

FRIEDRICH-SCHILLER-UNIVERSITÄT JENA
PHYSIKALISCH-ASTRONOMISCHE FAKULTÄT
THEORETISCH-PHYSIKALISCHES INSTITUT



seit 1558

Untersuchungen zur Supersymmetriebrechung in der supersymmetrischen Quantenmechanik

Diplomarbeit

eingereicht von Falk Tandetzky,
geboren am 26.10.1986 in Schleiz

31.10.2010

1. Gutachter: Prof. Dr. habil. A. Wipf, Friedrich-Schiller-Universität Jena
 2. Gutachter: Prof. Dr. habil. K. Langfeld, University of Plymouth
- Tag der Verleihung des Diploms:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Supersymmetrische Quantenmechanik	3
2.1	Operatorformalismus	3
2.2	Wittenindex	8
3	Pfadintegralformalismus	11
3.1	Quantenmechanik bei endlichen Temperaturen	11
3.2	Herleitung des Pfadintegrals für Fermionen	11
3.3	Supersymmetrie im Pfadintegralbild	15
4	Korrelationsfunktionen	16
4.1	Korrelationsfunktionen bei Temperatur $T=0$	16
4.2	Korrelationsfunktionen für endliche Temperaturen	18
5	Grundlagen der Gittersimulationen	21
5.1	Gitterformulierung	21
5.2	Fermion-Doubling-Problem und Wilsonterm	22
5.3	Explizite Invertierung der Fermionmatrix	27
5.4	Der HMC-Algorithmus	30
5.5	Jackknife-Methode	37
6	Untersuchung des Modells für spontan gebrochene Supersymmetrie	39
6.1	Analytische Beschreibung	39
6.2	Direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators	42
6.3	Projektion auf einen der Grundzustände	43
6.4	Bestimmung der Korrelationsfunktionen	45
7	Zusammenfassung und Ausblick	53
	Literaturverzeichnis	54

1 Einleitung

Ein Geologe kann durch Betrachten der Winkel zwischen den Flächen eines Minerals auf dessen Symmetrie schließen. Daraus kann er die innere Kristallstruktur und zum Teil sogar die Zusammensetzung des Materials bestimmen. Nach ähnlichen Prinzipien wurde das *Standardmodell der Elementarteilchenphysik* aufgestellt. Die Symmetrien beziehen sich dabei allerdings auf die physikalischen Gesetze. Die einfachsten Beispiele dafür sind Translationen und Rotationen: Egal an welcher Stelle im Universum man sich befindet oder in welche Richtung man blickt – die physikalische Beschreibung bleibt die gleiche. Ein weiteres Beispiel ist der Wechsel in ein mit konstanter Geschwindigkeit bewegtes Bezugssystem. Aufgrund der Beobachtung der Konstanz der Lichtgeschwindigkeit muss man hier allerdings beachten, dass die richtige Beschreibung dieser Symmetrie durch die Invarianz unter Lorentztransformationen gegeben ist. Dieses Beispiel zeigt bereits deutlich, dass das Finden der richtigen Symmetrien keine leichte Aufgabe ist. Ein weiteres Beispiel einer denkbaren Symmetrie ist die Spiegelsymmetrie. Man könnte denken, dass die physikalischen Gesetze nach einer gedachten Spiegelung wieder die gleichen sind. Für viele Prozesse ist das auch zutreffend, allerdings genügt die *schwache Wechselwirkung* dieser Symmetrie nicht.

Dies wirft die Frage auf, warum bestimmte Symmetrien vorhanden sind, andere aber nicht. Um dieser Frage nachzugehen, betrachten wir das Beispiel Wasser. Dabei handelt es sich um ein isotropes Medium. Anders gesagt: Es herrscht Rotationssymmetrie. Kühlt man das Wasser nun auf unter 0°C ab, gefriert es. Dabei bilden sich Eiskristalle, welche nur noch eine geringere Symmetrie aufweisen, etwa die sechszählige Drehsymmetrie, wie man sie von Eisblumen kennt. Obwohl die physikalischen Gesetze eine Rotationssymmetrie aufweisen, kann sich also ein Gebilde niedrigerer Symmetrie herausbilden. Man spricht in diesem Zusammenhang von *spontaner Symmetriebrechung*.

Kehren wir nun zum Standardmodell zurück. Um dieses zu entwickeln, wurde auf alle bisher genannten Symmetrien zurückgegriffen, bis auf die Spiegelsymmetrie, welche wie gesagt nicht realisiert ist. Die Menge all dieser Symmetrien wird in der *Poincarégruppe* zusammengefasst. Das Standardmodell ist in der Lage drei der vier fundamentalen Kräfte zu beschreiben. Dabei handelt es sich um die *elektromagnetische*, die *schwache* und die *starke Wechselwirkung*. Es erfasst allerdings nicht die *Gravitation*. Durch verschiedene Beschleunigerexperimente wurden die Grundlagen für die Theorie geliefert. Die dabei gefundenen Elementarteilchen mussten beschrieben und klassifiziert werden. Umgekehrt war es dann durch das erhaltene Modell möglich weitere Partikel vorherzusagen und anschließend experimentell zu bestätigen. Eine ähnliche Situation lag bei der Aufstellung des Periodensystems der Elemente Ende des 19. Jahrhundert vor. Auch hier wurden zunächst verschiedene Elemente beobachtet und nach ihren Eigenschaften klassifiziert. Dadurch war es möglich die Existenz noch nicht entdeckter Elemente zu postulieren und anschließend zu bestätigen. Erst im 20. Jahrhundert wurde dann durch das Verständnis des Aufbaus der Atome und durch die Entwicklung der Quantenmechanik eine grundlegende Theorie entwickelt, aus welcher sich ableiten

lässt, welche Elemente existieren und wie deren Eigenschaften sind.

Es liegt daher nahe zu versuchen das Standardmodell weiter zu entwickeln. Die Suche nach weiteren Symmetrien könnte dafür hilfreich sein. Das *Theorem von Coleman und Mandula* [1] schränkt die Möglichkeiten dafür stark ein. Es besagt, dass es neben inneren Symmetrien, welche unterschiedliche Komponenten eines Spinors an einem jeweils festen Punkt verknüpfen und der Poincaré-Symmetrie keine weiteren Symmetrien geben kann. Die inneren Symmetrien führen allerdings nicht zu weiteren Teilchen mit anderer Masse oder anderem Spin. Von dem Theorem wird die *Supersymmetrie* jedoch nicht berücksichtigt. Diese beschreibt einen Zusammenhang zwischen fermionischen und bosonischen Freiheitsgraden. Supersymmetrische Erweiterungen des Standardmodells haben deshalb die Eigenschaft, dass es zu jedem Fermion ein zunächst gleich schweres Boson und umgekehrt gibt. Da diese sogenannten *Superpartner* bisher jedoch nicht gefunden wurden, muss die Supersymmetrie, wenn es sie gibt, spontan gebrochen sein. Diese Symmetriebrechung könnte zu höheren Massen der Superpartner führen und somit erklären, dass diese noch nicht gefunden wurden. Abgesehen von den Erweiterungen des Standardmodells, gibt es bereits zahlreiche weitere Anwendungen von mit Supersymmetrie verbundenen Theorien. Dazu zählen die Behandlung von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen, das Finden exakter Lösungen spezieller Potentiale oder die Konstruktion neuer Näherungsverfahren [2, 3].

Ziel dieser Arbeit ist es ein tieferes Verständnis supersymmetrischer Theorien zu gewinnen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Untersuchung des Falls einer spontan gebrochener Supersymmetrie. Als Modell wird dafür die supersymmetrische Quantenmechanik verwendet. Diese kann als eine Quantenfeldtheorie in $D = 1$ Dimensionen interpretiert werden. Um die Ergebnisse der Untersuchungen auf höherdimensionale Fälle leichter übertragen zu können, wurden Pfadintegralformulierungen sowie Gittersimulationsverfahren verwendet.

Das folgende Kapitel 2 stellt die grundlegenden Prinzipien der Supersymmetrie dar. Anschließend wird in Kapitel 3 die im Hinblick auf höherdimensionale Theorien besonders wichtige Pfadintegralformulierung der Theorie beschrieben. Die sich in diesem Formalismus natürlicherweise ergebenden Korrelationsfunktionen werden in Kapitel 4 anhand des Operatorzugangs mit dem Spektrum der Theorie verknüpft. Das Hauptaugenmerk liegt auf der Behandlung des Modells mit Hilfe von Gittersimulationen, welche in Kapitel 5 eingeführt werden. Abschließend werden in Kapitel 6 die damit erhaltenen Ergebnisse mit analytischen und weiterern numerischer Resultaten verglichen.

2 Supersymmetrische Quantenmechanik

2.1 Operatorformalismus

Wir wollen den quantenmechanischen harmonischen Oszillator verallgemeinern. Dafür definieren wir die Operatoren

$$A = W(q) + \frac{d}{dq} \quad \text{und} \quad A^\dagger = W(q) - \frac{d}{dq},$$

wobei das sog. Präpotential $W(q)$ zunächst eine beliebige reelle Funktion des Ortes sei. Es gilt die Kommutatorrelation

$$[A, A^\dagger] = 2W'(q),$$

wobei W' die Ableitung von W nach q bedeutet. Für $W(q) = m_B q$ sind die Operatoren $\frac{1}{\sqrt{2m_B}}A^\dagger$ und $\frac{1}{\sqrt{2m_B}}A$ gerade die bekannten Auf- und Absteigeoperatoren des gewöhnlichen harmonischen Oszillators. Die Frequenz ist dabei $\omega = m_B$. Der Parameter wird hier m_B statt ω genannt, weil der harmonischen Oszillator als Spezialfall einer Quantenfeldtheorie in $D = 1$ Dimensionen gesehen werden kann und dort die Interpretation als eine (nackte) Masse sinnvoll ist. Die Größe m_B beeinflusst das Potential V der Theorie und hat nichts mit der Masse des Teilchens, welches durch die Quantenmechanik beschrieben wird, zu tun. Der Index B steht für *bosonisch*. Wir definieren nun den Hamiltonoperator als

$$H_B = \frac{1}{4}\{A^\dagger, A\} = \frac{1}{4}(A^\dagger A + A A^\dagger) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}W^2(q) = \frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}W^2(q),$$

mit $\pi = -i\frac{d}{dq}$. Offenbar lässt sich jeder Hamiltonoperator der Form $H = \frac{1}{2}\pi^2 + V(q)$ mit nicht-negativem $V(q)$ so darstellen.

Nun soll ein fermionischer harmonischer Oszillator konstruiert werden. Dazu definieren wir Auf- und Absteigeoperatoren, welche Antivertauschungsregeln genügen sollen.

$$\{\psi, \psi\} = \{\psi^\dagger, \psi^\dagger\} = 0 \quad \text{und} \quad \{\psi, \psi^\dagger\} = 1$$

Eine einfache Darstellung ist mit Hilfe der Paulimatrizen möglich.

$$\psi = \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Wir definieren nun den Hamiltonoperator des fermionischen Oszillators mit dem Kommutator statt des Antikommutators als

$$H_F = \frac{1}{2}m_F[\psi^\dagger, \psi] = \frac{1}{2}m_F\sigma_3,$$

wobei m_F ein Parameter ist (die „fermionische Masse“).

Spektrum des harmonischen Oszillators

Wir betrachten nun zunächst den Spezialfall des gewöhnlichen harmonischen Oszillators, setzen also $W(q) = m_B q$. Wir bezeichnen den Hamiltonoperator für diesen Fall mit H_B^0 . Der Kommutator von A und A^\dagger ist dann eine Zahl und vertauscht demnach mit A und A^\dagger . Dadurch kann man die Energieeigenzustände von H_B^0 mit Hilfe der Auf- und Absteigeoperatoren gemäß

$$|n_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2m_B)^{n_B} n_B!}} (A^\dagger)^{n_B} |0\rangle,$$

darstellen, wobei der Grundzustand definiert ist durch $A|0\rangle = 0$ und n_B natürliche Zahlen sind. Die so konstruierten Zustände sind Eigenzustände des Anzahloperators $N_B = \frac{1}{2m_B} A^\dagger A$.

$$N_B |n_B\rangle = n_B |n_B\rangle$$

Der bosonische Hamiltonoperator lässt sich schreiben als

$$H_B^0 = m_B \left(N_B + \frac{1}{2} \right)$$

und hat folglich die Eigenwerte

$$H_B^0 |n_B\rangle = m_B \left(n_B + \frac{1}{2} \right) |n_B\rangle.$$

Wie man sieht, ist die Differenz zweier Eigenwerte jeweils m_B . Die Grundzustandsenergie ist $\frac{m_B}{2}$.

Betrachten wir nun den fermionischen harmonischen Oszillator. Die Energieeigenzustände lassen sich in analoger Weise konstruieren. Man legt den Grundzustand fest durch

$$\psi |\downarrow\rangle = 0, \quad \text{also} \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und definiert den energetisch höher liegenden Zustand durch

$$|\uparrow\rangle = \psi^\dagger |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Da ψ^\dagger und ψ Antikommutationsregeln genügen, lassen sich keine weiteren Zustände konstruieren (Das Pauliprinzip verbietet weitere Fermionen.). Man führt auch hier einen Anzahloperator ein, der die Fermionen zählt.

$$N_F = \psi^\dagger \psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dieser hat die Eigenwerte 0 und 1. Der fermionische Hamiltonoperator lässt sich nun schreiben als

$$H_F = m_F \left(N_F - \frac{1}{2} \right)$$

und besitzt die Eigenwerte $-\frac{1}{2}m_F$ und $\frac{1}{2}m_F$.

Die supersymmetrische Theorie

Betrachtet man nun die Summe der Energien der beiden harmonischen Oszillatoren

$$E = m_B \left(n_B + \frac{1}{2} \right) + m_F \left(n_F - \frac{1}{2} \right),$$

so stellt man fest, dass für die Wahl $m = m_B = m_F$ die Gesamtenergie bei Erzeugung eines Fermions und gleichzeitiger Vernichtung eines Bosons gleich bleibt. Von dieser Beobachtung motiviert, führen wir die sogenannten *Superladungsoperatoren* Q und Q^\dagger ein, welche gerade diese Erzeugung und Vernichtung realisieren (Wir betrachten nun aber wieder ein allgemeines $W(q)$).

$$Q = A \otimes \psi^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & A \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Q^\dagger = A^\dagger \otimes \psi = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

Diese erben die Nilpotenz von den fermionischen Operatoren,

$$\{Q, Q\} = \{Q^\dagger, Q^\dagger\} = 0$$

und erfüllen

$$\frac{1}{2}\{Q, Q^\dagger\} = \frac{1}{4}\{A, A^\dagger\} + \frac{1}{4}\sigma_3[A, A^\dagger].$$

Der erste Summand entspricht gerade dem verallgemeinerten harmonischen Oszillator H_B . Der zweite Term stimmt immerhin für $W(q) = mq$ mit dem bisher betrachteten fermionischen Hamiltonoperator H_F überein. Damit liegt die folgende Definition des *supersymmetrischen Hamiltonoperators* nahe¹:

$$H_S = \frac{1}{2}\{Q, Q^\dagger\} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} AA^\dagger & 0 \\ 0 & A^\dagger A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_- & 0 \\ 0 & H_+ \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Da die Superladungen mit ihm vertauschen

$$[Q, H_S] = [Q^\dagger, H_S] = 0,$$

handelt es sich bei ihnen um zeitlich erhaltene Größen. H_- und H_+ sind gegeben durch

$$H_\pm = \frac{1}{2}\pi^2 + V_\pm(q) \quad \text{mit} \quad V_\pm(q) = \frac{1}{2}W^2(q) \mp \frac{1}{2}W'(q). \quad (2)$$

Gibt man also einen der Hamiltonoperatoren (etwa H_+) vor, lässt sich $W(q)$ durch Lösen der Riccatischen Differentialgleichung (Gl. (2)) finden. Unter der Bedingung, dass der

¹Eine detaillierte Einführung in dieses Modell findet sich in [2] und [5].

vorgegebene Hamiltonoperator positiv ist, existiert eine solche Lösung². Man kann H_S auch schreiben als

$$H_S = \frac{1}{2}W^2(q) + \frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}W'(q)\sigma_3 \quad (3)$$

$$= \frac{1}{2}W^2(q) + \frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}W'(q)(\psi^\dagger\psi - \psi\psi^\dagger). \quad (4)$$

Da H_S mit dem Fermionenzahloperator kommutiert,

$$[N_F, H_S] = 0,$$

lassen sich diese beiden Operatoren gleichzeitig diagonalisieren. Die Zustände können also durch ihre Energie und ihre Fermionenzahl charakterisiert werden. Man spricht für $N_F = 0$ auch von bosonischen und für $N_F = 1$ von fermionischen Zuständen.

Spektrum des supersymmetrischen Hamiltonoperators

Wir wollen nun das Spektrum von H_- und H_+ untersuchen. Wegen der Form von H_S ergibt sich dessen Spektrum dann als die Kombination der beiden Einzelspektren. Die Eigenzustände und Eigenwerte seien gegeben durch

$$H_+|\psi_n^+\rangle = E_n^+|\psi_n^+\rangle \quad \text{und} \quad H_-|\psi_n^-\rangle = E_n^-|\psi_n^-\rangle.$$

E_n^+ und E_n^- sind nicht-negativ:

$$E_n^+ = \langle \psi_n^+ | H_+ | \psi_n^+ \rangle = \langle \psi_n^+ | A^\dagger A | \psi_n^+ \rangle = \|A|\psi_n^+\rangle\|^2 \geq 0,$$

$$E_n^- = \langle \psi_n^- | H_- | \psi_n^- \rangle = \langle \psi_n^- | A A^\dagger | \psi_n^- \rangle = \|A^\dagger|\psi_n^-\rangle\|^2 \geq 0.$$

Wie man sieht, ist im Fall $E_n^+ = 0$ auch $\|A|\psi_n^+\rangle\| = 0$ und folglich $A|\psi_n^+\rangle = 0$. Analoges gilt für E^- und A^\dagger . Es ist also

$$H^+|\psi_n^+\rangle = 0 \quad \iff \quad A|\psi_n^+\rangle = 0 \quad \text{und} \quad (5)$$

$$H^-|\psi_n^-\rangle = 0 \quad \iff \quad A^\dagger|\psi_n^-\rangle = 0. \quad (6)$$

Damit lässt sich der Grundzustand zu $E = 0$, falls er existiert, finden:

$$\begin{aligned} H^+|\psi_0^+\rangle &= 0 \\ \iff A|\psi_0^+\rangle &= 0 \\ \left(W(q) + \frac{d}{dq}\right)\psi_0^+(q) &= 0. \end{aligned}$$

²Das Problem für einen gegebenen Hamiltonoperator eine Darstellung $H = A^\dagger A$ zu finden, ist als Faktorisierungsproblem bekannt, siehe [6].

