscheiden. Wohl aber unterscheiden sich die Verteilungen der ferro- und anti-ferromagnetischen Bindungen innerhalb der beiden Instanzen, so dass sich der Wert von κ durch Eichtransformationen also drastisch ändern kann, obwohl die thermodynamischen Observablen und somit die Physik unbeeinflusst bleiben.

Eine Möglichkeit zur eichinvarianten Klassifizierung der Frustration einer Instanz eines Ising-Spin-Glases besteht darin, eine Anleihe bei der Identifizierung von Zentrumsvortices in einer \mathbb{Z}_2 -projizierten $SU(2)$ -Eichtheorie (Kapitel 2.3) zu nehmen. Dazu definieren wir Plaquetten-Variablen auf dem dualen Gitter

$$P[U](\tilde{x}) = \prod_{\ell \in \tilde{x}} U_\ell , \quad (3.6)$$

die für die vorgegebene Verteilung der Bonds einer bestimmten Instanz berechnet werden. Die Plaquette $P(\tilde{x})$ entspricht dabei der in Gleichung (2.26) definierten Plaquette. Ein nicht-trivialer Wert $P(\tilde{x}) = -1$ signalisiert eine nicht-triviale duale Feldstärke, diese Plaquette wird bekanntermaßen als von einem \mathbb{Z}_2 -Vortex durchstoßen bezeichnet. Da wir offene Randbedingungen verwenden, ist eine vorgegebene Verteilung der Bonds $\{U_\ell\}$ durch die Kenntnis aller dualen Plaquetten – bis auf \mathbb{Z}_2 -Eichtransformationen – vollständig rekonstruierbar². Folglich ist eine Kategorisierung aller Instanzen eines Ising-Spin-Glases in Äquivalenzklassen möglich, die durch die Verteilung der Vortices eindeutig bestimmt sind. Die einfachste Möglichkeit besteht dabei darin, alle Instanzen zu einer festen *Anzahl* an Vortices, unabhängig von ihrer *Position* auf dem dualen Gitter, zu einer Äquivalenzklasse zusammenzufassen, da jede der so definierten Äquivalenzklassen durch einen einzigen, eichinvarianten Parameter charakterisiert wird. Um darüber hinaus die Komplexität des Problems charakterisieren zu können, ohne jeweils auf die Größe des zugrunde liegenden Gitters Bezug nehmen zu müssen, führen wir die *Vortex-Dichte*

$$\rho = \frac{N_V}{(L_1 - 1) \cdot (L_2 - 1)} \quad (3.7)$$

ein, wobei N_V die Anzahl der Vortices bezeichnet und $(L_1 - 1)(L_2 - 1)$ die Gesamtzahl aller Plaquetten eines zweidimensionalen Gitters der Dimension $L_1 \times L_2$ mit offenen Randbedingungen ist. Dadurch wird es möglich, eine Vielzahl von auf den ersten Blick gänzlich voneinander verschiedenen Instanzen mit höchst unterschiedlicher Anzahl von anti-ferromagnetischen Bonds einheitlich zu behandeln. Eine Illustration findet sich in Abbildung 3.1. Alle drei Instanzen sind durch $\rho = 0$ charakterisiert und eichäquivalent zu einem reinen Ferromagneten.

Wie bereits in der Einleitung diskutiert, erfordert die Berechnung des Erwartungswerts einer Observable \mathcal{O} auch die Mittelung über die herrschende Unordnung des Systems, die primär durch die Verteilung der Bonds charakterisiert ist:

$$[\langle \mathcal{O} \rangle]_{\text{av}} = \mathcal{N}^{-1} \sum_{\{U\}} \mathcal{Z}^{-1} \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O}[U, \sigma] \exp(-\beta \mathcal{H}[U, \sigma]) . \quad (3.8)$$

Dies bedeutet in unserem Fall, eine Mittelung über ein Ensemble von Instanzen zu einem festen Wert von ρ vorzunehmen. Zu beachten ist dabei, dass die beiden Instanzen (a) und (b) in Abbildung 3.1 im Rahmen des konventionellen Klassifizierungsschemas bei der Untersuchung des generischen $\pm J$ -Modells als unterschiedliche Realisierungen von Unordnung gewertet und bei der Berechnung von (3.8) berücksichtigt werden müssten. Umgekehrt besteht

²Für periodische Randbedingungen ist dies nicht der Fall, da auch eichinvariante Wilson-Loops mit einer von Null verschiedenen Windungszahl die Verteilung der negativen Bonds charakterisieren. Wird eine Quantenfeldtheorie betrachtet, so bezeichnet man üblicherweise einen über die zeitliche Richtung der zugehörigen Mannigfaltigkeit geschlossenen Wilson-Loop als *Polyakov-Loop*, für das hier vorliegende statistische System enfällt die Unterscheidung von zeitlicher und räumlicher Dimension, weshalb wir jeden über periodische Grenzen hinweg geschlossenen Loop als Polyakov-Loop bezeichnen wollen.

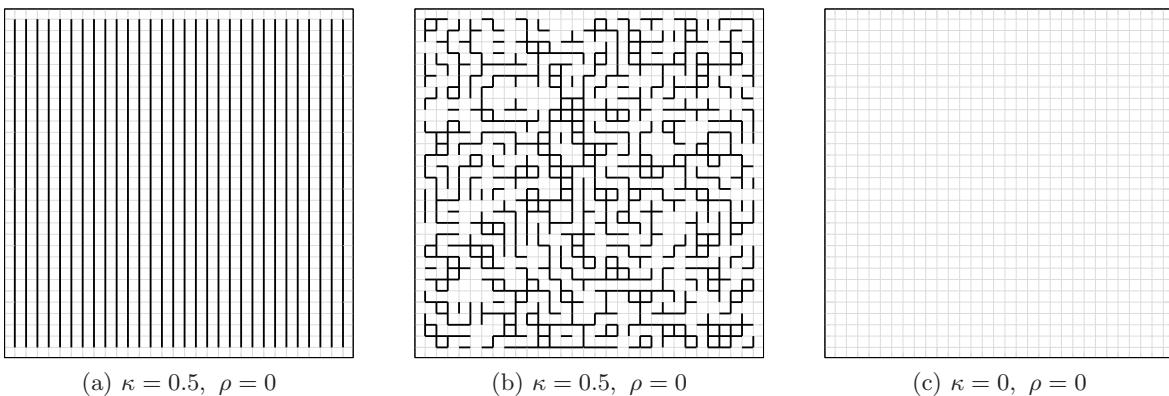


Abbildung 3.1: Drei verschiedene Instanzen eines planaren 30×30 -Spin-Glasses zu $\rho = 0$. Die Verteilung der Bindungen in (a) und (b) ergeben sich als unterschiedliche Eichtransformationen (3.5) eines reinen Ferromagneten (c).

das Ensemble zu $\kappa = 0.5$ auch aus einer Vielzahl von *eichinäquivalenten* Konfigurationen zu gänzlich verschiedenen Werten von ρ . Die Verwendung von κ oder ρ zur Charakterisierung der Frustration bringt daher gewissermaßen komplementäre Sichtweisen auf das Ising-Spin-Glas zum Ausdruck.

3.2.1 Der Grundzustand in Landau-Eichung

Der Entartungsgrad des Grundzustands hängt wesentlich von der Art der Wechselwirkung ab, die zwischen den Spins eines frustrierten Ising-Modells herrscht. Während der Grundzustand eines Spin-Glases mit Gaußscher Verteilung der Bonds (Mittelwert 0, Breite 1) eindeutig ist, erweist sich dieser im Falle einer bimodalen Verteilung i.A. als hochgradig entartet [AP07]. Aufgrund der Eichinvarianz lässt sich jedoch zeigen, dass sich unter all diesen möglichen Grundzuständen eines $\pm J$ -Modells³ immer die durch eine parallele Ausrichtung aller Spins des Gitters charakterisierte Konfiguration finden lässt, sofern unter allen eichäquivalenten Instanzen diejenige mit der minimalen Anzahl an anti-ferromagnetischen Bonds ausgewählt wird. Dies entspricht der Bedingung

$$\mathcal{F}[U^\Omega] = \sum_{\ell=\langle xy \rangle} U_\ell^\Omega \xrightarrow{\Omega} \max . \quad (3.9)$$

Bei $\mathcal{F}[U^\Omega]$ handelt es sich dabei gerade um das eichfixierende Funktional der Landau-Eichung in einer \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie⁴.

Zum Beweis der Behauptung nehmen wir an, eine vorgegebene Bond-Verteilung $\{U_\ell\}$ sei gemäß (3.5) in eine Verteilung $\{U_\ell^\Omega\}$ transformiert worden, welche der Bedingung (3.9) genüge. Dann stellt die Energie der Spin-Verteilung $\{\sigma^0\}$, in der alle Spins parallel zueinander ausgerichtet sind ($\sigma_x^0 \cdot \sigma_y^0 = 1, \forall x, y$), eine untere Schranke für die Energie einer

³Eine Reskalierung der Temperatur führt auf den hier betrachteten Fall $J \in \{-1, +1\}$.

⁴Vergleiche dazu die Diskussion der iterativen Fixierung der Landau-Eichung in Anhang C.

beliebigen Spin-Konfiguration $\{\sigma_x\}$ in der Instanz $\{U_\ell^\Omega\}$ dar:

$$\begin{aligned} E[\sigma] &= - \sum_{\ell=\langle xy \rangle} \sigma_x U_\ell^{\Omega_L} \sigma_y = - \sum_{\ell=\langle xy \rangle} U_\ell^{\sigma \cdot \Omega_L} \\ &\geq - \sum_{\ell=\langle xy \rangle} U_\ell^{\Omega_L} = - \sum_{\ell=\langle xy \rangle} \sigma_x^0 U_\ell^{\Omega_L} \sigma_y^0 = E[\sigma^0]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dabei wurde benutzt, dass im Fall einer \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie $\Omega_x^{-1} = \Omega_x$ gilt. Folglich handelt es sich wegen $E[\sigma] \geq E[\sigma^0]$ bei dem uniformen Zustand $\{\sigma^0\}$ tatsächlich um einen Grundzustand des frustrierten (bimodalen) Ising-Modells in zwei Dimensionen. Aufgrund der residuellen, ungebrochenen globalen \mathbb{Z}_2 -Symmetrie, welche die Theorie in Landau-Eichung (3.9) noch aufweist, ist der Grundzustand zumindest zweifach entartet. Falls mehrere Eichtransformationen $\{\Omega_x\}$ existieren, die alle das eichfixierende Funktional maximieren und nicht durch eine triviale globale Transformation ($\Omega_x \mapsto -\Omega_x, \forall x$) auseinander hervorgehen, führt dies auf einen Entartungsgrad des Grundzustands, der sich als zweimal der Anzahl dieser unterschiedlichen Transformationen berechnet.

3.2.2 Die Energie des Grundzustands

Die exakte Bestimmung des Grundzustands eines Spin-Glases in $d > 2$ Dimensionen gehört zur Klasse der NP-schweren Probleme [Bar82, PS82, Dev02]. Sofern externe Magnetfelder eine Rolle spielen, gilt dies sogar für planare Systeme, was die Untersuchung von großen Gittern selbst für $d = 2$ extrem aufwendig macht, da für Probleme aus dieser Klasse keine Algorithmen bekannt sind, deren Laufzeiten t_e wie $t_e \propto L^n$ skalieren. Erstaunlicherweise kann aber ein zweidimensionales Spin-Glas-Problem ohne externe Felder auf ein sogenanntes *least-weight minimal matching problem* abgebildet werden, das eine graphentheoretische Lösung in polynomialer Zeit erlaubt. Werden offene Randbedingungen in beiden Richtungen des Gitters zugrunde gelegt, bietet sich dazu der von Edmonds [Edm65a, Edm65b] vorgeschlagene Algorithmus an. Problemstellungen mit gemischten Randbedingungen können ebenfalls in polynomialer Zeit gelöst werden [LBR80], was sich als wichtig erweist, wenn zu klären ist, ob eine bestimmte Art von Wechselwirkung zwischen den Spins das Auftreten einer stabilen Spin-Glas-Phase bei endlichen Temperaturen erlaubt⁵. Der Grundgedanke all dieser Algorithmen besteht darin, nicht-triviale Plaquette des Gitters paarweise auf eine solche Art miteinander zu verbinden, dass die Summe der zugehörigen (gewichteten) Verbindungswege minimiert wird und keine der Vortices bei diesem Abgleich unberücksichtigt bleiben. Genau diese Idee, welche nochmals den Aspekt der Eichinvarianz des Problems in den Vordergrund rückt, wird es uns auch erlauben, unsere numerischen Ergebnisse zur Energie des Grundzustands als Funktion des neuen Komplexitätspараметers ρ auf natürliche Weise zu deuten.

Im vorigen Kapitel wurde gezeigt, dass die Eichinvarianz des Systems dazu genutzt werden kann, eine vorgegebene Instanz $\{U_\ell\}$ des frustrierten Ising-Modell gemäß Gleichung (3.5) in eine Instanz $\{U_\ell^{\Omega_L}\}$ zu transformieren, für welche die Anzahl an anti-ferromagnetischen Bindungen N_A minimal ist. Die Abschätzung (3.10) hat weiterhin gezeigt, dass der Zustand $\{\sigma^0\}$ (ebenso wie auch $\{-\sigma^0\}$) ein Grundzustand des Spin-Glas-Gitters in Landau-Eichung (3.9) ist. Folglich lässt sich die Energie des Grundzustands in dieser Eichung direkt als Differenz

⁵Siehe beispielsweise [HY01] und Referenzen darin.

von N_A und der Anzahl ferromagnetischer Bindungen N_F berechnen:

$$\begin{aligned} E_0 &= - \sum_{\langle xy \rangle} \sigma_x^0 U_{\langle xy \rangle}^{\Omega_L} \sigma_y^0 = - \sum_{\ell=\langle xy \rangle} U_\ell^{\Omega_L} \\ &= - [N_A \cdot (-1) + N_F \cdot (+1)] = N_A - N_F. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Da die Energie eine eichinvariante Größe ist, handelt es sich bei E_0 natürlich auch um die Grundzustandsenergie des ursprünglichen Spin-Glases $\{U_\ell\}$, die Berechnung der Energie gemäß Gleichung (3.11) kann aber nur in Landau-Eichung erfolgen.

Zur Berechnung der Energie des Grundzustands wird daher folgender Algorithmus verwendet:

1. Für eine vorgegebene Instanz $\{U_\ell\}$ des Spin-Glases werden die zugehörigen Vortices auf dem dualen Gitter berechnet.
2. Die minimale Anzahl N_A der anti-ferromagnetischen Bindungen, die mit der im ersten Schritt berechneten Verteilung der Vortices kompatibel ist, muss bestimmt werden.
3. Die Energie des Grundzustands *pro Bindung* berechnet sich dann zu

$$\epsilon = \frac{E_0}{N_\ell} = \frac{N_A - N_F}{N_\ell} = -1 + 2 \frac{N_A}{N_\ell}, \quad (3.12)$$

wobei N_ℓ die Gesamtzahl aller Bindungen des Spin-Glas-Gitters bezeichnet.

Die Spin-Konfiguration $\{\bar{\sigma}\}$, die einen Grundzustand bezüglich der ursprünglichen Instanz $\{U_\ell\}$ darstellt, kann durch Invertierung der Eichtransformation Ω_L rekonstruiert werden. Dazu müssen im zweiten Schritt des Algorithmus neben der Anzahl auch die Positionen der anti-ferromagnetischen Bindungen bestimmt werden. Unter Verwendung von $\sigma_x^0 \cdot \sigma_y^0 = 1 \forall x, y$ führt dies auf die Gleichungen

$$U_{\langle xy \rangle}^{\Omega_L} = \bar{\sigma}_x U_{\langle xy \rangle} \bar{\sigma}_y, \quad (3.13)$$

welche sukzessiv für ganz $\{\bar{\sigma}\}$ gelöst werden können. Insgesamt ist der zweite Schritt des Algorithmus dabei mit dem größten numerischen Aufwand verbunden, denn die Konstruktion der minimalen Instanz ist nach (3.9) äquivalent zur Fixierung der Landau-Eichung, und dieses Problem gehört bekanntlich in $d \geq 3$ Dimensionen selbst für eine so einfache Gruppe wie \mathbb{Z}_2 zur Klasse der NP-schwierigen Probleme. In $d = 2$ Dimensionen kann jedoch unter der Voraussetzung offener Randbedingungen der Algorithmus von Edmonds [Edm65a, Edm65b] herangezogen werden, dessen Wirkungsweise in Abbildung 3.2 illustriert wird: Werden zwei benachbarte dualen Plaquetten (\bullet) durch einen anti-ferromagnetischen dualen Bond (gestricheltes Segment) miteinander verbunden, so entspricht dies auf dem Originalgitter einem anti-ferromagnetischen Bond (schwarzes Segment) an der gemeinsamen Kante der beiden Plaquetten. Endet ein solcher anti-ferromagnetischer dualer Bond an einem Punkt \tilde{x} , so gilt $P(\tilde{x}) = -1$, daher muss notwendigerweise eine *zusammenhängende* Kollektion von anti-ferromagnetischen dualen Bonds (gestrichelte Linie) konstruiert werden, welche die vorgegebenen Vortices (rote Quadrate) auf dem dualen Gitter miteinander verbindet. Da aber jeder anti-ferromagnetische Bond auf dem dualen Gitter einem anti-ferromagnetischen Bond auf dem Originalgitter entspricht, führt die Minimierung der Gesamtlänge aller Verbindungswege

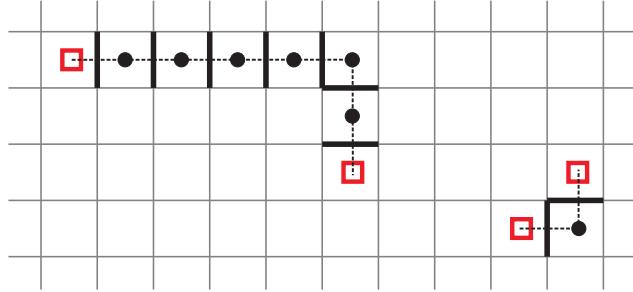


Abbildung 3.2: Vortices (rote Quadrate) sind Punkte des dualen Gitters und werden durch Pfade aus dualen Bonds (gestrichelte Linien) minimaler Länge miteinander verbunden. Den dualen Bonds entsprechen die N_A anti-ferromagnetische Bonds (schwarze Segmente) im Originalgitter.

zwischen Paaren von Vortices auf dem dualen Gitter zur Minimierung der Anzahl N_A anti-ferromagnetischer Bonds auf dem Originalgitter.

Im linken Teil der Abbildung 3.3 wird das Ergebnis der Anwendung des Algorithmus von Edmonds im realistischen Fall eines Gitters der Dimension 30×30 mit offenen Randbedingungen gezeigt. Zunächst wurden $N_V = 150$ Vortices zufällig auf dem Gitter verteilt, danach wurde die zugehörige minimale Instanz $\{U_\ell^{\Omega_L}\}$ in polynomialer Zeit [LBR80] berechnet. Die verwendeten Symbole sind dieselben wie in Abbildung 3.2.

Als nächstes wurde die auf die Anzahl der Bindungen normierte Energie des Grundzustands als Funktion der Vortexdichte ρ untersucht. Das Ergebnis ist im rechten Teil der Abbildung 3.3 zu sehen. Die Messungen wurden auf Gittern der Dimension $L \times L$ für $L = 60, 90, 120$ Gitterpunkte durchgeführt, wobei offene Randbedingungen zugrunde gelegt wurden. Die exakte Berechnung der Grundzustandsenergie ersetzt die Berechnung eines thermischen Mittelwertes am Temperaturnullpunkt und für die nach Gleichung (3.8) durchzuführende Mittelung $[\dots]_{\text{av}}$ über die Unordnung des Systems, die durch den Wert des Parameters $\rho = N_V/(L-1)^2$ charakterisiert wird, wurde für jeden der betrachteten Werte von $\rho \in [0, 1]$ ein Ensemble von 100 Instanzen herangezogen, die durch zufällige Verteilung der jeweiligen N_V Vortices generiert wurden. Unabhängig von der Ausdehnung L des Gitters scheinen alle Datenpunkte für $\epsilon(\rho)$ auf derselben Kurve zu liegen. Dies deutet darauf hin, dass Korrekturterme, die aufgrund der endlichen Größe der verwendeten Gitter zu erwarten sind, für $L \geq 60$ bereits sehr klein oder schon vernachlässigbar sind. Fassen wir alle verfügbaren Messwerte für $\rho \leq 0.3$ zusammen, so kann die Energie des Grundzustands pro Bindung für kleine Werte der Dichte ρ sehr gut durch eine Funktion der Form

$$\epsilon(\rho) \approx -1 + 0.39(7) \rho^{0.49(2)} \quad (3.14)$$

approximiert werden. Dies deutet auf ein Verhalten der Form $\epsilon(\rho) + 1 \propto \sqrt{\rho}$ hin. Tatsächlich ist es möglich, unter der Annahme eines Wertes von $1/2$ für den Exponenten einen ausgezeichneten Ein-Parameter-Fit an dieselben Datenpunkte mit einem vergleichbaren χ^2 durchzuführen [LLQR09]:

$$\epsilon(\rho) \approx -1 + 0.403(5) \cdot \sqrt{\rho}. \quad (3.15)$$

Eine störungstheoretische Behandlung des Systems für kleine Werte der Vortexdichte ρ erscheint aufgrund der singulären Ableitung $d\epsilon/d\rho$ am Nullpunkt wenig sinnvoll. Möglicherweise lässt sich aber das Verhalten von $\epsilon(\rho)$ in diesem Regime im Rahmen einer Beschreibung des

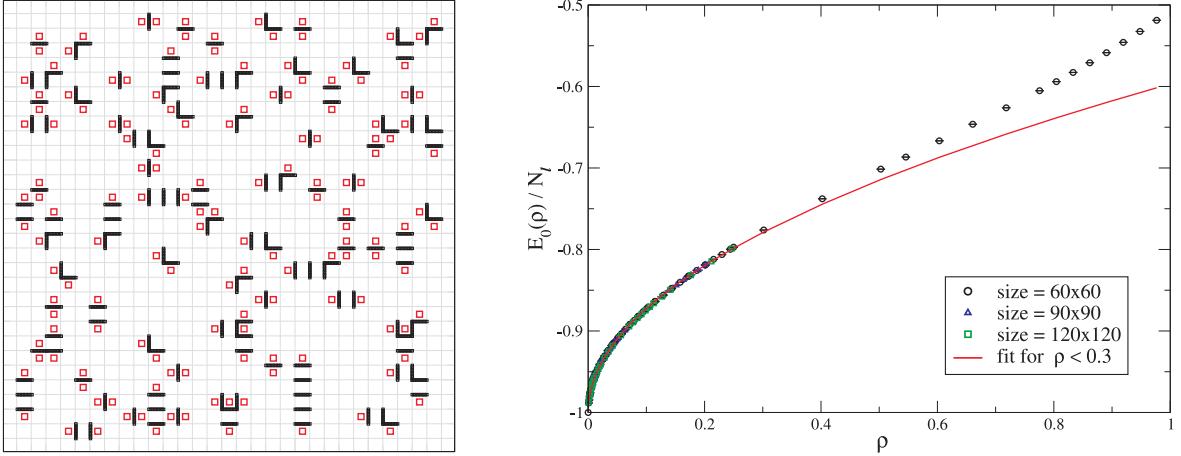


Abbildung 3.3: Links: $N_V = 150$ zufällig auf einem (dualen) 30×30 Gitter verteilte Vortices (rote Quadrate) mit zugehörigem *minimal matching* durch anti-ferromagnetische (schwarze) Bindungen: $\epsilon = E_0/N_\ell = -0.82759(1)$. Rechts: Die Energie des Grundzustands pro Bindung als Funktion der Vortextdichte $\epsilon(\rho)$, berechnet für offene Randbedingungen.

Systems als (stark verdünntes) semi-klassisches Gas von Vortices auf dem dualen Gitter verstehen.

In einem ersten Schritt in diese Richtung konnte jedenfalls eine einfache Erklärung für die Gesetzmäßigkeit, die in Gleichung (3.15) zum Ausdruck kommt, gefunden werden [LLQR09]: Bei einer zufälligen Verteilung der Vortices auf dem Gitter nimmt jeder Vortex im Mittel die Fläche $\bar{\ell}^2 = \rho^{-1}$ ein, wobei ihr *mittlerer Abstand* (die mittlere freie Weglänge) mit $\bar{\ell}$ bezeichnet werde. Da der *minimal matching* Algorithmus darauf basiert, die Gesamtlänge der Verbindungen zwischen den Vortices zu minimieren, ist davon auszugehen, dass die *mittlere Länge der Verbindungen* zwischen Paaren von Vortices $\langle \ell \rangle := N_A/(N_V/2)$ etwas kleiner sein wird als ihr mittlerer Abstand. Zumindest für hinreichend kleine Werte der Dichte sollte daher die Relation $\langle \ell \rangle \approx \alpha \bar{\ell}$ für $\alpha \lesssim 1$ unabhängig von der Größe des Gitters gelten. Für die minimale Anzahl an anti-ferromagnetischen Bindungen N_A finden wir daher die Abschätzung

$$N_A = \frac{1}{2} N_V \langle \ell \rangle \approx \frac{1}{2} (L-1)^2 \alpha \sqrt{\rho}, \quad (3.16)$$

und dies führt nach Gleichung (3.12) mit $N_\ell = 2L(L-1)$ unter der Annahme offener Randbedingungen auf

$$\epsilon(\rho) \approx -1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\rho} \left[1 - \frac{1}{L} \right]. \quad (3.17)$$

Die Formel erklärt also zum einen das experimentell beobachtete Anwachsen der Grundzustandsenergie des Spin-Glasses pro Bindung mit der Wurzel der Vortextdichte, zum anderen liefert sie eine Voraussage für den Koeffizienten $\alpha/2 \lesssim 0.5$, die bereits ziemlich gut mit dem numerisch gefundenen Wert in Gleichung (3.15) übereinstimmt. Außerdem kann der ebenfalls beobachtete Einfluss von Korrekturtermen abgeschätzt werden, der auf die Verwendung von Gittern endlicher Ausdehnung L zurückzuführen ist.

Für die beiden Grenzfälle $\rho = 0$ und $\rho = 1$ ist eine exakte Bestimmung der Grundzustandsenergie möglich. Ersterer entspricht dem bereits anhand von Abbildung 3.1 diskutierten Fall

eines reinen Ferromagneten ($\kappa = 0$), bzw. einer durch Eichtransformation daraus hervorgegangenen Instanz. Für alle Elemente dieser durch $\rho = 0$ charakterisierten Äquivalenzklasse gilt $\epsilon(0) = -1$, insbesondere auch für den reinen Anti-Ferromagneten ($\kappa = 1$). Der andere Extremfall entspricht einem Vortex-Gas größtmöglicher Dichte, jede der Plaquetten des Gitters wird dabei von einem Vortex durchstoßen. Das zugehörige *minimal matching* ergibt sich durch Verbindung von jeweils zwei benachbarten Vortices auf dem dualen Gitter, entsprechend einer anti-ferromagnetischen Bindung auf dem räumlichem Gitter. Für ungerade L ist $N_A = (L - 1)^2/2$ und aus Gleichung (3.12) ergibt sich

$$\epsilon(1) = -\frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{L} \right]. \quad (3.18)$$

Im thermodynamischen Limes erwarten wir daher den Wert $\epsilon(1) = -\frac{1}{2}$, vgl. dazu nochmals den rechten Teil von Abbildung 3.3.

3.3 Ein eichinvarianter Cluster-Algorithmus

Die generische Schwierigkeit bei der Simulation von Spin-Systemen besteht darin, Autokorrelationen der Konfigurationen innerhalb einer Markov-Kette gering zu halten. Dies ist insbesondere dann von höchster Bedeutung, wenn die physikalische Korrelationslänge ξ auf einen Wert von der Größenordnung des gesamten betrachteten Systems anwächst, da sich die (integrierte) Autokorrelationszeit τ üblicherweise wie $\tau \propto \xi^z$ verhält, wobei z den dynamischen kritischen Exponenten bezeichnet⁶. Dieses Phänomen ist bereits an dem einfachsten zweidimensionalen Spin-System, dem ferromagnetischen Ising-Modell, zu beobachten, dessen exakte Lösung 1944 von Onsager gefunden wurde. Das Modell zeigt einen ferromagnetischen Phasenübergang bei $T_c = 2.27 J/k_B$ (vgl. [LB91]), was bei Verwendung unserer Konventionen $\beta_c \simeq 0.44053$ bedeutet. Während das System in der symmetrischen Phase ($\beta < \beta_c$) das thermische Gleichgewicht unabhängig von der Wahl der Ausgangskonfiguration einer Markov-Kette in wenigen Schritten auch auf großen Gittern erreicht, ist eine Simulation unterhalb der kritischen Temperatur bereits auf Gittern mit einer linearen Ausdehnung von $L \geq 100$ Punkten unter Verwendung eines lokalen Update-Algorithmus praktisch unmöglich. Derartige Algorithmen weisen einen dynamischen kritischen Exponenten von $z \simeq 2$ auf. Einen Ausweg bieten die sogenannten Cluster-Algorithmen [SW87, Wol89], die in der Lage sind, ganze Domänen von gleich orientierten Spins zu identifizieren und auf einmal zu aktualisieren, wodurch sich Autokorrelationen drastisch verringern lassen. Die niedrigen Werte der zugehörigen dynamischen kritischen Exponenten – für translationsinvariante planare Ising-Ferromagnete gilt beispielsweise $0 \leq z \leq 0.3$ [CEPS93] – ermöglichen dabei zum einen die Simulation von Spin-Systemen einer realistischeren Größe, zum anderen wird dadurch auch signalisiert, dass die Cluster-Algorithmen offensichtlich über weite Bereiche der Temperaturskala in der Lage sind, die Physik des jeweiligen Grundzustands angemessen zu erfassen. Tatsächlich wird ja die Ausbildung von Domänen in Ferromagneten unterhalb von T_c experimentell beobachtet und im Grenzfall verschwindender Temperatur wird der Betrag der (spontanen) Magnetisierung maximal, da der Grundzustand einem einzigen Cluster von parallel orientierten Spins entspricht.

⁶Vgl. auch die Diskussion im Anhang B.4.

Bei der Konstruktion von effizienten Cluster-Algorithmen zur Simulation von reinen ferro- bzw. anti-ferromagnetische Spin-Systeme spielt die Kenntnis des Grundzustand am Temperaturnullpunkt eine wichtige Rolle. Da der Grundzustand von Spin-Gläsern i.A. aber gerade nicht exakt bestimmbar ist, erweist sich eine derartige Konstruktion als extrem schwierig. Vielmehr wird häufig auf eine Mischung verschiedener Algorithmen zurückgegriffen. Prinzipiell sollte aber ein Cluster-Algorithmus zur Simulation von Ising-Spin-Gläsern ferro- und anti-ferromagnetische Bindungen gleichermaßen behandeln können und muss somit eine Verallgemeinerung des ursprünglich von Swendsen und Wang [SW87] vorgeschlagenen Prototyps darstellen. Es soll dabei nochmals betont werden, dass die Identifizierung von Clustern auf eichinvariante Weise geschehen muss, um der (versteckten) Eichinvarianz des Modells Rechnung tragen zu können. Dies wird sich insbesondere im Hinblick auf die in Kapitel 3.5 zu besprechende Anwendung eines solchen Algorithmus auf den Fall eines Modells der QCD bei endlichen Temperaturen als unabdingbar erweisen. Wäre es nämlich erforderlich, zunächst eine Eichung zu fixieren, um zu einer Definition von Clustern zu gelangen, so würde dies einen jeden so gearteten Algorithmus aufgrund des erhöhten numerischen Aufwands von vornherein als wenig praktikabel erscheinen lassen. Das eigentliche Problem wäre dabei nur verlagert worden, da die meisten Algorithmen zur (iterativen) Fixierung einer Eichung bekanntermaßen gerade unter dem Problem des *critical slowing down* leiden. Legen wir das im vorherigen Kapitel anhand des elektroschwachen Standardmodells bei endlichen Temperaturen diskutierte Konzept der dimensionalen Reduktion auch bei der Behandlung der Quantenchromodynamik bei endlichen Temperaturen zugrunde, so muss ein aussichtsreicher Kandidat für einen Cluster-Algorithmus zur Simulation dieses Modells zumindest in der Lage sein, auf Gittern der Dimension $d = 3$ zu operieren.

Obwohl für die Simulation von planaren Spin-Gläsern zuletzt sehr effiziente Algorithmen vorgeschlagen wurden (siehe z.B. [Hou01, LGM⁺04]), untersuchen wir im Folgenden den weniger spezialisierten Algorithmus von Kessler und Bretz [KB90] näher, da dieser sich völlig unabhängig von der Dimension des Gitters formulieren lässt. In der Tat stellt sich die dabei verwendete Update-Vorschrift auch als eichinvariant heraus, so dass der Algorithmus das Potential zur Verallgemeinerung im oben beschriebenen Sinne besitzt. Um dies zu verstehen, folgen wir der Konstruktion des Swendsen-Wang-Algorithmus [SW87] und berücksichtigen bei der Umformulierung der Zustandssumme (3.1) das Auftreten von anti-ferromagnetischen Bindungen durch eine Symmetrisierung der Zerlegung. Die grundlegende Idee bei der Konstruktion eines solchen Cluster-Algorithmus stellt die Verknüpfung des Spin-Modells mit einem Perkolations-Modell dar [MM94], das Resultat ist eine (umfassendere) Zustandssumme, die sich in die Form

$$\mathcal{Z} = e^{\beta N_\ell} \sum_{\{\sigma_x\}} \sum_{\{n_\ell\}} P(\sigma, n) \quad (3.19)$$

bringen lässt, wobei mit $n_\ell \in \{0, 1\}$ zusätzliche (Bond-)Variablen eingeführt wurden, die Auskunft darüber geben, ob zwei benachbarte Spins Teil eines noch genauer zu definierenden Clusters von Spins sind. In die Definition der Wahrscheinlichkeit

$$P(\sigma, n) = \prod_{\ell=\langle xy \rangle} \left[(1 - q) \delta_{n_\ell 0} + q \delta_{n_\ell 1} \delta_{(\sigma_x U_\ell \sigma_y)} \right] \quad (3.20)$$

gehen dabei neben den Cluster-Bonds n_ℓ , die aktiviert ($n_\ell = 1$) und deaktiviert ($n_\ell = 0$) sein können, auch ein verallgemeinertes Kronecker-Delta $\delta_{(x)}$ sowie die inverse Temperatur β

gemäß

$$q = 1 - e^{-2\beta}, \quad \delta_{(x)} = \begin{cases} 1 & \text{für } x = +1 \\ 0 & \text{für } x = -1 \end{cases} \quad (3.21)$$

ein. Es ist leicht zu sehen, dass das Ergebnis einer Integration bezüglich der Bonds das ursprüngliche, durch die Zustandssumme (3.1) beschriebene frustrierte Ising-Modell darstellt, umgekehrt erhält man nach Ausführung einer Integration bezüglich der Spins das Analogon des Perkolationsmodells im rein ferromagnetischen Fall [MM94]. Wir greifen nun die Idee von Swendsen und Wang auf, eine alternierende Aktualisierung der Spins $\{\sigma\}$ und Bonds $\{n_\ell\}$ zur Simulation von (3.19) durchzuführen. Der Erfolg des Algorithmus bei der Behandlung von ferromagnetischen Systemen bei tiefen Temperaturen beruht hauptsächlich darauf, dass die dominierenden langreichweitigen Moden, die sogenannten „langsam“ Spin-Wellen, als die relevanten kollektiven Anregungen richtig identifiziert und kohärent in einem Schritt aktualisiert werden können. Ein Cluster von Spins lässt sich dabei charakterisieren als eine Kollektion von verbundenen, aktivierte Bonds. Zur Konstruktion eines solchen Clusters wählen wir in einer vorgegebenen Konfiguration von Spins $\{\sigma\}$ eine bestimmte Variable σ_x als Startpunkt und gehen dann wie folgt vor:

1. Überprüfe alle (2d) Nachbarn σ_y des vorgegebenen Spins σ_x sowie die zugehörigen Bindungen $U_\ell = U_{\langle xy \rangle}$ zwischen ihnen: Falls U_ℓ anti-ferromagnetisch ist und σ_x und σ_y parallel zueinander stehen, oder falls U_ℓ ferromagnetisch ist und σ_x und σ_y anti-parallel orientiert sind, so wird die zugehörige Bondvariable stets deaktiviert ($n_\ell = 0$). In allen anderen Fällen findet eine Aktivierung ($n_\ell = 1$) mit der Wahrscheinlichkeit $q = 1 - e^{-2\beta}$ statt, wodurch neue Spins an der Peripherie des Clusters hinzukommen können.
2. Ausgehend von den neu hinzugekommenen Spins wird der vorherige Schritt erneut durchgeführt. Die Rekursion endet, wenn alle Nachbarn überprüft wurden und der Cluster nicht mehr weiter anwachsen kann.

Ein Schritt innerhalb einer Markov-Kette zur Aktualisierung des Gitters besteht nach Swendsen und Wang darin, diese Prozedur solange durchzuführen, bis jeder Spin des Gitters Teil eines Clusters ist und dann alle Cluster mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% zu aktualisieren. Stattdessen verwenden wir eine Variante, die auf einen Vorschlag von Wolff [Wol89] zurückgeht, und die sich als besonders vorteilhaft erwiesen hat, wenn wenige große Cluster innerhalb der Verteilung der Spins dominieren: Nachdem per Zufall ein Ausgangspunkt x gewählt wurde, wird der zugehörige Cluster konstruiert und immer aktualisiert. Dies wird solange wiederholt, bis insgesamt mindestens N_ℓ Bonds aktualisiert wurden, wobei diese nicht notwendigerweise alle verschieden sein müssen.

Die Eichinvarianz des Algorithmus beruht auf der Invarianz des relevanten Terms $\sigma_x U_{\langle xy \rangle} \sigma_y$ in Gleichung (3.20) unter Eichtransformationen. Dabei enthalten die durch diese Vorschrift definierten Cluster sowohl parallele, durch ferromagnetische Bindungen verknüpfte Spins, als auch anti-parallele Spins an benachbarten Gitterpunkten, die über anti-ferromagnetische Bindungen gekoppelt sind. Wird nun eine Eichtransformation durchgeführt, so kehren sich die Verhältnisse innerhalb eines Clusters (möglicherweise) um⁷, die Identifizierung aller zu einem bestimmten Cluster gehörigen Spins bleibt davon aber unberührt, da das Produkt $\sigma_x U_{\langle xy \rangle} \sigma_y$ stets invariant bleibt.

⁷Parallele Spins mit ferromagnetischer Wechselwirkung werden zu anti-parallelen Spins mit anti-ferromagnetischer Wechselwirkung.

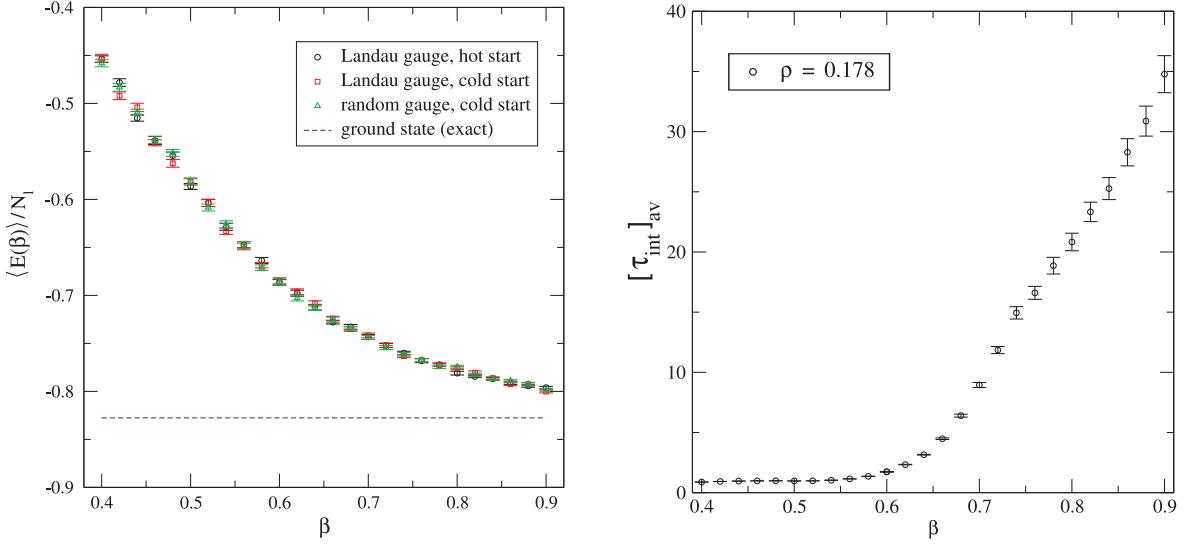


Abbildung 3.4: Links: Die thermische Energie pro Bindung, berechnet für die in Abbildung 3.3 gezeigte Instanz zu $N_V = 150$ als Funktion der inversen Temperatur β . Rechts: Die zugehörige integrierte Autokorrelationszeit der thermischen Energie. Beidesmal offene Randbedingungen.

3.4 Anwendung I: Thermische Energie und spezifische Wärme

In einem ersten Schritt wurde die thermische Energie (3.2) pro Bindung für die in Abbildung 3.3 gezeigte Instanz eines Spin-Glases mit $N_V = 150$ Vortices als Funktion von β berechnet. Die minimale Anzahl anti-ferromagnetischer Bindungen in Landau-Eichung beträgt in diesem Fall $N_A = 150$, gleichbedeutend mit $\kappa_{\min} = 150/1740 \approx 0.086$. Zum Nachweis der Eichinvarianz des Algorithmus wurde eine weitere Berechnung der thermischen Energie in einer zweiten Instanz mit $N_A = 834$ bzw. $\kappa \approx 0.48$ durchgeführt, die durch Anwendung einer zufälligen Eichtransformation auf die erste, in Landau-Eichung befindliche Instanz, erzeugt wurde. Obwohl sich die beiden Instanzen also bezüglich ihres Anteils an anti-ferromagnetischen Bindungen stark unterscheiden, sollte dies für die mittlere thermische Energie irrelevant sein, sofern der Algorithmus in der Lage ist, eichäquivalente Modell gleich zu behandeln. Der Nachweis dieser Behauptung findet sich im linken Teil von Abbildung 3.4. Es ist zu erkennen, dass die Monte-Carlo-Simulationen im gesamten von uns betrachteten Temperaturintervall für beide Instanzen übereinstimmende Ergebnisse liefern, und zwar unabhängig von der Wahl der Ausgangskonfiguration innerhalb der jeweiligen Markov-Kette. Die gestrichelte Linie in der Abbildung markiert die Energie des Grundzustands pro Bindung $\epsilon = E_0/N_\ell$, die sich im Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$ ergibt und bereits in Kapitel 3.2.2 mit Hilfe des Algorithmus von Edmonds für diese Instanz exakt berechnet wurde (vgl. Abbildung 3.3).

In der rechten Hälfte der Abbildung 3.4 finden sich unsere Ergebnisse zur Untersuchung der integrierten Autokorrelationszeit $\tau_{int}(\epsilon)$ der thermischen Energie pro Bindung als Funktion der inversen Temperatur. Die Messwerte ergeben sich als Mittelung über ein Ensemble von 1000 verschiedenen Instanzen zu $\rho = 0.178$, die durch zufällige Verteilung von jeweils $N_V = 150$ Vortices auf Gittern mit 30×30 Punkten erzeugt wurden. Für hohe Temperaturen ($\beta \leq 0.6$) verhält sich der Algorithmus optimal, aufeinander folgende Konfigurationen sind praktisch unkorreliert ($\tau_{int}(\epsilon) \leq 1$). Wird die Temperatur weiter abgesenkt ($\beta > 0.6$), so nimmt die Autokorrelationszeit der thermischen Energie kontinuierlich zu. Da zu erwarten ist,

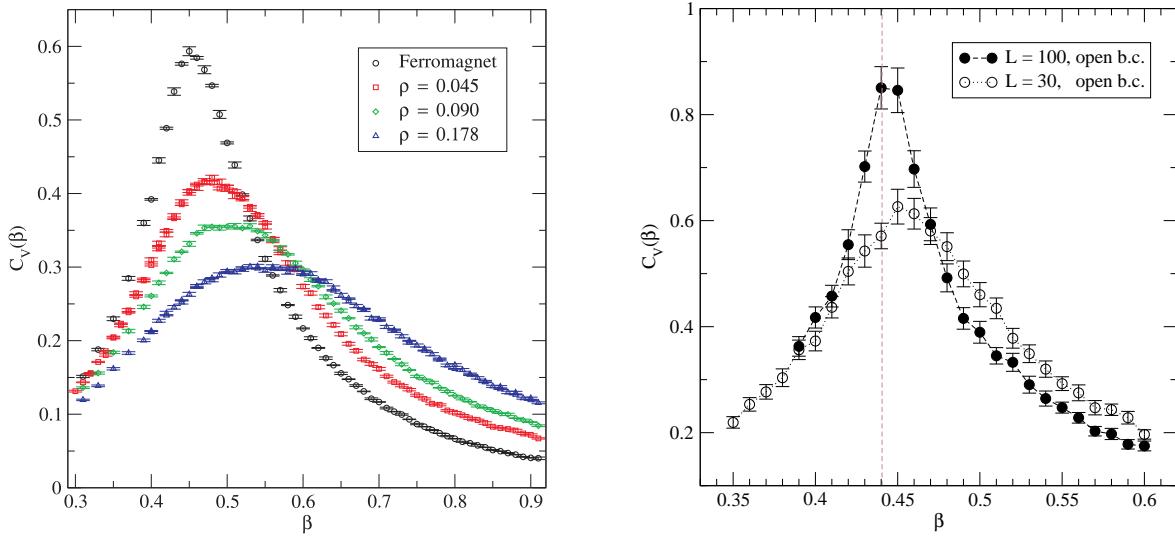


Abbildung 3.5: Links: Die spezifische Wärme $C_V(\beta)$ für planare Systeme ($L = 30$) mit unterschiedlicher Frustration ρ . Rechts: Einfluss der Gittergröße auf die spezifische Wärme eines Ferromagneten ($\rho = 0$). In beiden Fällen wurden offene Randbedingungen zugrunde gelegt.

dass sich das beobachtete Verhalten im Limes $\beta \rightarrow \infty$ nicht wesentlich ändern wird, bedeutet dies, dass der Algorithmus zur Simulation des Systems in der Nähe des kritischen Punktes $T_c = 0$ letztlich nicht geeignet ist. Es zeigt sich aber, dass die Durchführung von höchstens 50 Sweeps zur Aktualisierung der Gitterkonfigurationen für $\beta \leq 0.9$ ausreichend erscheint, um minimal korrelierte Messwerte zu erhalten. Das bedeutet aber, dass das Spin-Glas-System in der Umgebung des pseudo-kritischen Punktes, der durch Messung der spezifischen Wärme $C_V(\beta)$ bestimmt werden kann (vgl. Abbildung 3.5), durchaus einer numerischen Untersuchung zugänglich ist.

Als nächstes wurde eine Untersuchung der Autokorrelationszeiten der normierten thermischen Energie in einem Ensemble von eichäquivalenten Instanzen durchgeführt. Die Resultate waren in allen Fällen identisch, was wir als eine weitere Bestätigung für die eichinvariante Operationsweise des Cluster-Algorithmus werten. Eine Erläuterung der eingesetzten Methode zur Bestimmung der Autokorrelationszeiten findet sich in Anhang B.4.

Zuletzt haben wir das Verhalten der spezifischen Wärme (3.3) verschiedener Spin-Gläser bei zunehmender Vortexdichte ρ untersucht. Alle Simulationen wurden für eine einzelne Instanz der jeweiligen Vortexdichte durchgeführt, der Extremfall $\rho = 0.178$ entspricht dabei einer zufälligen Dotierung eines Ferromagneten mit $N_V = 150$ Vortices. Unsere Ergebnisse werden in Abbildung 3.5 gezeigt. Der (pseudo-) kritische Punkt β^* ergibt sich als Position des Maximums von $C_V(\beta)$, das sich bei Vergrößerung des Systems immer deutlicher ausprägt. Im rechten Teil von Abbildung 3.5 wird dies anhand des ferromagnetischen Ising-Modells ($\rho = 0$) bei Annahme offener Randbedingungen illustriert. Die gestrichelte vertikale Linie markiert den kritischen Punkt β_c , an dem der Übergang des Systems von der nicht magnetisierten in die ferromagnetische Phase im thermodynamischen Limes auftritt [LB91]. Während für Gitter mit einer linearen Ausdehnung von $L = 100$ Gitterpunkten bereits eine ziemlich gute Übereinstimmung mit der von Onsager berechneten Lösung beobachtet werden kann, macht sich der Einfluss der endlichen Größe des Gitters im Fall $L = 30$ aufgrund der offenen

Randbedingungen noch recht deutlich bemerkbar. Bei Verwendung von periodischen Randbedingungen für ein ansonsten gleichartiges Gitter kommt die Position des Maximums der spezifischen Wärme nämlich bereits deutlich näher an β_c zu liegen, wobei die Breite des *peaks* von dieser Veränderung nur unwesentlich beeinflusst wird. Eine präzise Bestimmung von β^* der untersuchten Spin-Glas-Instanzen ist folglich im Rahmen der auf Gittern der Ausdehnung $L = 30$ durchgeführten Simulationen sicherlich noch nicht möglich, nichts desto trotz lässt sich das interessierende Verhalten der spezifischen Wärme als Funktion der Dotierung ρ aber dennoch bereits für moderate Gittergrößen illustrieren.

Im linken Teil der Abbildung 3.5 ist zu erkennen, dass sich der pseudo-kritische Punkt bei einer Zunahme der Dichte ρ von nicht-triviale Plaquetten zu niedrigeren Temperaturen hin verschiebt. Gleichzeitig nimmt auch die Ausprägung des jeweiligen Maximums immer mehr ab, was darauf hindeutet, dass der Phasenübergang zweiter Ordnung des reinen Ferromagneten bei β_c zu einem *crossover* abgeschwächt wird und der Übergang für größere Werte von ρ zunehmend fließend wird. Auch dieses Resultat hat sich wie erwartet als eichinvariant erwiesen. Scheinbar führt also die zunehmende Unordnung bzw. Frustration des Spin-Modells zu einer Art „Gefrierpunktserniedrigung“. Zur Klärung der Frage nach der Natur dieser Übergänge sind jedoch sicherlich noch weitere Untersuchungen auf Gittern größerer Ausdehnung erforderlich.

3.5 Anwendung II: QCD bei endlichen Temperaturen

Cluster-Algorithmen spielen nicht nur eine wichtige Rolle bei der Simulation von reinen Ising-Spin-Systemen mit verschiedenartigen Wechselwirkungen, sondern auch bei der numerischen Untersuchung von komplexeren Systemen der statistischen Physik, für die eine geeignete *Einbettung* von Ising-Spins gefunden werden kann. In einigen Fällen hat sich diese Idee [CEPS93] als äußerst fruchtbar erwiesen und zu sehr beeindruckenden Resultaten geführt. Im Fall des $O(N)$ -symmetrischen σ -Modells konnte beispielsweise gezeigt werden [Wol89], dass der Wert des dynamischen kritischen Exponenten z sogar unterhalb desjenigen eines entsprechenden Ising-Modells liegt. Die grundlegende Idee besteht darin, das ursprünglich zu untersuchende System auf ein resultierendes Spin-System abzubilden, welches dann (hoffentlich) effizienter simuliert werden kann, als es ohne den Kunstgriff der Einbettung möglich wäre. Dabei ist zu beachten, dass die Effizienz eines solchen Algorithmus in Bezug auf die Bekämpfung des *critical slowing down* durch zwei völlig verschiedene Aspekte bestimmt wird. Zum einen muss die gewählte Einbettung der Ising-Spins in der Lage sein, die Dynamik der langreichweiten Moden des ursprünglichen Modells überhaupt richtig zu erfassen. Dadurch ist zumindest im Prinzip gewährleistet, dass eine Aktualisierung der Spins sich sinnvoll in die Aktualisierung kollektiver Anregungen im ursprünglichen Modell übersetzen kann. Zum anderen muss der verwendete Monte-Carlo-Algorithmus zumindest in einem Parameterbereich zur Aktualisierung des effektiven Spin-Modells geeignet sein, der für das ursprüngliche Modell von Interesse ist. Diese beiden Aspekte können letztlich nur durch eine Vielzahl sehr zeitaufwendiger Simulationen getrennt voneinander untersucht werden, da es leicht passieren kann, dass der positive Effekt einer im Prinzip sinnvollen Einbettung durch einen ungeeigneten Monte-Carlo-Algorithmus zunichte gemacht und die entsprechende Einbettung daher fälschlicherweise als ungünstig verworfen wird. Umgekehrt zeigt sich beispielsweise im Fall des bereits erwähnten σ -Modells mit globaler $O(N)$ -Symmetrie, dass sich gleich mehrere Cluster-Algorithmen

als gleichermaßen geeignet bzw. ungeeignet erweisen, je nachdem, ob für die Einbettung des Ising-Spins die Untergruppe der Reflexionen bzgl. einer zufälligen Richtung $\hat{r} \in \mathcal{S}^{N-1}$ oder aber alle Rotationen herangezogen werden [Nie96].

Der Erfolg dieser Methode beruht im Fall der $O(N)$ -Modelle wesentlich darauf, dass sich das resultierende Modell bei einer geschickten Wahl der Einbettung als ein Ising-Modell mit ortsabhängigen, aber *ferromagnetischen* effektiven Bindungen $\beta_{\langle xy \rangle}$ erweist⁸, für welches eine direkte Verknüpfung der Korrelationslänge mit der Größe der Cluster besteht, was die Einführung sogenannter *improved estimators* erlaubt [Nie96]. Das generische Problem bei der Suche nach wirksamen Cluster-Algorithmen für reine Eichtheorien besteht nun darin, dass die lokale Symmetrie der Wirkung i.A. dazu führt, dass es sich bei dem resultierenden Spin-Modell um ein *frustriertes* System handelt, in dem zusätzliche Wechselwirkungen, beispielsweise zwischen nicht benachbarten Spins oder einem effektiven externen Magnetfeld, auftauchen. Bei der Konstruktion von Cluster-Algorithmen wird daher häufig versucht, zunächst eine globale Symmetrie des Systems – wie beispielsweise die globale Reflexionssymmetrie $\{\sigma\} \rightarrow \{-\sigma\}$ des (frustrierten) Ising-Modells (3.1) – zu identifizieren, um dann eine entsprechende Transformation auf inhomogene Art und Weise – im Falle des von Wolff vorgeschlagenen Algorithmus beispielsweise beschränkt auf einzelne Cluster – durchzuführen [CEPS93]. Dieses Konstruktionsprinzip ist nicht allein auf Ising-Spins beschränkt, beispielsweise führt die Einbettung von $U(1)$ -Spins in Theorien mit $SU(N)$ -Symmetrie zu interessanten effektiven XY -Modellen. Es hat allerdings bisher eher den Anschein, als ob sich das Einbettungsprinzip letztlich als ungeeignet zur Überwindung der Probleme erweisen wird, mit denen man sich bei der Simulation von Eichtheorien mit kontinuierlicher Symmetrie konfrontiert sieht [CEPS93].

Im vorigen Kapitel wurde gezeigt, dass sich ein planares Ising-Spin-Glas als eine \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie auffassen lässt, wobei sich die Wechselwirkung zwischen benachbarten Ising-Spins als ortsabhängig erweist und sowohl ferromagnetischer wie auch anti-ferromagnetischer Natur sein kann. Bei der anschließenden numerischen Untersuchung hat sich der eingesetzte eichinvariante Cluster-Algorithmus als sehr gut dazu geeignet erwiesen, verschiedene derartige Modelle, deren Frustration durch den Komplexitätsparameter ρ charakterisiert werden kann, in der Nähe ihres jeweiligen pseudo-kritischen Punktes zu simulieren. Es besteht daher die Hoffnung, dass das Prinzip der Einbettung von Spins also durchaus zum Erfolg führen könnte, sofern es sich bei dem resultierenden Modell um eine Eichtheorie mit *diskreter* Symmetriegruppe handelt. Zur Überprüfung dieser Hypothese wollen wir als nächstes eine Erweiterung auf den dreidimensionalen Fall vornehmen und eine \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie untersuchen, die sich als Abbildung der QCD bei endlichen Temperaturen auf ein Ising-Spin-System mit dynamisch generierten, effektiven Kopplungen ergibt.

3.5.1 Diskretisierung und Einführung von Spin-Variablen

Die Zustandssumme dieser euklidischen, dimensionale reduzierten Theorie (vgl. Kapitel 2.5.2) ist durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}A_0 \exp \{-S[U, A_0]\} \quad (3.22)$$

⁸Ähnliches gilt auch für die klassischen Gittermodelle mit perfekter Wirkung [Nie96].

gegeben und wird in diskretisierter Form von der Wirkung [KLR⁺98]

$$\begin{aligned} S[U, A_0] = & \beta \sum_P \left(1 - \frac{1}{3} \operatorname{Re} \{ \operatorname{tr}[U_P] \} \right) - \frac{12}{\beta} \sum_{\mathbf{x}, k} \operatorname{tr} \left[A_0(\mathbf{x}) U_k(\mathbf{x}) A_0(\mathbf{x} + k) U_k^\dagger(\mathbf{x}) \right] \quad (3.23) \\ & + \sum_{\mathbf{x}} \beta_2(x, y, \beta) \operatorname{tr} [A_0^2(\mathbf{x})] + \frac{216 x}{\beta^3} \operatorname{tr} [A_0^2(\mathbf{x})]^2 \end{aligned}$$

bestimmt. Die auftretenden Summationen beziehen sich dabei auf räumliche Punkte, Richtungen und Plaquetten eines dreidimensionalen kubischen Gitters. Die dimensionslosen Größen x, y ermöglichen es, unter Verwendung der Relationen

$$x = \frac{\lambda_3}{g_3^2}, \quad y = \frac{m^2(g_3^2)}{g_3^4}, \quad \beta = \frac{6}{a g_3^2}, \quad (3.24)$$

sowie der einzigen dimensionsbehafteten Größe g_3^2 , eine Verbindung zur Kontinuumsformulierung der Theorie herzustellen⁹. Wie bereits in Kapitel 2.5 erläutert, tritt als Ergebnis der dimensionalen Reduktion der reinen Yang-Mills-Theorie neben den räumlichen Komponenten des Eichfeldes $A_k(\mathbf{x})$ (bzw. $U_k(\mathbf{x})$) in der effektiven Wirkung (3.23) auch ein skalares Feld $A_0(\mathbf{x})$ auf, welches sich unter der adjungierten Darstellung der Gruppe transformiert. Die Selbstkopplung dieses Feldes wird mittels des Parameters x reguliert, und die Temperatur in der vollen $D = 4$ dimensionalen Eichtheorie entspricht dem Parameter y . Wird die Temperatur abgesenkt, so lässt sich bei einer kritischen Temperatur y_c ein Übergang von der (symmetrischen) Coulomb-Phase ($y \gg y_c$) in die (gebrochene) Higgs-Phase ($y \ll y_c$) der Theorie beobachten. Die kritische Temperatur ist dabei eine monoton fallende Funktion der Selbstkopplungskonstanten, $y_c(x)$. Gleichzeitig nimmt bei einer Vergrößerung von x die Ordnung des Phasenübergangs zu. Bevorzugt man die bei der Formulierung von Eichtheorien mit skalaren Feldern auf dem Gitter beinahe universell gebräuchliche Parametrisierung der Wirkung durch den Hopping-Parameter κ und eine Selbstkopplungskonstante λ (vgl. dazu Kapitel 2.4.1 und 4.3.2), so können die jeweiligen Ergebnisse durch eine Reskalierung der Form

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sqrt{\beta_2} A_0(\mathbf{x}), \quad \lambda = 216 x \beta_2^{-2} \beta^{-3}, \quad \kappa = 6 (\beta_2 \beta)^{-1} \quad (3.25)$$

miteinander verglichen werden, sofern κ und λ dabei als Parameter einer effektiven, dimensional reduzierten Theorie mit der entsprechenden Veränderung der Kopplung β im Sektor der Eichfelder aufgefasst werden.

Neben der Eichsymmetrie weist die Theorie noch eine diskrete Symmetrie (*R-Parity*) unter globalen Reflexionen des adjungierten Skalarfeldes

$$A_0(\mathbf{x}) \rightarrow -A_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x}, \quad A_0(\mathbf{x}) = A_0^a(\mathbf{x}) T^a \quad (3.26)$$

auf. Dies motiviert die Einführung eines zusätzlichen Freiheitsgrades $\sigma(\mathbf{x}) \in \{-1, 1\}$, der durch eine Koordinatentransformation

$$\mathfrak{S}_{\mathbf{x}} : \begin{pmatrix} \bar{A}_0(\mathbf{x}) \\ \sigma(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_0(\mathbf{x}) \\ \sigma(\mathbf{x}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma(\mathbf{x}) \bar{A}_0(\mathbf{x}) \\ \sigma(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

⁹Die Definition der Funktion $\beta_2(x, y, \beta)$ findet sich in [KLR⁺98]: Gl. (7).

