

Monte-Carlo-Simulation eines repulsiven Instanton-Gases

als Diplomarbeit vorgelegt von Alexander Ferling

Juni 2004

Institut für Theoretische Physik Westfälische Wilhelms-Universität Münster







Inhaltsverzeichnis

1	Ein	leitung	5
2	Inst	tantonen in semiklassischer Näherung	7
	2.1	Der Feynman-Kern in Pfadintegraldarstellung	. 7
	2.2	Die Entwicklung des Wirkungsfunktionals	
	2.3	Das Doppelmuldenpotenzial und Instantonen	
	2.4	Das eindimensionale Instantongas	
	2.5	Der Korrekturfaktor $oldsymbol{K}$	
	2.6	Zusammenfassung	
3	Inst	tantonen in nichtabelschen Eichtheorien	19
	3.1	Topologische Objekte	. 19
	3.2	Die Vakuumstruktur von Eichfeldern	. 20
		3.2.1 Der Pontryagin-Index	. 22
		3.2.2 Raumzeitliche Entwicklung der Instantonlösungen	. 25
		3.2.3 Instantonen und Tunnelprozesse	. 28
		3.2.4 Instantonen in physikalischen Prozessen	. 29
	3.3	Zusammenfassung	. 30
4	Mu	ılti-Instanton-Lösungen	31
	4.1	Das Instantongas	. 31
	4.2	Die Zustandssumme des $ u$ -dimensionalen Instanton-Gases	. 32
	4.3	Das Potenzial des $ u$ -dimensionalen Instanton-	
		Gases	. 34
		4.3.1 Das Hard-Core-Potenzial	. 34
		4.3.2 Das Soft-Core-Potenzial	. 35
		4.3.3 Das Hard-Core-Potenzial mit Soft-Core-Anteil	. 38
5	Nu	merische Simulation eines Instantongases	41
	5.1	Das Monte-Carlo-Verfahren	41
		5.1.1 Der Markov-Prozess	41
		5.1.2 Das Metropolis-Verfahren	43
	5.2	Das Programm	
	5.3	Das Hard-Core-Instantongas mit Soft-Core-Anteil	. 47
	5.4	Messungen im Gleichgewicht	. 48
	5.5	Der Konsistenzcheck	49

INHALTSVERZEICHNIS

\mathbf{Li}	Literaturverzeichnis			
6	Resümee			
		bei $\alpha = 1$ und $\alpha = 2.33$	61	
	5.9	Asymptotisches Verhalten der Instantongase		
	5.8	Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei unterschiedlichen α	50	
		unterschiedlichen Kopplungen	54	
	5.7	Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei		
		Kantenlängen	52	
	5.6	Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei verschiedenen		

Kapitel 1

Einleitung

Instantonen sind nicht-singuläre Lösungen der Euklidischen Feldgleichungen mit einer lokalisierten Lagrange-Dichte, d.h. sie sind in Raum und Zeit lokalisierte Objekte und besitzen eine endliche Euklidische Wirkung.

Darüber hinaus verfügen sie über eine topologische Ladung, auch Windungszahl genannt, die ihre Stabilität gewährleistet. Die Entdeckung dieser speziellen Lösungen der Euklidischen Feldgleichungen ermöglichte neue Denkansätze zur Beschreibung nicht-perturbativer Effekte in quantisierten Eichtheorien, die störungstheoretisch nicht erfasst werden können. Die Eigenschaft der lokalisierten Wirkung verleiht den Instantonen teilchenartige Charakteristika. Man kann diesen vierdimensionalen Quasiteilchen Ortskoordinaten sowie einen Radius zusprechen. Ihre Wechselwirkung wird durch dipolartige Terme dominiert.

Eichtheorien gestatten das Auftreten von Instantonen beliebiger Ausdehnung, was zu Divergenzen in den Übergangsmatrixelementen führt, falls ihre Wechselwirkung dem nichts entgegensetzt. Um dieses Problem zu umgehen, könnte man einen willkürlichen Infrarot-Cutoff einführen, womit man lediglich Instantonen mit kleinen Radien berücksichtigen würde, was aber nicht mit den Vorgaben der Renormierungsgruppe konsistent ist.

In meiner Arbeit habe ich Instantonen verschiedener Theorien näher beleuchtet. In Kap.[2] werden Instantonen in der Quantenmechanik behandelt (siehe dazu auch [2]). Dort werden verschiedene Potenziale und Multi-Instantonlösungen betrachtet.

In Kap. [3] werden Instantonen in nichtabelschen Eichtheorien untersucht (siehe auch [4]). Insbesondere wird dort Bezug auf die topologische Ladung genommen und es werden raumzeitliche Instantonlösungen entwickelt sowie Instantonen in physikalischen Prozessen betrachtet. Hier wird auch auf Problem der starken CP-Verletzung eingegangen, das in diesem Zusammenhang existiert. Es wird geschildert, wie Instantonen die entarteten Vakua der klassischen Theorie verbinden und so in der quantisierten Theorie Tunnelvorgänge beschreiben — das Konzept des θ -Vakuums.

In Kap.[4] wird der phänomenologische Ansatz eines Instantongases gemacht, der sich aus den teilchenartigen Eigenschaften der Instantonen ergibt [5],[6] [7], [8],[9], [10],[12], [13], [14]. Dort wird eine dynamische und selbstkonsistente Beschränkung der Instantongröße durch eine repulsive Wechselwirkung bei

1. Einleitung

kleinen Abständen eingeführt. Es werden verschiedene Potenziale betrachtet. Ausgangspunkt ist das Hard-Core-Potenzial. Weiterhin werden ein Soft-Core-Potenzial und ein gemischtes Hard-Soft-Core-Potenzial untersucht.

In Kap. [5] wird die Numerik, die der Simulation eines Instantongases zugrunde liegt, beschrieben [15], [16], [17], [18], [19], [20]. Schließlich werden Instantongase mit verschiedenen Potenzialen, Volumen, Kopplungen und in verschiedenen Dimensionen simuliert und ausgewertet.

Kapitel 2

Instantonen in semiklassischer Näherung

2.1 Der Feynman-Kern in Pfadintegraldarstellung

Wir wählen den Zugang zur Feldquantisierung über den Pfadintegral-Formalismus und betrachten zuerst den einfachst möglichen Fall: Die Dynamik eines nichtrelativistischen Systems mit einem Freiheitsgrad, etwa ein Teilchen in einer Raumdimension, das sich frei oder in einem Potenzialtopf bewegt. Der Ausgangspunkt ist die Übergangsamplitude, auch Feynman-Kern genannt:

$$\langle q', t'|q, t\rangle. \tag{2.1}$$

Dies wird mit

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$
 (2.2)

zu

$$\langle q', t'|q, t\rangle = \langle q'|e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}|q\rangle.$$
 (2.3)

Zerlegt man das Zeitintervall kleinschrittig in $t - t' = N\varepsilon$ mit Stützpunkten bei $t_n = t + n\varepsilon$ erhält man unter Einschieben eines vollständigen Satzes von Basiszuständen $\int dq_i |q_i\rangle \langle q_i| = \mathbf{1}$

$$\langle q', t'|q, t\rangle = \int dq_{N-1} \dots \int dq_1 \quad \langle q', t'|q_{N-1}, t_{N-1}\rangle \dots \langle q_1, t_1|q, t\rangle. \tag{2.4}$$

Mit (2.2) werden die einzelnen Elemente zu

$$\langle q_{i+1}, t_{i+1}|q_i, t_i\rangle = \langle q_{i+1}|e^{-i\hat{H}(\hat{p},\hat{q})\varepsilon/\hbar}|q_i\rangle.$$
 (2.5)

Diese Größe wird auch als Transfermatrix bezeichnet. Approximiert man nun den Zeitentwicklungsoperator durch die ersten beiden Glieder der Taylorreihe, erhält man

$$\langle q_{i+1}, t_{i+1}|q_i, t_i\rangle = \langle q_{i+1}|1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\hat{H}(\hat{p}, \hat{q})|q_i\rangle + O(\varepsilon^2).$$
 (2.6)

Der Hamiltonoperator hängt von \hat{p} und \hat{q} ab. Durch Einschieben eines vollständigen Satzes von Impulseigenfunktionen kann sein Matrixelement berechnet werden. Mit

$$\int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} |p_i\rangle\langle p_i| = \mathbf{1} \tag{2.7}$$

erhält man

$$\langle q_{i+1}|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_i\rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \langle q_{i+1}|p_i\rangle \langle p_i|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_i\rangle. \tag{2.8}$$

Da die Operatoren \hat{p} und \hat{q} nach links, bzw. rechts auf ihre Eigenzustände wirken können, reduziert sich das Matrixelement des Hamilton-Operators auf die klassische Hamiltonfunktion:

$$\langle q_{i+1}|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q_i\rangle = \langle p_i|q_i\rangle H(p_i,q_i). \tag{2.9}$$

Dies ist allerdings nur dann unproblematisch, wenn die Voraussetzung erfüllt ist, dass \hat{H} keine gemischten Produkte der nichtkommutierenden Operatoren \hat{p} und \hat{q} enthält. Andernfalls impliziert (2.9) stillschweigend eine bestimmte Reihenfolge der Faktoren. Die infinitesimale Übergangsamplitude lautet mit $\langle q_i|p_i\rangle=\mathrm{e}^{ip_iq_i/\hbar}$

$$\langle q_{i+1}, t_{i+1} | q_i, t_i \rangle = \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{ip_i(q_{i+1} - q_i)/\hbar} (1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(p_i, q_i)) + O(\varepsilon^2).$$
 (2.10)

Mit der Grenzwertbetrachtung $\varepsilon \to 0$ und $N \to \infty$ bedeutet dies für den Feynman-Kern

$$\langle q', t'|q, t\rangle = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} p_i \frac{(q_{i+1} - q_i)}{\varepsilon}} \times \prod_{i=0}^{N-1} (1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(p_i, q_i)) + O(\varepsilon^2), \tag{2.11}$$

was man mit

$$\lim_{N \to \infty} \prod_{i=0}^{N-1} \left(1 - \frac{i(t-t')}{N\hbar} H(p_i, q_i) \right) = \exp \left(\lim_{N \to \infty} -\frac{i(t-t')}{N\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} H(p_i, q_i) \right)$$
(2.12)

umformen kann zu

$$\langle q, t | q, t \rangle = \lim_{N \to \infty} \int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (p_i \frac{q_{i+1} - q_i}{\varepsilon} - H(p_i, q_i))\right). \tag{2.13}$$

Mit den Bezeichnungen

$$\int \prod_{i=1}^{N-1} dq_i \to \int Dq \tag{2.14}$$

$$\int \prod_{i=0}^{N-1} \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \to \int Dp \tag{2.15}$$

und den Übergängen

$$\frac{q_{i+1} - q_i}{\varepsilon} \to \dot{q}(t_i), \tag{2.16}$$

$$\varepsilon \sum_{i=0}^{N-1} f(t_i) \to \int_t^{t'} d\tau f(\tau)$$
 (2.17)

lautet die Propagationsamplitude schliesslich

$$\langle q', t'|q, t\rangle = \int Dq \int Dp \ e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau (p\dot{q} - H(p, q))}. \tag{2.18}$$

Im Unterschied zur Feldquantisierung nach der kanonischen Methode wird hier primär nicht mit Operatoren gearbeitet, sondern mit Integralen über klassische Größen. Die Quanteneigenschaften des Systems kommen dadurch ins Spiel, dass sich die Teilchen (oder Felder) zwischen zwei Punkten auf allen erdenklichen Pfaden bewegen können und sich die Beiträge aller Pfade kohärent aufsummieren.

Zur besseren mathematischen Behandlung dieses Integrals wird eine Wick-Rotation durchgeführt. Es werden in Zukunft also komplexe Zeiten zugelassen $(T=\mathrm{e}^{i\vartheta}t)$. Wir betrachten von nun an also anstatt eines Feynman-Pfadintegrals $(\vartheta=0)$ ein Euklidisches Pfadintegral $(\vartheta=\frac{\pi}{2})$. Zusätzlich werden die Integralgrenzen durch die Transformation $t\to-\frac{T}{2}$ und $t'\to\frac{T}{2}$ ersetzt. Nach Ausführen aller p-Integrationen erhält man

$$\langle q', t'|q, t\rangle = \int Dq e^{-S}$$
 (2.19)

mit der euklidischen Wirkung

$$S = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left(\frac{1}{2} \sum_{j} m_{j} \dot{q}_{j}^{2} + V(q)\right). \tag{2.20}$$

Die Lösung der Euklidischen Bewegungsgleichungen nennt man *Instantonen*, sofern ihre euklidische Wirkung nicht singulär und endlich $(S < \infty)$ ist.

2.2 Die Entwicklung des Wirkungsfunktionals

Bevor wir den ersten Instantonen begegnen, betrachten wir Teilchen in einem eindimensionalen oszillatorischen Potenzial mittels des Pfadintegralformalismus. Die Resultate werden für weitere Betrachtungen von Bedeutung sein.

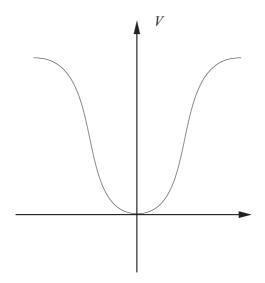


Abbildung 2.1: Potenzialtopf

Nach (2.18) ist

$$\langle q', t'|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|q, t\rangle = \int Dq \ e^{-\frac{S}{\hbar}}.$$
 (2.21)

Die Euklidische Wirkung lautet für den eindimensionalen Fall

$$S = \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right). \tag{2.22}$$

Zur Lösung dieses Problems wird eine Sattelpunktsentwicklung bis zur 2.Ordnung durchgeführt. Dazu wird folgende Notation eingeführt,

$$x(\tau) = \bar{x}(\tau) + \sum_{n} c_n x_n(\tau), \qquad (2.23)$$

wobei $\bar{x}(t)$ die geforderten Randbedingungen erfüllt, und $\{x_n(t)\}$ einen vollständigen Satz reeller, orthonormaler, differenzierbarer Funktionen darstellt,

$$\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau x_n(\tau) x_m(\tau) = \delta_{nm}, \qquad (2.24)$$

welche als Randbedingung an den Grenzen verschwinden:

$$x_n(\pm T/2) = 0. (2.25)$$

Der Potenzialwall habe einen stationären Punkt, um den entwickelt wird. Da die Funktion S dort ihr Maximum hat, gilt

$$\frac{\delta S}{\delta \bar{x}} = -\frac{d^2 \bar{x}}{d\tau^2} + \frac{dV(\bar{x})}{dx} \bigg|_{x=\bar{x}} = 0 \tag{2.26}$$

Weiterhin wählen wir die x_n als Eigenvektoren der 2. funktionalen Ableitung

$$-\frac{d^2x_n}{d\tau^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}x_n \bigg|_{x=\bar{x}} = \lambda_n x_n.$$
 (2.27)

Damit ist die Wirkung bis zur 2.Ordnung

$$S(x) \approx S(\bar{x}) + \frac{1}{2} \sum_{k,n} c_k c_n \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau x_k(\tau) \left(-\frac{d^2 x_n}{d\tau^2} + \left. \frac{d^2 V(\bar{x})}{dx^2} x_n \right|_{x=\bar{x}} \right). \quad (2.28)$$

Mit (2.27) wird dies zu

$$S(x) \approx S(\bar{x}) + \frac{1}{2} \sum_{n} c_n^2 \lambda_n, \qquad (2.29)$$

und das Integral

$$\langle 0|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|0\rangle = \int Dx \ e^{-\frac{S}{\hbar}} \tag{2.30}$$

ergibt sich zu einem Gaußintegral, dessen Lösung nach Substitution $Dx \to \prod_n (2\pi\hbar)^{-1/2} dc_n$ zu

$$\langle 0|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|0\rangle = Ne^{-\frac{S(\bar{x})}{\hbar}} \prod_{n} (\lambda_n)^{-1/2}$$
(2.31)

2. Instantonen in semiklassischer Näherung

wird. Mit (2.27) folgt

$$\det\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}\bigg|_{x=\bar{x}}\right) = \prod_n \lambda_n,\tag{2.32}$$

die sogenannte Fluktuationsdeterminante. Für den Harmonischen Oszillator gilt

$$V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 \to \frac{d^2 V}{dx^2} = \omega^2.$$
 (2.33)

Mit der Randbedingung (2.25) wird die Gleichung gelöst durch $\sin(\frac{n\pi t}{T}),$ womit

$$\left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2\right) \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) = \left(\frac{n^2\pi^2}{T^2} + \omega^2\right) \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right) \\
= \left(\frac{n^4\pi^4}{\omega^4 T^4}\right) \left(1 + \frac{\omega^2 T^2}{n^2\pi^2}\right) \sin\left(\frac{n\pi t}{T}\right). (2.34)$$

Mit (2.32) ist

$$N \det \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2} \Big|_{\bar{x}} \right)^{-1/2} = N \prod_n \left(\frac{n^4 \pi^4}{\omega^4 T^4} \right) \left(1 + \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-1/2} \quad (2.35)$$

und mit einer speziellen Wahl von N erhält man

$$N \det \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2} \Big|_{\bar{x}} \right)^{-1/2} = \left(\frac{2\pi\hbar}{\omega} \sinh(\omega T) \right)^{-1/2}$$

$$\overline{T \to \infty} \quad \left(\frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{\frac{-\omega T}{2}}. \tag{2.36}$$

Damit ist die Grundzustandsenergie gegeben durch

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{2.37}$$

In erster Ordnung ist die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen, das sich im Grundzustand befindet, am Ursprung anzutreffen, also

$$|\langle x = 0 | n = 0 \rangle|^2 = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2}.$$
 (2.38)

2.3 Das Doppelmuldenpotenzial und Instantonen

Nun soll das Doppelmuldenpotenzial Objekt unserer Betrachtungen sein. Anstatt eines quantenmechanischen Teilchens, das sich in einem Potenzial mit Minima bei $\pm a$ bewegt, wollen wir aufgrund der euklidischen Wirkung ein Potenzial -V wählen, in dem sich das Teilchen von -a nach +a bewegt.