Man erhält durch analoges Vorgehen auch eine Differentialgleichung für ψ_0^- . Beide lassen sich leicht lösen. Man erhält

$$\psi_0^\pm(q) = C^\pm e^{\mp \int^q W(q') dq'}, \quad (7)$$

wobei C^+ und C^- nicht von q abhängen. Offenbar ist das Produkt dieser Funktionen eine Konstante. Demnach kann höchstens einer der beiden Zustände normierbar sein. Es gibt also maximal einen Zustand zur Energie $E = 0$.

Betrachten wir nun das restliche Spektrum. Sei $|\psi_n^+\rangle$ ein Eigenzustand mit nicht verschwindender Energie E_n^+ . Dann ist

$$\begin{aligned} H^- A|\psi_n^+\rangle &= AA^\dagger A|\psi_n^+\rangle \\ &= AH^+|\psi_n^+\rangle \\ &= E_n^+ A|\psi_n^+\rangle \end{aligned} \quad (8)$$

und somit ist $A|\psi_n^+\rangle$ Eigenzustand von H^- zur gleichen Energie E_n^+ . Diese Konstruktion funktioniert offenbar genau dann, wenn $E_n^+ > 0$ ist, da nur dann $A|\psi_n^+\rangle$ von null verschieden ist (siehe Gl. (5)).

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass das Spektrum von H^+ mit dem von H^- exakt übereinstimmt, bis auf den Fall $E = 0$, bei dem kein oder insgesamt genau ein Zustand existiert.

Da Q und Q^\dagger erhaltene Größen sind, gilt dies auch für Linearkombinationen. Mit

$$\begin{aligned} Q_1 &= Q + Q^\dagger \quad \text{und} \\ Q_2 &= i(Q - Q^\dagger) \end{aligned}$$

erhält man zwei selbstadjungierte Operatoren. Es gibt also zwei erhaltene Ladungen (man spricht von einer $\mathcal{N} = 2$ - Supersymmetrie). Entsprechend dem Noether-Theorem sind Q_1 und Q_2 somit jeweils Generatoren einer Symmetrie, der sogenannten *Supersymmetrie*. Wenn der Grundzustand invariant unter diesen Supersymmetrietransformationen ist, also von den Superladungsoperatoren vernichtet wird, spricht man von einer exakten Supersymmetrie, ansonsten von einer spontan gebrochenen. Aufgrund der Gleichungen (5) und (6) und der Struktur der Operatoren Q und Q^\dagger ist somit die Brechung der Supersymmetrie äquivalent dazu, dass kein Grundzustand mit verschwindender Energie existiert.

2.2 Wittenindex

Wir hatten im letzten Abschnitt festgestellt, dass der supersymmetrische Hamiltonoperator H_S zwei qualitativ unterschiedliche Spektren haben kann:

1. Die Grundzustandsenergie liegt bei Energie $E = 0$. Die Supersymmetrie ist exakt.
2. Der Grundzustand hat eine Energie $E > 0$. Die Supersymmetrie ist spontan gebrochen.

Für die angegebene supersymmetrische Quantenmechanik gibt es im ersten Fall genau einen Grundzustand. Es ist aber auch (in anderen supersymmetrischen quantenmechanischen Modellen oder in der Quantenfeldtheorie) möglich, dass mehrere Grundzustände die Energie $E = 0$ haben. Ob der Grundzustand supersymmetrisch ist, hängt also im Allgemeinen nicht von seiner Entartung ab, sondern nur davon, ob seine Energie gleich null ist. Dementsprechend kann es schwierig sein zu entscheiden, ob in einem System Supersymmetriebrechung auftritt oder nicht. Stellt man nämlich in einer gewissen Näherung fest, dass $E = 0$ gilt, bleibt es unklar, ob kleine Korrekturen zu leichten Änderungen führen und die Supersymmetrie tatsächlich gebrochen ist³. Im umgekehrten Fall, in dem man eine Energie erhält, welche im Rahmen der Genauigkeit der Näherung definitiv größer als null ist, kann man dagegen sicher sein, dass die Supersymmetrie gebrochen ist. Dass die Näherung entsprechend gut ist, kann allerdings ebenfalls sehr schwierig zu zeigen sein.

Die Analyse einer Theorie wird oft vereinfacht, indem endliche (räumliche) Volumina betrachtet werden. Das Spektrum wird dadurch diskret und die Randbedingungen können oft einfacher implementiert werden. Stellt man fest, dass für jedes endliche Volumen eine ungebrochene Supersymmetrie vorliegt, also $E = 0$ gilt, folgt sofort, dass dies auch im Grenzfall des unendlichen Volumens der Fall ist (da der Grenzwert von null wieder null ist). Das Umgekehrte gilt nicht. Es ist möglich, dass die Supersymmetrie für jedes endliche Volumen gebrochen ist, aber im Limes $V \rightarrow \infty$ wieder hergestellt wird. Mit anderen Worten: Das Einführen eines endliche Volumens kann die Supersymmetrie „explizit“ brechen (sie aber im Allgemeinen nicht herstellen).

Man kann nun eine topologische Invariante der Theorie aufstellen, deren Verschwinden notwendig ist, damit die Supersymmetrie spontan gebrochen sein kann [8]. Wenn diese zuverlässig berechnet werden kann, hat man ein geeignetes Kriterium, um spontane Supersymmetriebrechung auszuschließen. Um zu einer solchen Größe zu gelangen, betrachten wir das Spektrum der supersymmetrischen Theorie. Wir hatten festgestellt, dass die Zustände gepaart auftreten. Lediglich bei $E = 0$ können unterschiedlich viele fermionische und bosonische Zustände vorliegen⁴. Was passiert nun, wenn man Parameter der Wirkung oder des Systems wie Volumen, Masse oder weitere Kopplungskon-

³im Fall einer spontan gebrochenen Supersymmetrie schlägt eine störungstheoretische Rechnung typischerweise fehl und liefert das falsche Resultat, dass die Energie immer gleich null sei [4].

⁴Für die supersymmetrische Quantenmechanik, wie sie hier eingeführt wurde, kann insgesamt nur ein Grundzustand mit verschwindender Energie vorliegen.

stanten variiert? Die Zustände können sich zwar energetisch verschieben, müssen aber aufgrund der Supersymmetrie gepaart bleiben. Bei dieser Verschiebung können sie von positiven Energien zu $E = 0$ gelangen. Umgekehrt können sich Zustände von dort weg bewegen. In jedem Fall bleibt aber die Differenz

$$\Delta = n_B^{E=0} - n_F^{E=0},$$

die als *Wittenindex* bezeichnet wird, unverändert. Welche Parametervariationen tatsächlich zulässig sind wird noch diskutiert. Diese Differenz muss offenbar verschwinden, damit Supersymmetriebrechung möglich ist. Wegen der Invarianz des Wittenindex, kann man die Berechnung dieser Zahl in einem leicht zugänglichen Grenzfall (z.B. geringe Kopplung und kleine Volumina) durchführen und weiß im Fall $\Delta \neq 0$, dass die Supersymmetrie für alle Parameter exakt ist. Damit hat man ein nützliches Kriterium für die Existenz einer exakten Supersymmetrie. Ist umgekehrt $\Delta = 0$, weiß man zunächst nicht, ob die Supersymmetrie spontan gebrochen ist ($n_B^{E=0} = n_F^{E=0} = 0$) oder nicht ($n_B^{E=0} = n_F^{E=0} \neq 0$). Unter der in unserem Fall vorliegenden Zusatzinformation, dass es höchstens einen Grundzustand bei $E = 0$ geben kann, ist aber klar, dass der erste Fall vorliegt. Eine nützliche Darstellung des Wittenindex ist

$$\Delta = \text{Sp}((-1)^{N_F} e^{-\beta H}), \quad (9)$$

wobei $\beta = \frac{1}{kT}$ die inverse Temperatur bezeichnet. Offenbar heben sich bei der Spurbildung mittels der gemeinsamen Eigenzustände von Energie und Fermionenzahl alle angeregten Zustände auf, da sie in Paaren auftreten. Lediglich die Zustände bei $E = 0$ können zu einem nicht verschwindenden Wittenindex führen. Der zweite Faktor in der Spur sorgt dabei dafür, dass die Größe wohldefiniert ist. Würde man ihn weglassen, würde das Auswerten der Spur mittels der Energieeigenzustände zu einer nicht konvergenten Summe führen. Das Ergebnis ist aber offenbar unabhängig von β . Wir werden diese Darstellung später verwenden, um eine Pfadintegraldarstellung des Wittenindex zu finden.

Nun soll noch etwas genauer darauf eingegangen werden, unter welchen Umständen die oben genannten Parameteränderungen tatsächlich zulässig sind. Wir hatten festgestellt, dass in unserem supersymmetrischen Modell nur genau ein oder gar kein Zustand bei $E = 0$ vorliegen kann. Welcher der beiden Fälle vorliegt, hängt davon ab, ob einer der beiden Grundzustände aus Gl. (7) normierbar ist. Dafür ist das Verhalten des Präpotentials $W(q)$ für $q \rightarrow \pm\infty$ ausschlaggebend. Mit der Definition

$$W_+ = \lim_{q \rightarrow \infty} W(q) \quad \text{und} \quad W_- = \lim_{q \rightarrow -\infty} W(q)$$

lassen sich folgende Fälle unterscheiden:

1. $W_- < 0$ und $W_+ > 0$ Grundzustand ψ_0^+ mit $E = 0$ existiert.
2. $W_- > 0$ und $W_+ < 0$ Grundzustand ψ_0^- mit $E = 0$ existiert.
3. $W_- > 0$ und $W_+ > 0$ Kein normierbarer Zustand zu $E = 0$.

4. $W_- < 0$ und $W_+ < 0$ Kein normierbarer Zustand zu $E = 0$.

Der zweite Fall ist äquivalent zum ersten: Ersetzt man $W(q)$ durch $W(-q)$, tauschen H^+ und H^- lediglich die Rollen:

$$H^-(q) \rightarrow H^+(-q) \quad \text{und} \quad H^+(q) \rightarrow H^-(-q).$$

Man kann also o.B.d.A. annehmen, dass H^- keinen Grundzustand zu $E^- = 0$ besitzt. Ob ψ^+ normierbar ist, hängt also davon ab, ob W bei $q = \pm\infty$ unterschiedliche Vorzeichen hat. Oder äquivalent dazu, ob die Anzahl an einfachen Nullstellen von W gerade oder ungerade ist. Betrachten wir nun als Beispiel das Superpotential $W(q) = mq + gq^2$. Man stellt fest, dass der Wittenindex unter Parameteränderungen tatsächlich invariant ist. Es liegt immer eine spontan gebrochene Supersymmetrie vor. Das stimmt allerdings nur, wenn der Koeffizient g echt positiv bleibt. Auch ein zusätzlicher Term wie hq^3 würde die Invarianz des Wittenindex verletzen. Es sind also nur solche Parametervariationen erlaubt, die das asymptotische Verhalten von W nicht verändern.

Den Grund dafür kann man für den Wechsel von $g = 0$ zu $g > 0$ sehr schön sehen. Für $g = 0$ haben die Potentiale V^\pm aus Gl. (2) jeweils nur ein Minimum bei $q = 0$. Für kleines aber endliches g kommt „aus dem Unendlichen“ je ein weiteres lokales Minimum bei etwa $-\frac{m}{g}$ dazu. Das Verhalten der Potentiale V^\pm ist für diesen Fall in Kap. 6.1 beschrieben und in Abb. (1) dargestellt. Das zusätzliche Minimum von V^- nimmt sogar einen kleineren Wert als bei $q = 0$ an und liegt auf gleicher Höhe wie das Minimum von V^+ bei $q = 0$. Es entsteht ein zusätzlicher neuer Grundzustand. Allerdings haben nun die beiden Grundzustände eine kleine positive Energie. Beim Verändern von Parametern können sich also die Energien im Spektrum nicht nur verschieben, sondern auch neue Energieniveaus auftreten.

3 Pfadintegralformalismus

3.1 Quantenmechanik bei endlichen Temperaturen

Um Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht zu beschreiben, ist es zweckmäßig gemischte Zustände zu betrachten. Die Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Zustand anzutreffen, ist dabei durch die Boltzmann-Statistik vorgegeben. Man definiert deshalb den statistischen Operator als

$$\rho = e^{-\beta H}.$$

Den Erwartungswert einer Größe erhält man durch Spurbildung

$$\langle O \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \text{Sp}(\rho O), \quad (10)$$

wobei die Zustandssumme

$$Z(\beta) = \text{Sp}(\rho) = \sum_n e^{-\beta E_n}$$

als Normierungsfaktor auftritt. Eine wichtige Rolle spielen Korrelationsfunktionen. Man definiert dafür Heisenberg-Ortsoperatoren (für euklidische Zeit $\tau \in \mathbb{R}$) gemäß

$$q(\tau) = e^{\tau H} q e^{-\tau H}$$

und die Zweipunktkorrelationsfunktionen (für $\tau_2 > \tau_1$) als

$$\langle q(\tau_2) q(\tau_1) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{-\beta H} q(\tau_2) q(\tau_1)).$$

3.2 Herleitung des Pfadintegrals für Fermionen

In diesem Abschnitt soll die Pfadintegralformulierung erläutert werden⁵. Es wird dabei hauptsächlich auf die Behandlung der Spinfreiheitsgrade eingegangen. Die Behandlung der verbleibenden Freiheitsgrade (der Ort des Teilchens) wird nur kurz skizziert.

Wir möchten diese Zustandssumme für den supersymmetrischen Hamiltonoperator H_S berechnen. Die Spur lässt sich schreiben als

$$Z = \text{Sp}_B \text{Sp}_F(e^{-\beta H}), \quad (11)$$

wobei Sp_F die Spur über die 2×2 -Matrix, welche aus den fermionischen Freiheitsgraden resultiert (siehe z.B. Gl. (1)) und Sp_B die Spur über die verbleibenden Operatoren

⁵Eine detaillierte Einführung findet sich in [10], sowie in [22] und [23].

ist. Um zu einer Pfadintegraldarstellung zu gelangen, ist es zunächst notwendig Graßmannzahlen c und \bar{c} einzuführen, welche untereinander sowie mit den Operatoren ψ und ψ^\dagger antivertauschen:

$$\{c, c\} = \{\bar{c}, \bar{c}\} = \{c, \bar{c}\} = \{dc, c\} = \{d\bar{c}, c\} = \dots = \{\psi, c\} = \dots = 0.$$

Darüber hinaus mögen sie den Regeln der Integration in Berezin-Integralen

$$\int dc = \int d\bar{c} = 0 \quad \text{und} \quad \int dc c = \int d\bar{c} \bar{c} = 1$$

genügen und wie unabhängige Variablen behandelt werden. Die Antivertauschungs- und Integrationsregeln für eine größere Anzahl an Graßmannzahlen setzen sich entsprechend fort. Der Darstellung von [19] folgend definieren wir die Zustände

$$\begin{aligned} |c\rangle &= e^{-c\psi^\dagger}|0\rangle = (1 - c\psi^\dagger)|0\rangle \quad \text{und} \\ \langle c| &= \langle 0|e^{-\psi\bar{c}} = \langle 0|(1 - \psi\bar{c}), \end{aligned}$$

welche Eigenzustände des Auf- bzw. Absteigeoperators sind.

$$\psi|c\rangle = c|0\rangle = c|c\rangle \quad (12)$$

$$\langle c|\psi^\dagger = \langle 0|\bar{c} = \langle c|\bar{c} \quad (13)$$

Ihr Skalarprodukt ist

$$\langle c'|c\rangle = \langle 0|(1 - \psi\bar{c}')(1 - c\psi^\dagger)|0\rangle = 1 + \langle 0|\psi\bar{c}'c\psi^\dagger|0\rangle = 1 + \bar{c}'c = e^{\bar{c}'c}. \quad (14)$$

Mit Hilfe dieser Zustände lässt sich der Einheitsoperator schreiben als

$$\begin{aligned} \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c}|c\rangle\langle c| &= \int d\bar{c}dc(1 - \bar{c}c)(1 - c\psi^\dagger)|0\rangle\langle 0|(1 - \psi\bar{c}) \\ &= |0\rangle\langle 0| + \int d\bar{c}dc c\psi^\dagger|0\rangle\langle 0|\psi\bar{c} \\ &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Sei nun $s = \pm 1$, dann ist

$$\begin{aligned} \int d\bar{c}dc e^{-\bar{c}c}\langle -sc|A|c\rangle &= \int d\bar{c}dc(1 - \bar{c}c)\langle 0|(1 + s\psi\bar{c})A(1 - c\psi^\dagger)|0\rangle \\ &= \langle 0|A|0\rangle - s \int d\bar{c}dc \langle 0|\psi\bar{c}Ac\psi^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|A|0\rangle + s\langle 1|A|1\rangle \\ &= \begin{cases} \text{Sp}(A) & \text{für } s = 1 \\ \text{Sp}((-1)^{N_F}A) & \text{für } s = -1 \end{cases} \\ &= \text{Sp}(s^{N_F}A). \end{aligned}$$

Wir nutzen nun diese Beziehung, um mit $A = e^{-\beta H}$ und $s = 1$ die innere Spur von Gl. (11) zu berechnen. Gleichzeitig erhalten wir für $s = -1$ die Pfadintegraldarstellung des Wittenindex Δ nach Gl. (9).

$$\text{Sp}_F(s^{N_F} e^{-\beta H}) = \int d\bar{c}_1 dc_1 e^{-\bar{c}_1 c_1} \langle -s c_1 | e^{-\beta H} | c_1 \rangle$$