Eingang in die Zustandssumme der Theorie findet:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\sigma \int \mathcal{D}U \mathcal{D}A_0 \exp \{-S[U, A_0]\} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\sigma \mathcal{D}\bar{A}_0 J[\bar{A}_0, \sigma] \exp \{-S[U, \bar{A}_0, \sigma]\}. \quad (3.28)$$

Das normierte \mathbb{Z}_2 -Maß ist dabei gegeben durch

$$\mathcal{D}\sigma = \frac{1}{2N_s^3} \prod_{\mathbf{x}} d\sigma(\mathbf{x}) \quad (3.29)$$

und die Jacobische Determinante der Transformation (3.27) ergibt sich zu

$$J[\bar{A}_0, \sigma] = |\text{Det}(\mathfrak{S}' [\bar{A}_0, \sigma])| = |\prod_{\mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x})| = 1. \quad (3.30)$$

Es erscheint wichtig zu betonen, dass es sich dabei nicht um eine Zerlegung der „Spin-Variablen“ $\{A_0^a\}$ im üblichen Sinne handelt [CEPS93], da dies – im Gegensatz zu den Vektor-Modellen mit einer globalen Symmetrie – aufgrund der Eichsymmetrie des kinetischen Terms des Skalarfeldes zu nicht-diagonalen Wechselwirkungen führen würde, die als zusätzliche Kopplung der Ising-Variablen $\{\sigma\}$ an ein effektives externes Magnetfeld interpretiert werden können. Stattdessen erhält der kinetische Term des Skalarfeldes in Gleichung (3.23) die Form eines im Allgemeinen frustrierten Ising-Modells

$$S_{\text{Higgs}}[U, \bar{A}_0, \sigma] = - \sum_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} \beta_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} \sigma(\mathbf{x})\sigma(\mathbf{y}), \quad (3.31)$$

wobei die effektiven Kopplungen

$$\beta_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} := \frac{12}{\beta} \text{tr} \left[\bar{A}_0(\mathbf{x}) U_k(\mathbf{x}) \bar{A}_0(\mathbf{y}) U_k^\dagger(\mathbf{x}) \right], \quad \mathbf{y} = \mathbf{x} + a\hat{e}_k \quad (3.32)$$

zwischen den Spins an benachbarten Orten des Gitters \mathbf{x} und \mathbf{y} von der Dynamik der zugrunde liegenden $SU(3)$ -Eichtheorie diktiert werden. Für den quadratischen und quartischen Anteil in der Selbstwechselwirkung des Skalarfeldes spielt die Einführung der neuen Variablen ebenso wenig eine Rolle wie für die Yang-Mills-Wirkung. Folglich ist zu erwarten, dass sich besonders Änderung im kinetischen Term des Skalarfeldes in der Verteilung der „Kopplungskonstanten“ (3.32) widerspiegeln werden und somit ein Phasenübergang der QCD bei endlichen Temperaturen auch von einer Veränderung der Frustration des zugehörigen Spin-Glas-Modells begleitet sein wird. Fassen wir die Kopplungen (3.32) als reellwertige Link-Variablen $\{\mathcal{U}_\ell\}$ (1-Formen) auf,

$$\mathcal{U}_k(\mathbf{x}) := \beta_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} , \quad \mathbf{y} = \mathbf{x} + a\hat{e}_k \quad (k = 1, 2, 3) \quad (3.33)$$

so lässt sich zusammen mit den Ising-Spins $\{\sigma\}$ wie in Gleichung (3.4) und (3.5) eine dreidimensionale \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie definieren. Die Link-Variablen können dabei wie schon in Kapitel 3.2 zur Charakterisierung der induzierten Spin-Glas-Instanzen herangezogen werden, durch eine Berechnung von $P[\mathcal{U}](\tilde{\mathbf{x}})$ (2.26) kann nämlich die Frustration des Systems wieder auf eichinvariante Weise als Dichte ρ der negativen Plaquetten des Gitters quantifiziert werden.

3.5.2 Numerische Ergebnisse

Das Ziel der vorliegenden Untersuchung ist es zu klären, ob der in Kapitel 3.3 vorgestellten Cluster-Algorithmus prinzipiell zur Simulation der QCD bei endlichen Temperaturen geeignet sein könnte. Da sich die Stärke eines solchen Algorithmus besonders in der Nähe eines kritischen Punktes im Phasendiagramm der Theorie zeigen sollte, wollen wir als „Testgelände“ ein Gebiet heranziehen, innerhalb dessen ein Phasenübergang zweiter Ordnung auftritt und die Korrelationslänge des Systems folglich divergiert. Wir orientieren uns an den in [KLR⁺98] berichteten Ergebnisse und untersuchen im Folgenden das Intervall $y \in [-1, +1]$ für $x = 0.3$ und $\beta = 12.0$.

Zur Aktualisierung der Eichfelder $\{U_k\}$ und Skalarfelder $\{\bar{A}_0\}$ wurde in den meisten Fällen ein einfacher Metropolis-Algorithmus herangezogen, damit die Auswirkungen des Cluster-Algorithmus möglichst direkt zu Tage treten können und nicht aus einer Vielzahl von Effekten extrahiert werden müssen, die der Einsatz der üblicherweise verwendeten, elaborierter Simulationsmethoden (vgl. Anhang B sowie [KLR⁺98]) nach sich zieht. Die Aktualisierungstabellen wurden dabei mit jeweils 5000 Elementen (und ihren Inversen) befüllt, die im Eichfeldsektor durch Wahl von drei verschiedene Einbettung von zufällig generierten $SU(2)$ -Elementen ($\vartheta_c = 0.15$) konstruiert wurden (siehe Anhang C.1.1). Im Skalarfeldsektor wurden die Aktualisierungsvorschläge für die Komponenten $\{\delta\bar{A}_0^a\}$ zufällig aus einer Normalverteilung mit Breite $\delta_c = 0.15$ gewählt [GH84]. Dadurch ergaben sich im Intervall $y \in [-1, +1]$ mittlere Akzeptanzraten von etwa $[0.55, 0.61]$ im Eichfeldsektor, sowie $[0.82, 0.83]$ im Skalarfeldsektor für alle untersuchten Gitter ($N_s = 8, 12, 16, 20$), wobei während eines schachbrettartigen Sweeps durch das Gitter immer $N_m = 5$ *Multihits* für jede Variable durchgeführt wurden. Die einzige Modifizierung des Cluster-Algorithmus zur Aktualisierung der Ising-Spins $\{\sigma\}$ bestand in der Veränderung der Aktivierungswahrscheinlichkeit der Bonds

$$q_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} = 1 - e^{-2|\beta_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>}|} \quad (3.34)$$

in Gleichung (3.20). Vor jeder Messung wurden die ursprünglichen Freiheitsgrade $\{A_0\}$ mit Hilfe von (3.27) wieder restauriert.

In einem ersten Schritt haben wir uns von der korrekten Implementierung des Cluster-Algorithmus überzeugt. Dazu wurden Messungen des dimensionslosen Ordnungsparameters $\langle \text{Tr}(A_0^3)/g_3^3 \rangle$ für die spontane Brechung der globalen Reflexionssymmetrie¹⁰, sowie des skalaren Kondensats $\langle \text{Tr}(A_0^2)/g_3^2 \rangle$ in der Nähe des kritischen Punktes y_c durchgeführt, und zwar sowohl unter Verwendung eines Heatbath-Overrelaxation-Algorithmus (Anhang B.3) ohne Einführung der Spin-Variablen, als auch unter Verwendung des oben beschriebenen Metropolis-Cluster-Algorithmus. Bei der Aktualisierung der Spins wurde die von Wolff vorgeschlagene Variante adaptiert: Es wird ein Ausgangspunkt \mathbf{x} gewählt, der zugehörige Cluster wird konstruiert und unbedingt aktualisiert. Ist die Anzahl der Spins in diesem Cluster kleiner als die Gesamtzahl aller Spins des Gitters, so wird nochmals per Zufall ein (anderer) Ausgangspunkt für die Routine gewählt. Ein Sweep ist beendet, wenn die Summe der auf diese Weise aktualisierten Spins die Anzahl aller Spins des Gitters übersteigt. Dies beinhaltet auch die Möglichkeit, dass manche Cluster mehrfach, andere dafür nicht aktualisiert werden.

¹⁰Aufgrund der Spurfreiheit der Generatoren T^a (D.2) handelt es sich bei $\text{Tr}(A_0^3)$ um den ersten nicht-trivialen Operator, der in der Lage ist, den Effekt von (3.26) zu detektieren.

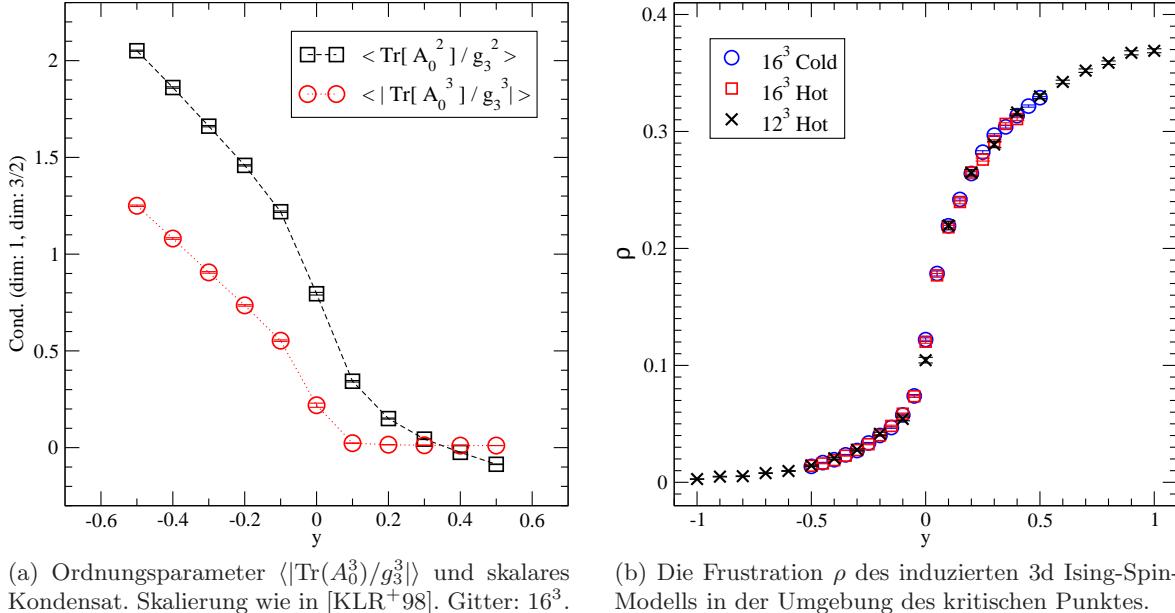
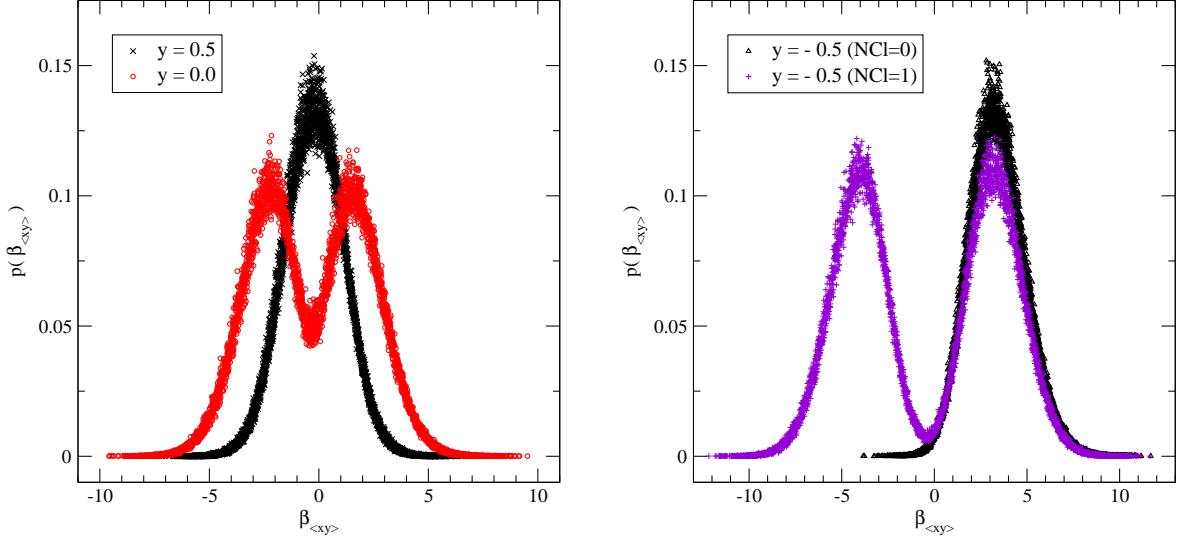


Abbildung 3.6: Skalare Kondensate und Dichte der frustrierten Plaquetten. Der kritische Punkt liegt bei $y_c \simeq 0.0$. Periodische Randbedingungen, $\beta = 12.0$, $x = 0.3$.

Die symmetrische Phase ist durch einen verschwindenden Wert des Ordnungsparameters charakterisiert, da betragsgleiche positive und negative Messwerte für $\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3$ mit derselben Wahrscheinlichkeit anfallen. Im Idealfall des thermodynamischen Limes wird die spontane Brechung der globalen Symmetrie (3.26) dadurch angezeigt, dass $\langle \text{Tr}(A_0^3)/g_3^3 \rangle$ einen (positiven oder negativen) endlichen Wert annimmt. Da in praktischen Simulationen aber immer nur Gitter endlicher Größe untersucht werden, kann das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung bzw. eines Phasenübergangs im strengen Sinne also überhaupt nicht auftreten¹¹. Stattdessen werden beide möglichen Realisierungsphasen zu positivem und negativem Vorzeichen von $\text{Tr}(A_0^3)$ innerhalb der erzeugten Markov-Kette simuliert, und zwar mit einer Gewichtung, die von der Güte des Algorithmus abhängt. Idealerweise sollte der Algorithmus dabei nicht nur Konfigurationen erzeugen, die zu ein und demselben Vorzeichen von $\text{Tr}(A_0^3)$ führen, sondern immer zwischen den beiden Extrema hin- und herspringen. Paradoxe Weise würde aber bei der Verwendung von $\langle \text{Tr}(A_0^3) \rangle$ als Ordnungsparameter auf dem Gitter gerade im Falle eines solchen idealen Algorithmus ein möglicher Phasenübergang unentdeckt bleiben. Ein üblicher Ausweg besteht nun darin, eine Projektion auf den Betrag des jeweils gemessenen Wertes durchzuführen, und somit $\langle |\text{Tr}(A_0^3)|/g_3^3 \rangle$ als Ordnungsparameter heranzuziehen.

Die Ergebnisse unserer Messungen sind in Abbildung 3.6a zu sehen und wurden so skaliert, dass sie mit den in [KLR⁺98] berichteten Werten verglichen werden können. Die Übereinstimmung beider Ergebnisse hat sich als quasi perfekt erwiesen. Wir schließen daraus, dass der Cluster-Algorithmus richtig implementiert wurde und funktioniert, zumal ein Vergleich mit den Resultaten der Heatbath-Overrelaxation-Simulationen gezeigt hat, dass sich auch hier keine nennenswerten Unterschiede ergeben. Als nächstes wurde die Dichte ρ der frustrierten

¹¹Vergleiche dazu auch die Diskussion des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung in Kapitel 4.2



(a) Histogramme der effektiven Kopplungskonstanten $\beta_{\langle xy \rangle}$ in der symmetrischen Phase ($y = 0.5$) sowie am Phasenübergang ($y = 0.0$).

(b) Veränderung der Verteilung von $\beta_{\langle xy \rangle}$ für $y = -0.5$ bei Simulationen mit ($NCl=1$) und ohne ($NCl=0$) Verwendung des Cluster-Algorithmus.

Abbildung 3.7: Das Verhalten der effektiven Kopplungskonstanten $\beta_{\langle xy \rangle}$ in der Nähe des Phasenübergangs. Gitter: 16^3 , $\beta = 12$, $x = 0.3$.

Plaquetten bei feinerer Rasterung des Intervalls $y \in [-1, +1]$ untersucht. Dazu wurde ein Ensemble von 2000 thermalisierten Konfigurationen pro y -Wert erzeugt. Das Ergebnis findet sich in Abbildung 3.6b. Deutlich ist zu erkennen, dass es sich bei dem induzierten Ising-Spin-Glas in der symmetrischen Hochtemperaturphase ($y \gg y_c$) um ein stark frustriertes System handelt, welches durch einen Wert von $\rho \simeq 0.37$ charakterisiert werden kann. Mehr als ein Drittel aller Plaquetten wird in dieser Phase von einem Vortex durchstoßen. Auf der anderen Seite, tief in der Higgs-Phase ($y \ll y_c$), erweist sich das Spin-System hingegen praktisch als ferromagnetisch ($\rho \simeq 0$). In der Umgebung des vom Ordnungsparameter $\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3$ angezeigten Phasenübergangs bei $y_c \simeq 0$ ändert sich die Dichte der frustrierten Plaquetten rasch. Direkt bei $y = 0$ finden wir eine moderate Frustration von $\rho \simeq 0.11$, wobei sich hier auch am deutlichsten zeigt, welche Auswirkungen die Verwendung von relativ kleinen Gittern hat. Ansonsten scheinen die Ergebnisse auch auf den größeren Gittern unabhängig davon zu sein, welche Anfangsbedingungen (Cold/Hot) für die Simulationen verwendet wurden.

Es ist in diesem Zusammenhang auch sehr aufschlussreich, sich die Verteilung der dynamisch generierten effektiven Kopplungen $\beta_{\langle xy \rangle}$ in der Umgebung des Phasenübergangs anzusehen. In Abbildung 3.7 finden sich die entsprechenden Histogramme, die unter Verwendung eines Zehntels aller Konfigurationen für die Werte $y = -0.5$, $y = 0$ und $y = 0.5$ erstellt wurden. In der symmetrischen Phase ($y = 0.5$) liegt eine glockenförmige Verteilung der Kopplungen mit einem Mittelwert nahe Null vor, deren Gestalt an die in der Einleitung erwähnte Normalverteilung der Gauß'schen Spin-Gläser erinnert. Wird das System abgekühlt, so verändert sich die Verteilung langsam, wobei die Breite zunimmt und das Maximum immer weniger ausgeprägt wird. Direkt am Phasenübergang ($y = 0$) tritt eine signifikante Änderung auf, die in Abbildung 3.7a illustriert wird. Es bildet sich eine Verteilung mit zwei Maxima aus, die

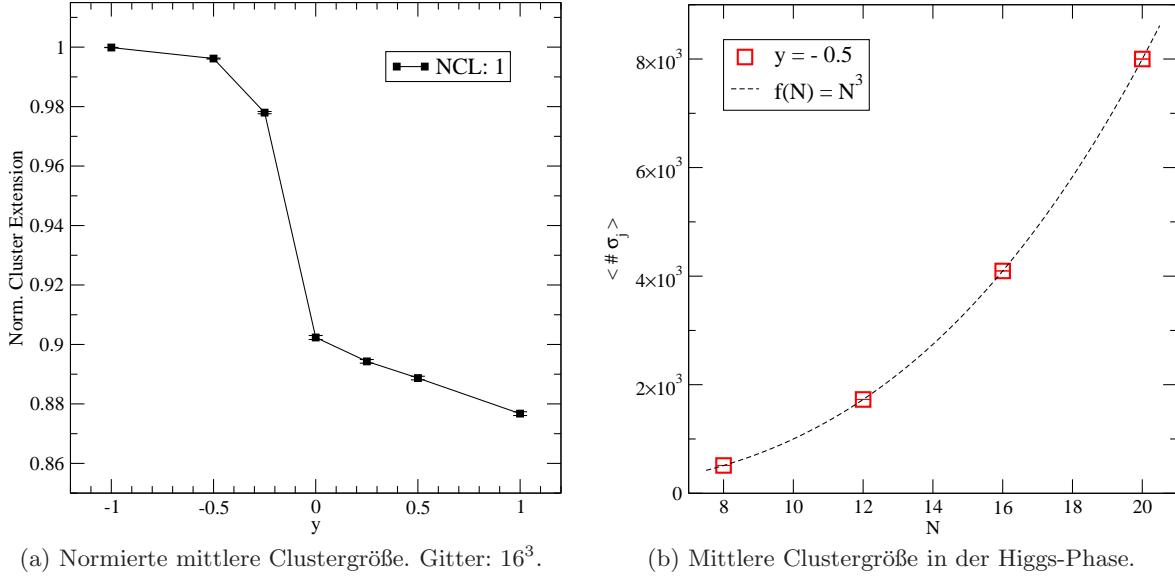


Abbildung 3.8: (a) *Unbridled growth* der Ising-Spin-Cluster. (b) Skalierung der Clustergröße in der Phase gebrochener *R-Parity*. Periodische Randbedingungen, $\beta = 12.0$, $x = 0.3$.

annähernd symmetrisch zum Nullpunkt bei etwa ± 2 zu liegen kommen. Dringt man weiter in die Phase gebrochener Symmetrie vor, so setzt sich dieser Trend fort. In Abbildung 3.7b findet sich für $y = -0.5$ (NCL=1) eine Verteilung mit zwei sehr ausgeprägten Maxima und einem Minimum in der Mitte bei einem leicht negativen Wert. Auch diese Verteilung weist die Reflexionssymmetrie (3.26) der Theorie auf, ihre Gestalt erinnert allerdings eher an eine verwaschene bimodale Verteilung der Wechselwirkungen wie im Falle eines $\pm J$ -Spin-Glasses. Würde man also versuchen, allein anhand dieser Verteilung die Frustration des induzierten Spin-Glasses durch den Anteil an anti-ferromagnetischen Bindungen innerhalb des Gitters zu charakterisieren, so entspräche dies einem Wert von $\kappa \sim 0.5$. Ähnliches müsste man dann aber konsequenterweise auch in den beiden in Abbildung 3.7a gezeigten Fällen für $y = 0$ und $y = 0.5$ feststellen. Angesichts unserer in Abbildung 3.6b gezeigten Ergebnisse zum Verlauf der Dichte $\rho(y)$ zeigt sich also wie schon bei der Diskussion der planaren Spin-Gläser in Kapitel 3.2, dass nicht nur das Verhältnis von ferromagnetischen zu anti-ferromagnetischen Bindungen bei der systematischen Klassifizierung von Spin-Gläsern eine Rolle spielt, sondern vor allem deren räumliche Verteilung, welche (für offene Randbedingungen) bis auf Eichtransformationen vollständig durch die Verteilung der Vortices festgelegt ist. Zuletzt wurde die Verteilung der Kopplungen im Rahmen einer Simulation bei $y = -0.5$ unter Verwendung eines Heatbath-Overrelaxation-Algorithmus ohne Einführung der Spins untersucht. Das Ergebnis wird in Abbildung 3.7b (NCL=0) gezeigt und entspricht nach Gleichung (3.31) der Verteilung der lokalen Beiträge zum kinetischen Term des Higgs-Feldes. Die Verteilung weist dabei im Gegensatz zu dem bereits besprochenen Fall (NCL=1) keine Reflexionssymmetrie auf, es ist aber zu beachten, dass die Berechnung des Mittelwertes von S_{Higgs} nach Gleichung (3.31) dasselbe Ergebnis liefert, da der Einfluss der Spin-Variablen bei der Invertierung der Transformation (3.27) berücksichtigt wird.

Während es für die Charakterisierung der Frustration innerhalb der induzierten Spin-Gläser hauptsächlich von Bedeutung ist, die räumliche Verteilung der *Vorzeichen* von $\{\mathcal{U}_\ell\}$ zu kennen, spielt der *Betrag* der effektiven Kopplungen (3.32) nach Gleichung (3.34) die entscheidende Rolle bei der Definition der Cluster und daher vermutlich auch für die Effizienz des Algorithmus. Betrachtet man unter diesem Aspekt nochmals die Kopplungsverteilungen in Abbildung 3.7, so steht zu erwarten, dass für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit (3.34) bereits in der Nähe des Phasenübergangs $\lim_{y \rightarrow y_c^+} q_{<\mathbf{x}\mathbf{y}>} = 1$ gelten dürfte, und somit typische Cluster praktisch alle Spins des Gitters umfassen werden. Für dieses erstmals anhand des bimodalen $\pm J$ -Ising-Glasses in $d = 3$ Dimensionen beobachtete Problem [KB90] hat sich in der Literatur inzwischen der Begriff *unbridled growth* etabliert. Tatsächlich konnte dieses Phänomen in ähnlicher Weise auch bei unseren Simulationen des in ein Ising-Spin-System überführten Modells der QCD in der Nähe des thermischen Phasenübergangs beobachtet werden. In Abbildung 3.8a ist zu erkennen, dass für $y = -1$ praktisch alle Spins Teil eines und desselben Clusters sind. An diesem Punkt des Phasendiagramms bestand ein Sweep zur Aktualisierung von $\{\sigma\}$ im Mittel aus zwei Schritten. Nähert man sich dem kritischen Punkt ($y \rightarrow y_c^-$), so sinkt zwar die mittlere Clustergröße, allerdings gehören in der Nähe des Phasenübergangs immer noch etwa 90% aller Spins des Gitters zu einem Cluster. Beim weiteren Vordringen in die symmetrische Phase sinkt dieser Wert innerhalb des von uns untersuchten Intervalls nur noch um weitere 2%, wobei im Mittel nun zumindest vier Cluster-Aktualisierungen pro Sweep durchgeführt wurden. Aus Abbildung 3.8b geht zusätzlich hervor, dass das Auftreten des Phänomens zumindest in der Phase gebrochener Reflexionssymmetrie ($y = -0.5$) nicht von der Größe des verwendeten Gitters abhängt.

Im Fall eines reinen Spin-Systems ist von einem Algorithmus, der ein solches Verhalten in der Umgebung eines kritischen Punktes zeigt, keine Verbesserung bei der Bekämpfung des Problems divergierender Autokorrelationszeiten zu erwarten. Andererseits wurde aber auch darauf hingewiesen [CEPS93], dass eine Beschränkung der Clustergröße durch die Möglichkeit zur kompletten Entkopplung von benachbarten Spins¹² kein grundlegendes Kriterium dafür darstellen könne, um die Effizienz eines entsprechenden, auf der *Einbettung* von Ising-Variablen beruhenden Algorithmus *a priori* einschätzen zu können. Außerdem sollte betont werden, dass der Algorithmus nach wie vor korrekt funktioniert, selbst wenn alle Spins simultan aktualisiert werden. Dabei handelt es sich um eine mikrokanonische Reflexion (vgl. B.4), die bereits allein zu einer Reduzierung des dynamischen kritischen Exponenten führen könnte. Durch die Kombination mit den Update-Schritten im Sektor der Eich- und Skalarfelder bleibt außerdem die Ergodizität gewährleistet, daher erscheint es durchaus sinnvoll, die Güte des Cluster-Algorithmus in Bezug auf die Dekorrelation aufeinander folgender Konfigurationen einer Markov-Kette noch etwas detaillierter zu untersuchen.

Zu diesem Zweck wurden zum einen Simulationen des Systems unter Verwendung eines einfachen Metropolis-Algorithmus durchgeführt, wobei auf die Einführung von Spin-Variablen komplett verzichtet wurde. Zum anderen wurde eine Variante herangezogen, bei der die Aktualisierung der Ising-Spins $\{\sigma\}$ mittels eines gewöhnlichen Metropolis-Algorithmus mit $N_m = 5$ Multihits pro Spin und einer variablen Anzahl (**N-Metro**) von Updates des kompletten Gitters pro Sweep durchgeführt wurde. Die Vorschriften zur Aktualisierung der Eichfelder $\{U_\ell\}$ und Skalarfelder $\{\bar{A}_0\}$ blieben dabei in allen Fällen unverändert.

¹²Beispielsweise wird im Fall eines rein ferromagnetischen Ising-Modells das Wachstum per Konstruktion durch das Auftreten von $q = 0$ für anti-parallele Spins begrenzt.

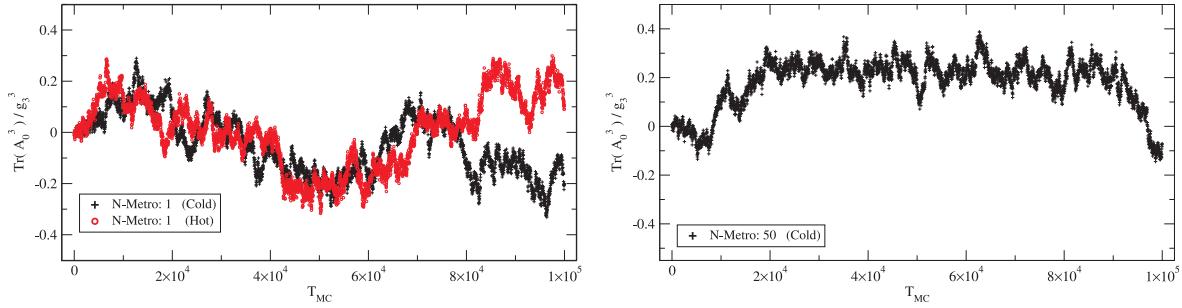


Abbildung 3.9: Thermalisierungsverlauf am Phasenübergang. Links: Verwendung eines reinen Metropolis-Algorithmus (N-Metro: 1) zum Update der Spins. Rechts: Verwendung eines Multi-Hit-Metropolis-Algorithmus (N-Metro: 50). Gitter: 16^3 , $x = 0.3$, $y = 0.0$.

In Abbildung 3.9 wird die Entwicklung der Messwerte für den Ordnungsparameter $\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3$ am Phasenübergang als Funktion der Thermalisierungsschritte T_{MC} unter Verzicht auf den Einsatz des Cluster-Algorithmus gezeigt. Im Fall des einfachsten Metropolis-Algorithmus zur Aktualisierung der Spins beobachten wir in der linken Teilabbildung (N-Metro=1) eine sehr langsame Entwicklung des Systems im Verlauf der aufgezeichneten 10^5 Iterationen. Die anfallenden Werte oszillieren dabei innerhalb des gesamten durch $|\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3| \sim 0.3$ begrenzten Intervalls, und zwar unabhängig von der Wahl des Ausgangszustands. Für $T_{MC} > 80.000$ spalten sich die Entwicklungsgeschichten der Systeme mit geordneter (**Cold**) und völlig zufälliger (**Hot**) Startkonfiguration erstmals merklich auf, wobei erstere dem negativen, letztere dem positiven Extremum zustrebt. Ob sich der Thermalisierungsverlauf dann in der Nähe der Intervallränder stabilisieren wird, oder ob danach allmählich wieder eine Entwicklung des Systems mit Nulldurchgang auftreten wird, wie sie schon im Bereich $50.000 \leq T_{MC} \leq 80.000$ beobachtet werden konnte, lässt sich jedoch nicht vorhersagen. In jedem Fall kann allerdings festgestellt werden, dass die Übergangsphasen zwischen den Randbereichen recht groß sind. Da eine Berechnung des Erwartungswerts von $|\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3|$ für $y = 0$ auf Basis dieser Daten einen deutlich kleineren Wert als den in der Literatur berichteten und in Abbildung 3.6a gezeigten Wert liefert, weist dieser Algorithmus also offensichtlich erhebliche Schwächen bei der Simulation des Systems nahe des Phasenübergangs auf. Hinzu kommt eine signifikant höhere statistische Unsicherheit bei der Berechnung des Erwartungswerts aus den Daten, die mittels dieses Metropolis-Algorithmus im Vergleich zu dem bereits erwähnten Heatbath-Overrelaxation-Algorithmus erzeugt wurden. Ein ähnlich unbefriedigendes Verhalten wurde auch bei der Untersuchung des reinen Standard-Metropolis-Algorithmus (ohne Spin-Variablen) festgestellt.

Erhöht man die Anzahl der Updates im Spin-Sektor auf N-Metro=50, so ergibt sich ein deutlich anderes Bild, welches im rechten Teil der Abbildung 3.9 zu sehen ist. Nach etwa 20.000 Monte-Carlo-Schritten hat sich die Entwicklung des Systems in einer Phase stabilisiert, die durch einen mittleren Wert des Ordnungsparameters von $\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3 \sim 0.2$ charakterisiert ist. Für $T_{MC} > 90.000$ findet ein Übergang in die zweite mögliche Gleichgewichtsphase des Systems statt, und zwar innerhalb von etwa 10.000 Iterationen. Damit erweist sich diese Variante zumindest als deutlich besser dazu geeignet, die Physik des effektiven Spin-Systems für $y = 0$ zu erfassen, als die beiden zuvor untersuchten Metropolis-Algorithmen. Daher

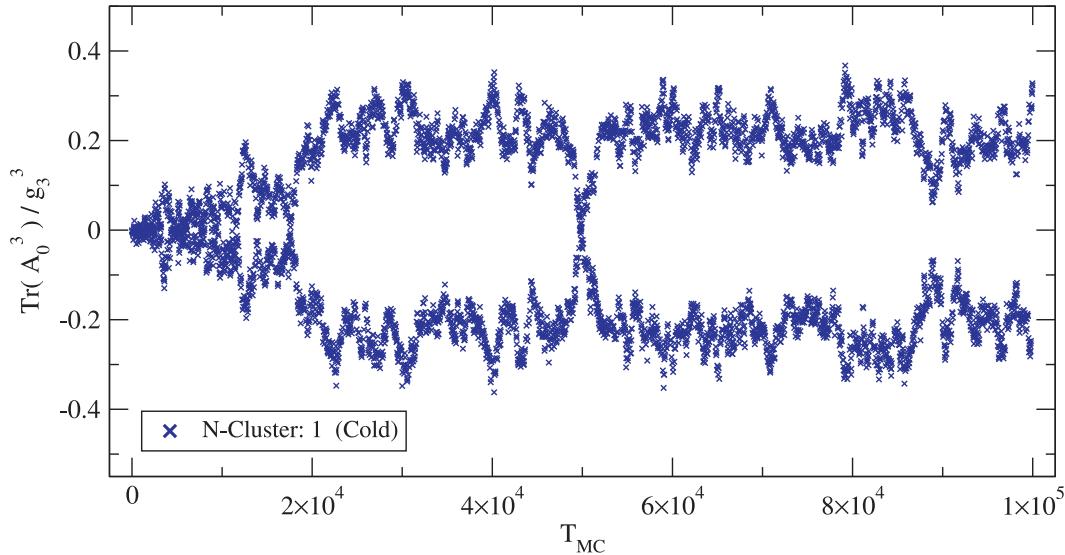


Abbildung 3.10: Thermalisierungsverlauf am Phasenübergang bei Verwendung des Cluster-Algorithmus (N-Cluster: 1). Gitter: 16^3 , $x = 0.3$, $y = 0.0$.

werden wir im Folgenden hauptsächlich diese Variante als Referenz heranziehen, wenn Autokorrelationszeiten von Observablen verglichen werden sollen, die mit und ohne Einsatz des Cluster-Algorithmus gewonnen wurden.

Betrachten wir zunächst aber noch den Thermalisierungsverlauf von $\text{Tr}(A_0^3)/g_3^3$ in Abbildung 3.10, der sich bei Verwendung des Cluster-Algorithmus (N-Cluster: 1) ergibt. Der größte Unterschied zu den Metropolis-Algorithmen besteht augenscheinlich darin, dass beide Realisierungsphasen gebrochener R -Symmetrie durch den Cluster-Algorithmus gleichermaßen sondiert werden können, wobei der Übergang von der einen in die andere Phase innerhalb weniger Aktualisierungsschritte vollzogen wird. Der alternierende Cluster-Algorithmus erreicht dabei ebenfalls nach etwa 20.000 Monte-Carlo-Schritten das thermische Gleichgewicht (unabhängig von der gewählten Ausgangskonfiguration), wobei zu berücksichtigen ist, dass in diesem Fall insgesamt höchstens zweimal die Anzahl aller Spins des Gitters pro Entwicklungsschritt aktualisiert werden muss, im Fall des effizienteren der beiden Metropolis-Algorithmen (N-Metro: 50) aber bereits 250 Aktualisierungsversuche jedes einzelnen Spins pro Monte-Carlo-Schritt durchzuführen sind.

Als nächstes wurde die integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} der Energie der Eichfelder E_G , des Hopping-Terms E_H , sowie des Betrags von $\text{Tr}(A_0^3)$ in der Umgebung des Phasenübergangs analysiert:

$$E_G = \frac{1}{3N^3} \sum_P \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re} \{ \text{tr}[U_P] \} \right), \quad E_H = \frac{1}{3N^3} \sum_{\mathbf{x}, k} \text{tr} \left[\bar{A}_0(\mathbf{x}) U_k(\mathbf{x}) \bar{A}_0(\mathbf{x} + k) U_k^\dagger(\mathbf{x}) \right].$$

Für jeden der untersuchten Werte $y \in [-1, +1]$ wurde dabei zunächst der Thermalisierungsverlauf der interessierenden Observablen wie in Abbildung 3.9 und 3.10 überprüft. Dabei hat sich gezeigt, dass die Durchführung von 30.000 Iterationen in allen untersuchten Fällen genügen sollte, um das jeweilige System ins thermische Gleichgewicht zu bringen, da sich

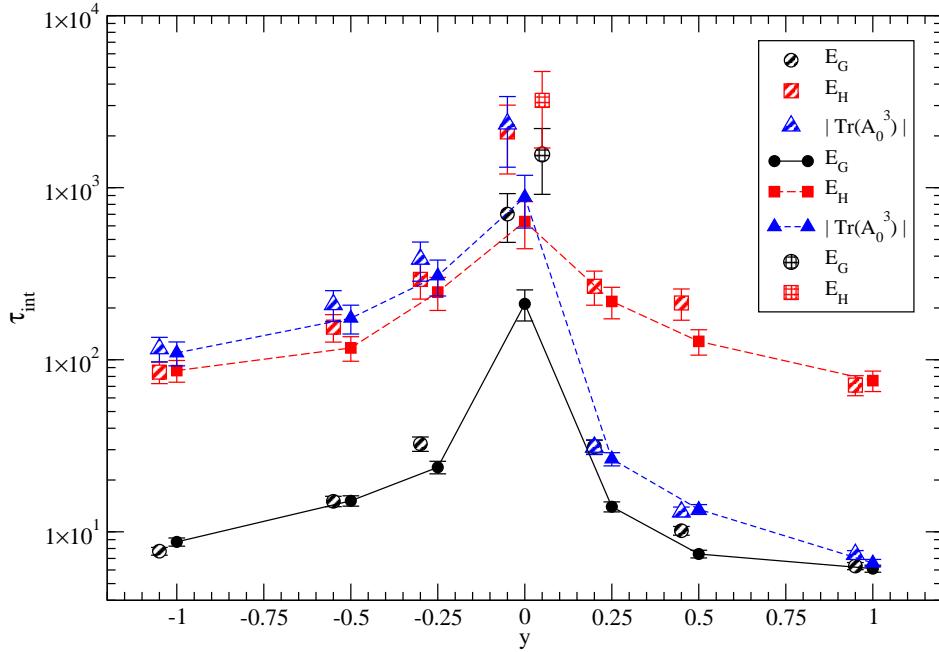


Abbildung 3.11: Vergleich der integrierten Autokorrelationszeiten von E_G , E_H und $|\text{Tr}(A_0^3)|$ bei Verwendung des Referenz-Metropolis-Algorithmus (schraffierte Symbole) sowie des Cluster-Algorithmus (verbundene Symbole). Reiner Metropolis-Algorithmus (gerasterte Symbole) zum Vergleich. Gitter: 16^3 , $\beta = 12.0$, $x = 0.3$.

die Equilibrierungsdauer des Ordnungsparameters bei $y = 0$ als Obergrenze für alle anderen Observablen und Punkte des Phasendiagramms erwiesen hat. Die entsprechenden Konfigurationen wurden daher verworfen und die Analyse der Autokorrelationszeiten unter Berücksichtigung der nachfolgenden 70.000 Konfigurationen durchgeführt.

Eine graphische Darstellung unserer Ergebnisse findet sich in Abbildung 3.11, wobei die vollen Symbole den Resultaten entsprechen, die wir bei Verwendung des Cluster-Algorithmus erhalten haben. Zur Erhöhung der Übersichtlichkeit wurden diese durch Linien miteinander verbunden und die schraffierte Symbole, welche die Resultate bei Verwendung des Referenz-Algorithmus (N-Metro: 50) repräsentieren, gegenüber den vollen Symbolen leicht verschoben. Außerdem haben wir die Resultate einer Analyse der Autokorrelationen von E_G und E_H bei Verwendung des gewöhnlichen Metropolis-Algorithmus am Phasenübergang zum Vergleich mit in die Abbildung aufgenommen. Dabei handelt es sich um die (ebenfalls leicht verschobenen) gerasterten Symbole. Eine Autokorrelationszeit für den Betrag des Ordnungsparameters konnte in diesem Fall – wie bereits diskutiert – nicht bestimmt werden.

Zunächst ist festzustellen, dass die Autokorrelationszeiten aller Observablen wie erwartet bei der Annäherung an den kritischen Punkt aus der symmetrischen Phase zunehmen. In dieser Phase dominieren starke räumliche Fluktuationen des Skalarfeldes, die sich sowohl im Verschwinden des (Betrag des) Ordnungsparameters als auch in einer geringen Autokorrelationszeit desselben bemerkbar machen. Diese liegt in derselben Größenordnung wie die der Energie der Eichfelder. Wird das System nun abgekühlt, so setzt ein Ordnungsvorgang ein, der sich besonders bei der Betrachtung des induzierten Spin-Systems bemerkbar macht.

Würde es sich dabei um ein rein ferromagnetisches Spin-System handeln, so wäre zu erwarten, dass sich die einsetzende Ordnung durch eine zunehmend parallele Ausrichtung aller Spins bemerkbar machen sollte und sich die Autokorrelationszeit der zugehörigen (spontanen) Magnetisierung nach einem dramatischen Anwachsen am Phasenübergang bei weiterem Vordringen in die Higgs-Phase allmählich auf einem ähnlich hohen Niveau wie am kritischen Punkt stabilisieren sollte. Tatsächlich beobachten wir ein ähnliches Verhalten für den Betrag des Ordnungsparameters, der sich in der Nähe des kritischen Punktes wie eine Magnetisierung verhält [KLR⁺98]. Der Einfluss der vorhandenen Frustration des induzierten Spin-Modells zeigt sich jedoch daran, dass die Autokorrelationszeit nach einem dramatischen Anstieg über etwa zwei Größenordnungen ihr Maximum am Phasenübergang erreicht und beim weiteren Vordringen in die Higgs-Phase wieder sinkt, und zwar in dem Maße, wie auch die Frustration ρ allmählich auf Null fällt. Dabei ist eine einsetzende Stabilisierung von $\tau_{\text{int}}(\text{Tr}(A_0^3))$ auf einem Niveau zu beobachten, das demjenigen des Ferromagneten entspricht und etwa eine Größenordnung unterhalb des Werts direkt am kritischen Punkt zu liegen kommt. Die Fluktuationen der Eichfelder können sich dabei über den Hopping-Term in den ansonsten bereits ziemlich geordneten Higgs-Sektor ausbreiten. Auch für E_G ist nämlich zu beobachten, wie die Autokorrelationszeit am Phasenübergang zunächst zunimmt, allerdings weniger dramatisch als im Fall des Ordnungsparameters. Hat man aber den kritischen Punkt überschritten, so sinkt $\tau_{\text{int}}(E_G)$ allmählich wieder auf praktisch denselben Wert wie am anderen Ende des betrachteten Intervalls $y \in [-1, 1]$, tief in der symmetrischen Phase. Der Hopping-Term nimmt durch die direkte Vermischung der Freiheitsgrade aus dem Eich- und Higgs-Sektor als Observable eine Zwischenstellung ein, die sich auch im Verhalten der zugehörigen Autokorrelationszeit widerspiegelt. Diese zeigt einen praktisch symmetrischen Verlauf bezüglich $y_c = 0$, wobei bemerkenswert ist, dass die Autokorrelationszeit von E_H auch in der symmetrischen Phase etwa um einen Faktor zehn größer ist als die von E_G und des Ordnungsparameters, der zwischen den beiden Extremen zu interpolieren scheint.

Wie bereits festgestellt wurde, macht sich der Einsatz des Cluster-Algorithmus am Rand des untersuchten Intervalls praktisch nicht bemerkbar. Tief in der Higgs-Phase besteht dessen Effekt nur noch in einer mikrokanonischen Reflexion aller Spins (und somit auch der Skalarfelder) und die Akzeptanzrate des Spin-Updates durch den Metropolis-Algorithmus ist auf $8.2(4) \cdot 10^{-7}$ gesunken. Am anderen Ende scheinen die Auswirkungen des Cluster-Updates (Clustergröße etwa 88% aller Spins) und des Metropolis-Updates (Akzeptanzrate: 0.03195(6)) in etwa gleich effektiv zu sein. Die Überlegenheit des Cluster-Algorithmus deutet sich erst bei der Annäherung an den kritischen Punkt an, an dem die Korrelation aufeinander folgender Konfigurationen einer Markov-Kette erwartungsgemäß am stärksten ist. Aus Abbildung 3.11 geht dabei hervor, dass sich der Einsatz des Cluster-Algorithmus interessanterweise besonders bei der Verringerung von $\tau_{\text{int}}(E_G)$ bemerkbar macht, obwohl sich die kollektive Aktualisierung von langreichweitigen Spin-Moden ja nur indirekt, nämlich über den kinetischen Term der Skalarfelder (3.31) auf die Eichfelder auswirken kann. Auch für den Hopping-Term ergibt sich eine Verbesserung in etwa derselben Größenordnung. Bezeichnen wir das Verhältnis der integrierten Autokorrelationszeiten einer Observablen \mathcal{O} bei Verwendung des Metropolis- bzw. Cluster-Algorithmus mit $R(\mathcal{O}) = \tau_{\text{int}}^M(\mathcal{O})/\tau_{\text{int}}^C(\mathcal{O})$, so finden wir für die drei untersuchten Observablen:

$$R(E_G) = 3.33 \pm 1.25 , \quad R(E_H) = 3.31 \pm 1.74 , \quad R(|\text{Tr}(A_0^3)|) = 2.67 \pm 1.48 . \quad (3.35)$$

Die vergleichsweise großen Fehler sind dabei eine Folge der beachtlichen Unsicherheiten bei der Bestimmung der Autokorrelationszeiten unter Verwendung des Referenz-Metropolis-Algorithmus, dessen Akzeptanzrate bei der Aktualisierung der Spins am Phasenübergang zu $1.2(1) \cdot 10^{-3}$ bestimmt wurde. Insbesondere im Fall von E_H und $|\text{Tr}(A_0^3)|$, für die sich integrierte Autokorrelationszeiten $\tau_{\text{int}}^M > 2000$ ergeben haben, erscheint es daher im Nachhinein als unbedingt notwendig, längere Zeitreihen als die hier verwendeten zu analysieren, um den Fehler weiter eingrenzen zu können. Noch gravierender erweisen sich die Unsicherheiten beim Vergleich dieser Ergebnisse mit den Autokorrelationszeiten, die für E_G und E_H aus Simulationsergebnissen extrahiert wurden, die ohne die Einbettung von Ising-Spins mit einem reinen Metropolis-Algorithmus gewonnen wurden. Für die Energie der Eichfelder finden wir ungefähr eine Reduktion der integrierten Autokorrelationszeit um einen Faktor sieben, für den Hopping-Term um etwa einen Faktor fünf bei Verwendung des Cluster-Algorithmus.

Obwohl diese Werte sicherlich nur einer groben Orientierung dienen können, lassen sich daraus bereits mehrere Einsichten gewinnen: Zum einen erscheint es klar zu sein, dass der Einsatz des Cluster-Algorithmus bei der Simulation einer dreidimensionalen euklidischen $SU(3)$ -Eichtheorie mit Skalarfeld in der adjungierten Darstellung tatsächlich einen messbaren Effekt bei der Bekämpfung von Autokorrelationen am kritischen Punkt der Theorie hat. Dies bestätigt die in [CEPS93] geäußerte Vermutung, dass das in unserem Fall tatsächlich beobachtete ungezügelte Anwachsen der Cluster in einer vergleichsweise großen Umgebung des kritischen Punktes nicht notwendigerweise die völlige Nutzlosigkeit eines solchen Algorithmus zur Folge haben muss, sofern dieser auf der *Einbettung* von Ising-Spins basiert. Zum anderen scheint sich die gewählte Einbettung der Spins als durchaus sinnvoll zu erweisen, denn unabhängig von der Wahl des Algorithmus zur Aktualisierung dieser zusätzlichen Variablen gelingt es durch deren Einführung überhaupt erst, das System am kritischen Punkt in akzeptabler Zeit ins thermische Gleichgewicht zu bringen, so dass es möglich wird, eine Autokorrelationszeit auch für den Ordnungsparameter $\text{Tr}(A_0^3)$, die sensibelste der untersuchten Observablen, bestimmen zu können. Vergleicht man zuletzt die Effizienz des Cluster-Algorithmus mit der des Referenz-Metropolis-Algorithmus in Bezug auf die Verminderung von Korrelationen im Verhältnis zum numerischen Aufwand, so kann festgestellt werden, dass ersterer auch in diesem Punkt überlegen ist und darüber hinaus vermutlich noch größeres Entwicklungspotential besitzt. Beispielsweise hat sich bei der Untersuchung des zweidimensionalen σ -Modells mit $O(4)$ -Symmetrie gezeigt, dass die mehrfache Durchführung eines Wolff-artigen Updates je nach Einbettung der Ising-Spins eine weitere Reduzierung der Autokorrelationszeiten um einen Faktor 2 – 10 bei einer moderaten Erhöhung des numerischen Aufwands ermöglicht [CEPS93].

Eine wirklich rigorose Aussage zur Güte einer gewählten Einbettung lässt sich dabei, wie eingangs bereits erwähnt, im Prinzip nur durch das Studium von *idealisierten* Algorithmen machen. Diese werden durch schrittweise Erhöhung der Anzahl an Aktualisierungsschritten pro Sweep approximiert, wobei die Hoffnung besteht, dass sich die Ergebnisse der Untersuchung von integrierten Autokorrelationszeiten irgendwann stabilisieren und so die wirkliche Leistungsfähigkeit zu Tage tritt und mit der anderer Algorithmen verglichen werden kann.

3.6 Zusammenfassung und Ausblick

Im vorliegenden Kapitel wurde die Physik frustrierter Systeme untersucht, und zwar zum einen anhand des prototypischen zweidimensionalen Ising-Spin-Glases, zum anderen im Zusammenhang einer dimensional reduzierten nicht-abelschen Eichtheorie, welche in einem gewissen Parameterbereich die Quantenchromodynamik in der Nähe ihres thermischen Phasenübergangs modelliert.

Dabei wurde zunächst die Notwendigkeit einer eichinvarianten Klassifizierung der Frustration erläutert, falls man daran interessiert ist, verschiedene Instanzen von Ising-Spin-Gläsern unter dem Gesichtspunkt identischer thermodynamischer Eigenschaften zu klassifizieren. Unter Ausnutzung der \mathbb{Z}_2 -Eichinvarianz der Theorie konnte gezeigt werden, dass sich die Energie des Grundzustands in Landau-Eichung auf einfache Weise berechnen lässt, wobei die Anzahl der anti-ferromagnetischen Bindungen in dieser Eichung minimal wird und die zugehörige Konfiguration der Spins größtmögliche Homogenität aufweist. Mit Hilfe des *minimal matching* Algorithmus von Edmonds wurde die exakte Energie des Grundzustands als Funktion des neuen Komplexitätsparameters ρ bestimmt, wobei eine einfache Erklärung des beobachteten Verhaltens für kleine Werte von ρ gegeben werden konnte, welche nochmals die Wichtigkeit der Rolle von \mathbb{Z}_2 -Vortices bei der Klassifizierung der Frustration betont. Bei der anschließenden Simulation von Ising-Spin-Gläsern bei endlichen Temperaturen wurde ein Algorithmus eingesetzt, dessen theoretische und praktische Untersuchung gezeigt hat, dass dieser in der Lage ist, der Eichinvarianz des Modells bei der Definition der zu aktualisierenden Cluster von Spins umfassend Rechnung zu tragen. Des weiteren konnte festgestellt werden, dass dieser eichinvariante Cluster-Algorithmus zwar eine effiziente numerische Behandlung der untersuchten frustrierten Systeme in der Umgebung ihres jeweiligen pseudo-kritischen Punktes erlaubt, für Untersuchungen des Grundzustands nahe $T = 0$ allerdings aufgrund von stark anwachsenden Autokorrelationen ungeeignet erscheint.

Das zweite Anwendungsgebiet für den dimensionsunabhängig operierenden Cluster-Algorithmus war die Simulation der Quantenchromodynamik in dimensional reduzierter Form in der Nähe der kritischen Temperatur. Durch eine Einbettung von Ising-Spins in den Sektor der adjungierten Skalarfelder der Theorie konnte diese als ein frustriertes Spin-Modell in $d = 3$ Dimensionen aufgefasst werden, dessen Kopplungskonstanten dynamisch generiert werden. Eine detaillierte Untersuchung des induzierten Modells hat dabei gezeigt, dass die QCD in der symmetrischen Realisierungsphase bei hohen Temperaturen einem stark frustrierten statistischen System entspricht, während sie sich in der Phase gebrochener globaler Reflexionssymmetrie der adjungierten Skalarfelder bei niedrigeren Temperaturen als praktisch rein ferromagnetisches System erweist. Wie schon bei der Untersuchung der planaren Ising-Spin-Gläser hat sich dabei auch in diesem Fall gezeigt, dass die Verteilung der Kopplungskonstanten alleine keine sinnvolle Möglichkeit zur Klassifizierung der Frustration bietet. Die beobachtete Veränderung in Bezug auf den mittleren Betrag der Kopplungen in der Nähe des Phasenübergangs führt dabei jedoch nochmals zu einem Anwachsen der ohnehin schon verhältnismäßig großen Cluster. Eine abschließende Untersuchung der Autokorrelationszeiten diverser Observablen hat aber gezeigt, dass sich dies nicht unbedingt nachteilig auf die Effizienz des Cluster-Algorithmus im Vergleich zu verschiedenen anderer Algorithmen zur Simulation des Gesamtsystems am Phasenübergang auswirken muss.

Da sich bei der Untersuchung der planaren Ising-Spin-Gläser angedeutet hat, dass eine Erhöhung der Vortexdichte ρ eine Abschwächung des ferromagnetischen Phasenübergangs zweiter Ordnung in einen *crossover* zur Folge hat, wäre es interessant zu untersuchen, wie sich eine Veränderung der Ordnung des Phasenübergangs der QCD bei endlicher Temperatur auf die induzierte Dichte der Vortices und damit auch auf die Effizienz des Cluster-Algorithmus in der Nähe dieses Punktes auswirkt. Die Ergebnisse unserer bisherigen Untersuchungen weisen bei der Frage nach der Bekämpfung des *critical slowing down* ja bereits darauf hin, dass durch den Einsatz des Cluster-Algorithmus eine merkliche Reduzierung von Autokorrelationen in der Nähe des kritischen Punktes möglich ist. Um diese ersten Ergebnisse quantitativ noch erhärten zu können, sollten sich aber weitere Untersuchungen anschließen, die zunächst in die bereits angedeutete Richtung der Analyse von idealisierten Algorithmen gehen müssten. Erst wenn die Autokorrelationszeiten dieser Algorithmen bestimmt wurden, lässt sich auch über eine Alternative zur hier untersuchten Einbettung von Ising-Spins nachdenken, die vielleicht zu einer weiteren Verbesserung führen könnte. Es erscheint dabei sehr gut möglich, dass die in unseren bisherigen Simulationen gefundene Reduzierung der Autokorrelationen um einen Faktor der Ordnung drei nurmehr eine untere Schranke für die wahre Leistungsfähigkeit des Cluster-Algorithmus darstellt. Außerdem wäre es interessant zu überprüfen, wie der Cluster-Algorithmus in Kombination mit anderen Algorithmen zur Aktualisierung der Eichfelder und Skalarfelder, wie beispielsweise dem in Anhang B.3.3 diskutierten Heatbath-Algorithmus, funktioniert. Zuletzt muss es natürlich, wie auch im Fall der planaren Ising-Spin-Gläser, das Ziel sein, die Größe der untersuchten Systeme schrittweise zu erhöhen, um durch die Messung der jeweiligen Autokorrelationszeiten und Korrelationslängen letztlich den Wert des kritischen dynamischen Exponenten des eingesetzten Algorithmus bestimmen zu können. Die Durchführung der dazu nötigen Simulationen erscheint in jedem Fall interessant und lohnenswert.

Kapitel 4

Elektroschwache Wechselwirkung und freie Isospinladungen

4.1 Einleitung

Das Konzept des schwachen Isospins spielt eine wichtige Rolle bei der Beschreibung von Prozessen, die durch die schwache Wechselwirkung hervorgerufen werden. Das historisch gesehen erste Beispiel ist dabei der durch Enrico Fermi 1934 beschriebene β -Zerfall des Neutrons $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$, der im Rahmen der Quantenfeldtheorie, die sich als heute allgemein akzeptiertes Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung durchgesetzt hat¹, als eine Reaktion aus der Klasse der semi-leptonischen Zerfälle über geladene schwache Ströme verstanden werden kann:

$$d' \rightarrow u + W^- \rightarrow u + e^- + \bar{\nu}_e . \quad (4.1)$$

Im GSW-Modell werden die sechs mittlerweile bekannten Quarks (up, down, charm, strange, top, bottom) und Leptonen ($e, \mu, \tau, \nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$) zu drei Generationen zusammengefasst, innerhalb derer jeweils zwei linkshändige Leptonen sowie zwei linkshändige Quarks in einem $SU(2)_W$ -Doublett mit schwacher Isospinladung $T^3 = \pm 1/2$ angeordnet werden:

$$\begin{array}{lll} \text{Leptonen :} & \left(\begin{array}{c} \nu_e \\ e \end{array} \right)_L & \left(\begin{array}{c} \nu_\mu \\ \mu \end{array} \right)_L & \left(\begin{array}{c} \nu_\tau \\ \tau \end{array} \right)_L \\ \text{Quarks :} & \left(\begin{array}{c} u \\ d' \end{array} \right)_L & \left(\begin{array}{c} c \\ s' \end{array} \right)_L & \left(\begin{array}{c} t \\ b' \end{array} \right)_L \end{array} \quad (4.2)$$

Eine Umwandlung zwischen den Fermionen eines Doubletts geschieht dabei durch Emission bzw. Absorption der W^\pm -Bosonen ($T^3[W^\pm] = \pm 1$), und die elektrische Ladung Q ergibt sich in dieser Theorie als $Q = T^3 + Y$, wobei die sogenannte *Hyperladung* Y mit einer zusätzlichen abelschen $U(1)_Y$ -Symmetrie verknüpft ist. Dadurch ist die Gruppenstruktur $SU(2)_W \times U(1)_Y$ des GSW-Modells festgelegt. Die Eigenzustände (d', s', b') der schwachen Wechselwirkung stimmen jedoch nicht mit den Eigenzuständen der starken Wechselwirkung überein, sondern ergeben sich als Linearkombinationen der Quark-Felder (d, s, b) der QCD. Diese Mischung wird durch die sogenannte CKM-Matrix (Cabibbo 1963, Kobayashi, Maskawa

¹Ausführliche Darstellungen des von Glashow und Weinberg (1967), sowie unabhängig davon von Salam (1968) vorgeschlagenen GSW-Modells finden sich beispielsweise in [Wei96, PS95].

1973) parametrisiert [CL84]. Durch Wahl eines geeigneten Potentialterms für ein fundamentales Higgs-Feld, welches neben schwacher Isospinladung auch Hyperladung $Y = 1/2$ trägt und auf diese Weise an die $SU(2) \times U(1)$ Eichtheorie angekoppelt wird, kann – nach Wahl einer Eichung – das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung bzw. die Ausbildung eines skalaren Kondensats beobachtet werden. Das Ergebnis im Spektrum der resultierenden Theorie ist das Auftreten einer masselosen vektoriellen Anregung, die mit dem Photon identifiziert wird, sowie die Generierung von Massentermen für die intermediären geladenen Vektorbosonen W^\pm und dem neutralen Vektorboson Z^0 , welche die schwache Wechselwirkung über geladene bzw. neutrale Ströme vermitteln². Diese vier verschiedenen Eigenzustände ergeben sich dabei als unterschiedliche Linearkombinationen der vier Eichfelder, die in der symmetrischen Realisierungsphase der Theorie als masselos angenommen werden und mit den drei Generatoren der Symmetriegruppe des schwachen Isospins $SU(2)_W$, sowie dem Generator der Hyperladungssymmetrie $U(1)_Y$ verknüpft sind. Die Massen der Fermionen ergeben sich ebenfalls im Rahmen des Higgs-Mechanismus durch Ausbildung eines Kondensats für das fundamentale Skalarfeld, das die links- und rechtshändigen Fermionen in der Lagrangedichte der Theorie durch eine Yukawa-Kopplung auf eichinvariante Weise miteinander verknüpft.