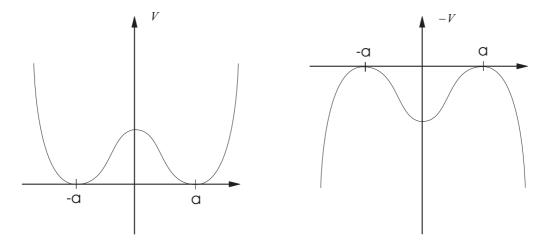


Abbildung 2.2: Doppelmuldenpotenzial

Der Übergang

$$\langle q', t'|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|q, t\rangle = \int Dp \ e^{-\frac{S}{\hbar}}$$
 (2.39)

wird mit der im letzten Kapitel gefundenen Gleichung (2.35) zu

$$\int Dq \ e^{\frac{-S}{\hbar}} = Ne^{\frac{-S(\bar{x})}{\hbar}} \det\left(-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}\Big|_{\bar{x}}\right)^{-1/2}.$$
 (2.40)

Während die beiden trivialen Lösungen,

$$\langle a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|a\rangle = \langle -a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|-a\rangle,$$
 (2.41)

also der Fall, dass das Teilchen bei $\pm a$ ruht, dieselbe Lösung wie der Harmonische Oszillator liefert, verhält es sich bei einem Übergang von $-a \longrightarrow a$ oder $a \longrightarrow -a$, also

$$\langle -a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|a\rangle = \langle a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|-a\rangle \tag{2.42}$$

schon anders. Ruht zu Beginn das Teilchen bei -a und setzt sich durch einen infinitesimalen Ruck in Bewegung, so genügt es der Bewegungsgleichung

$$\frac{dx}{dt} = (2V)^{1/2}. (2.43)$$

Damit ist

$$t = t_1 + \int_0^x dx' (2V)^{-1/2}, \tag{2.44}$$

wobei t_1 die Integrationskonstante ist und den Punkt $x(t_1) = 0$ darstellt.

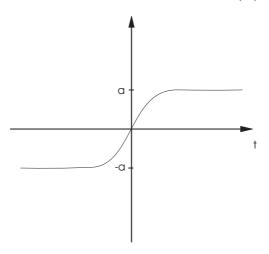


Abbildung 2.3: Zeitlicher Verlauf der Bahnkurve

Geht die Zeitdauer $T \to \infty$, wird der Übergang des Teilchens $+a \to -a$ ein sehr instantanes Ereignis. So nannte 't Hooft den Übergang bei t_1 Instanton. Ähnlich wie formstabile Wellen, die Solitonen, sind Instantonen Quasiteilchen, die allerdings sowohl zeitlich als auch räumlich lokalisiert sind. Betrachten wir den umgekehrten Fall, also ein Teilchen, dass von $a \to -a$ läuft, entspricht dies dem zeitinvertierten Vorgang von $-a \to a$, dem Anti-Instanton.

Die Wirkung der (Anti-)Instantonen berechnet sich mit

$$S = \int dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + V \right] = \int dt \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = \int_{-a}^a dx (2V)^{1/2}. \tag{2.45}$$

Für große Zeiten ergibt (2.43) angenähert

$$\frac{dx}{dt} = \omega(a - x) \tag{2.46}$$

und damit ist

$$(a-x) \propto e^{-\omega t}. (2.47)$$

Man kann Instantonen also als zeitlich lokalisierte Objekte auffassen, die einen Radius $1/\omega$ haben.

2.4 Das eindimensionale Instantongas

Ein nächster Schritt ist, zu analysieren, was passiert, wenn das Teilchen zu einem beliebigen Zeitpunkt umkehren kann, seine Position also von -a nach a oder von a nach -a ändert. Dann werden n Objekte auf der Zeitachse an den Stellen $-T/2 < t_1 < t_2 < \ldots < t_n < T/2$ vorhanden sein, wobei sich Instantonen mit Anti-Instantonen abwechseln müssen.

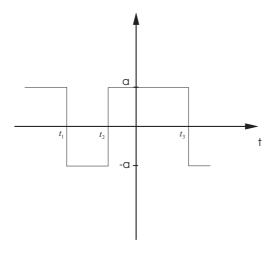


Abbildung 2.4: Drei Instantonen auf der Zeitachse

Im Grenzfall $T \to \infty$ entspricht das Ergebnis dem in Kap.[2.2] gefundenen. Löst man den Sachverhalt genauer auf, so ergeben sich Korrekturen, hervorgerufen durch die einzelnen Instantonen. Wir betrachten also n vollständig separierte Instantonen, die sich auf der Zeitachse an verscheidenen Stellen befinden. K stelle eine Korrektur für den n-Instanton-Beitrag dar:

$$\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{\frac{-\omega T}{2}} K^n. \tag{2.48}$$

Die Integration über die Zentren der Instantonen liefert nach [2]

$$\int_{-T/2}^{T/2} dt_1 \int_{-T/2}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-T/2}^{t_{n-1}} dt_n = \frac{T^n}{n!}.$$
 (2.49)

Die Summation über n Instantonen ergibt für den Feynman-Kern

$$\langle \pm a | e^{-\frac{HT}{\hbar}} | -a \rangle = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{\frac{-\omega T}{2}} \sum_{n} \frac{\left(K e^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}} T\right)^{n}}{n!}.$$
 (2.50)

Entspricht die Endposition der Anfangsposition $-a \longrightarrow -a$, so ist die Zahl der Instantonen und Anti-Instantonen gerade, ansonsten ist die Anzahl der Instantonen ungerade, die der Anti-Instantonen hingegen gerade. Wir erhalten

$$\langle \pm a | \mathrm{e}^{-\frac{HT}{\hbar}} | -a \rangle = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{\frac{-\omega T}{2}} \frac{1}{2} \left[\exp(K \mathrm{e}^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}} T) \mp \exp(-K \mathrm{e}^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}} T) \right]. (2.51)$$

Die Energieeigenwerte lauten

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}\hbar\omega \pm \hbar K e^{\frac{-S(\overline{x})}{\hbar}}.$$
 (2.52)

Die Entartung der Energie ist offenbar nur durch den Tunnelfaktor aufgehoben.

2.5 Der Korrekturfaktor K

Wie man der Funktion (2.50) ansieht, wächst die Exponentialreihe mit festem $Ke^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}}T$, bis n die Größenordnung von $Ke^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}}T$ erreicht, um danach schnell abzufallen. Die wesentlichen Beiträge liegen also in dem Bereich

$$n \le K e^{-\frac{S(\overline{x})}{\hbar}} T. \tag{2.53}$$

Damit ist die Dichte n/T der Quasiteilchen exponentiell klein und die durchschnittliche Separation enorm groß. Man spricht aufgrund der Ähnlichkeit zur statistischen Mechanik von einer Dilute-Gas-Approximation. Offenbar ist die Separation der einzelnen Instantonen von T unabhängig. Wenn wir uns ins Gedächtnis rufen, dass wir in Kap.[2.2] das Wirkungsfunktional bis zur 2. Ordnung entwickelt haben, so stellen wir nun fest, dass diese Näherung — eine Näherung für kleines \hbar — für hinreichend große Beobachtungszeiträume T gut erfüllt ist.

Abschliessend wollen wir den Korrekturfaktor K näher bestimmen. Kehren wir zurück zur Eigenwertgleichung (2.27):

$$-\frac{d^2x_n}{d\tau^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}x_n \bigg|_{x=\bar{x}} = \lambda_n x_n.$$
 (2.54)

Wir betrachten die Eigenwertgleichung für ein einzelnes Instanton. Aufgrund der zeitlichen Translationsinvarianz besitzt die Eigenwertgleichung einen Eigenwert 0. Aus (2.23) sieht man, dass daraus eine Divergenz im Gaußintegral oder äquivalent dazu eine Nullmode in der Fluktuationsdeterminante (2.32) auftritt. Wir schlagen also einen anderen Weg ein um K zu berechnen. Mit (2.45)

$$S_0 = \int_{a}^{a} dx (2V)^{1/2} \tag{2.55}$$

ergibt sich für die Eigenfunktion zum Eigenwert 0

$$x_1 = S_0^{-\frac{1}{2}} \frac{d\,\overline{x}}{dt}.\tag{2.56}$$

Die Variation des Ortes t_1 , also des Instantonzentrums

$$dx = \frac{d\overline{x}}{dt}dt_1, \tag{2.57}$$

wird durch eine kleine Änderung des Expansionskoeffizienten c_1 induziert:

$$dx = x_1 dc_1. (2.58)$$

Damit kann eine Integration über c_1 durch eine Integration über die Zeitachse ersetzt werden

$$\frac{dc_1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} dt_1. \tag{2.59}$$

Dann ist der (n = 1)-Beitrag zum Übergang gegeben durch

$$\langle a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|-a\rangle = NT \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{S_0}{\hbar}} \left(\overline{\det}\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}\Big|_{x=\bar{x}}\right]\right)^{-\frac{1}{2}}, (2.60)$$

wobei $\overline{\det}$ die nullmodenfreie Determinante darstellt. Durch Vergleich mit (2.50) ist ersichtlich, dass

$$K = \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \left| \frac{\det\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right]}{\det\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}\right]_{x=\bar{x}}} \right|^{\frac{1}{2}}.$$
 (2.61)

2.6 Zusammenfassung

Die Rechnungen und Strukturen der vorangegangenen Kapitel treten auch in komplexeren Theorien, wie z.B. der Yang-Mills-Theorie auf. In Kap. [2.4] wurde die Lösung eines Gases aus n Instantonen erörtert. In Kap. [2.5] wurde der Korrekturfaktor K, der die Abweichungen um das Zentrum eines Instantons wiederspiegelt, näher bestimmt. Zusammenfassend kann mit (2.50) und (2.61) der n-Instantonbeitrag angegeben werden:

$$\langle +a|e^{-\frac{HT}{\hbar}}|-a\rangle = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{T^n}{n!} e^{-\frac{nS_0}{\hbar}} \left[\left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \left| \frac{\det\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right]}{\det\left[-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{d^2V(\bar{x})}{dx^2}\right]_{x=\bar{x}}} \right]^{\frac{1}{2}} \right]^n (2.62)$$

2. Instantonen in semiklassischer Näherung

Kapitel 3

Instantonen in nichtabelschen Eichtheorien

3.1 Topologische Objekte

Analog zum semiklassischen Modell treten in nichtabelschen Feldtheorien Instantonlösungen auf. Das Augenmerk fällt nun also auf eine euklidische Yang-Mills-Theorie. Der vierdimensionale euklidische Raum E^4 wird im Unendlichen durch eine dreidimensionale Sphäre, den S^3 begrenzt. Der Gruppenraum der SU(2), ist ebenfalls der S^3 , schliesslich ist die Gruppe U der 2×2 Matrizen

$$U = u_0 + i \sum_{j=1}^{3} u_j \sigma_j$$
 (3.1)

unitär und die Determinante ergibt nach Voraussetzung

$$u_0^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 = 1, (3.2)$$

was eine Einheitssphäre im E^4 darstellt. Für uns sind nun nichttriviale Lösungen der SU(2)-Eichfelder von Interesse; dabei handelt es sich um Objekte topologischer Natur, die in Raum und Zeit lokalisiert sind. Sie werden Instantonen genannt und existieren genau dann, wenn es nichttriviale Abbildungen von S^3 nach S^3 gibt. Nicht-triviale bzw. nicht homotope Abbildungen existieren in Räumen, die nicht einfach zusammenhängend sind. Um dieser Tatsache etwas Leben einzuhauchen, sei an den Aharonov-Bohm Effekt erinnert, siehe Abb.[3.1]. Während sich das Magnetfeld in der Zeichenebene an einem lokalen Ort befindet, bewegen sich die Elektronen durch den feldfreien Raum. Durch sein Vektorpotenzial, das um B zirkuliert, hat das Magnetfeld Einfluss auf die Phase der Wellenfunktion und damit auf das Interferenzmuster der Elektronen.

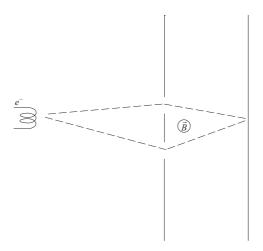


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Aharonov-Bohm-Effektes

Also ist das Vakuum nicht leer, sondern besitzt eine topologische Struktur. Zwei Wege der Elektronen, die am gleichen Punkt starten, am gleichen Punkt auf dem Schirm enden und sich stetig ineinander überführen lassen, heissen homotop.

Alle Wege, die homotop zu einem Weg a sind, bilden die Homotopieklasse [a]. Die Multiplikation der Homotopieklassen zweier unterschiedlicher Wege a und b mit gleichen Anfangs- und Endpunkten [a][b] := [ab] bildet eine Homotopie-gruppe.

Ein Satz aller Homotopieklassen stetiger Abbildungen $S^1 \to S^1$ bildet die Fundamentalgruppe $[S^1, S^1] = \pi_1(S^1)$. Befindet man sich anstatt in der zweidimensionalen Ebene im vierdimensionalen Raum, spricht man von der 3. Homotopiegruppe $[S^3, S^3] = \pi_3(S^3)$.

Man kann zeigen, dass die 3. Homotopiegruppe der SU(2) isomorph zur Gruppe der ganzen Zahlen ist $\pi_3(S^3) = \mathbb{Z}$, wobei ein expliziter Wert $Q \in \mathbb{Z}$ die Anzahl der Kreise im Gruppenraum darstellt $(S^1 : \text{Umläufe des Elektrons um das } \overrightarrow{B}$ -Feld).

Wie man sieht ist für die Existenz von Instantonen in nichtabelschen Eichtheorien spontane Symmetriebrechung nicht zwingend erforderlich. Das unterscheidet Instantonen von topologischen Monopolen (z.B. 't Hooft-Polyakov-Monopole).

3.2 Die Vakuumstruktur von Eichfeldern

Der Feldstärketensor einer abelschen U(1)-Gruppe hat die Form

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} \tag{3.3}$$

und ist aus der kovarianten, relativistischen Formulierung der Elektrodynamik hinlänglich bekannt. In nicht-abelschen Feldtheorien betrachtet man Felder mit nicht vertauschenden Komponenten. Der Feldstärketensor wird definiert als

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} - ig[A_{\mu}, A_{\nu}]. \tag{3.4}$$

Mit der allgemeinen Vertauschungsrelation (Lie-Algebra) für die Potenzialkomponenten

$$[T_a, T_b] = i f_{abc} T_c, \tag{3.5}$$

wobei $T_{a/b/c}$ Generatoren der O(3) respektive SU(2) Gruppe sind, wobei

$$A_{\mu} = A_{\mu}^{a} T_{a} \tag{3.6}$$

ist, erhält man

$$F_{\mu\nu}^{a} = \partial_{\mu}A_{\nu}^{a} - \partial_{\nu}A_{\mu}^{a} + g\varepsilon_{abc}A_{\mu}^{b}A_{\nu}^{c}.$$
(3.7)

Im Folgenden geht es darum, eine Eichtransformation für den Feldstärketensor und das Vektorpotenzial abzuleiten.