Nun schreiben wir $e^{-\beta H}$ als N -faches Produkt von $e^{-\epsilon H}$ mit $\epsilon = \frac{\beta}{N}$, fügen $N - 1$ Einsen nach Gl. (15) ein und erhalten

$$\text{Sp}_F(s^{N_F} e^{-\beta H}) = \int d\bar{c}_N dc_N \dots d\bar{c}_1 dc_1 f(s) f_{N-1} \dots f_2 f_1,$$

mit

$$\begin{aligned} f_i &= e^{-\bar{c}_{i+1} c_{i+1}} \langle c_{i+1} | e^{-\epsilon H(q, \pi, \psi^\dagger, \psi)} | c_i \rangle \\ &\stackrel{(12),(13)}{=} e^{-\bar{c}_{i+1} c_{i+1}} \langle c_{i+1} | c_i \rangle e^{-\epsilon H(q, \pi, \bar{c}, c)} \\ &\stackrel{(14)}{=} e^{-\bar{c}_{i+1} c_{i+1} + \bar{c}_{i+1} c_i - \epsilon H(q, \pi, \bar{c}, c)} \\ &= e^{-\epsilon \left(\bar{c}_{i+1} \frac{c_{i+1} - c_i}{\epsilon} + H(-s \bar{c}_{i+1}, c_i) \right)} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} f(s) &= e^{-\bar{c}_1 c_1} \langle -s c_1 | e^{-\epsilon H(q, \pi, \psi^\dagger, \psi)} | c_N \rangle \\ &= e^{-\bar{c}_1 c_1 - s \bar{c}_1 c_N - \epsilon H(-s \bar{c}_1, c_N)} \\ &= e^{-\epsilon \left(-s \bar{c}_1 \frac{-s c_1 - c_N}{\epsilon} + H(-s \bar{c}_1, c_N) \right)}. \end{aligned}$$

Insgesamt erhält man

$$\text{Sp}_F(s^{N_F} e^{-\beta H}) = \int d\bar{c}_N dc_N \dots d\bar{c}_1 dc_1 e^{-S}$$

mit

$$S = \epsilon \sum_{i=1}^N \left[\bar{c}_{i+1} \frac{c_{i+1} - c_i}{\epsilon} + H(q, \pi, \bar{c}_{i+1}, c_i) \right] \Big|_{c_{N+1} = -s c_1, \bar{c}_{N+1} = -s \bar{c}_1}.$$

Im Limes $N \rightarrow \infty$ erhält man formal ein Pfadintegral.

$$\text{Sp}_F(s^{N_F} e^{-\beta H}) = \int_{\text{AP/Per}} \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}c e^{-S}$$

Wobei man für $s = 1$ antiperiodische und für $s = -1$ periodische Randbedingungen bei der Integration zu verwenden hat. Die Wirkung ist dabei

$$S = \int_0^\beta d\tau \left(\bar{c}(\tau) \frac{dc(\tau)}{d\tau} + H(q, \pi, \bar{c}(\tau), c(\tau)) \right).$$

Man beachte, dass es sich hier bei q und π noch immer um Operatoren handelt. Die Auswertung der bosonischen Spur in Gl. (11) erfolgt in ähnlicher Weise [10]. Man zerlegt e^{-S} wieder in ein Produkt aus N Faktoren, welche selbst nochmal in je zwei Faktoren aus kinetischem Term und Potentialterm zerlegt werden, fügt Einsen in Form von Integralen über Ortseigenzustände ein und erhält ein Pfadintegral über die Wege $q(\tau)$. Insgesamt ergibt sich für die Zustandssumme ein Pfadintegral, welches keine Operatoren mehr enthält. Es ist üblich nun $\bar{\psi}$ und ψ statt \bar{c} und c für die Grassmann-wertigen Felder zu schreiben.

$$Z = \text{Sp}(e^{-\beta H}) = \int_0^\beta \mathcal{D}q \int_0^\beta \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[q, \bar{\psi}, \psi]} \quad (16)$$

Für den Wittenindex ergibt sich

$$\Delta = \text{Sp}((-1)^{N_F} e^{-\beta H}) = \int_0^\beta \mathcal{D}q \int_0^\beta \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[q, \bar{\psi}, \psi]}, \quad (17)$$

mit der euklidischen Wirkung

$$S[q, \bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \left(\bar{\psi}(\tau) \dot{\psi}(\tau) + H(q(\tau), \dot{q}(\tau), \bar{\psi}(\tau), \psi(\tau)) \right),$$

wobei der Punkt für die Ableitung nach τ steht. Setzt man H_S aus Gl. (4) mit $\pi = \dot{q}$ ein, erhält man

$$S[q, \bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \left(\frac{1}{2} W^2(q) + \frac{1}{2} \dot{q}^2 + \bar{\psi} \left(W'(q) + \frac{d}{d\tau} \right) \psi \right). \quad (18)$$

Eine ähnliche Rechnung wie die bei der Auswertung der bosonischen Spur erlaubt es thermische Erwartungswerte von Observablen zu berechnen. Insbesondere lassen sich zeitgeordnete Korrelationsfunktionen schreiben, indem man in das Pfadintegral für die Zustandssumme die entsprechenden Faktoren in den Integranden schreibt. Beispielsweise für die Zweipunktsfunktion

$$\langle Tq(\tau_1)q(\tau_2) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \int_0^\beta \mathcal{D}q \int_0^\beta \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[q, \bar{\psi}, \psi]} q(\tau_1)q(\tau_2).$$

Dies lässt sich entsprechend auf beliebige Observablen $O(q)$ verallgemeinern

$$\langle O(q) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \int_0^\beta \mathcal{D}q \int_0^\beta \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[q, \bar{\psi}, \psi]} O(q),$$

wobei, wenn O von q zu unterschiedlichen Zeiten abhängt, wieder die Zeitordnung zu berücksichtigen ist.

3.3 Supersymmetrie im Pfadintegralbild

Wir hatten bereits im Operatorbild gesehen, dass es eine zweiparametrische kontinuierliche Symmetrie der Wirkung gibt – die Supersymmetrie. Auf der Ebene des Pfadintegrals kann dies durch die infinitesimalen Transformationen

$$\delta q = \epsilon_1 \psi + \epsilon_2 \bar{\psi}, \quad \delta \bar{\psi} = -\epsilon_1 (\dot{q} + W), \quad \delta \psi = -\epsilon_2 (\dot{q} - W) \quad (19)$$

ausgedrückt werden, wobei ϵ_1 und ϵ_2 zwei Grassmann-Zahlen sind, welche also untereinander und mit $\bar{\psi}$ und ψ antivertauschen [17]. Man zeigt leicht, dass sich die Variation der Lagrange-Funktion L unter den angegebenen Supersymmetrietransformationen als eine totale Zeitableitung schreiben lässt und somit $S = \int_0^\beta L d\tau$ für periodische Randbedingungen unverändert bleibt. Betrachtet man stattdessen für die Fermionen antiperiodische Randbedingungen, bleibt ein im Allgemeinen nicht verschwindender Beitrag – die Supersymmetrie wird durch die thermischen Randbedingungen (explizit) gebrochen. Im Operatorbild entspricht das der Situation, dass ein thermisches Gemisch auch nicht invariant unter der Supersymmetrie ist. Es gibt also neben der spontanen Supersymmetriebrechung auch die Brechung aufgrund der endlichen Temperatur. Später werden wir sehen, dass auch das Einführen eines diskreten Zeitgitters, wie es für numerische Simulationen verwendet wird, die Supersymmetrie im Allgemeinen bricht.

4 Korrelationsfunktionen

Eine zentrale Größe bei der Behandlung von Quantenfeldtheorien sowie bei der Pfadintegralbeschreibung der Quantenmechanik sind Korrelationsfunktionen. Diese spielen auch für Gittersimulationen eine wichtige Rolle, da sie sich aus Monte-Carlo-Simulationen berechnen lassen und zudem Rückschlüsse auf das Spektrum der Theorie zulassen. Eine detaillierte Einführung findet sich in [10].

4.1 Korrelationsfunktionen bei Temperatur $T=0$

Bosonen

Wir hatten die (euklidischen) Heisenberg-Ortsoperatoren bereits definiert als

$$q(\tau) = e^{\tau H} q e^{-\tau H}.$$

Die (euklidische) Korrelationsfunktion für Bosonen ist bei verschwindender Temperatur definiert als

$$C_B(\tau_2 - \tau_1) = \langle 0 | T q(\tau_2) q(\tau_1) | 0 \rangle,$$

wobei T den Zeitordnungsoperator bezeichnet⁶. Fügt man zwischen den Ortsoperatoren eine Eins als Summe über die Energieeigenzustände ein, ergibt sich für $\tau > 0$

$$C_B(\tau) = \sum_n e^{-\epsilon_n |\tau|} |q_{0n}|^2, \quad (20)$$

mit der Schreibweise $q_{mn} = \langle m | q | n \rangle$ und $\epsilon_n = E_n - E_0$. Für negative Zeiten erhält man das gleiche Resultat. Der bosonische Korrelator ist also symmetrisch in der Zeit.

$$C_B(-\tau) = C_B(\tau)$$

Im Fall der gebrochen Supersymmetrie ist der Grundzustand entartet. Wenn nötig wird entsprechend angegeben, auf welchen der beiden Grundzustände sich bezogen wird. Die Matrixelemente q_{mn} sind offenbar gleich null, wenn der Zustand $|m\rangle$ eine andere Fermionenzahl als der Zustand $|n\rangle$ hat. Es ist oft zweckmäßig den *verbundenen Korrelator* zu betrachten, bei welchem der Grundzustandserwartungswert des Ortes von den Ortsoperatoren abgezogen wird. Das führt dazu, dass die Summe in Gl. (20) über alle Zustände außer den Grundzustand läuft. Die Rechnung wird im Folgenden für den Fall endlicher Temperaturen durchgeführt.

⁶Man überzeugt sich leicht davon, dass die rechte Seite tatsächlich nur von der Zeitdifferenz abhängt.

Fermionen

Im Fall von Fermionen wird analog vorgegangen. Man definiert wieder die Heisenbergoperatoren durch

$$\psi(\tau) = e^{\tau H} \psi e^{-\tau H} \quad \text{und} \quad \psi^\dagger(\tau) = e^{\tau H} \psi^\dagger e^{-\tau H}$$

und die Korrelationsfunktion als

$$C_F(\tau_2 - \tau_1) = \langle 0 | T \psi(\tau_2) \psi^\dagger(\tau_1) | 0 \rangle.$$

Der Zeitordnungsoperator soll dabei beim Vertauschen von fermionischen Operatoren das Vorzeichen umkehren:

$$T \psi(\tau_2) \psi^\dagger(\tau_1) = \begin{cases} \psi(\tau_2) \psi^\dagger(\tau_1) & \tau_2 > \tau_1 \\ -\psi^\dagger(\tau_1) \psi(\tau_2) & \tau_2 < \tau_1 \end{cases}.$$

Auch dieser Ausdruck lässt sich durch Einfügen einer Eins auswerten. Das Ergebnis hängt von der Zeitordnung ab

$$C_F(\tau) = \begin{cases} \sum_n e^{-\epsilon_n |\tau|} |\psi_{0n}|^2 & \tau > 0 \\ -\sum_n e^{-\epsilon_n |\tau|} |\psi_{0n}^\dagger|^2 & \tau < 0 \end{cases}. \quad (21)$$

Hier sind die auftretenden Matrixelemente $\psi_{0n} = \langle 0 | \psi | n \rangle$ offenbar nur dann von null verschieden, wenn der Zustand $|n\rangle$ die Fermionenzahl $N_F = 1$ hat und der bosonische Grundzustand gewählt wurde. Bei den Matrixelementen ψ_{0n}^\dagger ist es genau umgekehrt. Zusammenfassend: Für den bosonischen Grundzustand verschwindet der Korrelator für negative Zeiten und ist positiv für positive Zeiten. Beim fermionischen Grundzustand verschwindet der Korrelator für positive Zeiten und nimmt negative Werte für negative Zeiten an. In jedem Fall fällt die Korrelationsfunktion für betragsmäßig wachsende Zeiten exponentiell ab. Ist die Supersymmetrie gebrochen, gibt es allerdings einen konstanten Beitrag vom Überlapp des bosonischen mit dem fermionischen Grundzustand. In diesem Fall ist nämlich $\epsilon_n = 0$.

Propagator

Man definiert den Propagator einer Teilchensorte als die Fouriertransformierte der entsprechenden Korrelationsfunktion

$$G_{B/F}(p) = (\mathcal{F} C_{B/F})(p).$$

Dieser lässt sich leicht anhand der gefundenen Darstellungen der Korrelationsfunktionen Gl. (20) und Gl. (21) berechnen. Man erhält

$$G_B(p) = \sum_n \frac{2\epsilon_n |q_{0n}|^2}{\epsilon_n^2 + p^2} \quad \text{und} \quad G_F(p) = \sum_n \frac{\epsilon_n |\psi_{0n}|^2}{\epsilon_n + ip} - \sum_n \frac{\epsilon_n |\psi_{0n}^\dagger|^2}{\epsilon_n - ip}.$$

Wie man sieht, ergeben sich auf der imaginären p -Achse Polstellen bei den Energieeigenwerten (bezogen auf den Grundzustand). Im Spezialfall des harmonischen Oszillators sind jeweils alle Summanden bis auf einen gleich null. Der bosonische Propagator vereinfacht sich dann zu

$$G_B(p) = \frac{2\epsilon_1 |q_{01}|^2}{\epsilon_1^2 + p^2} \quad (22)$$

und hat die beiden Pole

$$p_{\text{Pol}} = \pm i\epsilon_1 = \pm im.$$

4.2 Korrelationsfunktionen für endliche Temperaturen

Bosonischer Korrelator

Wir betrachten nun die sogenannte *verbundene Zweipunktsfunktion* für endliche Temperaturen. Sie ist definiert als

$$\begin{aligned} \langle q(\tau_2)q(\tau_1) \rangle_{\beta,c} &= \langle (q(\tau_2) - \langle q \rangle_{\beta}) (q(\tau_1) - \langle q \rangle_{\beta}) \rangle_{\beta} \\ &= \langle q(\tau_2)q(\tau_1) \rangle_{\beta} - \langle q \rangle_{\beta}^2. \end{aligned}$$

Der Index c steht für *connected*. Sie unterscheidet sich von der unverbundenen Zweipunktsfunktion nur um eine zeitunabhängige Größe. Sie ist demnach auch nur von der Zeitdifferenz $\tau = \tau_2 - \tau_1$ abhängig. Wir setzen nun die Definition des thermischen Erwartungswerts (Gl. (10)) ein.

$$\langle q(\tau)q(0) \rangle_{\beta,c} = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{-\beta H} (e^{\tau H} q e^{-\tau H} - \langle q \rangle_{\beta})(q - \langle q \rangle_{\beta}))$$

Die Spuren können als Summen über die Energieeigenzustände $|n\rangle$ ausgeführt werden (n steht hier für die beiden Quantenzahlen Energie und Fermionenzahl). Außerdem fügen wir eine weitere Summe über die gleichen Zustände ein.

$$\langle q(\tau)q(0) \rangle_{\beta,c} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \langle m | (e^{\tau H} q e^{-\tau H} - \langle q \rangle_{\beta}) | n \rangle \langle n | q - \langle q \rangle_{\beta} | m \rangle$$

Nun werden die Hamiltonoperatoren ausgewertet und die Orthogonalität der Zustände verwendet.

$$\langle q(\tau)q(0) \rangle_{\beta,c} = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} (e^{\tau E_m} q_{mn} e^{-\tau E_n} - \langle q \rangle_{\beta} \delta_{mn}) (q_{nm} - \langle q \rangle_{\beta} \delta_{mn})$$

Die Summe lässt sich nun aufteilen in einen Teil mit $m \neq n$ und einen mit $m = n$.

$$\langle q(\tau)q(0) \rangle_{\beta,c} = \frac{1}{Z} \sum_{m \neq n} e^{-\beta E_m} e^{-\tau(E_n - E_m)} \|q_{mn}\|^2 + \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \|q_{nn} - \langle q \rangle_{\beta}\|^2 \quad (23)$$

Die zweite Summe liefert somit einen zeitunabhängigen Beitrag. Bei nicht-entartetem Grundzustand, also im Fall einer ungebrochenen Supersymmetrie, verschwindet dieser Anteil im Tieftemperaturlimit $\beta \rightarrow \infty$. Im Fall der gebrochenen Supersymmetrie verbleibt ein konstanter Anteil (zumindest sofern der Erwartungswert des Orts bei den beiden Grundzuständen nicht übereinstimmt).

Betrachten wir in der ersten Summe zunächst nur die Summanden mit $E_n > E_m$. Diese fallen exponentiell mit τ ab. Die Geschwindigkeit des Abfallens wird dabei von der jeweiligen Energiedifferenz bestimmt. Die Überlappmatrixelemente q_{mn} und die thermische Besetzung des niederenergetischeren Zustands $\frac{1}{Z}e^{-\beta E_m}$ bestimmen, wie stark der Beitrag für kleine τ ist. Für tiefe Temperaturen sind daher nur die Terme relevant, die den bzw. einen Grundzustand berücksichtigen.

Die Summanden mit $E_n < E_m$ ergeben sich aus den jeweiligen mit $E_n > E_m$ durch Spiegelung von τ bei $\frac{\beta}{2}$, also $\tau \rightarrow \beta - \tau$. Die Korrelationsfunktion ist also insgesamt symmetrisch um $\frac{\beta}{2}$. Bei Entartung, also $E_n = E_m$, treten konstante Beiträge auf. Dies betrifft allerdings nicht die Entartung aufgrund der Supersymmetrie. Da der Ortsoperator die Fermionenzahl nicht ändert, verschwinden die Überlappmatrixelemente der zueinander supersymmetrischen Zustände.

Man kann die Aufspaltung der Summe in Terme mit $E_n > E_m$ bzw. $E_n < E_m$ auch explizit durchführen und die sich ergebenden Summanden wieder zusammenfassen. Die jeweils zueinander korrespondierenden Exponentialfunktionen ergeben dann einen Kosinus-Hyperbolicus,

$$\langle q(\tau)q(0) \rangle_{\beta,c} = \text{Konst.} + \frac{2}{Z} \sum_{m>n} \|q_{mn}\|^2 e^{-\frac{\beta}{2}(E_n+E_m)} \cosh(-(E_m - E_n)(\tau - \frac{\beta}{2})), \quad (24)$$

wobei die Summe sowohl über den bosonischen als auch den fermionischen Sektor läuft. In dieser Schreibweise wird besonders gut deutlich, dass das Verhalten der Funktion in der Umgebung von $\tau = \frac{\beta}{2}$ für tiefe Temperaturen durch die Terme mit niedrigstmöglicher mittlerer Energie $\frac{1}{2}(E_n + E_m)$, also durch den Grund- und den ersten angeregten Zustand, dominiert wird.