Offensichtlich kommt dem Higgs-Feld in dieser Konstruktion eine entscheidende Bedeutung zu. Allerdings ist zunächst nicht klar, ob davon ausgegangen werden kann, dass die Annahmen über das Verhalten der Theorie beim Übergang von der Ebene der klassischen Feldtheorie, auf der die Konstruktion des GSW-Modells erfolgt, zur zugehörigen quantisierten Feldtheorie ihre Gültigkeit in vollem Umfang behalten. Numerische Untersuchungen weisen nämlich darauf hin, dass sich die Hypothese eines *mass gap* in quantisierten Yang-Mills-Theorien (ohne Materiefelder) zu bestätigen scheint, und zwar in dem Sinne, dass sowohl die sogenannten *glue balls* als (eichinvariante) Anregungen niedrigster Energie im Spektrum massiv sind [BB83, MT89], als auch den Gluonen selbst formal eine dynamisch erzeugte Masse zugeordnet werden kann³, obwohl in der Lagrangedichte der reinen Yang-Mills-Theorie keinerlei Massenterme auftreten. Ferner liegt überwältigende numerische Evidenz dafür vor, dass das Auftreten des Confinement-Phänomens in reinen Eichtheorien auf der nicht-abelschen Natur der Symmetriegruppe beruht, denn ein lineares Anwachsen des Potentials zwischen statischen Materiefeldquellen bei zunehmendem Abstand derselben konnte nicht nur im Fall der für die QCD relevanten $SU(3)$ –Yang-Mills-Theorie nachgewiesen werden [Sta84, BS92], sondern ebenfalls bei der Untersuchung der speziellen unitären Gruppen $SU(2)$ [Cre80, LR82, Sta83], $SU(4)$ [WO01], $SU(5)$ [Cre81], $SU(6)$ [CM82b], sowie den exzeptionellen Lie-Gruppen Sp_2 und G_2 [HMPW03, HPW04]. Dies ist insofern von Bedeutung, als dass der schwache Isospin im Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung ebenfalls eine nicht-abelsche Eichsymmetrie ist, gleichwohl jedoch die (linkshändige) Leptonen (4.2) frei beobachtet werden können. Außerdem hat der experimentelle Nachweis der massiven Vektorbosonen W^\pm [PRSZ01] auf direktem Wege gezeigt, dass die Eichbosonen des GSW-Modells trotz ihrer schwachen Isospinladung ebenfalls frei beobachtet werden können, wohingegen die Eichbosonen reiner Yang-Mills-Theorien, wie beispielsweise die Gluonen im Fall der QCD, nicht als asymptotische Zustände auftreten.

²Die direkte Einführung eines Massenterms der Form $m^2 A_\mu^a(x) A^{\mu a}(x)$ in der Lagrangedichte $\mathcal{L}(x)$ einer Theorie verbietet sich bereits aufgrund der Forderung nach Eichinvarianz von $\mathcal{L}(x)$.

³Die Analyse des Gluon-Propagators in Landau-Eichung weist auf dem Gitter typischerweise auf ein solches *decoupling behaviour* hin [LRG02], jedoch wird momentan auch die Relevanz einer weiteren Lösung diskutiert, die unter der Annahme einer global definierbaren und erhaltenen BRST-Ladung ein sogenanntes *IR scaling behaviour* zeigt. Einen Überblick vermitteln beispielsweise [BQR09], sowie die darin enthaltenen Referenzen.

Das Higgs-Feld muss folglich in der Lage sein, zweierlei Aufgaben zugleich zu erfüllen: Zum einen sollen Massenterme für die Eichbosonen generiert werden, die mit dem beobachteten Spektrum übereinstimmen, zum anderen müssen schwache Isospinladungen freigesetzt werden (*isospin liberation*). Letzteres wirft insbesondere die Frage nach dem Begriff des Confinement und einem zugehörigen Ordnungsparameter in einer Theorie mit dynamischer Materie auf, die sich unter der fundamentalen Darstellung der Eichgruppe transformiert. Die im Fall einer Eichtheorie mit nicht-trivialer Zentrumssymmetrie geeigneten Wilson-Loops oder Polyakov-Linien zur eichinvarianten Charakterisierung eines Confinement-Deconfinement-Übergangs scheiden dabei aus, da die Zentrumssymmetrie durch die fundamentalen Materiefelder explizit gebrochen wird. Mögliche Alternativen wurden von Caudy und Greensite [CG08] bei der Untersuchung eines $SU(2)$ -Higgs-Modells aufgezeigt. Dabei wurde eine Verbindung zwischen der Verletzung des Kriteriums von Kugo-Ojima bzw. des Coulomb-Confinements und der spontanen Brechung einer globalen (remanenten) Symmetrie, welche der Theorie nach Fixierung der Landau- bzw. Coulomb-Eichung noch verbleibt, hergestellt. Die Auswirkungen der Fixierung verschiedener Eichungen auf das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung sowie den Higgs-Mechanismus werden wir in Kapitel 4.2 ausführlich diskutieren. Ein wesentliches Ergebnis wird die Trennung des Higgs-Mechanismus zur Erzeugung von Massentermen für Eichbosonen vom Phänomen der spontanen Symmetriebrechung sein. Dies ist insofern für das elektroschwache Standardmodell relevant, als dass die Ergebnisse von Caudy und Greensite [CG08] darauf hinweisen, dass sich eine eindeutige Unterteilung des Phasendiagramms nur vornehmen lässt, wenn Confinement als Phase *magnetischer Unordnung* aufgefasst wird, charakterisiert durch hinreichend starke Vakuumfluktuationen, die für beliebige Längenskalen ein Flächengesetz des Wilson-Loops hervorrufen. Die $SU(2)$ -Higgs-Theorie befindet sich demnach (in Einklang mit der in Kapitel 2 diskutierten analytischen Verbundenheit des Phasendiagramms) immer in einer Higgs-artigen Deconfinement-Phase (im Sinne der magnetischen Unordnung), sobald eine Kopplung ($\kappa > 0$) des Higgs-Feldes an die Eichfelder vorliegt. Unter Vernachlässigung der Hyperladungsgruppe $U(1)_Y$ sollte folglich die Freisetzung von schwacher Isospinladung allein durch die Anwesenheit des fundamentalen Higgs-Feldes ermöglicht werden, unabhängig vom Phänomen der spontanen Symmetriebrechung⁴ oder der Ausbildung eines skalaren Kondensats, obwohl alle reinen nicht-abelschen Eichtheorien ihre Farbladungen (Isospin) permanent einschließen.

Die Postulierung des Higgs-Feldes hat zweifelsohne einen großen Beitrag zum Erfolg des elektroschwachen Teils des Standardmodells der Elementarteilchenphysik in heutiger Form geliefert, dennoch wurde das Higgs-Boson in Experimenten an Teilchenbeschleunigern bis heute noch immer nicht gefunden. Darüber hinaus befinden sich einige Voraussagen des Standardmodells, wie beispielsweise die Baryonenzahlasymmetrie⁵, nicht in Einklang mit den Beobachtungen in der Natur. Es besteht daher durchaus die Möglichkeit, dass durch Experimente, welche in naher Zukunft am Beschleuniger LHC (CERN) durchgeführt werden sollen, die Existenz eines schwach wechselwirkenden fundamentalen Higgs-Bosons ausgeschlossen werden kann.

⁴Dies lässt in Abwesenheit eines thermodynamischen Phasenübergangs keine eindeutige Unterteilung des Phasendiagramms zu, da das Kugo-Ojima-Kriterium und das Coulomb-Confinement-Kriterium an unterschiedlichen Stellen des Phasendiagramms einen Verlust der Confinement-Eigenschaft der Theorie anzeigen [CG08].

⁵Vergleiche dazu auch die Diskussion des Einflusses der Higgs-Masse auf die Ordnung des elektroschwachen Phasenübergangs in Kapitel 2

Angesichts dieser Tatsachen stellt sich die Frage, ob die Ursache für das *deconfinement* des schwachen Isospins einzig und allein im bisher postulierten Higgs-Mechanismus zu finden ist, oder ob es mögliche Alternativen gibt, welche ebenfalls zu *isospin liberation* führen könnten. Im Rahmen der vorliegenden Untersuchung soll zu diesem Zweck eine auf der Symmetriegruppe $SU(3)$ basierende Eichtheorie betrachtet werden, die um ein skalares Feld in der *adjungierten* Darstellung erweitert wurde. Für diese Theorie bestehen verschiedene Realisierungsmöglichkeiten einer residuellen Symmetrie nach spontaner Brechung der Ausgangssymmetrie. Insbesondere ist der Übergang in eine Phase möglich, in welcher die residuelle Symmetriegruppe mit der Eichgruppe des elektroschwachen Standardmodells übereinstimmt. Das Ziel ist es – zunächst unter Vernachlässigung aller möglichen weiteren Kopplungen an stark wechselwirkende oder leptonische Materie – zu untersuchen, ob die resultierende effektive Theorie mit residueller Symmetriegruppe $SU(2) \times U(1)$ dazu geeignet ist, als Wegbereiter einer alternativen Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung zu fungieren, die sich nicht auf die Annahme der Existenz eines fundamentalen Higgs-Bosons stützen muss. Insbesondere sollte die Farbe (Isospin) der resultierenden $SU(2) \times U(1)$ Theorie *nicht* permanent eingeschlossen sein⁶, sondern die aus der GSW-Theorie bekannten Felder (W^\pm, Z^0 massiv, γ masselos) sollten als Isospin tragende Zustände im asymptotischen Teilchenspektrum auftauchen.

Bevor wir uns der Untersuchung des konkreten Modells zuwenden werden, wird zunächst noch das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung samt zugehöriger phänomenologischer Konsequenzen diskutiert, wobei insbesondere auf die Feinheiten bei der Formulierung einer Quantenfeldtheorie auf dem Gitter hingewiesen werden soll.

4.2 Das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung

Ausgangspunkt der Diskussion des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung im feldtheoretischen Kontext ist üblicherweise die Untersuchung des Verhaltens einer Lagrangedichte, sowie des Vakuumzustands Ω der zugehörigen Quantentheorie unter Transformationen, denen die Felder $\chi(x)$, welche in die Konstruktion der Lagrangedichte eingehen, unterworfen werden. Erweist sich die Lagrangedichte $\mathcal{L}(x)$ der klassischen Feldtheorie als *invariant* unter einer bestimmten Klasse von Transformationen, so spricht man von einer *Symmetrie der Theorie* unter diesen Transformationen, da sich die Invarianz von $\mathcal{L}(x)$ in die Invarianz der zugehörigen Wirkung $S[\chi] = \int d^4x \mathcal{L}(x)$ übersetzt, und dies wiederum die Invarianz der Euler-Lagrange-Gleichungen nach sich zieht, welche auf der Grundlage des Prinzips der stationären Wirkung als klassische Bewegungsgleichungen der Theorie bestimmt werden:

$$\delta S[\chi] = 0 \iff \partial_\mu \left(\frac{\delta \mathcal{L}(x)}{\delta \partial_\mu \chi(x)} \right) = \frac{\delta \mathcal{L}(x)}{\delta \chi(x)}. \quad (4.3)$$

Erweist sich nun der Grundzustand der zugehörigen Quantenfeldtheorie als *nicht* invariant unter derselbe Klasse von Symmetrietransformationen, so spricht man von einer *spontanen Brechung* dieser Symmetrie. Die Symmetrie der Lagrangedichte spiegelt sich also in diesem Fall nicht im Verhalten des Vakuums wieder.

⁶Bei einer Erweiterung des Modells um dynamische Materiefelder sollten diese ebenfalls, anders als die Quarks der QCD, als asymptotische Zustände des physikalischen Spektrums möglich sein. In dieser Arbeit haben wir uns jedoch als vorbereitende Studie für die volle Theorie auf eine Untersuchung der Yang-Mills-Theorie mit adjungiertem Skalarfeld und rein statischen Materiefeldern beschränkt.

Die Bestimmung von Ω , des Zustands minimaler Energie einer konkreten Quantenfeldtheorie, sowie die Klärung der Frage, unter welchen Bedingungen das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung auftreten kann, machen daher die Berücksichtigung von Quantenfluktuationen unumgänglich. Die häufig anzutreffende semi-klassische Näherung, bei der die (konstante) Vakuumkonfiguration als das Minimum des Potentialterms der Lagragedichte $\mathcal{L}(x)$ bestimmt wird, greift daher zu kurz. Allenfalls kann eine solche Näherung zur Orientierung bei der Untersuchung des Phasendiagramms einer Theorie von Interesse dienen. Im Folgenden soll daher der Formalismus der *effektiven Wirkung* einer Quantenfeldtheorie in Anwesenheit von externen Quellen als eine elegante Methode vorgestellt werden, die eine angemessene Diskussion des Phänomens unter Berücksichtigung von Quantenkorrekturen erlaubt und sich auch im Hinblick auf die später durchzuführende Analyse von Propagatoren verschiedener Felder in der Realisierungsphase einer Theorie mit spontan gebrochener Symmetrie als nützlich erweisen wird.

Der Einfachheit halber wollen wir zunächst den Fall einer Theorie von skalaren Feldern $\chi^A(x)$ betrachten, die an klassische externe Quellen $\mathcal{J}^A(x)$ gekoppelt werden. Die zugehörige Lagragedichte $\mathcal{L}(x)$ sei dabei wie üblich ein Funktional der Felder sowie der zugehörigen Ableitungen. Zunächst wird durch die Relation

$$\mathcal{Z}[\mathcal{J}] = \exp \{ iW[\mathcal{J}] \} \quad (4.4)$$

das Funktional $W[\mathcal{J}]$ als Analogon der Helmholtz'schen freien Energie eines thermodynamischen Systems der statistischen Mechanik nach Wick-Rotation definiert, wobei die Zustandssumme $\mathcal{Z}[\mathcal{J}]$ der Theorie in Anwesenheit von externen Quellen bzw. Strömen \mathcal{J} gegeben ist durch

$$\mathcal{Z}[\mathcal{J}] = \int \mathcal{D}\chi \exp \{ i \int d^4x \mathcal{L}(x) + \chi_A(x) \mathcal{J}^A(x) \} . \quad (4.5)$$

$W[\mathcal{J}]$ ist das erzeugende Funktional der verbundenen (*connected*) n -Punkt-Funktionen, welche sich gemäß

$$\frac{\delta^n W[\mathcal{J}]}{\delta \mathcal{J}^A(x_1) \cdots \delta \mathcal{J}^N(x_n)} \Big|_{\mathcal{J}=0} = (i)^{n-1} \langle \chi_A(x_1) \cdots \chi_N(x_n) \rangle_c \quad (4.6)$$

berechnen. Der Erwartungswert bezieht sich dabei allein auf die durch $\mathcal{L}(x)$ bzw. $\mathcal{Z}[0]$ definierte Theorie, ohne Berücksichtigung des Einflusses der externen Quellen. Eine wichtige Änderung ergibt sich, wenn die Quellen auch nach Ausführung der Differentiation wirksam bleiben und nicht „abgeschaltet“ werden. Betrachten wir dazu speziell die erste Funktionalableitung von $W[\mathcal{J}]$ bezüglich $\mathcal{J}(x)$:

$$\frac{\delta W[\mathcal{J}]}{\delta \mathcal{J}^A(x)} = \langle \chi_A(x) \rangle_{\mathcal{J}} =: \chi_A^{\text{cl}}(x) . \quad (4.7)$$

Der Erwartungswert des Feldes $\chi_A(x)$, den wir mit $\chi_A^{\text{cl}}(x)$ bezeichnen haben, hängt nun von der externen Quelle ab und wird häufig auch als das *klassische Feld* bezeichnet. Dieses spielt dieselbe Rolle wie die Magnetisierung M in einem Spinsystem mit lokalen Spinvariablen $\sigma(x)$ in Gegenwart eines externen Feldes H , nämlich das gewichtete Mittel über alle möglichen Fluktuationen. Bezeichnen wir mit $\mathcal{J}_\chi(x)$ diejenige Quellenfunktion $\mathcal{J}(x)$, für welche die Berechnung von (4.7) aus (4.5) gerade das klassische Feld liefert, so ist $\chi^{\text{cl}}(x)$ also die zu

$\mathcal{J}_\chi(x)$ konjugierte Variable. Die effektive Wirkung der Quantenfeldtheorie wird dann durch eine Legendre-Transformation der Form

$$\Gamma[\chi^{\text{cl}}] := W[\mathcal{J}_\chi] - \int d^4x \chi_A^{\text{cl}}(x) \mathcal{J}_\chi^A(x) \quad (4.8)$$

als Funktional des klassischen Feldes definiert. Diese stellt nach Wick-Rotation das Analogon der Gibbs'schen freien Energie eines entsprechenden thermodynamischen Systems dar. Die effektive Wirkung $\Gamma[\chi^{\text{cl}}]$ ist ebenfalls ein erzeugendes Funktional, und zwar das der sogenannten Ein-Teilchen-Irreduziblen (1PI) Korrelationsfunktionen (*proper vertices*). Betrachten wir auch hier zunächst wieder nur die erste Funktionalableitung bezüglich des klassischen Feldes:

$$\frac{\delta \Gamma[\chi^{\text{cl}}]}{\delta \chi_B^{\text{cl}}(y)} = -\mathcal{J}_\chi^B(y) . \quad (4.9)$$

Insbesondere bedeutet dies, dass also die klassischen Felder $\chi_0(x)$, welche bei *Abwesenheit* von äußerer Quellen berechnet werden, die „stationären Punkte“ der effektiven Wirkung (4.8) sind:

$$\chi_0(x) = \langle \chi(x) \rangle_{\mathcal{J}=0} \iff \left. \frac{\delta \Gamma[\chi^{\text{cl}}]}{\delta \chi^{\text{cl}}(x)} \right|_{\chi_0(x)} = 0 . \quad (4.10)$$

Da sich nach Gleichung (4.3) aus der Stationarität der Wirkung $S[\chi]$ die klassischen Bewegungsgleichungen für die Felder ergeben, kann Gleichung (4.10) folglich auch als die Bewegungsgleichung der Felder $\chi_0(x)$ aufgefasst werden, in der sämtliche durch Quantenfluktuationen hervorgerufene Korrekturen berücksichtigt wurden. Die Konfigurationen $\chi_0(x)$ beschreiben also die stabilen Vakuumzustände der Quantentheorie [Wei96]. Eine besondere Rolle nehmen dabei die Poincaré-invarianten Lösungen $\chi_0 := \chi_0(0)$ ein, wobei $x = 0$ einen beliebigen Ursprung in der Raum-Zeit bezeichnet⁷. Für diese Klasse von konstanten Vakuumzuständen berechnet sich die effektive Wirkung zu [Wei96]

$$\Gamma[\chi_0] = -\mathcal{V}_4 V_{\text{eff}}(\chi_0) , \quad \mathcal{V}_4 := \int d^4x . \quad (4.11)$$

Das sogenannte *effektive Potential* $V_{\text{eff}}(\chi_0)$ ist dabei eine gewöhnliche Funktion von χ_0 , welche auf Grund der Konvexität der effektiven Wirkung (4.8) ebenfalls konvex ist [Roe91]. Die Bestimmung des Vakuumzustands der Quantenfeldtheorie geschieht in diesem Fall durch Aufsuchen des absoluten Minimums von $V_{\text{eff}}(\chi_0)$:

$$\left. \frac{\partial V_{\text{eff}}(\chi)}{\partial \chi} \right|_{\chi_0} = 0 . \quad (4.12)$$

Das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung ist im feldtheoretischen Kontext untrennbar mit einer Entartung des Vakuums verknüpft. Um dies zu verstehen, betrachten wir die wichtige Klasse der *linearen* Transformationen L

$$L : \chi \rightarrow \chi' , \quad \chi_n(x) \mapsto \chi'_n(x) = L_{nm} \chi_m(x) , \quad (4.13)$$

die eine infinitesimale Transformation der Felder in der Form

$$\delta \chi_n(x) = i \epsilon^a [t^a]_{nm} \chi_m(x) \quad (4.14)$$

⁷Eine Diskussion der Konstruktion räumlich lokalisierter, interpolierender Lösungen $\chi(x)$ von Gleichung (4.10) findet sich beispielsweise in [PS95].

hervorrufen, wobei die t^a endlichdimensionale, darstellungsabhängige Generatoren der infinitesimalen Transformation darstellen⁸. Lineare Transformationen spielen deshalb eine so wichtige Rolle, da für sie aus der Invarianz von Lagragedichte und Maß in (4.5) auch die Invarianz der effektiven Wirkung (4.8) unter derartigen Transformationen folgt [Wei96]:

$$\Gamma[L\chi^{\text{cl}}] = \Gamma[\chi^{\text{cl}}] \iff \int d^4x \frac{\delta\Gamma[\chi^{\text{cl}}]}{\delta\chi_n^{\text{cl}}(x)} [t^a]_{nm} \chi_m^{\text{cl}}(x) = 0. \quad (4.15)$$

Durch Anwendung der Kettenregel in Gleichung (4.9) lässt sich leicht zeigen, dass dies aber auch die Invarianz des erzeugenden Funktionalen $W[\mathcal{J}_\chi]$ zur Folge hat. Spontane Symmetriebrechung liegt nun vor, wenn sich mindestens eine der verbundenen n -Punkt-Funktionen (4.6) (bzw. Wightman-Funktionen im Kontext der konstruktiven Feldtheorie [Str77]) als nicht invariant unter der Wirkung der (nicht-trivialen) Transformationen L (4.13) erweist:

$$\langle \chi'_A(x_1) \cdots \chi'_N(x_n) \rangle_c \neq \langle \chi_A(x_1) \cdots \chi_N(x_n) \rangle_c. \quad (4.16)$$

Insbesondere ist dies erfüllt, wenn $\chi_0(x)$ gemäß Gleichung (4.10) eine nicht-triviale Lösung der Minimumsbedingung der effektiven Wirkung (bzw. χ_0 im Fall der Poincaré-invarianten Lösungen von (4.12) für das effektive Potential) darstellt. Da zu jeder solchen Lösung aber nun auch eine transformierte Lösung $L\chi_0(x)$ existiert, welche derselben Minimumsbedingung genügt, liegt eine Entartung des Vakuums vor. Weist die Theorie beispielsweise eine globale Reflexionssymmetrie der Form

$$\chi(x) \mapsto -\chi(x) \quad \forall x \in \mathcal{M}_4 \quad (4.17)$$

auf, so handelt es sich um eine zweifache Entartung des Vakuums.

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass eine rein störungstheoretische Behandlung des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung mit einigen Schwierigkeiten verbunden ist, und zwar bereits selbst dann, wenn es sich nur um die Brechung einer diskreten globalen Symmetrie handelt. Um dies zu verstehen, soll für das Potential, welches in die Konstruktion der Lagragedichte der Theorie eingeht, wie üblich die typische, unter Spiegelungen symmetrische Form des Querschnitts eines Sombreros (*mexican hat*) angenommen werden. Die klassischen Minima dieses Potentials seien die beiden (konstanten) Lösungen χ_0 und $-\chi_0$, was die Reflexionssymmetrie der Theorie widerspiegelt. Die spontane Brechung der Symmetrie geschieht nun durch die Wahl von einem der beiden Zustände als Ausgangspunkt einer störungstheoretischen Behandlung, welche auf der Betrachtung kleiner Fluktuationen um eben dieses Minimum beruht. Allerdings zeigt eine Analyse des Potentialterms $V(\chi_0)$ auf Ebene der Lagragedichte, dass zwischen den beiden Lösungen χ_0 und $-\chi_0$ ein Intervall existiert, in dem die zweite Ableitung des Potentials negativ wird, also ein lokales Maximum vorliegen muss. Dies stellt aber einen Widerspruch zu der Annahme eines stabilen Minimums dar, auf der die störungstheoretische Entwicklung basiert, welche folglich nur in einem eingeschränkten Bereich Gültigkeit besitzen kann. Ausschlaggebend für die Klärung der Frage, ob sich das System in einer bezüglich (4.17) symmetrischen oder unsymmetrischen Phase befindet, ist wie bereits erläutert vielmehr die Form des *effektiven* Potentials. Da das effektive Potential ebenfalls die Reflexionssymmetrie von $V(\chi_0)$ besitzt, folgt zusammen mit der

⁸Für hermitesche Skalarfelder beispielsweise handelt es sich bei $[t^a]_{nm}$ um die Generatoren $[t_A]_{nm}$ in adjungierter Darstellung (D.17), folglich ist $i[t]_{nm}$ eine reelle, anti-symmetrische Matrix.

Konvexität von $V_{\text{eff}}(\chi_0)$, dass ein solches Potential notwendigerweise genau *ein* Minimum (bei $\chi_0 = 0$) besitzen muss, sofern es sich bei $V_{\text{eff}}(\chi_0)$ um eine analytische Funktion handelt. Das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung lässt sich daher (wie auch das Phänomen eines Phasenübergangs) durch den Verlust der Analytizität einer bestimmten Funktion charakterisieren⁹. Da $V_{\text{eff}}(\chi_0)$ auf einem endlichen Gitter immer analytisch ist, ergibt sich als wichtige Konsequenz, dass das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung strenggenommen nur im thermodynamischen Limes einer diskretisierten Quantenfeldtheorie beobachtet werden kann, falls die Analytizität des effektiven Potentials dabei möglicherweise verloren geht. In *quantenmechanischen* Systemen hingegen erweist sich der Grundzustand immer als eindeutig [GJ87]. Bei der Untersuchung von Quantenfeldtheorien auf endlichen Gittern sind daher besondere Maßnahmen zu treffen, die es erlauben, die spontane Brechung einer Symmetrie dennoch beobachten zu können. Diese Maßnahmen werden im konkreten Fall weiter unten noch zu diskutieren sein.

4.2.1 Globale Symmetrie und das Theorem von Goldstone

Als nächstes soll die spontane Brechung einer globalen *kontinuierlichen* Symmetrie betrachtet werden. Dieser Vorgang ist mit dem Auftreten von masse- und spinlosen Anregungen im Spektrum der Theorie verknüpft, den sogenannten Goldstone-Bosonen [Gol61]. Ein besonders einfacher Beweis des Theorems von Goldstone kann im Rahmen des Formalismus der effektiven Wirkung gegeben werden und soll hier kurz rekapituliert werden. Dies dient vor allem dem Zweck, die bei der Diskussion der spontanen Brechung einer kontinuierlichen Symmetrie üblicherweise verwendete Terminologie einzuführen, was uns in die Lage versetzen wird, die im Folgenden jeweils zu diskutierenden Unterschiede bei der Betrachtung von globalen und lokalen Symmetriegruppen besser zu verstehen.

Die globale kontinuierliche Transformation der Felder sei in infinitesimaler Form durch Gleichung (4.14) gegeben, und die Invarianz der effektiven Wirkung unter dieser Transformation findet ihren Ausdruck in Gleichung (4.15). Beschränken wir uns wiederum nur auf Poincaré-invariante Konfigurationen, deren Spektralzerlegung folglich nur eine Komponente zum (Vierer-) Impuls $p = 0$ besitzt, so folgt nach nochmaliger Differentiation von (4.15) bezüglich der l -Komponente eines solchen Feldes χ_l und anschließender Auswertung des gewonnenen Ausdrucks für eine Konfiguration χ_0 , welche zu einem stationären Punkt des effektiven Potentials (4.12) gehört:

$$\left. \frac{\partial^2 V_{\text{eff}}(\chi)}{\partial \chi_l \partial \chi_n} \right|_{\chi=\chi_0} [t^a]_{nm} [\chi_0]_m = 0. \quad (4.18)$$

Unter Verwendung von Gleichung (4.7) und (4.9) lassen sich leicht die folgenden Ausdrücke für die verbundenen Zwei-Punkt-Funktionen und ihre zugehörigen 1PI-Anteile berechnen:

$$\begin{aligned} \Delta_{AB}(x, y) &:= \frac{\delta^2 W[\mathcal{J}]}{\delta \mathcal{J}^A(x) \delta \mathcal{J}^B(y)} = \frac{\delta \chi_B^{\text{cl}}(y)}{\delta \mathcal{J}^A(x)}, \\ \Pi^{AB}(x, y) &:= \frac{\delta^2 \Gamma[\chi^{\text{cl}}]}{\delta \chi_A^{\text{cl}}(x) \delta \chi_B^{\text{cl}}(y)} = -\frac{\delta \mathcal{J}^B(y)}{\delta \chi_A^{\text{cl}}(x)}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

⁹Das effektive Potential erweist sich dabei als eine symmetrische, aber nunmehr stückweise konstante Funktion, welche die konvexe Hülle des Potentials $V(\chi_0)$ bildet. Die Menge aller Minima des effektiven Potentials $V_{\text{eff}}(\chi_0)$ besteht daher aus der Vereinigung aller Linearkombinationen $\chi = \alpha \chi_0 + (\alpha - 1)\chi_0$, $\alpha \in]0, 1[$ mit den Werten χ_0 und $-\chi_0$, welche sich als Erwartungswerte sogenannter „extremaler Zustände“ ergeben [Roe91].

Definieren wir nun wie üblich den allgemeinen Propagator $D_{AB}(x, y)$ eines Feldes $\chi(x)$ gemäß

$$D_{AB}(x, y) := \langle \chi_A(x) \chi_B(y) \rangle_c = -i \frac{\delta^2 W[\mathcal{J}]}{\delta \mathcal{J}^A(x) \delta \mathcal{J}^B(y)} \Big|_{\mathcal{J}=0}, \quad (4.20)$$

so erweist sich $-i \Pi^{AB}(x, y)$ aufgrund von Gleichung (4.19) als dessen Inverse. Da die zweite Ableitung des effektiven Potentials in Gleichung (4.18), ausgewertet für eine zu $\mathcal{J} = 0$ gehörige konstante Konfiguration χ_0 , gerade die Summe aller 1PI-Diagramme darstellt, deren mit l und n bezeichnete externe Linien (Vierer-)Impuls Null tragen, lässt sich Gleichung (4.18) ebenfalls umformulieren zu:

$$D_{ln}^{-1}(p=0) [t^a]_{nm} [\chi_0]_m = 0. \quad (4.21)$$

Falls nun das Vakuum einer Theorie mit globaler kontinuierlicher Symmetrie eine nicht-triviale Konfiguration χ_0 ist, die das effektive Potential minimiert, so ist aufgrund von Gleichung (4.16) die spontane Brechung dieser Symmetrie gleichbedeutend mit der Feststellung, dass χ_0 nicht von allen Generatoren $[t^a]$ der Symmetriegruppe G annihiliert werden kann. All diese Vektoren sind aber nach Gleichung (4.21) die nicht-trivialen Eigenvektoren von $D_{ln}^{-1}(0)$ zum Eigenwert Null, folglich besitzt der zugehörige Propagator $D_{nm}(p)$ für jeden dieser Vektoren eine Polstelle bei $p^2 = 0$. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass der Rang des Residuums dieses Pols gleich der Dimension des durch die $t^a \chi_0$ (mit $a = 1 \dots \dim(\mathcal{L}G)$) aufgespannten Vektorraums ist [Wei96]. Dies ist die Aussage des Theorems von Goldstone:

Für jede unabhängige, spontan gebrochene kontinuierliche globale Symmetrie tritt ein masseloses Boson im Spektrum der Theorie auf.

Eine *vollständige* Symmetriebrechung tritt auf, wenn *keiner* der Generatoren der ursprünglichen Lie-Gruppe G der Theorie das Vakuum annihiliert. In diesem Fall transformiert die gesamte Symmetriegruppe G , die gebrochen erscheint, alle Vakuumzustände Ω ineinander und die Entartung des Grundzustands ist maximal. Transformationen, die das Vakuum *invariant* lassen, werden hingegen von denjenigen Generatoren erzeugt, die χ_0 annihilieren. Diese Transformationen bilden die sogenannten *residuellen Symmetrien* der Theorie, und die zugehörige Untergruppe wird üblicherweise mit H bezeichnet. Handelt es sich dabei um eine invariante Untergruppe von G , so ist der *Coset* G/H ebenfalls eine Gruppe, welche alle spontan gebrochenen Symmetrien umfasst. Im Gegensatz zu den mit G/H assoziierten bosonischen Anregungen macht das Theorem von Goldstone keine Aussage über Anregungen, die mit der residuellen Symmetriegruppe H verknüpft sind, da diese trivialerweise im Kern der durch $D^{-1}(0)$ vermittelten linearen Abbildung (4.21) liegen.

Zuletzt soll angemerkt werden, dass die Renormierung einer Quantenfeldtheorie in der Nambu-Goldstone-Phase durch Verwendung derselben G -invarianten Konterterme wie in der Wigner-Weyl-Phase möglich ist [Col84], die Frage nach der Renormierbarkeit einer Theorie bleibt daher vom Phänomen der spontanen Symmetriebrechung unberührt [Col88].

4.2.2 Eichsymmetrie und das Higgs-Phänomen

Weitet man die globale kontinuierliche Symmetrie durch Hinzunahme von Eichfeldern auf eine *lokale* Symmetrie der Theorie aus, so ergeben sich einige wesentliche Änderungen, die vor allem die phänomenologischen Konsequenzen betreffen und im Folgenden zusammen mit den eher subtilen Punkten der üblicherweise vorzufindenden Erklärungen des Higgs-Mechanismus zur Generierung von Eichbosonenmassen diskutiert werden sollen.

Zunächst ist es wichtig sich zu vergegenwärtigen, dass physikalische Observablen in einer Eichtheorie gerade durch die Invarianz der anfallenden Messwerte unter Eichtransformationen ausgezeichnet sind. Folglich besteht bei der Untersuchung einer auf eichinvariante Weise formulierten Quantenfeldtheorie im Prinzip auch keine Notwendigkeit, eine Eichung zu fixieren, um physikalisch relevante Größen, wie etwa das Massenspektrum der Theorie, berechnen zu können. Die Wahl einer bestimmten Eichung wird jedoch erforderlich, wenn eine Verbindung zu einer Kontinuumsformulierung der Theorie hergestellt werden soll, deren Behandlung im Rahmen einer störungstheoretischen Entwicklung die Fixierung einer Eichung unumgänglich macht.

Obwohl die störungstheoretisch gewonnenen Resultate im Falle des Modells von Glashow, Salam und Weinberg sicherlich zur Akzeptanz des Higgs-Mechanismus als Option bei der Beschreibung von elektroschwachen Wechselwirkungen beigetragen haben, hat der perturbative Zugang rückblickend betrachtet allerdings ebenso maßgeblich zur Etablierung einer irreführenden Terminologie, sowie einer unnötigen Verknüpfung des Higgs-Phänomens mit dem Phänomen der spontanen Symmetriebrechung beigetragen. Eine spontane Brechung der Eichsymmetrie kann nämlich unter keinen Umständen¹⁰ auftreten, wie von Elitzur [Eli75] bewiesen wurde. Dies hat zur Folge, dass alle Green'schen Funktionen der Theorie aufgrund ihrer Eichvarianz verschwinden. Insbesondere gilt dies für den Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes, der nun nicht mehr länger als Ordnungsparameter fungieren kann, wodurch auch eine direkte Übertragung der im Falle einer kontinuierlichen globalen Symmetrie durchgeföhrten Analyse unmöglich wird. Üblicherweise wird das Problem durch die Wahl der sogenannten unitären Eichung¹¹ gelöst. Dass sich dies als besonders geschickt erweist, wird folgendermaßen klar: Zum einen wird durch die Fixierung einer Eichung die lokale Symmetrie der Theorie *en passant* explizit gebrochen und somit dem Theorem von Elitzur die Grundlage entzogen, so dass das Skalarfeld nun wieder einen Vakuumerwartungswert entwickeln kann. Dieser wird ebenfalls mit χ_0 bezeichnet und stimmt in unitärer Eichung mit der Vakuumkonfiguration der zugehörigen ungeeichten Theorie überein¹². Zum anderen macht man sich die Tatsache zunutze, dass im Falle einer kompakten Gruppe G für jedes Skalarfeld $\chi(x)$ die Darstellung

$$\chi(x) = U(x) \tilde{\chi}(x), \quad U(x) := \exp\{i\xi(x)\}, \quad \xi(x) = \xi^c(x) t^c \in \mathcal{L}G/\mathcal{L}H \quad (4.22)$$

existiert [Wei96, Roe01], wobei $\tilde{\chi}(x)$ durch die Relation

$$\tilde{\chi}_n(x) [t^a]_{nm} [\chi_0]_m = 0 \quad (4.23)$$

ausgezeichnet ist. Die Fixierung der unitären Eichung besteht in der Durchführung der Transformation

$$\chi(x) \rightarrow \chi^u(x) = U^{-1}(x)\chi(x) = \tilde{\chi}(x). \quad (4.24)$$

Dadurch werden die $\dim(G) - \dim(H)$ Goldstone-Bosonen, die sich (bis auf Normierung) eindeutig mit den Feldern $\xi^c(x)$ aus dem Quotienten $\mathcal{L}G/\mathcal{L}H$ identifizieren lassen, aus der eichfixierten Theorie eliminiert. Zurück bleiben die nach Gleichung (4.23) zu den Goldstone-Bosonen orthogonalen physikalischen Freiheitsgrade. Im Kontext der üblicherweise nachzu-

¹⁰Eine Ausnahme stellen Eichtheorien mit einem Gibbs-Maß dar, welches nicht positiv definit ist. Wird diese implizite Annahme des Beweises aufgegeben, so kann gezeigt werden, dass die Eichinvarianz einer Theorie alleine nicht mehr ausreicht, um die spontane Brechung von lokalen Symmetrien zu verhindern [Spl03].

¹¹Für eine ausführliche Diskussion siehe beispielsweise [Wei96], Kapitel 19.6 und 21.1.

¹²Dieser Punkt erweist sich als wesentlich dafür, um zu demselben Ergebnis wie bei einer eichinvarianten Behandlung des Higgs-Phänomens zu gelangen [ST95].

lesenden perturbativen Diskussion der Massengenerierung¹³ für die vormals als masselos angenommenen Eichbosonen, findet sich an dieser Stelle die von Coleman [Col88] geprägte Formulierung, dass die sogenannten *Would-be-Goldstone-modes* $\xi^c(x)$ von den mit den gebrochenen Generatoren assoziierten Eichfeldern „aufgegessen“ werden, wodurch diese sowohl eine Masse erhalten, als auch einen dritten Polarisationsfreiheitsgrad hinzugewinnen.

An dieser Stelle soll nochmals darauf hingewiesen werden, dass eine vollständig eichinvariante Diskussion des Higgs-Mechanismus mit all seinen phänomenologischen Implikationen möglich ist, ohne auf das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung im Kontext einer Eichtheorie zurückgreifen zu müssen [FMS81]. Dabei wird klar, dass die *Would-be-Goldstone-modes* reine Eichartefakte sind, die folglich in keiner Eichung eine Rolle spielen können. Die unitäre Eichung ist nun insofern ausgezeichnet, als dass dies hier besonders manifest wird, da die zugehörigen Felder gänzlich aus der Lagrangedichte verschwinden. Tatsächlich ist es aber ebenfalls möglich, unter der Voraussetzung, dass eine lokale und kovariante Eichung in einer quantisierten Eichfeldtheorie fixiert wurde, eine rigorose Behandlung des gesamten Phänomens durchzuführen, ohne dabei auf eine konkrete Lagrangedichte oder die Existenz eines Higgs-Feldes Bezug zu nehmen [Str77]. Die Abstraktion von konkreten feldtheoretischen Modellen, die sich als invariant unter bestimmten Symmetrietransformationen erweisen, besteht in der Untersuchung der Konsequenzen der Existenz zugehöriger *erhaltener Ströme*. Tatsächlich lässt sich zeigen, dass das Goldstone-Theorem als ein Sonderfall des Noether-Theorems [Noe18] bei vorliegender spontaner Symmetriebrechung aufgefasst werden kann [O'R90]. Die Ausweitung auf den Fall lokaler Symmetrien macht dabei von einer Besonderheit der zugehörigen erhaltenen Ströme Gebrauch [Str76] und geschieht im Rahmen einer Erweiterung der axiomatischen Feldtheorie auf den Fall einer Theorie mit indefiniter Metrik, was zu einem Verlust der Positivität der Theorie führt und die üblichen Fragen nach der Konstruktion eines Hilbert-Raums der physikalischen Zustände aufwirft. Eine wesentliche Voraussetzung bei den Beweisen eines generalisierten Goldstone- und Higgs-Theorems [Str77] ist dabei in der speziellen Gruppenstruktur zu finden, die einer Eichtheorie zugrunde liegt. Da dies für die anstehenden Untersuchungen auf dem Gitter ebenfalls relevant ist, soll dieser Punkt hier kurz erläutert werden.

Die Symmetriegruppe einer Eichtheorie sei eine Lie-Gruppe G , deren Wirkung auf die Felder $\chi(x)$ in infinitesimaler Form durch

$$\delta\chi_n(x) = i \epsilon^a(x) [t^a]_{nm} \chi_m(x) \quad (4.25)$$

gegeben ist. Aufgrund der Ortsabhängigkeit der Komponentenfunktionen $\epsilon^a(x)$ werden die zugehörigen Gruppenelemente $g_\epsilon(x) \in G$ als *lokale* Symmetrietransformationen, oder wie in [Str77] auch als *Eichtransformationen zweiter Art* bezeichnet. Diejenigen Elemente $g_\epsilon \in G$ hingegen, die mit $\epsilon := (\epsilon^a = \text{const}, \epsilon^b = 0, b \neq a)$ assoziiert werden, wobei es mindestens eine zugehörige Eichtransformation zweiter Art der Form $\epsilon := (\epsilon^a \neq \text{const}, \epsilon^b = 0, b \neq a)$ gibt, bilden die Untergruppe $\mathcal{G} \subset G$ der *Eichtransformationen erster Art*. Wird die Eichtheorie durch Erweiterung einer globalen Symmetrie auf eine lokale Symmetrie durch Hinzunahme von Eichfeldern erzeugt, so fallen die Eichtransformationen erster Art natürlich trivialerweise mit den ursprünglichen globalen Symmetrietransformationen zusammen. Eine Theorie kann aber durchaus auch noch andere (globale) Symmetrien aufweisen, wie beispielsweise die chirale Symmetrie der QCD, die keine Entsprechung in lokalen Transformationen finden. Aus

¹³Vergleiche beispielsweise die Darstellung in [PS95].

diesem Grund – und weil der Begriff „lokal“ in [Str77] für Automorphismen auf Ebene der $*$ -Algebra \mathcal{F} der *lokalen* Felder reserviert ist – erscheint die Unterscheidung von Eichtransformationen erster und zweiter Art, die in der Lagrange’schen Formulierung beide auf die lokalen Felder der Theorie angewandt werden, also durchaus sinnvoll zu sein.

In einer Quantenfeldtheorie mit indefiniter Metrik existieren nun unter der Voraussetzung einer fixierten Eichung zwei Signaturen für das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung: Prinzipiell tritt für jede gebrochene Symmetrie notwendigerweise eine Singularität der Form $\delta(p^2)$ in der Fourier-Zerlegung von Erwartungswerten lokaler Operatoren auf. Dies ist die Aussage des generalisierten Goldstone-Theorems [Str77]. Falls die zugehörigen lokalen Generatoren nun mit Eichtransformationen erster Art assoziiert sind, so liefern diese Singularitäten aber *keinen* Beitrag bei der Berechnung physikalischer Matrixelemente und führen insbesondere nicht zum Auftreten spin- und masseloser Anregungen im Hilbert-Raum der physikalischen Zustände. In diesem Fall geschieht die spontane Symmetriebrechung durch den *Higgs-Mechanismus*. Für alle anderen Generatoren, die nicht mit \mathcal{G} assoziiert werden können, verläuft die spontane Symmetriebrechung mittels des *Goldstone-Mechanismus* und ist durch das Auftreten von masselosen Goldstone-Bosonen im physikalischen Spektrum der Theorie charakterisiert. Diese finden sich bei der Untersuchung der spektralen Dichte $\rho(\mu^2)$ einer Källén-Lehmann-Darstellung (siehe beispielsweise [Wei95], Kapitel 10.7) der zugehörigen Propagatoren als $\delta(\mu^2)$ –Singularität wieder. Besitzt die Theorie hingegen ein *mass gap*, so verschwindet die Spektraldichte unterhalb des Quadrats der Masse m_p der niedrigsten Anregung und es tritt eine Lücke zwischen $\mu^2 = m_p^2$ und der Schwelle für Mehrteilchenzustände $\mu^2 = 4m_p^2$ auf. In diesem Zusammenhang ist es wichtig festzuhalten, dass im Falle des Higgs-Mechanismus Aussagen über das Verhalten derjenigen Eichbosonen, die mit den *ungebrochenen* Generatoren von \mathcal{G} assoziiert sind, nur unter sehr speziellen Voraussetzungen möglich sind [Str77]. Wichtig scheint dabei in jedem Fall die abelsche oder nicht-abelsche Natur der residuellen Symmetriegruppe zu sein. Beispielsweise lassen sich die Gluonen einer reinen Yang-Mills-Theorie auf Basis einer Eichgruppe G zwar ebenfalls mit den Generatoren einer zugehörigen ungebrochenen Symmetrie \mathcal{G} erster Art assoziieren, nicht-perturbative Untersuchungen einer $SU(2)$ –Eichtheorie in Landau-Eichung haben aber gezeigt, dass individuelle Gluonen nicht im physikalischen Spektrum der Theorie auftreten, was sich am Verlust der Positivität der gluonischen Spektraldichte $\rho(\mu^2)$ ablesen lässt [LRG02] und dem Wirken eines Confinement-Mechanismus zugeschrieben wird. Im physikalisch noch interessanteren Fall $G = SU(3)$ hat sich außerdem gezeigt, dass die niedrigsten eichinvarianten (und somit physikalischen) Anregungen, die sogenannten *glue balls*, eine endliche Masse aufweisen [MT89]. Offensichtlich ist also auch bei der Untersuchung des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung im Kontext nicht-abelscher Eichtheorien die Verwendung nicht-perturbativer Methoden durchaus angezeigt.

Wählen wir zu diesem Zweck die Gittersimulation einer diskretisierten Version der interessierenden Quantenfeldtheorie, so führen die oben angestellten Überlegungen auf das folgende Vorgehen: Um das physikalische Spektrum der Theorie studieren zu können, müssen eichinvariante Operatoren konstruiert werden, die in der Lage sind, sowohl die verschiedenen interessierenden physikalischen Zustände bezüglich ihrer Quantenzahlen, als auch den jeweiligen Grundzustand von möglichen angeregten Zuständen zu unterscheiden. Die Konstruktion derartiger Operatoren, die in Kapitel 4.7 noch ausführlicher diskutiert werden wird, ist im Prinzip immer möglich, oft aber mit erheblichem Aufwand verbunden [BB83]. Eine Alternative stellt

die Fixierung einer vorteilhaft gewählten Eichung und die anschließende Untersuchung von Propagatoren dar, die zu im eben dieser Eichung definierten Feldern gehören. Ist darüber hinaus auch die Beobachtung des Phänomens der spontanen Symmetriebrechung selbst von Interesse, so wird eine Eichfixierung aufgrund des Theorems von Elitzur sogar unumgänglich. Die Bedeutung der Gruppe \mathcal{G} für den Higgs-Mechanismus in Eichtheorien wurde bereits diskutiert und gibt einen wichtigen Hinweis für die Wahl einer passenden Eichung. Wird diese nämlich so gewählt, dass der Theorie nach Eichfixierung nur noch eine Invarianz unter den zugehörigen globalen Transformationen (erster Art) verbleibt, so kann die spontane Symmetriebrechung im thermodynamischen Limes direkt anhand des Transformationsverhaltens des Vakuumzustands χ_0 studiert werden. Zu beachten ist dabei, dass dieses Vorgehen keine eindeutige Lokalisierung einer Grenze zwischen einer symmetrischen und unsymmetrischen Phase der Theorie zulässt [CG08], sondern je nach Wahl von \mathcal{G} und eines zugehörigen Ordnungsparameters die spontane Symmetriebrechung an verschiedenen Stellen im Phasendiagramm angezeigt wird. Außerdem wurde bereits erwähnt, dass bei Untersuchungen auf einem endlichen Gitter noch besondere Vorkehrungen getroffen werden müssen um zu verhindern, dass ein mögliches Signal für vorliegende spontane Symmetriebrechung bei der Berechnung von Erwartungswerten wieder verloren geht. Diesen Punkt werden wir bei der Diskussion der Fixierung einer geeigneten Eichung zur Bestimmung der residuellen Symmetrien einer $SU(3)$ -Eichtheorie mit einem skalaren Feld in adjungerter Darstellung in Kapitel 4.4 wieder aufgreifen.

Bevor wir uns jedoch der numerischen Simulation dieser Theorie in euklidischer Formulierung auf dem Gitter zuwenden werden, soll zunächst noch das störungstheoretisch zu erwartende Verhalten der zugehörigen Theorie im Minkowski-Raum diskutiert werden.

4.3 $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie mit Skalarfeld in adjungerter Darstellung

Die Dynamik der $SU(3)$ -Eichtheorie mit einem skalaren Feld $\Phi(x)$ in adjungerter Darstellung wird in der Kontinuumsformulierung auf dem Minkowski-Raum \mathcal{M}_4 von der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(x) = -\frac{1}{2} \text{tr}[F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)] + \text{tr}[D_\mu\Phi(x)D^\mu\Phi(x)] - m^2 \text{tr}[\Phi^2(x)] - \Lambda (\text{tr}[\Phi(x)^2])^2 \quad (4.26)$$

bestimmt. Der nicht-abelsche Feldstärketensor und die kovariante Ableitung sind dabei gegeben durch

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) - ig [A_\mu(x), A_\nu(x)] \quad (4.27)$$

$$D_\mu\Phi(x) = \partial_\mu\Phi(x) - ig [A_\mu(x), \Phi(x)]. \quad (4.28)$$

Die Masse des skalaren Feldes wird mit m bezeichnet, die Stärke der Kopplung von Eichfeldern an Skalarfelder wird durch die Kopplungskonstante g parametrisiert und die Selbstkopplungskonstante der Skalarfelder bezeichnen wir mit Λ . Bei all diesen Größen handelt es sich um nackte (*bare*), d.h. nicht renormierte Konstanten. Sowohl die Feldstärke, als auch das skalare Feld, sowie die kovariante Ableitung sind algebrawertige Größen und können nach den hermiteschen Generatoren T^a der zugehörigen Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$ der Gruppe G entwickelt werden. Die Konventionen für deren Normierung und weitere wichtige Relationen finden sich im Anhang D.2.

4.3.1 Störungstheoretische Analyse

Die durch (4.26) beschriebenen Theorie ermöglicht für $\Lambda > 0$ und negative Werte von m^2 das Auftreten des Higgs-Mechanismus, bzw. unter der Annahme einer fixierten Eichung auch das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung. Als Ergebnis einer Analyse auf *tree level* zeigt sich, dass das Minimum des Potentials nun für

$$\text{tr}[\Phi_0^2(x)] = -m^2/2\Lambda \quad (4.29)$$

angenommen wird. Diese Analyse vernachlässigt jedoch gänzlich den Einfluss von Quantenfluktuationen, welche zu einer Modifizierung des Potentials führen¹⁴ und im Rahmen der numerischen Simulation der Theorie berücksichtigt werden können. Die Bedingung (4.29) entspricht der bereits diskutierten Voraussetzung der Existenz eines nicht-trivialen Eichorbits von Minima des Potentials für die eichinvariante Formulierung des Higgs-Phänomens [FMS81], wobei die Orientierung des Skalarfeldes $\Phi_0(x)$ in der Algebra unbestimmt bleibt. Dies stellt keinen Widerspruch zum Theorem von Elitzur dar, da die Ausführung des Funktionalintegrals im Zuge der Quantisierung der Theorie einer Integration über Eichorbits entspricht und folglich der Erwartungswert des kovariant konstanten Skalarfeldes verschwindet [O'R90]. Die spontane Symmetriebrechung geschieht erst durch Festlegung einer bestimmten Orientierung von $\Phi_0(x) \in \mathcal{L}G$ durch Vorgabe einer Eichbedingung. Dadurch kann das Skalarfeld einen Vakuumerwartungswert entwickeln und dies ist der Ausgangspunkt einer störungstheoretischen Diskussion der Massenmatrix für die Eichbosonen in einer Realisierungsphase der Theorie mit gebrochener Symmetrie.

Wählen wir die durch Gleichung (4.23) bestimmte unitäre Eichung und nehmen wir ferner an, dass das Poincaré-invariante Vakuum Φ_0 der Theorie ein nicht-triviales Minimum des effektiven Potentials darstellt, so lässt sich das Teilchenspektrum der Theorie durch Untersuchung kleiner Fluktuationen um Φ_0 bestimmen. Zu diesem Zweck wird das Skalarfeld $\Phi^u(x)$ gemäß

$$\Phi^u(x) = \Phi_0 + \varphi(x), \quad \langle \varphi^a(x) \rangle = 0 \quad (a = 1 \dots 8) \quad (4.30)$$

verschoben und eine Entwicklung von (4.26) nach den neuen Feldern $\varphi^a(x)$ durchgeführt. Bereits in unterster Ordnung der Störungstheorie findet sich ein Beitrag zu einer effektiven Lagrangedichte der Form

$$\Delta\mathcal{L}(x) = \frac{1}{2}m_{ab}^2 A_\mu^a(x)A^{\mu b}(x), \quad m_{ab}^2 := -g^2 [t^a]_{nm}[t^b]_{nl}[\Phi_0]^m[\Phi_0]^l. \quad (4.31)$$

Dieser kann als effektiver Massenterm für die Eichfelder $A_\mu^a(x)$ interpretiert werden, da die Generatoren $[t^a]$ nach Voraussetzung imaginär und anti-symmetrisch sind, und die Matrix m_{ab}^2 folglich reell, symmetrisch und positiv ist:

$$m_{ab}^2 c_a c_b = g^2 \sum_n \left(c_a i[t^a]_{nm}[\Phi_0]^m \right)^2 \geq 0. \quad (4.32)$$

Eine Diagonalisierung dieser Matrix liefert schließlich die Masseneigenzustände als Linear-kombinationen der ursprünglichen Eichfelder, wobei sich die mit den ungebrochenen Generatoren verknüpften reellen Linearkombinationen als Eigenzustände zum Eigenwert Null ergeben.

¹⁴Vergleiche die Diskussion zur Konvexität des effektiven Potentials in Kapitel 4.2

Wie bereits erwähnt, lässt sich die Gruppe H der residuellen Symmetrien in einer konkreten Eichung direkt anhand des Transformationsverhaltens von Φ_0 bestimmen. Für ein skalares Feld in adjungierter Darstellung (D.1) muss dabei nach Gleichung (4.16) die Relation

$$\Phi_0 = h \Phi_0 h^{-1}, \quad \forall h \in H, \quad (4.33)$$

erfüllt sein. Wählen wir nun als Basis der Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$ die in Anhang D.2 angegebene Gell-Mann-Darstellung, so lässt sich die Diskussion weiter konkretisieren. Die Massenmatrix nimmt dabei die Gestalt

$$m_{ab}^2 := -2g^2 \text{tr}([T^a, \Phi_0][T^b, \Phi_0]) \quad (4.34)$$

an, wobei Φ_0 in unitärer Eichung maximal diagonal ist und die Darstellung

$$\Phi_0 = \phi^3 T^3 + \phi^8 T^8 \quad (4.35)$$

besitzt. Je nach Gestalt des Vakuumerwartungswertes Φ_0 können nun zwei verschiedene Szenarien eintreten: Im Allgemeinen wird die Theorie eine residuelle $U(1) \times U(1)$ -Symmetrie aufweisen, da jede der durch die beiden Generatoren T^3 und T^8 der Cartan-Subalgebra ausgezeichneten Richtungen mit einer ungebrochenen $U(1)$ -Symmetrie identifiziert werden kann. Falls aber zusätzlich noch für die Komponente $\phi^3 = 0$ gilt, so erweitert sich die residuelle Symmetriegruppe auf $H = SU(2) \times U(1)$, was an Gleichung (4.33) leicht zu erkennen ist. Die mit den Generatoren T^1, T^2, T^3 sowie T^8 assoziierten Eichfelder bleiben nach Gleichung (4.34) daher masselos, die restlichen in dieser Eichung definierten Eichfelder erhalten vermittels des Higgs-Mechanismus eine Masse $m^2 = 3g^2\text{tr}[\Phi_0^2]/2$. Eine analoge Untersuchung im skalaren Sektor der Theorie zeigt in diesem Fall, dass die Fluktuationen des Skalarfeldes $\varphi(x) := \phi^8(x)$ um Φ_0 mit einem massiven Boson in Verbindung gebracht werden können, für dessen Masse $m_\varphi^2 = 4\Lambda\text{tr}[\Phi_0^2]$ gilt.

Neben der $SU(3)$ -Eichsymmetrie weist die durch (4.26) beschriebene Theorie noch eine globale Reflexionssymmetrie der Form

$$\Phi(x) \mapsto -\Phi(x) \quad \forall x \in \mathcal{M}_4 \quad (4.36)$$

auf. In welchen Regionen des Phasendiagramms diese globale diskrete Symmetrie realisiert oder spontan gebrochen ist, soll ebenfalls im Rahmen der numerischen Untersuchung des effektiven Potentials der Theorie geklärt werden. Insbesondere stellt sich die Frage, ob eine dadurch bestimmte Grenzlinie mit einer Unterteilung des Phasendiagramms in Bereiche mit gebrochener und ungebrochener G -Symmetrie übereinstimmt, da in letzterem Falle ja eine Eichfixierung notwendig wird und die Lage der so bestimmten Phasengrenze wie bereits diskutiert im Allgemeinen von der Wahl der Eichung und dem betrachteten Ordnungsparameter abhängt.

Es zeigt sich also bereits im Rahmen des perturbativen Zugangs, dass mehrere Möglichkeiten der spontanen Brechung der vollen $SU(3)$ -Symmetrie der auf (4.26) basierenden Theorie bestehen. Wie jedoch bereits ausgeführt wurde, ist die Gestalt der residuellen Symmetrie eine von der Dynamik der Felder abhängige Frage, welche nicht allein durch den Einsatz von störungstheoretischen Methoden geklärt werden kann. Unser Zugang der Wahl wird die numerische Monte-Carlo-Simulation einer diskretisierten Version des euklidischen Analogons

von (4.26) sein, um zu klären, ob eine Realisierungsphase der zugehörigen quantisierten Theorie mit einer $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie existiert, deren Untersuchung einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der Grundlagen der von Glashow, Salam und Weinberg formulierten Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung sowie möglicher Alternativen dazu liefern sollte.

4.3.2 Diskretisierte Formulierung der Quantenfeldtheorie

Die Zustandssumme \mathcal{Z} der von uns betrachteten euklidischen Quantenfeldtheorie auf dem toroidalen Gitter T^4 ist gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi \exp \{-S[U, \Phi]\}. \quad (4.37)$$

Die Erwartungswerte interessierender Observablen werden also bezüglich des normierten Gibbs-Maßes

$$d\mu(U, \Phi) = \mathcal{D}U \mathcal{D}\Phi \mathcal{Z}^{-1} \exp \{-S[U, \Phi]\} \quad (4.38)$$

berechnet, wobei $\mathcal{D}U$ das invariante Haarsche Maß auf der Gruppenmannigfaltigkeit der $SU(3)$ für jeden Link des Gitters bezeichnet, und für den Anteil an der Integration der skalaren Felder gilt

$$\mathcal{D}\Phi = \prod_x \prod_{a=1}^8 d\phi^a(x), \quad \phi^a(x) \in \mathbb{R}. \quad (4.39)$$

Auf einem endlichen Gitter handelt es sich bei (4.38) um ein wohldefiniertes Maß, wobei das Wirkungsfunktional $S[U, \Phi]$ in Gleichung (4.38) in drei Anteile zerfällt:

$$S[U, \Phi] = S_G[U] + S_{\text{Hop}}[U, \Phi] + S_{\text{Pot}}[\Phi]. \quad (4.40)$$

Der erste Term stellt die Konkretisierung der von Wilson [Wil74] eingeführte Wirkung einer $SU(N)$ Yang-Mills-Theorie auf Basis von Plaquetten-Variablen für den Fall $N = 3$ dar

$$S_G[U] = \beta \sum_P \left(1 - \frac{1}{N} \text{Re}\{\text{tr}[U_P]\} \right), \quad \beta = \frac{2N}{g^2}, \quad (4.41)$$

zu deren Konstruktion über alle orientierte Plaquetten P des Gitters summiert wird. Der zweite Term

$$S_{\text{Hop}}[U, \Phi] = -2\kappa \sum_x \sum_{\mu=1}^D \text{tr} \left[\Phi(x) U_\mu(x) \Phi(x + \mu) U_\mu^\dagger(x) \right] \quad (4.42)$$

verknüpft die Freiheitsgrade des Eichsektors mit denen des Skalarfeldsektors der Theorie. Die Bedeutung dieses in der englischsprachigen Literatur als *hopping term* bezeichneten Ausdrucks soll hier kurz erläutert werden. Für ein skalares Feld $\Phi(x)$, das sich unter der adjungierten Darstellung einer Gruppe G transformiert, gilt wie in Anhang D.1 erläutert

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi'(x) = \Omega(x) \Phi(x) \Omega^\dagger(x), \quad \Omega(x) \in G, \quad (4.43)$$

und für ein solches Feld definiert man als Verallgemeinerung der üblicherweise bei der Diskretisierung von kinetischen Termen auftretenden Vorwärts- bzw. Rückwärtsableitungen die folgenden Operatoren:

$$D_\mu^+ \Phi(x) := \frac{1}{a} \left[U_\mu(x) \Phi(x + \mu) U_\mu^\dagger(x) - \Phi(x) \right], \quad (4.44)$$

$$D_\mu^- \Phi(x) := \frac{1}{a} \left[\Phi(x) - U_\mu^\dagger(x - \mu) \Phi(x - \mu) U_\mu(x - \mu) \right]. \quad (4.45)$$

Diese verhalten sich per Konstruktion kovariant unter Eichtransformationen:

$$D_\mu^+ \Phi(x) \rightarrow \Omega(x) D_\mu^+ \Phi(x) \Omega^\dagger(x), \quad D_\mu^- \Phi(x) \rightarrow \Omega(x) D_\mu^- \Phi(x) \Omega^\dagger(x). \quad (4.46)$$

Eine Potenzreihenentwicklung der Paralleltransporter $U_\mu(x)$, sowie der skalaren Felder, welche im Abstand einer Gitterkonstanten a zum Gitterpunkt x auftreten, führt im Falle von (4.44) bis auf Korrekturen von $\mathcal{O}(a)$ auf (4.28), so dass dieser Operator eine mögliche Approximation der kovarianten Ableitung für adjugierte skalare Felder einer Kontinuumsfeldtheorie darstellt und sich im Limes $a \rightarrow 0$ auf diese reduziert. Die Behandlung von (4.45) verläuft analog. Mit diesen Definitionen findet man unter Verwendung von periodischen Randbedingungen, die wir bei der Konstruktion der Feldtheorie auf dem hyperkubischen (bzw. toroidalen) Gitter T^4 zugrunde legen:

$$\begin{aligned} a^4 \sum_x \sum_{\mu=1}^D \text{tr} [D_\mu^+ \Phi(x) D_\mu^+ \Phi(x)] &= a^2 \left\{ -2 \sum_x \sum_{\mu=1}^D \text{tr} [\Phi(x) U_\mu(x) \Phi(x + \mu) U_\mu^\dagger(x)] \right. \\ &\quad \left. + 2D \sum_x \text{tr} [\Phi^2(x)] \right\}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Es lässt sich ebenfalls leicht zeigen, dass

$$\sum_x \sum_\mu \text{tr} [D_\mu^+ \Phi(x) D_\mu^+ \Phi(x)] = - \sum_x \sum_\mu \text{tr} [\Phi(x) D_\mu^- D_\mu^+ \Phi(x)], \quad (4.48)$$

was die Definition des kovarianten d'Alembert-Operators auf dem Gitter motiviert:

$$\square_{xy} := - \sum_\mu D_\mu^- D_\mu^+ \delta_{xy}. \quad (4.49)$$

Der kinetische Term für skalare Felder, die sich unter der adjungierten Darstellung transformieren, besitzt auf dem Gitter daher die Gestalt

$$a^4 \sum_x \sum_\mu \text{tr} [D_\mu^+ \Phi(x) D_\mu^+ \Phi(x)] = a^4 \sum_{x,y} \text{tr} [\Phi(x) \square_{xy} \Phi(y)]. \quad (4.50)$$

Unter Hinzunahme des dritten in Gleichung (4.40) auftretenden Terms

$$S_{\text{Pot}}[\Phi] = \sum_x \text{tr} [\Phi^2(x)] + \lambda (\text{tr} [\Phi^2(x)])^2, \quad (4.51)$$

der neben der Selbstwechselwirkung des skalaren Feldes auch einen quadratischen Term enthält, dessen Koeffizient in der Kontinuumsformulierung mit dem Quadrat der (nackten) Masse von $\Phi(x)$ identifiziert wird, kann schließlich durch eine Reskalierung der Form

$$\Phi(x) \rightarrow \Phi'(x) := \sqrt{\kappa} \Phi(x) \quad (4.52)$$

gezeigt werden, dass der Kontinuumsliches der nun durch $S[U, \Phi']$ bestimmten Theorie durch genau diejenige euklidische Feldtheorie gegeben ist, welche aus (4.26) durch Übergang von M_4 in den euklidischen Raum E_4 durch inverse Wick-Rotation hervorgeht [Rot97], sofern dabei die Relationen

$$\kappa = (2D + m^2)^{-1} \quad \text{sowie} \quad \lambda = \kappa^2 \Lambda \quad (4.53)$$

gelten. Offenbar lässt sich also (4.42) mit einem Teil der Wirkung (4.51) zu einer Darstellung der kinetischen Energie des skalaren Feldes $\Phi(x)$ kombinieren. Dies ist der Grund dafür, dass κ üblicherweise als *hopping parameter* bezeichnet wird.