Ein 2-dimensionaler Isospinor ψ transformiert sich beispielsweise als

$$\psi \to \psi' = e^{\frac{i}{2}\overrightarrow{\tau}\overrightarrow{\lambda}}\psi = S\psi, \tag{3.8}$$

was einer Drehung des Zustandsvektors um den Winkel λ entspricht. $\overrightarrow{\tau}$ ist hier der Paulioperator. S ist in diesem Fall eine 2×2 -Matrix. Im n-Dimensionalen Fall haben wir

$$\psi \to \psi' = e^{iM^a \lambda^a} \psi = S\psi, \tag{3.9}$$

wobei M eine $n \times n$ -Matrix ist und ψ n Komponenten hat. Die Ableitung transformiert sich in gleicher Weise wie ψ mit

$$D_{\mu}\psi \to D'_{\mu}\psi' = SD_{\mu}\psi. \tag{3.10}$$

Mit

$$D_{\mu}\psi = (\partial_{\mu} - igA_{\mu})\psi \tag{3.11}$$

ergibt sich

$$(\partial_{\mu} - igA'_{\mu})\psi' = S(\partial_{\mu} - igA_{\mu})\psi, \tag{3.12}$$

wobei mit $\psi' = S\psi$ für die Eichtransformation

$$A'_{\mu} = SA_{\mu}S^{-1} - \frac{i}{a}(\partial_{\mu}S)S^{-1}$$
(3.13)

gefunden wird. Die Eichtransformation des Feldstärketensors lautet

$$F'_{\mu\nu} = SF_{\mu\nu}S^{-1}. (3.14)$$

3.2.1 Der Pontryagin-Index

In Kap.[3.1] wurde bereits erwähnt, dass die 3.Homotopiegruppe der SU(2) isomorph zur Gruppe der ganzen Zahlen ist, $\pi_3(S^3) = \mathbb{Z}$, wobei ein expliziter Wert $Q \in \mathbb{Z}$ die Anzahl der Kreise im Gruppenraum darstellt. Die Abbildungen $S^3 \to S^3$ zerfallen also in Homotopieklassen, die durch den Wert $Q \in \mathbb{Z}$ charakterisiert sind. Diesen Wert nennt man Pontryagin-Index oder auch Windungszahl.

Im Folgenden wird ein Weg aufgezeigt, wie man eine Darstellung des Pontryagin-Index findet. Dazu definiert man sich eine Größe K_{μ} , wobei $\partial_{\mu}K_{\mu}$ einen divergenzartigen Charakter hat. Unter Anwendung des Gaußschen Satzes findet man schliesslich eine Darstellung, die es erlaubt, für eine beliebige Transformation die Windungszahl zu berechnen. Wir definieren die Größe

$$K_{\mu} = \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} (A_{\nu}^{a} \partial_{\kappa} A_{\lambda}^{a} + \frac{g}{3} \varepsilon_{abc} A_{\nu}^{a} A_{\kappa}^{b} A_{\lambda}^{c})$$

$$= \varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} \operatorname{Sp} \left(\frac{1}{2} A_{\nu} \partial_{\kappa} A_{\lambda} - \frac{ig}{3} A_{\nu} A_{\kappa} A_{\lambda} \right). \tag{3.15}$$

Mit dem dualen Feldstärketensor $\widetilde{F}_{\mu\nu}$ ergibt sich

$$\partial_{\mu}K_{\mu} = \frac{1}{4} \text{Sp } \widetilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu} = \frac{1}{8} \widetilde{F}^{a}_{\mu\nu}F^{a}_{\mu\nu},$$
 (3.16)

wobei der zu $F_{\mu\nu}$ duale Tensor $\widetilde{F}_{\mu\nu}$ definiert ist als

$$\widetilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}. \tag{3.17}$$

Dies zeigt man, indem man mit (3.15) $\partial_{\mu}K_{\mu}$ darstellt als

$$\partial_{\mu}K_{\mu} = \varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp}\left(\frac{1}{2}(\partial_{\mu}A_{\nu})(\partial_{\kappa}A_{\lambda}) - ig(\partial_{\mu}A_{\nu})A_{\kappa}A_{\lambda}\right).$$
 (3.18)

Auf der anderen Seite ist mit (3.4)

$$\operatorname{Sp} \widetilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu} =$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp}\left(\partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} - ig[A_{\mu}, A_{\nu}]\right)\left(\partial_{\kappa}A_{\lambda} - \partial_{\lambda}A_{\kappa} - ig[A_{\kappa}, A_{\lambda}]\right)$$

$$= 2\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp} \left(\partial_{\mu}A_{\nu}\right)\left(\partial_{\kappa}A_{\lambda}\right) - 2ig\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp} A_{\mu}A_{\nu}\left(\partial_{\kappa}A_{\lambda}\right)$$

$$-2ig\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp} \left(\partial_{\mu}A_{\nu}\right)A_{\kappa}A_{\lambda} - 2g^{2}\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda}\operatorname{Sp} A_{\mu}A_{\nu}A_{\kappa}A_{\lambda}.$$

$$(3.19)$$

Die zweiten Terme sind gleich, da die Spur dieselbe ist, der letzte Term verschwindet. Damit ist (3.16) gezeigt. Sp $\widetilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ entspricht einer totalen Divergenz.

In Kap.[3.1]wurde schon festgestellt, dass Instantonen topologische Objekte im vierdimensionalen euklidischen Raum darstellen, weshalb wir uns nun auf den V^4 mit $\partial V^4 \sim S^3$ beziehen. Mit dem Gaußschen Satz wird (3.16) zu

$$\frac{1}{4} \int_{V^4} d^4x \operatorname{Sp} \widetilde{F}_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \int_{V^4} d^4x \, \partial_{\mu} K_{\mu}$$

$$= \oint_{\partial V^4} d^3x \, K_{\perp}. \tag{3.20}$$

 K_{\perp} sei ein Fluss von K senkrecht durch die Oberfläche ∂V^4 des Volumens V^4 . Über das Potenzial lässt sich das Integral (3.20) berechnen, über die Lösung lässt sich die Windungszahl ausdrücken. Wir betrachten nunmehr ein Potenzial A_{μ} , dass auf dem Rand des Volumens ∂V^4 verschwindet, wobei das Volumen als sehr groß angenommen wird. Von (3.13) bleibt damit auf dem Rand

$$A_{\mu} \to -\frac{i}{g}(\partial_{\mu}S)S^{-1}. \tag{3.21}$$

Die Feldstärke verschwinde

$$F_{\mu\nu} = 0. \tag{3.22}$$

Um den Sachverhalt zu veranschaulichen, sei folgendes Schaubild gegeben:

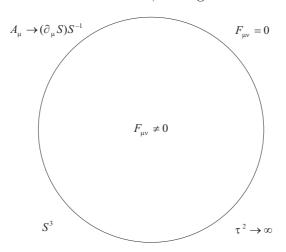


Abbildung 3.2: Ein vierdimensionales Instanton

Um tatsächlich Berechnungen durchführen zu können, muss eine Eichtransformation gewählt werden. Wir nehmen

$$S = \frac{x_4 + i\mathbf{x}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{x_4^2 + \mathbf{x}^2}},\tag{3.23}$$

wobei x_4 die zeitliche und ${\bf x}$ die drei räumlichen Komponenten darstellt. Wir bezeichnen $x_4^2 + {\bf x}^2 = \tau^2$. Setzt man dies in (3.21) ein, erhält man

$$A_i = \frac{i}{g\tau^2} [x_i - \sigma_i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x} + ix_4)], \qquad (3.24)$$

bzw.

$$A_4 = -\frac{i}{g\tau^2} \ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{x}. \tag{3.25}$$

Damit wird K_{μ} zu

$$K_{\mu} = \frac{2x_{\mu}}{g^2 \tau^2}. (3.26)$$

Wir berechnen (3.20) zu

$$\frac{1}{4} \int_{V^4} d^4x \operatorname{Sp} \widetilde{F}_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \oint_{\partial V^4} d^3x K_{\perp}$$

$$= \frac{2\tau}{g^2 \tau^4} \oint_{\partial V^4} d^3x$$

$$= \frac{4\pi^2}{g^2}.$$
(3.27)

Dabei wurde das Kugelvolumen zu $2\pi^2\tau^3$ integriert. Offenbar kann $F_{\mu\nu}$ nicht im ganzen Volumen Null sein. Dies ist eine Konsequenz des nicht eichinvarianten K_{μ} .

Das obige Integral definiert den Pontryagin-Index in der Form

$$Q = \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Sp} \int_{V^4} d^4x \widetilde{F}_{\mu\nu} F_{\mu\nu}.$$
 (3.28)

Hier ist die Windungszahl 1:

$$Q = \frac{g^2}{4\pi^2} \int d^4x \partial_\mu K_\mu = 1.$$
 (3.29)

Indem man (3.21) in (3.15) einsetzt

$$K_{\mu} = \frac{1}{6q^2} \varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} \operatorname{Sp}(S^{-1}\partial_{\nu}S)(S^{-1}\partial_{\lambda}S)(S^{-1}\partial_{\kappa}S), \tag{3.30}$$

kann man zeigen, dass Q der Grad der Abbildung vom Gruppenraum S^3 der SU(2) auf den dreidimensionalen Rand S^3 der vierdimensionalen Kugel ist. Wir erhalten

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \oint_{S^3} d^3 \sigma \varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} \widehat{n}_{\mu} \operatorname{Sp}(S^{-1} \partial_{\nu} S)(S^{-1} \partial_{\lambda} S)(S^{-1} \partial_{\kappa} S)$$

$$= \frac{1}{24\pi^2} \oint_{S^3} d^3 \sigma \frac{\partial(g)}{\partial(\sigma)}$$

$$= \frac{1}{24\pi^2} \int_G d^3 g. \tag{3.31}$$

Dabei stellt d^3g eine invariantes Volumenelement im Gruppenraum dar.

3.2.2 Raumzeitliche Entwicklung der Instantonlösungen

Um eine Verbindung zum semiklassischen Modell herzustellen, empfiehlt es sich, das Modell der vierdimensionalen Kugel anschaulich abzuändern. In der Literatur [1],[2] werden formstabile Quasiteilchen, Solitonen, behandelt. Solitonen ähneln in ihrer Struktur den Instantonen, allerdings sollte man bei Instantonen von form- und zeitstabilen Objekten sprechen. Die Entwicklung entlang einer Achse entspricht bei den Instantonen der zeitlichen Entwicklung. In der Abbildung (3.3) entspricht I und II der begrenzenden Fläche der Zeitachse x_4 bei $-\infty$ bzw. ∞ ; III entspricht einer dreidimensionalen Fläche.

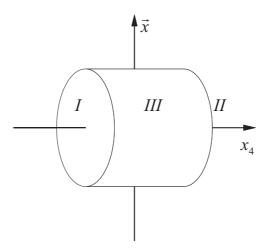


Abbildung 3.3: Der Rand des Instantons als Zylinder

Das semiklassische Pendant zu dieser Abbildung findet sich als Abbildung [2.3] in Kap.[2.3]. Mit dieser Anschauung lässt sich in (3.31) separat über die Teile des Zylinders integrieren

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \left[\int_{I-II} d^3 \sigma \varepsilon_{4ijk} \operatorname{Sp}(\overline{A}_i \overline{A}_j \overline{A}_k) + \int_{-\infty}^{\infty} d^4 x \int_{III} d^2 \sigma_i \varepsilon_{i\nu\kappa\lambda} \operatorname{Sp}(\overline{A}_\nu \overline{A}_\kappa \overline{A}_\lambda) \right],$$
(3.32)

wobe
i $\overline{A}_{\mu}=S^{-1}(\partial_{\mu}S)=igA_{\mu}$ ist. Nach [9] lässt sich für A_{μ} nun

$$A_{\mu} = \frac{\tau^2}{\tau^2 + \lambda^2} \left(\frac{-i}{g}\right) (\partial_{\mu} S) S^{-1} \tag{3.33}$$

angeben, wobei λ die Größe des Instantons bzw. seinen Radius darstellt und $x_4^2 + \mathbf{x}^2 = \tau^2$. Im Grenzfall $x_4 \to \pm \infty$ geht dies über in $A_\mu = ig(\partial_\mu S)S^{-1}$. Die innere Struktur ist aber so beschaffen, dass $F_{\mu\nu} \neq 0$ im Zylinder ist. Da Q eichinvariant ist, liegt es nahe, A' = 0 zu wählen, so dass das Integral über den Zylindermantel (Fläche III) wegfällt. Solch eine Transformation ist mit

$$A'_{\mu} = SA_{\mu}S^{-1} - g(\partial_{\mu}S)S^{-1} \tag{3.34}$$

möglich, wenn

$$S = \exp\left[\frac{i\mathbf{x}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{(\tau^2 + \lambda^2)^{1/2}} \ \theta\right]$$
 (3.35)

und

$$\theta = \tan^{-1} \left[\frac{ix_4}{(\tau^2 + \lambda^2)^{1/2}} - \frac{\pi}{2} \right], \tag{3.36}$$

gewählt wird, im Einklang zu (3.13) und dem allgemein definierten S. Der Vorteil bei dieser Wahl liegt darin, dass Q nur noch von der Differenz der beiden Kopfflächen I und II abhängt, wenn die Zeitdauer lange ausgedehnt wird, also $x_4 \to \pm \infty$. In diesem Fall reduziert sich A_i zu

$$x_4 \to \infty, \ A'_i \to i(g_n)^{-1}(\partial_i g_n), \ x_4 \to -\infty, \ A'_i \to i(g_{n-1})^{-1}(\partial_i g_{n-1}), \ (3.37)$$

mit

$$g_n = (g_1)^n \tag{3.38}$$

und

$$g_1 = \exp\left[-i\pi \frac{i\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{(\tau^2 + \lambda^2)^{1/2}}\right]. \tag{3.39}$$

 g_n ist natürlich ein Element des Gruppenraumes, allerdings sind zwei verschiedene g_n und g_m nicht stetig ineinander überführbar, also nicht homotop, wenn $n \neq m$ ist.

Das Instanton beschreibt also eine Lösung der euklidischen Feldgleichungen, in der sich x_4 von $-\infty$ nach ∞ entwickelt. Ein Vakuumzustand entwickelt sich in einen anderen, wobei beide Zustände unterschiedlichen Homotopieklassen

angehören, schliesslich gibt es zwischen diesen Vakua eine Region mit nicht verschwindendem Feldtensor $F_{\mu\nu}$.

In dem Fall $g_0 = 1$ und g_1 (siehe (3.38)) wären das die Homotopieklassen 0 und 1. Es ergibt sich ein Pontryagin-Index Q = n - (n - 1) = 1.

Es gibt eine unendliche Anzahl nicht zueinander homotoper Vakua und die Instantonlösung repräsentiert den Übergang von einer Klasse in die andere. Um noch einmal den Bogen zu Instantonen in semiklassischen Theorien zu schlagen, sei erwähnt, dass die Windungszahl das Pendant zur topologischen Ladung der Instantonen ist.

3.2.3 Instantonen und Tunnelprozesse

Instantonlösungen repräsentieren den Übergang einer Vakuumklasse in eine andere. Eine physikalisch interessante Frage ist, wie die Wahrscheinlichkeit für einen derartigen Übergang ist. Analog zu Kap.[2.3] muss die Übergangsamplitude e^{-S} berechnet werden.