Fermionischer Korrelator

Die fermionische Korrelationsfunktion für endliche Temperatur ist definiert als

$$\langle \psi(\tau)\psi^\dagger(0) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \text{Sp}(e^{-\beta H} e^{\tau H} \psi e^{-\tau H} \psi^\dagger).$$

Die Auswertung erfolgt ähnlich wie im bosonischen Fall. Da ψ allerdings die Fermionenzahl ändert, führen wir diese Quantenzahl explizit auf. Sei also $N_F = 0, 1$ die Fermionenzahl und n die Quantenzahl für die Energie. Die gemeinsamen Eigenzustände

werden als $|nN_F\rangle$ bezeichnet. Nun wird die Spur in dieser Basis ausgewertet und wiederum eine entsprechende Eins eingefügt. Somit schreibt sich die Zweipunktsfunktion als

$$\langle \psi(\tau)\psi^\dagger(0) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \sum_{n, N'_F, m, N_F} \langle mN_F | e^{-\beta H} e^{\tau H} \psi e^{-\tau H} | nN'_F \rangle \langle nN'_F | \psi^\dagger | mN_F \rangle$$

Das letzte Skalarprodukt liefert nur dann einen Beitrag, wenn $N_F = 0$ und $N'_F = 1$ ist. Zudem können die Hamiltonoperatoren ausgewertet werden. Man erhält

$$\langle \psi(\tau)\psi^\dagger(0) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \sum_{n, m} e^{-\beta E_m} e^{-\tau(E_n - E_m)} \left\| \langle n1 | \psi^\dagger | m0 \rangle \right\|^2 \quad (25)$$

und hat somit die gleiche Struktur, wie der τ -abhängige Teil der bosonischen Korrelationsfunktion (siehe Gl. (23)). Auch hier ist die Geschwindigkeit, mit der der jeweilige Term abfällt, von der Energiedifferenz der Zustände abhängig. Der Beitrag ist ebenfalls mit einem Boltzmannfaktor $\frac{1}{Z} e^{-\beta E_m}$ gedämpft. Im Gegensatz zum bosonischen Korrelator liegt hier allerdings im Fall der ungebrochenen Supersymmetrie (ein bosonischer Zustand bei $E = 0$, aber kein fermionischer) keine Symmetrie bzgl. Spiegelung der Zeit τ an $\frac{\beta}{2}$ vor. Im Grenzfall tiefer Temperaturen tragen dann die Terme mit $m = 0$ am stärksten bei und liefern ein exponentielles Abfallen, welches vom Fundamentalgap dominiert wird. Im Fall der gebrochenen Supersymmetrie gibt es wie im Fall des bosonischen Korrelators auch im Tieftemperaturlimit Beiträge, welche mit τ zunehmen. Wenn das den beiden Grundzuständen zugeordnete Matrixelement einen Beitrag liefert, gibt es außerdem einen konstanten Anteil.

5 Grundlagen der Gittersimulationen

Die Quantenelektrodynamik konnte sehr erfolgreich durch Störungstheorien beschrieben werden. Dieses Verfahren funktioniert allerdings nur bei kleinen Kopplungskonstanten. Auch spontane Symmetriebrechung lässt sich in wesentlichen Fällen nicht mit den üblichen störungstheoretischen Methoden beschreiben [4]. Sollte die Supersymmetrie tatsächlich eine korrekte Beschreibung der uns umgebenden Welt sein, muss sie auf niedrigen Energieskalen spontan gebrochen sein. Auch dafür kommt somit nur eine nicht-störungstheoretische Beschreibung in Frage. Ein sehr erfolgreicher Ansatz ist die der Gitterdiskretisierung des Pfadintegrals. Eine Einführung in die Thematik findet sich in [9]. Eine Beschreibung des HMC-Algorithmus liefert [13]. Die Fourierbeschleunigung wird in [14] und [15] behandelt.

5.1 Gitterformulierung

Die hergeleitete Pfadintegraldarstellung nach Gl. (16) legt es nahe, die Wirkung auf einem endlichen Gitter zu berechnen und anschließend den Limes $N \rightarrow \infty$ durchzuführen. Das ermöglicht einen sich vom Operatorformalismus stark unterscheidenden Zugang zur analytischen sowie numerischen Untersuchung der Theorie. Dieser Weg ist vor allem auch im Hinblick auf Quantenfeldtheorien sehr wertvoll, da die erhöhte Anzahl an Freiheitsgraden (eigentlich sogar unendlich viele) die direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators im Allgemeinen praktisch unmöglich macht.

Man setzt dazu die Felder auf ein Gitter

$$\begin{aligned} \Lambda &= \{a, 2a, \dots, Na\} \\ q(\tau) &\rightarrow q_i = q(\tau_i) \quad \tau_i = i \cdot a \in \Lambda, \quad i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Die Zustandssumme auf dem Gitter ist dann

$$Z = \int \prod_i dq_i \int \prod_i d\bar{\psi}_i d\psi_i e^{-S[q, \bar{\psi}, \psi]}, \quad (26)$$

wobei man für $S[q, \bar{\psi}, \psi]$ noch eine geeignete diskretisierte Form angeben muss. Unabhängig davon, wie genau diese gewählt wird, ist es sinnvoll, die Wirkung in einen rein bosonischen und einen fermionischen Teil aufzuspalten:

$$S[q, \bar{\psi}, \psi] = S_B[q] + \sum_{i,j} \bar{\psi}_i M_{ij} \psi_j.$$

Dabei wurde benutzt, dass die fermionischen Terme bilinear in ψ und $\bar{\psi}$ sind. Die Komponenten der sogenannten Fermionmatrix M_{ij} hängen allerdings auch noch von den bosonischen Freiheitsgraden q_k ab. Wir werden diese Matrix später für konkrete Diskretisierungen genauer untersuchen. Die durchgeführte Zerlegung erlaubt es das

Berezin-Integral zu berechnen. Es ist nicht schwer zu zeigen, dass das Integral über die Exponentialfunktion zur Determinante von M führt.

$$Z = \int \prod_i dq_i \det M e^{-S_B[q]}$$

Um wieder auf die gewohnte Form des Pfadintegrals zu kommen, kann man die Determinante noch in die e -Funktion ziehen.

$$Z = \int \prod_i dq_i \operatorname{sgn}(\det M) e^{-S_B[q] + \ln |\det M|}$$

Somit lässt sich die Zustandssumme (zumindest für positive Fermion-Determinante) auf das Pfadintegral bezüglich einer effektiven bosonischen Wirkung

$$S_{\text{eff}}[q] = S_B[q] - \ln |\det M[q]|$$

zurückführen. Die gesamte Simulation kann also mit dieser effektiven Wirkung durchgeführt werden. Die fermionischen Zweipunktfunktionen können dabei über die Beziehung

$$\langle \psi(\tau_j) \psi^\dagger(\tau_i) \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \int \prod_k dq_k M_{ij}^{-1}[q] e^{-S_{\text{eff}}[q]} \quad (27)$$

bestimmt werden (die Herleitung dieser Beziehung erfolgt durch ausintegrieren der Grassmannzahlen in analoger Weise, wie die bei der im Folgenden bestimmten bosonischen Korrelationsfunktion der freien Theorie).

5.2 Fermion-Doubling-Problem und Wilsonterm

Es stellt sich nun die Aufgabe eine geeignete diskretisierte Wirkung anzugeben. Ein naheliegender Ansatz die Wirkung (siehe Gl. (18)) auf dem Gitter zu schreiben ist

$$S[q, \bar{\psi}, \psi] = \frac{a}{2} \sum_i \left((\partial q)_i^2 + W_i^2 \right) + a \sum_{i,j} \bar{\psi}_i (\partial_{ij} + W_{ij}) \psi_j.$$

Die eingeführten Symbole sollten dabei im Kontinuumslimites übergehen in

$$\partial_{ij} \rightarrow \frac{d}{d\tau}, \quad W_i \rightarrow W(q_i) \quad \text{und} \quad W_{ij} \rightarrow W'(q_i) \delta(\tau_i - \tau_j).$$

Für die letzten beiden Ausdrücke ist der einfachstmögliche Ansatz

$$W_i = W(q_i) \quad \text{und} \quad W_{ij} = W'(q_i) \delta_{ij}, \quad (28)$$

mit dem Kroneckerdelta δ_{ij} . Die naheliegendsten Möglichkeiten für die Ableitung sind Vorwärts- Rückwärts- und symmetrische Ableitung

$$\partial_{ij}^f = \frac{1}{a}(-\delta_{i,j} + \delta_{i+1,j}), \quad \partial_{ij}^b = \frac{1}{a}(-\delta_{i-1,j} + \delta_{i,j}) \quad \text{und} \quad \partial_{ij}^s = \frac{1}{2a}(-\delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j}). \quad (29)$$

Um die periodischen bzw. antiperiodischen Randbedingungen zu erhalten, muss man für die Kroneckersymbole zusätzlich fordern, dass $\delta_{i,i+N} = +1$ bzw. $\delta_{i,i+N} = -1$ ist. Als Fehlerabschätzungen erhält man (durch Anwenden des Satz von Taylor)

$$\begin{aligned} \left\| \partial_{ij}^{f/b} f(\tau_j) - f(\tau_i) \right\| &\leq \frac{a}{2} \max(|\dot{f}|) \quad \text{und} \\ \left\| \partial_{ij}^s f(\tau_j) - f(\tau_i) \right\| &\leq \frac{a^2}{6} \max(|\ddot{f}|), \end{aligned}$$

wobei auf den linken Seiten jeweils über j zu summieren ist. In diesem Sinne konvergiert die symmetrische Ableitung schneller als die anderen beiden. Man kann weitere Ableitungsmethoden definieren, welche noch schneller, also in einer höheren Potenz von a , konvergieren. Dies ist allerdings nur solange sinnvoll, wie der zusätzliche Aufwand aufgrund der weiteren benötigten Stellen, an denen f ausgewertet werden muss, sinnvoll bleibt und – was in der Regel die stärkere Einschränkung ist – die entsprechend höheren Ableitungen von f , die in den Fehlerabschätzungen auftreten, nicht zu groß sind und insbesondere existieren.

Ein weiteres Problem bei der Wahl der Ableitung ist als *Fermion-Doubling-Problem* bekannt. Dieses soll hier kurz diskutiert werden⁷. Wir verwenden dafür die wechselwirkungsfreie Theorie, wählen also $W(q) = mq$. Die Wirkung lässt sich dann in zwei nicht wechselwirkende Teile zerlegen. Des Weiteren wählen wir die symmetrische Ableitung $\partial \rightarrow \partial^s$ für die Fermionen und die Rückwärtsableitung $\partial \rightarrow \partial^b$ für die Bosonen. Am Ende werden wir die Auswirkungen dieser Wahl diskutieren. Die Zerlegung der Wirkung ist nun

$$\begin{aligned} S &= S_B + S_F \quad \text{mit} \\ S_F &= a \sum_{i,j} \bar{\psi}_i (\partial^s + m)_{ij} \psi_j = \sum_{i,j} \bar{\psi}_i M_{ij} \psi_j \quad \text{und} \\ S_B &= \frac{a}{2} \sum_{i=1}^N m^2 q_i^2 + (\partial^b q)_i^2 = \frac{1}{2a} \sum_{i,j} q (a^2 m^2 \mathbb{1} - \Delta) q = \frac{1}{2a} \sum_{i,j} q_i \square_{ij} q_j, \end{aligned}$$

wobei beim Umschreiben der bosonischen Wirkung verwendet wurde, dass die Transponierte der Rückwärtsableitung gerade die negative Vorwärtsableitung ist und folgende Symbole eingeführt wurden:

$$\begin{aligned} \Delta_{ij} &= a^2 (\partial^f \partial^b)_{ij} = \delta_{i-1,j} - 2\delta_{i,j} + \delta_{i+1,j}, \\ \square &= a^2 m^2 \mathbb{1} - \Delta, \\ M &= a \partial^s + am \mathbb{1}. \end{aligned}$$

⁷Wir folgen hier im Wesentlichen der Darstellung aus [21].

Im wechselwirkungsfreien Fall zerfällt die Zustandssumme (nach Gl. (26)) in einen bosonischen und einen fermionischen Teil.

$$\begin{aligned} Z &= Z_B Z_F \quad \text{mit} \\ Z_B &= a^{\frac{N}{2}} \int \prod_i dq_i e^{-\frac{1}{2} q_i \square_{ij} q_j} \quad \text{und} \\ Z_F &= \int \prod_i \bar{\psi}_i \psi_i e^{-\bar{\psi}_i M_{ij} \psi_j} \end{aligned}$$

Der Faktor $a^{\frac{N}{2}}$ kommt von der Variablentransformation $q_i \rightarrow a^{\frac{1}{2}} q_i$ im Integral der bosonischen Zustandssumme. Diese Faktorisierung erlaubt es, den bosonischen und den fermionischen Teil unabhängig zu untersuchen. Wir sind nun interessiert an Zweipunktsfunktionen. Die bosonische schreibt sich (nach der gleichen Variablentransformation) als

$$\langle T q_i q_j \rangle_\beta = \frac{a^{\frac{N}{2}}}{Z_B} \int \prod_k dq_k q_i q_j e^{-\frac{1}{2} q_l \square_{lm} q_m}.$$

Um dies auszuwerten, führen wir eine Hilfsfunktion $J(\tau_i) = J_i$ ein, schreiben die Orte q als Ableitungen nach dieser Funktion und setzen anschließend $J = 0$. Man erhält

$$\langle T q_i q_j \rangle_\beta = \frac{a^{\frac{N}{2}}}{Z_B} \int \prod_k dq_k \frac{\partial}{\partial J_i} \frac{\partial}{\partial J_j} e^{-\frac{1}{2} q_l \square_{lm} q_m + J_l q_l} \Big|_{J=0}.$$

Nun werden Ableitung und Integration vertauscht. Es verbleiben Integrale, welche durch eine Variablentransformation $q \rightarrow q + \square^{-1} J$ bis auf einen Faktor in die Zustandssumme überführt werden. Übrig bleibt

$$\langle T q_i q_j \rangle_\beta = \frac{\partial}{\partial J_i} \frac{\partial}{\partial J_j} e^{\frac{1}{2} J_l \square_{lk}^{-1} J_k} \Big|_{J=0}$$

und somit

$$\langle T q_i q_j \rangle_\beta = \square_{ij}^{-1}.$$

Man beachte an dieser Stelle die Analogie zu Gl. (27). Im wechselwirkungsfreien Fall ist die Fermionmatrix unabhängig von den bosonischen Freiheitsgraden. Der Korrelator vereinfacht sich also zu

$$\langle \psi(\tau_j) \psi^\dagger(\tau_i) \rangle_\beta = M_{ij}^{-1}.$$

Wir möchten nun die Propagatoren, also die Fouriertransformierten der Korrelationsfunktionen, berechnen. Dazu betrachten wir zunächst den Operator \square im Fourierraum:

$$\square_{pp'} = \frac{1}{N} \sum_{x,y} e^{-ip'ay} e^{ipax} \square_{xy}.$$

Die Impulse p und p' sind dabei ganzzahlige Vielfache von $\frac{2\pi}{Na}$ und nehmen Werte zwischen $-\frac{\pi}{a}$ und $\frac{\pi}{a}$ an. Da der Operator im Ortsraum durch eine zirkulante Matrix dargestellt wird, ist er im Fourierraum diagonal.

$$\begin{aligned}\square_{pp'} &= \frac{1}{N} \sum_{x,y} e^{-ipay} e^{ip'ax} (a^2 m^2 \delta_{xy} - \delta_{x-1,y} + 2\delta_{x,y} - \delta_{x+1,y}) \\ \square_{pp'} &= \frac{1}{N} \underbrace{\sum_x e^{-i(p-p')ax}}_{=N\delta_{p,p'}} (a^2 m^2 - e^{ipa} + 2 - e^{-ipa}) \\ \square_{pp'} &= \delta_{pp'} \square_p \quad \text{mit} \quad \square_p = a^2 m^2 + 4 \sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)\end{aligned}$$

Der dazu inverse Operator hat also im Fourierraum die Form

$$\square_{pp'}^{-1} = \delta_{pp'} \square_p^{-1} \quad \text{mit} \quad \square_p^{-1} = \frac{1}{a^2 m^2 + 4 \sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)}.$$

Der Propagator ist dementsprechend

$$G_B(p) = \square_p^{-1} = \frac{1}{a^2 m^2 + 4 \sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)}.$$

Die Pole liegen bei

$$p_{\text{Pol}} = \pm \frac{2i}{a} \operatorname{arsinh}\left(\frac{am}{2}\right) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \pm im,$$

stimmen also im Kontinuumsimes mit dem Resultat aus Gl. (22) überein.

Da wir in diesem Beispiel für die Fermionen die symmetrische Ableitung gewählt haben, ergibt sich in einer analogen Rechnung beim Verwenden periodischer Randbedingungen⁸ der folgende Propagator

$$G_F(p) = M_p^{-1} = \frac{1}{am + i \sin(pa)}.$$

Dieser hat Pole bei

$$p_{\text{Pol}} = \frac{i}{a} \operatorname{arsinh}(am) \quad \text{und} \quad p_{\text{Pol}} = \pm \frac{\pi}{a} - \frac{i}{a} \operatorname{arsinh}(am).$$

Der erste Pol geht im Kontinuumsimes wieder gegen die richtige Teilchenmasse. Die beiden anderen Pole, die man eigentlich nur als einen Pol zählen sollte, da sie wegen der $\frac{2\pi}{a}$ -Periodizität des Propagators zum gleichen Punkt gehören, sind unphysikalisch.

⁸Die Rechnung muss im Fall antiperiodischer Randbedingungen etwas abgeändert werden, führt allerdings zu den gleichen Problemen.

Dieser Effekt wird als Fermion-Doubling-Problem bezeichnet. Den Grund dafür kann man in der diskretisierten Ableitung sehen. Diese liefert zwar bei kleinen Impulsmoden sehr gute Werte, versagt aber bei Impulsen in der Größenordnung von $\frac{\pi}{a}$. Im Extremfall einer Funktion, die abwechselnd stark positive und stark negative Werte hat, kann die symmetrische Ableitung sogar verschwinden und ist somit offenbar keine gute Approximation des Kontinuumswertes mehr. Ein Weg dieses Problem zu beheben, ist diesen Pol aus dem Spektrum zu entfernen. Da der ungewollte Pol im Gegensatz zum physikalischen einen großen Realteil hat, kann man ihn beseitigen indem man einen zusätzlichen impulsabhängigen Massenterm, den sogenannten *Wilsonterm*, einführt:

$$M = a\partial^S + am \quad \rightarrow \quad M = a\partial^S + am - \frac{r}{2}\Delta.$$

Hierbei wird $r \in [-1, 1]$ als Wilsonparameter bezeichnet. Der zusätzliche Term liefert bei großem Impuls offenbar einen wesentlichen Beitrag, während er für kleine Impulse gegen null geht. So kann der ursprüngliche Pol erhalten werden, während der unphysikalische verschwindet. Für die spezielle Wahl $r = 1$ vereinfacht sich der fermionische Teil der Wirkung zusätzlich zu

$$\begin{aligned} M &= a\partial^S + am - \frac{1}{2}\Delta, \\ M &= a\partial^b + am. \end{aligned}$$

Umgekehrt liefert $r = -1$ die Vorwärtsableitung. Für den hier betrachteten Fall einer Quantenmechanik wirkt diese Konstruktion etwas künstlich. Man hätte natürlich ebensogut gleich die Rückwärtsableitung wählen und feststellen können, dass es dann kein Fermion-Doubling-Problem gibt. Allerdings ist in der Situation einer Quantenfeldtheorie – wenn also nicht nur ein Zeit-, sondern ein Raum-Zeit-Gitter vorliegt – die Beschreibung mittels Wilsonterm der Weg der Wahl, da dann die symmetrische Ableitung durch den Wilsonterm nicht in eine Vorwärts- oder Rückwärtsableitung umgewandelt wird (und selbst diese noch Fermionendoppler haben).