Eine für die Konvergenz der zu berechnenden Pfadintegrale wichtige Forderung bei der Konstruktion einer euklidischen Feldtheorie ist die sogenannte Stabilitätsbedingung, welche besagt, dass der Potentialbeitrag zur euklidischen Wirkung (4.51) von unten durch eine Parabel mit geeignet gewählten Koeffizienten beschränkt sein muss [Roe91]. Als Konsequenz dieser Bedingung können in der durch Gleichung (4.37) definierten Theorie Terme der Form $\text{tr}[\Phi^m(x)]$ zu ungeraden Potenzen $m > 2n + 1$, ($n \in \mathbb{N}$) nicht auftreten. Die Anwesenheit eines Terms proportional zu $\text{tr}[\Phi^3(x)]$ wäre zwar prinzipiell mit der Stabilitätsbedingung vereinbar, würde jedoch zur expliziten Brechung der globalen Reflexionssymmetrie (4.36) führen. Da ein solcher Term nun aber in der Lagrangedichte (4.26) bzw. der zugehörigen Wirkung auf dem Gitter (4.40) nicht auftritt, eröffnet sich die Möglichkeit, die Theorie auf ein (vierdimensionales) Spin-Glas-System abzubilden, welches mithilfe des eichinvarianten Cluster-Algorithmus (vgl. Kapitel 3.3) simuliert werden kann. Die Vorteile dieser Methode bei der Reduktion von Autokorrelationen wurden bereits in Kapitel 3 diskutiert. Außerdem haben wir mit $\text{tr}[\Phi^3(x)]$ zugleich einen Operator gefunden, der als Grundlage für die Konstruktion eines Ordnungsparameters dienen kann, der in der Lage ist, die spontane Brechung der Reflexionssymmetrie (4.36) anzuzeigen. In Kapitel 4.5 werden wir die Ergebnisse und Details unserer numerischen Untersuchungen vorstellen, zuvor soll jedoch noch die Fixierung einer Eichung besprochen werden, die es uns ermöglichen soll, die in Kapitel 4.3.1 diskutierten perturbativen Erwartungen zu überprüfen.

4.4 Fixierung der Eichfreiheit: Landau-Eichung und globale unitäre Eichung

Zu diesem Zweck fixieren wir in einem ersten Schritt die Landau-Eichung durch iterative Minimierung des eichfixierenden Funktionalen

$$\mathcal{F}_U[\Omega] = \sum_x \sum_{\mu=1}^4 \text{Re} \{ \text{tr} [\mathbb{1} - U_\mu^\Omega(x)] \} \xrightarrow{\Omega} \min. \quad (4.54)$$

Für eine detaillierte Diskussion des zugehörigen Algorithmus wird dabei auf Kapitel C.1 im Anhang verwiesen. Offensichtlich erlaubt die Bedingung (4.54) immer noch globale Transformationen $\Omega \in SU(3)$, so dass durch Fixierung der Landau-Eichung gerade das in Kapitel 4.2.2 diskutierte Ziel der Einschränkung von G auf \mathcal{G} erreicht wird. In der Kontinuumsformulierung lautet die lokale Eichfixierungsbedingung $\partial A^\Omega(x) = 0$ und es ist offensichtlich, dass die Landau-Eichung mit globalen Transformationen kompatibel ist. Bei der Suche nach einem Ordnungsparameter für die spontane Brechung dieser Restsymmetrie erster Art lassen wir uns von der zunächst in [Lan05] angegebenen Konstruktion eines Operators leiten, der sowohl bei der Untersuchung einer $SU(3)$ -Eichtheorie, als auch im Falle einer $SU(2)$ -Eichtheorie [CG08] mit Skalarfeld in fundamentaler Darstellung verwendet wurde. Dabei handelt es sich um das *globale* Skalarfeld

$$\Phi := \frac{1}{\mathcal{V}_4} \sum_x \Phi(x), \quad \Phi(x) = \phi^a(x) T^a, \quad (4.55)$$

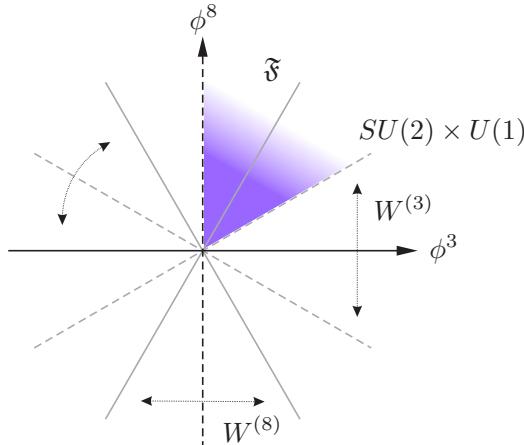


Abbildung 4.1: Die Weyl-Reflexionen $W^{(3)}$ und $W^{(8)}$ sowie Rotationen um Vielfache von $\alpha = \frac{\pi}{3}$ überführen das adjugierte Skalarfeld in die fundamentale Domäne \mathfrak{F} .

dessen Betrag in der symmetrischen Phase verschwindet, bei vorliegender Symmetriebrechung jedoch auch im thermodynamischen Limes $\mathcal{V}_4 \rightarrow \infty$ einen endlichen Wert annimmt. Die Vakuummannigfaltigkeit ist dabei die Menge aller Konfigurationen, welche das effektive Potential minimieren:

$$\mathcal{M}_{\Phi_0} = \{\Phi \mid V_{\text{eff}}(\Phi) = \min.\}. \quad (4.56)$$

Diese ist nach Gleichung (4.12) in erster Ordnung Störungstheorie durch all jene Konfigurationen gegeben, die der Relation $\text{tr}[\Phi_0^2] = -m^2/2\Lambda$ genügen. Offensichtlich bedeutet spontane Brechung der Symmetrie nun, dass vom Skalarfeld irgendein Punkt auf der durch diese Relation beschriebenen S^7 mit endlichem Radius gewählt wird. Im thermodynamischen Limes gibt es keine Tunnelamplitude zwischen den verschiedenen Vakua, die durch Rotationen auf der S^7 auseinander hervorgehen. Folglich gilt in diesem Fall $\Phi_0 = \langle \Phi \rangle \neq 0$. Für einen ergodischen Algorithmus auf einem endlichen Gitter hingegen wird dies bei jeder Messung ein anderer Punkt sein, so dass folglich stets $\langle \Phi \rangle \equiv 0$ zu erwarten ist. Entweder muss daher wie in [Lan05, CG08] der Erwartungswert der Norm von Φ betrachtet werden, oder eine weitere Eichfixierungsbedingung gestellt werden.

Da wir nicht nur daran interessiert sind, die residuelle Symmetriegruppe H , sondern auch ihre Einbettung in G bestimmen zu können, wählen wir die zweite Variante. Zu diesem Zweck führen wir noch eine weitere globale Transformation $\Omega^u \in SU(3)$ durch, mithilfe derer das globale Skalarfeld (4.55) diagonalisiert wird, sowie mögliche Weyl-Reflexionen in der von T^3 und T^8 aufgespannten Ebene fixiert werden, in der das diagonalisierte Skalarfeld (4.35) zu liegen kommt. Eine Matrix $[\Omega^u]_{nm}$, die eine solche Transformation vermittelt, wird aus den Eigenvektoren des hermiteschen globalen Feldes konstruiert und die Drehung desselben in die fundamentale Domäne \mathfrak{F} entspricht der Festlegung einer möglichen Permutationen dieser Eigenvektoren. Eine Illustration der Situation findet sich in Abbildung 4.1.

Im Detail wird dabei folgendes Verfahren angewandt:

- Die drei reellen Eigenwerte $\lambda_i \in \mathbb{R}$ von Φ_0 werden in absteigender Reihenfolge der Größe nach angeordnet:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3.$$

- Gilt nun $\lambda_2 < 0$, so werden die Eigenwerte λ_1 und λ_3 miteinander vertauscht.

Es ist leicht zu überprüfen, dass die so angeordneten und wiederum mit λ_i bezeichneten Eigenwerte ($i = 1, 2, 3$) der Relation

$$|\lambda_1 - \lambda_2| \leq |\lambda_2 - \lambda_3| \leq |\lambda_1 - \lambda_3| \quad (4.57)$$

genügen. Die Eigenwerte sind invariant unter globalen Transformationen, was die Invarianz der Norm von Φ unter derartigen Transformationen widerspiegelt. Wird aber die oben beschriebene Eichung fixiert, die wir fortan als *globale unitäre Eichung* bezeichnen wollen, so besteht aufgrund der gewählten Anordnung der Eigenwerte folgende Verbindung zu den nicht-verschwindenden Komponenten von (4.55):

$$\begin{aligned} \phi^3 &= \lambda_1 - \lambda_2 \\ \phi^8 &= \sqrt{3}(\lambda_1 + \lambda_2) . \end{aligned} \quad (4.58)$$

Dabei ist zu beachten, dass die globale Reflexionssymmetrie (4.36) durch diese erweiterte Eichfixierungsbedingung nicht fixiert wird. Der Sinn der Vorschrift, nach Anordnung der Eigenwerte im Falle $\lambda_2 < 0$ eine Permutation von λ_1 und λ_3 durchzuführen, besteht darin, dass auf diese Weise gewährleistet wird, dass die Position der beiden Eigenwerte auf der Diagonalen des Skalarfeldes, deren Abstand zueinander vom Betrag her minimal ist, stets dieselbe bleibt. Im Gegensatz zur in [GH84] vorgestellten Methode vereinfacht dieses Vorgehen die Identifizierung der residuellen Symmetriegruppe erheblich. Auf diesen Punkt wird nochmals ausführlich im Zuge der Konstruktion eines eichinvarianten Testzustands in Kapitel 4.6 eingegangen.

4.5 Numerische Ergebnisse zur Phasenstruktur

Aufgrund der Relation (4.53) ist zu erwarten, dass das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung für $\kappa \geq 1/8$ auftreten sollte. Da dieses Ergebnis jedoch durch eine Analyse des Potentials auf Ebene der klassischen Feldtheorie zustande kam, steht zu erwarten, dass sich die Lage des kritischen Punktes κ_c durch Quantenfluktuationen, in Abhängigkeit von der Wahl der Parameter β und λ , verschieben wird. Das perturbativ gewonnene Ergebnis vermag also bestenfalls eine Orientierungshilfe bei der Suche nach dem Übergangspunkt von der Wigner-Weyl-Phase in die Phase gebrochener Symmetrie zu bieten. Eine erste nicht-perturbative Untersuchung der Theorie wurde von Gupta und Heller [GH84] durchgeführt. Deren Ergebnisse ließen erstmals quantitative Aussagen zur Phasenstruktur der Theorie zu, wenngleich die Autoren eingestehen mussten, dass eine eindeutige Identifizierung der residuellen Symmetriegruppe ohne Fixierung einer Eichung schwierig sei und sich die Effekte der in dieser Arbeit verwendeten Gittergrößen auf die Lage der Phasengrenzen bei einer von uns durchgeföhrten Überprüfung als erheblich herausstellten. Dennoch geben die in [GH84] berichteten Resultate wertvolle Hinweise auf den für unsere Zwecke interessierenden Parameterbereich.

Nach Fixierung der beiden Kopplungskonstanten β und λ auf die Werte $\beta = 6.0$ und $\lambda = 0.01$ wurde in einer ersten Simulation auf einem Gitter der Größe 8^4 im Intervall $\kappa \in [0.14, 0.24]$ nach einem Signal für einen Phasenübergang gesucht. Zu diesem Zweck wurde die verbundene skalare Korrelationsfunktion

$$C_\Phi(|x - y|) = \langle n^a(x) n^a(y) \rangle_c, \quad n^b(x) = \|\Phi(x)\|^{-1} \phi^b(x) \quad (4.59)$$

für jeden untersuchten Wert des Parameters κ in 250 thermalisierten und eichfixierten Konfigurationen gemessen. Zur Erzeugung dieser Ensembles wurde der im Anhang B.3 beschriebene Hybrid-Heatbath-Algorithmus in Kombination mit dem Cluster-Update-Algorithmus (siehe Kapitel 3) verwendet, wobei für die Aktualisierung der skalaren Felder der in Abschnitt B.3.2 dargelegte Algorithmus verwendet wurde. Letzterer stellt eine Erweiterung und Verallgemeinerung des ursprünglich von Bunk [Bun95] vorgeschlagenen Verfahrens zur Simulation der elektroschwachen Eichtheorie auf den Fall von Materie dar, die sich unter der *adjungierten* Darstellung einer Eichgruppe transformiert. Zur Thermalisierung wurden dabei ausgehend von einer geordneten (*cold start*) Konfiguration 500 sogenannte *supersweeps* durchgeführt, wobei ein *supersweep* definiert wurde als Kombination von drei gewöhnlichen Heatbath-Aktualisierungsdurchgängen aller Links und Skalarfelder des Gitters, gefolgt von jeweils einem Durchgang von mikrokanonischen Reflexionen (B.4) im Eich- und Skalarfeldsektor. Neben den geordneten Startkonfigurationen wurden ebenfalls völlig zufällig erzeugte (*hot start*) Anfangskonfigurationen verwendet. Durch Überwachung der Entwicklung von Observablen wie der mittleren kinetischen Energie des Skalarfeldes oder der mittleren Plaquette konnte nachgewiesen werden, dass sich das zu simulierende System bei Verwendung dieses Algorithmus unabhängig von der Wahl der verwendeten Anfangskonfiguration in ein und denselben Gleichgewichtszustand entwickelt, und dass dieser für alle betrachteten Werte von κ bereits nach einer Thermalisierungsdauer von höchstens 100 *supersweeps* erreicht wird. Die Akzeptanzraten für die Vorschläge, die mittels des Heatbath- sowie des Overrelaxation-Algorithmus im Eichfeldsektor generiert wurden, variierten im untersuchten κ -Intervall in beiden Fällen zwischen 0.8 und 0.5, im Skalarfeldsektor hingegen fielen die Akzeptanzraten in keinem der beiden Fällen unter 0.9. Dieses Ergebnis werten wir als Erfolg unserer Analyse und der in Anhang B.3.2 vorgestellten Adaption des Algorithmus von Bunk an den vorliegenden Fall, die es uns ermöglicht hat, im gesamten betrachteten Intervall des Parameters κ stets die optimalen Kandidaten für den Update der Skalarfelder zu generieren und somit die Akzeptanzrate zu maximieren. Die Konfigurationen, welche für die Ensembles zu den verschiedenen Werten des *hopping parameter* κ ausgewählt wurden, waren dabei jeweils durch zehn *supersweeps* in der erzeugenden Markov-Kette voneinander getrennt und das Abbruchkriterium bei der iterativen Fixierung der Eichung wurde auf $\delta^2 < 10^{-6}$ festgelegt.

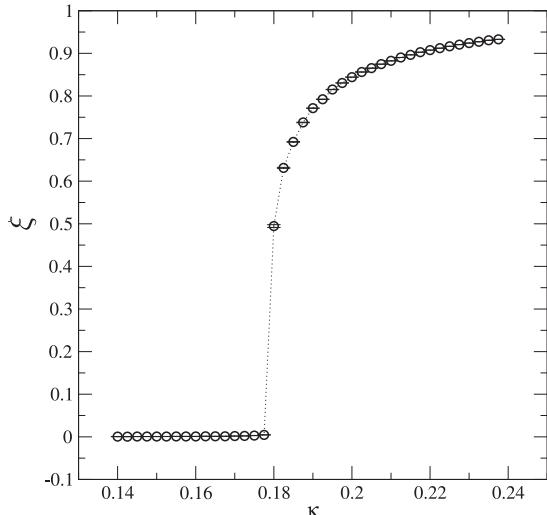
Der Erwartungswert der (normierten) integrierten Korrelationsfunktion liefert die (normierte) Korrelationslänge ξ des Skalarfeldes:

$$\xi = \frac{1}{N^2} \sum_{x,y} C_\Phi(|x - y|), \quad N := N_s^3 \times N_t. \quad (4.60)$$

Das Ergebnis der Messungen ist in Abbildung 4.2 zu sehen. In der symmetrischen Phase sind die Skalarfelder völlig unkorreliert und die Korrelationslänge (4.60) verschwindet. Wird nun der Wert des Parameters κ weiter vergrößert, so beobachtet man für $\kappa \simeq 0.18$ ein rapides Anwachsen von ξ , was den Übergang der Theorie in eine Phase zunehmender Ordnung anzeigen. Die Korrelationen zwischen den Skalarfelder an verschiedenen Orten x des Gitters nehmen zu und im Grenzfall völliger Kohärenz der Felder ist ein Divergieren der Korrelationslänge zu erwarten. Auf einem endlichen Gitter bedeutet dies, dass der Wert der Korrelationslänge ξ auf die Ausdehnung des gesamten Gitters anwachsen wird. Durch die in (4.60) vorgenommene Normierung kann ξ einen Maximalwert von eins annehmen und diesem Grenzwert nähert sich die Korrelationslänge für zunehmende Werte von κ in der Tat an. Zur Überprüfung unserer Ergebnisse wurde für dieselben Parameter eine weitere Simulation mittels eines reinen

Abbildung 4.2: Das Verhalten der integrierten Korrelationsfunktion des Skalarfeldes (4.60) als Funktion des Parameters κ . Die zugehörigen Ensembles wurden in die globale unitäre Eichung gebracht, welche in Kapitel 4.4 beschrieben wird.

Gitter: 8^4 , $\beta = 6.0$, $\lambda = 0.01$.

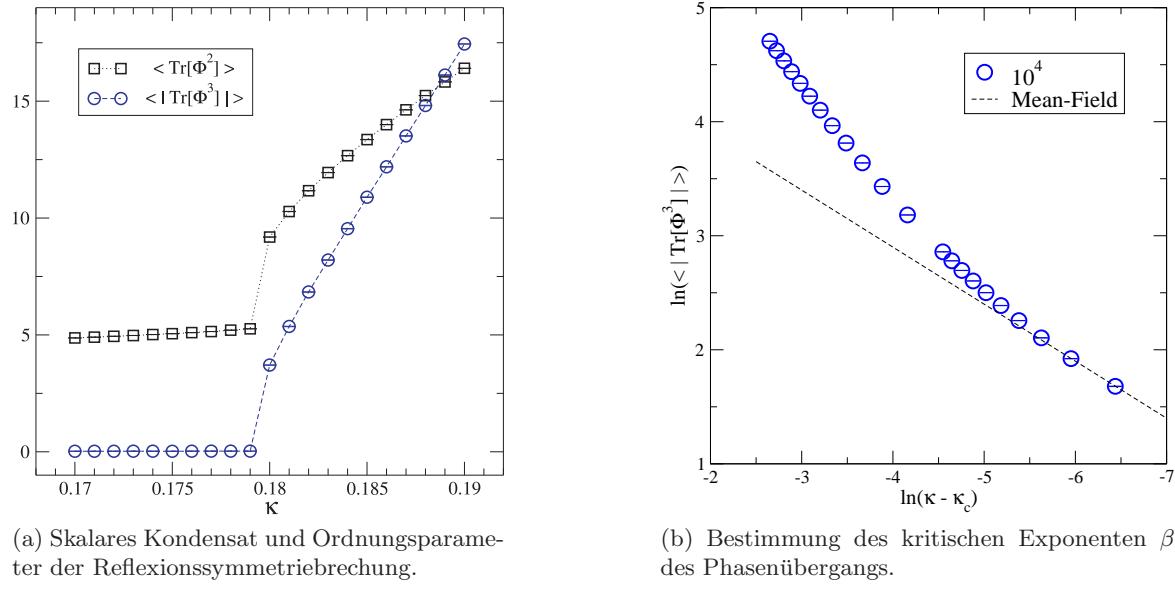


Metropolis-Algorithmus nach Maßgabe der in [GH84] vorgestellten Methode durchgeführt. Unsere in Abbildung 4.2 gezeigten Ergebnisse konnten dabei bestätigt werden, jedoch waren bei der Verwendung des Metropolis-Algorithmus in etwa doppelt so viele Iterationen wie bei Verwendung des Heatbath-Algorithmus nötig, um das thermische Gleichgewicht zu erreichen. Aus diesem Grund wurde in allen weiteren Simulation dem Heatbath-Algorithmus der Vorzug gegeben. Weitere Simulationen auf einem 8^4 Gitter, die für die Parameterkombination $\beta = 6.0$ und $\lambda = 0.001$ durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass sich der kritische Punkt zu einem Wert des Hopping Parameters von $\kappa_c \simeq 0.16$ verschiebt. Außerdem scheint die Ordnung des Phasenübergangs bei einer Verkleinerung der Selbstkopplung des Skalarfeldes abzunehmen. Beide Beobachtungen stimmen qualitativ mit den in [GH84] berichteten überein. In jedem Fall scheint für den kritischen Punkt κ_c der Quantentheorie $\kappa_c > \kappa_{\text{cl}}$ zu gelten, wobei sich der kritische Punkt der klassischen Theorie nach Gleichung (4.53) unabhängig von β und λ zu $\kappa_{\text{cl}} = 0.125$ ergibt.

Zur genaueren Analyse der Phasenstruktur wurde in einem nächsten Schritt durch Simulationen auf einem Gitter der Größe 10^4 ein feinerer Parameterbereich in der Umgebung des für die Werte der Kopplungskonstanten $\beta = 6.0$ und $\lambda = 0.01$ bereits lokalisierten Phaseübergangspunktes untersucht. Das Abbruchkriterium der Eichfixierungsroutine wurde dabei auf $\delta^2 < 10^{-12}$ heruntergesetzt und die für jeden untersuchten Wert des Hopping Parameters erzeugten Ensembles enthielten nun 400 unabhängige Konfigurationen.

Der erste nicht-triviale Term, welcher als Ordnungsparameter zur Detektierung eines Phasenübergangs und einer damit einhergehenden spontanen Brechung der globale diskrete Reflexionssymmetrie (4.36) der in Gleichung (4.37) definierten Theorie herangezogen werden kann, ist $\text{tr}[\Phi^3(x)]$. In Analogie zur mittleren Magnetisierung¹⁵ eines $D = 2$ dimensionalen Ising-Modells, in dem sich die spontane Symmetriebrechung beim Übergang in die geordnete Phase unterhalb einer kritischen Temperatur T_c (in Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes) in der Auswahl einer der beiden möglichen Orientierungen ($\pm \hat{e}_z$) der nicht-verschwindenden

¹⁵Die Dimensionalität des Ordnungsparameters \mathcal{M} ist $n = 1$.



(a) Skalares Kondensat und Ordnungsparameter der Reflexionssymmetriebrechung.

(b) Bestimmung des kritischen Exponenten β des Phasenübergangs.

Abbildung 4.3: (a) Lokale Observablen zur Detektierung des Phasenübergangs als Funktion des Parameters κ . (b) Skalierungsverhalten des Ordnungsparameters $\langle |\text{Tr}[\Phi^3]| \rangle$ für $\kappa > \kappa_c$. Gitter: 10^4 , $\beta = 6.0$, $\lambda = 0.01$.

Magnetisierung \mathcal{M} manifestiert, ist bei der Berechnung des Erwartungswerts von

$$\text{Tr}[\Phi^3] = \frac{1}{N} \sum_x \text{tr}[\Phi^3(x)] \quad (4.61)$$

auf endlichen Gittern der Betrag zu bilden, da das Auftreten von Konfigurationen zu den beiden möglichen Orientierungen der „mittleren Magnetisierung“ innerhalb einer Markov-Kette im Falle eines ergodischen Algorithmus sogar gleich wahrscheinlich ist und es deshalb zu einer Auslöschung des Signals bei der direkten Berechnung von $\langle \text{Tr}[\Phi^3] \rangle$ kommen würde. Dies ist eine weitere der in Kapitel 4.2 angesprochenen Maßnahmen, die es ermöglichen, das strenggenommen nur im thermodynamischen Limes mögliche Phänomen der spontanen Symmetriebrechung auch im Fall endlicher Systeme zu beobachten.

In Abbildung 4.3a finden sich die Messergebnisse des Betrags von (4.61) als Funktion von κ . Für $\kappa \leq 0.179$ wird die Realisierung einer symmetrischen Phase der Theorie angezeigt, für $\kappa \geq 0.18$ signalisieren unsere Ergebnisse bereits die spontane Brechung der globalen Reflexionssymmetrie (4.36). Tatsächlich zeigt sich die Analogie von $\text{Tr}[\Phi^3]$ und der mittleren Magnetisierung eines Ising-Modells in D Dimensionen auch auf quantitativer Ebene. Für $T > T_c$ verschwindet die Magnetisierung \mathcal{M} im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$), unterhalb der kritischen Temperatur T_c kann das Verhalten von \mathcal{M} in der Nähe des Phasenübergangs jedoch durch das Potenzgesetz

$$|\mathcal{M}| \propto (T_c - T)^\beta, \quad T < T_c \quad (4.62)$$

beschrieben werden, wobei β den zugehörigen kritischen Exponenten bezeichnet. Bei der Untersuchung der dimensional reduzierten QCD in Kapitel 3.5 konnte in Übereinstimmung mit den in [KLR⁺98] berichteten Ergebnissen bereits ein Skalierungsverhalten der Form

$$\langle |\text{Tr}[\Phi^3]| \rangle \propto (\kappa - \kappa_c)^\beta, \quad \kappa > \kappa_c \quad (4.63)$$

in $D = 3$ Dimensionen für (4.61) verifiziert werden, und zwar in guter Übereinstimmung mit den Werten des kritischen Exponenten, die in Simulationen eines dreidimensionalen Ising-Modells mittels Monte-Carlo-Methoden gemessen ($\beta \simeq 0.33$), oder im Rahmen einer Hochtemperaturrentwicklung ($\beta = 0.312(3)$) bestimmt werden konnten [LB91]. Im Fall $D \geq 4$ sagt die Mean-Field-Theorie, welche den einfachsten Grenzfall der Landau-Ginzburg-Theorie der Phasenübergänge darstellt, einen Wert von $\beta = 0.5$ für den kritischen Exponenten der Magnetisierung voraus¹⁶, was in Abbildung 4.3b als gestrichelte Kurve angedeutet ist. Die offenen blauen Symbole in derselben Abbildung geben das Verhalten des Ordnungsparameters $\langle |\text{Tr}[\Phi^3]| \rangle$ nach Gleichung (4.63) unter der Annahme $\kappa_c = 0.17939(2)$ wieder, was durch weitere Simulationen im verfeinerten Intervall $\kappa \in [0.1791, 0.1799]$ festgestellt werden konnte. In der Nähe des kritischen Punkts ($\kappa \rightarrow \kappa_c^+$) scheinen die Daten sehr gut mit dem Ergebnis der Molekularfeldanalyse des Ising-Modells übereinzustimmen. Dieses Resultat zeigt zum einen, dass der Ordnungsparameter der globalen Reflexionssymmetriebrechung auch in $D = 4$ Dimensionen die Rolle der Magnetisierung eines vierdimensionalen Ising-Modell übernimmt, und zum anderen, dass es sich bei dem Übergang, der im von uns untersuchten Bereich des Phasendiagramms auftritt, um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handelt. Letzteres steht in Einklang mit den in [GH84] geäußerten Vermutungen über die Phasenstruktur des Modells.

In Abbildung 4.3a ist auch das Verhalten des Erwartungswerts des (nicht renormierten) mittleren skalaren Kondensats

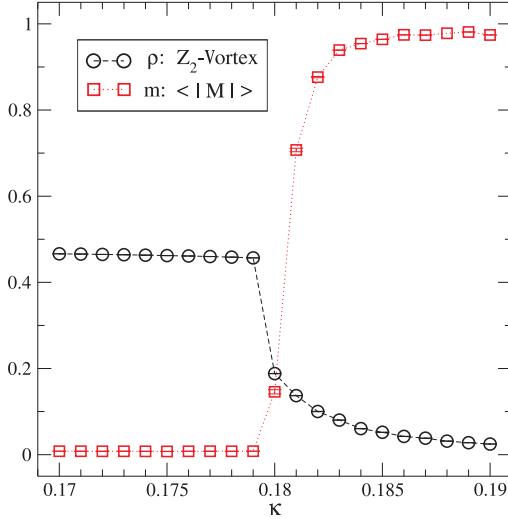
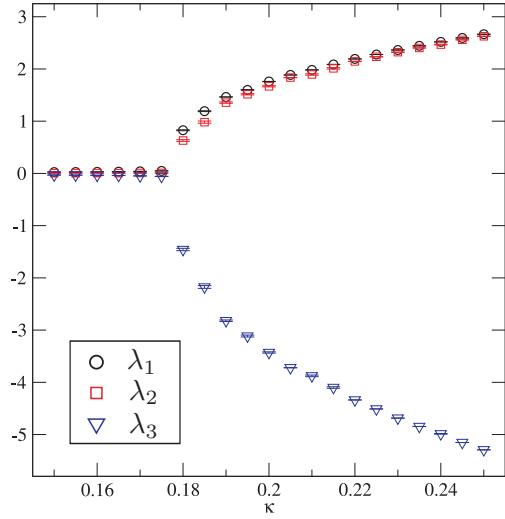
$$\text{Tr}[\Phi^2] = \frac{1}{N} \sum_x \text{tr}[\Phi^2(x)] \quad (4.64)$$

als Funktion von κ zu sehen. Das für $\kappa \leq \kappa_c$ nahezu konstante Signal interpretieren wir als Indikator für das Vorliegen der Wigner-Weyl-Phase, für größere Werte von κ wird auch hier eine Änderung der Realisierungsphase der Theorie durch ein rasches Anwachsen des mittleren Quadrats der Norm des Skalarfeldes angezeigt. Durch die Einführung der Spinfreiheitsgrade $\sigma(x)$ wie in Kapitel 3.5 bietet sich ferner die Möglichkeit, das Verhalten der Größe

$$M = \frac{1}{N} \sum_x \sigma(x) \quad (4.65)$$

in der Nähe des Phasenübergangs untersuchen zu können, die wir als das (normierte) mittlere magnetische Moment M des Systems bezeichnen. In Abbildung 4.4a ist neben dem Erwartungswert des Betrages von M auch der Erwartungswert der in Kapitel 3 eingeführten mittleren Defektdichte ρ zu sehen. Es ist zu beobachten, dass der Übergang in die Phase der spontan gebrochenen globalen Reflexionssymmetrie (4.36) von einem Anwachsen (des Betrags) des mittleren magnetischen Moments M begleitet wird. Schon knapp oberhalb des Phasenübergangspunktes sind praktisch alle Spins gleich orientiert und der Maximalwert von $|M|$ wird fast erreicht. Die Defektdichte ρ hingegen nimmt beim Vordringen in die Phase gebrochener Symmetrie relativ langsam ab. Es ist allerdings zu vermuten, dass ρ für größere Werte von κ und N als die von uns in dieser Untersuchung betrachteten, schließlich auf Null abfallen wird und somit in der Sprache der Festkörperphysik im thermodynamischen Limes den Übergang eines frustrierten Systems, das einen Dotierungsgrad von knapp 50% aufweist, zu einem rein ferromagnetischen (oder anti-ferromagnetischen) System anzeigt. Sowohl die

¹⁶Siehe z.B. [LB91].

(a) Die Defektdichte ρ und der Betrag des mittleren magnetischen Moments M .(b) Aufspaltung der Eigenwerte von Φ beim Übergang in die Phase gebrochener Symmetrie.Abbildung 4.4: (a) Lokale Observable ρ und M als Funktion von κ . (b) Das globale Skalarfeld Φ (4.55) ist in globaler unitärer Eichung (4.57) definiert. Gitter: 10^4 , $\beta = 6.0$, $\lambda = 0.01$.

Dichte ρ , als auch die in Abbildung 4.3a gezeigten Größen sind dabei Messwerte *eichinvariante* Operatoren. Dies ist insofern bedeutsam, als dass der durch das Studium besagter Operatoren identifizierte kritische Punkt bei $\kappa_c = 0.17939(2)$ mit dem aus der Untersuchung *eichvarianter* Signale für M bzw. ξ in globaler unitärer Eichung bestimmten kritischen Punkt übereinzustimmen scheint.

Zuletzt soll geklärt werden, an welcher Stelle im Phasendiagramm eine spontane Brechung der Eichsymmetrie erster Art nach Fixierung der Landau-Eichung (4.54) und anschließender globaler unitärer Eichung (4.57) auftritt, und welche residuelle Symmetrie der Theorie in dieser Phase noch verbleibt. Zu diesem Zweck wurde der Erwartungswert des globalen Skalarfeldes Φ als Funktion des *hopping parameter* untersucht. Die Ergebnisse unserer Messungen finden sich in Abbildung 4.4. Für kleine Werte von κ sind alle drei Eigenwerte mit Null verträglich, gleichbedeutend mit $\|\Phi_0\| = 0$. Dies ist das erwartete Signal für die Realisierungsphase der vollen $SU(3)$ -Symmetrie des Grundzustands. Erhöht man den Wert des Parameters κ , so ist ab einem kritischen Wert κ^* eine Aufspaltung der Eigenwerte zu beobachten, die einem Muster folgt, welches wir aufgrund der Relation (4.58) als ein Signal für die Realisierung einer residuellen $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie interpretieren. Im Rahmen unserer Messgenauigkeit ist dabei zu beobachten, dass die kritischen Werte κ^* und κ_c übereinzustimmen scheinen. Daher identifizieren wir im Folgenden beide Punkte miteinander als den kritischen Wert des Hopping Parameters, an dem ein Übergang von der symmetrischen Realisierungsphase der Theorie in eine Phase gebrochener \mathcal{G} - und Reflexions-Symmetrie stattfindet. Der Abstand der Eigenwerte λ_1 und λ_2 verringert sich bei weiter zunehmenden Werten von κ , und die Summe aller drei Eigenwerte ergibt stets Null, wie es aufgrund der Spurfreiheit des (globalen) Skalarfeldes Φ zu erwarten ist. Unmittelbar oberhalb des Phasenübergangs ist das Signal noch nicht gänzlich eindeutig, möglicherweise zeigen sich hier die Effekte, die durch die Problematik des Auftretens von Gribov-Kopien beim Versuch der Fixierung unserer speziellen

kovarianten Landau-Eichung erwartet werden, am deutlichsten. Eine weitere Ursache könnte darin begründet liegen, dass ein echter Phasenübergang bzw. das Phänomen der spontanen Symmetriebrechung auf dem Gitter nur im thermodynamischen Limes zu beobachten ist und sich Abweichungen von dem im Idealfall erwarteten Verhalten aufgrund der Verwendung von relativ kleinen Gittern am deutlichsten in der Nähe des kritischen Punktes zeigen. Da wir an der Untersuchung einer Quantenfeldtheorie in einer Realisierungsphase mit residueller Symmetriegruppe $H = SU(2) \times U(1)$ interessiert sind, werden wir im Folgenden bestrebt sein, die oben genannten Effekte zu minimieren und führen deshalb weitere Untersuchungen hinreichend weit entfernt vom kritischen Punkt $\kappa_c \equiv \kappa^*$ in der Phase gebrochener Symmetrie auf Gittern der Größe 18⁴ durch.

4.6 Das statische Potential eines Isospin-Doubletts

Die Fixierung der Landau-Eichung, gefolgt von der globalen unitären Eichung hat uns nicht nur die einfache Identifizierung der residuellen Symmetriegruppe $H = SU(2) \times U(1)$ der Theorie nach Übergang in die Phase gebrochener Symmetrie anhand der Eigenwerte des globalen Skalarfeldes Φ ermöglicht, sondern erlaubt es darüber hinaus auch, die Orientierung der Einbettung von H in G zu kontrollieren. Dies wollen wir uns im Folgenden bei der Konstruktion eines eichinvarianten Testzustands zu Nutze machen, welcher ein Paar von statischen Testladungen im Abstand r beschreiben soll, die sich sowohl unter $SU(2)$ -Transformationen wie ein Isospin-Doublett ($T^3 = \pm \frac{1}{2}$) verhalten, als auch $U(1)_Y$ -Ladung tragen.

Die interessierende Einbettung von H in G ist charakterisiert durch Eichtransformationen, die wir in der Form

$$\Omega(x) = \exp\left(i \sum_{a=1}^3 \theta^a(x) T^a\right) \exp(i\alpha(x) T^8) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha(x)} U(x) \\ \hline & e^{-2i\alpha(x)} \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

schreiben können, wobei $U(x) = \exp(i\theta^a(x)\frac{\sigma^a}{2}) \in SU(2)$ und $\alpha : E_4 \rightarrow \mathbb{R}$. Da sich das globale Skalarfeld Φ aufgrund von (4.43) nun als invariant unter einer globalen Version der Transformationen (4.66) – den Eichtransformationen erster Art – erweist, fassen wir die nach spontaner Symmetriebrechung erhaltene Theorie mit residueller globaler $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie als eichfixierte Eichtheorie auf, deren Eichgruppe H ist, welche auf die in (4.66) gezeigte Weise in eine größere Eichgruppe, nämlich G , eingebettet ist.

Diese Überlegung motiviert die Konstruktion eines Testzustands der Form

$$|\Psi_{\alpha\beta}^{\bar{q}q}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, 0)\rangle = \bar{\Psi}_{(\bar{q})\alpha}^d(\mathbf{x}, 0) P^{da}(\mathbf{x}, 0) U^{ab}(\mathbf{x}, 0; \mathbf{y}, 0) P^{bc}(\mathbf{y}, 0) \Psi_{(q)\beta}^c(\mathbf{y}, 0) |\Omega\rangle, \quad (4.67)$$

wobei der Einfachheit halber die Erzeugung dieses Zustands zum Zeitpunkt $t = 0$ geschehen soll. Im Allgemeinen bezeichne $U(\mathbf{x}, t, \mathbf{y}, t) = \text{P}\{\exp[ig \int_{\mathbf{x}}^{\mathbf{y}} \mathcal{A}_j(\mathbf{z}, t) d\mathbf{z}_j]\}$ dabei das pfadgeordnete Produkt des Eichpotentials längs einer Integrationskontur von \mathbf{x} nach \mathbf{y} für beliebige, aber feste Zeiten t . Den Abstand der beiden Testladungen bezeichnen wir wie üblich mit $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ und die ersten beiden Komponenten des ursprünglichen $SU(3)$ -Triplets $\psi^a(x)$ werden zu einem Doublett zusammengefasst, dessen Komponentenfunktionen Felder sind, die sowohl schwache Isospin-Ladung, als auch Hyperladung tragen können. Wie in der Einleitung (4.2) beschrieben, kann dies die Kombination eines (linkshändigen) Neutrinos mit einem zugehörigen Lepton sein, oder auch ein entsprechendes Quark-Doublett. Da im Quark-Sektor

jedoch zum einen die CKM-Mischung der Eigenzustände der starken Wechselwirkung berücksichtigt werden müsste, zum anderen jedoch die Farbladung der Quarks bei der Untersuchung der schwachen Wechselwirkung keine Rolle spielt, ist es konzeptionell sinnvoller, sich allein auf den leptonischen Sektor zu konzentrieren. Wir werden weiter unten sehen, dass die Chiralität der Felder ebenfalls keinen Einfluss auf die Form des zu untersuchenden Potentials hat. Daher denken wir bei der Kombination der ersten beiden Komponenten des Fermionenfeldes $\Psi(x)$ in (4.67) im Folgenden an ein Leptonen-Doublett der Form:

$$L(x) = \begin{pmatrix} \nu_l(x) \\ l(x) \end{pmatrix}. \quad (4.68)$$

Die dritte Komponente $\psi^3(x)$ ist ein Isospin-Singulett ($T^3 = 0$) und trägt zweifach negative $U(1)_Y$ -Ladung. Diese Komponente soll aber im Folgenden nicht betrachtet werden, weswegen wir den Projektor

$$P^{ab} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.69)$$

einführen, der es uns erlaubt, ausschließlich den Isospin-Doublett-Anteil des Zustands zu untersuchen. Unter Eichtransformationen der Form (4.66) gilt $\Omega^\dagger(x) P(x) \Omega(x) = P(x)$, somit ist der Testzustand (4.67) invariant unter derartigen Transformationen:

$$|\Psi^{\bar{q}q}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t=0)\rangle = \bar{L}(\mathbf{x}, 0) U(\mathbf{x}, 0; \mathbf{y}, 0) L(\mathbf{y}, 0) |\Omega\rangle. \quad (4.70)$$

Um einen Ausdruck für die Zeitentwicklung des Zustands (4.67) zu gewinnen, soll zunächst kurz die Konstruktion des Wilson-Loops rekapituliert werden, aus welchem sich als Folge der Zeitentwicklung eines unter einer Symmetrietransformation invarianten Zustands zweier statischer Ladungen im Abstand r das zwischen diesen herrschende Potential extrahieren lässt. Die folgende Darstellung orientiert sich dabei an der in [Rot97] für den Fall eines string-artigen Testzustands in der QCD angegebenen Konstruktion. Einen derartigen Zustand aus zwei eichinvariant miteinander verbundenen Farbladungen gewinnen wir im Falle der Eichgruppe $SU(3)$ aus (4.67) durch Verwendung von $P^{ab} = \delta^{ab}$, bzw. durch Entfernen der Projektoren¹⁷. Dessen Zeitentwicklung wird beschrieben durch die Green'sche Funktion

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{x}', \mathbf{y}', t) = \langle \Omega | \mathcal{T} \{ \bar{\Psi}_{\bar{q}}(\mathbf{y}', t) U(\mathbf{y}', t; \mathbf{x}', t) \Psi_q(\mathbf{x}', t) \bar{\Psi}_{\bar{q}}(\mathbf{x}, 0) U(\mathbf{x}, 0; \mathbf{y}, 0) \Psi_q(\mathbf{y}, 0) \} | \Omega \rangle.$$

Dabei wurden sowohl die Indizes, welche die Spinorstruktur angeben, als auch die der internen Symmetrietransformation der Übersichtlichkeit halber für den Moment unterdrückt, \mathcal{T} bezeichnet den Zeitordnungsoperator. Die Green'sche Funktion $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{x}', \mathbf{y}', t)$ besitzt eine Pfadintegraldarstellung der Form

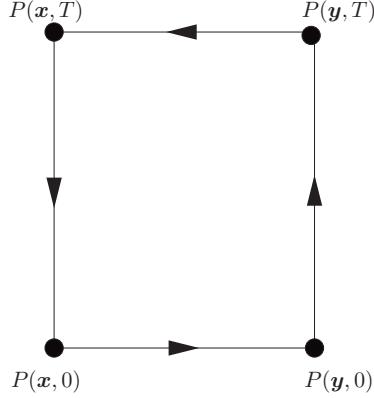
$$\begin{aligned} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}; \mathbf{x}', \mathbf{y}', t) &= \mathcal{Z}^{-1} \int \mathcal{D}\mathcal{A} \mathcal{D}[\bar{\psi}\psi] \mathcal{D}[\bar{\Psi}\Psi]_q \{ \bar{\Psi}_{\bar{q}}(\mathbf{y}', t) U(\mathbf{y}', t; \mathbf{x}', t) \Psi_q(\mathbf{x}', t) \\ &\quad \times \bar{\Psi}_{\bar{q}}(\mathbf{x}, 0) U(\mathbf{x}, 0; \mathbf{y}, 0) \Psi_q(\mathbf{y}, 0) \} e^{iS_{\text{total}}}, \end{aligned} \quad (4.71)$$

wobei die Wirkung $S_{\text{total}} = S_{YM}[\mathcal{A}] + S_F[\mathcal{A}, \psi, \bar{\psi}] + S_{q\bar{q}}[\mathcal{A}, \Psi_q, \bar{\Psi}_{\bar{q}}]$ in drei Anteile zerfällt, nämlich den kinetischen Term des Eichbosonensektors $S_{YM}[\mathcal{A}]$, die Wirkung

$$S_F[\mathcal{A}, \psi, \bar{\psi}] = \int d^4x \bar{\psi}(x) [i\cancel{D} - m] \psi(x) := \int d^4x d^4y \bar{\psi}_\alpha(x) K_{\alpha\beta}(x, y) \psi_\beta(y),$$

¹⁷Das zugehörige skalierte Potential, welches aus Messwerten dieser gewöhnlichen Wilson-Loops für verschiedene Werte der Kopplungskonstanten β extrahiert wurde, wird in Abbildung 2.3 gezeigt.

Abbildung 4.5: Zur Definition des modifizierten Wilson-Loop-Operators $W_\Gamma^P[\mathcal{A}]$ in Gleichung (4.76): An jeder Ecke der Integrationskontur Γ ist ein Projektor $P(\mathbf{z}, t)$ (4.69) einzuschieben.



welche die Dynamik der *leichten* Fermionen $\psi(x)$ beschreibt, sowie das Analogon $S_{q\bar{q}}[\mathcal{A}, \Psi_q, \bar{\Psi}_{\bar{q}}]$ für die *schweren* Quellen $\Psi_q(x)$ und $\bar{\Psi}_{\bar{q}}(x)$ der Masse m_q . Für die Normierung gilt dabei $\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mathcal{A} \mathcal{D}[\bar{\psi}\psi] \mathcal{D}[\bar{\Psi}\Psi]_q e^{iS_{\text{total}}}$. Die Wirkung der statischen Quellen ist bilinear in den Feldern $\Psi_q, \bar{\Psi}_{\bar{q}}$, somit kann die Integration über diese Grassmann-wertigen Freiheitsgrade ausgeführt werden. Das Ergebnis sind vier verschiedene Wick-Kontraktionen, die als Green'sche Funktionen $S(z, z')[\mathcal{A}]$ des Dirac-Operators $K_q(x, y)[\mathcal{A}]$ die Propagation der schweren Fermionen im externen Feld $\{\mathcal{A}_\mu\}$ beschreiben:

$$[i\gamma^\mu(\partial_\mu - ig\mathcal{A}_\mu(z) - m_q)] S(z, z')[\mathcal{A}] = \delta(\mathbf{z} - \mathbf{z}') \delta(t - t') . \quad (4.72)$$

Außerdem erhält man bei der Ausführung des Gauß'schen Integrals eine Determinante $\det(K_q[\mathcal{A}])$ der Fermionen, welche für endliche Massen eine Polarisation des Vakuums hervorrufen können. Im Limes $m_q \rightarrow \infty$ konvergiert die Determinante jedoch gegen eine Konstante, die denselben Wert besitzt wie die in \mathcal{Z} auftretende Determinante. Daher spielt dies bei der Berechnung des statischen Potentials keine Rolle. In diesem Grenzfall (*quenched approximation*) ergibt sich [Rot97]

$$\lim_{m_q \rightarrow \infty} G_{\alpha\alpha',\beta\beta'}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{y}', t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}') [P_+]_{\alpha\alpha'} [P_-]_{\beta\beta'} e^{-2im_q t} \langle W_\Gamma[\mathcal{A}] \rangle . \quad (4.73)$$

Dabei ist der Erwartungswert des nicht-abelschen Wilson-Loops (1.98) bezüglich des fermionischen und gluonischen Integrationsmaß zu bilden

$$\langle W_\Gamma[\mathcal{A}] \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\mathcal{A} \mathcal{D}[\bar{\psi}\psi] [\text{tr } P \{ e^{ig \oint_\Gamma \mathcal{A}_\mu(z) dz^\mu} \}] e^{i(S_{YM}[\mathcal{A}] + S_F[\mathcal{A}, \psi, \bar{\psi}])}}{\int \mathcal{D}\mathcal{A} \mathcal{D}[\bar{\psi}\psi] e^{i(S_{YM}[\mathcal{A}] + S_F[\mathcal{A}, \psi, \bar{\psi}])}} \quad (4.74)$$

und die Konturintegration über einen geschlossenen, rechteckigen Pfad Γ der räumlichen Ausdehnung $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ und zeitlichen Ausdehnung t auszuführen. Die Spinorstruktur der Korrelationsfunktion ist in den Projektoren $P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \gamma^0)$ codiert.

Betrachten wir nun die Zeitentwicklung des Testzustands (4.67). Die Projektoren $P(\mathbf{x}, t)$ hängen nur formal vom Ort ab, und die oben vorgestellte Herleitung verläuft nach Durchführung der Ersetzungen

$$\Psi_q^a(x) \rightarrow P^{ab}(x) \Psi_q^b(x) \quad \text{sowie} \quad \bar{\Psi}_{\bar{q}}^a(x) \rightarrow \bar{\Psi}_{\bar{q}}^b(x) P^{ba}(x)$$

in kompletter Analogie. So ergibt sich für die Korrelationsfunktion des projizierten Testzustands nach Fortsetzung zu imaginären Zeiten ($t \rightarrow -iT$) im Grenzfall statischer Ladungen

$$\lim_{m_q \rightarrow \infty} G^P(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{y}', T) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}')P_+P_- e^{-2m_q T} \langle W_\Gamma^P[\mathcal{A}] \rangle_E. \quad (4.75)$$

Der modifizierte Wilson-Loop-Operator $W_\Gamma^P[\mathcal{A}]$ geht aus $W_\Gamma[\mathcal{A}]$ durch Einfügen von Projektoren an den Ecken der Integrationskontur Γ hervor, die nun ein Rechteck der Ausdehnungen r und T in der euklidischen Raum-Zeit beschreibt. Eine schematische Darstellung findet sich in Abbildung 4.5. Ausgedrückt durch die Link-Variablen ergibt sich also für den modifizierten Wilson-Loop-Operator

$$W_\Gamma^P[\mathcal{A}] = \text{tr}[U(\mathbf{x}, 0; \mathbf{y}, 0)PU(\mathbf{y}, 0; \mathbf{y}, T)PU^\dagger(\mathbf{x}, T; \mathbf{y}, T)PU^\dagger(\mathbf{x}, 0; \mathbf{x}, T)P], \quad (4.76)$$

dessen Erwartungswert in (4.75) bezüglich der euklidischen Wirkung zu berechnen ist. Die Kenntnis dieses Erwartungswerts ermöglicht es, die Wechselwirkungsenergie des Doublets, welches schwache Isospin- und Hyperladung trägt, gemäß

$$V(r) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln \langle W_\Gamma^P[\mathcal{A}] \rangle_E \quad (4.77)$$

zu bestimmen, da im Limes unendlich schwerer Quellen und großer euklidischer Zeiten T zu erwarten ist, dass die Korrelationsfunktion $G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{y}', T)$ ein Verhalten der Form

$$\lim_{\substack{m_q \rightarrow \infty \\ T \rightarrow \infty}} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}', \mathbf{y}', T) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}')F(\mathbf{x}, \mathbf{y})e^{-E(r)T} \quad (4.78)$$

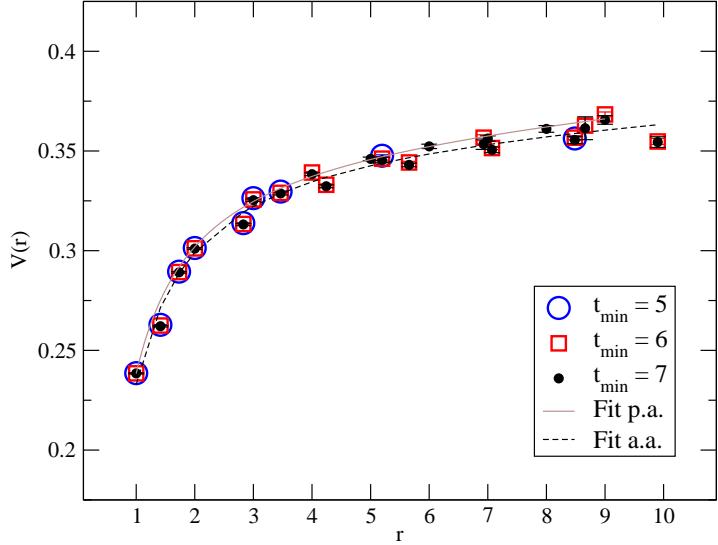
zeigen wird (vgl. (1.102)), wobei $F(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ Informationen über den Überlapp des Testzustands $|\Psi_{\bar{q}q}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\rangle$ mit dem Grundzustand enthält. Wird die Chiralität der Quellen berücksichtigt, so führt dies zu einer Veränderung von $F(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, die Wechselwirkungsenergie $E(r)$ bleibt davon jedoch unberührt.

Zur Messung des Potentials wurde ein Ensemble von 1450 Konfigurationen der Gittergröße 18^4 für die Parameterwerte $\beta = 6.0$, $\lambda = 0.01$, $\kappa = 0.216$ erzeugt. Ausgehend von einer geordneten Anfangskonfiguration wurden zur Thermalisierung des Systems 2500 *supersweeps* durchgeführt, wobei eine Veränderung der Definition eines *supersweeps* im Vergleich zu den auf Gittern der Größe 10^4 für $\kappa \in [0.17, 0.19]$ durchgeführten Simulationen vorgenommen wurde, welche weiter unten erläutert wird. Während die Akzeptanzraten für die durch Anwendung des Heatbath- (HB) bzw. Overrelaxation-Algorithmus (OR) erzeugten Vorschläge im Skalarfeldsektor der Theorie in beiden Fällen nach wie vor bei etwa 0.9 lagen, machte sich die Veränderungen der Gittergröße, sowie besonders das Vordringen in einen Parameterbereich weit entfernt von κ_c in der Akzeptanzrate im Eichfeldsektor bemerkbar. Diese stabilisierte sich bei etwa 0.3. Um diesen Effekt des Absinkens der Akzeptanzrate auf die Korrelation von Konfigurationen innerhalb der erzeugenden Markov-Kette zu reduzieren, wurde die folgende Kombination an Aktualisierungsschritten zu einem *supersweep* (SSW) zusammengefasst, wobei der Cluster-Algorithmus (CL) nur auf die Spin-Freiheitsgrade wirkt:

$$\text{SSW}\{U, \Phi, \sigma\} = 7 (\text{HB}\{\Phi\} + \text{HB}\{U\} + \text{CL}\{\sigma\}) + 3 (\text{OR}\{\Phi\} + 3 \text{OR}\{U\}). \quad (4.79)$$

Nach Abschluss der Thermalisierungsphase wurde nur jede zehnte Konfiguration in das im Folgenden näher zu untersuchende Ensemble aufgenommen.

Abbildung 4.6: Das Potential eines Paares von statischen $SU(2) \times U(1)$ -Testladungen, extrahiert aus Wilson-Loops, die einer Zeitentwicklung des Zustands (4.67) von mindestens $t_{\min} = 5, 6, 7$ Schritten entsprechen. Fits für die Hauptachsendaten (p.a.), sowie unter Verwendung aller für $t_{\min} = 7$ verfügbaren Datenpunkte (a.a.) werden ebenfalls gezeigt. Gitter: 18^4 , $\beta = 6.0$, $\lambda = 0.01$, $\kappa = 0.216$.



Der Verlauf des Potentials zwischen den statischen Testladungen wurde nach der in Kapitel 1.3.4 beschriebenen Methode aus den Messwerten von Wilson-Loops unterschiedlicher Größe und Orientierung extrahiert. Die Hauptachsen des Gitters geben dabei die Standardorientierung der Wilson-Loops vor, welche in den durch \hat{e}_t und \hat{e}_i ($i = 1, 2, 3$) aufgespannten Netzebenen des Gitters gemessenen wurden. Da jedoch keine der Hauptachsen des Gitters ausgezeichnet ist, lassen sich die statistischen Fehler weiter minimieren. Die uneingeschränkte kubische Symmetrie des Problems kann dahingehend ausgenutzt werden, dass jede der vier Hauptachsen als die Zeitrichtung betrachtet, und folglich insgesamt eine Erhöhung der Anzahl an Messwerten für die Wilson-Loops um einen Faktor vier erreicht werden kann. Darüber hinaus wurden auch noch zwei weitere Orientierungen der Wilson-Loops betrachtet, welche durch die beiden Raumdiagonalen der elementaren dreidimensionalen Würfel vorgegeben sind. Die räumliche Ausdehnung der Integrationskontur der zugehörigen Wilson-Loops ist daher ein ganzzahliges Vielfaches von $\sqrt{2}a$ und $\sqrt{3}a$, so dass es möglich ist, auch für nicht-rationale Abstände r der Quellen Messdaten zu erheben. Dadurch wird die Möglichkeit eröffnet, das Ausmaß der durch die Diskretisierung der Raumzeit induzierten Brechung der $O(4)$ -Symmetrie abzuschätzen.