Die Wirkung ist das Integral über die Lagrangedichte

$$S = -\frac{1}{4} \int d^4x \ F^a_{\mu\nu} F^a_{\mu\nu}. \tag{3.40}$$

Mit der Tatsache, dass

$$\operatorname{Sp}(F_{\mu\nu} - \widetilde{F}_{\mu\nu})^2 \ge 0 \tag{3.41}$$

ist, kann unter Ausnutzen der Identität

$$\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} = 2(\delta_{\rho\kappa}\delta_{\sigma\lambda} - \delta_{\rho\lambda}\delta_{\sigma\kappa}) \tag{3.42}$$

gezeigt werden, dass

$$\widetilde{F}_{\mu\nu}\widetilde{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{3.43}$$

ist. Damit wird (3.41) zu

$$\operatorname{Sp}(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}) \ge \operatorname{Sp}(\widetilde{F}_{\mu\nu}F_{\mu\nu}). \tag{3.44}$$

Daraus folgt

$$-\int d^4x \ Sp(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}) \ge \mp \int d^4x \ Sp(F_{\mu\nu}\widetilde{F}_{\mu\nu}), \tag{3.45}$$

womit unter Zuhilfenahme von (3.28) eine Abschätzung für die Wirkung gegeben werden kann:

$$S \ge \frac{8\pi^2}{g^2}|Q|. \tag{3.46}$$

Die Wirkung wird also minimal für den Fall $\widetilde{F}_{\mu\nu}=\pm F_{\mu\nu}$. Der positive Wert gehört zu den Instantonenlösungen. Diese lösen die Bewegungsgleichung. Die gesuchte Übergangsamplitude ist also von der Form

$$\exp\left(-\frac{8\pi^2}{g^2}\right). \tag{3.47}$$

Wir haben in Kap.[3.2.2] festgestellt, dass das Vakuum in einer nichtabelschen Eichtheorie unendlich oft entartet ist. Die Übergangsamplitude zwischen zwei Vakua unterschiedlicher Homotopieklassen ist ungleich 0, es treten also Tunnelprozesse auf. Der tatsächliche Vakuumzustand ist eine Überlagerung dieser Vakua, er lässt sich schreiben als

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle,$$
 (3.48)

wobei n wieder die Homotopieklasse repräsentiert. Ein tatsächliches Vakuum ist durch die Größe θ charakterisiert. Für einen einem physikalischen Operator O und der Eichtransformation S leicht zeigen. Mit [S,O]=0 ist

$$0 = \langle \theta | [S, O] | \theta' \rangle = \langle \theta | O | \theta' \rangle (e^{i\theta} - e^{-i\theta'}) \stackrel{\theta \neq \theta'}{\to} \langle \theta | O | \theta' \rangle = 0.$$
 (3.49)

Mit der Eichtransformation g_1 (3.39) ist

$$|n\rangle \stackrel{g_1}{\to} |n+1\rangle,$$
 (3.50)

und damit

$$|\theta\rangle \stackrel{g_1}{\to} e^{-i\theta} |\theta\rangle.$$
 (3.51)

Bei diesen θ -Vakua handelt es sich um komplexe Vakuumzustände, sobald $\theta \neq 0$ ist. Komplexe Vakuumzustände sind nicht invariant unter Zeitumkehr, zudem ist die Parität verletzt.

3.2.4 Instantonen in physikalischen Prozessen

Die Existenz von Instantonen ist für physikalische Prozesse von Bedeutung. In Eichtheorien für die elektroschwache Wechselwirkung, wie z.B. im Weinberg-Salam-Modell, gibt es den Axialstrom J_{μ}^{5} . Im Fall masseloser Fermionen ist dieser Strom nicht erhalten, was aus einer Anomalie in der Ward-Identität folgt. Mit dieser Anomalie erhält man schliesslich

$$\partial_{\mu} J_{\mu}^{5} = \frac{Ng^{2}}{16\pi^{2}} F_{\mu\nu}^{a} \widetilde{F}_{\mu\nu}^{a}. \tag{3.52}$$

N ist hier die Flavour-Anzahl. Setzt man den Pontryagin-Index (3.28) ein, erhält man

$$\int d^4x \ \partial_\mu J_\mu^5 = 2NQ. \tag{3.53}$$

Liegt ein Instantonfeld mit der Windungszahl 1 vor, ändert sich die axiale Ladung Q^5 vom Anfangs- in den Endzustand zu

$$\triangle Q^5 = 2N. \tag{3.54}$$

Dies macht sich z.B. in dem Zerfall

$$p + n \to e^+ + \overline{\nu}_{\mu} \tag{3.55}$$

bemerkbar, in dem die Baryonen- und Leptonenzahl verletzt ist. Man errechnet für das Deuteron eine Übergangsamplitude von

$$e^{-\frac{16\pi^2}{g^2}} = e^{-\frac{16\pi^2}{e^2}\sin^2\theta_W} \approx 10^{-262},$$
 (3.56)

wobei $\sin^2\theta\approx 0.35$ gewählt wurde. Daraus errechnet sich eine Lebenszeit von 10^{218} Jahre für das Deuteron.

3.3 Zusammenfassung

Instantonen in nichtabelschen Eichtheorien sind keine unbegreiflichen Gebilde. Um sich mehr darunter vorstellen zu können, wurde in Kap. [3.1] der Aharonov-Bohm-Effekt als quantenmechanisches Analogon aufgeführt. In Kap. [3.2.4] wurde zudem ein physikalischer Prozess erwähnt, der über Instantonen beschrieben werden kann. In Kap. [3.2], in dem der Pontryagin-Index, die raumzeitliche Entwicklung der Instantonen und Tunnelprozesse beschrieben wurden, wurde besonderen Wert darauf gelegt, auf Analogien zur semiklassischen Approximation hinzuweisen. Sowohl in der Quantenmechanik, als auch in der Yang-Mills-Theorie werden Instantonen völlig nicht-perturbativ behandelt, schliesslich haben Störungen einer θ -Vakuum-Welt keine Auswirkungen auf eine andere θ -Vakuum-Welt, denn die θ -Vakua sind physikalisch nicht verbunden. Man erhofft sich mittels topologischer, nichtperturbativer Methoden Bereiche der Physik zu erschliessen, die den perturbativen Methoden verschlossen sind, z.B. versucht man damit das Confinement zu erklären [5].

Literatur zu diesem Kapitel findet sich in [1] [4], [5], und [14].

Kapitel 4

Multi-Instanton-Lösungen

4.1 Das Instantongas

Gegenstand der Betrachtung sei ein Instanton-Gas einer vierdimensionalen SU(n)-Yang-Mills-Theorie. Wie in Kap.[2] erörtert, sind Instantonen stationäre Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen in euklidischer Raumzeit. Das euklidische Pfadintegral wird durch eine Sattelpunkts-Approximation der Wirkung berechnet. Es gibt auch hier Multi-Instantonlösungen. Charakteristisch ist ihre topologische Ladung $K \in \mathbb{Z}$, auch Windungszahl oder Pontryagin-Index genannt. Die euklidische Wirkung eines K-Instanton-Gases setzt sich auch hier durch eine K-fache Überlagerung der Einzelbeiträge zusammen: $S_K = KS_1$. In der Sattelpunktsapproximation besitzen die Vakuumfluktuationsdeterminanten in der Nähe des Sattelpunktes einen wesentlichen Anteil. Zusätzlich muss über verschiedene Parameter integriert werden. Weil es sich als äusserst schwierig herausstellt, diese Beiträge zu berechnen, empfiehlt es sich, diese Multi-Instanton-Beiträge in geeigneter Weise anzunähern. Dazu wird nun das Modell eines verdünnten Gases herangezogen. Der 'Dilute-Gas-Approximation' liegt folgende Idee zugrunde:

Die Ein-Instantonlösungen könnten als lokalisierte Objekte aufgefasst werden — lokalisiert in Raum und Zeit. Wie in Kap.[3.2.1] gezeigt, werden sie durch einen Vektor a_{μ} charakterisiert, der den Ort des Instantonzentrums festlegt, sowie durch einen Parameter λ , den man als Radius des Instantons interpretieren kann. Außerdem gibt es weitere interne Parameter. Im verdünnten Gas werden Multi-Instantonlösungen nun durch Überlagerung einzelner Instantonen an den Orten $a_{\mu}^{(j)}$ mit den Radien λ_j erzeugt. Dadurch vereinfacht sich der Beitrag zur Zustandssumme zu einem K-fach potenzierten Ein-Instantonbeitrag.

Ein weiteres Problem stellt die Integration über die Radiuskoordinaten dar. Da die Instantondichte $\rho(\lambda)$ mit einer Potenz $b=\kappa-\nu-1$ von λ ansteigt, kann man über

$$\int_0^\infty d\lambda \ \lambda^\alpha, \qquad \alpha \ge -1, \tag{4.1}$$

die Gesamtdichte des Systems bestimmen. Da dieses Integral aber divergiert, bedeutet das, dass es keinen endlichen thermodynamischen Limes gibt. Um das

Problem zu umgehen, wäre ein möglicher Ansatz, einen willkürlichen Cutoff einzuführen, also lediglich Instantonen mit kleinem Radius zu berücksichtigen, was aber nicht mit den Vorgaben der Renormierungsgruppe konsistent ist. In meiner Arbeit werde ich einen anderen Ansatz verfolgen. Eine dynamische und selbstkonsistente Beschränkung der Instantongröße kann durch Einführung einer repulsiven Wechselwirkung bei kleinen Abständen erzeugt werden. Offenbar liefern große Instantonen einen gewichtigeren Beitrag zur Zustandssumme als kleinere, wie man mit (4.1) sieht, was eine große Instantondichte impliziert. Da sich ein verdichtetes Gas quantitativ von einem verdünnten unterscheidet, wird der Dichteverteilung und damit verbunden dem thermodynamische Grenzwert besondere Aufmerksamkeit zuteil. Die Instantondichte hat erheblichen Einfluss auf den thermodynamischen Limes.

Zu erwähnen ist auch, dass der Druck des großkanonischen Instanton-Gases

$$p = \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V} \ln Z = D(g) \exp\left(-\frac{S_1}{g^2}\right)$$
 (4.2)

ist, wobei D(g) das Integral über die Vakuumfluktuationsdeterminante eines Instantons repräsentiert und g die Kopplungskonstante darstellt. S_1 ist die Wirkung eines Instantons mit der topologischen Ladung 1 multipliziert mit g^2 . Berechnet man den Druck nun in einem endlichen Volumen und behandelt das unendliche Volumen als Zusammmensetzung dieser, muss ein zusätzlicher Korrekturfaktor κ eingeführt werden

$$\exp\left(\frac{-S_1}{g^2}\right) \to \exp\left(-\frac{S_1}{\kappa g^2}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2}\right). \tag{4.3}$$

4.2 Die Zustandssumme des ν -dimensionalen Instanton-Gases

Ausgangspunkt ist die Ein-Instantonlösung in einem unendlich ausgedehnten Volumen. Die relevanten Parameter sind der Ortsvektor a_{μ} sowie die Radiuskoordinate λ . α_i seien die übrigen dimensionslosen kollektiven Koordinaten. Wir erhalten (siehe [10])

$$Z_{1} = \frac{1}{(g_{0}\sqrt{2\pi})^{m}} \int da_{\mu} \frac{d\lambda}{\lambda^{\nu-\kappa+1}} d\alpha_{i} J(\alpha_{i}) \left(\frac{\det' \Delta_{1}}{\det \Delta_{0}}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\left(\frac{S_{1}}{g_{0}^{2}}\right)}. \tag{4.4}$$

Hier ist m die Anzahl der kollektiven Koordinaten, J ist die Jacobi-Determinante der kollektiven Koordinaten, det Δ_K ist die nullmodenfreie K-Instanton Fluktuationsdeterminante, det Δ_0 die Vakuumfluktuation, S_0 die Ein-Instanton-Wirkung. Da die Determinanten ultraviolettdivergent sind, wird eine Renomierung durchgeführt. Mit dem Ultraviolett-Cutoff M findet man in Einschleifenordnung

$$J(\alpha_i) \left(\frac{\det' \Delta_1}{\det \Delta_0} \right)_M^{-\frac{1}{2}} = \exp(\kappa \ln M) f(\alpha_i, \lambda)$$
 (4.5)

mit der schon eingeführten Korrektur κ . Mit (4.5) wird der Integrand zu

$$\exp\left\{-S_1\left(\frac{1}{g_0^2} - \frac{\kappa}{S_1}\ln M\right)\right\} f(\alpha_i). \tag{4.6}$$

Die Kopplungskonstante wurde in der Form

$$\frac{1}{g^2(\mu)} = \frac{1}{g_0^2} - 2\beta_0 \ln \frac{M}{\mu} \tag{4.7}$$

renormiert, wobei hier die Massenskala μ eingeführt wurde. Um eine renormierte Determinante zu erhalten, muss also $\kappa = 2\beta_0 S_1$ sein. Damit erhalten wir

$$\exp\left\{-S_1\left(\frac{1}{g^2(\mu)} - \frac{\kappa}{S_1}\ln\mu\right)\right\} = \left\{\mu\exp\left(-\frac{1}{2\beta_0g^2(\mu)}\right)\right\}^{\kappa} = \Lambda^{\kappa}.$$
 (4.8)

 Λ ist die renormierungsgruppenun
abhängige Massenskala. Mit (4.8) in (4.5) eingesetzt, erhält man

$$Z_{1} = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}g_{0})^{m}} \int da_{\mu}d\lambda \ \lambda^{-\nu-1}(\lambda\Lambda)^{\kappa} \int d\alpha_{i} \ f(\alpha_{i})$$
$$= C_{1}\Lambda^{\kappa} \int da_{\mu}d\lambda \ \lambda^{\kappa-\nu-1}g^{-m}$$
(4.9)

mit renormiertem g. In einer SU(n)-YANG-MILLS-Theorie ist

$$S_1 = 8\pi^2, \qquad \beta_0 = \frac{11}{3} \cdot \frac{n}{16\pi^2}, \qquad \kappa = \frac{11}{3}n.$$
 (4.10)

Betrachten wir nun den K-Instantonbeitrag in einem endlichen Raumzeitvolumen V mit periodischen Randbedingungen. Wir erwarten, dass die Wirkung der Instantonen am Sattelpunkt noch von $\lambda V^{-\frac{1}{\nu}}$ abhängt [8]. Die Nullmoden werden gegen Moden mit sehr kleinen Eigenwerten ausgetauscht, die etwa wie $\lambda V^{\frac{1}{\nu}} \to 0$ gegen Null gehen, und als kollektive Koordinaten C_1 behandelt werden. Aus Dimensionsgründen erhalten wir aus (4.9)

$$Z_1 = C_1 (\Lambda^{\nu} V)^{\frac{\kappa}{\nu}}. \tag{4.11}$$

Durch die Überlagerung der Einzellösungen erhalten wir eine K-Potenz im Exponenten:

$$\exp\left\{-KS_1\left(\frac{1}{g^2(\mu)} - \frac{\kappa}{S_1}\ln\mu\right)\right\} = \Lambda^{K\kappa}.\tag{4.12}$$

Aus (4.11) wird damit

$$Z_K = C_K (\Lambda^{\nu} V)^{K_{\overline{\nu}}^{\kappa}}. \tag{4.13}$$

Nun soll Z_K auf eine Form gebracht werden, in der sich die Zustandssumme berechnen läßt. Dazu bedienen wir uns der Vorstellung des verdünnten Gases. Die K-Instanton-Zustandssumme lässt sich dann schreiben als

$$Z_K = \frac{1}{K!(g_0\sqrt{2\pi})^{mK}} \int d\xi_i \ J(\xi_i) \left(\frac{\det' \Delta_K}{\det \Delta_0}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-K\left(\frac{S_1}{g_0^2}\right)}. \tag{4.14}$$

Mit obigen Definitionen wird dies nach Renormierung zu

$$Z_K = \frac{\Lambda^{K\kappa}}{(g_0\sqrt{2\pi})^{mK}} \int d\xi_i \ e^{-U(\xi_i)}.$$
 (4.15)

Hierbei wird die Abhängigkeit der Kopplungskonstante g von den kollektiven Koordinaten ξ_i vernachlässigt und entsprechend nicht bei der Integration berücksichtigt. Um das Potenzial $U(\xi_i)$ einfacher handhaben zu können, werden nun Orts- $(a_{\mu}^{(j)})$ und Radiuskoordinaten $(\lambda_j, j=1,...,K)$ eingeführt. Wie in der Approximation des verdünnten Gases können wir nun schreiben

$$Z_{K} = \Lambda^{K\kappa} \frac{1}{K!} \int \prod_{j} \frac{da^{(j)} d\lambda_{j}}{\lambda_{j}^{\nu+1}} \int \prod_{i,j} d\alpha_{i}^{(j)} \prod_{j} \lambda_{j}^{\kappa} \frac{e^{-\widetilde{U}(a^{(j)}, \lambda_{j}, \alpha_{i}^{(j)})}}{(g(\lambda_{j}^{-1})\sqrt{2\pi})^{m}},$$
(4.16)

wobei $\alpha_i^{(j)}$ die übrigen kollektiven Koordinaten darstellt.

4.3 Das Potenzial des ν -dimensionalen Instanton-Gases

4.3.1 Das Hard-Core-Potenzial

Wie wir schon erörtert haben, hängt der thermodynamische Limes empfindlich von der zulässigen Radiusgröße ab. Aus (4.9) ist bekannt, dass diese proportional zu $\lambda_j^{\kappa-\nu-1}d\lambda_j$ ist und mit λ_j wächst. Den größten Beitrag zur Zustandssumme liefert eine Konfiguration, in der das Volumen mit Instantonen dicht gefüllt ist. Dort wird auch das Potenzial \widetilde{U} interessant. Um dieses immer noch sehr komplizierte Potenzial besser behandeln zu können, verwenden wir als weitere

Vereinfachung die Anschauung des Tröpfchenmodells. Dazu spendieren wir den Instantonen einen harten Kern, so dass

$$e^{-\tilde{U}} = \Theta(a^{(j)}, \lambda_j) \tag{4.17}$$

mit

$$\Theta(\{a_j\}, \{\lambda_j\}) = \begin{cases} 1 & 1. \parallel a^{(j)} - a^{(i)} \parallel > \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\left(\frac{1}{\nu}\right)} (\lambda_j + \lambda_i) & \forall i, j, \\ 2. & |a_{\mu}^{(j)}| < \frac{1}{2} V^{\left(\frac{1}{\nu}\right)} & \forall j, \mu, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Hier wurde mit v_1 das ν -dimensionale Volumen einer Einheitskugel angegeben

$$v_1 = \frac{\pi^{\frac{\nu}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\nu}{2} + 1\right)}. (4.18)$$

 τ legt das effektive Volumen $\tau \lambda_i^{\nu}$ eines Instantons fest.