Fehlschlagen der naiven Diskretisierung

Um das Problem der Doppler zu vermeiden ist es, wie wir gesehen haben, im Fall der Quantenmechanik ausreichend, die Rückwärtsableitung zu wählen. Man erhält somit das Modell

$$S^{\text{naive}}[q, \bar{\psi}, \psi] = \frac{a}{2} \sum_i ((\partial^b q)_i^2 + W_i^2) + a \sum_{i,j} \bar{\psi}_i (\partial_{ij}^b + W_{ij}) \psi_j$$

mit den oben eingeführten ∂^b , W_i und W_{ij} . Diese Diskretisierung führt dazu, dass die Supersymmetrien auf dem Gitter gebrochen werden, also die Variation der Wirkung unter den Transformationen nach Gl. (19) nicht verschwindet. Das kann darauf zurückgeführt werden, dass die Leibniz-Regel für Ableitungen auf dem Gitter nicht erfüllt

ist [24]. In Untersuchungen zu diesem diskretisierten Modell wurde zudem festgestellt, dass das Verhalten im Kontinuumslimit nicht mit dem ursprünglichen Modell übereinstimmt [16, 17]. Es konnte aber gezeigt werden, dass das Hinzufügen eines sogenannten *improvement term* der Gestalt

$$a \sum_i W_i (\partial q)_i$$

dieses Problem behebt und zu den richtigen Kontinuumsresultaten führt (hier ist nach Hinzufügen des Wilson-Terms $\partial = \partial^b$). Da der Term im Kontinuumslimit in eine totale Ableitung übergeht, verschwindet er für periodische Randbedingungen in diesem Grenzfall. Ein weiterer Vorteil ist, dass durch diesen zusätzlichen Term eine der beiden Supersymmetrien auf dem Gitter wieder hergestellt wird.

Die Wirkung, welche in dieser Arbeit für die Gittersimulationen verwendet wurde, ist also gegeben durch

$$S = S^{\text{naive}} + a \sum_i W_i (\partial^b q)_i,$$

oder ausgeschrieben

$$S = \frac{a}{2} \sum_i \left((\partial^b q)_i + W_i \right)^2 + a \sum_{i,j} \bar{\psi}_i (\partial_{ij}^b + W_{ij}) \psi_j$$

mit ∂^b , W_i und W_{ij} entsprechend den Gleichungen (28) und (29). Dieses Modell wurde ebenfalls in [17] für den Fall einer nicht spontan gebrochenen Supersymmetrie untersucht.

5.3 Explizite Invertierung der Fermionmatrix

Wir wenden uns nun der Berechnung der Determinante der Fermionmatrix zu. Diese schreibt sich für Wilsonparameter $r = 1$ als

$$M_{ij} = \delta_{ij} - \delta_{i-1,j} + aW'(q_i)\delta_{ij}.$$

Also

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & & & & s \\ -1 & m_2 & & & \\ & -1 & \dots & & \\ & & & m_{n-1} & \\ & & & -1 & m_N \end{pmatrix},$$

wobei $s = +1$ antiperiodischen und $s = -1$ periodischen Randbedingungen entspricht und

$$m_i = 1 + aW'(q_i)$$

eingeführt wurde. Die Determinante ist, wie man beispielsweise durch Anwenden der Permutationsformel sieht,

$$\det M = s + \prod_{i=1}^n m_i. \quad (30)$$

Wir können die Determinante also mit geringem Aufwand anhand der Konfiguration q_i berechnen. Für das in [17] untersuchte Beispiel $W(q) = mq + hq^3$ sieht man an dieser Stelle, dass $m_i \geq 1$ ist und entsprechend sowohl für periodische als auch für antiperiodische Randbedingungen nur positive Fermiondeterminanten auftreten können. Somit ist der Wittenindex offenbar auch positiv (Gl. (17)), wie es im Fall der ungebrochenen Supersymmetrie sein muss.

Nun möchten wir die Zweipunktsfunktion berechnen. Dazu muss M invertiert werden (siehe Gl. (27)). Wir verwenden die allgemeine Beziehung

$$M^{-1} = \frac{1}{\det M} \text{adj} M,$$

wobei $\text{adj} M$ die Adjunkte von M bezeichnet. Das (i, j) -Element erhält man, indem man die j -te Zeile und die i -te Spalte von M streicht und die sich ergebende Unterdeterminante berechnet. Dazu kommt noch ein alternierendes Vorzeichen. Wir betrachten den Fall $j < i - 2$. Es ergibt sich⁹

$$M_{ij}^{-1} = \frac{(-1)^{i+j}}{\det M} \begin{vmatrix} \mathbf{m}_1 & & & & & & & & & & s \\ -1 & \mathbf{m}_2 & & & & & & & & & \\ & -1 & \mathbf{m}_{j-1} & & & & & & & & \\ & & & -1 & m_{j+1} & & & & & & \\ & & & & -1 & m_{j+2} & & & & & \\ & & & & & -1 & m_{i-1} & & & & \\ & & & & & & -1 & & & & \\ & & & & & & & \mathbf{m}_{i+1} & & & \\ & & & & & & & -1 & \mathbf{m}_{i+2} & & \\ & & & & & & & & -1 & \mathbf{m}_N & \end{vmatrix}.$$

Offenbar enthalten alle Permutation bis auf eine (die hier fett gedruckt ist) mindestens eine null. Da sich alle Faktoren -1 aufheben bleibt also

$$M_{ij}^{-1} = \frac{1}{\det M} \prod_{k=1}^{j-1} m_k \prod_{k=i+1}^N m_k. \quad (31)$$

Mit dieser Formel lassen sich die fermionischen Zweipunktsfunktionen effizient berechnen¹⁰. Setzt man die oben gefundene Darstellung der Determinante Gl. (30) ein, ergibt

⁹Aus Platzgründen wird hier $i = 8$, $j = 4$, $N = 11$ dargestellt. Der allgemeine Fall sollte aber ersichtlich sein.

¹⁰In den numerischen Simulationen wurde allerdings auf eine allgemeinere, wenn auch langsamere Implementierung zur Berechnung der Zweipunktsfunktion zurückgegriffen, welche die Matrix mittels L-U-Zerlegung invertiert.

sich

$$M_{ij}^{-1} = \left[\prod_{k=j}^i m_k + s \left(\prod_{k=1}^{j-1} m_k \prod_{k=i+1}^N m_k \right)^{-1} \right]^{-1}. \quad (32)$$

Die auftretenden Produkte lassen sich noch umschreiben gemäß

$$\begin{aligned} \prod_{k=x}^y m_k &= \exp \left(\sum_{k=x}^y \ln(m_k) \right) \\ \prod_{k=x}^y m_k &= \exp \left(\sum_{k=x}^y \ln(1 + aW'(q_k)) \right). \end{aligned}$$

Im Limes $a \rightarrow 0$ kann der Logarithmus um eins entwickelt werden. Man erhält

$$\prod_{k=x}^y m_k \approx \exp \left(a \sum_{k=x}^y W'(q_k) \right).$$

Der Exponent kann als Riemannsumme für das Integral über W' interpretiert werden. Das Produkt geht somit im Kontinuumslimit über in

$$\prod_{k=x}^y m_k \sim \exp \left(\int_x^y W'(q(\tau)) d\tau \right).$$

Einsetzen in Gl. (30) bzw. Gl. (32) liefert

$$\begin{aligned} \det M &\sim s + \exp \left(\int_0^\beta W' \right) \quad \text{und} \\ M_{xy}^{-1} &\sim \left[\exp \left(\int_x^y W' \right) + s \exp \left(- \int_0^x W' - \int_y^\beta W' \right) \right]^{-1}, \quad (33) \end{aligned}$$

wobei $\int_a^b W'$ für $\int_a^b W'(q(\tau)) d\tau$ steht. Diese Gleichung verknüpft das Präpotential mit der fermionischen Korrelationsfunktion. Der erste Summand hängt dabei von den bosonischen Feldern zwischen den betrachteten Zeiten x und y ab. Das zweite Integral verwendet die Daten, welche überschritten werden, wenn man beim späteren Zeitpunkt y beginnt, bis zum Wert β geht, anschließend wieder bei null startet und bis x geht. Man kann dies auch als Integral von y bis $\beta + x$ auffassen, wobei die periodische Fortsetzung der bosonischen Felder verwendet wird. Die periodischen bzw. antiperiodischen Randbedingungen der Fermionen werden dabei durch den Faktor s berücksichtigt.

Dieses Resultat soll nun auf das Beispiel $W(q) = mq + gq^2$ für den Fall kleiner Kopplung g angewendet werden. Wie in Kapitel 6.1 im Detail diskutiert wird, nimmt q typischerweise entweder Werte um $q = 0$ oder um $q = -\frac{m}{g}$ an. In erster Näherung gilt dann $W' = m$ bzw. $W' = -m$. Im ersten Fall wird der Korrelator zu

$$M_{xy}^{-1} \sim \left[e^{m(y-x)} + s e^{-m(\beta-(y-x))} \right]^{-1} = (1 + s e^{-\beta m})^{-1} e^{-m\tau},$$

fällt also in dieser Näherung exponentiell mit $\tau = y - x$ ab, wobei die Geschwindigkeit des Abfallens von m vorgegeben wird. Dies deckt sich mit dem Resultat aus der analytischen Untersuchung im Kontinuum (Gl. (25)). Dabei ist zu beachten, dass im Grenzfall kleiner g die Matrixelemente $\langle n1|\psi^\dagger|m0\rangle$ nur für sich um eins unterscheidende Werte m und n nicht verschwinden. Außerdem ist der Energieabstand dieser benachbarten Zustände jeweils m (siehe Kapitel 6.1). Der Beitrag des fermionischen Grundzustands fehlt. Dieser ist aber gerade bei $q = -\frac{m}{g}$ lokalisiert. Für diesen Fall ergibt sich analog

$$M_{xy}^{-1} \sim \left[e^{-m(y-x)} + s e^{m(\beta-(x-y))} \right]^{-1} = (s + e^{-\beta m})^{-1} e^{-m(\beta-\tau)}.$$

Das ist, bis auf den Vorfaktor, gerade die bei $\tau = \frac{m}{2\beta}$ gespiegelte Funktion. Im Fall periodischer Randbedingungen für die Fermionen ist sie negativ, im antiperiodischen Fall positiv. Auch das deckt sich mit dem Resultat im Kontinuumsfall, wenn man berücksichtigt, dass der bosonische Grundzustand nicht beiträgt, da er bei $q = 0$ lokalisiert ist.

Abschließend sei erwähnt, dass die Rechnung mit Wilsonparameter $r = -1$ im Kontinuumslimit auf das gleiche Resultat (Gl. (33)) führt.

5.4 Der HMC-Algorithmus

Es soll der Erwartungswert einer Größe $\Omega(q)$ mit $q = (q_1, \dots, q_N)$ numerisch berechnet werden. Dieser ist

$$\langle \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q e^{-S[q]} \Omega(q),$$

wobei wir das Pfadintegral als N -faches Integral über die q_i verstehen. Es gibt nun zahlreiche Verfahren Integrale numerisch auszuwerten. Das einfachste ist es, über das Integrationsgebiet ein möglichst feines (Integrations-)Gitter zu legen und das Integral (bis auf einen Faktor) durch die Summe der Funktionswerte an den Gitterpunkten zu bestimmen, also eine Riemannsumme zu berechnen. Im vorliegenden Fall würde dies für ein Integrationsgitter mit L Gitterpunkten in jede Richtung bedeuten, dass L^N Werte zu bestimmen sind. Da wir Werte von $N = 20 \dots 100$ durchaus zulassen wollen, ist klar, dass dieses einfache Verfahren schon für recht grobe Gitter L nicht durchführbar ist. Man kann nun die Approximation noch verbessern, indem man Verfahren anwendet, welche beispielsweise für Polynome eines gewissen Grades exakt sind. Dies erlaubt zwar etwas kleinere Werte für L , löst aber das grundsätzliche Problem nicht.

Ein anderer Weg ist die Monte-Carlo-Integration. Der einfachste Ansatz besteht darin, Punkte im Integrationsvolumen (gleichverteilt) zufällig zu wählen und den Integranden an diesen Stellen auszuwerten. Der Mittelwert ist wieder ein guter Schätzwert für das Integral. Dieses Verfahren liefert für das vorliegende Integral leider auch noch keine zufriedenstellenden Resultate. Der Grund dafür ist, dass der Term $e^{-S[q]}$ für fast alle

Konfigurationen, die man durch zufälliges Wählen erhält, nahe null ist. Der Hauptbeitrag kommt durch Pfade q zustande, welche ein kleines S liefern. Es liegt daher nahe, bevorzugt diejenigen Pfade auszuwählen, welche stärker zum Integral beitragen. Eine elegante Möglichkeit dies zu realisieren, ist es,

$$P_S(q) = \frac{1}{Z} e^{-S[q]}$$

als Wahrscheinlichkeitsmaß zu interpretieren. Gelingt es Konfigurationen q zu erzeugen, welche nach dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung verteilt sind, kann man das Integral schätzen, indem man T Pfade q^t erzeugt, den verbleibenden Integranden Ω an diesen Stellen auswertet und das arithmetischen Mittel berechnet.

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \Omega(q^t)$$

Sind die q^t stochastisch unabhängig, dann ist die Varianz der Summe gleich der Summe der Varianzen der $\Omega(q^t)$. Durch den Normierungsfaktor ergibt sich damit, dass die Standardabweichung von $\bar{\Omega}$ wie $\frac{1}{\sqrt{T}}$ fällt.

$$\bar{\Omega} = \langle \Omega \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{T}}\right)$$

Wir brauchen nun noch eine geeignete Methode, um Konfigurationen zu erzeugen, welche nach P_S verteilt sind. Dafür eignen sich Markov-Prozesse ausgezeichnet. Dabei handelt es sich um Prozesse, bei welchen Folgen von Konfigurationen $q^1 \rightarrow q^2 \rightarrow \dots$ erzeugt werden, wobei der $i + 1$ -te „Zustand“ zufällig aus dem i -ten hervorgeht und von denen davor nicht abhängt. Dies wird durch ein Wahrscheinlichkeitsmaß

$$P_{\text{Mkv}}(q^i \rightarrow q^{i+1})$$

beschrieben. Damit alle Zustände erreicht werden können, muss für jeden Anfangszustand eine Folge von Konfigurationen existieren, um diesen zu erreichen. Diese Bedingung ist notwendig, um die Ergodizität des Markovprozesses sicherzustellen, was im Folgenden immer vorausgesetzt werden soll. Eine hinreichende Bedingung dafür, dass der Markov-Prozess für große Zeiten T die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilung, für beliebigen Startwert, realisiert, ist dann das sogenannte detaillierte Gleichgewicht (detailed balance).

$$P_S(q)P_{\text{Mkv}}(q \rightarrow q') = P_S(q')P_{\text{Mkv}}(q' \rightarrow q) \quad (34)$$

Es ist nun sinnvoll den Markov-Schritt in zwei Teile zu zerlegen:

1. Man erzeugt aus der gegebenen Konfiguration q einen neuen „Vorschlag“ q' nach einer noch festzulegenden Prozedur mit Wahrscheinlichkeit P_{Vors} .

2. Man akzeptiert den neuen Zustand nur mit einer gewissen Akzeptanzrate $P_{\text{Akz}}(q \rightarrow q')$ und behält den bisherigen Zustand q ansonsten bei.

Das erlaubt es, die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (Gl. (34)) für beliebiges P_{Vors} zu erfüllen, indem man

$$P_{\text{Akz}}(q \rightarrow q') = \min \left\{ 1, \frac{P_S(q')P_{\text{Vors}}(q' \rightarrow q)}{P_S(q)P_{\text{Vors}}(q \rightarrow q')} \right\}$$

wählt. Wir benötigen nun noch ein Verfahren für den ersten Schritt, um P_{Vors} zu realisieren. Dieses sollte folgenden Anforderungen genügen:

- Die Vorschläge q' sollten sich effizient berechnen lassen.
- Die Wahrscheinlichkeit des umgekehrten Schrittes $P_{\text{Vors}}(q' \rightarrow q)$ sollte leicht ermittelt werden können.
- Die Akzeptanzrate P_{Akz} sollte möglichst groß sein.
- Die Autokorrelation der Konfigurationen q^t sollte möglichst schnell reduziert werden.