Nach Gleichung (4.77) ist eine Extraktion des Potentials $V(r)$ aus den Erwartungswerten des (modifizierten) Wilson-Loop-Operators erst im Grenzfall einer unendlich langen Zeitentwicklung des Testzustands (4.67) möglich. Dieser Fall ist natürlich in einer konkreten Simulation nicht realisierbar. Daher muss im Einzelfall überprüft werden, ob es gerechtfertigt ist davon auszugehen, dass dieser Grenzfall bereits für endliche, große euklidische Zeiten T vorliegt und somit das so gewonnene Ergebnis eine hinreichend gute Näherung für das wahre Potential darstellt. Zu diesem Zweck wurde die Extraktion des Potentials unter der Annahme verschiedener Werte für t_{\min} durchgeführt, wobei ausschließlich Messwerte verwendet wurden, deren relativer Fehler geringer als 0.1 war. Die Ergebnisse für die Fälle $t_{\min} = 5, 6, 7$ sind in Abbildung 4.6 zusammengefasst, wobei all diejenigen Datenpunkte verworfen wurden, für welche sich im Rahmen des T -Fits ein $\chi^2/\nu > 2.5$ oder eine *Goodness-of-Fit* $Q < 0.01$ ergeben hatte. Erwartungsgemäß hat sich gezeigt, dass die Anzahl der Datenpunkte für $V(r)$, die unsere

beiden Kriterien für die Güte des Fits erfüllen, bei Vergrößerung von t_{\min} zunimmt, und dies speziell für diejenigen Punkte gilt, die zu großen räumlichen Abständen r der Quellen gehören. Da sich der relative Fehler der Wilson-Loops bei Vergrößerung von r erhöht, muss die Anzahl der Datenpunkte N , die durch eine interpolierende Gerade beschrieben werden sollen, abnehmen, um das geforderte Qualitätskriterium erfüllen zu können. Dies ist aber bei Vergrößerung von t_{\min} der Fall, denn es gilt $N = N_4/2 - t_{\min}$. Konnten für festes r jedoch aus den verschiedenen Fits zu den unterschiedlichen Werten von t_{\min} mehrere Werte für $V(r)$ extrahiert werden, so ist zu beobachten, dass diese praktisch übereinstimmen. Der Limes großer Zeiten scheint also bereits ab $t_{\min} = 5$ erreicht zu sein, dennoch verwenden wir Sicherheitshalber im Folgenden die für $t_{\min} = 7$ extrahierten Daten um einen Fit derselben an einen Potentialansatz der Form

$$V(r) = V_0 - \frac{\alpha}{r} + \sigma \cdot r \quad (4.80)$$

durchzuführen. Dabei beschränken wir uns zunächst auf diejenigen Datenpunkte, für welche r durch ein ganzzahliges Vielfaches der Gitterkonstanten a gegeben ist. Diese wurden aus Wilson-Loops in Hauptachsenorientierung gewonnen. Das Ergebnis dieses Fits war:

$$\sigma = 2.3777 \cdot 10^{-3} \pm 2.225 \cdot 10^{-4}, \quad \alpha = 0.12233 \pm 0.00118, \quad \chi^2/\nu = 1.41370. \quad (4.81)$$

Die graphische Darstellung dieses Resultats wurde ebenfalls in Abbildung 4.6 als durchgezogene Kurve (p.a.) mit aufgenommen. Betrachtet man nun auch diejenigen Datenpunkte, die zu nicht-rationalen Abständen r der Quellen gehören, so ist festzustellen, dass sich Abweichungen von dieser Kurve ergeben, die sich mit zunehmendem Abstand der Quellen leicht vergrößern. Gleichzeitig nimmt aber auch die Größe der Fehler dieser Messwerte zu. Versucht man nun, einen Fit aller für $t_{\min} = 7$ gewonnenen Datenpunkte an den einfachen Potentialansatz (4.80) durchzuführen, findet sich zwar ein Wert für σ , der etwa halb so groß ist wie das Ergebnis in (4.81), allerdings gilt hierbei $\chi^2/\nu > 20$. Die graphische Darstellung ist die gestrichelte Kurve (a.a.) in Abbildung 4.6. Dieses Resultat stellt einen Hinweis auf eine Verletzung der Rotationssymmetrie aufgrund des endlichen Wertes der Gitterkonstanten $a(\beta)$ am von uns betrachteten Punkt im Phasendiagramm dar, allerdings nur, falls die Fehler der aus den Erwartungswerten der Wilson-Loops in Diagonalorientierung extrahierten Messwerten nicht stark unterschätzt wurden. Dass dies tatsächlich der Fall sein könnte, zeigte eine Inspektion der Werte für χ^2/ν und Q : Tendenziell gilt bei starker Abweichung $\chi^2/\nu \ll 1$ für $Q \simeq 1$, insbesondere für große Werte von r . Die Verletzung der Rotationssymmetrie ist also sicherlich vorhanden und nachweisbar, die Gestalt des Potentials signalisiert jedoch, dass dieser Effekt nicht übermäßig gravierend zu sein scheint und möglicherweise durch eine Unterschätzung der Fehler der Potentialdaten im Rahmen der verwendeten Methode überschätzt wird.

Zur eindeutigen Klärung der Frage, ob der linear anwachsende Confinement-Anteil des Potentials (4.80) an diesem Punkt des Phasendiagramms tatsächlich gänzlich vernachlässigt werden kann, müssten weitere Simulationen auf sehr viel größeren Gittern durchgeführt werden, um verlässliche Messwerte für den Verlauf des Potentials bei Abständen $r > 9a$ gewinnen zu können, die weder von den Auswirkungen der Rotationssymmetriebrechung (Diagonalachsen), noch von der Periodizität des Gitters (Hauptachsen) beeinflusst sind. An dieser Stelle ist es wichtig zu betonen, dass eine Unterscheidung zwischen einer Confinement-Phase und einer Higgs-Phase der hier untersuchten Theorie prinzipiell möglich ist, da die statischen Testladungen im Falle der Erweiterung einer Yang-Mills-Theorie durch ein Skalarfeld, welches sich unter der *adjungierten* Darstellung der Gruppe transformiert, anders als durch

ein skalares Feld in fundamentaler Darstellung, nicht durch Paarbildungseffekte abgeschirmt werden können¹⁸. Folglich stellt die *string tension* einen echten Ordnungsparameter für einen möglichen Phasenübergang dar, und der von uns gemessene Wert unterscheidet sich deutlich (etwa um einen Faktor 20) von dem in der Literatur angegebenen Wert von $\sigma = 0.0517(2)$ im Falle einer reinen $SU(3)$ -Yang-Mill-Theorie bei $\beta = 6.0$ [Lan07]. Das skalierte Potential der reinen $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie wird in Abbildung 2.3 gezeigt, auch hier werden nochmals die Unterschiede des Potentialsverlaufs für $\beta = 6.0$ im Vergleich zu Abbildung 4.6 deutlich.

Das in (4.81) zusammengefasste Ergebnis deutet jedenfalls darauf hin, dass das $SU(2) \times U(1)$ -Potential von einem langreichweitigen Anteil dominiert wird, der vielmehr der Form eines Coulomb-Potentials als der eines Confinement-Potentials im Sinne Wilsons folgt. Diese Beobachtung legt die Vermutung nahe, dass zumindest *eine* masselose Anregung im Spektrum der Theorie nachweisbar sein sollte, die diese langreichweite Wechselwirkung vermittelt. Das Auftreten von massiven Anregungen würde sich hauptsächlich in der Modifizierung des Coulomb-Potentials bei kleinen Abständen r der Quellen bemerkbar machen, sofern diese bei dem durch die Gitterkonstante $a(\beta)$ vorgegebenen Auflösungsvermögen überhaupt detektiert werden könnten. Die beobachtete Form des Potentials lässt jedenfalls diesbezüglich keine eindeutigen Schlüsse zu. Daher sind zur Klärung dieser Frage weitere Untersuchungen erforderlich, welche Gegenstand des folgenden Kapitels sind.

4.7 Spektroskopische Untersuchungen

In diesem Kapitel soll die Untersuchung des Massenspektrums der $SU(3)$ -Eichtheorie mit Skalarfeld in adjungierter Darstellung durchgeführt werden, und zwar in der Realisierungsphase spontan gebrochener Symmetrie, in welcher die Theorie noch eine residuelle $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie aufweist, deren Einbettung in die ursprüngliche Eichgruppe $SU(3)$ durch die Wahl der in Kapitel 4.4 beschriebenen Eichung kontrolliert werden kann. In einem ersten Schritt sollen zunächst die Grundlagen spektroskopischer Untersuchungsmethoden im Rahmen von Gittertheorien dargelegt werden.

4.7.1 Physikalische Zustände

Die Aufhebung der Gitterdiskretisierung einer Eichtheorie geht im Kontinuumslimes mit der Wiederherstellung der vollen Rotationssymmetrie einher. In diesem Fall lässt sich der Spin J eines physikalischen Zustands im zugehörigen Hilbertraum \mathcal{H} durch eine unitäre irreduzible Darstellung der Gruppe $SU(2)$ charakterisieren, die wir mit D_J bezeichnen wollen, wobei die Darstellungen mit halbzahligen Spins den fermionischen Anregungen vorbehalten sind und bosonische Anregungen nach irreduziblen Darstellungen der Drehungsgruppe $SO(3)$ klassifiziert werden können. Derartige Eigenzustände des Hamilton-Operators bezeichnen wir mit $|\Psi_J\rangle$. Durch Einführung einer Gitterkonstanten a reduziert sich die Rotationssymmetrie der Theorie auf Symmetrietransformationen, welche der kubischen Gruppe \mathbf{O} entstammen, die eine Untergruppe der $SO(3)$ darstellt. Die durch triviale Einbettung der kubischen Gruppe \mathbf{O} in die Drehungsgruppe hervorgegangenen Darstellungen bezeichnen wir mit $D_J^{\mathbf{O}}$. Da

¹⁸Da adjugierte Materie die Symmetrie reiner Yang-Mills-Theorien unter Transformationen aus dem Zentrum der Gruppe nicht explizit bricht, kann die Confinement-Phase in Theorien wie (4.26) eindeutig anhand des Verhaltens von großflächigen Wilson-Loops als eine Phase nicht spontan gebrochener Zentrumssymmetrie charakterisiert werden [CG08].

die kubische Gruppe \mathbf{O} (auch Oktahedron-Gruppe) für alle Gitterabstände a eine exakte Symmetriegruppe der Theorie auf dem Gitter darstellt, müssen sich alle Eigenzustände des Hamilton-Operators durch unitäre irreduzible Darstellungen von \mathbf{O} klassifizieren lassen¹⁹, die wir mit $|\Psi_R\rangle$ bezeichnen. Außerdem muss eine Verbindung zwischen den so charakterisierten Zuständen und den gemäß der irreduziblen Darstellungen D_J der $SU(2)$ im Kontinuum klassifizierten existieren. Durch eine Zerlegung der Form

$$|\Psi_R\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^R |\Psi_{\alpha}\rangle \quad (4.82)$$

kann diese Verbindung hergestellt werden, wobei in die Summation über $\alpha = (J, m)$ auch die $m = 2J + 1$ verschiedenen Unterzustände mit „magnetischen“ Quantenzahlen m eingeschlossen sind. Im Kontinuumslimes gehört jeder der Zustände $|\Psi_{\alpha}\rangle$ zu einem Spin J Multiplett, in diesem Sinne enthält der Zustand $|\Psi_R\rangle$ verschiedene Spins J . Da die abgeleiteten Darstellungen $D_J^{\mathbf{O}}$ i.A. reduzibel sind (z.B. gilt $D_3^{\mathbf{O}} = A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$), ist zunächst zu fordern, dass $R \subset D_J^{\mathbf{O}}$, damit in (4.82) Spin J zur Superposition $|\Psi_R\rangle$ beitragen kann.

Der physikalische Hilbertraum \mathcal{H} einer Gitterreichtheorie besteht aus eichinvarianten Zuständen $|\Psi\rangle$, die durch Anwendung von eichinvarianten Operatoren \mathcal{O} auf den Vakuumzustand $|\Omega\rangle$ erzeugt werden. Nehmen wir o.B.d.A. an, dass dies zum Zeitpunkt $t = 0$ geschehen soll – die Zeitentwicklung derartiger Zustände wird durch den Zeitentwicklungsoperator \mathbb{T} im Rahmen des Transfermatrixformalismus beschrieben [MM94] – so finden wir nach Subtraktion der Projektion auf den Vakuumzustand

$$|\Psi(\mathbf{x})\rangle = [\mathcal{O}(\mathbf{x}) - \langle \mathcal{O}(\mathbf{x}) \rangle] |\Omega\rangle. \quad (4.83)$$

Durch Fourier-Transformation lassen sich daraus Eigenzustände des Impulsoperators konstruieren, die Summation über alle Orte innerhalb einer festen Zeitschicht ermöglicht die Konstruktion von Eigenzuständen des Paritätsoperators P . Eine weitere diskrete Symmetrioperation ist die Ladungskonjugation, die Eigenwerte des zugehörigen Operators C sind $c = \pm$ (C-Parität). Möchte man diese beiden diskreten Symmetriegruppen in die Klassifizierung von möglichen Zuständen mit einbeziehen, so müssen irreduzible Darstellungen der Gruppe $\mathbf{O} \times \mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ konstruiert werden. Bezeichnen wir diese mit $\rho = R^{PC}$, so gilt für Zustände mit endlichen Impulsen \mathbf{p} , die zu einer solchen Darstellung gehören:

$$|\Psi_{\rho}(\mathbf{p})\rangle = \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} |\Psi_{\rho}(\mathbf{x})\rangle. \quad (4.84)$$

Unterwerfen wir die auf diese Weise konstruierten Zustände nun einer Zeitentwicklung, so können die Massen der zugehörigen Anregungen aus der Übergangs- bzw. Persistenzamplitude für große Zeiten t (*large time limit*) extrahiert werden:

$$\mathcal{C}_{\rho}(\mathbf{p}, t) := \langle \Psi_{\rho}(\mathbf{p}) | e^{-Ht} | \Psi_{\rho}(\mathbf{p}) \rangle = \sum_{\alpha} |c_{\alpha}^{\rho}|^2 e^{-E_{\alpha}^{\rho}(\mathbf{p})t}. \quad (4.85)$$

Alternativ dazu können Operatoren der Form

$$\mathcal{O}(\mathbf{p}, t) := \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \mathcal{O}(\mathbf{x}, t), \quad (4.86)$$

¹⁹Die fünf inäquivalenten irreduziblen Darstellungen R der kubischen Gruppe werden üblicherweise mit A_1, A_2, E, T_1, T_2 bezeichnet und haben jeweils die Dimensionen 1, 1, 2, 3 und 3 [BB83].

definiert werden, welche Observablen beschreiben sollen, die in einer festen Zeitschicht t des Gitters definiert sind. Dabei wird der lokale Operator $\mathcal{O}(\mathbf{x}, t)$ zunächst so konstruiert, dass durch Anwendung auf das Vakuum ein Zustand mit den Quantenzahlen R und C unter Transformationen aus \mathbf{O} und \mathbb{Z}_2 erzeugt wird:

$$|\Psi_{RC}(\mathbf{x}, t)\rangle = \mathcal{O}(\mathbf{x}, t)|\Omega\rangle. \quad (4.87)$$

Danach wird eine partielle Fourier-Transformation des Operators durchgeführt und die Berechnung einer verbundenen Korrelationsfunktion der Operatoren $\mathcal{O}(\mathbf{p}, t)$ in Gleichung (4.86) liefert ebenfalls die Amplitude von Interesse:

$$\mathcal{C}_\rho(\mathbf{p}, t) = \langle \mathcal{O}(-\mathbf{p}, t) \mathcal{O}(\mathbf{p}, 0) \rangle_c := \langle \mathcal{O}(-\mathbf{p}, t) \mathcal{O}(\mathbf{p}, 0) \rangle - \langle \mathcal{O}(-\mathbf{p}, t) \rangle \langle \mathcal{O}(\mathbf{p}, 0) \rangle. \quad (4.88)$$

Unsere Konventionen zur Fourier-Transformation finden sich im Anhang A.4.

4.7.2 Masselose Anregungen: Ein Kandidat für das Photon

In einem ersten Schritt soll das oben vorgestellte Verfahren zur Konstruktion physikalischer Zustände im Rahmen der Suche nach einem Kandidaten für das Photon im Spektrum der Theorie konkretisiert werden. Wir sind also zunächst bestrebt, einen Operator zu finden, von dem zu erwarten ist, dass er an eine masselose Anregung koppeln wird, sofern sich eine solche im Spektrum der Theorie befindet. Auf diesem Operator soll in einem weiteren Schritt eine irreduzible Darstellung ρ der kubischen Gruppe konstruiert werden, welche im Kontinuumsliedes der Spin $J = 1$ Darstellung für Vektoren entspricht und die Quantenzahlen des Photons aufweist.

Bei der Suche nach einem geeigneten Operator lassen wir uns von den Ergebnissen der von 't Hooft [tH74b] und Polyakov [Pol74] durchgeführten Untersuchungen zur Frage nach der Existenz von Monopolen als klassischen Lösungen der Feldgleichungen des Georgi-Glashow-Modells leiten. Unser Vorgehen stellt somit eine natürliche Verallgemeinerung der für den Falle einer $SU(2)$ -Eichtheorie mit adjungiertem Skalarfeld in $D=4$ Dimensionen ausführlich in [Har96] dargelegten Konstruktionen auf den Fall der Eichgruppe $SU(3)$ dar.

Wir beginnen mit der Definition einer verallgemeinerten Feldstärke der Form

$$f_{\mu\nu}(x) := \frac{\phi^a(x)}{\|\phi(x)\|} F_{\mu\nu}^a(x) - \frac{1}{g\|\phi(x)\|^3} f_{abc} \phi^a(x) D_\mu \phi^b(x) D_\nu \phi^c(x). \quad (4.89)$$

Dabei gelten die in Kapitel 4.3 eingeführten Konventionen, f_{abc} bezeichne die total antisymmetrischen Strukturkonstanten. Unter Verwendung der folgenden Definitionen

$$a_\mu(x) := n^a(x) A_\mu^a(x), \quad n^a(x) := \phi^a(x)/\|\phi(x)\| \quad (4.90)$$

lässt sich nach kurzer Rechnung zeigen, dass

$$f_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu a_\nu(x) - \partial_\nu a_\mu(x) - \frac{1}{g} f_{abc} n^a(x) \partial_\mu n^b(x) \partial_\nu n^c(x), \quad (4.91)$$

wobei der letzte Term eine topologische Invariante darstellt. Wie bereits in Kapitel 2 diskutiert, reduziert sich dieser im Falle des Georgi-Glashow-Modells auf einen Ausdruck, welcher

mit der magnetischen Ladung M der von 't Hooft und Polyakov beschriebenen *hedgehog solution* eines magnetischen Monopols verknüpft ist. Die verallgemeinerte Feldstärke (4.89) ist manifest eichinvariant, was an der Formulierung

$$f_{\mu\nu}(x) = \frac{2}{\|\phi(x)\|} \text{tr}[\Phi(x)F_{\mu\nu}(x)] + \frac{2i}{g\|\phi(x)\|^3} \text{tr}[\Phi(x)[D_\mu\Phi(x), D_\nu\Phi(x)]] \quad (4.92)$$

offensichtlich wird. Der für uns relevante Aspekt dieser Konstruktion offenbart sich, wenn wir die Eichfreiheit dahingehend ausnutzen, (4.89) in lokaler unitärer Eichung auszuwerten. In diesem Fall sind die einzigen nichtverschwindenden Komponenten des Skalarfeldes $\phi^a(x)$ durch die Wahl der beiden Generatoren aus der Cartan-Algebra festgelegt. Nach Diagonalisierung bedeutet dies im Fall der von uns verwendeten Gell-Mann-Basis, dass $\phi^a(x) = \chi(x)\delta^{a3} + \xi(x)\delta^{a8}$. Das Skalarfeld ist also im Raum der internen Symmetrietransformationen konstant, kann sich aber räumlich noch ändern. Nach Fixierung dieser Eichung reduziert sich (4.91) auf

$$f_{\mu\nu}^\Omega(x) = \partial_\mu a_\nu(x) - \partial_\nu a_\mu(x). \quad (4.93)$$

In unitärer Eichung liegt also eine abelsche Feldstärke vor, und das zugehörige Photon $a_\mu(x)$ wird durch (4.90), berechnet in dieser Eichung, definiert. Die Einbettung der ungebrochenen abelschen Untergruppe $U(1)$ nach spontaner Symmetriebrechung ist also durch die Richtung des adjungierten Skalarfeldes festgelegt.

Die Übertragung dieser Überlegungen auf die Formulierung der Theorie auf dem Gitter geschieht in zwei Schritten. Zunächst suchen wir einen Operator, der dem ersten Beitrag in (4.89) entspricht und die Projektion der nicht-abelschen Feldstärke auf die Richtung des Einheitsvektors $\hat{n}(x)$ darstellt. Ein möglicher Kandidat ist dabei gegeben durch

$$\Gamma_{\mu\nu}^1(x) := \frac{2}{\|\phi(x)\|} \text{Im}\{\text{tr}[\Phi(x)U_{\mu\nu}(x)]\}, \quad (4.94)$$

wovon man sich durch Entwicklung der in der $\hat{\mu} - \hat{\nu}$ -Ebene liegenden Plaquette $U_{\mu\nu}(x)$ nach Potenzen der Gitterkonstanten a leicht überzeugen kann:

$$\text{tr}[\Phi(x)U_{\mu\nu}(x)] = i\frac{a^2}{2}\phi^a(x)F_{\mu\nu}^a(x) - \frac{a^4}{8}d_{abc}\phi^a(x)F_{\mu\nu}^b(x)F_{\mu\nu}^c(x) + \mathcal{O}(a^6). \quad (4.95)$$

Für den zweiten Term in der generalisierten Feldstärke (4.89) verwenden wir

$$\Gamma_{\mu\nu}^2(x) := \left(\frac{\beta}{2N}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{4}{\|\phi(x)\|\|\phi(x+\mu)\|\|\phi(x+\nu)\|} \text{Im}\{\text{tr}[B_{\mu\nu}(x)]\}, \quad (4.96)$$

wobei im vorliegenden Fall $N = 3$ zu wählen ist und der Einfachheit halber

$$B_{\mu\nu}(x) := \Phi(x)U_\mu(x)\Phi(x+\mu)U_\mu^\dagger(x)U_\nu(x)\Phi(x+\nu)U_\nu^\dagger(x) \quad (4.97)$$

definiert wurde. Die Wahl des Operators $\Gamma_{\mu\nu}^2(x)$ wird durch die Relation

$$\text{tr}[\Phi(x)[D_\mu^+\Phi(x), D_\nu^+\Phi(x)]] = \frac{2i}{a^2} \text{Im}\{\text{tr}[B_{\mu\nu}(x)]\} \quad (4.98)$$

motiviert, wobei die kovariante Vorwärtsableitung eines adjungierten Skalarfeldes auf dem Gitter durch (4.44) gegeben ist. Eine konsequente Entwicklung aller in der Konstruktion

von $\Gamma_{\mu\nu}^2(x)$ auftauchenden Felder nach Potenzen der Gitterkonstanten a zeigt, dass man im Kontinuumsliimes als führenden Term der Entwicklung gerade den zweiten Term in (4.89) gewinnt. Das Analogon der 't Hooft-Polyakov-Feldstärke $f_{\mu\nu}(x)$ in der Formulierung der Theorie auf dem Gitter bezeichnen wir schließlich mit

$$\Gamma_{\mu\nu}^3(x) := \Gamma_{\mu\nu}^1(x) - \Gamma_{\mu\nu}^2(x). \quad (4.99)$$

Als nächstes ist auf den drei Operatoren $\Gamma_{\mu\nu}^k(x)$ in (4.94), (4.96) und (4.99) jeweils die irreduzible abgeleitete Darstellung $D_1^{\mathbf{O}}$ der kubischen Gruppe \mathbf{O} zu konstruieren. Dabei orientieren wir uns an den Ergebnissen von Berg und Billoire [BB83], die im Rahmen der Spektroskopie von *glue balls* auf Wilson-Loops einer Länge von bis zu acht Links alle irreduziblen Darstellungen der vollen kubischen Gruppe konstruiert und dabei 16 verschiedene mögliche Kandidaten für sämtliche Zustände J^{PC} der vier niedrigsten Spinquantenzahlen ($J = 0, 1, 2, 3$) identifiziert haben. Für unsere Zwecke ist die irreduzible dreidimensionale Darstellung T_1 von \mathbf{O} entscheidend. Aufgrund der zyklischen Eigenschaft der Spur ist die Verallgemeinerung der in [BB83] vorgestellten Ergebnisse für die Konstruktion eines Zustands mit Quantenzahlen $\rho = 1^{+-}$ auf elementaren Plaquetten auf den von uns konstruierten Operator (4.94) direkt möglich, d.h. die zusätzliche Einführung des skalaren Feldes $\Phi(x)$ am Basispunkt der Plaquette stellt also kein Problem dar. Bezeichnen wir für den Moment die euklidische Richtung \hat{e}_4 als Zeitrichtung, so bilden die drei auf den räumlichen Impuls $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ projizierten Operatoren

$$\text{Im}\{\Gamma_{12}^1(\mathbf{0}, t)\}, \quad \text{Im}\{\Gamma_{23}^1(\mathbf{0}, t)\}, \quad \text{Im}\{\Gamma_{31}^1(\mathbf{0}, t)\}, \quad (4.100)$$

nach Anwendung auf das Vakuum in jeder Zeitschicht t die gewünschte Triplettdarstellung (zu $J = 1$) mit negativem Eigenwert des Ladungskonjugationsoperators C und gerader Parität. Die Konstruktion eines Zustands mit negativer Parität bei verschwindendem räumlichen Impuls $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ erfordert die Verwendung nicht-lokaler Operatoren [BB83], es wurde aber in [BP84] darauf hingewiesen, dass die durch (4.100) gegebene Axialvektordarstellung nach Transformation auf endliche räumliche Impulse $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ einen Überlapp mit dem physikalischen Photon aufweist, welches negative Parität besitzt. Wir verzichten auf die Verwendung einer nicht-lokalen Konstruktion und nehmen dafür in Kauf, dass das Signal, welches im Kanal $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ der für jeden der drei Operatoren $\Gamma_{\mu\nu}^k(x)$ ($k = 1, 2, 3$) konstruierten Darstellung (4.100) gemessen wird, keine Relevanz für die Klärung der Frage nach der Existenz eines Photons haben wird. Stattdessen muss das für endliche Impulse erhaltene Signal, das durch Verwendung von Operatoren mit den richtigen Quantenzahlen des physikalischen Photons gemessenen wird, auf den Fall $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ extrapoliert werden. Die Konstruktion der irreduziblen Darstellung T_1^{+-} für die Operatoren (4.96, 4.99) verläuft in Analogie zum hier vorgestellten Verfahren.

Die Hauptgrundlage unserer Messungen bildete das Ensemble der für eine Gittergröße von 18^4 Gitterpunkten erzeugten 1450 Konfigurationen, welches bereits in Abschnitt 4.6 für die Untersuchung des statischen Potentials zwischen zwei Quellen mit $SU(2) \times U(1)$ -Ladungen herangezogen wurde. Bezeichnen wir wie üblich mit \hat{e}_4 die euklidische Zeitrichtung, so wurden in jeder dieser Konfigurationen zunächst für jedes $k = 1, 2, 3$ die drei Zeitschichtoperatoren

$$\Gamma_{\alpha}^k(\mathbf{p}, t) := \sum_{\mathbf{x}} \text{Im}\{\Gamma_{\alpha}^k(\mathbf{x}, t)\} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}, \quad \alpha := \Pi(\mu\nu), \quad \mu, \nu \in [1, 2, 3], \quad (4.101)$$

gemessen, wobei durch $\alpha = 1, 2, 3$ diejenigen Permutationen der Indizes μ und ν bezeichnet werden sollen, welche den drei magnetischen Unterzuständen in (4.100) entsprechen.

Für die partielle Fourier-Transformation wurden dabei nur ganzzahlige Vielfache des minimalen Matsubara-Impulses

$$p_i^M = 2\pi/N_i \quad (4.102)$$

in Richtung der Hauptachsen des Gitters verwendet. Hier bezeichnet N_i die Anzahl der Gitterpunkte in Richtung \hat{e}_i . Zur Erhöhung der Statistik wurde die hyperkubische Symmetrie des Gitters durch zyklische Permutation der Raumzeit-Indizes ausgenutzt, d.h. der Zerfall der Korrelationen wurde in Richtung aller vier möglichen, äquivalenten Orientierungen des Gitter gemessen, wobei zu fordern ist, dass die Impulse der zugehörigen Wellenfunktionen einer Transversalitätsbedingung gehorchen. Die Definition eines Gitterimpulses der Form

$$\hat{p}_i := 2 \sin(p_i/2) \quad (4.103)$$

ermöglicht nach Wiedereinführung der Gitterkonstanten a die Vergleichbarkeit von Kontinuumsphysik mit Gitterresultaten, insbesondere übersetzt sich die relativistische Dispersionsrelation $p^2 = m^2$ eines Teilchens der Masse m im Minkowski-Raum \mathcal{M}_4 beim Übergang auf das euklidische Gitter E_4 in die Form

$$-\hat{p}_4^2 = \sum_{i=1}^3 \hat{p}_i^2 + m^2 \iff 2[\cosh(E) - 1] = 2 \sum_{i=1}^3 [1 - \cos(p_i)] + m^2, \quad (4.104)$$

da die komplexen Singularitäten des Propagators im Impulsraum mit der vierten Komponente des euklidischen Impulses gemäß $p_4 = \pm iE$ verknüpft sind [EJJ⁺87, MM94]. Zur weiteren Minimierung des statistischen Fehlers wurde für einen festen Wert des Index k über alle möglichen Orientierungen des Gitters gemittelt, sowie dessen Periodizität ausgenutzt. Mit der entsprechenden Verallgemeinerung der Permutationen α in (4.101) erhält man schließlich die folgenden Erwartungswerte:

$$\Gamma^k(d, \mathbf{p}) = \sum_{\alpha, \Pi(\hat{e}_t)} \sum_{t=1}^{N_t} \left\langle \Gamma_\alpha^k(-\mathbf{p}, (t+d)\hat{e}_t) \Gamma_\alpha^k(\mathbf{p}, t\hat{e}_t) \right\rangle_c. \quad (4.105)$$

Um abschätzen zu können, inwiefern die gemessenen Ergebnisse noch von der Größe des verwendeten Gitters abhängen, wurden ebenfalls Messungen in einem Ensemble von 2500 Konfigurationen der Gittergröße 16^4 durchgeführt. Dies ermöglicht nach (4.102) auch die Untersuchung neuer Punkte im Impulsraum und bietet damit die Möglichkeit einer stringenteren Extrapolation der Dispersionsrelation in einem intermediären Impulsbereich auf den nicht direkt zugänglichen Punkt $\mathbf{p} = \mathbf{0}$, an dem die physikalische Masse definiert ist [MM94]:

$$m_{\text{phys}} := \lim_{\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{0}} E(\mathbf{p}). \quad (4.106)$$

Die Messergebnisse für den 't Hooft-Polyakov-Operator (4.99) für die vier niedrigsten ganzzahligen Vielfachen $n = 0, 1, 2, 3$ des minimalen Impulses (4.102) auf einem Gitter der Größe 18^4 finden sich in Abbildung 4.7. Legen wir die Konvention

$$\hat{p}_i(n) := 2 \sin\left(n \frac{p_i^M}{2}\right) \quad (4.107)$$

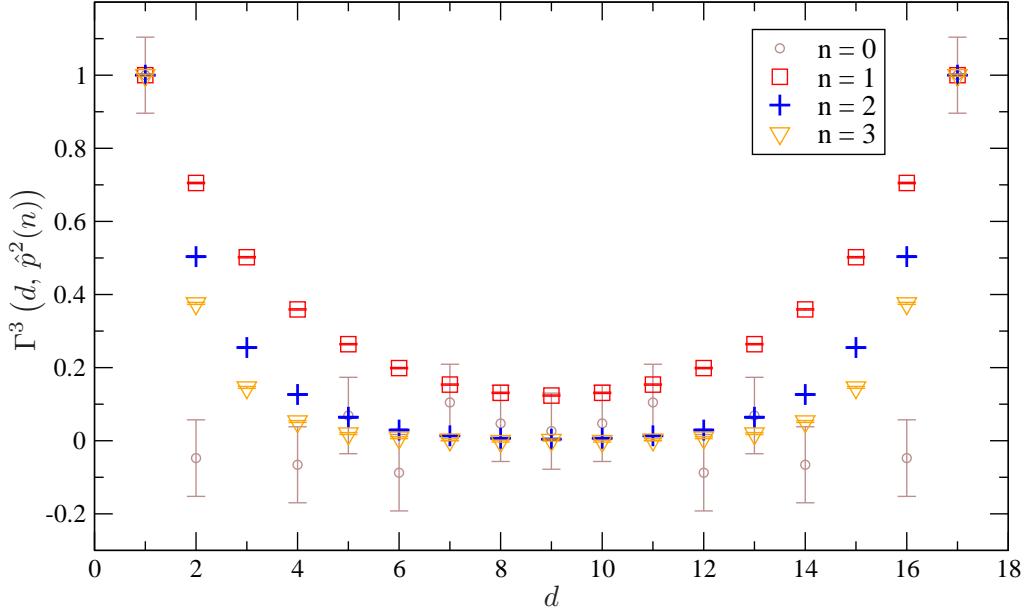


Abbildung 4.7: Die gemittelte Korrelationsfunktion $\Gamma^3(d, \hat{p}^2)$ (4.105) des 't Hooft-Polyakov-Operators (4.99) nach Fourier-Transformation. Gitter: 18^4 , $\beta = 6.0$, $\kappa = 0.216$, $\lambda = 0.01$.

bei der Bezeichnung der Komponenten des Gitterimpulses $\hat{p}_i(n)$ zu den ganzzahligen Vielfachen $n \in \mathbb{Z}$ des Matsubara-Impulses zugrunde, so lautet die von uns adaptierte Normierung der Korrelationsfunktionen:

$$\Gamma^k(1, \hat{p}_i(n)) = 1 \quad \text{für} \quad n = 1, 2, 3, \quad (k = 1, 2, 3). \quad (4.108)$$

Die Messergebnisse der Korrelatoren wurden dabei für die Abstände $d = 0$ bzw. $d = 18$ nicht berücksichtigt. Erwartungsgemäß sind die Datenpunkte, welche für verschwindenden Impuls ($n = 0$) gemessen wurden, statistisch nicht signifikant. Die Datenpunkte für $n > 0$ hingegen weisen minimale statistische Fehler auf, welche in dieser Abbildung durch Gauß'sche Fehlerfortpflanzung aus den Fehlern der Erwartungswerte der primären Größen vor Ausführung der in (4.105) durchgeführten Mittelung berechnet wurden. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Korrelationen von Anregungen mit zunehmenden Impulsen und somit höheren Energien $E(\hat{p}^2)$ schneller zerfallen. Die Extraktion der Energie bzw. Masse der beobachteten Anregungen geschieht durch einen nicht-linearen Fit der Messdaten an eine Funktion der Form

$$\mathcal{C}(d, n) = A \cosh(E(\hat{p}^2(n)) [d - N_t/2]), \quad (4.109)$$

welche den periodischen Randbedingungen, die wir den Simulationen zugrunde gelegt haben, durch Symmetrisierung des exponentiellen Verhaltens um die Mitte der zeitlichen Ausdehnung des Gitters Rechnung trägt. Die dabei extrahierten Werte für $E(\hat{p}^2)$ können nach Gleichung (4.104) über die Relation

$$\hat{E}_L^2(\hat{p}^2) = 2 [\cosh(E(\hat{p}^2)) - 1] \quad (4.110)$$

mit dem Quadrat der Gesamtenergie $\hat{E}_L(\hat{p}^2)$ der Anregung in Gitterformulierung in Verbindung gebracht werden. In Abbildung 4.8 sind die Resultate der Messungen von $\hat{E}_L^2(\hat{p}^2)$ für

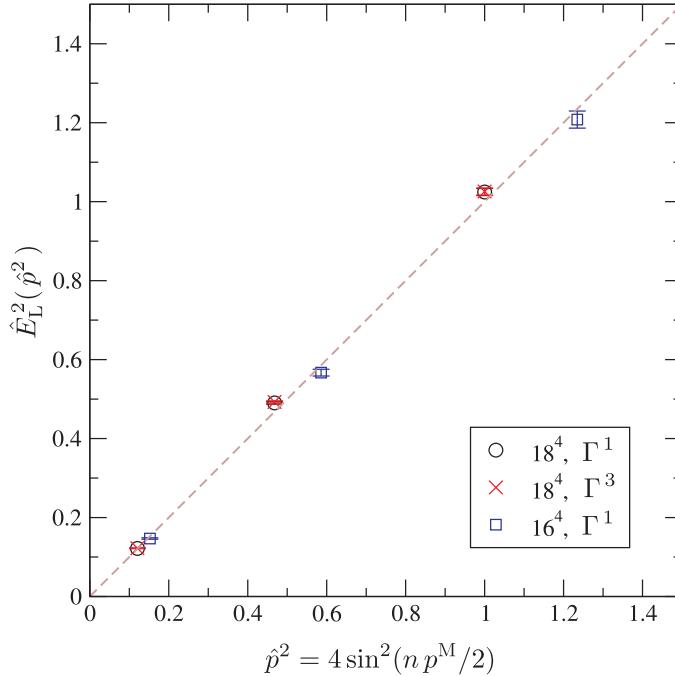


Abbildung 4.8: Die Dispersionsrelation (4.104) einer masselosen Anregung, die aus Messungen der verbundenen Korrelationsfunktionen (4.105) der beiden Operatoren $\Gamma^1(\mathbf{p}, t)$ (4.94) und $\Gamma^3(\mathbf{p}, t)$ (4.99) auf Gittern der Größe 16^4 und 18^4 extrahiert wurde.

$\beta = 6.0$, $\kappa = 0.216$, $\lambda = 0.01$.

die Operatoren Γ^1 und Γ^3 für verschiedene Gittergrößen gegen die Quadrate der zugehörigen Gitterimpulse \hat{p}^2 aufgetragen. Der Kurvenverlauf folgt somit der Form (4.104). Aufgrund der vollen hyperkubischen Symmetrie des Gitters steht zu erwarten, dass Erwartungswerte einzelner vektorieller und plattentartiger Operatoren verschwinden werden, so dass die bei der Berechnung von verbundenen Zweipunktfunktionen der Form (4.88) auftretenden Produkte von Einpunktfunctionen in diesen Fällen keine Rolle spielen sollten. Dies konnte für alle Korrelatoren der drei verschiedenen Operatoren in Gleichung (4.101) verifiziert werden. Die Anzahl der durchgeföhrten Messungen war also hinreichend groß, um ein Verschwinden des zweiten Terms in (4.88) im Rahmen des statistischen Fehlers beobachten zu können.

Um die Energie der niedrigsten Anregung zu extrahieren, muss sichergestellt werden, dass die zeitliche Entwicklung der erzeugten Zustände von Interesse hinreichend lang gedauert hat, damit höhere Anregungen im selben Kanal das Ergebnis nicht mehr wesentlich beeinflussen können. A priori ist nicht klar, wann der *large time limit* in praktischen Berechnungen erreicht ist, dies hängt auch stark vom verwendeten Operator ab, der den zu untersuchenden Zustand aus dem Vakuum erzeugt hat. Es bietet sich daher an, Energieplateaus der Form

$$m_{\text{eff}}(d, n) = \frac{\mathcal{C}(d+1, n) + \mathcal{C}(d-1, n)}{2\mathcal{C}(d, n)} \quad (4.111)$$

zu studieren. Falls die gemessene Korrelationsfunktion dem Verlauf der Modellannahme (4.109) folgt, so gilt $m_{\text{eff}}(d, n) = \cosh(E(\hat{p}^2(n)))$. Somit wird das Erreichen des Limes großer Zeiten dadurch angezeigt, dass der Graph der Funktion (4.111) vom Parameter d unabhängig wird. Im Fall $n = 0$ erhält man dadurch eine Abschätzung für die effektive Masse der Anregung, wodurch die für (4.111) ebenfalls gebräuchliche Bezeichnung „Massenplateau-Funktion“ herführt. Eine komplementäre Vorgehensweise stellt die Durchführung von Fits der Daten an eine Funktion der Form (4.109) für zunehmende Werte des minimalen zeitlichen Abstands d_{\min} der Schichten dar, wobei der Limes großer Zeiten dadurch identifiziert wird, dass das extrahierte Ergebnis für die Energie $E(\hat{p}^2(n))$ unabhängig von d wird.

Es hat sich gezeigt, dass dieser Limes für die Operatoren Γ^1 und Γ^3 bereits ab $d = 2$ erreicht ist, für den Operator Γ^2 hingegen war das Signal/Rausch-Verhältnis zu klein, als dass sich ein statistisch aussagekräftiges Signal extrahieren ließe. Dieses Resultat deckt sich mit der Beobachtung, dass die Operatoren Γ^1 und Γ^3 , welche sich ja nach (4.99) gerade um den Anteil des Operators Γ^2 von einander unterscheiden, praktisch dasselbe Ergebnis bei der Messung der Korrelationsfunktion (4.105) liefern haben, was in Abbildung 4.8 deutlich zu erkennen ist. An dieser Stelle soll nochmals auf die Eichinvarianz aller drei Operatoren (4.94, 4.96, 4.99) hingewiesen werden. Alle Datenpunkte, die durch nicht-lineare Fits nach der Standardmethode der kleinsten χ^2 von Levenberg-Marquardt [PTVF07] an die Funktion (4.109) mit $M = 2$ Parametern extrahiert wurden, weisen ein $\chi^2/\nu < 1.5$ auf, wobei die Anzahl der Freiheitsgrade durch $\nu = N_4 - 2d_{\min} + 1 - M$ gegeben ist.

Offenbar sind also die Operatoren Γ^1 bzw. Γ^3 für endliche Impulse hervorragend dazu geeignet, eine Anregung zu detektieren, welche die Quantenzahlen des Photons besitzt und im Kontinuumslimes an das physikalische Photon koppelt. Für die größten von uns betrachteten Impulse sind die Abweichungen von der als gestrichelten Linie in Abbildung 4.8 angedeuteten Dispersionsrelation im Kontinuum minimal, und auch der Vergleich der auf Gittern der Größe 16^4 und 18^4 gemessenen Datenpunkten zeigt, dass Effekte, die sich auf die endliche Größe der diskretisierten Raumzeit zurückführen lassen, keine nennenswerten Auswirkungen auf unser Ergebnis haben. Es wurde in Abschnitt 4.7.1 bereits darauf hingewiesen, dass die D_J^0 für $J > 1$ reduzibel sind. Neben dem gewünschten Beitrag einer Anregung mit Spin $J = 1$ wird als nächste mögliche Anregung im Kontinuumslimes auch ein Beitrag zu $J = 3$ erwartet [BB83, MM94]. Der Einfluss dieser Anregung, sowie weiterer höherer Anregungen konnte aber in der Dispersionsrelation nicht beobachtet werden, vermutlich, da diese bereits eine so hohe Energie aufweisen, dass sie aufgrund der exponentiellen Dämpfung schon nach einer zeitlichen Entwicklung, die $d = 2$ Zeitschritten entspricht, nicht mehr nachweisbar sind. Die Extrapolation der Datenpunkte zum Koordinatenursprung lässt den Schluss zu, dass es sich bei dieser Anregung tatsächlich um ein masseloses Teilchen mit den Quantenzahlen des Photons handelt.

4.7.3 Das Boson des adjungierten Skalarfeldes

Neben der bereits nachgewiesenen masselosen Anregung erwarten wir als weiteres Charakteristikum des Higgs-Phänomens (mindestens) eine massive Anregung im Spektrum der Theorie, nämlich die zum adjungierten Skalarfeld gehörige. Im Rahmen der perturbativen Analyse des Modells in Kapitel 4.3.1 konnte bereits gezeigt werden, dass genau ein massives Higgs-Bosons auftreten sollte, sofern der Vakuumerwartungswert des Skalarfeldes in (globaler) unitärer Eichung von der Gestalt ist, dass $\phi^3 = 0$ und folglich $H = SU(2) \times U(1)$ gilt. Am von uns untersuchten Punkt im Phasendiagramm ($\beta = 6.0, \kappa = 0.216, \lambda = 0.01$) ist die Theorie genau in einer solchen Phase realisiert und der zum Feld $\varphi(x)$ gehörige Massenterm ist in diesem Fall gegeben durch

$$m_\varphi^2 = 4\Lambda \text{tr} [\Phi_0^2] . \quad (4.112)$$

Die Masse des adjungierten Higgs-Bosons wird also sowohl durch den Wert des skalaren Kondensats, als auch durch die Selbtkopplungskonstante Λ in der Phase gebrochener Symmetrie nach Renormierung kontrolliert. Da es sich bei dem adjungierten Higgs-Feld um ein reelles Skalarfeld handelt, wird der von diesem Feld erzeugte Zustand unter Paritäts- und Ladungskonjugationstransformationen gerade sein.

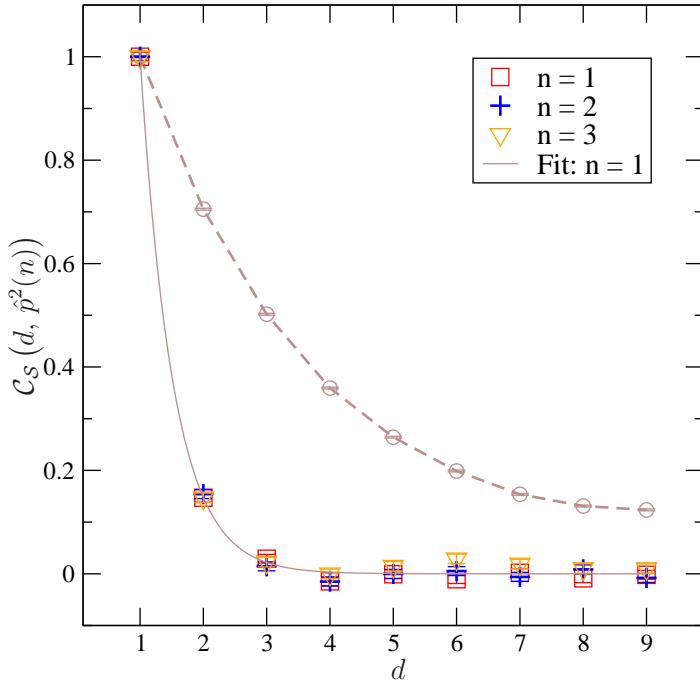


Abbildung 4.9: Das Verhalten der Korrelationsfunktion des adjungierten Skalarfeldes (4.114) für endliche Impulse. Gezeigt wird ebenfalls das Verhalten des Photonkorrelators $\Gamma^3(d, \hat{p}^2(n))$ (4.105) für $n = 1$ (gestrichelte Kurve), sowie ein Fit (durchgezogene Kurve) an $C_S(d, \hat{p}^2(n))$ für $n = 1$. Aufgrund der periodischen Randbedingungen sind die Datenpunkte symmetrisch bezüglich der halben zeitlichen Ausdehnung des Gitters, daher wird nur das Intervall $1 \leq d \leq N_4/2$ gezeigt.

$$\beta = 6.0, \kappa = 0.216, \lambda = 0.01.$$

Ein eichinvarianter Operator, der an den durch $J^{PC} = 0^{++}$ charakterisierten physikalischen Zustand koppelt, ist gegeben durch

$$\mathcal{S}(x) := \text{tr} [\Phi^2(x)] . \quad (4.113)$$

Wir untersuchen daher im Folgenden die verbundene Korrelationsfunktion

$$\mathcal{C}_S(d, \mathbf{p}) = \langle \mathcal{S}(-\mathbf{p}, d) \mathcal{S}(\mathbf{p}, 0) \rangle_c := \langle \mathcal{S}(-\mathbf{p}, d) \mathcal{S}(\mathbf{p}, 0) \rangle - \langle \mathcal{S}(-\mathbf{p}, d) \rangle \langle \mathcal{S}(\mathbf{p}, 0) \rangle , \quad (4.114)$$

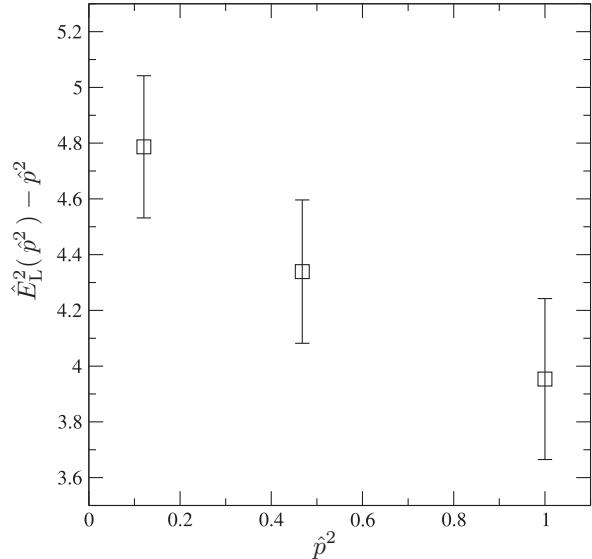
um die niedrigste Anregung im 0^{++} -Kanal, und somit die Masse des skalaren Bosons zu finden. Die Ergebnisse unserer Untersuchungen für endliche Impulse sind in Abbildung 4.9 dargestellt. Wie in Gleichung (4.108) bei der Untersuchung der photonischen Korrelatoren $\Gamma^k(d, n)$ wurde die skalare Korrelationsfunktion gemäß

$$\mathcal{C}_S(d = 1, n) = 1 , \quad n = 1, 2, 3 \quad (4.115)$$

normiert, wobei sich die Messdaten im Falle eines verschwindenden räumlichen Impulses ($n = 0$) wiederum als statistisch nicht relevant erwiesen haben. Letzteres ist darauf zurückzuführen, dass sich die beiden Beiträge zur verbundenen Korrelationsfunktion bei der Berechnung von $\mathcal{C}_S(d, \mathbf{0})$ im Rahmen des statistischen Fehlers kompensieren. Unser Ensemble von 1450 Konfigurationen scheint also nicht groß genug gewesen zu sein, um diese auf Auslöschungseffekten basierende statistische Unsicherheit so weit einschränken zu können, als dass noch verlässliche Aussagen aus den Messdaten extrahiert werden könnten. Betrachtet man jedoch den Verlauf der Korrelationsfunktionen für $n > 0$, so ist zu erkennen, dass die Kurven im Rahmen des statistischen Fehlers übereinstimmen und bereits für $d > 3$ auf einen mit Null verträglichen Wert abgefallen sind. Dies ist mit dem Verhalten einer masselosen Anregung zu vergleichen. Zu diesem Zweck wurde die bereits in Abbildung 4.7 gezeigte

Abbildung 4.10: Das Quadrat der Masse des skalaren Bosons m_φ^2 , extrahiert aus Fits an $\mathcal{C}_S(d, \hat{p}^2(n))$ im Intervall $d \in [1, 4]$ für endliche Vielfache $n = 1, 2, 3$ des minimalen Matsubara-Impulses (4.102).

Gitter: 18^4 , $\beta = 6.0$, $\kappa = 0.216$, $\lambda = 0.01$.



Korrelationsfunktion $\Gamma^3(d, \hat{p}(n)^2)$ (4.105) für $n = 1$ (gestrichelte Kurve) in Abbildung 4.9 mit aufgenommen. Die mit der masselosen Anregung verknüpfte Langreichweiteitigkeit der Wechselwirkung manifestiert sich in einem von Null verschiedenen asymptotischen Wert, der von der Korrelationsfunktion für den auf einem Gitter mit periodischen Randbedingungen maximal zugänglichen Abstand $d = N_4/2$ angenommen wird. Außerdem ist der Einfluss der endlichen Impulse bei der Präparierung des Testzustands, der ein Photon beschreiben soll, durch das Auffächern der zu $n = 1, 2, 3$ gehörenden Kurven in Abbildung 4.7 evident. Im Gegensatz dazu muss für die Masse der zum adjungierten Skalarfeld gehörenden Anregung geschlossen werden, dass diese zumindest so groß sein muss, dass die auf das Quadrat derselben bezogene Differenz aller bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen verwendeten Impuls-Quadraturen kleiner ist als deren relativer Fehler, und die Korrelation nach $d = 3$ Entwicklungsschritten für alle endlichen Impulse vollständig zerfallen ist. Dies macht das Problem bei der Bestimmung eines numerischen Wertes für die Masse des skalaren Bosons deutlich: Der Limes großer Zeiten wird voraussichtlich erst erreicht, wenn bereits keine Korrelation der Felder mehr nachweisbar ist.

Der Versuch einer Abschätzung ist in Abbildung 4.10 zu sehen. Zu diesem Zweck wurden nicht-lineare *least- χ^2 -fits* der Messdaten für endliche Impulse an einen Kurvenverlauf der Form (4.109) im Intervall $d \in [1, d_{\max}]$ durchgeführt. Die Ergebnisse für $d_{\max} = 4$ waren:

n	$E(n)$	$\sigma_{E(n)}$	χ^2/DoF
1	1.91094	0.03858	1.77068
2	1.89562	0.03953	1.86669
3	1.91790	0.04336	0.04873

Eine graphische Darstellung des Resultats für $n = 1$ ist in Abbildung 4.9 als durchgezogene Linie zu sehen. Aus den Werten für $E(n)$ sowie den zugehörigen Fehlern wurde unter Verwendung der Gleichungen (4.104) und (4.110) die Dispersionsrelation der Anregung berechnet, um eine Abschätzung des Quadrats der Masse sowie des zugehörigen Fehlers in Einheiten der (inversen) Gitterkonstanten zu erhalten. Die in Abbildung 4.10 gezeigten Daten deuten

darauf hin, dass eine Extrapolation zum physikalisch relevanten Punkt einen endlichen Wert liefert, den wir zu $m_\varphi^2 = 5 \pm 0.25$ abschätzen. Dabei sollte angemerkt werden, dass sich die Ergebnisse zur Abschätzung dieses Wertes als stabil gegenüber einer Veränderung der Obergrenze des zum Fit herangezogenen Intervalls auf $d_{\max} = 3$ bzw. $d_{\max} = 5$ erwiesen haben. Die Masse des adjungierten Higgs-Bosons scheint also auf einer Skala angesiedelt zu sein, welche für das Verhalten der Theorie im Bereich niedriger Energien eine untergeordnete Rolle spielen sollte.

4.7.4 Das Spektrum der Eichbosonen

In einer Feldtheorie werden die verbundenen Zweipunktfunktionen aller Felder, die für die Konstruktion dieser Theorie eine Rolle spielen, im Allgemeinen als Propagatoren bezeichnet. Handelt es sich um eine quantisierte Eichtheorie, so muss der Berechnung der Propagatoren stets die Wahl einer bestimmten Eichung zugrunde liegen, da ansonsten – wie in Kapitel 4.2 erläutert – sämtliche Green'schen Funktionen der Theorie aufgrund ihrer Eichvarianz verschwinden würden. Insbesondere lässt sich den Eichfeldern selbst immer nur in einer konkreten Eichung ein Sinn verleihen. Im Gegensatz zu den bisherigen Untersuchungen des Spektrums der Theorie wird daher die Fixierung einer Eichung nötig. Dabei ziehen wir uns auf die in Kapitel 4.4 beschriebene Landau-Eichung mit anschließender globaler unitären Eichung zurück.

Die Definition von Eichfeldern $A_\mu(x)$ auf dem Gitter ist nicht eindeutig, da es sich um abgeleitete Größen handelt, die aus den Link-Variablen $U_\mu(x)$, den fundamentalen Freiheitsgraden der Gitterformulierung, extrahiert werden müssen [GPP⁺98]. Wir verwenden im Folgenden die mit der Landau-Eichung (4.54) kompatible Definition der dimensionslosen Eichfelder

$$A_\mu^a(x) := \text{Im} \left\{ \text{tr} \left[T^a (U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)) \right] \right\} \quad (4.116)$$

auf dem Gitter, in deren Konstruktion nun Link-Variablen aus einer gemäß Kapitel 4.4 eichfixierten Konfiguration $\{U\}$ eingehen. Die Konventionen zur Fourier-Transformation dieser Eichfelder, welche auf natürliche Weise mit den Mittelpunkten $(x + \hat{e}_\mu/2)$ der entsprechenden Links assoziiert werden, finden sich im Anhang A.4. Die Definition (4.116) bietet dabei den Vorteil, dass sich die Korrekturterme bei der Betrachtung der zugehörigen dimensionsbehafteten Eichfelder als von $\mathcal{O}(a^2)$ herausstellen, lineare Korrekturen heben sich auf. Außerdem besteht eine direkte Verbindung des Eichfixierungskriteriums auf dem Gitter zur Transversalitätsbedingung, der die zugehörigen Eichfelder in Landau-Eichung der Kontinuumsformulierung genügen. Daher ist die prinzipielle Vergleichbarkeit von Resultaten gewährleistet, die aus diesen beiden verschiedenen Zugängen gewonnen werden können. Die Definition des Abbruchkriteriums bei der iterativen Fixierung der Landau-Eichung und weitere Erläuterungen des verwendeten Algorithmus findet sich im Anhang C.

Fassen wir nun die skalaren Felder $\phi^a(x)$ sowie die Eichfelder $A_\mu^a(x)$ der Theorie zu einem gemeinsamen Feld $\chi^A(x)$ zusammen und ordnen in gleicher Weise die Quellen für beide Felder in einer vereinheitlichten Quellenfunktion $\mathcal{J}^A(x)$ an

$$\chi_A(x) := \begin{pmatrix} \phi^a(x) \\ A_\mu^b(x) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{J}^A(x) := \begin{pmatrix} J^a(x) \\ j_\mu^b(x) \end{pmatrix}, \quad (4.117)$$

so erhalten wir unter Verwendung der in Kapitel 4.2 eingeführten Konvention gemäß Gleichung (4.20) die Propagatoren

$$D_{AB}(x, y) = -i \frac{\delta^2 W[\mathcal{J}]}{\delta \mathcal{J}^A(x) \delta \mathcal{J}^B(y)} \Big|_{\mathcal{J}=0} = \begin{pmatrix} D^{ij}(x, y) & \\ & D_{\mu\nu}^{ab}(x, y) \end{pmatrix}. \quad (4.118)$$

Die sogenannten „gemischten“ Propagatoren, also diejenigen Zweipunktfunktionen, welche Skalarfelder mit Vektorfeldern verknüpfen, verschwinden aufgrund der Lorentz-Invarianz der Theorie. Beschränken wir uns im Folgenden also auf den Propagator der Eichbosonen

$$D_{\mu\nu}^{ab}(x, y) := \langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \rangle_c, \quad (4.119)$$

dessen Fourier-Transformierte $D_{\mu\nu}^{ab}(p)$ von besonderem Interesse ist. In Landau-Eichung handelt es sich dabei um ein transversales Objekt, welches sich wie folgt parametrisieren lässt:

$$D_{\mu\nu}^{ab}(p) = \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \right) D^{ab}(p^2), \quad p_\mu D_{\mu\nu}^{ab}(p^2) = 0. \quad (4.120)$$

Die Kontraktion der Raumzeit-Indizes liefert also lediglich einen Beitrag zur Normierung, wir betrachten daher im Folgenden die Fourier-Transformierte der Kontraktion von (4.119)

$$D^{ab}(p^2) := \langle A_\mu^a(-p) A_\mu^b(p) \rangle_c \quad \text{bzw.} \quad D^{ab}(x, y) := D_{\mu\mu}^{ab}(x, y). \quad (4.121)$$

Dabei handelt es sich im Falle endlicher Impulse um hermitesche Farb-Matrizen, welche im Falle einer reinen $SU(N)$ -Yang-Mills-Theorie (sowie in der hier betrachteten Theorie mit Kopplung an ein adjungiertes Skalarfeld in der Wigner-Weyl-Phase) in Landau-Eichung Diagonalgestalt besitzen. Die Invarianz der effektiven Wirkung $\Gamma[\chi^h] = \Gamma[\chi]$ führt nämlich wie bereits in Kapitel 4.2 diskutiert auf die Invarianz des erzeugenden Funktionals der verbundenen Zweipunktfunktionen unter globalen Transformationen und infolge dessen auf die Gleichung

$$D^{ab}(x, y) = \Omega^{ac}(h) D^{cd}(x, y) [\Omega^{-1}]^{db}(h) \quad h \in H \subset G. \quad (4.122)$$

Ist die Symmetrie nun nicht spontan gebrochen, so gilt $H = G$ und $\Omega(h)$ ist ein Gruppenelement in der adjungierten Darstellung der Gruppe G . Dabei handelt es sich um eine endlich-dimensionale, irreduzible Darstellung der Gruppe, so dass als Konsequenz des Lemmas von Schur (vgl. [Hei90] III, §1.5) die Diagonalität des Propagators im Farbraum folgt, $D(x, y) \propto \mathbb{1}$. Dies ist Ausdruck der Tatsache, dass keiner der Basisvektoren der Lie-Algebra in dieser Realisierungsphase der Theorie ausgezeichnet ist. Die Proportionalitätskonstante berechnet sich durch Integration von Gleichung (4.122) bzgl. des normierten, invarianten Haarschen Maßes über die Mannigfaltigkeit von G unter Ausnutzung der Orthogonalitätsrelation für Matrixdarstellungen ([Hei90] III, §1.9):

$$D^{ab}(x, y) = \int_G d\mu(g) \Omega^{ac}(g) D^{cd}(x, y) \Omega^{bd}(g) = \frac{1}{n} \text{tr}[D(x, y)] \delta^{ab}. \quad (4.123)$$

Dabei bezeichnet n die Dimension des Darstellungsraumes, im Falle einer $SU(N)$ also $n = N^2 - 1$. Die Fourier-Transformierte dieses Proportionalitätsfaktors ist gerade der nicht-triviale skalare Anteil des Gluon-Propagators $D(p^2)$, aus dem (formal) eine dynamische Masse der Gluonen extrahiert werden kann, welche natürlich für alle n Anregungen identisch ist. Die Ergebnisse einer entsprechenden Untersuchung im Fall der $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie in Landau-Eichung [LRG02] weisen auf einen Wert von $m_g \simeq 650 \pm 20$ MeV hin.