4.3.2 Das Soft-Core-Potenzial

Wir nehmen an, dass die Dichte zwar klein ist, jedoch groß genug, dass eine Wechselwirkung der Instantonen relevant wird. Wir ergänzen die Wirkung durch ein langsam veränderliches externes Feld $F_{\mu\nu}^{ext}$, das in einem einfachen Vakuum den Beitrag

$$S_{int} = -\left(\frac{2\pi^2}{g^2}\right)\lambda^2 \overline{\eta}_{a\mu\nu} F_{\mu\nu}^{ext} \tag{4.19}$$

zur Wirkung gibt [6]. Dieses Hintergrundfeld entsteht durch andere im Volumen vorhandene Instantonen. Man stellt sich vor, dass $F_{\mu\nu}^{ext}$ das Hintergrundfeld an den Positionskoordinaten des Instantons ist. Hier wurde das 't Hooft-Symbol $\overline{\eta}_{a\mu\nu}$ eingeführt, dass mit

$$\overline{\eta}_{a\mu\nu} = \begin{cases}
\varepsilon_{a\mu\nu} & \mu, \nu = 1, 2, 3 \\
\delta_{a\mu} & \nu = 4 \\
-\delta_{a\nu} & \mu = 4
\end{cases}$$
(4.20)

definiert ist. Der zentrale Gedanke ist, dass es sich hierbei um ein Zwei-Teilchen-Wechselwirkungspotenzial handelt, das die Form

$$V_{int} \sim \frac{\lambda_i^2 \lambda_j^2}{\|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_i\|^4} \tag{4.21}$$

hat (siehe Abb.4.1), was wir im Folgenden zeigen werden.

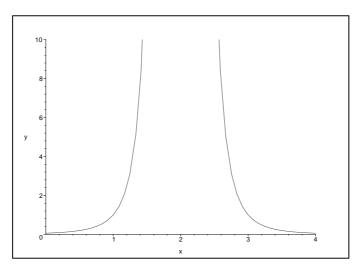


Abbildung 4.1: Ein reines Soft-Core-Wechselwirkungspotenzial

In Gl.(4.19) kann man den Term

$$\frac{2\pi^2}{a^2}\lambda^2\overline{\eta}^a_{\mu\nu} \tag{4.22}$$

als farbmagnetisches 'Dipolmoment' auffassen. Das externe Feld steht also in Wechselwirkung mit diesem Dipolmoment. Die Dipolwechselwirkung der Instantonen kann quantenmechanisch verstanden werden, wobei sie durch Gluonwechselwirkungen verursacht wird. Die Wechselwirkung (4.19) entspricht einem Instanton-Vertex, der die Emission eines Gluons von einem klassischen Instanton-Feld beschreibt [5]. Die Übergangsamplitude eines Gluons von einem Instanton zu einem Anti-Instanton ist gegeben durch

$$\frac{4\pi^4}{g^2}\lambda_1^2\lambda_2^2 R_I^{ab} R_A^{cd} \overline{\eta}_{\mu\nu}^b \eta_{\alpha\beta}^d \langle G_{\mu\nu}^a(x) G_{\alpha\beta}^c(0) \rangle, \tag{4.23}$$

wobei $\langle G^a_{\mu\nu}(x)G^c_{\alpha\beta}(0)\rangle$ der freie Eichfeldpropagator

$$\langle G^a_{\mu\nu}(x)G^c_{\alpha\beta}(0)\rangle = \frac{2\delta^{ac}}{\pi^2 x^6} (g_{\nu\alpha}x_\mu x_\beta + g_{\mu\beta}x_\nu x_\alpha - g_{\nu\beta}x_\mu x_\alpha - g_{\mu\alpha}x_\nu x_\beta) \quad (4.24)$$

ist, sowie R^{ab} eine Matrix ist

$$R^{ab} = \frac{1}{2} Sp(U\tau^a U^{\dagger} \tau^b), \tag{4.25}$$

die die relative Orientierung im Farbraum wiedergibt. Setzt man (4.24) in (4.23) ein, erhält man die Dipolwechselwirkung bis zur ersten Ordnung. Die Summierung aller n-Gluon-Wechselwirkungen erlaubt es, die volle Dipolwechselwirkung

$$S_{int} = \frac{32\pi^2}{g^2} \lambda_I^2 \lambda_A^2 \overline{\eta}_{\mu\rho}^a \eta_{\nu\rho}^b R^{ab} \frac{\widehat{R}_{\mu} \widehat{R}_{\nu}}{R^4}$$

$$\tag{4.26}$$

anzugeben (siehe auch [6]). R sei der Abstand der Instantonzentren

$$R = \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_i\|. \tag{4.27}$$

 \widehat{R} ist ein Einheitsvektor, der die Zentren der Instantonen und Anti-Instantonen verbindet. Um diese Wechselwirkung besser zu verstehen, werden zusätzliche Bezeichnungen eingeführt. Die relative Farborientierung wird durch den Vektor

$$u_{\mu} = \frac{1}{2i} Sp(U\tau_{\mu}^{+}) \tag{4.28}$$

dargestellt, wobei

$$\tau_{\mu}^{+} = (\vec{\tau}, i) \tag{4.29}$$

ist. Man definiert den Winkel θ , der die relative Farborientierung wiedergibt durch

$$\cos^2 \theta = -\frac{|u \cdot \widehat{R}|^2}{|u|^2}.\tag{4.30}$$

In dieser Schreibweise lässt sich die Wechselwirkung darstellen als

$$S_{int} = -\frac{32\pi^2}{g^2} \frac{\lambda_1^2 \lambda_2^2}{R^4} |u|^2 (1 - 4\cos^2 \theta). \tag{4.31}$$

Berücksichtigt man, dass u_{μ} in einer SU(2)-Eichtheorie ein reeller Vektor ist, wobei $|u|^2 = 1$ und betrachtet den Maximalwert der Wechselwirkung, der bei paralleler Stellung der \widehat{R} -Vektoren auftritt ($\theta = 0$), erhält man

$$S_{int} = \frac{96\pi^2}{g^2} \frac{\lambda_1^2 \lambda_2^2}{R^4}.$$
 (4.32)

Es sei angemerkt, dass u_{μ} in einer SU(n>2) Theorie ein komplexer Vektor ist, dessen Betrag $|u|^2 \leq 1$ ist. Man sieht, dass $S_{int} \simeq V_{int}$ ist (vgl. (4.21) mit (4.32)). Insbesondere besitzen Instantonen dieses Potenzials keinen harten Kern. Nun kann auf zwei Arten weiter verfahren werden. Es bietet sich einmal an [7], das Wechselwirkungspotenzial mit einem zusätzlichen Anteil der Form

$$U(i,j) = \begin{cases} 0 & \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j\|^4 > A \cdot \lambda_i^2 \lambda_j^2 \\ \infty & \|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j\|^4 < A \cdot \lambda_i^2 \lambda_j^2 \end{cases}$$
(4.33)

zu ergänzen, wobei

$$A = \frac{96\pi^2}{a^2} \tag{4.34}$$

ist.

4.3.3 Das Hard-Core-Potenzial mit Soft-Core-Anteil

Das Soft-Core-Potenzial nach [7] besitzt keinen harten Kern und steht dem Hard-Core-Potenzial gewissermassen gegenüber. Während das Hard-Core-Potenzial keine langreichweitige Komponente besitzt, gibt das Soft-Core-Potenzial das physikalische Verhalten für kleine Abstände unzureichend wieder. Deshalb soll auch ein Mischpotenzial diskutiert werden, das sowohl einen harten Kern, als auch eine langreichweitige Komponente besitzt. Es empfiehlt sich, das Potenzial (4.32) durch einen Parameter B zu ergänzen, also

$$S_{int} = U(i,j) = A \left(\frac{|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j|^2}{\lambda_i \lambda_j} - B \right)^{-2}.$$
 (4.35)

Für den Fall B=0 geht dies über in (4.32), allerdings ist der Fall $B\neq 0$ wesentlich interessanter. Für alle Paare setzt man

$$U(i,j) = \begin{cases} A \left(\frac{|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j|^2}{\lambda_i \lambda_j} - B \right)^{-2} \text{ falls} & \|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\|^4 \ge B^2 \lambda_j^2 \lambda_i^2 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(4.36)$$

und definiert dadurch einen verbotenen Bereich, der dem Hard-Core-Anteil des Instantons entspricht. Dessen Radius kann sich beliebig einstellen. Wir betrachten also Instantonen, die einen harten Kern haben, deren Ränder aber ausgeschmiert sind. Es muss gewährleistet sein, dass sich die harten Anteile der Kerne keinesfalls überlagern.

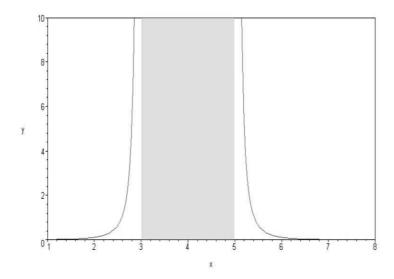


Abbildung 4.2: Das Wechselwirkungspotenzial mit Hard-Core- (grau) und Soft-Core-Anteil (4.36)

Da wir auch hier in einem endlichen Volumen mit periodischen Randbedingungen arbeiten, muss auch gewährleistet sein, dass sich das Instanton-Zentrum im Beobachtungsvolumen befindet, also

$$|a_j^{\mu}| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \qquad \forall \mu = 1, ..., \nu, \qquad \forall j,$$
 (4.37)

und das Instanton muss kleiner sein als das Beobachtungsvolumen

$$0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V \right)^{\frac{1}{\nu}} \forall j. \tag{4.38}$$

Nun kann die Zustandssumme (4.16)

$$Z_{K} = \Lambda^{K\kappa} \frac{1}{K!} \int \prod_{j} \frac{da^{(j)} d\lambda_{j}}{\lambda_{j}^{\nu+1}} \int \prod_{i,j} d\alpha_{i}^{(j)} \prod_{j} \lambda_{j}^{\kappa} \frac{e^{-U(a^{(j)}, \lambda_{j}, \alpha_{i}^{(j)})}}{(g(\lambda_{j}^{-1})\sqrt{2\pi})^{m}},$$
(4.39)

mit Potenzial angegeben werden. Mit

$$C = \frac{W}{(g\sqrt{2\pi})^m},\tag{4.40}$$

wobei W die Integration über die verbleibenden kollektiven Koordinaten darstellt, ist

$$Z_K(V) = \Lambda^{K\kappa} \frac{C^K}{K!} \int \prod_j^K d\mathbf{a}^{(j)} d\lambda_j \prod_j^K \lambda_j^{\kappa - \nu - 1} e^{-\tilde{U}(a^{(j)}, \lambda_j)}.$$
(4.41)

Mit dem hier vorliegenden Potenzial $\widetilde{U}(\{\mathbf{a}_j\},\{\lambda_j\})$ für ein Instantonengas wird daraus

$$Z_K(V) = \Lambda^{K\kappa} \frac{C^K}{K!} \int \prod_j^K d\mathbf{a}_j d\lambda_j \prod_j^K \lambda_j^{\kappa - \nu - 1} e^{-\frac{A}{2} \sum_{i, i \neq j} \left(\frac{\|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j\|^2}{\lambda_i \lambda_j} - B\right)^{-2}}.$$
(4.42)

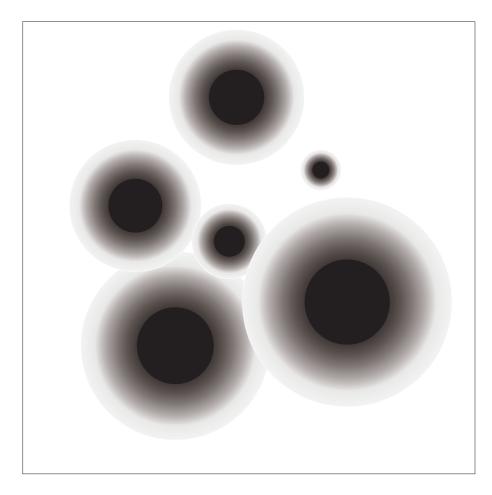


Abbildung 4.3: 6 Instantonen in einem Volumen V

Kapitel 5

Numerische Simulation eines Instantongases

5.1 Das Monte-Carlo-Verfahren

Die analytische Behandlung eines vierdimensionalen Instantongases als großkanonisches Ensemble birgt große Schwierigkeiten, weshalb nun auf eine numerische Methode zurückgegriffen werden soll: Die Monte-Carlo-Simulation. Dieses, von N. Metropolis et.al. [21] im 2.Weltkrieg in Los Alamos entwickelte Verfahren zur Beschreibung der Bewegung von Neutronen in Festkörpern, entwickelte sich in den letzten Jahrzehnten im Gleichschritt mit der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computer zu einem der wichtigsten numerischen Verfahren der statistischen Physik. Für Gittermodelle der Elementarteilchenphysik wurde es in den letzten Jahren ein wesentliches Hilfsmittel zur Bestimmung phänomenologischer Größen, wie z.B. die Masse von Elementarteilchen.

5.1.1 Der Markov-Prozess

Die Berechnung der Erwartungswerte von Funktionen auf Konfigurationsräumen

$$\langle F \rangle = \frac{\sum_{X} F[X] e^{-\beta E[X]}}{\sum_{X} e^{-\beta E[X]}},\tag{5.1}$$

wobei

$$\langle F \rangle \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} F[X_i]$$
 (5.2)

ist, ist selbst für diskrete lokale Freiheitsgrade problematisch, da der Konfigurationsraum oft viel zu groß ist. Das Ising-Modell auf einem 10^3 Gitter hat beispielsweise 2^{1000} Konfigurationen, was sich in absehbarer Zeit auf keinem Computer berechnen lassen wird. Wenn man sich aber zu nutze macht, dass die meisten Konfigurationen einen verschwindenden Beitrag liefern, kann man die

5. Numerische Simulation eines Instantongases

Erwartungswerte schon durch Auswertung und Mittelwertbildung der Observablen auf einen geeigneten Satz von unabhängigen, typischen Konfigurationen $X_1,...,X_N$ reduzieren. Darin besteht die Kernidee des Monte-Carlo-Verfahrens. Die Wahrscheinlichkeit, mit der die Konfiguration X_i in dieser Auswahl vertreten ist, muss proportional zum Boltzmann-Faktor $\mathrm{e}^{-\beta E[X_i]}$ sein. Das Monte-Carlo-Verfahren ist im wesentlichen ein Markov-Prozess, also ein Prozess stochastischer Natur, dessen Übergangswahrscheinlichkeit im i-ten Schritt von der Konfiguration X nach Y überzugehen, nicht von der weiteren Vergangenheit des Systems abhängt. Der Übergang von der Konfiguration X nach Y wird durch die Wahrscheinlichkeit $P(X \to Y)$ beschrieben. Sei $\Omega = X$ die Menge aller Konfigurationen und $F = \{F|F:\Omega\to\mathbb{R}\}$ der Vektorraum aller Funktionen über Ω . $P(X\to Y)=:P_{XY}$ sei eine lineare Abbildung auf diesem Vektorraum, wobei sie die Eigenschaften P

$$P_{XY} > 0 \tag{5.3}$$

und normiert

$$\sum_{X \in \Omega} P_{XY} = 1 \tag{5.4}$$

besitze. Zudem sei für alle Paare X,Y

$$\sum_{X_1,...,X_n} P_{XX_n} P_{X_nX_{n-1}} ... P_{X_2X_1} P_{X_1Y} = P_{XY}^{n+1} > 0 \qquad \text{ für geeignete } n. \quad (5.5)$$

Während (5.5) sicherstellt, dass jede Konfiguration erreicht werden kann, also dass das System ergodisch ist, gewährleistet die Bedingung (5.4), dass es genau eine Nachfolgekonfiguration gibt. Eine Folge des Satzes von Frobenius und Perron ist, dass die Markov-Matrix mit der Eigenschaft (5.5) einen nichtentarteten, maximalen Eigenvektor zum Eigenwert 1 hat. Sind $\omega[X]$ die Komponenten des Eigenvektors von P zum Eigenwert 1, so gilt

$$\omega[X] > 0 \quad \forall X \tag{5.6}$$

und

$$\sum_{X} \omega[X] = 1. \tag{5.7}$$

Daraus kann man folgern, dass

$$\lim_{n \to \infty} P^n = P^{\infty} \tag{5.8}$$

existiert und

$$P_{XY}^{\infty} = \omega[Y] \tag{5.9}$$

unabhängig von X ist. Somit folgt für jeden Vektor $a_0(X)$ mit $\sum_X a_0(X) = 1$ die Gleichung

$$\sum_{X} P_{XY}^{\infty} a_0(X) = \omega[Y]. \tag{5.10}$$

Startet man also mit beliebiger Konfiguration X, generiert der Markov-Prozess nach 'unendlich' vielen Schritten Konfigurationen Y mit der Wahrscheinlichkeit $\omega[Y]$. In dem Programm zur Berechnung der Instantonradien wird mit einem leeren Volumen gestartet. Parallel zu den Übergangsprozessen wird die Dichte berechnet. Ändert sich diese nur noch unwesentlich, befindet sich das System im Gleichgewicht und man kann die Radienverteilung ausgeben.