Alle diese Punkte werden sehr elegant vom sog. Hybriden Monte-Carlo-Algorithmus (HMC) erfüllt. Dafür wird eine künstliche Hamiltonfunktion

$$H'(q, \pi) = \frac{1}{2}\pi^2 + S(q)$$

eingeführt, wobei die „künstlichen“ kanonischen Impulse π_i und die Schreibweise $\pi^2 = \sum_{i=1}^N \pi_i^2$ eingeführt wurden. Wie man sieht, beschreibt dies ein System mit $2N$ Freiheitsgraden, wobei nur N denen des ursprünglichen Problems entsprechen. Nun werden folgende „Bewegungsgleichungen“ bezüglich der Computerzeit t gefordert

$$\frac{dq_i}{dt} = \sum_{j=1}^N A_{ij}\pi_j \quad \text{und} \quad (35)$$

$$\frac{d\pi_i}{dt} = \sum_{j=1}^N A_{ji}F_j, \quad (36)$$

mit der Kraft $F_j = -\frac{\partial H'[q]}{\partial q_j} = -\frac{\partial S[q]}{\partial q_j}$. Wie man sieht, handelt es sich für $A = \mathbb{1}$ um die kanonischen Bewegungsgleichungen. Der Vorteil dieser Verallgemeinerung wird später noch klar. Wir zeigen an dieser Stelle nur, dass diese Gleichungen zu einer Energieer-

haltung (von H' ; nicht vom ursprünglich zu simulierenden System) führen.

$$\begin{aligned}\frac{dH'}{dt} &= \frac{\partial H'}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \frac{\partial H'}{\partial \pi_i} \frac{d\pi_i}{dt} \\ &= \frac{\partial H'}{\partial q_i} A_{ij} \pi_j - \underbrace{\frac{\partial H'}{\partial \pi_i} A_{ji}}_{=\pi_i} \frac{\partial H'}{\partial q_j} \\ &= 0\end{aligned}$$

Die Zeitumkehrsymmetrie, bei gleichzeitigem Übergang von π nach $-\pi$, ist direkt ersichtlich. Der HMC sieht nun vor, dass man die Impulse π_i nach einer Standard-Gaußverteilung wählt,

$$P_{\text{Gauss}}(\pi) \sim e^{-\frac{\pi^2}{2}},$$

um dann die Konfigurationen durch numerische Integration der Bewegungsgleichungen (35) und (36) für eine Zeit t_0 zu entwickeln, womit man $q' = q(t_0)$ und $\pi' = \pi(t_0)$ erhält. Die Wahrscheinlichkeit, die neue Konfiguration zu erhalten, ist folglich

$$P_{\text{Int}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) = \delta(q' - q(t_0))\delta(\pi' - \pi(t_0)).$$

Anschließend wird der Akzeptanzschritt mit

$$P_{\text{Akz}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) = \min\{1, e^{\delta H'}\}$$

durchgeführt, wobei $\delta H' = H'(q', \pi') - H'(q, \pi)$ eingeführt wurde. Diese Größe verschwindet im Allgemeinen nicht, da die Lösung der Bewegungsgleichung numerischen Fehlern unterliegt. Insgesamt ergibt sich also für den Markov-Schritt eine Übergangswahrscheinlichkeit von

$$P_{\text{Mkv}}(q \rightarrow q') = \int d\pi P_{\text{Gauss}}(\pi) P_{\text{Int}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) P_{\text{Akz}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')). \quad (37)$$

Wir möchten uns nun davon überzeugen, dass das detaillierte Gleichgewicht so tatsächlich eingehalten wird. Dafür benötigen wir noch, dass die numerische Integration der Bewegungsgleichungen umkehrbar ist:

$$P_{\text{Int}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) = P_{\text{Int}}((q', -\pi') \rightarrow (q, -\pi)). \quad (38)$$

Mit der Identität

$$\begin{aligned}e^{-H'(q, \pi)} \min\{1, e^{-\delta H'}\} &= \min\{e^{-H'(q, \pi)}, e^{-H'(q', \pi')}\} \\ &= e^{-H'(q', \pi')} \min\{e^{\delta H'}, 1\}\end{aligned}$$

und der Beobachtung, dass

$$P_S(q)P_{\text{Gauss}}(\pi) \sim e^{H'(q, \pi)},$$

gelangt man zu

$$\begin{aligned} P_S(q)P_{\text{Gauss}}(\pi)P_{\text{Akz}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) &= P_S(q')P_{\text{Gauss}}(\pi')P_{\text{Akz}}((q', \pi') \rightarrow (q, \pi)) \\ &= P_S(q')P_{\text{Gauss}}(-\pi')P_{\text{Akz}}((q', -\pi') \rightarrow (q, -\pi)), \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Invarianz von H' unter $\pi \rightarrow -\pi$ ausgenutzt wurde. Multiplizieren dieser Gleichung mit $P_{\text{Int}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi'))$ und Integration über π und π' liefert mit der Umkehrbarkeit des Integrators (Gl. (38))

$$\begin{aligned} &\int d\pi d\pi' P_S(q)P_{\text{Gauss}}(\pi)P_{\text{Int}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi'))P_{\text{Akz}}((q, \pi) \rightarrow (q', \pi')) \\ &= \int d\pi d\pi' P_S(q')P_{\text{Gauss}}(-\pi')P_{\text{Int}}((q', -\pi') \rightarrow (q, -\pi))P_{\text{Akz}}((q', -\pi') \rightarrow (q, -\pi)), \end{aligned}$$

womit nach einer Variablentransformation $\pi \rightarrow -\pi$ und $\pi' \rightarrow -\pi'$ mit Gl. (37) die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts Gl. (34) offenbar erfüllt ist. Wir hatten gezeigt, dass die Bewegungsgleichungen (35) und (36) zu einer Energieerhaltung führen. Dies würde bedeuten, dass die Akzeptanzrate gleich 1 ist. Die numerische Integration wird allerdings zu Fehlern führen, so dass es zu einer Energieänderung $\delta H'$ kommt. Da wir an keiner Stelle vorausgesetzt haben, dass die Energie tatsächlich erhalten ist, bleibt das Verfahren dennoch korrekt. Die Abweichungen führen also lediglich zu einer geringeren Akzeptanzrate. Tatsächlich ist es sogar sinnvoll, die numerische Integration mit einer relativ großen Schrittweite durchzuführen. Das führt zwar zu größeren Fehlern und somit zu geringeren Akzeptanzraten, bringt aber den Vorteil, dass die neue Konfiguration (bei gleicher Zahl an Rechenschritten) sich von der alten stärker unterscheidet. Man erreicht so eine schnellere Reduktion der Autokorrelation. Zu große Schrittweiten führen allerdings dazu, dass die Akzeptanzrate sehr gering wird, was das Verfahren verlangsamt.

Die stochastische Unabhängigkeit der Konfigurationen ist natürlich mit diesem Algorithmus nicht erreichbar. Es reicht aber aus, wenn die Korrelation der aus den Konfigurationen berechneten Größen Ω gering ist. Solange die Simulationszeit groß genug ist, um den Phasenraum ausreichend „abzutasten“, führen vorhandene Korrelationen aber nicht zu systematischen Fehlern. Bei geeigneter Auswertung der Daten kommt es auch nicht zu einer Unterschätzung der statistischen Fehler. In der praktischen Anwendung hat es sich bewährt, zunächst die Monte-Carlo-Simulation durchzuführen und dabei nur einen Bruchteil der sich ergebenden Konfigurationen zu speichern, z.B. nur jede zwanzigste. Diese sind dann nur noch geringfügig korreliert und gut geeignet, um „Messungen“ durchzuführen, also verschiedene Erwartungswerte zu bestimmen. Das Verwenden aller Daten würde unnötig viel Speicherplatz benötigen und die Zeit verlängern, die notwendig ist, um Messungen durchzuführen, ohne den statistischen Fehler gravierend zu verringern. Die Wahl der Anfangskonfiguration q^0 ist zwar, wie bereits bemerkt, für große Simulationszeiten im Prinzip egal, man sollte aber dennoch darauf verzichten, Konfigurationen zu verwenden, die noch zu stark mit der Startkonfiguration korreliert sind. Dies würde nämlich zu systematischen Fehlern führen, welche

zwar wie T^{-1} und damit schneller abfallen, als die statistischen, aber besonders groß sein können. Man macht also zunächst eine bestimmte Anzahl an *Thermalisierungsschritten*, welche nicht abgespeichert werden. Wie viele nötig sind, hängt dabei stark vom konkreten Fall ab. Auch die Wahl der Startkonfiguration sowie die zu untersuchende Observable beeinflussen die notwendige Zeit.

Vorzeichenänderung der Fermiondeterminante

Bei bestimmten Präpotentialen W kann die Fermiondeterminante auch negativ werden. Im Fall der gebrochenen Supersymmetrie muss das sogar so sein, da der Wittenindex verschwindet und demnach auch negative Beiträge im Pfadintegral auftreten müssen. Die Wirkung beinhaltet nach Ausintegration der fermionischen Freiheitsgrade einen Beitrag $\sim -\ln|\det M|$. Dieser divergiert für verschwindende Determinanten. Demnach könnte die Simulation bei einem Startwert mit positiver Determinante bei exakter Lösung der Bewegungsgleichungen (35) und (36) nie zu einer Konfiguration mit anderem Vorzeichen kommen. Die Bedingung der Ergodizität wäre nicht erfüllt. Da die Integration der Bewegungsgleichungen aber mit einer endlichen Schrittweite durchgeführt wird, kann es dennoch zu solchen Vorzeichenwechseln kommen. Für gewöhnlich würde man diesen Effekt als Fehler der numerischen Lösung der Bewegungsgleichung sehen und vermeiden wollen. Für das Funktionieren des HMC-Algorithmus ist es aber nicht notwendig, dass die Bewegungsgleichungen erfüllt oder näherungsweise erfüllt werden. Das wirkt sich lediglich positiv auf die Akzeptanzrate und damit die Geschwindigkeit aus.

Gerade die numerischen Fehler beim Lösen der Bewegungsgleichung stellen also die Ergodizität wieder her. Die notwendige Umkehrbarkeit des Integrators wird davon im Allgemeinen nicht aufgehoben. Diese könnte nur durch die begrenzte Genauigkeit, mit der Fließkommazahlen im Computer abgespeichert werden, verletzt werden. Ob bei Simulationen tatsächlich alle Konfigurationen ausreichend berücksichtigt werden, oder das „Tunneln“ zwischen bestimmten Bereichen zwar im Prinzip möglich ist aber praktisch nie passiert, muss im Einzelfall untersucht werden.

Fourierbeschleunigung

Eine Stelle in der Beschreibung des HMC wurde bisher noch offen gelassen: Die Wahl der Matrix A_{ij} in den Bewegungsgleichungen (35) und (36). Wie bereits festgestellt wurde, kann man an dieser Stelle einfach die Einheitsmatrix verwenden und erhält einen funktionierenden Algorithmus. Es gibt hier aber noch Potential den Algorithmus durch geschickte Wahl von A weiter zu verbessern. Zunächst ist es sicher eine sinnvolle Forderung, dass A die Translationssymmetrie des Gitters respektieren sollte. Dazu muss es zirkulant sein, also $A_{i+1,j+1} = A_{i,j}$ gelten. Dies sollte wegen der periodischen Randbedingungen beispielsweise auch für $i = N$ und $i + 1 \rightarrow 1$ der Fall sein. Unter dieser

Voraussetzung stellen die Bewegungsgleichungen gerade Faltungen von A bzw. A^T mit π bzw. F dar. Diese lassen sich für die fouriertransformierten¹¹ Größen q_p , π_p und F_p als Multiplikation schreiben,

$$\begin{aligned}\dot{q}_p &= g(p)\pi_p, \\ \dot{\pi}_p &= g(-p)F_p,\end{aligned}$$

wobei $g(p)$ die Fouriertransformierte von $A_{0,i}$ ist. Wir eliminieren nun die Impulse und schreiben dies als Gleichung zweiter Ordnung für die q_p

$$\ddot{q}_p = g(-p)g(p)F_p.$$

Offenbar führen ungerade Anteile in g zu einer Beschleunigung entgegen der Krafrichtung, was zu einem instabilen Algorithmus führen würde. Wir wählen deshalb $g(-p) = g(p)$, was einer symmetrischen Matrix A entspricht. Damit ist

$$\ddot{q}_p = g^2(p)F_p. \quad (39)$$

Wir können also die Beschleunigung der Felder im Impulsraum beeinflussen. Dies sollte sinnvollerweise so geschehen, dass sich alle Impulsmoden mit ähnlicher Geschwindigkeit bewegen. Dafür benötigen wir zumindest die grobe Impulsabhängigkeit von F_p . Der Einfachheit halber betrachten wir die Wirkung aus Gl. (18) für den Spezialfall des harmonischen Oszillators, also $W(q) = mq$ und rechnen im Kontinuumslimit. Dann ist

$$S = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \left(m^2 q^2 + \left(\frac{d}{d\tau} q \right)^2 \right).$$

Die Variationsableitung davon ist

$$\begin{aligned}F_\tau &= -\frac{\delta S}{\delta q(\tau)} = -\left(m^2 - \frac{d^2}{d\tau^2} q(\tau) \right) \\ F_p &= -(m^2 + p^2 q_p).\end{aligned}$$

Dieses Ergebnis legt die Definition

$$g(p) = \frac{m}{\sqrt{m^2 + p^2}} \quad (40)$$

nahe, um die Impulsabhängigkeit weitestgehend aus Gl. (39) zu eliminieren. Wie man sieht, werden davon die Moden mit kleinem Impuls nicht oder schwach beeinflusst und die Moden mit großem Impuls werden gedämpft. Dadurch führen die Bewegungen der hochfrequenten Moden zu geringeren numerischen Fehlern, was eine Erhöhung der Schrittweite der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen erlaubt. Man

¹¹Die Fouriertransformation wird hier bzgl. der Gitterzeit τ , nicht etwa bzgl. der künstlich eingeführten HMC-Zeit t durchgeführt.

erreicht also eine langsamere Bewegung der hochfrequenten Moden (und damit eine höhere Akzeptanzrate) und eine schnelle Bewegung der niederfrequenten bei gleichem Rechenaufwand.

Für die praktische Implementierung ist es sinnvoll, die Fouriertransformationen der Größen tatsächlich auszuführen. Der Zeitaufwand dafür wächst mit der Anzahl an Gitterplätzen wie $N \log N$, während das direkte Ausführen der Faltungen (oder der Matrixmultiplikationen) mit A_{ij} die Zeitkomplexität N^2 hat. Da die Zeitkomplexität des gesamten Algorithmus im besten Fall N sein kann (bei fester Anzahl an HMC-Schritten) und dies für die Wilson-Beschreibung (Kap. 5.2) tatsächlich der Fall ist, könnte man an dieser Stelle denken, dass sich das Verfahren für große Gitter nicht mehr auszahlt, da die Zeitkomplexität zu $N \log N$ verschlechtert wird. Das Gegenteil ist der Fall. Gerade bei großen Gittern muss für den HMC ohne Fourierbeschleunigung die Schrittweite des Integrators gesenkt werden. Der maximal auftretende Impuls in Gl. (40) ist über $p_{\max} = N \frac{\pi}{L}$ von der Zahl der Gitterpunkte abhängig. Für $p_{\max} \gg m$ ist

$$g^2(p_{\max}) \approx m^2 p_{\max}^{-2} = \frac{m^2 L^2}{\pi^2} N^{-2}.$$

Verzichtet man also auf die Fourierbeschleunigung, muss man, um die Akzeptanzrate auf einem brauchbaren Niveau zu halten, die Schrittweite des Integrators (und damit die Schrittweite für Moden niedriger Frequenz) etwa wie N^{-2} senken. Um also den gleichen Weg im Phasenraum zurückzulegen und unkorrelierte Konfigurationen zu erhalten, muss man um einen Faktor $\mathcal{O}(N^2)$ mehr Schritte durchführen, als beim Verwenden der Fourierbeschleunigung. Wir haben also das sogenannte *Critical Slow Down* vermieden.

5.5 Jackknife-Methode

In den letzten beiden Kapiteln wurde beschrieben, wie Konfigurationen (Pfade) q^t erzeugt werden können, welche Boltzmann-verteilt sind (t ist die Monte-Carlo Zeit; die physikalische Zeit wird unterdrückt). Der Erwartungswert einer Observable $\langle \Omega \rangle$ kann nun geschätzt werden als der Mittelwert

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \Omega^t \quad \text{mit} \quad \Omega^t = \Omega(q^t).$$

Oft möchte man eine bestimmte Funktion f an der Stelle eines Erwartungswerts auswerten. Des Weiteren benötigt man eine Fehlerabschätzung. Um diese zu erhalten, könnte man den Mittelwert der Funktionswerte

$$\bar{f}_{\text{naive}} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T f^t \quad \text{mit} \quad f^t = f(\Omega^t)$$

als Schätzer für $f(\langle \Omega \rangle)$ verwenden und die Varianz gemäß

$$\sigma^2(\bar{f}_{\text{naive}}) = \frac{1}{T(T-1)} \sum_{t=1}^T (f^t - \bar{f}_{\text{naive}})^2 \quad (41)$$

schätzen. Dieses Vorgehen ist aber für nichtlineare Funktionen f im Allgemeinen nicht geeignet, da das Bilden des Mittelwerts und das Anwenden der Funktion nicht vertauscht werden kann:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \bar{f}_{\text{naive}} = \langle f(\Omega) \rangle \neq f(\langle \Omega \rangle).$$

Beispielsweise ist die linke Seite für eine echt konvexe Funktion f immer größer als die rechte, sofern Ω nicht-verschwindende Varianz hat. Natürlich ist $f(\bar{\Omega})$ ein geeigneter Schätzer. Allerdings kann Gl. (41) nicht verwendet werden, um eine Fehlerabschätzung für f zu erhalten. Eine oft verwendete Alternative sind Fehlerfortpflanzungsgesetze, welche Δf aus $\Delta \Omega$ berechnen. Ein anderes Verfahren, das auch bei stark nichtlinearen Funktionen noch recht unempfindlich gegen statistische Fluktuationen ist, ist das Jackknife-Verfahren [18]. Dieses bietet außerdem den Vorteil, dass man die partiellen Ableitungen der Funktion nicht kennen muss. Dafür werden die sog. Jackknife-Schätzer \bar{f}_J und f_J^t gemäß

$$\bar{f}_J = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T f_J^t \quad \text{und} \quad f_J^t = f(\Omega_J^t) \quad \text{mit} \quad \Omega_J^t = \frac{1}{T-1} \sum_{t' \neq t} \Omega^{t'} \quad (42)$$

definiert. Der Erwartungswert der Ω_J^t ist der von Ω selbst. Zudem geht die Varianz dieser Größen für $T \rightarrow \infty$ gegen null. Dadurch konvergiert der Wert von \bar{f}_J gegen den korrekten Wert. Die Streuung kann geschätzt werden durch

$$\sigma^2(\bar{f}_J) = \frac{T-1}{T} \sum_{t=1}^T (f_J^t - \bar{f}_J)^2.$$

Dies ist allerdings nur für unkorrelierte Daten korrekt. Um die Autokorrelation, wie sie in den aus dem HMC gewonnenen Daten auftritt, weitestgehend zu beseitigen, bietet es sich an, die Daten in Blöcke einer bestimmten Größe aufzuteilen (sogenanntes Binning). Bildet man für jeden Block den Mittelwert der Daten, erhält man einen kleineren unkorrelierten Satz von Daten. Die Anzahl an Blöcken sollte dabei ausreichend groß sein, um noch eine aussagekräftige Fehlerschätzung zu erhalten (in dieser Arbeit wurde mit 30 Blöcken gearbeitet). Gleichzeitig sollten die Blöcke mindestens in der Größenordnung von einigen Autokorrelationslängen liegen.

6 Untersuchung des Modells für spontan gebrochene Supersymmetrie

Wir wollen uns in diesem Kapitel mit dem speziellen Präpotential

$$W(q) = mq + gq^2$$

beschäftigen. Da die höchste Potenz gerade ist, verschwindet der Wittenindex. Es handelt sich also um ein Modell mit spontan gebrochener Supersymmetrie. Die Theorie soll nun zunächst analytisch für kleine Kopplung g untersucht werden. Anschließend werden die Korrelationsfunktionen und das Spektrum berechnet, indem der Hamiltonoperator direkt diagonalisiert wird und die Resultate für die Korrelationsfunktionen aus Kapitel 4.2 verwendet werden. Danach können diese Ergebnisse mit den Daten aus den HMC-Simulationen verglichen werden.