In der von uns untersuchten Realisierungsphase der Theorie ist jedoch die residuelle Eichsymmetrie erster Art eingeschränkt, da das adjugierte Skalarfeld, wie in Kapitel 4.5 gezeigt, einen nicht-trivialen Vakuumerwartungswert der Form $\Phi_0 = \phi^8 T^8$ ($\phi^3 = 0$) entwickelt. Daher ist eine Veränderung der Gestalt des Propagators (4.121) der Bosonen zu erwarten. Zur Klärung der Struktur desselben betrachten wir Gleichung (4.122) für

$$\Omega \in \text{Ad}(H) := \{ \Omega \in SO(8) \mid \Omega \hat{T}^8 \Omega^{-1} = \hat{T}^8 \} \quad (4.124)$$

in der von uns gewählten Einbettung als Bestimmungsgleichung der Komponenten von $D(x, y)$ anstelle einer direkten Integration von (4.122) bezüglich eines auf $H = SU(2) \times U(1)$ eingeschränkten Maßes. Die Generatoren in der adjunktiven Darstellung der Gruppe werden dabei konventionsgemäß (Anhang D.2) mit einem Dach bezeichnet, $\hat{T}^b = T_A^b$. Es zeigt sich, dass durch $\text{Ad}(H)$ eine blockdiagonale, vollständig reduzible Darstellung von H der Form

$$\Omega[\theta^{\bar{a}}](x) := \exp \left\{ i \sum_{\bar{a}} \theta^{\bar{a}}(x) \hat{T}^{\bar{a}} \right\}, \quad \bar{a} \in \bar{A} := \{1, 2, 3, 8\} \quad (4.125)$$

gegeben ist, welche sich gemäß

$$\Omega[\theta^{\bar{a}}](x) = \bigoplus_{i=1}^3 \Omega^{(i)}[\theta^{\bar{a}}](x) \quad (4.126)$$

darstellen lässt und somit in eine direkte Summe von irreduziblen Darstellungen zerfällt. Dabei bezeichnet $\Omega^{(1)}[\theta^{\bar{a}}](x)$ eine dreidimensionale Darstellung, $\Omega^{(2)}[\theta^{\bar{a}}](x)$ ist eine vierdimensionale Darstellung und $\Omega^{(3)}[\theta^{\bar{a}}](x)$ bezeichnet die triviale Darstellung der Gruppe H . Die Anwendung des Lemmas von Schur im Falle der direkten Zerlegung einer reduziblen Darstellung in irreduzible Untermoduln (vgl. [Hei90] III, §1.7) bestimmt die Gestalt des Propagators zu:

$$D(x, y) = \lambda_1(x, y) \mathbb{1}_{3 \times 3} \oplus \lambda_2(x, y) \mathbb{1}_{4 \times 4} \oplus \lambda_3(x, y) 1, \quad \lambda_i(x, y) \in \mathbb{R}. \quad (4.127)$$

Wir erwarten daher, dass höchstens drei verschiedene Werte für die Massen der möglichen verschiedenen Anregungen im Spektrum der $SU(3)$ -Eichtheorie mit skalarem Feld in adjunktiver Darstellung in der hier betrachteten Realisierungsphase der Theorie auftreten können. Die Form des Propagators (4.127) gibt ferner Anlass zur Annahme, dass aufgrund der Multiplettstruktur eine dreifache Entartung derjenigen Anregungen vorliegen wird, welche mit den Generatoren T^1, T^2 und T^3 der in G eingebetteten $SU(2)$ -Untergruppe verknüpft sind. Obwohl der Coset G/H keine Gruppe darstellt, da H offensichtlich keine invariante bzw. normale Untergruppe von G ist, erwarten wir dennoch auch im von den Generatoren T^c ($c \in \bar{A}^\perp := \{4, 5, 6, 7\}$) aufgespannten Unterraum eine vierfache Entartung.

Prinzipiell sollte also die Berechnung des im Impulsraum definierten Propagators $D^{ab}(p^2)$ (4.121) mittels der in (4.116) definierten Eichfelder ein farbdiagonales Objekt liefern, dessen acht (verschiedene) Komponentenfunktionen $D^{aa}(p^2)$ mit den bei der Untersuchung des Gluon-Propagators einer reinen Yang-Mills-Theorie in Landau-Eichung erfolgreich eingesetzten Methoden [LRG02] analysiert werden könnten. Anstatt jedoch Messungen von Formfaktoren $F^a(p^2)$ für jede der Anregungen durchzuführen und insbesondere aus deren Infrarotverhalten eine zugehörige spektrale Dichte $\rho^a(m^2)$ zu extrahieren, soll hier versucht werden, das Problem der Extraktion von Massen aus Korrelationsfunktionen mit den bereits in Kapitel

4.7.1 vorgestellten Methoden zu lösen. Dabei werden nun die Eichfelder als Erzeuger eines eichabhängigen Zustands zu festem Impuls aufgefasst, dessen zeitliche Entwicklung untersucht wird. Dadurch wird es möglich, Rückschlüsse auf die Masse der zugehörigen Anregung zu ziehen. Die Verbindung der beiden Zugänge wird nach partieller Fourier-Transformation des Propagators (4.121) offenbar:

$$\frac{1}{N_4} \sum_{p_4} D^{ab}(p^2) \exp(-ip_4 t) = \frac{\delta^{ab}}{N_4} \sum_{p_4} \frac{F^a(p^2)}{p^2} \exp(-ip_4 t) = D^{ab}(t, \mathbf{p}). \quad (4.128)$$

Dabei ist die rechte Seite die Konkretisierung der allgemeinen, verbundenen Korrelationsfunktion von Zeitschicht-Operatoren der Form (4.88), ausgewertet für Eichfelder als Erzeuger von Zuständen bei räumlichem Impuls \mathbf{p} und periodisch gemittelt über die zeitliche Ausdehnung des Gitters:

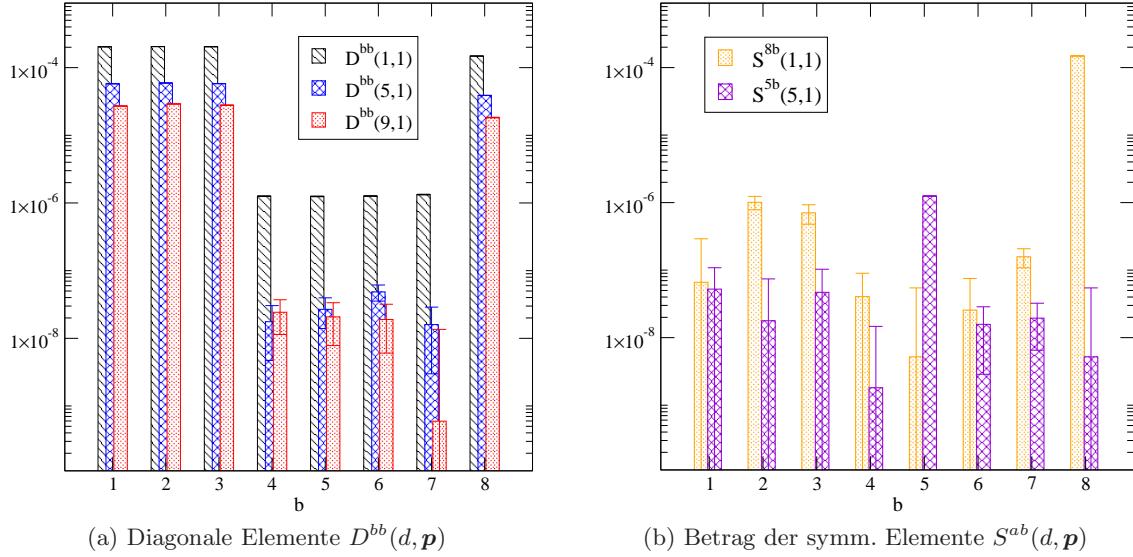
$$D^{ab}(t, \mathbf{p}) := \sum_{x_4} \sum_{\mu} \langle A_{\mu}^a(-\mathbf{p}, x_4) A_{\mu}^b(\mathbf{p}, x_4 + t) \rangle_c \quad (4.129)$$

Um die Konsistenz der Notation zu gewährleisten, verwenden wir wie schon in den Kapiteln 4.7.2 und 4.7.3 im Folgenden weiterhin das Symbol d (*distance*) statt t für den Abstand der Zeitschichten, in denen die Feldoperatoren endlicher Impulse definiert sind.

Die Grundlage unserer Messungen bildete wiederum das Ensemble der 1450 thermalisierten Konfigurationen zu jeweils 18^4 Gitterpunkten. Bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen (4.129) wurde zur Erhöhung der Statistik wie schon im Falle der photonischen Korrelationsfunktionen die hyperkubische Symmetrie des Gitters ausgenutzt. Die numerischen Ergebnisse beinhalten also eine weitere Mittelung über alle vier Hauptachsen des Gitters, längs derer der Zerfall der Korrelationen gemessen wurde.

In einem ersten Schritt wurden die aus der gruppentheoretischen Analyse gewonnenen Erwartungen zur Gestalt des Propagators überprüft. Die Ergebnisse dieser Untersuchung sind in Abbildung 4.11 in logarithmischer Darstellung zusammengefasst. Bei der Betrachtung der Diagonalelemente des Propagators²⁰ finden wir tatsächlich die in Gleichung (4.127) antizipierte Form wieder. In Abbildung 4.11a ist das Verhalten dieser Matrixelemente für $n = 1$ sowie die exemplarisch ausgewählten Zeitschichtabstände $d = 1, 5, 9$ zu sehen. Wir unterscheiden für $d = 1$ eindeutig drei verschiedene Werte für $D^{bb}(1, 1)$ an den erwarteten Positionen, inklusive des richtigen Entartungsgrads. Für die Propagatoren der Eichbosonen, die mit den Generatoren der Untergruppe H vernüpft sind, besteht dieses Verhalten für alle betrachteten Zeitschichtabstände d , im Falle der mit G/H assoziierten Eichbosonen gilt dies nur noch näherungsweise. Die Korrelationen sind in diesem Fall bereits nach $d = 5$ Entwicklungsschritten um etwa zwei Größenordnungen abgefallen, und die zugehörigen Werte stimmen nurmehr im Rahmen der statistischen Fehler überein, welche deutlich größer sind, als es für die Korrelatoren $D^{bb}(d, \mathbf{p})$ ($b \in \bar{A}$) der Fall ist. Außerdem ist festzustellen, dass sich die Maximalwerte der mit H und G/H assoziierten Korrelatoren bei gleicher Normierung um zwei Größenordnungen unterscheiden.

²⁰Die Einstein'sche Summenkonvention gilt im Folgenden nicht mehr.

Abbildung 4.11: Untersuchung der Matrixelemente des Propagators $D^{ab}(d, \mathbf{p})$ der Eichfelder.

Als nächstes wurden die Matrixelemente des Propagators außerhalb der Diagonalen untersucht. Zu diesem Zweck wurden die Beträge des symmetrisierten Korrelators $D^{(ab)}(d, \mathbf{p})$ betrachtet:

$$S^{ab}(d, \mathbf{p}) = |D^{(ab)}(d, \mathbf{p})|, \quad D^{(ab)}(d, \mathbf{p}) := \frac{D^{ab}(d, \mathbf{p}) + D^{ba}(d, \mathbf{p})}{2}. \quad (4.130)$$

Da es sich bei $D^{ab}(p^2)$ um eine hermitesche Matrix handelt, sollte $D^{(ab)}(d, \mathbf{p}) = \text{Re}(D^{ab}(d, \mathbf{p}))$ gelten, bei der Betrachtung von $S^{ab}(d, \mathbf{p})$ werden also auch diejenigen Beiträge berücksichtigt, die aufgrund der endlichen Anzahl an Messungen zu Abweichungen von der Hermitizität des Propagators führen. Das Ergebnis unserer Untersuchungen ist in Abbildung 4.11b zu sehen. Dabei wurden sowohl die fünfte als auch die achte Zeile des Korrelators zum niedrigsten nicht-trivialen Impuls ($n = 1$) untersucht, wobei sich die Wahl von d an der bei der Untersuchung der Diagonalelemente getroffenen orientierte, was einen Vergleich mit den Ergebnissen in der nebenstehenden Abbildung ermöglicht. Es zeigt sich, dass die nicht-diagonalen Elemente gegenüber den Diagonalelementen stark unterdrückt sind, insbesondere ist der relative Fehler häufig bereits so groß, dass diese Elemente als statistisch nicht mehr relevant angesehen werden können. Ausnahmen bilden die Elemente $D^{56}(5, 1)$ und $D^{57}(5, 1)$, wobei sich diese um mindestens zwei Größenordnungen vom Diagonalelement $D^{55}(5, 1)$ unterscheiden, analoges gilt für die Elemente $D^{82}(1, 1)$, $D^{83}(1, 1)$ und $D^{87}(1, 1)$ im Vergleich zu $D^{88}(1, 1)$. Ein Vergleich mit $D^{88}(d, 1)$ in Abbildung 4.11a zeigt darüber hinaus, dass diese Elemente immer noch mindestens eine Größenordnung kleiner sind als der Wert, den der diagonale Korrelator für die maximale zeitliche Entwicklung bei $d = 9$ angenommen hat. Vermutlich machen sich in diesen Elementen die Abweichungen vom zu erwartenden Idealfall eines im Rahmen der Fehlergenauigkeit hermiteschen Propagators besonders bemerkbar. Wir nehmen daher im Folgenden an, dass die Diagonaltät des Korrelators numerisch bereits in sofern hinreichend akzeptabel ist, als dass zu erwarten steht, dass das Studium der diagonalen Korrelationsfunktionen allein es ermöglichen sollte, die wesentlichen Informationen über das Spektrum der Theorie zu gewinnen und dieses sich durch Hinzufügen weiterer Konfigurationen zum betrachteten Ensemble nicht wesentlich verändern sollte. Diese Annahme wird am Ende der Untersuchung nochmals kritisch zu reflektieren sein.

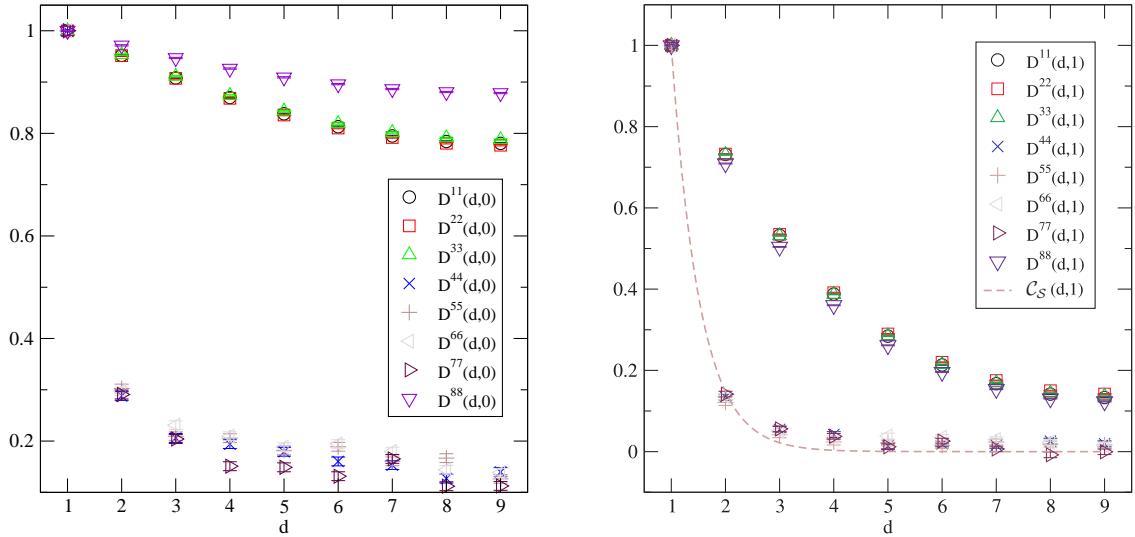


Abbildung 4.12: Zerfall der diagonalen Korrelationen $D^{aa}(d, n)$ für räumliche Impulse $n = 0$ (links), sowie $n = 1$ (rechts). Gitter: 18^4 , $\kappa = 0.216$, $\lambda = 0.01$, periodische Randbedingungen.

Betrachten wir also die zu den acht Eichfeldern $A_\mu^a(x)$ gehörenden diagonalen Korrelationsfunktionen $D^{aa}(d, n)$, die wie üblich gemäß

$$D^{aa}(d = 1, n) = 1 \quad \text{für} \quad n = 0, 1, 2, 3 \quad \text{und} \quad a = 1 \dots 8 \quad (4.131)$$

normiert wurden. Die Messergebnisse sind bezüglich $d = N_4/2$ symmetrisch und werden in Abbildung 4.12 für die Fälle $n = 0$ und $n = 1$ im Intervall $d \in [1, 9]$ dargestellt. Zunächst fällt bei der Betrachtung der linken Abbildung auf, dass die Korrelationsfunktionen für verschwindende räumliche Impulse ($n = 0$) scheinbar in drei verschiedene Klassen zerfallen. Die leichteste Anregung gehört zum Eichfeld $A_\mu^8(x)$, etwas schwerer erscheint das entartete Triplet zu sein, welches aus den mit $A_\mu^a(x)$ ($a = 1, 2, 3$) assoziierten Anregungen besteht, sowie zuletzt die Kollektion der aus den vier Eichfeldern $A_\mu^b(x)$ ($b \in \bar{A}^\perp$) gebildeten Korrelationsfunktionen, welche sehr schnell zerfallen und folglich mit sehr massiven Anregungen verbunden sein müssen. An dieser Stelle soll daran erinnert werden, dass in Kapitel 4.3.1 bei der perturbativen Diskussion des Higgs-Mechanismus in der vorliegenden Theorie neben einer Vorhersage für die Masse des Higgs-Bosons (4.112) auch eine Vorhersage für die Massen der mit den Generatoren der gebrochenen Symmetrien verknüpften Eichfelder gemacht wurde. Das Ergebnis war $m^2 = 3g^2\text{tr}[\Phi_0^2]/2 \propto m_\varphi^2$. Eine solche Relation scheint sich auch in unserer nicht-perturbativen Untersuchung zu bestätigen. Betrachten wir nämlich das Verhalten der Korrelationsfunktionen für $n = 1$ in der rechten Abbildung von Figur 4.12, so ist eine weitgehende Übereinstimmung des Verlaufs von $D^{bb}(d, 1)$ ($b \in \bar{A}^\perp$) mit der gestrichelten grauen Kurve zu konstatieren, die das Ergebnis des bereits in Kapitel 4.7.3 diskutierten Fits an die Messdaten der Korrelationsfunktion $C_S(d, 1)$ des adjungierten Skalarfeldes darstellt. In Kapitel 4.7.3 wurde auch bereits auf die Schwierigkeiten hingewiesen, die sich bei dem Versuch einer Abschätzung der physikalischen Teilchenmasse im Falle sehr schnell zerfallender Korrelationsfunktionen der zugehörigen Felder ergeben. Wir sehen daher an dieser Stelle davon ab, eine derartige Untersuchung auch für die Propagatoren $D^{bb}(d, n)$ ($b \in \bar{A}^\perp$) durchzuführen und belassen es angesichts der in Abbildung 4.12 gezeigten Resultate bei der Vermutung, dass durchaus die Möglichkeit besteht, dass die Massen der zugehörigen vier Anregungen mit der Masse m_φ des adjungierten Skalarfeldes übereinstimmen könnten.

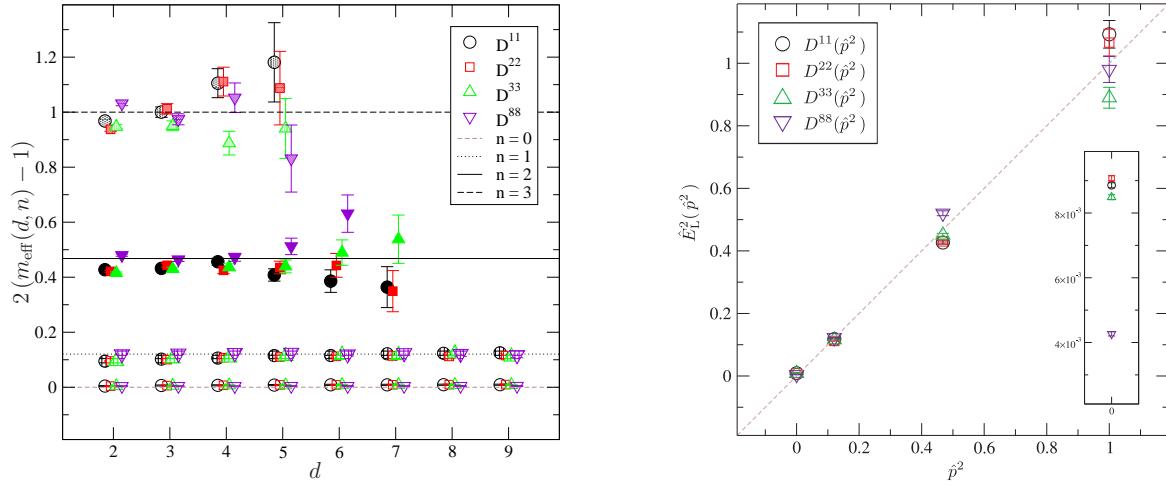
(a) Die Energieplateaus der mit der Untergruppe H assoziierten Anregungen $A_\mu^a(x)$, $a = 1, 2, 3, 8$.(b) Die Dispersionsrelation der mit der Untergruppe H assoziierten Eichbosonen.

Abbildung 4.13: (a) Der kinetische Beitrag zur Dispersionsrelation ist gegeben durch $\hat{p}^2(n)$ (horizontale Linien). (b) Die eingebettete Abbildung zeigt die Ergebnisse des Fits an die Daten für $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ im Detail. Gitter: 18^4 , $\kappa = 0.216$, $\lambda = 0.01$.

Des Weiteren fällt beim Vergleich der beiden Teilabbildungen 4.12 auf, dass die im Fall $n = 0$ offensichtliche Aufspaltung der zu $A_\mu^a(x)$ ($a = 1, 2, 3$) und $A_\mu^8(x)$ gehörigen Korrelationsfunktionen im Fall $n = 1$ deutlich reduziert ist. Es liegt also möglicherweise eine weitere Entartung der Massen des Triplets sowie des Singulets vor, die sich aber vielleicht erst bei der Untersuchung von Korrelationsfunktionen zu größeren Impulsen in voller Deutlichkeit zeigen wird. Um diese Frage zu klären, wurden in einem nächsten Schritt die durch Gleichung (4.111) definierten effektiven Massen $m_{\text{eff}}(d, n)$ dieser vier Anregungen untersucht.

Das Ergebnis ist in Abbildung 4.13a zu sehen, wobei die Datenpunkte für die vier verschiedenen Anregungen der Übersichtlichkeit halber leicht gegeneinander verschoben wurden. Statt der effektiven Masse wurde außerdem direkt die Größe $2(m_{\text{eff}}(d, n) - 1)$ gegen den Abstand der Zeitschichten d aufgetragen, welche nach Gleichung (4.110) dem Quadrat der Energie der Anregung $\hat{E}_L^2(\hat{p}^2)$ entspricht. Dabei wurden nur solche Messwerte für m_{eff} verwendet, deren relativer Fehler kleiner als 0.1 war. Es ist zu beobachten, dass die erwartete Ausbildung der Plateaus sehr schnell einsetzt, insbesondere für die Fälle $n = 0, 1$ ist das Ergebnis praktisch völlig unabhängig vom Parameter d . Auch für die endlichen Impulse $n = 2, 3$ scheint der *large time limit* praktisch unmittelbar erreicht zu sein, das Signal wird jedoch für zunehmende Werte von n und d immer undeutlicher. Dieses Problem röhrt aus dem Verhalten der Korrelatoren selbst her. Die statistischen Fehler derselben sind bei festem n für jeden Wert von d etwa gleich groß, da es sich jedoch um monoton fallende Funktionen handelt²¹ nimmt der relative Fehler daher monoton zu. Die gezeigten Funktionswerte der sich ausbildenden Plateaus enthalten immer noch die Beiträge der kinetischen Energie, deren Werte in der Abbildung durch die horizontalen Linien zu $n = 0, 1, 2, 3$ dargestellt werden. Die Differenz der Datenpunkte zu der jeweiligen Linie ergibt also eine Abschätzung für das Quadrat der Massen. Unsere Messungen legen folglich nahe, dass es sich in allen vier Fällen um *masselose* Anregungen handelt. Diese

²¹Im Falle periodischer Randbedingungen gilt dies bis zum Symmetrisierungspunkt $d = N_4/2$.

Aussage kann mittels eines Fits an die Messdaten der zugehörigen Korrelationsfunktionen quantifiziert werden. Bei der Auswahl der für den Fit zu verwendenden Datenpunkte bzw. bei der Bestimmung von d_{\min} lassen wir uns von den Resultaten unserer Untersuchungen der Energie-Plateaus leiten. Die Annahme von $d_{\min} = 3$ als Limes großer Zeiten erscheint gerechtfertigt, Messwerte der Korrelationsfunktionen bei größeren Zeiten d wurden verwendet, sofern der relative Fehler bei der Bestimmung zugehöriger effektiver Masse – wie in Abbildung 4.13a gezeigt – kleiner war als 0.1. Das Resultat ist die in Abbildung 4.13b gezeigte Dispersionsrelation, wobei alle Datenpunkte der zusätzlichen Einschränkung $\chi^2/\text{DoF} < 3.5$ unterliegen.

Eine Bemerkung zu den Ergebnissen im Fall $n = 0$ erscheint zum Schluss angebracht. Das Verhalten der jeweiligen Korrelationsfunktionen in Abbildung 4.12 hatte die Vermutung nahe gelegt, dass zwar eine Entartung der Masse innerhalb des $SU(2)$ -Multipletts vorliegt, diese sich aber von der Masse des Singulettzustands unterscheiden sollte. Tatsächlich unterscheiden sich die extrahierten Werte in diesem Fall, wie aus der in Abbildung 4.13b eingebetteten Detailansicht hervorgeht. Die Aufspaltung der Tripletts- und Singulettmassen ist klar zu erkennen, jedoch ist ihr Abstand absolut gesehen sehr gering. Möglicherweise spiegelt sich an dieser Stelle die erwähnte leichte Verletzung der Hermitizität des Propagators aufgrund der endlichen Anzahl an Konfigurationen des betrachteten Ensembles besonders wider. Es wäre daher interessant zu sehen, ob sich diese Lücke nach Durchführung weiterer Messungen allmählich schließt. Eine Extrapolation der für endliche Impulse erzielten Ergebnisse zum physikalischen Punkt lässt jedenfalls durchaus den Schluss zu, dass alle mit den Generatoren der Untergruppe H assoziierten Eichbosonen tatsächlich masselos sein sollten. In diesem Fall läge die höchst interessante Situation vor, dass eine effektive Quantenfeldtheorie ohne *mass gap* eine ungebrochene $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie aufweist, wobei der zugehörige schwache Isospin sowie die Hyperladung aber dennoch freigesetzt sind.

4.8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen der vorliegenden Untersuchung konnte gezeigt werden, dass eine in $D = 4$ Dimensionen definierte $SU(3)$ -Eichtheorie, welche an ein skalares Feld in adjungierter Darstellung gekoppelt und durch die Lagrangedichte (4.26) beschrieben wird, nach Fixierung der Eichsymmetrie durch Wahl der Landau-Eichbedingung, sowie einer globalen unitären Eichbedingung einen Phasenübergang zweiter Ordnung ermöglicht, der mit der spontanen Brechung der residuellen globalen $SU(3)$ -Symmetrie der eichfixierten Theorie einhergeht. Dies führt auf eine Realisierungsphase der Theorie, die durch eine residuelle $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie gekennzeichnet ist. Das Auftreten des Phasenübergangs, der von der Brechung einer zusätzlichen globalen Reflexionssymmetrie der Theorie am selben kritischen Punkt begleitet wird, konnte durch das Studium eichinvariante, thermodynamische Observablen beobachtet und im Phasendiagramm lokalisiert werden. Zur eindeutigen Bestimmung insbesondere der Einbettung der residuellen Symmetriegruppe H in die Symmetriegruppe G der Theorie in der Wigner-Weyl-Phase hat es sich jedoch als vorteilhaft erwiesen, eine Eichung zu fixieren. Die Wahl der globalen unitären Eichung in Kombination mit der Landau-Eichung hat es uns dabei auf direkte Art und Weise ermöglicht, die nicht-trivialen Eigenwerte des globalen Skalarfeldes Φ nach spontaner Symmetriebrechung – und somit H – zu bestimmen, sowie Eichfelder zu definieren, welche aus den Freiheitsgraden der simulierten Gittereichtheorie extrahiert werden können. Die Bestimmung von H zu $SU(2) \times U(1)$ hat uns ferner die Möglichkeit eröffnet, das Verhalten eines Paares von statischen Testladungen bei verschiedenen Abständen zu untersuchen, die sich nicht-trivial unter eben jener Symmetriegruppe transformieren, welche

der Konstruktion der heute weitestgehend akzeptierten Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung zugrunde liegt. Die Messergebnisse deuten darauf hin, dass die Kondensation der Bosonen des adjungierten Skalarfeldes während des Phasenübergangs denselben Effekt hervorruft, wie die Ausbildung eines Kondensats von fundamentalen Higgs-Bosonen bei der spontanen Symmetriebrechung im Modell von Glashow, Weinberg und Salam: Obwohl es sich beim schwachen Isospin um eine nicht-abelsche Symmetrie handelt, kann Materie, welche Isospinladung trägt, im Rahmen der von uns untersuchten effektiven Theorie frei beobachtet werden. Die für das Confinement-Phänomen charakteristische Form des Potentials ändert sich beim Phasenübergang von einem linearen Anstieg für große Abstände der Quellen hin zu einem Coulomb-Potential.

Das Spektrum der Theorie weist dabei sowohl eine masselose Anregung auf, welche die Quantenzahlen des Photons trägt, als auch ein massives Boson, welches zum adjungierten Skalarfeld gehört, und dessen Masse vom Vakuumerwartungswert des skalaren Kondensats und der Selbstdkopplungskonstante (4.112) bestimmt wird. Beide Anregungen konnten auf eichinvariante Weise identifiziert werden. Die Massenskala der Theorie ist dabei nicht fixiert und könnte durch weiteres Vordringen in die Phase gebrochener Symmetrie beliebig vergrößert werden, was durch das beobachtete Verhalten von (4.112) als Funktion von κ nahe gelegt wird. Die dynamische Erzeugung einer weiteren Massenskala durch genuin nicht-perturbative Effekte, wie sie etwa aus dem Studium des Infrarotverhaltens des Gluon-Propagators in Landau-Eichung im Falle der $SU(2)$ [LRG02] und $SU(3)$ [BBLW00] Yang-Mills-Theorien bekannt ist, konnte im nicht-abelschen Sektor der residuellen Symmetriegruppe H nicht beobachtet werden. Vielmehr wurde bei der Untersuchung der Propagatoren der in Landau- und globaler unitärer Eichung (Abschnitt 4.4) definierten Felder festgestellt, dass diese in zwei Klassen zerfallen. Die vier mit den Generatoren von H verknüpften Eichfelder gehören zu masselosen Anregungen, während die mit den Generatoren von G/H assoziierten Eichfelder eine dynamisch erzeugte Masse erhalten. Diese scheint direkt proportional zu m_φ , möglicherweise sogar gleich der Masse des adjungierten Higgs-Bosons zu sein.

Dies ist insofern sehr interessant, als dass die vorliegenden Ergebnisse dem eingangs kurz rekapitulierten, perturbativ zu erwartenden Verhalten in Bezug auf das Spektrum der Theorie voll und ganz zu entsprechen scheint, obwohl bei dieser üblicherweise angeführten Erklärung des Higgs-Mechanismus ausschließlich die klassische Feldtheorie als Argumentationsgrundlage bemüht wird und dabei offensichtlich von Voraussetzungen ausgegangen wird, die im Falle der quantisierten Theorie nicht mehr unbedingt zutreffend sind. Ein besonders aufschlussreiches Beispiel ist in diesem Zusammenhang das viel diskutierte Confinement-Phänomen in nicht-abelschen Eichtheorien. Würde man der üblichen Argumentation auch in diesem Fall folgen, so müsste man unabhängig von etwaigen nicht-perturbativ Effekten in stark gekoppelten Quantenfeldtheorien zu dem Schluss kommen, dass solche Theorien aufgrund der intakten (Eich-) Symmetrie ausschließlich masselose Eichbosonen aufweisen sollte. Dies ist aber vermutlich in doppelter Hinsicht nicht der Fall. Zum einen treten Eichbosonen in derartigen Theorien überhaupt nicht als asymptotische Zustände im Spektrum auf, versucht man dennoch ihnen zumindest formal in einer bestimmten Eichung eine Masse zuzuweisen, so findet sich typischerweise ein von Null verschiedener Wert²². Es ist daher höchst interessant, das Zusammenspiel der verschiedenen Effekte zu studieren, die in nicht-abelschen Eichtheorien bei der Ankopplung von skalaren Feldern auftreten können, die das Phänomen der spontanen

²²Wie in Kapitel 4.1 ausgeführt wurde, ist dieser Punkt noch Gegenstand aktueller Untersuchungen.

Symmetriebrechung ermöglichen²³. Ein zentrales Ergebnis der in diesem Kapitel vorgestellten Untersuchung ist dabei, dass die mit der residuellen Symmetriegruppe H assoziierten Eichbosonen im Zuge der spontanen Symmetriebrechung tatsächlich im Spektrum der Theorie nachweisbar werden und masselos sind. An dem von uns untersuchten Punkt im Phasendiagramm der $SU(3)$ -Eichtheorie mit adjungiertem Skalarfeld scheint somit eine höchst interessante effektive Quantenfeldtheorie vorzuliegen, die weder das Confinement-Phänomen, noch das Auftreten eines *mass gap* zeigt, obwohl die zugrunde liegende Symmetriegruppe H einen nicht-abelschen Faktor enthält.

In der Einleitung wurde darauf hingewiesen, dass eine Kopplung der zu untersuchenden Theorie (4.26) an dynamische fermionische Materie bewusst vernachlässigt wurde, um zunächst zu klären, ob die $SU(3)$ -Eichtheorie mit Skalarfeld in adjungerter Darstellung allein in der Lage ist, die wesentlichen Merkmale einer Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung zu reproduzieren. Zum einen muss die Existenz einer masselosen vektoriellen Anregung im Spektrum der Theorie gesichert sein, welche als das Photon der elektromagnetischen Wechselwirkung interpretiert werden kann. Zum anderen muss die Theorie einen Mechanismus beinhalten, der sowohl effektive Massenterme für Eichfelder erzeugen kann, als auch eine Erklärung dafür bereithalten, warum eine bestimmte Linearkombination dieser Eichfelder genau diejenigen Masseneigenzustände sein sollen, deren zugehörige Eichbosonen im Folgenden als W^\pm und Z^0 interpretiert werden können und deren Massen gerade in einem Verhältnis stehen, welches im Rahmen des GSW-Modells durch den sogenannten Weinberg-Winkel θ_W gemäß $m_W/m_Z = \cos(\theta_W)$ parametrisiert wird und experimentell hervorragend gesichert ist.

Der eichinvariante 't Hooft-Polyakov-Operator $\Gamma_{\mu\nu}^3(x)$, der zur Detektierung des Photons konstruiert wurde, wird von einem Term (4.94) dominiert, der als Linearkombination der Feldstärken aller nicht-abelschen Eichfelder interpretiert werden kann. Das masselose Vektorboson, welches an diesen Operator koppelt und im Spektrum der Theorie eindeutig nachgewiesen werden konnte, ist daher als eine Linearkombination zu verstehen, die von den vier masselosen Eichfeldern $A_\mu^a(x)$ ($a \in \bar{A}$) dominiert wird, wobei Beiträge der (beliebig) massiven übrigen Eichfelder für das langreichweite Verhalten des Feldstärke-Korrelators offenbar keine Rolle spielen. Obwohl es bei der ersten Betrachtung der Propagatoren der Eichbosonen (4.12) für verschwindenden räumlichen Impuls den Anschein hatte, als würde sich im Niedrigenergiesektor der Theorie neben einer sehr leichten Anregung auch ein massives, quasi entartetes Triplet von Eichbosonen als Kandidaten für die Vektorbosonen W^\pm, Z^0 nachweisen lassen, hat sich diese gruppentheoretisch denkbare Möglichkeit (4.127) bei der anschließenden Untersuchung der Dispersionsrelation aller Anregungen als äußerst unwahrscheinlich erwiesen. Viel eher deutet die Extrapolation der Messdaten zum physikalischen Punkt darauf hin, dass die Massen aller mit H assoziierten Eichbosonen mit Null verträglich sind, und die Theorie somit zumindest an dem von uns untersuchten Punkt des Phasendiagramms nicht direkt zu einer möglichen Alternative zur Beschreibung von elektroschwachen Vorgängen in der Natur ausgebaut werden kann. In diesem Zusammenhang wäre es allerdings sehr interessant, das Verhalten der Theorie bei einer Annäherung an die bereits beobachtete Grenzlinie eines Phasenübergangs zweiter Ordnung zu studieren um die Frage nach der Existenz eines nicht-trivialen Kontinuumslimes dieser Theorie näher zu untersuchen.

²³Bereits in einer der ersten Untersuchungen des GSW-Modells auf dem Gitter hat sich angedeutet, dass sowohl eine Confinement-Phase mit *mass gap* und $SU(2) \times U(1)_Y$ -Symmetrie, als auch eine $U(1)_Q$ -Coulomb-Phase realisiert sein kann, wobei keine analytische Verbindung zwischen beiden besteht [Shr86, MM94].

Hält man am Konzept der Beschreibung der elektroschwachen Wechselwirkung durch eine Eichtheorie in Verbindung mit spontaner Symmetriebrechung fest, so ist es vor allem die (flavourunabhängige) Universalität der Kopplungskonstanten von Quarks und Leptonen in elektroschwachen Prozessen, die einen starker Hinweis darauf gibt, dass die zugrunde liegende Symmetriegruppe $SU(2) \times U(1)$ sein sollte²⁴. Dass diese Symmetrie jedoch nicht unbedingt durch ein fundamentales Higgs-Doublett gebrochen werden muss, wurde schon in Abschnitt 4.3.1 diskutiert. Vielmehr genügt es anzunehmen, dass der skalare Erweiterungssektor eine ungebrochene globale (*custodial*) $SU(2)$ -Symmetrie aufweist um zu zeigen, dass ein Symmetriebrechungsschema möglich ist, das das Spektrum der beobachteten Eichbosonen reproduziert. Zudem muss es sich bei dem entsprechenden Boson nicht unbedingt um ein elementares Teilchen handeln. Ebenso gut ist ein Mechanismus vorstellbar, der eine Analogie zur dynamischen Brechung der chiralen Symmetrie in der Theorie der starken Wechselwirkung durch Ausbildung eines skalaren Quarkkondensats $\langle \bar{q}^f q^f \rangle \neq 0$ auf einer durch Λ_{QCD} charakterisierten Skala darstellt²⁵. Allerdings gibt es für die Existenz derartiger Bindungszustände, die unter dem Namen *Techni-Mesonen* bekannt sind, genau wie bei der Suche nach dem fundamentalen Higgs-Boson, bisher keinerlei experimentelle Hinweise [A⁺08]. Dennoch ist es interessant, über die Rolle der von uns untersuchten Quantenfeldtheorie in Verbindung mit derartigen Theorien zu spekulieren, denn bei allen Anstrengung, die im fermionischen Sektor unternommen werden müssen, um das Problem der dynamischen Erzeugung von Massentermen für ungleich zu behandelnde rechts- und linkshändige Familien von Materiefeldern zu lösen, reduziert sich das Problem im Sektor der Eichbosonen letztlich immer auf die Brechung einer $SU(2) \times U(1)$ -Symmetrie und der damit verbundenen Massenerzeugung für Eichfelder, die *a priori* stets als masselos angenommen werden. Nehmen wir also an, dass sich die durch (4.26) gegebene Theorie oberhalb einer sehr hohen Energieskala μ' in der symmetrischen Realisierungsphase befindet. Während des Phasenübergangs zweiter Ordnung erhalten das adjungierte Boson und die zu G/H gehörigen Eichbosonen eine sehr große Masse und entkoppeln somit faktisch von der resultierenden Quantenfeldtheorie bei deutlich niedrigeren Energien. In diesem Energiebereich liegt somit eine Quantenfeldtheorie vor, welche zum einen das Auftreten von freien Isospin-Ladungen erlaubt, zum anderen die residuelle Symmetriegruppe $H = SU(2) \times U(1)$ besitzt, und die Voraussetzung der Masselosigkeit der zugehörigen Eichfelder auf Quantenniveau erfüllt. Auf der elektroschwachen Skala, der im GSW-Modell durch einen Vakuumerwartungswert des fundamentalen Higgs-Kondensats von $v \simeq 250$ GeV gegeben ist, kann dann eine weitere Symmetriebrechung auf die elektromagnetische Gruppe $U(1)_Q$ erfolgen, ohne dass dabei darauf zu achten wäre, dass dieser Mechanismus für die Freisetzung des Isospins sorgen muss. Die Randbedingung ist dabei „lediglich“, dass zuletzt das beobachtete Spektrum der elektroschwach wechselwirkenden Teilchen reproduziert werden muss.

Die genaue Form dieses Symmetriebrechungsmechanismus ist nach wie vor eine der offenen und drängendsten Fragen der Elementarteilchenphysik und wird vermutlich nur durch Hinweise aus weiteren experimentellen Untersuchungen zu klären sein. Es bleibt also zu hoffen, dass die anstehenden Experimente am LHC (CERN) Licht ins Dunkel bringen werden.

²⁴Da die beiden Faktoren miteinander kommutieren, kann es zwei unabhängige Kopplungskonstanten geben, diese können durch die Werte der Fermi-Konstanten G_F und $\sin^2(\theta_w)$ universell festgelegt werden [PS95].

²⁵Überlegungen dieser Art haben bereits vor über 30 Jahren zum Anstoß einer Entwicklung von sogenannten *Technicolour*-Theorien geführt [CL84]. Die wesentliche Idee ist dabei, Erweiterungen von QCD-artigen Eichtheorien mit geeigneten RG- β -Funktionen zu finden, die ein besonderes Verhalten der laufenden Kopplung aufweisen und dadurch die natürliche Einführung der Massenskala der elektroschwachen Wechselwirkung, sowie eine Erklärung der Massenhierarchie zwischen den verschiedenen Familien der Fermionen ermöglichen. Eine Einführung findet sich in den Übersichtsartikeln von Hill und Simmons [HS03], sowie Sannino [San08].

Anhang A

Diverses

A.1 Einheiten

Wir verwenden das natürliche Einheitensystem, in welchem $\hbar = c = 1$ gesetzt wird.
In diesem System gilt

$$[\text{Länge}] = [\text{Zeit}] = [\text{Energie}]^{-1} = [\text{Masse}]^{-1}$$

und die Umrechnung in physikalische Einheiten geschieht mittels der Relation

$$(1 \text{ MeV})^{-1} (\hbar c) = 197.3 \text{ fm}.$$

A.2 Metriken

- **Minkowski-Raum \mathcal{M}_4 :** $g_{\mu\nu} = \text{diag}[+, -, -, -]$

Ein Raumzeit-Ereignis wird nach Wahl eines Koordinatensystems mit

$$x = \{x^0, x^1, x^2, x^3\} = \{\mathbf{x}, x^0\}, \quad x^\mu \in \mathbb{R}$$

bezeichnet. Die quadratische Form auf \mathcal{M}_4 lautet

$$(x, x) = g_{\mu\nu} x^\mu x^\nu = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2 = (x^0)^2 - \mathbf{x}^2,$$

was dem Raum \mathcal{M}_4 eine pseudo-euklidische Struktur gibt.

- **Euklidischer Raum E_4 :** $g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$

Ein Vektor $x \in E_4$ wird mit

$$x = \{x^1, x^2, x^3, x^4\} = \{\mathbf{x}, x^4\}, \quad x^\mu \in \mathbb{R}$$

bezeichnet. Die quadratische Form ist positiv definit, es handelt sich um einen Skalarprodukt Raum mit euklidischer Struktur:

$$x^2 = (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 + (x^4)^2 = \mathbf{x}^2 + (x^4)^2.$$

A.3 Notationskonvention

Die Dimension der Raumzeit wird mit D bezeichnet. Es gilt also $D = d + 1$, wobei d die Dimension des Raums bezeichnet.

- **Griechische Symbole:** Im Falle der euklidischen Raumzeit E_4 gilt $\mu, \nu, \dots \in [1, D]$. Wird stattdessen der Minkowski-Raum \mathcal{M}_4 betrachtet, so gilt gemäß Konvention A.2 $\mu, \nu, \dots \in [0, d]$. Die Symbole α, β, \dots bezeichnen Spinor-Indizes.
- **Lateinische Symbole:** $i, j, k, \dots \in [1, d]$ sind den räumlichen Dimensionen vorbehalten, Farb-Indizes einer $SU(N)$ -Yang-Mills-Theorie werden mit $a, b, c, \dots \in [1, N^2 - 1]$ bezeichnet. Majuskel A, B, C, \dots bezeichnen in diesem Zusammenhang eine Kollektion verschiedener Indizes, also einen sogenannten Multi-Index.

Falls nicht explizit anders angegeben, gilt stets die Einstein'sche Summenkonvention. Für benachbarte Punkte x und y auf dem Gitter E_4 verwenden wir häufig die Kurzschreibweise

$$y = x + \mu := x + a \hat{e}_\mu ,$$

wobei a die Gitterkonstante der Diskretisierung bezeichnet.

A.4 Fourier-Transformation

Für die vierdimensionale euklidische Fourier-Transformation gelten auf dem Gitter allgemein die Konventionen

$$\tilde{f}(p) = a^4 \sum_x f(x) \exp[i p x], \quad f(x) = \frac{1}{a^4 N^4} \sum_p \tilde{f}(p) \exp[-i p x] .$$

Dabei bezeichnet $x \cdot y = \sum_{\mu=1}^4 x_\mu y_\mu$ nach den in A.2 getroffenen Konventionen das euklidische Skalarprodukt, a ist wieder die Gitterkonstante.

Die Dirac'sche Delta-Distribution besitzt auf dem Gitter die diskretisierte Darstellung

$$\delta_{N^4}(x - y) = \frac{1}{N^4} \sum_p \exp[-i p (x - y)] .$$

Eine Verbindung zwischen Eichfeldern $A_\mu(x)$ und Link-Variablen $U_\mu(x)$, die auf den Links $(x, x + a \hat{e}_\mu)$ des Gitters definiert sind, wird üblicherweise durch die Relation (C.48) hergestellt. Dabei werden die Eichfelder auf natürliche Weise mit den Mittelpunkten der zugehörigen Links assoziiert [MM94]. Eine solche Definition ist immer nur nach Wahl einer bestimmten Eichung sinnvoll [GPP⁺98]. Die Fourier-Transformation der beispielsweise in Landau-Eichung definierten Eichfelder (4.116) ist dabei gegeben durch:

$$\tilde{A}_\mu^a(p) = a^4 \sum_x A_\mu^a(x) \exp\left[i p (x + \frac{a}{2} \hat{e}_\mu)\right], \quad A_\mu^a(x) = \frac{1}{a^4 N^4} \sum_p \tilde{A}_\mu^a(p) \exp\left[-i p (x + \frac{a}{2} \hat{e}_\mu)\right] .$$

Anhang B

Algorithmen zur numerischen Simulation von Quantenfeldtheorien

Iacta alea est
SUETON: Divus Iulius, 32f

B.1 Markov-Prozesse und Monte-Carlo-Methoden

Im Rahmen der numerischen Simulation von Quantenfeldtheorien auf dem Gitter sollen Erwartungswerte verschiedener Funktionale $f[\varphi]$ berechnet werden, wobei im Folgenden $\{\varphi\}$ eine Konfiguration von Feldvariablen bezeichnen soll. Dies führt auf die Berechnung eines Pfadintegrals der Form

$$\langle f \rangle = \mathcal{Z}^{-1} \int \mathcal{D}\varphi f[\varphi] \exp\{-S[\varphi]\} \quad \mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi \exp\{-S[\varphi]\}, \quad (\text{B.1})$$

wobei $S[\varphi]$ die reellwertige Wirkung der diskretisierten Theorie darstellt. Eine direkte Auswertung des Integrals verbietet sich aufgrund der Vielzahl der auftretenden Konfigurationen¹. Das Ziel eines ökonomischen Monte-Carlo-Algorithmus muss also ein *importance sampling* sein, bei dem ein Ensemble, bestehend aus einer großen Zahl N von Konfigurationen $\{\varphi\}_n$, ($n = 1 \dots N$) erzeugt wird, so dass die Verteilungsdichte dieser samples die gewünschte Verteilungsdichte des *kanonischen Ensembles* $W_c[\varphi] \propto \exp\{-S[\varphi]\}$ approximiert. Der in diesem Ensemble berechnete Mittelwert

$$\bar{f} := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f[\varphi_n] \quad (\text{B.2})$$

stellt eine Approximation des Erwartungswertes $\langle f \rangle$ dar. In einer numerischen Simulation wird – ausgehend von einer Startkonfiguration $\{\varphi\}_0$ – eine Folge von Konfigurationen $\{\{\varphi\}_k | k \in \mathbb{N}_0\}$ generiert, dabei wird jede bereits erzeugte Konfiguration $\{\varphi\}$ durch Anwendung einer Aktualisierungsvorschrift (*update step*) mit einer Übergangswahrscheinlichkeit $P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\})$ in eine neue Konfiguration $\{\varphi'\}$ überführt.

$$\{\varphi\}_0 \rightarrow \{\varphi\}_1 \rightarrow \{\varphi\}_2 \rightarrow \{\varphi\}_3 \rightarrow \{\varphi\}_4 \rightarrow \dots \quad (\text{B.3})$$

¹Bereits für das zweidimensionale Ising-Modell auf einem Gitter mit 100^2 Gitterplätzen x , in dem jede Variable $\sigma(x) \in \{-1, +1\}$ nur zwei verschiedene Werte annehmen kann, müssten bereits $2^{10000} \sim 10^{3010}$ Konfigurationen berücksichtigt werden.

Die Aktualisierung ist also ein stochastischer Prozess. Folgende Bedingungen sind zu erfüllen, damit es sich bei dem Update-Prozess um einen *Markov-Prozess* handelt:

$$\sum_{\{\varphi'\}} P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) = 1 \quad \forall \{\varphi\} \quad (\text{B.4})$$

$$P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) > 0 \quad \forall \{\varphi\}, \{\varphi'\} \quad (\text{B.5})$$

$$P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) W_c[\varphi] = P(\{\varphi\} \leftarrow \{\varphi'\}) W_c[\varphi'] \quad (\text{B.6})$$

Neben der Normierungsbedingung (B.4) für die Übergangswahrscheinlichkeiten drückt die Forderung nach *strong ergodicity* (B.5) aus, dass durch einen Update jede mögliche Konfiguration des Ensembles mit endlicher Wahrscheinlichkeit erreicht werden können muss. Die letzte Forderung wird i.A. mit *detailed balance* bezeichnet, deren Erfüllung eine hinreichende Bedingung für die üblicherweise geforderte *Stabilitätsbedingung*

$$\sum_{\{\varphi\}} P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) W_c[\varphi] = W_c[\varphi'] \quad (\text{B.7})$$

darstellt. Die Stabilitätsbedingung garantiert, dass die Verteilung des kanonischen Ensembles W_c ein (eindeutiger) Fixpunkt der Übergangswahrscheinlichkeit P ist [Wip07], d.h. vorausgesetzt, die Anfangsverteilung W_0 hat einen nichtverschwindenden Überlapp mit der Verteilung des kanonischen Ensembles², so konvergiert diese Verteilung im Grenzfall unendlich häufiger Anwendung von P gegen die kanonische Verteilung. In der Praxis wird zunächst, ausgehend von einer Startkonfiguration $\{\varphi\}_0$, eine bestimmte Anzahl $N_{\text{therm.}}$ von Aktualisierungsschritten durchgeführt. Dies ist die sogenannte *Thermalisierungsphase*, in der die Entwicklung $W_0[\varphi] \rightarrow W_c[\varphi]$ stattfindet. Die danach erzeugten Konfigurationen werden zu einem Ensemble $\{\{\varphi\}_n \mid n = 1 \dots N\}$ zusammengefasst, welches zum Messung von Erwartungswerten interessierender Observablen gemäß (B.2) herangezogen wird und die Gleichgewichtsverteilung $W_c[\varphi]$ approximiert.

Gleichbedeutend mit den Bedingungen (B.5, B.6) sind die zugehörigen lokalen Versionen, denn falls ein Algorithmus lokal ergodisch ist und *detailed balance* lokal erfüllt, so können die auf Konfigurationsebene gestellten Forderungen (B.5, B.6) durch Hintereinanderausführung von lokalen Aktualisierungsschritten an jedem Gitterpunkt x in der Form $P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) = \prod_x P_x(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\})$ erfüllt werden [MM94]. Diese Tatsache spielt eine entscheidende Rolle bei der Konstruktion und Überprüfung der Gültigkeit von Metropolis- und Heatbath-Algorithmen, die auf der lokalen Aktualisierung von dynamischen Variablen basieren.

B.1.1 Metropolis-Algorithmus

Die Konstruktion der Übergangswahrscheinlichkeit

$$P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) := P_{\text{trial}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) P_{\text{acc.}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) \quad (\text{B.8})$$

des (verallgemeinerten) Metropolis-Algorithmus geschieht in zwei Schritten:

- Es sei $P_{\text{trial}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\})$ eine beliebige Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Vorschlag $\{\varphi'\}$ zur Aktualisierung der Konfiguration $\{\varphi\}$.

²Dies ist für jede Anfangsverteilung W_0 , die nur aus einer einzigen Anfangskonfiguration $\{\varphi\}_0$ besteht, aufgrund der Bedingung (B.5) immer gewährleistet [MM94].

- Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $P_{\text{acc.}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\})$ für diesen Vorschlag ist gegeben als

$$P_{\text{acc.}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) \propto \min\left[1, \frac{P_{\text{trial}}(\{\varphi\} \leftarrow \{\varphi'\}) W_c[\varphi']}{P_{\text{trial}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) W_c[\varphi]}\right]. \quad (\text{B.9})$$

Der so definierte Algorithmus erfüllt die Bedingungen (B.4 – B.6), im Fall einer Gleichverteilung von P_{trial} reduziert sich der Algorithmus auf den ursprünglich von Metropolis *et al.* [MRR⁺53] vorgeschlagenen.

B.1.2 Heatbath-Algorithmus

Der Heatbath-Algorithmus ist ein Spezialfall des verallgemeinerten Metropolis-Algorithmus. Der Vorschlagswahrscheinlichkeit $P_{\text{trial}}(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\})$ für eine neue Konfiguration $\{\varphi'\}$ wird dabei die kanonische Gleichgewichtsverteilung zugrunde gelegt. Dieser Vorschlag ist völlig unabhängig von der alten Konfiguration $\{\varphi\}$ und wird nach (B.9) immer akzeptiert. Es gilt also

$$P(\{\varphi'\} \leftarrow \{\varphi\}) = W_c[\varphi'] = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-S[\varphi']\}. \quad (\text{B.10})$$

Die numerische Implementierung dieser Verteilung ist in den meisten Fällen nicht direkt für die komplette Konfiguration möglich, wie bereits oben diskutiert kann man sich aber auf einen lokal ergodischen Update-Schritt zurückziehen, dem eine lokale Version von (B.10) zugrunde liegt. Diese lokale Wahrscheinlichkeitsverteilung einer Feldvariablen $\varphi(x)$ im kanonischen Ensemble bezeichnen wir mit $W_c[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$, wobei $\hat{\varphi}(x)$ alle umliegenden Variablen meint, die während des Update-Schritts am Punkt x festgehalten werden. Die Ergodizität des Algorithmus wird durch die sukzessive Durchführung des lokalen Update-Schritts an allen Punkten des Gitters wiederhergestellt, ein solcher *sweep* führt auch zur Realisierung von (B.10) auf Konfigurationsebene.

Die eigentliche Aufgabe reduziert sich also im Falle des Heatbath-Algorithmus darauf, die lokale kanonische Verteilung $W_c[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$ zu erzeugen. Schreiben wir

$$dI_{\hat{\varphi}(x)} = W_c[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)] d\varphi(x), \quad (\text{B.11})$$

so kann der Vorschlag $\varphi'(x)$ bei Kenntnis des Integrals $I_{\hat{\varphi}(x)}$ (und dessen Inversen $I_{\hat{\varphi}(x)}^{-1}$) direkt angegeben werden. Falls dies nicht ohne weiteres möglich ist, aber eine Zerlegung der Verteilung gemäß

$$W_c[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)] = W_0[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)] W_m[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)] \quad (\text{B.12})$$

in einen integrierbaren Anteil $W_0[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$ und einen Rest $W_m[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$ existiert, kann folgendes Verfahren angewandt werden:

- Zunächst wird mit Hilfe von $W_0[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$ ein Vorschlag $\varphi'(x)$ erzeugt.
- In einem nachgelagerten Metropolis-Schritt ist dieser Vorschlag mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{\text{acc.}}(\varphi'(x) \leftarrow \varphi(x), \hat{\varphi}(x)) \propto \min\left[1, \frac{W_m[\varphi'(x), \hat{\varphi}(x)]}{W_m[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]}\right] \quad (\text{B.13})$$

zu akzeptieren.

Im Erfolgsfall ist das dadurch gewonnene Element nach der vollen kanonischen Verteilung $W_c[\varphi(x), \hat{\varphi}(x)]$ verteilt. Anwendungen dieses Verfahrens im Rahmen des Updates von skalaren Feldern in Eichtheorien finden sich in Kapitel B.3.

B.2 Heatbath-Algorithmen für Yang-Mills-Theorien

Der Heatbath-Algorithmus in Anwendung auf reine Eichtheorien soll zunächst anhand des Beispiels der $SU(2)$ -Eichtheorie erläutert werden. Die Darstellung basiert dabei im Wesentlichen auf dem Vorschlag von Creutz [Cre80]. Auf die Vereinfachungen, die sich im Falle der $U(1)$ -Eichtheorie ergeben, sowie auf die Verallgemeinerungen im Falle der Gruppe $SU(3)$ wird im Anschluss eingegangen werden.

Die Anwendbarkeit eines lokalen Heatbath-Update-Schritts setzt, wie in Abschnitt B.1.2 diskutiert, die Zerlegbarkeit der kanonischen Wahrscheinlichkeitsverteilung voraus. Dies ist insbesondere für die von Wilson [Wil74] vorgeschlagenen Wirkung (2.39), die wir durchgängig verwenden, der Fall. Die lokale Wahrscheinlichkeitsverteilung der zu aktualisierenden Link-Variablen $U_\mu(x)$ kann demnach geschrieben werden als

$$W_c(U_\mu(x), \hat{U}_\mu(x)) dU_\mu(x) \propto \exp \left\{ \frac{\beta}{2} \text{tr} [U_\mu(x) B_\mu(x)] \right\} dU_\mu(x) , \quad (\text{B.14})$$

wobei $B_\mu(x)$ die Summe der $2(D - 1)$ Bügel bezeichnet, die den Link $U_\mu(x)$ umgeben:

$$B_\mu(x) := \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_\nu^\dagger(x + \mu - \nu) U_\mu^\dagger(x - \nu) U_\nu(x - \nu) + U_\nu(x + \mu) U_\mu^\dagger(x + \nu) U_\nu^\dagger(x) \right] . \quad (\text{B.15})$$

Die Integration über die Gruppenmannigfaltigkeit erfolgt dabei bezüglich des invarianten, normierten Haarmäßes dU

$$\int f(AU) dU = \int f(UB) dU = \int f(U) dU , \quad dU = d(AUB) \quad A, B \in SU(2) , \quad (\text{B.16})$$

welches bei Verwendung der quaternionischen Parametrisierung (D.33) eines Gruppenelementes $U \in SU(2)$ die Gestalt

$$dU = \frac{1}{\pi^2} d^4 a \delta(a^2 - 1) , \quad \int_{SU(2)} dU = 1 \quad (\text{B.17})$$

nimmt. Hier wurde zur Vereinfachung der Notation bereits die Raumzeit- und Richtungsabhängigkeit des zu aktualisierenden Links $U_\mu(x)$ unterdrückt. Im Falle der $SU(2)$ ist (B.15) als Summe von Elementen aus $SU(2)$ offenbar bis auf Normierung wieder ein Gruppenelement:

$$\bar{B} = k^{-1} B , \quad k = \|B\| = \det(B)^{\frac{1}{2}} , \quad \bar{B} \in SU(2) . \quad (\text{B.18})$$

Nach Einführung der Variablen $\bar{U} = U\bar{B}$ finden wir

$$\exp \left\{ \frac{\beta k}{2} \text{tr} [U\bar{B}] \right\} dU = \exp \left\{ \frac{\beta k}{2} \text{tr} [\bar{U}] \right\} d\bar{U} , \quad (\text{B.19})$$

wobei die (Rechts-) Invarianz des Haarmäßes ausgenutzt wurde, und die Wahrscheinlichkeitsverteilung (B.14) erhält bei Verwendung der Darstellung (D.33) für das Gruppenelement \bar{U} die Form

$$dP(a_0, \vec{a}) \propto d^4 a \delta(a^2 - 1) \exp\{\beta k a_0\} , \quad a^2 = a_0^2 + \vec{a} \cdot \vec{a} . \quad (\text{B.20})$$

Die Abhängigkeit der Verteilung von $\|\vec{a}\|$ kann mittels der Delta-Distribution eliminiert werden, so dass sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Element $\bar{U} \in SU(2) \simeq S^3$ auf

$$dP(a_0, \vartheta_a, \varphi_a) \propto da_0 d\Omega_a \sqrt{1 - a_0^2} \exp\{\beta k a_0\} \quad d\Omega_a = \sin(\vartheta_a) d\vartheta_a d\varphi_a \quad (\text{B.21})$$

reduziert. Nach einer Variablentransformation der Form

$$y = \exp\{\beta k(a_0 - 1)\}, \quad \exp\{-2\beta k\} \leq y \leq 1 \quad (\text{B.22})$$

zur weiteren Vereinfachung der Integration ergibt sich also schließlich

$$dP(y, \vartheta_a, \varphi_a) \propto dy d\Omega_a \sqrt{1 - a_0^2(y)}. \quad (\text{B.23})$$

Numerische Durchführung

Es wird eine gleichverteilte Zufallszahl $y \in [e^{-2\beta k}, 1]$ gezogen, die mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\text{acc}}(y) = \sqrt{1 - (1 + (\beta k)^{-1} \ln(y))^2} \quad (\text{B.24})$$

zu akzeptieren ist. Zu diesem Zweck wird eine weitere, gleichverteilte Zufallszahl $\xi \in [0, 1]$ gewürfelt und mit p_{acc} verglichen. Ist $\xi > p_{\text{acc}}(y)$, so wird dieser Vorschlag verworfen und durch erneute Ziehung von y ein weiterer Vorschlag für a_0 generiert. Diesem wird gemäß (B.24) wieder eine bestimmte Akzeptanzwahrscheinlichkeit zugeordnet, welche mit einer neuen Zufallszahl ξ verglichen wird. Im Fall $\xi < p_{\text{acc}}(y)$ wird das aktuelle y akzeptiert, durch Umkehrung der Transformation (B.22) das zugehörige a_0 berechnet und danach die Richtung von \vec{a} gemäß $d\Omega_a$ gleichverteilt auf der Kugeloberfläche einer S^2 bestimmt. Das auf diese Weise erhaltene Element $\bar{U}_\mu(x)$ ist dann gemäß (B.21) verteilt, und nach Inversion der Substitution wird das Element $U_\mu(x)$ zum Abschluss des Update-Schritts durch $U'_\mu(x) = \bar{U}_\mu(x) \bar{B}_\mu^\dagger(x)$ ersetzt. Alternativ dazu ist es aufgrund der zyklischen Eigenschaft der Spur in (B.19) ebenfalls legitim, die Ersetzung $U'_\mu(x) = \bar{B}_\mu^\dagger(x) \bar{U}_\mu(x)$ durchzuführen.