Für die Realisation des Markov-Prozesses ist die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts von Bedeutung,

$$P_{XY}\omega[X] = P_{YX}\omega[Y]. \tag{5.11}$$

Es handelt sich dabei um eine Art Fliessgleichgewicht. In dem Programm wird in jedem Schritt maximal eine Aktion durchgeführt, also eine Erzeugung, Vernichtung oder Bewegung eines Instantons. Die neue Konfiguration liegt also sehr nahe bei der alten, man spricht von autokorrelierten Zuständen.

5.1.2 Das Metropolis-Verfahren

Das Metropolis-Verfahren besteht aus zwei Schritten. In einem ersten wählt man ausgehend von einer Konfiguration X eine neue Konfiguration Y. Dabei wird ein Listenelement — ein Instanton — zufällig ausgewählt und anschliessend verschoben, vernichtet oder an einer Stelle erzeugt, falls (5.12) erfüllt ist. In einem zweiten Schritt, der sich die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts zu Nutze macht, entscheidet man mit einer Wahrscheinlichkeit $p_2(X \to Y)$, ob Y angenommen werden soll, oder nicht. Dazu vergleicht man eine im Intervall [0,1] gleichverteilte Zufallszahl x mit dem Verhältnis der Boltzmann-Faktoren

$$X_{(nachher)} = Y$$
, falls $e^{U[X]-U[Y]} \ge x$,
 $X_{(nachher)} = X$, falls $e^{U[X]-U[Y]} < x$. (5.12)

Dies bedeutet, dass eine energetisch günstigere Konfiguration immer angenommen wird. Je ungünstiger die neue Konfiguration ist, desto unwahrscheinlicher wird ihre Akzeptanz.

5.2 Das Programm

Das von Christel Kamp [14] erstellte und von mir modifizierte C++ Programm zur Berechnung großkanonischer Instanton-Ensemble besteht im Wesentlichen aus dem Hauptprogramm, einer Klasse, die die benötigten Methoden zur Verfügung stellt, sowie einer Klasse, mit der man Zufallszahlen generieren kann, die auf dem Intervall [0,1] gleichverteilte Zufallszahlen liefert. Im Hauptprogramm wird mit einem leeren ν -dimensionalen Volumen der Kantenlänge L gestartet. Mit jeweils einer Wahrscheinlichkeit von 1/3 werden die Methoden Create, Move und Destroy aufgerufen. Diese 3 Methoden bilden das Herzstück der Simulation. Nach einer festgelegten Anzahl an Rechenschritten berechnet das Programm die momentane Dichte des Gases und kann auf Wunsch ein Histogramm der Radienverteilung ausgeben. Über die Dichtekurve kann man kontrollieren, inwieweit sich das System schon im Gleichgewicht befindet.

Die Methode Create wählt einen zufälligen Ort aus und erzeugt dort ein Instanton mit einem zufälligen Radius. Danach wird überprüft, ob dieser Zustand überhaupt angenommen werden kann, was in vier Schritten geschieht:

1. Es wird überprüft, ob die Ortskoordinaten des Instantons im Beobachtungsvolumen liegen, und zwar mit

$$|a_j^{\mu}| < \frac{1}{2} V^{\frac{1}{\nu}} \qquad \mu = 1, ..., \nu.$$
 (5.13)

2. Es wird überprüft, ob es ins Volumen passt; dazu darf der Radius die halbe Kantenlänge nicht überschreiten

$$0 < \lambda_j < \frac{1}{2} \left(\frac{v_1}{\tau} V^{\frac{1}{\nu}} \right)^{\frac{1}{\nu}}. \tag{5.14}$$

3. Der Hard-Core-Anteil der Instantonen darf sich nicht überschneiden; insbesondere muss die Kollisionsabfrage erfüllt sein, d.h.

$$\|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_i\|^4 > B^2 \lambda_i^2 \lambda_i^2 \qquad \forall i. \tag{5.15}$$

4. Sind die ersten drei Bedingungen erfüllt, wird nach dem Verfahren von Metropolis (Kap.[5.1.2]) die Annahmewahrscheinlichkeit des neuen Zustandes überprüft. Der Übergang

$$X \to Y$$
 geschieht, wenn
$$\frac{C}{2(K+1)} \cdot V \left(\frac{v_1}{\tau}V\right)^{\frac{1}{\nu}} \lambda_j^{\kappa-\nu-1} e^{\Delta U} \ge x,$$
 (5.16)

wobei $\Delta U = U_{vor} - U_{nach}$ hier

$$\Delta U = -U_{nach} = -A \sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j}' - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{j}' \lambda_{i}} - 1 \right)^{-2}$$

$$i \neq j$$
(5.17)

ist, da $U_{vor} = 0$ ist. x ist eine auf dem Intervall [0, 1] gleichverteilte Zufallszahl. Mit \mathbf{a}'_i wird der neue Zustand in besonderer Weise gekennzeichnet.

Sind die 4 Voraussetzungen erfüllt, wird die neue Konfiguration angenommen, ansonsten wird sie verworfen, was bedeutet, dass die alte Konfiguration X auch die neue Konfiguration ist. Im letzten Punkt wird deutlich, dass die Annahme eines Zustandes umso unwahrscheinlicher wird, je größer das Potenzial am Erzeugungsort ist.

Die Methode Move sucht sich zufällig ein Instanton aus der Liste aus und verschiebt dieses. Ob das Ergebnis tatsächlich angenommen wird, entscheiden die gleichen vier Schritte, die auch schon in der Methode Create zum Einsatz kamen. Das Verhältnis $\frac{P(Y)}{P(X)}$ wird hier berechnet mit

$$X \to Y$$
, wenn

$$\left(\frac{\lambda_{j}'}{\lambda_{j}}\right)^{\kappa-\nu-1} \cdot \exp -A \left(\sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j}' - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{j}' \lambda_{i}} - 1 \right)^{-2} - \sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j} - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{i} \lambda_{j}} - 1 \right)^{-2} \right) \geq x.$$

$$\left(\sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j} - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{j}' \lambda_{i}} - 1 \right)^{-2} - \sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j} - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{i} \lambda_{j}} - 1 \right)^{-2} \right) \geq x.$$

$$(5.18)$$

Für den Fall, dass das Instanton in ein Gebiet geringeren Potenzials verschoben wird, wird die Konfiguration auf jeden Fall angenommen. Ansonsten wird die Annahme unwahrscheinlicher, je größer die Potenzialdifferenz ist.

Die Methode Destroy sucht sich ein beliebiges Instanton aus und eliminiert es. Dieser Prozess ist das Gegenstück zur Methode Create. Die Annahmewahrscheinlichkeit berechnet sich nach

$$X \to Y$$
, wenn $\frac{2K}{C} \cdot \frac{1}{V\left(\frac{v_1}{\tau}V\right)^{\frac{1}{\nu}} \lambda_i^{\kappa-\nu-1}} \cdot e^{\Delta U} \ge x$, (5.19)

wobei $\Delta U = U_{vor} - U_{nach}$ hier

$$\Delta U = U_{vor} = A \sum_{i} \left(\frac{\|\mathbf{a}_{j} - \mathbf{a}_{i}\|^{2}}{\lambda_{j} \lambda_{i}} - 1 \right)^{-2}$$

$$i \neq j$$
(5.20)

ist, da $U_{nach}=0$ ist. Im Gegensatz zu Create, wo die Annahme eines Zustandes an Orten hohen Potenzials unwahrscheinlicher wird, nimmt sie hier also zu. Instantonen werden an Stellen 'ungünstiger' Potenziale also eher vernichtet und an 'günstigen' Potenzialstellen bevorzugt erzeugt. Da das mittlere Potenzial steigt, je mehr Instantonen schon vorhanden sind, kann man davon ausgehen, dass die Methode Destroy mit zunehmender Instantondichte vermehrt auftritt. Das Ensemble strebt in einen Gleichgewichtszustand. Ausserdem ist davon auszugehen, dass die Dichte des Instantongases im Gleichgewicht im Vergleich zu einem reinen Hardcore-Gas geringer sein wird. Die Konstante A, welche für den Fall A=0 ein Hardcore-Gas realisiert, wird also auch Einfluss auf die Gleichgewichtsdichte haben.

Deklaration der in der Simulation verwendeten Größen:

V = Beobachtungsvolumen

K = Anzahl der Instantonen

 \mathbf{a}_i = Ortskoordinate des j-ten Instantons

 λ_i = Instanton radius

 ν = Dimension

C = Integral über verbleibende kollektive Koordinaten eines Instantons

 $\tau \lambda_i^{\nu}$ = effectives Instantonvolumen

x = gleichvereilte Zufallszahl

 $\tau \lambda_i^{\nu}/v_1$ = Auf eine Einheitskugel normiertes Instantonvolumen

Im weiteren Verlauf sollen zuerst großkanonische Hard-Core-Instanton-Ensembles untersucht werden, die ein zusätzliches Soft-Core-Potenzial besitzen (siehe Kap.[5.3]). Zur Kontrolle werden dabei zuerst Gase betrachtet, deren Kopplungskonstante zu Null gewählt wurde (A=0), denn für diesen Fall erhält man ein reines Hard-Core-Gas. Das Programm liefert Werte, die denen des unmodifizierten Programms entsprechen. Danach wird das Instantongas für verschiedene Kopplungen simuliert. Es wird dabei der Frage nachgegangen, inwieweit sich dabei die Radiusverteilung verändert. Zum Schluss wird ein reines Soft-Core-Potenzial untersucht.

5.3 Das Hard-Core-Instantongas mit Soft-Core-Anteil

Das Programm startet mit einem leeren Volumen der Kantenlänge L. Zu Beginn werden mehr Instantonen erzeugt als vernichtet, da die Methode Destroy an einem zufälligen Instanton angreift und versucht, es zu vernichten. Die Methode Create hingegen versucht an einem willkürlichen Ort Instantonen zu erzeugen. Zu Beginn ist eine Vernichtung relativ unwahrscheinlich, während eine Erzeugung vorrangig geschieht. Mit steigender Instantondichte gleichen sich die Verhältnisse an, das System driftet ins Gleichgewicht. Damit Randeffekte keine Rolle mehr spielen, muss das Volumen für die jeweiligen Instantonen groß genug gewählt werden.

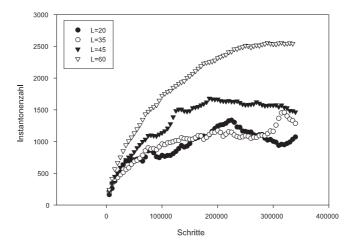


Abbildung 5.1: Drift ins Gleichgewicht bei verschiedenen Kantenlängen, $A=200,\,\nu=4,\,B=1,\,\alpha=1$

Abb.[5.1] zeigt die absolute Anzahl der Instantonen eines Instantonensembles in verschiedenen Volumina, wobei α definiert ist durch

$$\alpha = \kappa - \nu - 1. \tag{5.21}$$

Hier wird sehr deutlich, dass bei einer Kopplung von A=200 ein Volumen der Kantenlänge L=60 benötigt wird, damit Dichtefluktuationen im Gleichgewicht vollständig aussterben. Das Volumen ist eine sehr kritische Komponente der Simulation. Wählt man es zu klein, haben Randeffekte einen zu großen Einfluss auf das Ergebnis. Wählt man es sehr groß, können zwar Randeffekte vermieden werden, allerdings wird die Instantonenzahl K auch beliebig groß. Der Grund dafür ist, dass jedes neu erschaffene Objekt auf Kollision mit allen vorherigen überprüft wird. Somit steigt der Rechenaufwand mit 2^K . Da in dem erweiterten Programm nach erfolgreicher Kollisionsabfrage eine Potenzialsumme über alle K gebildet wird, benötigt jeder Rechenschritt proportional zu K mehr Zeit. Da die Prozesse hochgradig redundant sind, sind sie für parallele Verarbeitung ungeeignet. Eine Realisierungsmöglichkeit wäre eine spekulative

Struktur. Während in einem ersten Prozess z.B. die Methode Create verarbeitet wird, könnte in zwei weiteren Prozessen sowohl von der Annahme als auch einer Ablehnung ausgegangen werden, wobei ein Ereignis nach erfolgreicher Berechnung des ersten Prozesses verworfen wird. Der Overhead wäre allerdings gigantisch - während die Leistung sich pro Spekulationsstufe linear steigert, verdoppelt sich die Anzahl der benötigten Prozessoren. Um die Rechenzeit nicht ins unermessliche zu steigern, sollte die Gesamtanzahl der Instantonen K in dem Beobachtungsvolumen 2500 nicht überschreiten. Die in der Folge betrachteten Ensembles werden sich unterhalb dieses Wertes befinden, wobei gewisse Dichteschwankungen im Gleichgewicht in Kauf genommen werden müssen.

5.4 Messungen im Gleichgewicht

Sind die Dichteschwankungen weitestgehend ausgestorben, befindet man sich in Gleichgewicht, in dem Create und Destroy gleich häufig zum Zuge kommen. Damit das Gesamtsystem ins Gleichgewicht kommt, sind weitere Rechenschritte nötig. In dem Rahmen spielt die Methode Move eine herausragende Rolle. Bei der Bewegung der Instantonen im Konfigurationsraum können sich die Radien λ neu einstellen. So wirkt die Radienverteilung anfangs auch im Gleichgewicht noch verrauscht. Die bei der ersten Dichtemessung (siehe Abb.[5.1]) aufgenommene Radienverteilung (Abb.[5.2]) für die Kopplung A=200 und das Volumen mit der Kantenlänge L=60 zeigt noch deutliche Schwankungen, das Dichtegleichgewicht ist jedoch schon erreicht. Mit weiteren Rechenschritten würde sich die Radienverteilung gleichmäßiger abzeichnen.

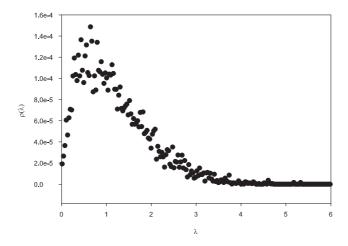


Abbildung 5.2: Radienverteilung im Gleichgewicht, $A=200, L=60, \nu=4, B=1, \alpha=1$

Je größer das Beobachtungsvolumen wird, desto länger wird die Korrelationszeit, auf die gesamte Rechenzeit bezogen spielt sie jedoch eher eine untergeordnete Rolle, da die Rechenschritte im Dichtegleichgewicht wesentlich mehr Zeit in Anspruch nehmen.