6.1 Analytische Beschreibung

Wir möchten nun das Spektrum und die Eigenfunktionen der Hamiltonoperatoren H_+ und H_- für das oben angegebene Präpotential im Grenzfall kleiner Kopplung g bestimmen. Das Spektrum und die Eigenfunktionen des aus diesen zusammengesetzten Hamiltonoperators H_S ergeben sich dann entsprechend. Die Definition von H_{\pm} war

$$H_{\pm}(q) = \frac{1}{2}\pi^2 + V_{\pm}(q) \quad \text{mit} \quad V_{\pm}(q) = \frac{1}{2}W^2(x) \mp \frac{1}{2}W'(q).$$

Durch Ausmultiplizieren und Koeffizientenvergleich verifiziert man leicht, dass bei unserer Wahl des Präpotentials

$$V_- \left(-\frac{m}{g} - q \right) = V_+(q) \quad (43)$$

gilt. Das bedeutet, dass die Potentiale V_+ und V_- durch Spiegelung an $q = -\frac{m}{2g}$ ineinander überführt werden (siehe Abb. 1). Demnach sind die Energieeigenwerte von H_+ und H_- identisch, wie es im Fall der gebrochenen Supersymmetrie sein muss. Daraus folgt außerdem, dass die entsprechenden Eigenfunktionen durch die gleiche Spiegelung auseinander hervorgehen. Andererseits überführen die Operatoren A und A^\dagger die Eigenfunktionen ebenfalls bis auf einen Faktor ineinander (siehe Gl. (8)). Die daraus zusammengesetzten Superladungsoperatoren Q und Q^\dagger haben also zwei Auswirkungen auf die Energieeigenzustände. Zum einen wird die Fermionenzahl geändert, was sich darin ausdrückt, welche der beiden Komponenten des Spinors verschwindet. Zum anderen wird die Funktion im Ortsraum bis auf einen konstanten Faktor bei $q = -\frac{m}{2g}$ gespiegelt.

Die Potentiale V_{\pm} lassen sich nun schreiben als

$$V_{\pm}(q) = \mp \frac{m}{2} + \frac{m}{2} \left(\mp J + J^{-1}(\tilde{q} \mp J)^2 + 2J^{-1}\tilde{q}^3 + J^{-1}\tilde{q}^4 \right),$$

mit der dimensionslosen Kopplung $J = \frac{g^2}{m^3}$ und $\tilde{q} = \frac{g}{m}q$. Für kleine Kopplung $J \ll 1$ und \tilde{q} in der gleichen Größenordnung wie J , können die letzten beiden und der erste Summand in der Klammer vernachlässigt werden. Das Potential ist dann näherungsweise gegeben durch

$$\begin{aligned} V_{\pm}(q) &= \mp \frac{m}{2} + \frac{m}{2J}(\tilde{q} \mp J)^2 \\ &= \mp \frac{m}{2} + \frac{1}{2}m^2\left(q \mp \frac{g}{m^2}\right)^2 \\ &\approx \mp \frac{m}{2} + \frac{1}{2}m^2q^2. \end{aligned}$$

Es besitzt also für kleine Kopplungskonstanten g ein lokales Minimum in der Nähe von null¹². Dort wird ein Wert von $V_{\pm} \approx \pm \frac{m}{2}$ angenommen. Aufgrund der Symmetrie der Potentiale nach Gl. (43), hat also das Potential V_+ sowohl in der Nähe von $q = 0$ als auch in der Nähe von $q = -\frac{m}{g}$ ein lokales Minimum und nimmt an diesen Stellen näherungsweise die Werte $\pm \frac{m}{2}$ an. Das Potential V_- hat entsprechend an den gleichen Stellen Minima, nimmt aber bei $q = -\frac{m}{g}$ den Wert $-\frac{m}{2}$ und bei $q = 0$ den Wert $+\frac{m}{2}$ an. Es ist nun ausreichend, die Eigenfunktionen von H_+ zu suchen, da sich die von H_- durch Spiegelung ergeben. Die Eigenfunktionen zu einer bestimmten Energie E haben ihren Hauptbeitrag in Bereichen, wo $E - V_+(q)$ positiv ist. Wird dieser Wert negativ fallen sie exponentiell ab. Für nicht zu große Energien sind die Energieeigenfunktionen also um die beiden Minima lokalisiert. Da das Potential dort für kleine Kopplung näherungsweise dem des harmonischen Oszillators entspricht, kann man in diesen Bereichen die Kenntnis der Lösungen der entsprechenden Schrödingergleichungen ausnutzen. Die ebenfalls in Abb. 1 dargestellten Eigenfunktion sind näherungsweise gegeben durch

$$\begin{aligned} \psi_0^+(q) &= \phi_0(q), \\ \psi_{2k-1}^+(q) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_k(q) + \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{k-1}\left(q + \frac{m}{g}\right) \quad \text{und} \\ \psi_{2k}^+(q) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_k(q) - \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{k-1}\left(q + \frac{m}{g}\right), \quad \text{mit } k = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

wobei ϕ_k die k -te Energieeigenfunktion des harmonischen Oszillators mit Frequenz m ist. Die Phasenfaktoren vor den ϕ_k sollen dabei so gewählt werden, dass die Funktionen reell sind und die ψ_{2k}^+ immer eine Nullstelle mehr haben, als die ψ_{2k-1}^+ . Aus dem Knotensatzes folgt dann, dass die ψ_k^+ nach aufsteigenden Energieeigenwerten geordnet sind. Der Grund dafür, dass in der Umgebung von $q = -\frac{m}{g}$ jeweils der um die Energie

¹²Genau genommen muss man, um die letzte Näherung zu zeigen, den Term $2J^{-1}\tilde{q}^3$ mit berücksichtigen und die Nullstelle der Ableitung von V_{\pm} bestimmen.

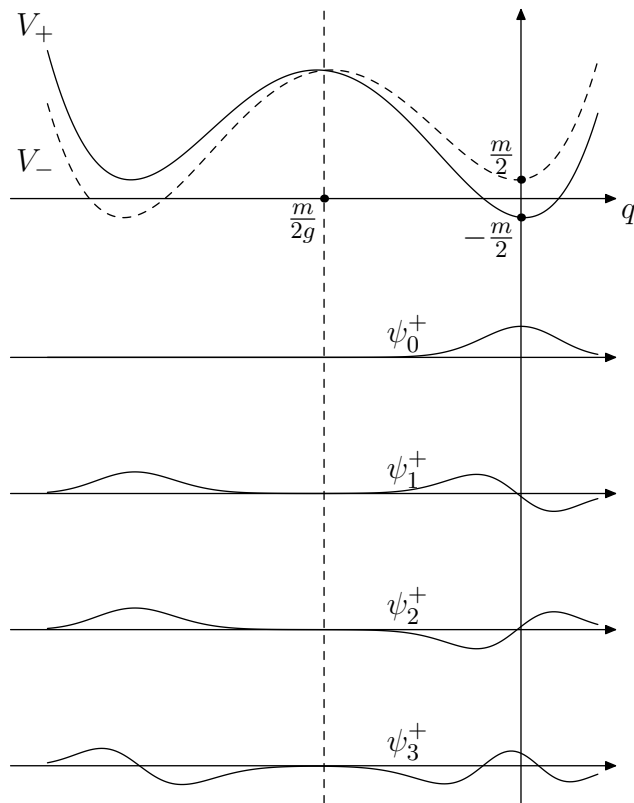


Abbildung 1: Potentiale V_+ , V_- und die ersten Energieeigenfunktionen von H_+ für das Modell mit gebrochener Supersymmetrie bei geringer Kopplung. Die Eigenfunktionen wurden durch die direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators bestimmt. Sie setzen sich in erster Näherung aus den Energieeigenzuständen des harmonischen Oszillators zusammen.

m höher liegende Zustand des harmonischen Oszillators verwendet wurde, ist, dass das Potential V_+ dort gerade um diesen Wert höher liegt. Die Energieeigenwerte lassen sich nun auch angeben. Sie entsprechen den jeweiligen Energien des harmonischen Oszillators.

$$\begin{aligned} E_0 &\approx 0, \\ E_{2k-1} &\approx km \quad \text{und} \\ E_{2k} &\approx km \quad \text{mit } k = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Da die Supersymmetrie gebrochen ist, kann die Grundzustandsenergie nicht exakt null sein. Außerdem ist aufgrund des Knotensatzes, wie bereits erwähnt, $E_{2k-1} < E_{2k}$. Die Differenz dieser Energien geht aber für kleine Kopplung gegen null. Im Grenzfall $g \rightarrow 0$ gibt es also eine zusätzliche Entartung der angeregten Zustände, wie bereits in [25] festgestellt wurde. Man überzeugt sich nachträglich leicht davon, dass die angegebenen Funktionen mit den angegebenen Energieeigenwerten die Schrödingergleichung in den entsprechenden Bereichen, in der jeweiligen quadratischen Näherung des Potentials, erfüllen.

6.2 Direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators

Wir kommen nun zu der numerischen Untersuchung der Theorie. Die Untersuchungen wurden alle mit den Parametern

$$m = g = 25$$

durchgeführt, um eine Vergleichbarkeit mit den Berechnungen in [25] herzustellen. Für diese Wahl sind die Minima der Potentiale V_+ und V_- noch deutlich getrennt. Sie liegen andererseits noch so dicht beieinander, dass sich die Konfigurationen in den HMC-Simulationen zwischen beiden Minima hin und her bewegen können.

Wir wollen das Spektrum aber zunächst auf einem anderen Weg bestimmen¹³. Dazu wird das Eigenwertproblem der zeitfreien Schrödingergleichung

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

numerisch gelöst. Man kann sich dabei auf die Lösung einer der beiden Hamiltonoperatoren H^+ und H^- beschränken, da die Spektren identisch sind und die Eigenfunktionen auseinander durch Spiegelung hervorgehen. Um vom Hilbertraum zu einem endlich-dimensionalen Raum zu gelangen, wird der Ort des Teilchens diskretisiert und auf ein endliches Intervall eingeschränkt.¹⁴ Dadurch können Operatoren durch Matrizen und Funktionen durch Vektoren beschrieben werden. Die Dimension dieser Objekte ist gerade gleich der Anzahl an verwendeten Gitterpunkten. Bei einem Problem mit

¹³Das hier beschriebene Vorgehen findet sich ebenfalls in [25].

¹⁴Die Art der Diskretisierung unterscheidet sich somit von der bei den Monte-Carlo-Simulationen, wo der Ort kontinuierlich bleibt und die Zeit diskretisiert wird.

N Freiheitsgraden, wäre diese Zahl noch mit N zu potenzieren – daher ist dieses Verfahren im Fall einer Quantenfeldtheorie nicht mehr praktisch einsetzbar. Man muss an dieser Stelle wieder eine geeignete Diskretisierung der Ableitung wählen. In diesem Fall wurde die Slac-Ableitung eingesetzt, da diese eine schnelle Konvergenz zum Kontinuumslimit aufweist und die Einfachheit der Vorwärts- oder Rückwärtsableitungen an dieser Stelle keinen Geschwindigkeitsvorteil bringen würden¹⁵. Die Lösung des Eigenwertproblems selbst ist in allen gängigen Numerik-Softwarepaketen implementiert und kann schnell und genau durchgeführt werden¹⁶. Man erhält so direkt das Spektrum sowie die Energieeigenfunktionen. Man ist also in der glücklichen Situation, die Theorie numerisch praktisch beliebig genau lösen zu können und hat folglich hervorragende Vergleichswerte an welchen man die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation messen kann. Es geht an dieser Stelle vor allem darum, die Qualität der verwendeten Verfahren gerade im Hinblick auf die Anwendung in der Quantenfeldtheorie, wo die direkte Diagonalisierung nicht mehr möglich ist, zu bewerten.

Durch das eben beschriebene Verfahren ist es möglich, sowohl das Spektrum, als auch die, in den analytischen Ausdrücken für die thermischen Korrelationsfunktionen (siehe Gl. (24) und Gl. (25)) auftretenden Matrixelemente q_{mn} bzw. ψ_{mn} zu berechnen. Die Resultate für die niedrigsten Eigenzustände sind in Abb. 2 und 3 angegeben. Die entsprechenden Ergebnisse werden im nächsten Abschnitt mit den Werten aus den Monte-Carlo-Simulationen verglichen.

6.3 Projektion auf einen der Grundzustände

Der bosonische Grundzustand ist bei $q = 0$ lokalisiert. Der fermionische hingegen befindet sich in der Umgebung von $q = -\frac{m}{h}$. Alle angeregten Zustände haben jeweils einen bei $q = 0$ und einen bei $q = -\frac{m}{h}$ lokalisierten Anteil. Beschränkt man sich also auf die Konfigurationen, für welche der zeitlich gemittelte Ort größer als $-\frac{m}{2h}$ ist, entfernt man im wesentlichen den fermionischen Grundzustand. Umgekehrt kann der bosonische Grundzustand eliminiert werden, indem man nur Konfigurationen verwendet, für welche $q < -\frac{m}{2h}$ gilt. Für tiefe Temperaturen projiziert man somit gewissermaßen auf den bosonischen bzw. fermionischen Grundzustand [25]. Dadurch kann man künstlich die Situation eines nicht entarteten Grundzustands herstellen. Wie wir gesehen haben, verhalten sich die Korrelationsfunktionen anders, wenn der Grundzustand eindeutig ist. Im Tieftemperaturlimit fällt der fermionische Korrelator bei Projektion auf den bosonischen Grundzustand für wachsendes τ auch nahe β noch ab¹⁷. Wird auf den fermionischen projiziert, ergibt sich die bei $\tau = \frac{m}{2\beta}$ gespiegelte Funktion. Es wird sich im Folgenden herausstellen, dass dieses Vorgehen für die Bestimmung des Massengaps sehr hilfreich sein kann.

¹⁵Eine Untersuchung der Konvergenz findet sich in [11].

¹⁶Hierfür wurde ein Octave-Skript verwendet.

¹⁷Dies gilt hier aufgrund des vernachlässigbaren Überlapps der Grundzustände.

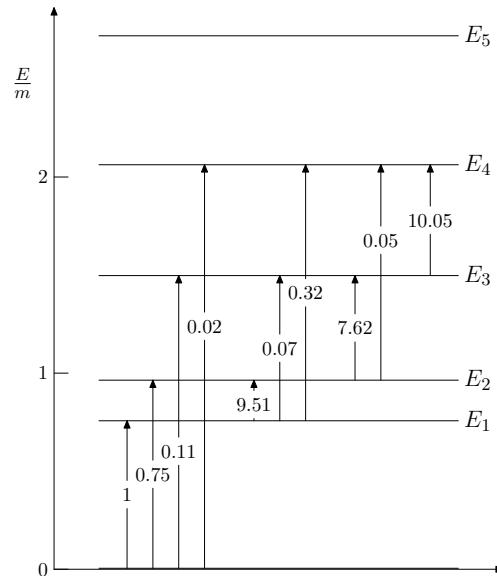


Abbildung 2: Spektrum der wechselwirkenden Theorie. Wie überall ist $m = 25$ und $h = 25$ gewählt. Die Zahlen an den Pfeilen geben die Quadrate der Matrixelemente des Ortsoperators $\|q_{mn}\|^2$ bezogen auf den Wert beim Fundamentalgap $\|q_{01}\|^2$ an. Dieses Bild und die Zahlen stimmen sowohl für Fermionenzahl $N_F = 0$ als auch für $N_F = 1$.

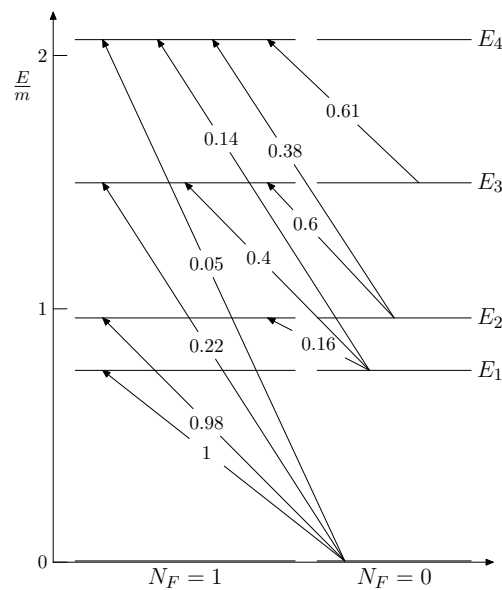


Abbildung 3: Spektrum der wechselwirkenden Theorie. Die Zahlen an den Pfeilen geben die Quadrate der Matrixelemente des fermionischen Aufsteigeoperators $\|\langle n1|\psi|m0\rangle\|^2$ bezogen auf den Wert beim Fundamentalgap $\|\langle 11|\psi|00\rangle\|^2$ an.

6.4 Bestimmung der Korrelationsfunktionen

Um die Masse der Teilchen einer Theorie zu bestimmen, führt ein nicht-Störungstheoretischer Weg über den HMC-Algorithmus. Dieser wurde verwendet um Korrelationsfunktionen zu berechnen und anschließend aus diesen auf die Teilchenmassen zu schließen. Hier wurde mit einem Leap-Frog-Integrator und einer Fourierbeschleunigung, wie in Kap. 5.4 beschrieben, gearbeitet. Die Implementierung erfolgte in C++ und baut auf die Vorarbeit von Christian Wozar, Tobias Kästner, Georg Bergner, Co Georg sowie das am TPI in Jena entwickelte Programmpaket *JenLatt* auf. Nach einer Untersuchung, welche Schrittweiten für den Integrator für welche Gittergrößen angemessen sind, also zu einer Akzeptanzrate zwischen etwa 0.5 und 0.9 führen, wurden für Gittergrößen zwischen $N = 5$ und $N = 230$ Boltzmann-verteilte Konfigurationen erzeugt. Da der Rechenaufwand in diesem Modell vergleichsweise gering ist, ist es ohne Probleme möglich, eine sehr hohe Anzahl an Konfigurationen zu erzeugen. Es ist völlig ausreichend einen einzelnen handelsüblichen PC zu verwenden – alle Berechnungen zusammen benötigten in der Summe nur wenige Tage Computer-Rechenzeit. Dementsprechend wurden jeweils 300 000 Konfigurationen abgespeichert, welche zudem nur mit einer geringen Autokorrelation behaftet sind, da nur jede vierhundertste Konfiguration verwendet wurde. Für einen HMC-Schritt wurden dabei 20 Leap-Frog-Integrations-Schritte durchgeführt. Insgesamt wurden also für jede Gittergröße $300\,000 \cdot 400 \cdot 20 = 2,4 \cdot 10^9$ Leap-Frog-Schritte ausgeführt. Die Berechnung der Korrelationsfunktionen hat nur einen geringen Computer-Rechenaufwand und erfolgt binnen Sekunden oder weniger Minuten. Die weitere Auswertung, wie etwa das Anfitten von Funktionen an den Korrelator, arbeitet nur noch mit geringen Datenmengen und wurde mit Octave-Skripten durchgeführt. Hier war weniger die Rechengeschwindigkeit als die Menge an bereits vorgefertigten Funktionen (wie etwa das Fitten) und die übersichtliche und einfache Implementierbarkeit ausschlaggebend.