Veränderungen im Falle der $U(1)$ - und $SU(3)$ -Eichtheorien

Abelsche Eichtheorie

Die Zustandssumme der (kompakten) $U(1)$ -Eichtheorie ist nach Wilson gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U_\mu \exp\left[\beta \sum_x \sum_P \text{Re } U_P(x)\right] = \int \mathcal{D}\theta_\mu \exp\left[\beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} \cos(\theta_{\mu\nu}(x))\right], \quad (\text{B.25})$$

wobei die sogenannten Plaquettenwinkel $\theta_{\mu\nu}(x)$ in (1.70) definiert wurden. Die Abspaltung eines zu aktualisierenden Links $U_\mu(x)$ ist in diesem Fall ebenso wie die Berechnung von (B.15) direkt möglich, der Heatbath-Algorithmus kann also unter Verwendung eines flachen Maßes ($\theta \in (-\pi, \pi]$) angewandt werden.

$SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie

Im Falle der Gruppe $SU(3)$ ermöglicht zwar die Form der Wilson'schen Wirkung die Aufspaltung der lokalen Wahrscheinlichkeitsverteilung in einen Anteil für den zu aktualisierenden Link und einen davon unabhängigen Rest, das Problem stellt jedoch die Berechnung von (B.15) dar, da im Falle der $SU(3)$ die Summation von Gruppenelementen aus der Gruppe hinausführt. Die Lösung des Problems besteht in unserem Fall in der Anwendung des von Cabibbo und Marinari [CM82a] vorgeschlagenen Pseudo-Heatbath-Algorithmus, wobei alle drei Einbettungen von $SU(2)$ -Untergruppen der Reihe nach aktualisiert wurden. Details des Algorithmus werden im Rahmen der Diskussion von Eichfixierungsalgorithmen in Anhang C erörtert.

B.3 Algorithmen für Eichtheorien mit skalaren Feldern

B.3.1 $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie mit dynamischem Higgs-Feld

Updates der Eichfelder

Die Darstellung der Wirkung in der Form (2.42) ermöglicht aufgrund der Linearität in $U_\mu(x)$ eine direkte Übertragung des für die reine $SU(2)$ -Eichtheorie bereits vorgestellten Heatbath-Algorithmus auf die vorliegende Situation. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Link-Variable $U_\mu(x)$ lässt sich schreiben als

$$W_c(U_\mu(x), \hat{U}_\mu(x)) dU_\mu(x) \propto \exp \left\{ \frac{\beta}{2} \text{tr} [U_\mu(x) \mathcal{B}_\mu(x)] \right\} dU_\mu(x), \quad (\text{B.26})$$

wobei die Definition des verallgemeinerte Bügels

$$\mathcal{B}_\mu(x) := B_\mu(x) + \frac{\kappa}{\beta} [\Phi(x + \mu), \Phi^\dagger(x)], \quad \bar{\mathcal{B}} = b^{-1} \mathcal{B} \in SU(2), \quad (\text{B.27})$$

die in (B.15) definierte Summer der Bügel der reinen Yang-Mills-Theorie mit einschließt.

Updates des Higgs-Feldes

Zum Update des Higgs-Feldes verwenden wir den von Bunk [Bun95] vorgeschlagenen Hybrid-Heatbath-Algorithmus. Der kinetische Anteil der Wirkung (2.42) kann in die Form

$$S_{\text{Kin}}[\phi] = \kappa \sum_{x,\mu} \frac{1}{2} [\phi^\dagger(x) U_\mu(x) \phi(x + \mu) + c.c.] \quad (\text{B.28})$$

gebracht werden. Die vier reellen Komponenten des Higgs-Feldes $\phi(x)$ (2.40) werden mit

$$\varphi_1(x) = \text{Re}[\phi_1(x)], \quad \varphi_2(x) = \text{Im}[\phi_1(x)], \quad \varphi_3(x) = \text{Re}[\phi_2(x)], \quad \varphi_4(x) = \text{Im}[\phi_2(x)] \quad (\text{B.29})$$

bezeichnet und zu einem Vektor $\varphi(x) \in \mathbb{R}^4$ zusammengefasst. Fassen wir nun alle Beiträge in (B.28), die an das zu aktualisierende Higgs-Feld $\varphi(x)$ koppeln, zu einem Vektor $R(x) \in \mathbb{R}^4$ zusammen, so findet sich für die gesamte lokale Wirkung des Higgs-Sektors die Darstellung

$$S_{\text{Higgs}}[\varphi(x)] = (\varphi(x) - R(x))^2 + \lambda (\varphi(x)^2 - 1)^2, \quad (\text{B.30})$$

und ein neues Higgs-Feld ist gemäß der Verteilung

$$dP(\varphi) = d^4\varphi p(\varphi) \sim d^4\varphi \exp\{-S_{\text{Higgs}}[\varphi]\} \quad (\text{B.31})$$

zu erzeugen. Zur Vereinfachung der Darstellung haben wir hier bereits die Abhängigkeit der dynamischen Variablen vom Ort x unterdrückt, da wir im Folgenden den Update eines Higgs-Feldes an einem festen Ort diskutieren wollen. Obwohl (B.30) bereits in Form einer Wirkung vorliegt, welche die Anwendung eines Gauß'schen Heatbath-Algorithmus direkt zulassen würde, besteht immer noch die Möglichkeit, die Verteilungsfunktion (B.31) dahingehend zu verändern, dass eine *optimale Akzeptanzrate* während des Aktualisierungsprozesses erzielt wird. Dies kann erreicht werden, indem zunächst ein Parameter $\alpha \in \mathbb{R}$ eingeführt wird, mithilfe dessen die Wirkung (B.30) umformuliert wird:

$$S_{\text{Higgs}}[\varphi] = \alpha (\varphi - \alpha^{-1} R)^2 + \lambda (\varphi^2 - v_\alpha^2)^2 + \gamma \quad (\text{B.32})$$

$$v_\alpha^2 := 1 + \frac{\alpha - 1}{2\lambda}, \quad \gamma := (1 - \alpha) \left(1 - \frac{R^2}{\alpha} + \frac{(\alpha - 1)}{4\lambda} \right). \quad (\text{B.33})$$

Die Konstante γ ist unabhängig von $\varphi(x)$ und kann daher bei der Aktualisierung des Higgs-Feldes nach (B.32) vernachlässigt werden. Daraus ergibt sich die modifizierte Verteilungsfunktion

$$p(\varphi, \alpha) = p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha) \cdot p_{\text{acc}}(\varphi, \alpha) \quad (\text{B.34})$$

mit den beiden Faktoren

$$p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha) = \mathcal{N}^{-1} \exp \left\{ -\alpha(\varphi - \alpha^{-1}R)^2 \right\} \quad \text{und} \quad p_{\text{acc}}(\varphi, \alpha) = \exp \left\{ -\lambda(\varphi^2 - v_\alpha^2)^2 \right\}. \quad (\text{B.35})$$

Die Normierungskonstante ist dabei durch $\mathcal{N} = \int d^4\varphi \exp \left\{ -\alpha(\varphi - \alpha^{-1}R)^2 \right\}$ gegeben. Zuletzt wird durch das Parameterintegral

$$R_{\text{acc.}}(\alpha) := \int d^4\varphi p(\varphi, \alpha), \quad (\text{B.36})$$

die *Akzeptanzrate* als Funktion des Parameters α definiert, und die zufordernde Extremumsbedingung für $R_{\text{acc.}}(\alpha)$ führt auf die in [Bun95] angegebene kubische Gleichung

$$\alpha^3 - (1 - 2\lambda)\alpha^2 - 4 \cdot \lambda \alpha = 2\lambda R^2, \quad (\text{B.37})$$

deren einzige positive Lösung (B.36) maximiert. Das weitere Vorgehen zur Bestimmung des Vorschlags φ_{trial} für die neue Higgs-Variable wird im folgenden Abschnitt erläutert, nachdem eine Verallgemeinerung des bisher vorgestellten Algorithmus präsentiert wurde.

B.3.2 Die Verallgemeinerung des Algorithmus von Bunk

Das Ziel ist es, einen allgemein anwendbaren Heatbath-Algorithmus für die Aktualisierung von Higgs-Feldern in Eichtheorien unter der Voraussetzung zu konstruieren, dass sich die Wirkung des Higgs-Sektors auf eine Gauß'sche Form transformieren lässt. Als Folge dessen ergibt sich eine Verallgemeinerung der kubischen Gleichung (B.37) zur Optimierung solcher Algorithmen, die nun auf eine etwas andere Weise wie oben abgeleitet werden soll.

Angenommen, die Wirkung der betrachteten Theorie konnte bereits in die Form (B.32) gebracht werden, wobei nun die Vektoren $\varphi, R \in \mathbb{R}^d$. In einem ersten Schritt wird im Wechselwirkungsterm der Wert von φ^2 durch den zugehörigen Erwartungswert $\langle \varphi^2 \rangle$ angenähert, und gefordert, dass

$$v_\alpha^2 = \langle \varphi^2 \rangle, \quad (\text{B.38})$$

was die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $p_{\text{accept}}(\varphi, \alpha)$ in Gleichung (B.35) maximiert. Als nächstes berechnen wir den Erwartungswert von φ^2 bezüglich der Vorschlagsverteilungsfunktion $p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha)$

$$\langle \varphi^2 \rangle = I_1(\alpha)/I_0(\alpha), \quad (\text{B.39})$$

ausgedrückt durch die beiden Parameterintegrale

$$I_0(\alpha) = \int d^4\varphi p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha) \quad \text{und} \quad I_1(\alpha) = \int d^4\varphi \varphi^2 p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha). \quad (\text{B.40})$$

Nach quadratischer Ergänzung durch Einführung eines Vektors $\chi := \varphi - \alpha^{-1} R$ reduziert sich $I_1(\alpha)$ auf

$$I_1(\alpha) = \int d^4\chi [\chi^2 + \alpha^{-2} R^2] \exp\{-\alpha\chi^2\}, \quad (\text{B.41})$$

da der Term linear in φ verschwindet. I_0 ist ein Standard-Gauß-Integral in d Dimensionen:

$$I_0(\alpha) = \left[\left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^d = \pi^{d/2} \alpha^{-d/2}. \quad (\text{B.42})$$

Zur Berechnung des ersten Beitrags zu $I_1(\alpha)$ verwenden wir den Trick

$$\int d^d\chi \chi^2 \exp\{-\alpha\chi^2\} = -\frac{d}{d\alpha} \int d^d\chi \exp\{-\alpha\chi^2\} = -\frac{d}{d\alpha} I_0(\alpha). \quad (\text{B.43})$$

Schließlich identifizieren wir $\langle \varphi^2 \rangle$ mit v_α^2 um eine selbstkonsistente Lösung zu erhalten. Auflösen der so erhaltenen Gleichung (B.38) führt auf die verallgemeinerte kubische Gleichung

$$\alpha^3 - (1 - 2\lambda)\alpha^2 - d \cdot \lambda \alpha = 2\lambda R^2. \quad (\text{B.44})$$

Einen Vorschlag φ_{trial} für das zu aktualisierende Higgs-Feld erhält man nun, indem zunächst vier Gauß-verteilte Zufallsvariablen x^i mit $\sigma_i = 1$ und $\bar{x}^i = 0$ erzeugt werden:

$$\prod_i dx^i p(x^1, x^2, x^3, x^4) = \prod_i dx^i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x^i)^2} \quad (\text{B.45})$$

Dazu wurde ein Box-Müller-Generator in Polardarstellung verwendet, eine mögliche Implementierung findet sich in [PTVF07]. Durch eine Variablentransformation der Form

$$\varphi^i = (2\alpha)^{-\frac{1}{2}} x^i + \alpha^{-1} R^i, \quad i = 1 \dots d \quad (\text{B.46})$$

erhält man den neuen Vorschlag für das Higgs-Feld, welcher dann mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\text{acc}}(\varphi, \alpha) = \exp\{-\lambda(\varphi^2 - v_\alpha^2)^2\} \quad (\text{B.47})$$

zu akzeptieren ist.

Anmerkung: Für skalare Felder, die an eine $SU(N)$ -Yang-Mills-Theorie koppeln und sich unter der adjungierten Darstellung transformieren, gilt $d = N^2 - 1$.

B.3.3 $SU(3)$ -Eichtheorie mit skalarem Feld in adjungerter Darstellung

In Analogie zur Behandlung der $SU(2)$ -Eichtheorie mit einem skalaren Feld in fundamentaler Darstellung wird zunächst die Wirkung des Higgs-Sektors der $SU(3)$ -Eichtheorie mit adjungiertem skalarem Feld (4.42, 4.51) in eine Form gebracht, die es gestattet, auf einfache Weise eine für die Anwendung des Heatbath-Algorithmus notwendige quadratische Ergänzung durchzuführen. Mit den von uns gewählten Konventionen ergibt sich der für den lokalen Update relevante Teil der Wirkung zu

$$S_{\text{Higgs}}[\phi(x)] = \frac{1}{2} \left(\phi(x) - R(x) \right)^2 + \frac{\lambda}{4} \left(\phi^a(x) \phi^a(x) \right)^2. \quad (\text{B.48})$$

Dabei sind die Vektoren $\phi, R \in \mathbb{R}^8$, und für die Komponenten von R gilt:

$$\begin{aligned} R^a(x) &= 2\kappa \sum_{\mu} \text{tr}[T^a U_{\mu}(x) T^b U_{\mu}^{\dagger}(x)] \phi^b(x + \mu) \\ &\quad + \text{tr}[T^b U_{\mu}(x - \mu) T^a U_{\mu}^{\dagger}(x - \mu)] \phi^b(x - \mu) \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

$$= \kappa \sum_{\mu} O_{\mu}^{ab}(x) \phi^b(x + \mu) + O_{\mu}^{ba}(x - \mu) \phi^b(x - \mu). \quad (\text{B.50})$$

Die letzte Zeile macht dabei bereits von der in Gleichung (C.50) noch einzuführenden adjunktiven Darstellung der Links, $U_{\text{adj}}(x)_{\mu}^{ab} = O_{\mu}^{ab}(x)$, Gebrauch. Die Reskalierung der Wirkung mit $\alpha/2$ erfolgt aufgrund der von uns in Kapitel 4 gewählten Konventionen im Vergleich zu (B.30), und die Selbstkopplungskonstante ist nun $\lambda/4$. Daher folgt (wiederum nach Unterdrückung der Ortsabhängigkeit) für die nur scheinbar vom Parameter α abhängige Wirkung

$$S_{\text{Higgs}}[\phi] = \frac{\alpha}{2} \left(\phi - \alpha^{-1} R \right)^2 + \frac{\lambda}{4} \left(\phi^2 - w_{\alpha}^2 \right)^2 + \Gamma_{\alpha}, \quad (\text{B.51})$$

wobei

$$w_{\alpha}^2 := \frac{(\alpha - 1)}{\lambda} \quad \text{und} \quad \Gamma_{\alpha} := \frac{(\alpha - 1)^2}{4\lambda} + \frac{R^2}{2\alpha}. \quad (\text{B.52})$$

Die Konstante Γ_{α} ist irrelevant für die lokale Aktualisierung des Skalarfeldes und wird daher ignoriert, wir finden folglich

$$p_{\text{trial}}(\phi, \alpha) = \mathcal{N}^{-1} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{2} (\phi - \alpha^{-1} R)^2 \right\} \quad (\text{B.53})$$

mit passender Normierung \mathcal{N} , sowie die veränderte kubische Gleichung

$$\alpha^3 - \alpha^2 - 8\lambda\alpha - \lambda R^2 = 0. \quad (\text{B.54})$$

Die Transformation der wie in (B.45) generierten Gauß'schen Zufallsvariablen x^a auf die Komponenten des skalaren Feldes in adjungerter Darstellung lautet

$$\phi^a = \alpha^{-\frac{1}{2}} x^a + \alpha^{-1} R^a, \quad a = 1 \dots 8, \quad (\text{B.55})$$

und der auf diese Weise generierte Vorschlag für ein neues Higgs-Feld wird in einem nachgelagerten Metropolis-Schritt mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\text{acc}}(\phi, \alpha) = \exp \left\{ -\frac{\lambda}{4} (\phi^2 - w_{\alpha}^2)^2 \right\} \quad (\text{B.56})$$

akzeptiert.

B.4 Overrelaxation und mikrokanonische Reflexion

Eine spezielle Möglichkeit, im Rahmen eines Metropolis-Update-Algorithmus einen Vorschlag für ein zu aktualisierendes Element $\varphi(x)$ zu erzeugen, ist unter dem Namen *Overrelaxation* bekannt. Das Ziel ist die Bekämpfung des als *critical slowing down* bekannten Phänomens, welches insbesondere in der Nähe des kritischen Punktes einer Feldtheorie auftritt und eine mitunter extrem lange Thermalisierungsphase in der Markov-Kette hervorruft, was durch ein (dynamisches) Skalierungsgesetz für die (integrierte) Autokorrelationszeit $\tau_{\text{int}}(A)$ einer Observablen A ausgedrückt werden kann:

$$\tau_{\text{int}}(A) \propto \xi^{z_A}. \quad (\text{B.57})$$

Ein effizienter Algorithmus wird durch eine geringe Autokorrelationszeit charakterisiert. Falls es sich im einfachsten Fall bei $\langle A \rangle$ um den exakten (statistischen) Wert einer *primären* Observablen handelt, die nach Gleichung (B.2) als Mittel von N innerhalb einer Markov-Kette $\{\varphi\}_n$ aufeinander folgenden Messwerten a_n approximiert wird, so berechnet sich die (diagonale) Korrelationsfunktion zu

$$C_{AA}(t) = \langle (a_n - A)(a_{n+t} - A) \rangle, \quad (\text{B.58})$$

und die zugehörige *integrierte Autokorrelationszeit* ist definiert zu

$$\tau_{\text{int}}(A) := \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \frac{C_{AA}(t)}{C_{AA}(0)}. \quad (\text{B.59})$$

Für den statistischen Fehler σ_A des Schätzwertes (B.2) gilt dabei

$$\sigma_A^2 = 2 \tau_{\text{int}}(A) \cdot \frac{V_A}{N}, \quad (\text{B.60})$$

wobei die „gewöhnliche“ Varianz von $\langle A \rangle$ mit $V_A := C_{AA}(0)$ bezeichnet wird. Sind die Konfigurationen der Markov-Kette vollständig unkorreliert, so gilt $C_{AA}(t) \propto \delta_{t0}$ und man findet die bekannte Relation $\sigma_A^2 = \langle (a_k - A)^2 \rangle / N$. Im Allgemeinen wird die Berechnung der verallgemeinerten, nicht-diagonalen Kovarianzmatrix $C_{AB}(t)$ erforderlich, um eine Abschätzung des Fehlers von *sekundären* Observablen $f(A, B)$ zu erhalten. Dieser Fall wird in [Wol04] diskutiert, hier findet sich auch die Implementierung einer Routine zur Abschätzung von (B.59) durch verschiedene selbstkonsistente und automatisierbare Trunkierungen der Summation, die in unseren Untersuchungen zur Autokorrelation verschiedener Observablen herangezogen wurde.

Für *lokale* Update-Algorithmen nimmt der dynamische kritische Exponent z üblicherweise Werte von $z \simeq 2$ an, so dass bei divergierender Korrelationslänge ξ am Phasenübergang die Unterschiede von einer Konfiguration zur nächsten minimal werden und somit keine Konvergenz mehr eintreten kann. Eine Verringerung der Autokorrelationszeit kann nun dadurch erzielt werden, dass ein Vorschlag $\varphi'(x)$ für eine zu aktualisierende Variable $\varphi(x)$ so gewählt wird, dass sich diese maximal von $\varphi(x)$ unterscheidet. Die zugrunde liegende Idee geht auf Adler [Adl81] zurück und wurde für multi-quadratische Wirkungen entwickelt: Bei der Annäherung an ein lokales Minimum der Wirkung wählt man zunächst eine Transformation, die das Funktional tatsächlich minimiert, und erlaubt danach durch Wahl einer Potenz $\omega \in [1, 2]$ für diesen Schritt, das Minimum wieder zu verlassen, bzw. über es hinauszuschießen (*overrelaxation*). Der Grenzfall $\omega = 2$ entspricht dabei einer Reflektion am Minimum und führt

auf das „Spiegelbild“ von $\varphi(x)$. Der Parameter ω kann so eingestellt werden, dass die Autokorrelationszeit interessierender Observablen minimiert wird.

Betrachten wir das Vorgehen am Beispiel der $SU(2)$ -Eichtheorie anhand von Gleichung (B.14). $\bar{B}_\mu^\dagger(x)$ ist dabei das Element, welches lokal die Wirkung (2.39) minimiert. Dann ist die Transformation, welche nach Anwendung auf $U_\mu(x)$ zum Minimum der Wirkung führt, gegeben durch $\bar{B}_\mu^\dagger(x)U_\mu^\dagger(x)$. Zweifache Anwendung ($\omega = 2$) führt auf die Form [Cre87]

$$U'_\mu(x) = [\bar{B}_\mu^\dagger(x)U_\mu^\dagger(x)]^2 U_\mu(x) = \bar{B}_\mu^\dagger(x)U_\mu^\dagger(x)\bar{B}_\mu^\dagger(x), \quad (\text{B.61})$$

was eine Involution darstellt: $U_\mu(x) = \bar{B}_\mu^\dagger(x)U'^\dagger_\mu(x)\bar{B}_\mu^\dagger(x)$. Daher kürzen sich die beiden Faktoren P_{trial} in (B.9) und die Transformation erfüllt *detailed balance*. Außerdem ändert sich durch Verwendung des neuen Elements die Wirkung nicht (vgl. B.14), so dass dieser Vorschlag immer akzeptiert wird, es gilt $P_{\text{acc.}} = 1$. Ein solcher Schritt ist nicht ergodisch und wird als *mikrokanonische Reflexion* bezeichnet, da hierdurch statt des kanonischen Ensembles ein mikrokanonisches Ensemble zu fester Wirkung erzeugt wird. Üblicherweise wird daher eine feste Kombination von Heatbath- bzw. Metropolisschritten und mikrokanonischen Update-Schritten an allen Gitterpunkten durchgeführt, um die Ergodizität des Algorithmus wiederherzustellen. Die Anwendung einer solchen Kombination für jedes Element auf dem Gitter wird als *supersweep* bezeichnet. Für die $SU(3)$ -Eichtheorie wird das in [BW87] beschriebene Vorgehen der sukzessiven Anwendung des gerade beschriebenen Verfahrens auf alle drei Einbettungen von $SU(2)$ -Untergruppen angewandt, was sowohl elegant als auch numerisch leicht durchführbar ist. Ein auf diese Weise erhaltenes Element U' wird in einem nachgelagerten Schritt gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ausgewählt, deren Boltzmannfaktor den noch relevanten Teil der Wirkung enthält.

Es sollte darauf hingewiesen werden, dass Vorschläge für die Anwendung von Overrelaxation-Schritten in $SU(N)$ -Eichtheorien existieren, die nicht auf irgendwelche Untergruppeneinbettungen zurückgreifen, und dennoch zu einem schnelleren Abbau von Korrelationen führen können [Cre87, dFJ05]. Da sich diese Untersuchungen jedoch nur auf reine $SU(N)$ -Yang-Mills-Theorien beziehen, und eine merkliche Reduktion von Autokorrelationszeiten in den untersuchten Observablen außerdem erst für $N \geq 4$ beobachtet wurde, haben wir derartige Algorithmen in unseren Simulationen nicht eingesetzt.

Für das $SU(2)$ -Modell mit fundamentalem Skalarfeld $\varphi(x)$ ergibt sich die lokale Overrelaxation-Transformation ($\omega = 2$) im Higgs-Sektor zu

$$\varphi'(x) = 2\alpha^{-1}R(x) - \varphi(x). \quad (\text{B.62})$$

Die Vorschlagswahrscheinlichkeit $p_{\text{trial}}(\varphi', \alpha)$ erfährt durch diese Transformation gegenüber $p_{\text{trial}}(\varphi, \alpha)$ in Gleichung (B.35) keinerlei Änderung, daher muss das gespiegelte Element anschließend einfach mit Wahrscheinlichkeit $p_{\text{acc}}(\varphi', \alpha)$ akzeptiert werden.

Die Verallgemeinerung auf den Fall der $SU(3)$ -Eichtheorie mit einem skalaren Feld $\phi(x)$ in adjungierter Darstellung verläuft nach (B.53) und (B.56) völlig analog.

Anhang C

Eichfixierung auf dem Gitter als Minimierungsproblem

C.1 Landau-Eichung und Coulomb-Eichung

Auf dem Gitter wird die Aufgabe der Fixierung einer Eichung für eine gegebene Konfiguration von Links $\{U\}$ wie im Kontinuum ebenfalls auf die Minimierung eines eichfixierenden Funktionals bezüglich einer Eichtransformation $\{\Omega\}$ zurückgeführt. Das Problem besitzt die generischen Form

$$\mathcal{F}_U[\Omega] = \sum_x \sum_{\mu=1}^l \text{Re} \operatorname{tr} [\mathbb{1} - U_\mu^\Omega(x)] \xrightarrow{\Omega} \min. \quad (\text{C.1})$$

Die Formulierung der Feldtheorie auf dem euklidischen Raum E_4 ermöglicht eine vereinheitlichte Darstellung des Minimierungsproblems, im Falle der Coulomb-Eichung ist die Summation über die Kanten des Raumzeit-Gitter in (C.1) bis $l = 3$ auszuführen, für die Realisierung der Landau-Eichung gilt $l = 4$. Anstatt wie im Rahmen der Kontinuumsformulierung eine Entwicklung des Funktionals (1.94) nach Potenzen von $\omega(x)$ durchzuführen, wollen wir hier einen anderen Weg beschreiten um einen Ausdruck für die Eichfixierungsbedingung, sowie die zweite Variation auf dem Gitter zu erhalten. Um zu zeigen, dass die Minimierung von (C.1) bezüglich der die Eichtransformation vermittelnde Funktion $\Omega(x)$ auf die Eichbedingung der Coulomb- bzw. Landau-Eichung führt, parameterisieren wir diese Funktion durch

$$\Omega(\tau, x) := \exp\{i\tau\omega(x)\}, \quad \omega(x) = \omega^a(x)T^a \in \mathfrak{su}(N), \quad \tau \in \mathbb{R}. \quad (\text{C.2})$$

In dieser Formulierung lauten die hinreichenden Bedingungen für ein Minimum des Funktionals

$$\frac{d}{d\tau} \mathcal{F}_{U_{\min}}[\omega, \tau] \Big|_{\tau=0} = 0, \quad \frac{d^2}{d\tau^2} \mathcal{F}_{U_{\min}}[\omega, \tau] \Big|_{\tau=0} \geq 0, \quad \forall \omega, \quad (\text{C.3})$$

wobei $U_{\min} := U^{\Omega_{\min}(U)}$. Um die Abhängigkeit der eichtransformierten Links vom Parameter τ zu unterstreichen, schreiben wir

$$U_\mu^\tau(x) = \Omega(\tau, x)U_\mu(x)\Omega^\dagger(\tau, x + \mu), \quad (\text{C.4})$$

und berechnen daraus

$$\frac{d}{d\tau} U_\mu^\tau(x) = i\omega(x)U_\mu^\tau(x) - iU_\mu^\tau(x)\omega(x + \mu). \quad (\text{C.5})$$

Für die Extremalbedingung findet sich also:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{F}_U[\Omega, \tau] &= - \sum_x \sum_{\mu=1}^l \operatorname{Re} \operatorname{tr} \left[i\omega(x) U_\mu^\tau(x) - iU_\mu^\tau(x)\omega(x+\mu) \right] \\ &= \sum_x \operatorname{Im} \operatorname{tr} \left[\omega(x) \sum_\mu (U_\mu^\tau(x) - U_\mu^\tau(x-\mu)) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Auflösung des Imaginärteils liefert unter Verwendung der Relation (C.48) die explizite Darstellung

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{F}_U[\Omega, \tau] &= - \frac{i}{2} \sum_x \operatorname{tr} [\omega(x) \left[\sum_\mu (U_\mu^\tau(x) - U_\mu^{\tau\dagger}(x)) - (U_\mu^\tau(x-\mu) - U_\mu^{\tau\dagger}(x-\mu)) \right]] \\ &= a \sum_x \operatorname{tr} \left[\omega(x) \sum_\mu A_\mu^\tau(x) - A_\mu^\tau(x-\mu) \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Fassen wir wie in Gleichung (1.94) die Summation über alle Gitterpunkte und die Bildung der Spur im Farbraum zusammen, so erhalten wir für die (erste) Variation von $\mathcal{F}_U[\Omega, \tau]$ schließlich

$$\frac{d}{d\tau}\mathcal{F}_U[\Omega, \tau] = a^2 \operatorname{Tr}(\omega \partial A^\tau), \quad (\text{C.8})$$

wobei sich wiederum der Fall $l = 3$ in der Kontraktion $\partial A^\tau := \sum_{\mu=1}^l \partial_\mu A_\mu^\tau$ auf die Coulomb-Eichung, der Fall $l = 4$ auf die Landau-Eichung bezieht. Es ist anzumerken, dass die Form des eichfixierenden Funktionals (C.6) in der Gitterformulierung der Eichtheorie entscheidend von der Definition des Eichfeldes auf dem Gitter abhängt. Da die fundamentalen Größen in der zugrunde liegenden Wilson'schen Formulierung Elemente der Eichgruppe \mathcal{G} sind, ist das Eichpotential eine abgeleitete Größe, und es existieren verschiedene Definitionen von A , die sich formal nur um irrelevante Terme der Ordnung $\mathcal{O}(a)$ voneinander unterscheiden. Die von uns verwendete Konvention (C.48) hat sich heute größtenteils als Standard etabliert, es gibt aber keinen theoretischen Grund, diese Definition anderen Varianten vorzuziehen. Tatsächlich konnte gezeigt werden, dass Green'sche Funktionen, die unter der Verwendung von zwei verschiedenen Definitionen des Eichpotentials konstruiert werden, zueinander proportional sind, was die Eindeutigkeit des Gluonenfeldes im Kontinuumslimes garantiert [GPP⁺01].

An einem stationärer Punkt $\{U^{\Omega_{\min}}\}$ des eichfixierenden Funktionals verschwindet die Variation desselben, daher erfüllt das daraus abgeleitete Gitterreichfeld $A_{\min}^{\tau=0}$ die Transversalitätsbedingung $\partial A_{\min}^{\tau=0} = 0$. Folglich ist es wünschenswert, Abweichungen von der Stationaritätsbedingung kontrollieren zu können, die während der iterativen Suche nach $\{\Omega_{\min}\}$ auftreten und anzeigen, dass noch kein Extremum von (C.1) gefunden wurde. Die explizite Darstellung des Imaginärteils in (C.6) führt wie oben gezeigt zum Auftreten von inversen Links, was die Definition von

$$B(x) := \sum_{\mu=1}^l \left[U_\mu(x) + U_\mu^\dagger(x-\mu) \right] \quad (\text{C.9})$$

motiviert, denn unter Verwendung von (C.48) erhält man mit den in Anhang D.2 angegebenen Relationen für die hermiteschen Generatoren T^b für die Größe

$$\Delta_x^b := 2 \operatorname{Im} \operatorname{tr}[T^b B(x)] = a^2 \partial_\mu A_\mu^b(x) + \mathcal{O}(a^3), \quad (\text{C.10})$$

und somit ein Maß für die Güte der Realisierung der Transversalitätsbedingung für die Eichfelder. Genau genommen handelt es sich hierbei um ein Kontinuum von Eichbedingungen (für jeden Raumzeitpunkt eine), und um nur eine einzige Bedingung stellen zu müssen, definieren wir die Größe

$$\delta^2 := \frac{1}{N} \sum_{x=1}^N \sum_{b=1}^{N_c^2-1} [\Delta_x^b]^2, \quad N = N_t \times N_s^3, \quad (\text{C.11})$$

deren Analogon in der Kontinuumsfeldtheorie mittels eines Lagrangeschen Multiplikators durch Modifizierung des ursprünglichen Variationsproblems in der zugehörigen klassischen Wirkung berücksichtigt werden kann [Roe91]. Im Kontinuumslimes reduziert sich (C.11) auf einen eichfixierenden Term der Form

$$\delta_c^2 = \frac{1}{V} \int d^D x [\partial A^b(x)]^2. \quad (\text{C.12})$$

Im Falle der Coulomb-Eichung wurde die Eichung sukzessiv in jeder Zeitschicht separat fixiert, so dass nach Abschluss dieser Prozedur ein Gluonenfeld auf dem Gitter vorliegt, welches der dreidimensionalen Transversalitätbedingung genügt. Die noch bestehende residuelle Eichfreiheit wurde nicht weiter fixiert (vgl. die Diskussion in Kapitel 1.3.3). Im Falle der Landau-Eichung handelt es sich bei den mit der Eichfixierungsbedingung kompatiblen Eichtransformationen um ausschließlich globale Transformationen $\Omega \in G$.

Zur Berechnung von $\frac{d^2}{d\tau^2} \mathcal{F}_{U_{\min}}[\omega, \tau]$ ist nach Gleichung (C.8) die Kenntnis von $\frac{d}{d\tau} A_\mu^\tau(x)$ erforderlich. Im Kontinuum ist diese Ableitung des eichtransformierten Potentials (für $\tau = 0$) gegeben durch die kovariante Ableitung bezüglich $\omega(x)$:

$$\left. \frac{d}{d\tau} \mathcal{A}_\mu^\Omega(x, \tau) \right|_{\tau=0} = D_\mu[\mathcal{A}] \omega(x) = \partial_\mu \omega(x) - ig[\mathcal{A}_\mu(x), \omega(x)]. \quad (\text{C.13})$$

Auf dem Gitter berechnen wir also unter Verwendung von (C.5) und (C.48) die Ableitung

$$a \frac{d}{d\tau} A_\mu^\tau(x) = 2 \operatorname{Im} \operatorname{tr} \left[\frac{d}{d\tau} U_\mu^\tau(x) T^a \right] \quad (\text{C.14})$$

$$= -\frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\{\omega(x + \mu) - \omega(x), T^a\} (U_\mu^\tau(x) + U_\mu^{\tau\dagger}(x)) \right. \quad (\text{C.15})$$

$$\left. + [\omega(x + \mu) + \omega(x), T^a] (U_\mu^\tau(x) - U_\mu^{\tau\dagger}(x)) \right]. \quad (\text{C.16})$$

Definieren wir den symmetrischen Anteil \mathfrak{S} , sowie den anti-symmetrischen Anteil \mathfrak{A} zu

$$\mathfrak{S}_\mu[U^\tau]^{ab}(x) := \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[\{T^a, T^b\} (U_\mu^\tau(x) + U_\mu^{\tau\dagger}(x)) \right] \quad (\text{C.17})$$

$$\mathfrak{A}_\mu[U^\tau]^{ab}(x) := \frac{1}{2} \operatorname{tr} \left[[T^a, T^b] (U_\mu^\tau(x) - U_\mu^{\tau\dagger}(x)) \right], \quad (\text{C.18})$$

so lässt sich die kovariante Ableitung auf dem Gitter in der Form

$$a [D_\mu[U^\tau] \omega]^a(x) = \mathfrak{S}_\mu^{ab}[U^\tau](x) (\omega^b(x) - \omega^b(x + \mu)) + \mathfrak{A}_\mu^{ab}[U^\tau](x) (\omega^b(x) + \omega^b(x + \mu)) \quad (\text{C.19})$$

darstellen, was sich für $\tau = 0$ in führender Ordnung einer Entwicklung nach der Gitterkonstanten a auf

$$[D_\mu[U] \omega]^a(x) = -\mathfrak{S}_\mu^{ab}[U](x) \partial_\mu \omega^b(x) + \frac{1}{2} f^{abc} A_\mu^b(x) (\omega^c(x + \mu) + \omega^c(x)) \quad (\text{C.20})$$

reduziert. Für die Minimumsbedingung (C.3) finden wir also

$$\frac{d^2}{d\tau^2} \mathcal{F}_{U_{\min}}[\omega, \tau] \Big|_{\tau=0} = a^2 \operatorname{Tr}(\omega [-\partial D[U_{\min}]] \omega) \geq 0, \quad (\text{C.21})$$

folglich ist der Faddeev-Popov-Operator auf dem Gitter für ein Minimum von $\mathcal{F}_U[\Omega]$ positiv definit. Die Menge aller Minima $\{U_{\min}\}$ des Funktionals (C.1) längs eines Eichorbits ist Ω_0 , die erste Gribov-Region auf dem Gitter, und die Menge aller absoluten Minima entspricht der *Fundamental Modular Region* (FMR). Durch Verwendung von lokalen Update-Algorithmen alleine ist die systematische Bestimmung des absoluten Minimums von $\mathcal{F}_U[\Omega]$ für eine vorgegebene Konfiguration $\{U\}$ nicht möglich, da das Problem der eindeutigen Fixierung einer Eichung äquivalent ist zum Problem der Bestimmung des Grundzustands eines Spin-Glases. Für $D \geq 3$ handelt es sich dabei um ein NP-hartes Problem, lediglich in $D = 2$ Dimensionen bietet z.B. der von Edmonds [Edm65b, Edm65a] beschriebene Algorithmus die Möglichkeit zur Lösung in polynomialem Zeit (vgl. die Diskussion in Kapitel 3). Eine Verbesserung der Situation kann jedoch durch den Einsatz eines von uns verwendeten Overrelaxation-Algorithmus erzielt werden. Eine weiterführende Diskussion des Problems der im Rahmen der Eichfixierung auf dem Gitter auftretenden Gribov-Kopien, sowie eine Übersicht über verschiedene mögliche Algorithmen zur Behandlung desselben findet sich in [GPP⁺01].

C.1.1 Die Eichgruppen $U(1)$, $SU(2)$ & $SU(3)$

Zur Minimierung des eichfixierenden Funktionals (C.1) wurde ein *Iteration-Overrelaxation*-Algorithmus verwendet. Dabei wird angestrebt, iterativ sowohl das Funktional lokal zu minimieren, als auch gleichzeitig den als *critical slowing down* bekannten Effekt der Verringerung der Konvergenzgeschwindigkeit bei Annäherung an ein Minimum zu minimieren. Zu diesem Zweck wird in einem ersten Schritt die Änderung des lokalen Funktionals $\mathcal{F}_U[\Omega(x)]$ bei Durchführung einer Eichtransformation an einem festen Gitterpunkt x untersucht. Hierbei werden $\Omega(x)$, sowie die zugehörige Inverse $\Omega^\dagger(x)$, als unabhängige Variablen aufgefasst und $\Omega^{\dagger ab}(z) = \Omega^{ab}(z) = \delta^{ab}$ für $z \neq x$ zugrunde gelegt. Aufgrund von $\operatorname{Re} \operatorname{tr}(M) = \operatorname{Re} \operatorname{tr}(M^\dagger)$, $M_{ik} \in \mathbb{C}$ lässt sich das Problem auf die *lokale Maximierung* von

$$\mathcal{F}_U[\Omega(x)] = \operatorname{Re} \operatorname{tr}[\Omega(x)B(x)] \quad (\text{C.22})$$

mit dem in (C.9) definierten $B(x)$ zurückführen. Die Lösung $\Omega(x)$ wird in einem zweiten Schritt modifiziert, $\Omega(x) \rightarrow \Omega^\eta(x)$, bevor eine Eichtransformation derjenigen Links durchgeführt wird, die eine Verbindung zum Gitterpunkt x aufweisen.

$U(1)$ –Eichtheorie in Coulomb-Eichung

Im Falle der $U(1)$ –Eichtheorie ergibt sich aufgrund der abelschen Natur folgende Veränderung für das eichfixierende Funktional (C.1):

$$\mathcal{F}_U[\Omega] = \sum_{\mathbf{x}, t} \sum_{i=1}^3 \operatorname{Re} [1 - U_i^\Omega(\mathbf{x}, t)]. \quad (\text{C.23})$$

Diese Änderung tritt auch im lokalen Funktional (C.22) auf, die Maximierung wird erreicht durch die Wahl

$$\Omega(x) = \bar{B}^\dagger(x), \quad \bar{B}(x) = \|B(x)\|^{-1} B(x) \in U(1). \quad (\text{C.24})$$

Durch Einführung eines sogenannten *Overrelaxation-Parameters* η kann die Konvergenzgeschwindigkeit des Eichfixierungsalgorithmus optimiert werden. Dadurch ist es möglich, Transformationen durchzuführen, die im Vergleich zu $\Omega(x)$ eine größere Schrittweite bei der Annäherung an ein Minimum von (C.1) erlauben und es gestatten, über selbiges hinauszuschießen. Dies wird im Falle der $U(1)$ -Eichtheorie durch Übergang zur Polardarstellung $\Omega(x) = \exp(i\varphi(x))$ und anschließende Ersetzung $\varphi \rightarrow \varphi^\eta := \eta\varphi$ erreicht. In unseren Simulationen wurde dabei durchgehend ein Wert von $\eta = 1.5$ verwendet.

Die Abweichung von der Transversalitätsbedingung, sowie die für die Abbruchbedingung maßgebliche Größe erhalten die Gestalt

$$\delta^2 = \frac{1}{N_{\text{in}}} \sum_x \Delta_x^2, \quad \Delta_x = \sum_{i=1}^3 \text{Im} [U_i^\Omega(x) + U_i^{\Omega\dagger}(x-i)], \quad (\text{C.25})$$

wobei die Summation im Falle der Verwendung von räumlich offenen Randbedingungen auf die $N_{\text{in}} = (N_i - 2)^3 \times N_t$ Gitterpunkte im Inneren des Gitters einzuschränken ist.

$SU(2)$ -Eichtheorie

Verwenden wir die Normierungskonvention (B.18), so wird das lokale eichfixierende Funktional $\mathcal{F}_U[\Omega(x)]$, welches im Falle der $SU(2)$ -Eichtheorie die Gestalt (C.22) besitzt, durch Wahl von

$$\Omega(x) = \bar{B}^\dagger(x) \quad (\text{C.26})$$

maximiert. Der Übergang zur Polardarstellung von Elementen der Gruppe $SU(2)$ gemäß

$$\bar{B} = \cos(\vartheta) \mathbb{1} + i \sin(\vartheta) \hat{n} \cdot \vec{\sigma}, \quad \hat{n}^a = \|\vec{b}\|^{-1} b^a, \quad a = 1 \dots 3 \quad (\text{C.27})$$

ermöglicht die Extraktion des Winkels ϑ und somit auf einfache Weise die Konstruktion einer Transformation, welche über das lokale Maximum hinauszuschießen vermag. Die Matrix, die diesen Overrelaxation-Schritt vermittelt, wird als

$$\Omega^\eta = \cos(\vartheta_\eta) \mathbb{1} - i \sin(\vartheta_\eta) \hat{n} \cdot \vec{\sigma}, \quad \vartheta_\eta := \eta \vartheta \quad (\text{C.28})$$

konstruiert. Die Wahl eines Wertes von $\eta = 1.7$ für die in unseren Simulationen betrachteten Kopplungskonstanten orientierte sich an den Ergebnissen einer in [CM96] vorgestellten Analyse verschiedener Algorithmen zur Fixierung der Landau-Eichung.

$SU(3)$ -Eichtheorie

Eine direkte Übertragung des im Rahmen der $SU(2)$ -Eichtheorie erläuterten Vorgehens zur Maximierung des lokalen Funktionals (C.22) scheitert an der Tatsache, dass die dabei verwendete Relation $\sum_i g^i \propto g$ für $g, g^i \in SU(3)$ keine Gültigkeit mehr besitzt. Dies ist auch der Grund dafür, dass bei Simulationen von $SU(N)$ -Eichtheorien ($N \geq 3$) Heatbath-Algorithmen nicht in direkter Form zum Einsatz kommen können. Ein möglicher Ausweg wurde von Cabibbo und Marinari [CM82a] aufgezeigt: Dabei werden sukzessive verschiedene Einbettungen von $SU(2)$ -Untergruppen in die $SU(N)$ betrachtet, für deren Behandlung wiederum ein standardisierter Heatbath-Algorithmus verwendet werden kann [Cre80]. Die von uns verwendete Methode zur Fixierung der Coulomb- bzw. Landau-Eichung in der $SU(3)$ -Eichtheorie greift auf diese Technik zurück und soll nun kurz erläutert werden.

Wie definieren zunächst die folgenden drei verschiedenen Einbettungen eines Gruppen-elements $U = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ u_3 & u_4 \end{pmatrix} \in SU(2)$ in ein entsprechendes Gruppenelement $\Omega^{(i)} \in SU(3)$:

$$\Omega^{(1)} := \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & 0 \\ u_3 & u_4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Omega^{(2)} := \begin{pmatrix} u_1 & 0 & u_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ u_3 & 0 & u_4 \end{pmatrix}, \quad \Omega^{(3)} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & u_2 \\ 0 & u_3 & u_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.29})$$

Die gesamte Transformation $\Omega(x) \in SU(3)$, welche das Funktional (C.22) maximiert, wird als Hintereinanderausführung $\Omega(x) = \prod_k \Omega^{(k)}(x)$ konstruiert. Für die drei verschiedenen Einbettungen erhalten wir

$$\mathcal{F}_U[\Omega^{(k)}(x)] = \operatorname{Re} \operatorname{tr} [\Omega^{(k)}(x) B(x)] = \operatorname{Re} \operatorname{tr} [U(x) B^{(k)}(x)]_{2 \times 2} + \operatorname{Re}(b^{(k)}(x)), \quad (\text{C.30})$$

wobei $B^{(k)}$ die mit der in $\Omega^{(k)}$ eingebetteten Matrix U durch Multiplikation zu kontrahierende Untermatrix mit $b_{ij} \in \mathbb{C}$ ($i, j = 1 \dots 3$) und $b^{(k)}$ das Element b_{jj} ($j = 4 - k$) der Matrix B darstellt:

$$B^{(1)} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \quad B^{(2)} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{13} \\ b_{31} & b_{33} \end{pmatrix}, \quad B^{(3)} = \begin{pmatrix} b_{22} & b_{23} \\ b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.31})$$

Für jede Matrix $M \in \mathcal{M}(2, \mathbb{C})$ existiert nach (D.33) eine Zerlegung der Form

$$M = R + i S = r \bar{R} + i s \bar{S}, \quad r = \det(R)^{\frac{1}{2}}, \quad s = \det(S)^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{R}^+, \quad \bar{R}, \bar{S} \in SU(2). \quad (\text{C.32})$$

Beginnend mit $B^{(1)}(x)$ erhalten wir

$$\operatorname{tr} [U(x) B^{(1)}(x)]_{2 \times 2} = r \operatorname{tr} [U(x) \bar{R}^{(1)}(x)]_{2 \times 2} + i s \operatorname{tr} [U(x) \bar{S}^{(1)}(x)]_{2 \times 2}, \quad (\text{C.33})$$

und somit aufgrund der Reellwertigkeit der Spur im Falle der $SU(2)$:

$$\mathcal{F}_U[\Omega^{(1)}(x)] = r \operatorname{tr} [U(x) \bar{R}^{(1)}(x)]_{2 \times 2} + \operatorname{Re}(b_{33}(x)). \quad (\text{C.34})$$

Die lokale Maximierung geschieht durch Wahl von $U(x) = \bar{R}^{(1)}(x)$. Der Wiedereinbettung in $\Omega^{(1)}(x)$ geht die in (C.28) beschriebene Modifizierung durch Einführung eines Overrelaxation-Parameters η voraus, anschließend wird die Transformation durchgeführt, welche auch Auswirkungen auf die Form von (C.9) hat. Aus diesem modifizierten $B(x)$ wird nun $B^{(2)}(x)$ gewonnen, und daraus $\Omega^{(2)}(x)$ konstruiert, modifiziert und angewandt. Sind alle drei Einbettungen an diesem Punkt des Gitters herangezogen worden, so wird die iterative Maximierung von $\mathcal{F}_U[\Omega]$ an einem benachbarten Gitterpunkt fortgesetzt. Neben (C.11) kann auch die Größe

$$\theta^2 = \frac{1}{3N} \sum_{x=1}^N \sum_{k=1}^3 \vartheta_\eta^{(k)}(x)^2 \quad (\text{C.35})$$

während des Eichfixierungsprozesses überwacht werden, um eine Kontrolle über die Güte der Realisierung der Eichfixierungsbedingung zu erhalten. Am stationären Punkt weichen die Eichtransformationen $\{\Omega^\eta\}$ nämlich *de facto* nicht mehr von der Identität ab. Tatsächlich hatte sich θ^2 bei Erreichen des Abbruchkriteriums von $\delta^2 < 10^{-12}$ in unseren Simulationen auf $\theta^2 \simeq 5 \cdot 10^{-15}$ stabilisiert.

C.2 Direkte Maximale Zentrums-Eichung (DMCG)

Bei der Implementierung der sogenannten *Direkten Maximalen Zentrums-Eichung* (DMCG) folgen wir der in [DDFG⁺98] vorgeschlagenen Methode, eingebettet in eine Prozedur, die sich als Kombination eines *simulated annealing algorithm*, sowie eines Overrelaxation-Algorithmus ergibt. Die optimale Eichtransformation $\{\Omega_{\min}\}$, die zu einem Extremum des eichfixierenden Funktionals führt, wird dabei als Folge von Eichtransformationen $\Omega_i(x)$ konstruiert, welche jeweils das eichfixierende Funktional

$$\mathcal{F}_x^{\text{MCG}}[\Omega(x)] = \frac{1}{4} \left(\sum_{\mu} \text{tr}[\Omega(x)U_{\mu}(x)]^2 + \text{tr}[U_{\mu}(x - \mu)\Omega^{\dagger}(x)]^2 \right) \quad (\text{C.36})$$

lokal maximieren und sofort durchgeführt werden, bevor man sich dem nächsten Gitterpunkt zuwendet. Angenommen, der Algorithmus erfülle nach m derartigen Durchgängen durch das gesamte Gitter eine noch zu stellende Abbruchbedingung, so ist die resultierende, iterativ konstruierte Eichtransformation $\{\Omega_{\min}\}$ gegeben durch $\{\prod_{i=1}^m \Omega_i(x) | m \in \mathbb{N}, x \in [1, N^4]\}$. Wir verwenden folgende Parametrisierung der Eichtransformationen sowie der Links:

$$\Omega(x) = \omega_4 \mathbb{1} - i \vec{\omega} \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{C.37})$$

$$U_{\mu}(x) = u_4(\mu) \mathbb{1} + i \vec{u}(\mu) \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{C.38})$$

$$U_{\mu}(x - \hat{\mu}) = u_4(\mu + 4) \mathbb{1} - i \vec{u}(\mu + 4) \cdot \vec{\sigma}. \quad (\text{C.39})$$

Dies führt auf

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_x^{\text{MCG}}[\Omega(x)] &= \sum_{\mu} \left(\left\{ \sum_{k=1}^4 \omega_k u_k(\mu) \right\}^2 + \left\{ \sum_{k=1}^4 \omega_k u_k(\mu + 4) \right\}^2 \right) \\ &=: \sum_{l=1}^8 \left(\sum_{k=1}^4 \omega_k u_k(l) \right)^2. \end{aligned} \quad (\text{C.40})$$

Die Maximierung dieses Ausdrucks unter der Nebenbedingung $\Omega(x) \in SU(2)$ geschieht durch Einführung eines Lagrange'schen Multiplikators λ ,

$$\mathcal{F}_{\lambda}[\Omega(x)] = \mathcal{F}_x^{\text{MCG}}[\Omega(x)] + \lambda \left(\sum_{k=1}^4 \omega_k^2 - 1 \right), \quad (\text{C.41})$$

und die sich daraus ergebenden 4+1 Bedingungen für ein Maximum (zunächst nur Extremum) des Funktionals (C.36) lauten:

$$\sum_{k=1}^4 \sum_{l=1}^8 u_i(l) u_k(l) \omega_k = \lambda \omega_i, \quad \sum_{k=1}^4 \omega_k^2 = 1. \quad (\text{C.42})$$

Damit ist die Implementierung der DMCG auf die Lösung eines vierdimensionalen, reellen und symmetrischen Eigenwertproblems der Form

$$M \omega = \lambda \omega, \quad M_{ik} = \sum_{l=1}^8 u_i(l) u_k(l) \quad (\text{C.43})$$

zurückgeführt. Das Standardverfahren der Wahl war die iterative Lösung mittels des Jacobi-Verfahrens [PTVF07].

Das Eichfixierungsfunktional (2.22) reagiert auf eine Veränderung des lokalen Funktionals unter Nebenbedingung (C.41) gemäß

$$\mathcal{F}_x^{\text{MCG}} = \omega^T M \omega - \lambda (\omega^T \omega - 1), \quad \omega = \begin{pmatrix} \omega_4 \\ \vec{\omega} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.44})$$

Bezeichnen wir die vier Eigenvektoren und zugehörigen Eigenwerte der Matrix M mit e_k, λ_k , so liefert die Wahl des Eigenvektors $\omega = e_{\max}$ zum größten Eigenwert λ_{\max} offensichtlich lokal den maximalen Beitrag zum Eichfixierungsfunktional (2.22). Hier weichen wir von der Standardprozedur ab, um die in [GPP⁺01] diskutierten Probleme der in [DDFG⁺98] vorgestellten Methode zur Eichfixierung zu überwinden: Mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(\beta_f \lambda_k)$ lassen wir auch die Wahl der anderen Eigenvektoren e_k zu, wobei β_f die in der Klasse der *simulated annealing algorithms* auftretende inverse Temperatur bezeichnet. Eine Abkühlung des Systems wird durch schrittweise Vergrößerung von β_f simuliert, für niedrige Temperaturen wird praktisch ausschließlich der größte Eigenwert gewählt, und im Grenzfall $T \rightarrow 0$ stimmt der Algorithmus wieder mit der Standardmethode überein. Zu Beginn des Abkühlungsvorgangs kann die Suche nach dem globalen Maximum von (2.22) lokal durchaus in einer Richtung e_k orthogonal zum Gradienten des lokalen Funktionals (C.36) voranschreiten. Es besteht daher die Möglichkeit der kurzfristigen Verminderung des Wertes von $\mathcal{F}^{\text{MCG}}[\Omega]$, so dass es dem System ermöglicht wird, die Anziehung des nächstgelegenen Maximums zu überwinden und das globale, statt nur eines lokalen Maximums zu finden. Die auf diese Weise bestimmten lokalen Eigenvektoren $\omega(x)$ wurden nach (C.37) zur Konstruktion der entsprechenden Eichtransformationen $\Omega(x)$ herangezogen, die jedoch vor ihrer Durchführung noch gemäß Gleichung (C.28) modifiziert wurden.

Numerische Durchführung:

Um die Güte der iterativen Eichfixierung kontrollieren zu können, wurden folgende Größen definiert und während der *Relaxation* in ein Extremum von $\mathcal{F}^{\text{MCG}}[\Omega]$ überwacht:

$$\delta^2 := \frac{1}{3N} \sum_{x=1}^N \sum_{b=1}^3 \epsilon^b(x) \epsilon^b(x) \quad (\text{C.45})$$

$$\epsilon^b(x) := 2 \sum_{\mu=1}^D u_{\mu}^4(x) u_{\mu}^b(x) - u_{\mu}^4(x - \mu) u_{\mu}^b(x - \mu) \quad (\text{C.46})$$

Eine thermalisierte Konfiguration $\{U\}$ wurde zur Eichfixierung ausgewählt und die inverse Temperatur β_f zu Beginn der Eichfixierungsprozedur auf den Wert $\beta_f = 0.02$ gesetzt. Die Konstruktion der modifizierten $SU(2)$ -Matrizen $\Omega^{\eta}(x)$ wurde bereits in Abschnitt C.1.1 beschrieben, für den Parameter η wurde dabei ein Wert von $\eta = 1.7$ gewählt, was sich als guter Kompromiss für die Optimierung des Algorithmus im gesamten Intervall von β_f herausgestellt hat. Nach jeweils 25 *sweeps* durch das Gitter wurde β_f um $\Delta\beta_f = 0.1$ erhöht. Anstatt eine fixe Anzahl an Aktualisierungsschritten vorzuschreiben, wurde ein Abbruchkriterium von $\delta^2 < 10^{-12}$ für die iterative Eichfixierung festgelegt. Der Zusammenhang der Direkten Maximalen Zentrums-Eichung (DMCG) mit einer besonderen, der Kontinuumsformulierung entlehnten Landau-Eichung wird im nächsten Abschnitt ebenso erklärt wie die Bedeutung des Abbruchkriteriums (C.45) im Kontinuumslimes der Gittereichtheorie.

C.2.1 Minimale Adjungierte Landau-Eichung und DMCG

Aufgrund der Relation

$$\text{tr}_{\text{adj}} [U_\mu(x)] = |\text{tr} [U_\mu(x)]|^2 - 1 , \quad (\text{C.47})$$

die sich mittels (D.15) leicht beweisen lässt, ist die DMCG äquivalent zur *Minimalen Adjungierten Landau-Eichung* (MALG) [ADD00]. Diese wird beispielsweise in [LSR05] bei der Untersuchung des Gluon-Propagators in Landau-Eichung eingesetzt, da sich die Relation

$$U_\mu(x) = \exp \{iaA_\mu(x)\} , \quad \hat{A}_\mu^a(x) := a A_\mu^a(x) = 2 \text{Im}(\text{tr} [U_\mu(x)T^a]) , \quad (\text{C.48})$$

die unter der Annahme glatter Eichpotentiale üblicherweise dazu bemüht wird, um eine Verbindung zwischen den Links als fundamentalen Freiheitsgraden einer Gitterformulierung, sowie den Eichpotentialen als fundamentalen Freiheitsgraden einer Kontinuumsformulierung herzustellen, als nicht vollständig konsistent erweist. Das Problem ist das Verhalten der auf diese Weise extrahierten Eichpotentiale unter nicht-trivialen Transformationen aus dem Zentrum der Gruppe:

$$U_\mu(x) \rightarrow U_\mu^Z(x) = Z_\mu(x)U_\mu(x) \iff \hat{A}_\mu^a(x) \rightarrow \hat{A}_\mu^{Z,a}(x) = Z_\mu(x)\hat{A}_\mu^a(x) . \quad (\text{C.49})$$

Da sich die Eichpotentiale der Kontinuumsformulierung unter der adjungierten Darstellung transformieren, welche *N-alität Null* [Gre03] besitzt, sind diese folglich „zentrumsblind“ – im Gegensatz zu den in Gleichung (C.48) definierten Eichpotentialen $\hat{A}_\mu(x)$.

Daher empfiehlt sich die Definition von *adjungierte Links* der Form

$$U_{\text{adj}}(x)_\mu^{ab} := 2 \text{tr}[T^a U_\mu(x) T^b U_\mu^\dagger(x)] , \quad (\text{C.50})$$

die ebenfalls „zentrumsblind“ sind. Für diese Links wird die MALG fixiert und danach der Zentrumsgehalt aus den zugehörigen fundamentalen Links gemäß

$$U_\mu^\Omega(x) = Z_\mu(x)\bar{U}_\mu(x) \quad (\text{C.51})$$

abgelesen. Durch die Verwendung des *Coset*-Anteils

$$\bar{U}_\mu(x) = \exp \{ia\bar{A}_\mu(x)\} \quad (\text{C.52})$$

gelingt es, einen konsistent definierten Kandidaten für das Kontinuumseichpotential zu extrahieren. Quadrieren von (C.51) liefert unter Verwendung der Darstellung (D.33) und Berücksichtigung von $\bar{A}_\mu(x) = \bar{A}_\mu^a(x)T^a = \bar{A}_\mu^a(x)\sigma^a/2$ nach Entwicklung und Vergleich bis $\mathcal{O}(a^2)$ die alternative Definition

$$a\bar{A}_\mu^b(x) := 2a_\mu^0(x)a_\mu^b(x) . \quad (\text{C.53})$$

Unter Verwendung der Darstellung (C.38) kann schließlich noch gezeigt werden, dass

$$\epsilon^b(x) = a^2 \partial_\mu \bar{A}_\mu^b(x) + \mathcal{O}(a^3) , \quad (\text{C.54})$$

daher ist (C.45) ein Maß für die Verletzung der adjungierten Landau-Eichbedingung, und somit ebenfalls für die Verletzung der Eichbedingung (2.22). Im Kontinuumslimes finden wir nach Entwicklung von (C.45) bezüglich der Gitterkonstanten a das Ergebnis

$$\delta^2 = \frac{1}{3V} \int d^4x (\partial_\mu \bar{A}_\mu^b(x))^2 . \quad (\text{C.55})$$

Anhang D

Gruppentheoretischer Anhang

D.1 Darstellungstheoretische Grundlagen

Für unsere Zwecke genügt es, Darstellungen von linearen Gruppen in endlich-dimensionalen komplexen Vektorräumen V zu betrachten. Die linearen Gruppen sind isomorph zu einer abgeschlossenen Untergruppe von $\mathrm{GL}(n, \mathbb{K})$, insbesondere sind die speziellen unitären Gruppen Teil der sogenannten klassischen Gruppen, welche linear sind (vgl. [Hei90]).