5.5 Der Konsistenzcheck

Das ursprüngliche Programm zur Berechnung der Radiusverteilung von Instantonen wurde mit analytischen Näherungen im thermodynamischen Limes genauestens verglichen, so dass es im Rahmen des Modells eines harten Kernes korrekte Werte liefert [14]. In der modifizierten Fassung gibt es die Möglichkeit, das Potenzial durch einen Soft-Core-Anteil zu ergänzen, bzw. zu ersetzen. Um etwaige Programmierfehler zu vermeiden, werden die Berechnungen des ursprünglichen Programms, das ein Hard-Core-Gas simuliert,

$$e^{-\tilde{U}} = \Theta(a^{(j)}, \lambda_j), \tag{5.22}$$

mit dem veränderten Programm, das einen zusätzlichen Soft-Core-Beitrag hat

$$e^{U(\{\mathbf{a}_j\},\{\lambda_j\})} = e^{A\sum_{i,i\neq j} \left(\frac{|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j|^2}{\lambda_i \lambda_j} - B\right)^{-2}}.$$
 (5.23)

verglichen. Anfangs wird in beiden Simulationen die alte Kollisionsabfrage implementiert.

$$\|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\| \ge \left(\frac{\tau}{v_1}\right)^{\left(\frac{1}{\nu}\right)} (\lambda_j + \lambda_i) \quad \forall i, j.$$
 (5.24)

Während diese Kollisionsabfrage für ein Hard-Core-Gas besonders sinnvoll ist, eignet sich für den zweiten Fall (5.26) besser. Das Soft-Core-Potenzial (5.23) wird bei

$$\frac{|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j|^2}{\lambda_i \lambda_j} = B \tag{5.25}$$

extremal und die repulsive Wechselwirkung wird am größten. In einem zweiten Schritt soll die Kollisionsabfrage des Hard-Soft-Core-Potenzials mit den alten Resultaten verglichen werden

$$\|\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i\|^4 > B^2 \lambda_j^2 \lambda_i^2 \qquad \forall i, j.$$
 (5.26)

Zum Schluß wird die neue Kollisionsabfrage auch in das alte Programm eingebaut, um Fehler auszuschließen. In allen Fällen wird die Kopplung A zu 0 gewählt und in 4 Dimensionen gerechnet.

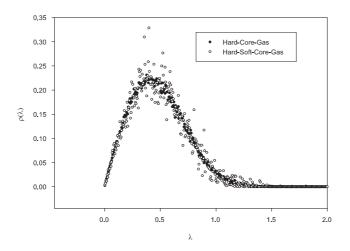


Abbildung 5.3: Vergleich der Radienverteilungen, $L=10,~\nu=4,~\alpha=1,$ bei Hard-Soft-Core A=0,~B=1

In Abb.[5.3] wurde die Radienverteilung eines Hard-Core-Gases mit der eines Hard-Soft-Core-Gases verglichen. Im zweiten Fall wurde diesmal auch die Kollisionsabfrage (5.24) benutzt. Bei der Analyse fiel auf, dass die Einzelwerte der beiden Simulationen bei gleichem Startwert des Pseudo-Zufallsgenerators nach gleich vielen Schritten exakt gleich waren. In Abb.[5.3] wurde für beide Simulationen die gleiche Rechenzeit veranschlagt. Das Hard-Soft-Core-Gas führt pro Rechenschritt zusätzliche Potenzialberechnungen im Monte-Carlo-Schritt durch und wird hier um den Faktor 10 ausgebremst. Dabei sind deutlich die in Kap.[5.4] angesprochenen Effekte zu beobachten. Die Potenzialberechnungen schlagen sich im Ergebnis deshalb nicht nieder, da die Kopplung A=0 gewählt wurde, um eine Vergleichbarkeit zu erreichen.

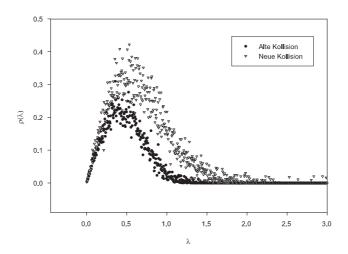


Abbildung 5.4: Vergleich der Radienverteilungen zweier Hard-Soft-Core-Gase mit verschiedenen Kollisionen, $L=10, \nu=4, \alpha=1, A=0, B=1$

Wie man Abb. [5.4] entnimmt, ermöglicht die neue Kollisionsabfrage eine deutliche Verschiebung der Radienverteilung hin zu größeren Radien. Abb. [5.5], in der die Dichteentwicklung beider Simulationen dargestellt wird, zeigt außerdem, dass die Instantonenzahl K, und damit die Dichte bei dieser Kollision, sich im Gleichgewicht wesentlich erhöht. Zusammenfassend lässt sich also feststellen, dass die Instantonenzahl bei der neuen Kollision bei gleichzeitig größerem mittlerem Radius erheblich ansteigt.

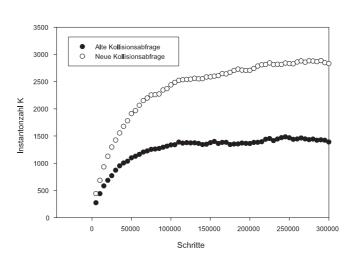


Abbildung 5.5: Vergleich der Dichteverteilungen zweier Hard-Soft-Core-Gase mit verschiedenen Kollisionen, $L=10, \nu=4, \alpha=1, A=0, B=1$

Im Dritten Fall (siehe Abb. [5.6]) wurde die Kollisionsabfrage der ursprünglichen Hard-Core-Simulation gegen die Abfrage der repulsiven Wechselwirkung

ausgetauscht und mit der Hard-Soft-Core Simulation verglichen. Auch diese Ergebnisse sind konsistent, die Abweichungen entstehen wieder durch die differierende Anzahl an Simulationsschritten, die bei gleicher Rechenzeit entstehen.

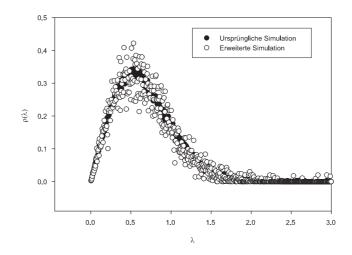


Abbildung 5.6: Vergleich der Radienverteilungen des Hard-Core und des Hard-Soft-Core-Potenzials mit repulsiver Wechselwirkung, $L=10,~\nu=4,~\alpha=1,~A=0,~B=1$

5.6 Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei verschiedenen Kantenlängen

Die Randeffekte, die bei endlichen Volumina auftreten, machen sich nicht nur in Dichteschwankungen bemerkbar, sondern auch in einer veränderten Radiusverteilung. Mit größeren Volumina nähert man sich der physikalischen Realität an, dem unendlich großen Volumen. Da sich der Rechenaufwand durch größere Volumina jedoch erheblich steigert, ist man daran interessiert, das Volumen möglichst klein zu wählen. Abb. [5.7] zeigt exemplarisch für eine Kopplung von A=2, wie sich die Radienverteilung von einem Volumen der Kantenlänge L=5 zu einem Volumen der Kantenlänge L=15 entwickelt.

Es fällt auf, dass die Instantonverteilung in grösseren Volumina stärker unterdrückt wird. Die Radiendichte nimmt ab, da die Instantondichte abnimmt. Der Grund dafür liegt darin, dass die Instantonenzahl K sich bei einem Volumen von $V=15^4=50625$ mit ungefähr 4000 im Gleichgewicht nicht auf das Fünffache der Instantonenzahl des Volumens $V=10^4=10000$ einstellt, sondern eben nur auf das Vierfache. Die Instantonenzahl für $V=10^4$ liegt bei K=1000.

In Anbetracht der noch kleineren Volumina mit L=4 und L=3 sowie der weniger rechenintensiven Hard-Core-Simulation kann man vermuten, dass die Verteilungen gegen eine Grenzverteilung etwas unterhalb der L=15 Simulation streben. Selbst die stark verrauschten (da nicht im Gleichgewicht befindlichen) Simulationen für L=20 und L=25 lassen Rückschlüsse auf dieses Verhalten

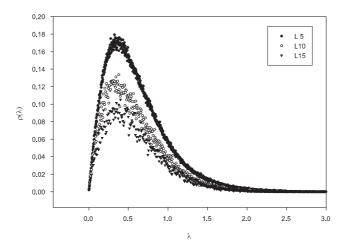


Abbildung 5.7: Vergleich der Radienverteilungen in verschiedenen Volumnia, bei einer Kopplung von $A=2, \ \nu=4, \ \alpha=1, \ B=1$

zu.

Im Unterschied zu einer reinen Hard-Core Simulation, die sich bei einer Kantenlänge von L=15 in einem volumenunabhängigen Gleichgewicht befindet, sollte das Volumen bei Instantonen mit Fernwirkung also weit größer gewählt werden.

Eine logarithmische Auftragung der Werte aus Abb.[5.7], wie sie in Abb.[5.8] dargestellt ist, liefert weiteren Aufschluss über die Thermalisierung. Während sich der Graph der Simulation für L=5 deutlich von den Graphen für L=10 und L=15 absetzt, sind letztere nur schwer zu unterscheiden.

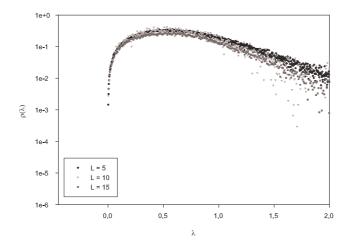


Abbildung 5.8: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kantenlängen, logarithmische Auftragung $\nu=4,~\alpha=1,~B=1$

5.7 Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei unterschiedlichen Kopplungen

Instantonensembles mit Potenzialen verschiedener Kopplungskonstanten besitzen aufgrund der unterschiedlichen Fernwirkungen differierende Dichten. Dabei werden die Instantondichten umso kleiner, je größer die Kopplungskonstante gewählt wird. Diese Konstante ist proportional zur Fernwirkung und erhöht das mittlere Potenzial, wobei ein größeres Potenzial eine Instantonvernichtung begünstigt. Das Gas wird mit steigendem A also dünner. Diese Erkenntnis wird mit den Simulationen Abb.[5.9] und Abb.[5.10] belegt. Da die größten Veränderungen im Bereich zwischen A=0 und A=1 festzustellen sind, wurde dieser in den Simulationen (Abb.[5.10]) näher untersucht.

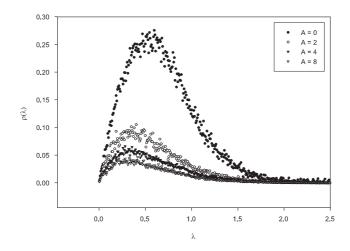


Abbildung 5.9: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen $L=15,~\nu=4,~\alpha=1,~B=1$

In Abb.[5.9] ist eine deutliche Verringerung der Radiendichte bei stärkerer Kopplung zu beobachten. Außerdem verschiebt sich das Maximum hin zu wesentlich kleineren Radiendichten.

Bei einer Kantenlänge von L=15 macht es keinen Sinn, Kopplungen zu betrachten, die größer als A=10 sind, da sie aufgrund der vergrößerten Fernwirkung starken Gleichgewichtsschwankungen unterliegen. Das kleinste vernünftige Volumen muss also umso größer gewählt werden, je größer A ist.

An dieser Stelle ergibt sich das Problem der Vergleichbarkeit verschiedener Kopplungsstärken. Zahlreiche Testrechnungen haben ergeben, dass bei A=0 eine Kantenlänge von L=15 von der Rechenzeit gerade noch vertretbar ist und gute Resultate liefert, während bei A=50 ein Volumen von L=50 sinnvoll ist, um der Fernwirkung genügend Rechnung zu tragen. Dieses Volumen wäre aber aufgrund der hohen Instantonenzahl K für ersteren Fall von der Rechenzeit her unvertretbar. Bei stärkerer Kopplung bleibt die Instantondichte kleiner und damit auch die Instantonenzahl im Gesamtvolumen. Um derartige Kopplungen miteinander zu vergleichen, muss der Kompromiss eingegangen werden,

dass kleinere Kopplungen bei geringeren Volumina mit größeren Kopplungen größerer Volumina verglichen werden. Da darauf geachtet wird, dass sich die Ensembles in einem höchstens gering fluktuierendem Gleichgewicht befinden, sollten die Ergebnisse aber sehr gut vergleichbar sein.

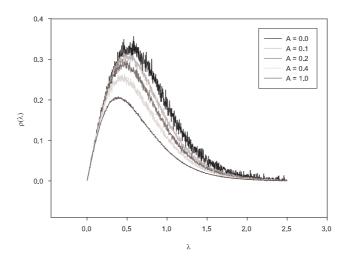


Abbildung 5.10: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen $L=5,~\nu=4,~\alpha=1,~B=1$

Die in Abb.[5.11] dargestellten Radienverteilungen offenbaren in einer logarithmischen Auftragung von $\rho(\lambda)$ gegen λ eine interessante Eigenschaft. Ihre Werte liegen jenseits des Maximums der Dichteverteilungen für große Radien auf einer Geraden, was bedeutet, dass große Radien exponentiell abgedämpft werden. Instantonradien besitzen also unabhängig von der Kopplungskonstanten für $\alpha=1$ ein lineares Anstiegsverhalten für kleine Radien und ein exponentielles Abklingverhalten für große Radien.

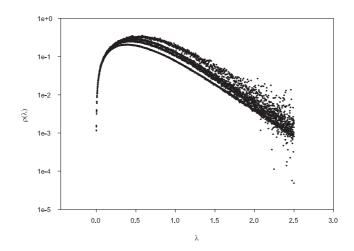


Abbildung 5.11: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen, logarithmische Auftragung mit $A=0,\ A=0.2,\ A=0.4,\ A=1.0$ (von oben nach unten), $L=5,\ \nu=4,\ \alpha=1,\ B=1$

Vergleicht man sehr große Kopplungskonstanten mit kleineren (siehe Abb.[5.12] und Abb.[5.9]), kann man eine Fortführung der beobachteten Aspekte feststellen. In Abb.[5.12] unterscheiden sich der größte und kleinste Wert der Kopplungskonstanten um den Faktor 8. Es fällt auf, dass die Erhöhung der Kopplungskonstanten bei großen Werten nicht mehr so stark ins Gewicht fällt (Abb.[5.12]). Die Abdämpfung der Radienverteilung fällt wesentlich weniger schwach aus.

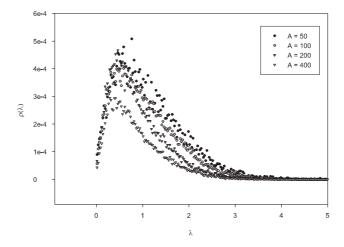


Abbildung 5.12: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen, $L=50, \ \nu=4, \ \alpha=1, \ B=1$

Abb.[5.13], in der die Simulationsergebnisse aus Abb.[5.12] logarithmisch dargestellt wurden, zeigt das gleiche Verhalten, wie die Simulationen in Abb.[5.11]. Also gilt auch für starke Kopplungen ein lineares Anstiegsverhalten für kleine

Radien und ein exponentielles Abdämpfen für große.

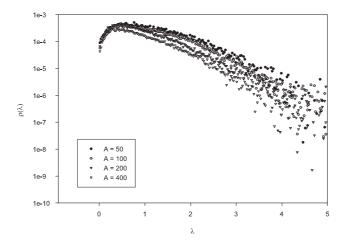


Abbildung 5.13: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen, logarithmische Auftragung, $L=50,~\nu=4,~\alpha=1,~B=1$

5.8 Das Hard-Soft-Core-Potenzial bei unterschiedlichen α

Im Folgenden wird eine Verteilung bei verschiedenen Werten von $\alpha = \kappa - \nu - 1$ untersucht. κ verhält sich in einer SU(N)-YANG-MILLS-THEORIE nach [8] wie $\kappa = \frac{11}{3}N$. Damit ergibt sich für die SU(2) und SU(3) für $\alpha = 2.33$ bzw. $\alpha = 6$. Die Ergebnisse der Simulation finden sich in Abb.[5.14]. Bei größeren Werten von α verschiebt sich das Maximum der Verteilung zu größeren Werten von λ . Während die Radienverteilung für $\alpha = 1$ ihr Maximum bei ungefähr 0.4 hat, liegt er für $\alpha = 6$ bei einem doppelt so großen Wert. Während das Maximum der Verteilung mit wachsendem α stark abgedämpft wird, werden größere Radien wahrscheinlicher. Die logarithmische Auftragung (Abb.[5.15]) läßt dieses Verhalten besonders deutlich zu Tage treten. Dort kann man erkennen, dass die Verteilung für $\alpha = 6$ die größte Radiendichte für Radien größer als 1.5 besitzt.

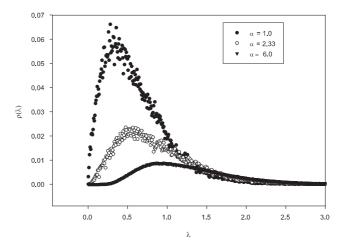


Abbildung 5.14: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen $\alpha, A=4, L=15, \nu=4, B=1$

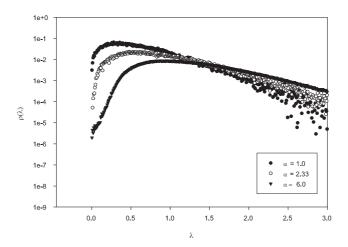


Abbildung 5.15: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen α , logarithmische Auftragung, $A=4,\,L=15,\,\nu=4,\,B=1$

Analog zu Abb.[5.9] und [5.12], in der die Simulationsergebnisse für $\alpha=1$ dargestellt wurden, werden in Abb.[5.16] und Abb.[5.17] die Simulationsergebnisse für $\alpha=2.33$ dargestellt.