Definition 1. Es seien G und H lineare Gruppen. Dann heißt eine Abbildung $f: G \rightarrow H$ ein *Homomorphismus*, wenn

- $f(AB) = f(A)f(B) \quad \forall A, B \in G$,
- und die Abbildung

$$f_{\exp}: \mathbb{R} \rightarrow H, \quad t \mapsto f \circ \exp_G(tX)$$

$\forall X \in \mathcal{L}G$ stetig differenzierbar ist.

Dabei stellt $\exp_G()$ die auf G eingeschränkte Exponentialabbildung dar und $\mathcal{L}G$ bezeichnet die zu G gehörende Lie-Algebra.

Definition 2. Eine *Darstellung einer linearen Gruppe* G ist ein Homomorphismus

$$\rho: G \rightarrow \mathrm{GL}(V)$$

linearer Gruppen.

Folglich ist ρ eine Darstellung von G im Sinne von Definition 1. Ein für die Konstruktion der adjungierten Darstellung einer Gruppe relevanter Homomorphismus ist das folgende

Beispiel. Für $A \in G$ wird mit κ_A die *Konjugationsabbildung in G mit A* bezeichnet:

$$\kappa_A: G \rightarrow G, \quad B \mapsto ABA^{-1}, \quad \forall B \in G.$$

Definition 3. Ein Vektorraum \mathcal{L} über einem Körper \mathbb{K} , ausgerüstet mit einer bilinearen Abbildung $(X, Y) \mapsto [X, Y]$ heißt *Lie-Algebra* über \mathbb{K} , wenn $\forall X, Y, Z \in \mathcal{L}$ gilt:

- $[X, Y] = -[Y, X]$

- $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$

Dabei wird die *Lie-Klammer* $[,]$ auch als *Kommutator* bezeichnet, die zweite Relation heißt *Jacobi-Identität*.

Eine abgeleitet Darstellung der Lie-Algebra \mathcal{L} einer linearen Gruppe G erhält man durch Anwendung der Ableitung \mathcal{L}_ρ der Darstellung ρ von G .

Definition 4. Eine *Darstellung der Lie-Algebra* \mathcal{L} über \mathbb{R} ist ein Homomorphismus

$$\rho: \mathcal{L} \rightarrow \mathrm{gl}(V)$$

der reellen Lie-Algebren.

Dieser Homomorphismus $\mathcal{L}_\rho: \mathcal{L}G \rightarrow \mathrm{gl}(V)$ ist eine \mathbb{R} -lineare Abbildung mit der Eigenschaft

$$\mathcal{L}_\rho([X, Y]) = [\mathcal{L}_\rho(X), \mathcal{L}_\rho(Y)], \quad \forall X, Y \in \mathcal{L}G.$$

Die adjungierte Darstellung

Die adjungierte Darstellung der Gruppe G ergibt sich als Spezialfall der Ableitungskonstruktion für den im Beispiel D.1 eingeführten Konjugationshomomorphismus κ_A .

Die Abbildung $t \mapsto \kappa_A \circ \exp(tX)$ ist für jedes $X \in \mathcal{L}G$ stetig differenzierbar und es gilt

$$\mathcal{L}_{\kappa_A}(X) = \left. \frac{d}{dt} \kappa_A \circ \exp(tX) \right|_{t=0} = AXA^{-1} \quad (\text{D.1})$$

Dabei ist $\mathcal{L}_{\kappa_A} \in \mathrm{GL}(\mathcal{L}G)$ und es gilt $\mathcal{L}_{\kappa_{AB}} = \mathcal{L}_{\kappa_A \circ \kappa_B} = \mathcal{L}_{\kappa_A} \circ \mathcal{L}_{\kappa_B}$, $\forall A, B \in G$ und beliebiges $X \in \mathcal{L}G$. Die Abbildung ist also eine Darstellung, nämlich

Definition 5.

$$\mathrm{Ad}: G \rightarrow \mathrm{GL}(\mathcal{L}G), \quad A \mapsto \mathcal{L}_{\kappa_A} (A \in G),$$

die sogenannte *adjungierte Darstellung von G*.

Definition 6. Die *adjungierte Darstellung von $\mathcal{L}G$* erhält man durch Setzen von $\mathrm{ad} := \mathcal{L}(\mathrm{Ad})$ und nochmaligem Differenzieren:

$$\mathrm{ad}: \mathcal{L}G \rightarrow \mathrm{gl}(\mathcal{L}G), \quad \mathrm{ad}_X(Y) = [X, Y], \quad X, Y \in \mathcal{L}G.$$

Eine nützliche Relation bei der Untersuchung von Lie-Gruppen und ihren zugehörigen Algebren in adjungierter Darstellung lautet

$$\mathrm{Ad} \circ \exp = \exp \circ \mathrm{ad}.$$

Explizite Darstellungen im Fall der speziellen unitären Gruppen finden sich im Abschnitt D.2.

Eichtransformationen

Transformiert sich ein Feld Φ (homogen) unter der *adjungierten Darstellung* einer Gruppe G , so gilt $\Phi \in \mathcal{L}G$ und die umgekehrte Lesart der Definition 5 führt auf das Transformationsverhalten

$$\Phi \rightarrow \Phi' = g \Phi g^{-1}, \quad g \in G \quad (\text{D.2})$$

unter der Wirkung von $g \in G$. Wählen wir eine Basis von $\mathcal{L}G$, bezeichnet mit $\{T^a\}$, so transformieren sich die Komponenten ϕ^a von $\Phi = \phi^a T^a$ bezüglich dieser Basis gemäß

$$\phi^a \rightarrow \phi'^a = \Omega^{ab}(g) \phi^b, \quad \Omega^{ab}(g) := 2 \operatorname{tr}(T^a g T^b g^{-1}), \quad (\text{D.3})$$

wobei die Normierungskonvention D.9 der Basisvektoren zugrunde gelegt wurde. Im Fall von $\mathcal{L}G = \mathfrak{su}(N)$ ist die Dimension der adjungierten Darstellung gerade $N^2 - 1$.

Transformiert sich ein Feld Ψ unter der *fundamentalen Darstellung* einer Gruppe G , so gilt $\Psi \in V$ für die Darstellung $\rho : G \rightarrow \operatorname{GL}(V)$. Durch die Darstellung ρ wird nämlich eine *Operation von G auf V* induziert, also eine Abbildung

$$G \times V \rightarrow V, \quad (g, \Psi) \mapsto \rho(g)\Psi \quad (\text{D.4})$$

mit den folgenden Eigenschaften

$$\rho(gh)\Psi = \rho(g)(\rho(h)\Psi), \quad \rho(e)\Psi = \Psi, \quad \rho(g)(\alpha\Psi) = \alpha\rho(g)\Psi, \quad \rho(g)(\Psi + \chi) = \rho(g)\Psi + \rho(g)\chi$$

für alle $g, h \in G, \Psi, \chi \in V$ und $\alpha \in K$. Ein Vektorraum, der mit einer solchen Operation ausgerüstet ist, heißt *G -Modul*.

Die Komponentenfunktionen Ψ^i eines Feldes Ψ transformieren sich dann unter einer solchen fundamentalen Darstellung von G gemäß

$$\Psi^i \rightarrow \Psi'^i = \rho^{ij}(g)\Psi^j, \quad i, j \in [1, \operatorname{Dim}(V)]. \quad (\text{D.5})$$

D.2 Nützliche Relationen für $SU(N)$

Im Folgenden bezeichnen T^a die hermiteschen Generatoren der Eichgruppe $SU(N)$.

$$[T^a, T^b] = i f^{abc} T^c \quad (\text{D.6})$$

$$\operatorname{tr}([T^a, T^b] T^c) = C(N) i f^{abc} \quad (\text{D.7})$$

$$[T^a, [T^b, T^c]] + [T^b, [T^c, T^a]] + [T^c, [T^a, T^b]] = 0 \quad (\text{D.8})$$

Der Wert von $C(N)$ wird durch die Normierung der Generatoren festgelegt:

$$\operatorname{tr}(T^a T^b) = C(N) \delta^{ab}, \quad C(N) = \frac{1}{2} \quad (\text{D.9})$$

Für Generatoren in der fundamentalen Darstellung (N) gelten folgende Relationen:

$$\text{tr}(T^a) = 0 \quad (\text{D.10})$$

$$\{T^a, T^b\} = \frac{\delta^{ab}}{N} \mathbb{1} + d^{abc} T^c \quad (\text{D.11})$$

$$\text{tr}(\{T^a, T^b\} T^c) = \frac{1}{2} d^{abc} \quad (\text{D.12})$$

$$\text{tr}(T^a T^b T^c) = \frac{1}{4} (d^{abc} + i f^{abc}) \quad (\text{D.13})$$

$$\text{tr}(T^a T^b T^c T^d) = \frac{1}{4N} \delta^{ab} \delta^{cd} + \frac{1}{8} (d^{abe} + i f^{abe})(d^{cde} + i f^{cde}) \quad (\text{D.14})$$

$$[T^a]_{ij} [T^a]_{lm} = \frac{1}{2} \left[\delta_{im} \delta_{jl} - \frac{1}{N} \delta_{ij} \delta_{lm} \right] \quad (\text{D.15})$$

Als Folge der Kommutatorrelation (D.6) sowie der Jacobi-Identität (D.8) genügen die Strukturkonstanten f^{abc} der Relation

$$f^{ade} f^{bcd} + f^{bde} f^{cad} + f^{cde} f^{abd} = 0 . \quad (\text{D.16})$$

Dies ermöglicht die Definition der sogenannten adjungierten Darstellung (A). Die Generatoren sind dabei durch die Strukturkonstanten selbst gegeben und werden häufig auch durch ein Dach auf dem Symbol des Generators gekennzeichnet:

$$[T_A^a]_{bc} := [\hat{T}^a]_{bc} := -i f^{abc} . \quad (\text{D.17})$$

Für diese gelten die folgenden Regeln bei der Bildung der Spur:

$$\text{tr}(T_A^a) = 0 \quad (\text{D.18})$$

$$\text{tr}(T_A^a T_A^b) = N \delta^{ab} \quad (\text{D.19})$$

$$\text{tr}(T_A^a T_A^b T_A^c) = \frac{N}{2} i f^{abc} \quad (\text{D.20})$$

$$\begin{aligned} \text{tr}(T_A^a T_A^b T_A^c T_A^d) &= \delta^{ab} \delta^{cd} + \delta^{ad} \delta^{bc} \\ &\quad + \frac{N}{4} (d^{abe} d^{cde} - d^{ace} d^{bde} + d^{ade} d^{bce}) \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

Der (quadratische) Casimir-Operator ist definiert zu $T^2 := T^a T^a$. Aufgrund der Relation

$$[T^2, T^b] = 0, \quad b \in [1, N^2 - 1] \quad (\text{D.22})$$

ist T^2 eine Invariante der Lie-Algebra $\mathfrak{su}(N)$ und nimmt daher in jeder irreduziblen Darstellung r der Dimension $d(r)$ einen konstanten Wert $C_2(r)$ an:

$$T_r^a T_r^a = C_2(r) \mathbb{1}_{d(r) \times d(r)} . \quad (\text{D.23})$$

Für die fundamentale (N) bzw. adjungierte Darstellung (A) gilt:

$$C_2(N) = \frac{N^2 - 1}{2N}, \quad C_2(A) = N . \quad (\text{D.24})$$

Summenregeln:

$$d^{abc} d^{abc} = (N^2 - 1)(N - \frac{4}{N}) \quad (\text{D.25})$$

$$f^{abc} f^{abc} = (N^2 - 1)N \quad (\text{D.26})$$

$$d^{abc} d^{dbc} = \delta^{ad} (N - \frac{4}{N}) \quad (\text{D.27})$$

$$f^{abc} f^{dbc} = \delta^{ad} N \quad (\text{D.28})$$

$$f^{abe} f^{cde} = \frac{2}{N} (\delta^{ac} \delta^{bd} - \delta^{ad} \delta^{bc} + d^{ace} d^{dbe} - d^{ade} d^{bce}) \quad (\text{D.29})$$

$$f^{ade} f^{bef} f^{cf d} = \frac{N}{2} f^{abc} \quad (\text{D.30})$$

Für die Eichgruppe $SU(2)$ sind die Strukturkonstanten durch die Komponenten des total antisymmetrischen Levi-Civita-Tensors gegeben, die symmetrischen Konstanten verschwinden identisch:

$$f^{abc} = \epsilon^{abc}, \quad d^{abc} = 0. \quad (\text{D.31})$$

Die Generatoren wählen wir in fundamentaler Darstellung zu $T^a = \sigma^a/2$ mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.32})$$

Für Gruppenelemente $G \in SU(2)$ existiert die spezielle quaternionische Darstellung

$$G = a_0 \mathbb{1} + i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}, \quad (\text{D.33})$$

und für den Vektor $(a_0, \vec{a}) \in \mathcal{S}^3$ gilt:

$$a_0^2 + \vec{a} \cdot \vec{a} = 1. \quad (\text{D.34})$$

In der von uns bei der Behandlung von $SU(3)$ -Eichtheorien durchgängig verwendeten, so genannten Gell-Mann-Darstellung, haben die Generatoren T^a der zugehörigen Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$ die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} T^1 &= \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad T^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}i & 0 \\ \frac{1}{2}i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ T^4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{2}i \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \\ T^7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}i \\ 0 & \frac{1}{2}i & 0 \end{pmatrix} \quad T^8 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Eine explizite Darstellung der Strukturkonstanten f^{abc} und d^{abc} der $\mathfrak{su}(3)$ findet sich in [IZ80].

Literaturverzeichnis

- [A⁺87] M. Albanese et al. Glueball Masses and String Tension in Lattice QCD. *Phys. Lett.*, B192:163, 1987.
- [A⁺08] C. Amsler et al. Review of particle physics. *Phys. Lett.*, B667:1, 2008.
- [ADD00] C. Alexandrou, M. D'Elia, and Ph de Forcrand. The relevance of center vortices. *Nuclear Physics B - Proceedings Supplements*, 83:437, 2000.
- [Adl81] Stephen L. Adler. An overrelaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions. *Phys. Rev.*, D23:2901, 1981.
- [AKKW06] Reinhard Alkofer, M. Kloker, A. Krassnigg, and R. F. Wagenbrunn. Aspects of the confinement mechanism in Coulomb-gauge QCD. *Phys. Rev. Lett.*, 96:022001, 2006, hep-ph/0510028.
- [AP81] Thomas Appelquist and Robert D. Pisarski. High-Temperature Yang-Mills Theories and Three-Dimensional Quantum Chromodynamics. *Phys. Rev.*, D23:2305, 1981.
- [AP07] A. Aromsawa and J. Poulter. Domain wall entropy of the bimodal two-dimensional Ising spin glass. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 76(6):064427, 2007.
- [AR98] M. Alava and H. Rieger. Chaos in the Random Field Ising Model. *Physical Review E*, 58:4284, 1998.
- [AV00] Ana Achucarro and Tanmay Vachaspati. Semilocal and electroweak strings. *Phys. Rept.*, 327:347–426, 2000, hep-ph/9904229.
- [Bal00] Gunnar Singh Bali. Casimir scaling of $SU(3)$ static potentials. *Phys. Rev.*, D62:114503, 2000, hep-lat/0006022.
- [Bar82] F. Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 15(10):3241–3253, 1982.
- [BB83] B. Berg and A. Billoire. Glueball Spectroscopy in Four-Dimensional $SU(3)$ Lattice Gauge Theory. 1. *Nucl. Phys.*, B221:109, 1983.
- [BBJ81] P. Becher, M. Böhm, and H. Joos. *Gauge Theories Of Strong and Electroweak Interaction (in german)*. Teubner, Stuttgart, Germany, 1981. Studienbuecher: Physik.

- [BBLW00] Frederic D. R. Bonnet, Patrick O. Bowman, Derek B. Leinweber, and Anthony G. Williams. Infrared behavior of the gluon propagator on a large volume lattice. *Phys. Rev.*, D62:051501, 2000, hep-lat/0002020.
- [BBMPS96] G. S. Bali, V. Bornyakov, M. Muller-Preussker, and K. Schilling. Dual Superconductor Scenario of Confinement: A Systematic Study of Gribov Copy Effects. *Phys. Rev.*, D54:2863–2875, 1996, hep-lat/9603012.
- [BCF⁺00] H. G. Ballesteros, A. Cruz, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, J. Pech, J. J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancón, P. Téllez, C. L. Ullod, and C. Ungil. Critical behavior of the three-dimensional Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 62(21):14237–14245, Dec 2000.
- [BFGO04] Roman Bertle, Manfried Faber, Jeff Greensite, and Stefan Olejnik. Center Dominance in $SU(2)$ Gauge-Higgs Theory. *Phys. Rev.*, D69:014007, 2004, hep-lat/0310057.
- [BFH⁺93] G. S. Bali, J. Fingberg, Urs M. Heller, F. Karsch, and K. Schilling. The Spatial string tension in the deconfined phase of the (3+1)-dimensional $SU(2)$ gauge theory. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3059–3062, 1993, hep-lat/9306024.
- [BGM07a] P. Yu Boyko, F. V Gubarev, and S. M Morozov. On the Fine Structure of QCD Confining String. 2007, 0704.1203.
- [BGM07b] P. Yu. Boyko, F. V. Gubarev, and S. M. Morozov. On the structure of QCD confining string. *PoS*, LAT2007:307, 2007, 0712.0656.
- [BLM00a] Emili Bagan, Martin Lavelle, and David McMullan. Charges from dressed matter: Construction. *Annals Phys.*, 282:471–502, 2000, hep-ph/9909257.
- [BLM00b] Emili Bagan, Martin Lavelle, and David McMullan. Charges from dressed matter: Physics and renormalisation. *Annals Phys.*, 282:503–540, 2000, hep-ph/9909262.
- [BLM06] Emili Bagan, Martin Lavelle, and David McMullan. Anti-screening by quarks and the structure of the inter- quark potential. *Phys. Lett.*, B632:652–656, 2006, hep-th/0510077.
- [BLMT02] Emili Bagan, Martin Lavelle, David McMullan, and Shogo Tanimura. The structure of screening in QED. *Phys. Rev.*, D65:105004, 2002, hep-ph/0107303.
- [BMK77] Tom Banks, R. Myerson, and John B. Kogut. Phase Transitions in Abelian Lattice Gauge Theories. *Nucl. Phys.*, B129:493, 1977.
- [BP84] B. Berg and C. Panagiotakopoulos. The Photon in $U(1)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev. Lett.*, 52:94, 1984.
- [BQR09] G. Burgio, M. Quandt, and H. Reinhardt. BRST symmetry vs. Horizon condition in Yang-Mills theory. 2009, 0911.5101.
- [BS92] G. S. Bali and K. Schilling. Static quark - anti-quark potential: Scaling behavior and finite size effects in $SU(3)$ lattice gauge theory. *Phys. Rev.*, D46:2636–2646, 1992.

- [BSS95] G. S. Bali, K. Schilling, and C. Schlichter. Observing long color flux tubes in $SU(2)$ lattice gauge theory. *Phys. Rev.*, D51:5165–5198, 1995, hep-lat/9409005.
- [Bun95] B. Bunk. Monte Carlo methods and results for the electro-weak phase transition. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 42:566–568, 1995.
- [BW87] Frank R. Brown and Thomas J. Woch. Overrelaxed Heat Bath and Metropolis Algorithms for Accelerating Pure Gauge Monte Carlo Calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2394, 1987.
- [BY86] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58:801–976, 1986.
- [CEPS93] Sergio Caracciolo, Robert G. Edwards, Andrea Pelissetto, and Alan D. Sokal. Wolff type embedding algorithms for general nonlinear sigma models. *Nucl. Phys.*, B403:475–541, 1993, hep-lat/9205005.
- [CG08] W. Caudy and J. Greensite. On the Ambiguity of Spontaneously Broken Gauge Symmetry. *Phys. Rev.*, D78:025018, 2008, 0712.0999.
- [CGI98] M. N. Chernodub, F. V. Gubarev, and Ernst-Michael Ilgenfritz. Topological content of the electroweak sphaleron on the lattice. *Phys. Lett.*, B424:106–114, 1998, hep-lat/9710011.
- [CGIS98a] M. N. Chernodub, F. V. Gubarev, Ernst-Michael Ilgenfritz, and A. Schiller. Embedded topological defects in hot electroweak theory: A lattice study. *Phys. Lett.*, B434:83–91, 1998, hep-lat/9805016.
- [CGIS98b] M. N. Chernodub, F. V. Gubarev, Ernst-Michael Ilgenfritz, and A. Schiller. Z-vortex percolation in the electroweak crossover region. *Phys. Lett.*, B443:244–254, 1998, hep-lat/9807016.
- [CGIS99] M. N. Chernodub, F. V. Gubarev, Ernst-Michael Ilgenfritz, and A. Schiller. Embedded topological defects in electroweak theory: From percolating networks to sphalerons. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 73:671–676, 1999, hep-lat/9809025.
- [CH86] Hue Sun Chan and Martin B. Halpern. New Ghost Free Infrared - Soft Gauges. *Phys. Rev.*, D33:540, 1986.
- [CIS00] M. N. Chernodub, Ernst-Michael Ilgenfritz, and A. Schiller. Vortex profiles and vortex interactions at the electroweak crossover. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 83:571–573, 2000, hep-lat/9909001.
- [CL84] T. P. Cheng and L. F. Li. *Gauge Theory Of Elementary Particle Physics*. Oxford, UK: Clarendon (Oxford Science Publications), 1984.
- [CM82a] N. Cabibbo and E. Marinari. A New Method for Updating $SU(N)$ Matrices in Computer Simulations of Gauge Theories. *Phys. Lett.*, B119:387–390, 1982.
- [CM82b] M. Creutz and K. J. M. Moriarty. Phase Transition in $SU(6)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D25:1724–1726, 1982.

- [CM96] Attilio Cucchieri and Tereza Mendes. Critical Slowing-Down in $SU(2)$ Landau Gauge-Fixing Algorithms. *Nucl. Phys.*, B471:263–292, 1996, hep-lat/9511020.
- [Col84] John C. Collins. *Renormalization. An introduction to renormalization, the renormalization group, and the operator product expansion.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1984. Chapter 9.2.
- [Col88] Sidney Coleman. *Aspects of Symmetry: Selected Erice Lectures.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1988. Chapter 5.
- [Cor79] John M. Cornwall. Quark Confinement and Vortices in Massive Gauge Invariant QCD. *Nucl. Phys.*, B157:392, 1979.
- [Cre80] M. Creutz. Monte Carlo Study of Quantized $SU(2)$ Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D21:2308–2315, 1980.
- [Cre81] Michael Creutz. Phase Transition in $SU(5)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev. Lett.*, 46:1441, 1981.
- [Cre87] Michael Creutz. Overrelaxation and Monte Carlo Simulation. *Phys. Rev.*, D36:515, 1987.
- [CZ02] Attilio Cucchieri and Daniel Zwanziger. Numerical study of gluon propagator and confinement scenario in minimal Coulomb gauge. *Phys. Rev.*, D65:014001, 2002, hep-lat/0008026.
- [DDFG⁺98] L. Del Debbio, M. Faber, J. Giedt, J. Greensite, and S. Olejnik. Detection of center vortices in the lattice Yang-Mills vacuum. *Phys. Rev.*, D58:094501, 1998, hep-lat/9801027.
- [Dev02] Keith Devlin. *The millennium problems: the seven greatest unsolved mathematical puzzles of our time.* Basic Books, New York, NY, USA, 2002.
- [dFD99] Philippe de Forcrand and Massimo D’Elia. On the relevance of center vortices to QCD. *Phys. Rev. Lett.*, 82:4582–4585, 1999, hep-lat/9901020.
- [dFJ05] Phillippe de Forcrand and Oliver Jahn. Monte Carlo overrelaxation for $SU(N)$ gauge theories. 2005, hep-lat/0503041.
- [Dir31] Paul A. M. Dirac. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A133:60–72, 1931.
- [Dir55] Paul A. M. Dirac. Gauge invariant formulation of quantum electrodynamics. *Can. J. Phys.*, 33:650, 1955.
- [Dre] S. D. Drell. Asymptotic freedom. SLAC-PUB-2694.
- [DT80] Thomas A. DeGrand and Doug Toussaint. Topological Excitations and Monte Carlo Simulation of Abelian Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D22:2478, 1980.
- [EA75] S.F. Edwards and P.W. Anderson. Theory of spin glasses. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 5(5):965–974, 1975.

- [Edm65a] J. Edmonds. Matching and a polyhedron with $0 - 1$ vertices. *J. Res. NBS*, 69B:125–130, 1965.
- [Edm65b] J. Edmonds. Paths, trees, and flowers. *Can. J. Math.*, 17:449–467, 1965.
- [EJJ⁺87] H. G. Evertz, K. Jansen, J. Jersak, C. B. Lang, and T. Neuhaus. Photon and Bosonium masses in scalar lattice QED. *Nucl. Phys.*, B285:590, 1987.
- [Eli75] S. Elitzur. Impossibility of Spontaneously Breaking Local Symmetries. *Phys. Rev.*, D12:3978–3982, 1975.
- [ELRT98] M. Engelhardt, K. Langfeld, H. Reinhardt, and O. Tennert. Interaction of confining vortices in $SU(2)$ lattice gauge theory. *Phys. Lett.*, B431:141–146, 1998, hep-lat/9801030.
- [ELRT00] M. Engelhardt, K. Langfeld, H. Reinhardt, and O. Tennert. Deconfinement in $SU(2)$ Yang-Mills theory as a center vortex percolation transition. *Phys. Rev.*, D61:054504, 2000, hep-lat/9904004.
- [ERS07] D. Epple, H. Reinhardt, and W. Schleifenbaum. Confining Solution of the Dyson-Schwinger Equations in Coulomb Gauge. *Phys. Rev.*, D75:045011, 2007, hep-th/0612241.
- [Fel98] Bjørn Felsager. *Geometry, Particles, and Fields*. Springer, 2nd edition, 1998.
- [FGO98] Manfried Faber, J. Greensite, and S. Olejnik. Casimir scaling from center vortices: Towards an understanding of the adjoint string tension. *Phys. Rev.*, D57:2603–2609, 1998, hep-lat/9710039.
- [FMS81] J. Fröhlich, G. Morchio, and F. Strocchi. Higgs phenomenon without symmetry breaking order parameter. *Nucl. Phys.*, B190:553–582, 1981.
- [FR04] C. Feuchter and H. Reinhardt. Variational solution of the Yang-Mills Schroedinger equation in Coulomb gauge. *Phys. Rev.*, D70:105021, 2004, hep-th/0408236.
- [FS79] Eduardo H. Fradkin and Stephen H. Shenker. Phase Diagrams of Lattice Gauge Theories with Higgs Fields. *Phys. Rev.*, D19:3682, 1979.
- [G⁺05] Jochen Gattnar et al. Center vortices and Dirac eigenmodes in $SU(2)$ lattice gauge theory. *Nucl. Phys.*, B716:105–127, 2005, hep-lat/0412032.
- [GG72] Howard Georgi and Sheldon L. Glashow. Unified weak and electromagnetic interactions without neutral currents. *Phys. Rev. Lett.*, 28:1494, 1972.
- [GH84] Subhash Gupta and Urs M. Heller. A Monte Carlo study of the $SU(3)$ adjoint Higgs model. *Phys. Lett.*, B138:171, 1984.
- [GIS97] M. Gurtler, Ernst-Michael Ilgenfritz, and A. Schiller. Where the electroweak phase transition ends. *Phys. Rev.*, D56:3888–3895, 1997, hep-lat/9704013.
- [GJ87] James Glimm and Arthur M. Jaffe. *Quantum Physics. A Functional Integral Point Of View*. Springer, New York, USA, Second edition, 1987. Chapter 3.3.

- [GO03] Jeff Greensite and Stefan Olejnik. Coulomb energy, vortices, and confinement. *Phys. Rev.*, D67:094503, 2003, hep-lat/0302018.
- [Gol61] J. Goldstone. Field Theories with Superconductor Solutions. *Nuovo Cim.*, 19:154–164, 1961.
- [GOZ04] Jeff Greensite, Stefan Olejnik, and Daniel Zwanziger. Coulomb energy, remnant symmetry, and the phases of non-Abelian gauge theories. *Phys. Rev.*, D69:074506, 2004, hep-lat/0401003.
- [GOZ05a] Jeff Greensite, Stefan Olejnik, and Daniel Zwanziger. Center vortices and the Gribov horizon. *JHEP*, 05:070, 2005, hep-lat/0407032.
- [GOZ05b] Jeff Greensite, Stefan Olejnik, and Daniel Zwanziger. Relations between the Gribov-horizon and center-vortex confinement scenarios. *AIP Conf. Proc.*, 756:162–171, 2005, hep-lat/0411032.
- [GPP⁺98] L. Giusti, M. L. Paciello, S. Petrarca, B. Taglienti, and M. Testa. On the definition of gauge field operators in lattice gauge-fixed theories. *Phys. Lett.*, B432:196–202, 1998, hep-lat/9803021.
- [GPP⁺01] L. Giusti, M. L. Paciello, C. Parrinello, S. Petrarca, and B. Taglienti. Problems in lattice gauge fixing. *International Journal of Modern Physics A*, 16:3487, 2001.
- [GQW09] Noah Graham, Markus Quandt, and Herbert Weigel. Spectral Methods in Quantum Field Theory. *Lect. Notes Phys.*, 777:1, 2009. Chapter 8.
- [Gre03] J. Greensite. The confinement problem in lattice gauge theory. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 51:1, 2003, hep-lat/0301023.
- [Gri78] V. N. Gribov. Quantization of non-Abelian gauge theories. *Nucl. Phys.*, B139:1, 1978.
- [Gut80] Alan H. Guth. Existence Proof of a Nonconfining Phase in Four-Dimensional $U(1)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D21:2291, 1980.
- [Har96] Jeffrey A. Harvey. Magnetic monopoles, duality and supersymmetry. *Boulder 1996, Fields, Strings and Duality*, pages 157–216, 1996, hep-th/9603086.
- [Hei90] Wolfgang Hein. *Einführung in die Struktur- und Darstellungstheorie der klassischen Gruppen*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1990.
- [HI07] Thomas Heinzl and Anton Ilderton. Noncommutativity from spectral flow. *J. Phys.*, A40:9097–9125, 2007, 0704.3547.
- [HIL⁺08a] T. Heinzl, A. Ilderton, K. Langfeld, M. Lavelle, W. Lutz, and D. McMullan. Is the ground state of Yang-Mills theory Coulombic? *Phys. Rev.*, D78:034504, 2008, 0806.1187.
- [HIL⁺08b] T. Heinzl, A. Ilderton, K. Langfeld, M. Lavelle, W. Lutz, and D. McMullan. Probing the ground state in gauge theories. *Phys. Rev.*, D77:054501, 2008, 0709.3486.

- [HJ97] Peter E. Haagensen and Kenneth Johnson. On the wavefunctional for two heavy color sources in Yang- Mills theory. 1997, hep-th/9702204.
- [HLLM07] Tom Heinzl, Kurt Langfeld, Martin Lavelle, and David McMullan. Coulomb gauge Gribov copies and the confining potential. *Phys. Rev.*, D76:114510, 2007, 0705.2718.
- [HM85] David A. Huse and I. Morgenstern. Finite-size scaling study of the two-dimensional Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 32(5):3032–3034, Sep 1985.
- [HMPW03] K. Holland, P. Minkowski, M. Pepe, and U. J. Wiese. Exceptional confinement in $G(2)$ gauge theory. *Nucl. Phys.*, B668:207–236, 2003, hep-lat/0302023.
- [Hou01] J. Houdayer. A Cluster Monte Carlo Algorithm for 2-Dimensional Spin Glasses. *The European Physical Journal B*, 22:479, 2001.
- [HPW04] K. Holland, M. Pepe, and U. J. Wiese. The deconfinement phase transition of $Sp(2)$ and $Sp(3)$ Yang-Mills theories in 2+1 and 3+1 dimensions. *Nucl. Phys.*, B694:35–58, 2004, hep-lat/0312022.
- [HS03] Christopher T. Hill and Elizabeth H. Simmons. Strong dynamics and electro-weak symmetry breaking. *Phys. Rept.*, 381:235–402, 2003, hep-ph/0203079.
- [HY01] A. K. Hartmann and A. P. Young. Lower Critical Dimension of Ising Spin Glasses. *Physical Review B*, 64:180404, 2001.
- [ILM07] Anton Ilderton, Martin Lavelle, and David McMullan. Colour, copies and confinement. *JHEP*, 03:044, 2007, hep-th/0701168.
- [IZ80] C. Itzykson and J. B. Zuber. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill (International Series In Pure and Applied Physics), New York, USA, 1980.
- [Jac] R. Jackiw. Topological Investigations Of Quantized Gauge Theories. Presented at Les Houches Summer School on Theoretical Physics: Relativity, Groups and Topology, Les Houches, France, Jun 27 - Aug 4, 1983.
- [Jac80] R. Jackiw. Introduction to the Yang-Mills Quantum Theory. *Rev. Mod. Phys.*, 52:661, 1980.
- [JKM03] K. Jimmy Juge, Julius Kuti, and Colin Morningstar. Fine structure of the QCD string spectrum. *Phys. Rev. Lett.*, 90:161601, 2003, hep-lat/0207004.
- [JLMM06] T. Jörg, J. Lukic, E. Marinari, and O. C. Martin. Strong universality and algebraic scaling in two-dimensional Ising spin glasses. *Physical Review Letters*, 96:237205, 2006.
- [KB90] David A. Kessler and Michael Bretz. Unbridled growth of spin-glass clusters. *Phys. Rev. B*, 41(7):4778–4780, Mar 1990.
- [KC] A. C. Kalloniatis and R. J. Crewther. Temporal gauge propagator from the Coulomb gauge. In *Vienna 1989, Proceedings, Physical and nonstandard gauges* 145-149.

- [KK95] Ian I. Kogan and Alex Kovner. Compact QED in three-dimensions: A Simple example of a variational calculation in a gauge theory. *Phys. Rev.*, D51:1948–1955, 1995, hep-th/9410067.
- [KLC07] Helmut G. Katzgraber, Lik Wee Lee, and I. A. Campbell. Effective critical behavior of the two-dimensional Ising spin glass with bimodal interactions. *Physical Review B*, 75:014412, 2007.
- [KLM⁺94] Leo Karkkainen, P. Lacock, D. E. Miller, B. Petersson, and T. Reisz. The Physical phase of dimensionally reduced gauge theories. *Nucl. Phys.*, B418:3–14, 1994, hep-lat/9310014.
- [KLR⁺98] K. Kajantie, M. Laine, A. Rajantie, K. Rummukainen, and M. Tsypin. The phase diagram of three-dimensional $SU(3)$ + adjoint Higgs theory. *JHEP*, 11:011, 1998, hep-lat/9811004.
- [KLRS96a] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, and Mikhail E. Shaposhnikov. Generic rules for high temperature dimensional reduction and their application to the standard model. *Nucl. Phys.*, B458:90–136, 1996, hep-ph/9508379.
- [KLRS96b] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, and Mikhail E. Shaposhnikov. The Electroweak Phase Transition: A Non-Perturbative Analysis. *Nucl. Phys.*, B466:189–258, 1996, hep-lat/9510020.
- [KLRS97a] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, and Mikhail E. Shaposhnikov. 3d $SU(N)$ + adjoint Higgs theory and finite-temperature QCD. *Nucl. Phys.*, B503:357–384, 1997, hep-ph/9704416.
- [KLRS97b] K. Kajantie, M. Laine, K. Rummukainen, and Mikhail E. Shaposhnikov. A non-perturbative analysis of the finite T phase transition in $SU(2) \times U(1)$ electroweak theory. *Nucl. Phys.*, B493:413–438, 1997, hep-lat/9612006.
- [Kog83] John B. Kogut. A Review of the Lattice Gauge Theory Approach to Quantum Chromodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 55:775, 1983.
- [KS98] Francesco Knechtli and Rainer Sommer. String breaking in $SU(2)$ gauge theory with scalar matter fields. *Phys. Lett.*, B440:345–352, 1998, hep-lat/9807022.
- [Lan89] N. P. Landsman. Limitations to Dimensional Reduction at High Temperature. *Nucl. Phys.*, B322:498, 1989.
- [Lan02] Kurt Langfeld. Lattice effective theory and the phase transition at finite densities. 2002, hep-lat/0212032.
- [Lan05] Kurt Langfeld. Confinement versus Bose-Einstein condensation. *AIP Conf. Proc.*, 756:133–142, 2005, hep-th/0412020.
- [Lan07] Kurt Langfeld. Improved actions and asymptotic scaling in lattice Yang- Mills theory. *Phys. Rev.*, D76:094502, 2007, 0704.2635.
- [LB91] Michel Le Bellac. *Quantum and statistical field theory*. Clarendon, Oxford, UK, 1991.

- [LBR80] R. Maynard L. Bieche, J. P. Uhry and R. Rammal. On the ground states of the frustration model of a spin glass by a matching method of graph theory. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 13(8):2553–2576, 1980.
- [LGM⁺04] J. Lukic, A. Galluccio, E. Marinari, O. C. Martin, and G. Rinaldi. Critical Thermodynamics of the Two-Dimensional $\pm J$ Ising Spin Glass. *Phys. Rev. Lett.*, 92(11):117202, Mar 2004.
- [LLQR09] K. Langfeld, W. Lutz, M. Quandt, and H. Reinhardt. Gauge invariant treatment of the 2d Ising spin glass near criticality. *Submitted to Phys. Rev. E*, 2009.
- [LM97] Martin Lavelle and David McMullan. Constituent quarks from QCD. *Phys. Rept.*, 279:1–65, 1997, hep-ph/9509344.
- [LM98] Martin Lavelle and David McMullan. Colour charges and the anti-screening contribution to the interquark potential. *Phys. Lett.*, B436:339–343, 1998, hep-th/9805013.
- [LM04] Kurt Langfeld and Laurent Moyaerts. Propagators in Coulomb gauge from $SU(2)$ lattice gauge theory. *Phys. Rev.*, D70:074507, 2004, hep-lat/0406024.
- [LMP⁺03] K. Langfeld, H. Markum, R. Pullirsch, C. D. Roberts, and S. M. Schmidt. Concerning the quark condensate. *Phys. Rev.*, C67:065206, 2003, nucl-th/0301024.
- [LMR92] Pierre LaCock, David E. Miller, and Thomas Reisz. Dimensional reduction of $SU(2)$ gauge theory beyond the perturbative horizon. *Nucl. Phys.*, B369:501–518, 1992.
- [LNWW92] Martin Luscher, Rajamani Narayanan, Peter Weisz, and Ulli Wolff. The Schrödinger functional: A Renormalizable probe for nonAbelian gauge theories. *Nucl. Phys.*, B384:168–228, 1992, hep-lat/9207009.
- [LR82] C. B. Lang and C. Rebbi. Potential and restoration of rotational symmetry in $SU(2)$ lattice gauge theory. *Phys. Lett.*, B115:137, 1982.
- [LRG02] K. Langfeld, H. Reinhardt, and J. Gattnar. Gluon propagators and quark confinement. *Nucl. Phys.*, B621:131–156, 2002, hep-ph/0107141.
- [LRT98] Kurt Langfeld, Hugo Reinhardt, and Oliver Tennert. Confinement and scaling of the vortex vacuum of $SU(2)$ lattice gauge theory. *Phys. Lett.*, B419:317–321, 1998, hep-lat/9710068.
- [LS89] Martin Lavelle and Martin Schaden. Propagators and condensates for QCD in the axial gauge. *Phys. Lett.*, B217:551, 1989.
- [LS04] Norbert Ligterink and Eric S. Swanson. A Coulomb gauge model of mesons. *Phys. Rev.*, C69:025204, 2004, hep-ph/0310070.
- [LSR05] K. Langfeld, G. Schulze, and H. Reinhardt. Center flux correlation in $SU(2)$ Yang-Mills theory. *Phys. Rev. Lett.*, 95:221601, 2005, hep-lat/0508007.

- [LTER99] K. Langfeld, O. Tennert, M. Engelhardt, and H. Reinhardt. Center vortices of Yang-Mills theory at finite temperatures. *Phys. Lett.*, B452:301, 1999, hep-lat/9805002.
- [Lus81] M. Lüscher. Symmetry Breaking Aspects of the Roughening Transition in Gauge Theories. *Nucl. Phys.*, B180:317, 1981.
- [LvN94] P. V. Landshoff and P. van Nieuwenhuizen. Canonical quantization in n.A=0 gauges. *Phys. Rev.*, D50:4157–4161, 1994, hep-th/9307117.
- [LW90] Martin Lüscher and Ulli Wolff. How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theories by numerical simulations. *Nucl. Phys.*, B339:222–252, 1990.
- [LY03] L. W. Lee and A. P. Young. Single Spin and Chiral Glass Transition in Vector Spin Glasses in Three Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 90(22):227203, Jun 2003.
- [Man76] S. Mandelstam. Vortices and Quark Confinement in Nonabelian Gauge Theories. *Phys. Rept.*, 23:245–249, 1976.
- [Man83] N. S. Manton. Topology in the Weinberg-Salam Theory. *Phys. Rev.*, D28:2019, 1983.
- [MB79] I. Morgenstern and K. Binder. Evidence Against Spin-Glass Order in the Two-Dimensional Random-Bond Ising Model. *Physical Review Letters*, 43:1615–1618, November 1979.
- [MB80] I. Morgenstern and K. Binder. Magnetic correlations in two-dimensional spin-glasses. *Phys. Rev. B*, 22(1):288–303, Jul 1980.
- [MM94] I. Montvay and G. Münster. *Quantum fields on a lattice*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1994. (Cambridge monographs on mathematical physics).
- [MP99] Colin J. Morningstar and Mike J. Peardon. The Glueball spectrum from an anisotropic lattice study. *Phys. Rev.*, D60:034509, 1999, hep-lat/9901004.
- [MPPT93] Enzo Marinari, Maria Luigia Paciello, Giorgio Parisi, and Bruno Taglienti. The String tension in gauge theories: A Suggestion for a new measurement method. *Phys. Lett.*, B298:400–404, 1993, hep-lat/9210021.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953.
- [MSKS97] F. Matsubara, A. Sato, O. Koseki, and T. Shirakura. Cluster Heat Bath Algorithm in Monte Carlo Simulations of Ising Models. *Physical Review Letters*, 78:3237–3240, April 1997, arXiv:cond-mat/9704114.
- [MT89] Christopher Michael and Michael Teper. The Glueball Spectrum in $SU(3)$. *Nucl. Phys.*, B314:347, 1989.

- [MY82] N. D. Mackenzie and A. P. Young. Lack of Ergodicity in the Infinite-Range Ising Spin-Glass. *Phys. Rev. Lett.*, 49(5):301–304, Aug 1982.
- [Nam77] Yoichiro Nambu. String-like configurations in the Weinberg-Salam theory. *Nucl. Phys.*, B130:505, 1977.
- [Nie96] Ferenc Niedermayer. Cluster algorithms. 1996, hep-lat/9704009.
- [Nis81] Hideyoshi Nishimori. Internal Energy, Specific Heat and Correlation Function of the Bond-Random Ising Model. *Progress of Theoretical Physics*, 66(4):1169–1181, 1981.
- [NNS⁺06] Y. Nakagawa, A. Nakamura, T. Saito, H. Toki, and D. Zwanziger. Properties of color-Coulomb string tension. *Phys. Rev.*, D73:094504, 2006, hep-lat/0603010.
- [NO79] Holger Bech Nielsen and P. Olesen. A Quantum Liquid Model for the QCD Vacuum: Gauge and Rotational Invariance of Domained and Quantized Homogeneous Color Fields. *Nucl. Phys.*, B160:380, 1979.
- [Noe18] Emmy Noether. Invariante Variationsprobleme. *Nachr. d. König. Gesellsch. d. Wiss. zu Göttingen*, Math.-Phys. Klasse:235–257, 1918.
- [Nol04] David Nolland. Topology, normalisability and the Schrödinger equation: Compact QED (2+1). 2004, hep-th/0408075.
- [NS83] Hideyoshi Nishimori and Michael J. Stephen. Gauge-invariant frustrated Potts spin-glass. *Phys. Rev. B*, 27(9):5644–5652, May 1983.
- [NS06] A. Nakamura and T. Saito. Color confinement in Coulomb gauge QCD. *Prog. Theor. Phys.*, 115:189–200, 2006, hep-lat/0512042.
- [OM85] Andrew T. Ogielski and Ingo Morgenstern. Critical behavior of three-dimensional Ising spin-glass model. *Phys. Rev. Lett.*, 54(9):928–931, Mar 1985.
- [O’R90] L. O’Raifeartaigh. Some hidden aspects of hidden symmetry. *Hennig, J.D. (ed.) et al.: Differential geometry, group representations, and quantization*, Dublin Institute for Advanced Studies:99–108, 1990. Contribution to a Festschrift in honor of H.D. Doebner on occasion of his 60th birthday.
- [OS78] K. Osterwalder and E. Seiler. Gauge Field Theories on the Lattice. *Ann. Phys.*, 110:440, 1978.
- [Pan05] Marco Panero. A numerical study of confinement in compact QED. *JHEP*, 05:066, 2005, hep-lat/0503024.
- [Pes78] Michael Edward Peskin. Mandelstam ’t Hooft Duality in Abelian Lattice Models. *Ann. Phys.*, 113:122, 1978.
- [PFS93] L. V. Prokhorov, D. V. Fursaev, and S. V. Shabanov. String - like excitations in quantum electrodynamics. *Theor. Math. Phys.*, 97:1355–1363, 1993.
- [Pol74] Alexander M. Polyakov. Particle spectrum in quantum field theory. *JETP Lett.*, 20:194–195, 1974.

- [Pol75] Alexander M. Polyakov. Compact gauge fields and the infrared catastrophe. *Phys. Lett.*, B59:82–84, 1975.
- [PRSZ01] B. Povh, K. Rith, C. Scholz, and F. Zersche. *Particles and nuclei: An Introduction to the physical concepts*. Springer, Berlin, Germany, 5th edition, 2001.
- [PS82] Christos H. Papadimitriou and Kenneth Steiglitz. *Combinatorial Optimization: Algorithms and Complexity*. Prentice-Hall, 1982.
- [PS95] Michael E. Peskin and Daniel V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Addison-Wesley, Reading, USA, 1995.
- [PTVF07] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, August 2007.
- [PW98] Owe Philipsen and Hartmut Wittig. String breaking in non-Abelian gauge theories with fundamental matter fields. *Phys. Rev. Lett.*, 81:4056–4059, 1998, hep-lat/9807020.
- [Rei02] H. Reinhardt. Topology of center vortices. *Nucl. Phys.*, B628:133–166, 2002, hep-th/0112215.
- [Roe91] Gert Roepstorff. *Path integrals in quantum physics*. Vieweg, Braunschweig, Germany, 1991. (In German).
- [Roe01] Gert Roepstorff. Einführung in die Quantenfeldtheorie, WiSe 2000/2001. <http://www.physik.rwth-aachen.de/gemeinsame-einrichtungen/physikbibliothek/skripte/>.
- [Rot97] H. J. Rothe. *Lattice Gauge Theories: An Introduction*. World Scientific Lecture Notes in Physics, 59, 1997.
- [RS96] V. A. Rubakov and M. E. Shaposhnikov. Electroweak baryon number non-conservation in the early universe and in high-energy collisions. *Usp. Fiz. Nauk*, 166:493–537, 1996, hep-ph/9603208.
- [RSB⁺96] H. Rieger, L. Santen, U. Blasum, M. Diehl, and M. Jünger. The critical exponents of the two-dimensional Ising spin glass revisited: Exact Ground State Calculations and Monte Carlo Simulations. 1996.
- [RSTZ02] H. Reinhardt, O. Schroeder, T. Tok, and V. C. Zhukovsky. Quark zero modes in intersecting center vortex gauge fields. *Phys. Rev.*, D66:085004, 2002, hep-th/0203012.
- [RT80] G. C. Rossi and M. Testa. The Structure of Yang-Mills Theories in the Temporal Gauge. 1. General Formulation. *Nucl. Phys.*, B163:109, 1980.
- [Ryd85] L. H. Ryder. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, Second edition, 1985.

- [San08] Francesco Sannino. Dynamical Stabilization of the Fermi Scale: Phase Diagram of Strongly Coupled Theories for (Minimal) Walking Technicolor and Unparticles. 2008, 0804.0182.
- [Sch01] Alexandra Schäfke. *Yang-Mills-Theorie: Confinement und Topologie*. Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen, Fakultät für Mathematik und Physik, 2001.
- [Sei82] E. Seiler. Gauge Theories as a Problem of Constructive Quantum Field Theory and Statistical Mechanics. *Lect. Notes Phys.*, 159:1–192, 1982.
- [Shi08] M. Shifman. Theoretical Developments in SUSY. 2008, 0805.4378.
- [Shr86] Robert E. Shrock. The Phase Structure Of $SU(2) \times U(1)_Y$ Lattice Gauge Theory. *Nucl. Phys.*, B267:301, 1986.
- [Sin78] I. M. Singer. Some Remarks on the Gribov Ambiguity. *Commun. Math. Phys.*, 60:7–12, 1978.
- [SLR06] W. Schleifenbaum, M. Leder, and H. Reinhardt. Infrared analysis of propagators and vertices of Yang- Mills theory in Landau and Coulomb gauge. *Phys. Rev.*, D73:125019, 2006, hep-th/0605115.
- [SM97] T. Shirakura and F. Matsubara. Low Temperature Phase of Asymmetric Spin Glass Model in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 79(15):2887–2890, Oct 1997.
- [Spl03] K. Splittorff. Impossibility of spontaneously breaking local symmetries and the sign problem. *Phys. Rev.*, D68(5):054504, 2003.
- [SS02] Adam P. Szczepaniak and Eric S. Swanson. Coulomb gauge QCD, confinement, and the constituent representation. *Phys. Rev.*, D65:025012, 2002, hep-ph/0107078.
- [ST95] D. Stoll and M. Thies. Higgs mechanism and symmetry breaking without redundant variables. 1995, hep-th/9504068. hep-th/9504068.
- [Sta83] John D. Stack. The Heavy Quark Potential in $SU(2)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D27:412, 1983.
- [Sta84] John D. Stack. The Heavy Quark Potential in $SU(3)$ Lattice Gauge Theory. *Phys. Rev.*, D29:1213, 1984.
- [Str76] F. Strocchi. Gauge Groups in Local Field Theory and Superselection Rules. *Nijmegen 1975, Proceedings, Group Theoretical Methods In Physics*, Berlin:87–92, 1976.
- [Str77] F. Strocchi. Spontaneous Symmetry Breaking in Local Gauge Quantum Field Theory: The Higgs Mechanism. *Commun. Math. Phys.*, 56:57, 1977.
- [SW87] Robert H. Swendsen and Jian-Sheng Wang. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 58(2):86–88, Jan 1987.
- [SW92] John D. Stack and Roy J. Wensley. Monopoles, quark confinement and screening in four- dimensional $U(1)$ lattice gauge theory. *Nucl. Phys.*, B371:597–617, 1992.

- [Szc04] Adam P. Szczepaniak. Confinement and gluon propagator in Coulomb gauge QCD. *Phys. Rev.*, D69:074031, 2004, hep-ph/0306030.
- [Tep87] M. Teper. An Improved Method for Lattice Glueball Calculations. *Phys. Lett.*, B183:345, 1987.
- [tH71] Gerard 't Hooft. Renormalizable Lagrangians for massive Yang-Mills Fields. *Nucl. Phys.*, B35:167–188, 1971.
- [tH74a] Gerard 't Hooft. A planar diagram theory for strong interactions. *Nucl. Phys.*, B72:461, 1974.
- [tH74b] Gerard 't Hooft. Magnetic monopoles in unified gauge theories. *Nucl. Phys.*, B79:276–284, 1974.
- [tH75] Gerard 't Hooft. Gauge Fields with Unified Weak, Electromagnetic, and Strong Interactions. 1975. Rapporteur's talk given at Int. Conf. on High Energy Physics, Palermo, Italy, Jun 23-28, 1975.
- [tH78] Gerard 't Hooft. On the Phase Transition Towards Permanent Quark Confinement. *Nucl. Phys.*, B138:1, 1978.
- [tH79] Gerard 't Hooft. A Property of Electric and Magnetic Flux in Nonabelian Gauge Theories. *Nucl. Phys.*, B153:141, 1979.
- [tH81] Gerard 't Hooft. Topology of the Gauge Condition and New Confinement Phases in Nonabelian Gauge Theories. *Nucl. Phys.*, B190:455, 1981.
- [VdF04] Michele Vettorazzo and Philippe de Forcrand. Finite temperature phase transition in the 4d compact $U(1)$ lattice gauge theory. *Phys. Lett.*, B604:82–90, 2004, hep-lat/0409135.
- [VF94] Tanmay Vachaspati and George B. Field. Electroweak string configurations with baryon number. *Phys. Rev. Lett.*, 73:373–376, 1994, hep-ph/9401220.
- [Wan50] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net. *Phys. Rev.*, 79(2):357–364, Jul 1950.
- [Wei95] Steven Weinberg. *The Quantum Theory of Fields. Vol. 1: Foundations*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.
- [Wei96] Steven Weinberg. *The Quantum Theory of Fields. Vol. 2: Modern Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1996.
- [Wey50] Hermann Weyl. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*. Dover, New York, second edition, 1950. (translated from *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, S. Hirzel, Leipzig, 2nd ed., 1931), p 256.
- [Wil74] Kenneth G. Wilson. Confinement of Quarks. *Phys. Rev.*, D10:2445–2459, 1974.
- [Wip07] Andreas Wipf. Lecture notes: Quantum Field Theory 2, Sommersemester 2007. <http://www.personal.uni-jena.de/~p5anwi/lecturenotes.html>.

-
- [WO01] Matthew Wingate and Shigemi Ohta. Deconfinement transition and string tensions in $SU(4)$ Yang-Mills theory. *Phys. Rev.*, D63:094502, 2001, hep-lat/0006016.
 - [Wol89] Ulli Wolff. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62(4):361–364, Jan 1989.
 - [Wol04] Ulli Wolff. Monte Carlo errors with less errors. *Comput. Phys. Commun.*, 156:143–153, 2004, hep-lat/0306017.
 - [WY75] Tai Tsun Wu and Chen Ning Yang. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields. *Phys. Rev.*, D12:3845–3857, 1975.
 - [Zar98a] K. Zarembo. Ground state in gluodynamics and quark confinement. *Phys. Lett.*, B421:325–333, 1998, hep-th/9710235.
 - [Zar98b] K. Zarembo. Interquark potential in Schroedinger representation. *Mod. Phys. Lett.*, A13:2317–2325, 1998, hep-th/9806150.
 - [ZJ96] Jean Zinn-Justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Int. Ser. Monogr. Phys. 92, 1996.
 - [ZJ00] Jean Zinn-Justin. Quantum field theory at finite temperature: An introduction. *Lecture notes, SACLAY*, 2000, hep-ph/0005272.
 - [Zwa03] Daniel Zwanziger. No confinement without Coulomb confinement. *Phys. Rev. Lett.*, 90:102001, 2003, hep-lat/0209105.

DANKSAGUNG

Zu allererst möchte ich Herrn Prof. Dr. Hugo Reinhardt und Herrn Prof. Dr. Kurt Langfeld für ihre hervorragende Betreuung danken. Als gute Doktorväter waren sie stets daran interessiert, den Fortgang dieser Arbeit durch hilfreiche Diskussionen und mit großem Enthusiasmus zu fördern, mich zu unterstützen und zu leiten, und mir dabei kontinuierlich zunehmend mehr Freiräume zur Entwicklung eigener physikalischer Interessen zu gewähren.

Besonders danken möchte ich auch Herrn PD Dr. Markus Quandt, der jederzeit bereit war, sich mit meinen zahlreichen Fragen auseinander zu setzen und mir dabei viel seiner Zeit geopfert hat. Für das Korrekturlesen dieser Arbeit bin ich ihm ebenso dankbar wie für viele bereichernde Gespräche, in denen ich von seinem tiefen Verständnis der Verbindung von Mathematik und Physik profitieren konnte.

Bei allen aktuellen und ehemaligen Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe, die durch ihre offene und freundliche Art für eine hervorragende Atmosphäre sowohl innerhalb, als auch außerhalb des Instituts gesorgt haben, möchte ich mich an dieser Stelle ebenfalls bedanken. Die Möglichkeit zum Austausch mit Dr. Giuseppe Burgio, Dr. Peter Watson, Dr. Claus Feuchter, Dr. Dominik Epple, Dr. Diana Nicmorus, Dr. Wolfgang Schleifenbaum, Dr. Torsten Tok, Jan Kuckei, Davide Campagnari, Markus Leder, Markus Pak und meiner Bürokollegin Carina Popovici hat mir nicht nur bei der Klärung vieler physikalischer Fragestellungen geholfen, sondern darüber hinaus ganz wesentlich dazu beigetragen, dass ich die Zeit in Tübingen in sehr guter Erinnerung behalten werde. Nicht zuletzt danke ich den Sekretärinnen Frau Ingrid Estiry und Frau Sabrina Metzler für die reibungslose Abwicklung aller Korrespondenzen während meines Promotionsprojekts.

Den Sprechern des Internationalen Graduiertenkollegs *Hadronen im Vakuum, in Kernen und Sternen*, Herrn Prof. Dr. Friedrich-Karl Thielemann, Prof. Dr. Christof Gattringer und Herrn Prof. Dr. Josef Jochum möchte ich für die Organisation vieler interessanter Veranstaltung in Basel, Graz und Tübingen danken, sowie für die finanzielle Unterstützung durch das Graduiertenkolleg, was mir die Teilnahme an der *Winter School 2006: Hadron Structure and Non-Perturbative QCD* in Schladming, Österreich, ermöglicht hat.

Den Mitgliedern der Particle Theory Group der School of Mathematics and Statistics möchte ich für die freundliche Aufnahme und Integration in ihre Arbeitsgruppe während meines einjährigen Besuchs an der University of Plymouth, UK, danken. Außerdem bedanke ich mich für die finanzielle Unterstützung, die mir die Teilnahme am *Annual Theory Meeting 2007* in Durham, UK, ermöglicht hat. Neben Prof. David McMullen, Dr. Tom Heinzl,

Dr. Martin Lavelle und natürlich Dr. Kurt Langfeld sind dabei insbesondere Dr. Anton Ilderton sowie Christopher Harvey zu nennen, mit dem ich das Büro geteilt habe. Gerne erinnere ich mich an viele anregende Diskussionsrunden, in denen sich neben dem Austausch über Mathematik und Physik auch immer wieder Raum für die Erörterung von Subtilitäten der deutschen und englischen Sprache, Politik und der jeweiligen Bürokratie gefunden hat.

Den Administratoren des Computernetzwerks des Instituts für Theoretische Physik der Universität Tübingen möchte ich für ihren unermüdlichen Einsatz danken. Sie waren stets bereit, sich meiner Fragen und Sonderwünsche anzunehmen und haben es geschafft, eine optimale Nutzung der bestehenden Infrastruktur zu ermöglichen. Während meines Aufenthalts an der School of Mathematics and Statistics in Plymouth, UK, wurden die numerischen Berechnungen auf dem High Performance Cluster HPC der Faculty of Technology, sowie dem CONDOR-PlymGrid der University of Plymouth durchgeführt. Den Administratoren Mr. Marc Flamank und Dr. Cen Tjhai gilt mein Dank für die Einführung in die Nutzung und die kontinuierliche Wartung und Pflege der beiden Systeme, was ein wunderbar problemloses Arbeiten ermöglicht hat.

Dem Cusanuswerk bin ich für die Förderung meines Dissertationsprojekts – in ideeller, wie auch in finanzieller Hinsicht – zu großem Dank verpflichtet. Stellvertretend für alle Mitarbeiter der Geschäftsstelle in Bonn richtet sich dieser Dank namentlich an Herrn Dr. Thorsten Wilhelmy sowie an Herrn Dr. Manuel Ganser, die sich als Leiter des Referats für Graduiertenförderung stets für den Fortgang meiner Arbeit interessiert haben und durch ihre wohlwollende Unterstützung auch in schwierigen Phasen dazu beigetragen haben, dass dieses Promotionsprojekt zu einem guten Ende gekommen ist.

Meiner Liebsten Friederike danke ich zum einen für ihr Verständnis und ihre Geduld, zum anderen aber auch für ihre nie enden wollende Unterstützung und Motivation, die zur Beendigung dieser Arbeit so wertvoll waren.

Schließlich ist es mir ein Anliegen, meinen Eltern und meinem Bruder zu danken, die mich seit jeher immer bedingungslos unterstützt haben.