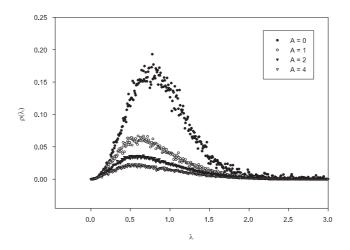


Abbildung 5.16: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen, $L=15,~\nu=4,~\alpha=2.33,~B=1$

Wie auch schon in Abb.[5.15] zu sehen ist, sind bei dieser Simulation die Radiendichten stärker abgedämpft als bei der $\alpha=1$ - Simulation. Bei kleinen Kopplungen wird die Radienverteilung von λ^{α} dominiert. Bei starken Kopplungen gleicht sich die $\alpha=2.33$ - Simulation in ihrer Radienverteilung der $\alpha=1.0$ - Simulation an.

In Abb.[5.18] wird das Verhältnis der Radienverteilungen von Simulationen mit $\alpha=1$ und $\alpha=2.33$ deutlich. Die Werte der SU(2) - Simulation wurden dabei

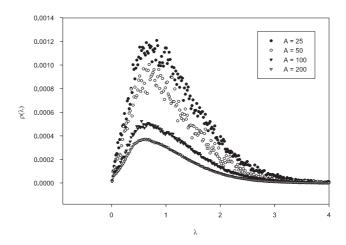


Abbildung 5.17: Vergleich der Radienverteilungen bei verschiedenen Kopplungen, $L=35,~\nu=4,~\alpha=2.33,~B=1$

mit 2.75 skaliert, so tritt die Ähnlichkeit besonders zu Tage. Die $\alpha=2.33$ - Simulation wirkt wie eine $\alpha=1$ - Simulation, die aufgeweitet wurde. Würde man die $\alpha=1$ -Simulation um den Faktor 1,7 aufweiten, so würde man feststellen, dass sich die Kurven in weiten Teilen in ihren Radienverteilungen gleichen. Die Verteilungen würden erst im Bereich größer als 2 größere Unterschiede zeigen. Zusammenfassend läßt sich sagen, dass die $\alpha=2.33$ - Simulation für große Kopplungen einer aufgeweiteten und abgedämpften Simulation bei $\alpha=1$ entspricht.

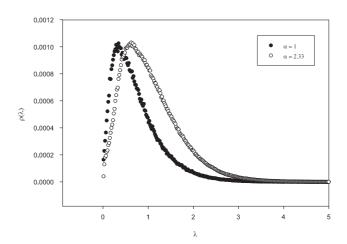


Abbildung 5.18: Vergleich der Radienverteilungen bei $\alpha=1$ und $\alpha=2.33, A=200, L=35, \nu=4, \alpha=2.33$ skaliert mit 2.75

5.9 Asymptotisches Verhalten der Instantongase bei $\alpha = 1$ und $\alpha = 2.33$

In den Kapiteln [5.7] und [5.8] wurde schon das Verhalten für große Radien besprochen und soll hier näher diskutiert werden. In [14] wurde eine analytische Approximation der Radiendichten für verschiedene α angestrebt. Es wurde eine Funktion der Form

$$\rho(\lambda) = \lambda^{\alpha} e^{-b\lambda^{P}} \tag{5.27}$$

gefunden. Da mit einem größeren α -Wert der Vorfaktor λ^{α} die Exponentialfunktion länger dominiert, werden entsprechend auch die durch diese Vorfaktoren dividierten Daten untersucht (siehe Abb.[5.19] für $\alpha=1$ und Abb.[5.20] für $\alpha=2.33$).

Für quantitative Aussagen über das Verschwinden der Verteilungen der Simulation wird für $F(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^{\alpha}}$ ein Ansatz der Form

$$F_{fit}(\lambda) = ae^{-b\lambda^P} \tag{5.28}$$

gemacht. a wird durch Extrapolation von $F(\lambda)$ für kleine Argumente gewonnen $(a = F_{fit}(0))$. Die Parameter b und P werden durch einen Fit an die Funktion (5.28) abgeschätzt (siehe Tabelle[5.1]).

Der numerische Fit an die Werte der Simulationen für verschiedene Kopplungskonstanten hat ergeben, dass die λ -Potenz $P_{1.0}$ für kleine Kopplungskonstanten im Bereich um 1.9 liegt, auf ein Minimum bei 0.8 abfällt und sich für große A auf 1.3 einpendelt. Der Vorfaktor b_1 steigt kontinuierlich von 1.66 auf über 8 an. Er reagiert sehr sensibel auf den Wert, der für a gefunden wird (siehe Tabelle[5.2]). Abb.[5.19] zeigt deutlich die initiale Abhängigkeit für große A.

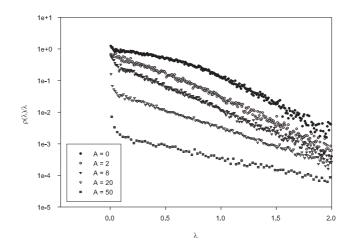


Abbildung 5.19: Abfall von $\frac{\rho(\lambda)}{\lambda^{\alpha}}$ logarithmische Auftragung, L=15 für A=0 und $A=2,\,L=50$ sonst, $\nu=4,\,\alpha=1,\,B=1$

Die $\alpha=2.33$ -Simulation zeigt für $P_{2.33}$ ein ähnliches Verhalten wie P_1 . Zuerst fällt der Wert bei steigender Kopplung ab, um dann wieder zuzunehmen. Im Unterschied zu P_1 pendelt er sich jedoch nicht bei einem festen Wert ein, sondern scheint weiter zu steigen. $b_{2.33}$ steigt ebenfalls. Für A>8 wurde der Wert zwar ermittelt, ihn anzugeben macht aber deshalb keinen Sinn, weil er sehr groß wird und außerdem im Wesentlichen von den Startbedingungen abhängt. Für A>50 haben die $\alpha=2.33$ -Simulationen mit stärkeren Gleichgewichtsfluktuationen zu kämpfen, die darauf zurückzuführen sind, dass die Fernwirkung bei diesen Simulationen deutlich zunimmt und somit kein thermischer Gleichgewichtszustand erreicht werden kann, da die Volumina dafür zu klein sind. Es ist also nicht auszuschließen, dass sich $P_{2.33}$ bei 3.6 einpendelt. Eine Simulation in größeren Volumina würde diese Vermutung klären.

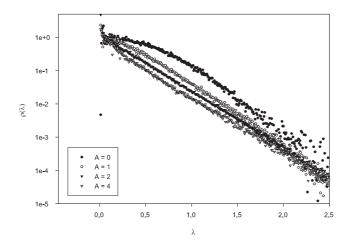


Abbildung 5.20: Abfall von $\frac{\rho(\lambda)}{\lambda^\alpha}$ logarithmische Auftragung, $L=50,~\nu=4,~\alpha=2.33,~B=1$

A	$b_{\alpha=1}$	$P_{\alpha=1}$	$L_{\alpha=1}$	$b_{\alpha=2.33}$	$P_{\alpha=2.33}$	$L_{\alpha=2.33}$
0	1.66	1.93	5	1.98	1.97	15
1	2.62	1.49	5	3.34	1.46	15
2	2.96	1.27	15	5.67	1.50	15
4	3.39	0.82	15	5.68	1.18	15
8	3.72	0.83	15	-	-	-
25	8.37	1.24	50	-	3.46	35
50	8.12	1.32	50	-	3.66	35
100	8.15	1.33	50	-	4.42	60
200	8.67	1.57	50	-	5.49	80
300	8.77	1.34	50	-	-	-

Tabelle 5.1: Ergebnis der Fits an die Monte-Carlo-Daten mit F_{fit} für $\nu=4,$ $\alpha=1,\,2\frac{1}{3},$ Fehler für P, b ca. ±0.05

a	$b_{\alpha=1}$
1.00	3.38
0.83	3.30
0.60	3.20
0.40	3.27

Tabelle 5.2: Ergebnis der Fits mit verschiedenen Startparametern a für $\nu=4,$ $\alpha=1,$ A=4, L=15

5. Numerische Simulation eines Instantongases

Kapitel 6

Resümee

In dieser Diplomarbeit wurde ein Instantongas mit verschiedenen Potenzialen in vier Raum-Zeit-Dimensionen numerisch untersucht. Dabei fiel das Hauptaugenmerk auf die Radiusverteilung der Instantonen bei verschiedenen Kopplungen. Eine erste Erkenntnis ist, daß die Radienverteilung sich durch eine modifizierte Kollisionsabfrage ändert (siehe Abb.[5.4]und Abb.[5.7]). Im Wesentlichen werden große Radien in der Radiendichte stärker unterdrückt. Durch die neue Kollisionsabfrage ändert sich das Verhalten des reinen Hard-Core-Gases bei größeren Volumina, ebenso wie das des Soft-Core-Gases, bei dem die Kopplung A=0 gewählt wurde. In größeren Volumina wird die mittlere Radienverteilung stärker unterdrückt, allerdings konvergieren diese Verteilungen in Volumen, die wesentlich größer sind, als die der ursprünglichen Kollisionsabfrage. Die allgemeine Form der Radienverteilungen ist linear für kleine Radien λ , und wird durch einen exponentiellen Abfall bei großen Radien bestimmt. Ein solches Verhalten läßt sich prinzipiell durch eine Funktion

$$\rho(\lambda) \sim \lambda^{\kappa - \nu - 1} e^{-b\lambda^{P}} \tag{6.1}$$

annähern (siehe Abb.[5.4]).

Eine weitere wichtige Erkenntnis ist, dass bei steigender Kopplungsstärke die Radienverteilung unterdrückt wird und sich hin zu kleineren Werten verschiebt (Abb.[5.9], Abb.[5.10] und Abb.[5.12]). Der Grund dafür liegt in der deutlich stärker werdenden Fernwirkung der Instantonen. Auch α hat wesentlichen Einfluss auf die Radienverteilung (Abb.[5.14]). So verschieben sich die mittleren Radien bei gleicher Kopplung A mit steigendem α ($\alpha=1$, $\alpha=2.33$, $\alpha=6$) hin zu größeren Werten. Wie schon bei $\alpha=1$ verschieben sich die Verteilungen bei stärkerer Kopplung A hin zu kleineren Werten (Abb.[5.16] und Abb.[5.17]). Ein numerischer Fit für die λ -Potenz $P_{1.0}$ für kleine Kopplungskonstanten liegt im Bereich um 1.9 fällt für größere auf 0.8 ab und pendelt sich für große A auf 1.3 ein. Der Vorfaktor b_1 steigt kontinuierlich von 1.66 auf über 8 an. Für das weitere Vorgehen erschließen sich nun diverse Möglichkeiten. Besonders interessant wäre es, die großkanonische Zustandssumme mit geeigneten Verfahren analytisch zu approximieren, um damit die Datensätze qualitativ besser

untersuchen zu können.

Bevor man das Programm komplexer gestaltet, sind weitere Optimierungsschritte nötig. Ein Ansatz wäre es, zu versuchen, die Instantonen möglichst schnell ins Gleichgewicht zu bringen. Ein einfacher Trick ist es, den Simple-Sampling-Zufallszahlengenerator gegen einen auszutauschen, der die Akzeptanzwahrscheinlichkeit einer Bewegung oder Erzeugung eines neuen Instantons erhöht und nach der Importance-Sampling-Methode arbeitet, also dem Problem angepasste Zufallszahlen liefert.

Kritisch ist die Idee, mit virtuellen und realen Teilchen zu arbeiten, wobei alle Teilchen bewegt werden, aber nur die realen an der Wechselwirkung teilhaben. Die Teilchenzahl wird durch den Übergang von virtuellen zu realen Teilchen und umgekehrt variiert. Die Annahme der vorgeschlagenen Koordinaten ist zwar wahrscheinlicher, da virtuelle Teilchen zunächst in der Nachbarschaft der Lücke bleiben, die ihre Vernichtung erzeugte, jedoch steigt die Anzahl der Listenelemente, die in jedem Schritt berücksichtigt werden müssen, was sogar einen Ausbremsungseffekt nach sich ziehen kann. Von der physikalischen Seite wäre es interessant, die in Kap.[4] erwähnte Farborientierung im Gruppenraum der Eichgruppe oder auch die dipolartigen Beiträge zu berücksichtigen. Ein erster Schritt könnte aber die Berücksichtigung des Vorzeichens der topologischen Ladung sein (siehe Kap.[3.2.1]).

Literaturverzeichnis

- [1] R. Rajaraman: Solitons and Instantons; North-Holland (1996),
- [2] S. Coleman: Aspects of Symmetry; Cambridge University Press (1985),
- [3] W. Greiner: Feldquantisierung; Harri-Deutsch (1993),
- [4] L.H. Ryder: Quantum Field Theory; Cambridge University Press (1996),
- [5] E.V. Shuryak, T. Schäfer: Instantons in QCD; hep-ph/9610451,
- [6] D.J. Gross: A Theory of the Strong Interactions; Phys.Rep. 49(1979) S.143,
- [7] E.M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker: Statistical Mechanics of the interacting Yang-Mills Instanton-Gas; Nucl. Phys. B 184(1980) S.443,
- [8] G. Münster: On the Statistical Mechanics of Dense Instanton Gases; Z.Phys.C.-Particles and Fields 12(1982) S.43,
- [9] A. Belavin et. al.: Pseudoparticle Solutions of the Yang-Mills Equations, Phys.Let. **59B** (1975),
- [10] A.M. Polyakov: Phys.Lett. **59B**, S.82 (1975): Nucl.Phys, **B120** S.429 (1977),
- [11] H. Levine, L.G. Yaffe: Phys.Rev. **D19**, S.1225 (1979),
- [12] C.G. Callan, R.F. Dashen, D.J. Gross: Phys.Lett. **63B**, S.334 (1976),
- [13] C.G. Callan, R.F. Dashen, D.J. Gross: Phys.Lett. **66B**, S.375 (1977),

LITERATURVERZEICHNIS

- [14] C. Kamp: Untersuchung der Radiusverteilung in einem Instantongas mit Hilfe analytischer Methoden sowie großkanonischer Monte-Carlo-Verfahren; Diplomarbeit WWU Münster(1999),
- [15] H. Römer, T. Filk: Statistische Mechanik; VHC Verlagsgesellschaft (1994),
- [16] K. Binder, D.W. Heermann: Monte Carlo Simulation in Statistical Physics; Springer Verlag (2002),
- [17] D.W. Heermann: Computer Simulation Methods in Theoretical Physics; Springer Verlag (1990),
- [18] A.D. Sokal: Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms; Vorlesungsskript,
- [19] M. Hasenbusch: Monte Carlo Simulationen in der statistischhen Physik; Vorlesungsskript,
- [20] I.M. Sobol: *Die Monte-Carlo-Methode*; Deutscher Verlag der Wissenschaften(1991),
- [21] N. Metropolis et.al.: Chem. Phys. 21, S.1087 (1953),
- [22] B. Stroustrup: $Die\ C++\ Programmiersprache$; Addison-Wesley-Verlag (2000),
- [23] J.R. Hubbard: Programmieren in C++;McGraw-Hill (2000),
- [24] W.H. Press et.al: Numerical Recipes in C; Cambridge University Press (1999),
- [25] J. Wennekers: Persönliche Mitteilungen (2002),

Schlusswort

An dieser Stelle steht normalerweise ein Schlusswort, in dem der Familie, den Studienkollegen, dem Professor und den Freunden für die Unterstützung während der Diplomarbeitszeit gedankt wird.

Doch ist dies keine gewöhnliche Diplomarbeit, nicht aus Sicht des Themas und der Herangehensweise, sondern aus Sicht der Dauer der Bearbeitung. Aufgrund eines schweren Unfalls verzögerte sich die Abgabe meiner Arbeit um ein Jahr. In dem Jahr der Genesung stand mir insbesondere meine Familie zur Seite, die mir in der schlimmen Zeit Liebe und Zuneigung gab, so dass ich mich im fortschreitenden Stadium der Genesung wieder mit der Physik beschäftigen konnte. Mit einigem Abstand, neuer Energie und Motivation fand ich die abschließenden Ergebnisse und brachte die Arbeit zu Ende.

Danken möchte ich in erster Linie meiner Familie, die in der schweren Zeit unermüdlich zu mir stand. Mein Dank gilt auch Prof. Dr. Münster für sein Vertrauen und den Glauben an meine Fähigkeiten, für die vielseitige Aufgabenstellung sowie die Betreuung meiner Arbeit.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen meines Studiums beigetragen haben. Für die Korrektur der Arbeit danke ich Björn Vogt, Jan Wennekers und Imke Seifert.

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig angefertigt und keine ausser den genannten Hilfsmitteln verwendet zu haben.					
Münster, im Juni 2004					