Anhand der Boltzmann-verteilten Konfigurationen können die Korrelationsfunktionen bestimmt werden. Durch Anfitten geeigneter Funktionen lässt sich daraus das Fundamentalgap bestimmen. Da aus dem letzten Kapitel sowohl das Gap als auch die Korrelationsfunktionen bekannt sind, soll es hier vor allem darum gehen, mögliche Fehlerquellen zu identifizieren und die Grenzen und Möglichkeiten der verwendeten Verfahren zu testen. Alle hier gewonnenen Daten wurden ohne Zuhilfenahme der genauen Daten aus der direkten Diagonalisierung erstellt. So soll sichergestellt werden, dass die Methoden auch in Situationen anwendbar sind, bei denen die direkte Diagonalisierung nicht möglich ist. Da das zu simulierende Volumen proportional zur inversen Temperatur β ist, steigt der numerische Aufwand beim simulieren niedrigerer Temperaturen. Bei gleicher Rechenzeit werden die statistischen Fehler größer. Die Auswertung der Korrelationsfunktionen mit dem Ziel das Fundamentalgap zu bestimmen, ist jedoch umso leichter, je kleiner T ist, da dann die systematischen Fehler aufgrund der höherenergetischen Zustände kleiner sind. Man muss also eine Temperatur wählen, welche einen guten Kompromiss zwischen systematischen und statistischen Fehlern liefert. Da im hier verwendeten Modell der numerische Aufwand von vornherein nicht sehr groß

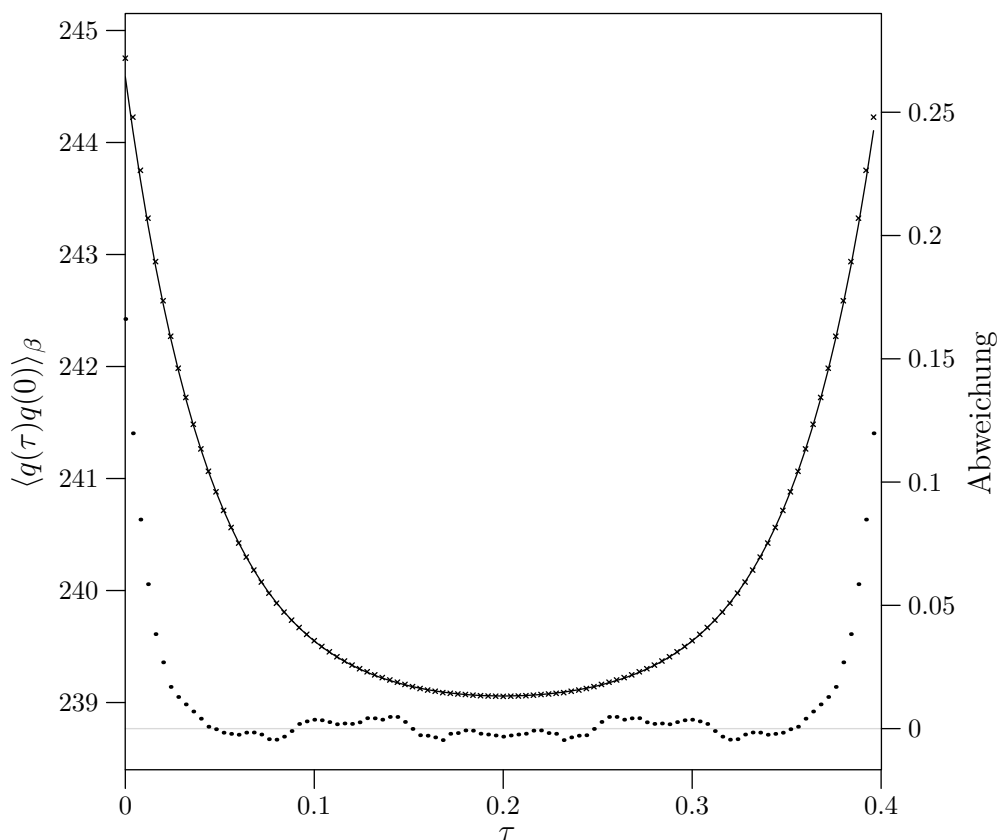


Abbildung 4: Aus Monte-Carlo-Simulationen bestimmte bosonische Korrelationsfunktion für die Gittergröße $N = 100$ (Kreuze) und Fit mit Kosinushyperbolicus plus Konstante (Linie). Der Fitbereich liegt bei $\tau = 0.04 \dots 0.36$. Die Differenz aus numerischen Daten und Fitfunktion ist ebenfalls dargestellt (Punkte). Die Korrelationsfunktion ist nicht normiert. Es wurde auf den fermionischen Grundzustand projiziert.

ist, wäre die Wahl einer recht kleinen Temperatur naheliegend. Die statistischen Fehler könnten durch längere Simulationen reduziert werden. Es geht hier aber vor allem um die Untersuchung der Methoden selbst, weshalb mit $\beta = 0.4$ eine, wie sich im Folgenden zeigen wird, relativ hohe Temperatur gewählt wurde. Die Korrelationsfunktionen wurden nun für verschiedene Gittergrößen „gemessen“. Da die Auswertung dabei im Wesentlichen immer die gleiche ist, beschränken wir uns hier auf die Illustration des Vorgehens für $N = 100$. Abb. 4 zeigt die bosonische Korrelationsfunktion, wie sie durch die HMC-Simulation berechnet wurde. Hierbei wurde auf den fermionischen Grundzustand projiziert. Es wurden also nur Konfigurationen verwendet, deren Ort im Mittel kleiner als $\frac{m}{2h}$ ist. Man sieht, dass sich der Korrelator qualitativ verhält wie die Summe aus einer Konstanten und einer um $\tau = \frac{\beta}{2}$ zentrierten Kosinus-Hyperbolicus-Funktion. Das entspricht gerade dem Verhalten, wie man es (zumindest für niedrige Tempera-

turen) aufgrund der analytischen Untersuchung erwartet (siehe Gl. (24)). Um nun die Masse zu bestimmen, wurde eine Funktion vom Typ

$$f(\tau) = p_1 \cosh\left(p_2\left(\tau - \frac{\beta}{2}\right)\right) + p_3$$

angefittet¹⁸, wobei p_1 , p_2 und p_3 Fit-Parameter sind. Vergleicht man dies mit dem analytischen Ausdruck für die Korrelationsfunktion (siehe Gl. (24)), sieht man, dass diese Funktion gerade die Summanden erfasst, welche für niedrige Temperaturen am stärksten ins Gewicht fallen und dass p_2 dem fundamentalen Gap entspricht. Die nicht erfassten Terme haben in der Nähe von $\tau = 0$ und $\tau = \beta$ ihren Hauptbeitrag. Um mit dem Fit möglichst gut das Gap zu bestimmen, wurde deshalb nur ein eingeschränkter Datenbereich verwendet. Es hat sich herausgestellt, dass ein Fitten an die Daten mit τ zwischen 10% und 90% der inversen Temperatur gut reproduzierbare Parameter liefert. Obwohl das Verwenden eines kleineren Fitbereichs grundsätzlich sinnvoll ist, um systematische Fehler durch die nicht erfassten Terme zu reduzieren, führt hier bereits die Einschränkung auf einen Bereich von 20% bis 80% dazu, dass die Fits (bei Verwenden eines anderen Datenblocks, welcher also nur andere statistische Fehler aufweist) stark unterschiedliche Parametersätze liefern.

Wie bei praktisch allen nicht-linearen Fits, ist auch hier die Wahl der Startparameter sehr wichtig für das Auffinden der besten und nicht nur einer lokal besten Lösung. Für p_2 liegt es nahe, die nackte Masse m zu verwenden. Für p_1 bräuchte man Informationen über die Größe von Überlapp-Matrixelementen, welche in den HMC-Simulationen nicht direkt zugänglich sind. Man kann aber zumindest die Größenordnung bestimmen, sofern man weiß, wie groß die räumliche Ausdehnung der entsprechenden Energie-Eigenfunktionen in etwa ist. Für die hier durchgeführte Untersuchung ist diese Größenordnung $\frac{m}{g} = 1$. Auf ähnliche Weise kann man versuchen den konstanten Beitrag p_3 zu schätzen, indem man die Größenordnung von q^2 verwendet. Hier war allerdings auch ein Startwert von 0 ausreichend, sofern der Fitalgorithmus so eingestellt wurde, dass die beiden anderen Parameter keine zu großen Änderungen pro Optimierungsschritt erfahren.

Die angefittete Funktion, sowie deren Abweichung von den numerischen Daten, sind ebenfalls in Abb. 4 dargestellt. Die Fehler im angefitteten Bereich von 10% bis 90% liegen in der Größenordnung von einem Zehntel Prozent (bezogen auf die Differenz

¹⁸Tatsächlich wurde $f(\tau) = p_1 \cosh\left(p_2\left(\tau - \frac{\beta}{2}\right)\right) / \cosh\left(-p_2\frac{\beta}{2}\right) + p_3$ verwendet. Damit erhält p_1 die Bedeutung des Schnittpunkts mit der y -Achse (nach Abzug der Konstanten p_3). Die Bedeutung der anderen Parameter bleibt gleich. Verzichtet man auf diese Anpassung, führt eine Änderung von p_2 zu einer starken Änderung der Funktionswerte in der Nähe von $\tau = 0$ und $\tau = \beta$. Da dies in nichtlinearer Weise passiert, ist eine gleichzeitige Anpassung von p_1 für den Fit-Algorithmus besonders schwierig. Insgesamt ist also das Finden des besten Fits mit dieser scheinbar komplizierteren Funktion leichter, was die Anforderungen an die Qualität der Wahl der Startparameter deutlich reduziert hat. Bei den weiter unten dargestellten Fits mit zwei Kosinus-Hyperbolicus-Funktionen wurden beide Summanden durch den jeweiligen Wert bei $\tau = 0$ geteilt. Man kann dieses Verfahren sicherlich noch verfeinern und versuchen, p_3 weitestgehend zu „entkoppeln“, indem man den Mittelwert (bzgl. τ) des ersten Summanden abzieht.

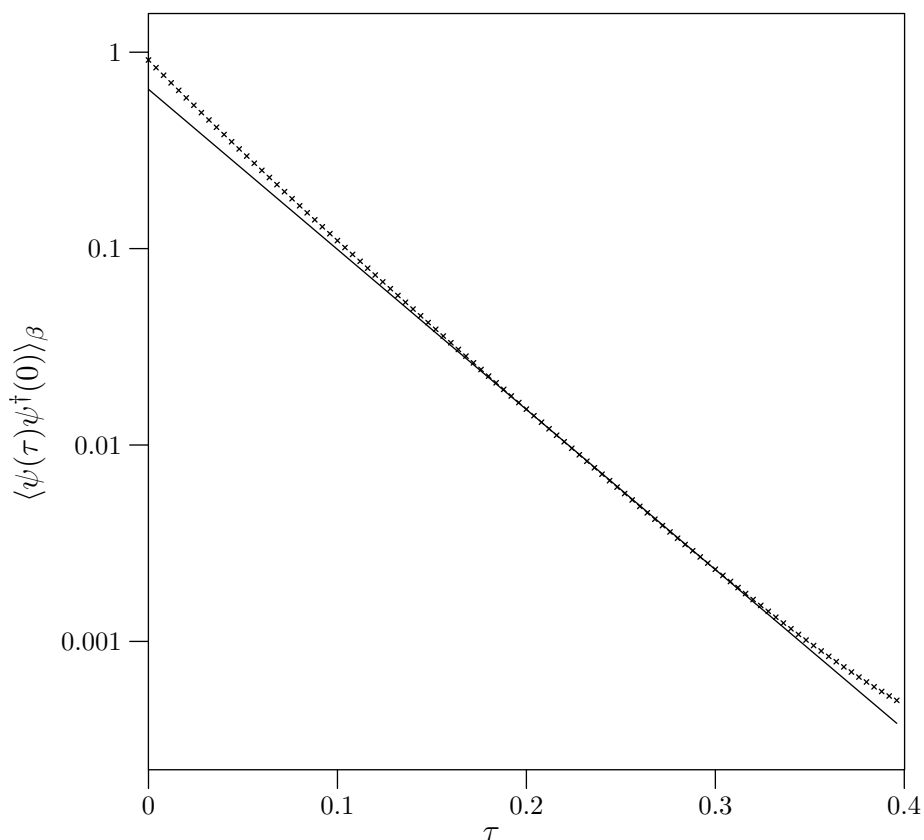


Abbildung 5: Aus Monte-Carlo-Simulationen bestimmte fermionische Korrelationsfunktion für die Gittergröße $N = 100$ und Fit mit Exponentialfunktion. Der Fitbereich liegt bei $\tau = 0.2 \dots 0.4$. Die Korrelationsfunktion ist nicht normiert.

von Maximal- und Minimalwert der Korrelationsfunktion). Für sehr kleine oder sehr große τ wird der Fehler größer und sieht jeweils grob wie eine schnell abfallende Exponentialfunktion aus. Das entspricht den Erwartungen, da der Fit die schnell abfallenden Terme der Korrelationsfunktion nicht erfasst. Die selbst beim Fehler vorliegende Symmetrie rührt daher, dass bei der Bestimmung der Zweipunktsfunktion die Korrelation zwischen allen Gitterpunkten des jeweiligen Abstands gemessen und gemittelt wird. Die Terme, welche für eine Zeit τ aufsummiert werden, sind dadurch identisch mit denen, die für Zeit $\beta - \tau$ auftreten.

Die Untersuchung des fermionischen Korrelators erfolgte weitestgehend analog. Es wurde mit den gleichen Datensatz an Feldkonfigurationen gearbeitet. Die Korrelationsfunktion wurde jeweils anhand des Zusammenhangs (27) bestimmt. Auch hier wurde jeweils auf einen der beiden Grundzustände projiziert. Im Fall des bosonischen Grundzustands wurde die Fitfunktion

$$f(\tau) = p_1 \exp(-p_2 \tau)$$

verwendet. Bei der Projektion auf den fermionischen Grundzustand wurde das negative Vorzeichen in der Exponentialfunktion weggelassen, um p_2 wieder die Bedeutung des Fundamentalgaps zu verleihen. Der Fitbereich wurde von 50% bis 100% für die Beschränkung auf den bosonischen und von 0% bis 50% für den fermionischen Grundzustand gewählt. Die numerischen Daten sowie die angefittete Funktion sind in Abb. 5 dargestellt. Das Verhalten ist hier qualitativ gleich wie beim bosonischen Korrelator: Im Bereich des Fits sind die Fehler (auf einer linearen Skala) deutlich unter einem Zehntel Prozent des Maximalwerts des Korrelators. Im nicht angefitteten Bereich werden die Beiträge der durch den Fit nicht erfassten Anteile der Korrelationsfunktion erkennbar. Die Abweichungen sind hier allerdings deutlich größer (0.91 im Vergleich zu 0.65 bei $\tau = 0$). Zusätzlich sieht man in der logarithmischen Darstellungen signifikante Abweichungen im Bereich nahe $\tau = \beta$ (Für das Fitten fallen die Datenpunkte nahe $\tau = \beta$ kaum ins Gewicht, da die Daten nicht vor dem Fitten logarithmiert wurden.). Diese sind auf Terme zurückzuführen, die dem Überlapp des ersten und zweiten angeregten Zustands entsprechen¹⁹. Ohne diese Information wäre an dieser Stelle eine Verwechslung mit dem Fundamentalgap als Ursache durchaus denkbar. Die geringe Amplitude, mit der dieser langsam abfallende Teil eingeht, ist allerdings ein Hinweis darauf, dass es sich nicht um das Fundamentalgap handelt.

Die beschriebenen Fits wurden nun für die Gittergrößen

$$N = 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 130, 180 \quad \text{und} \quad N = 230$$

sowohl für Bosonen, als auch für Fermionen und jeweils für den fermionisch und bosonisch projizierten Fall wiederholt. Die sich aus den Fits ergebenden Schätzungen für das Fundamentalgap (also jeweils der Parameter p_2) sind in Abb. 6 gegen die Gitterkonstante a aufgetragen. Die Fehlerbalken wurden bestimmt, indem jeder dieser Fits für jeweils dreißig Datensätze durchgeführt wurde und mittels der Jackknife-Fehleranalyse (siehe Kapitel 5.5) die Genauigkeit der Parameter geschätzt wurde. An die Daten für $N = 30$ bis $N = 230$ wurde nun eine Gerade gefittet, um die Daten ins Kontinuum, also zu $a = 0$ zu extrapolieren. Die aus dem fermionischen Korrelator ermittelten Daten liefern mit

$$\begin{aligned} E^{\text{gap}} &= (0.756 \pm 0.006)m && \text{(aus ferm. Korrelator, für bos. Grundzustand)} \\ E^{\text{gap}} &= (0.760 \pm 0.005)m && \text{(aus ferm. Korrelator, für ferm. Grundzustand)} \end{aligned}$$

sehr gut mit dem Wert aus der direkten Diagonalisierung übereinstimmende Daten ($E_1 = 0.75712 m$). Dagegen liefern die Untersuchungen des bosonischen Korrelators mit

$$\begin{aligned} E^{\text{gap}} &= (0.875 \pm 0.011)m && \text{(aus bos. Korrelator, für bos. Grundzustand)} \\ E^{\text{gap}} &= (0.853 \pm 0.023)m && \text{(aus bos. Korrelator, für ferm. Grundzustand)} \end{aligned}$$

zwar zueinander konsistente, aber für die Schätzung des Gaps ungeeignete Ergebnisse.

¹⁹Ein konstanter Beitrag ist hier entgegen den Betrachtungen in [25] nicht zu beobachten, da für die gewählten Parameter nur ein vernachlässigbarer Überlapp der beiden Grundzustände besteht.

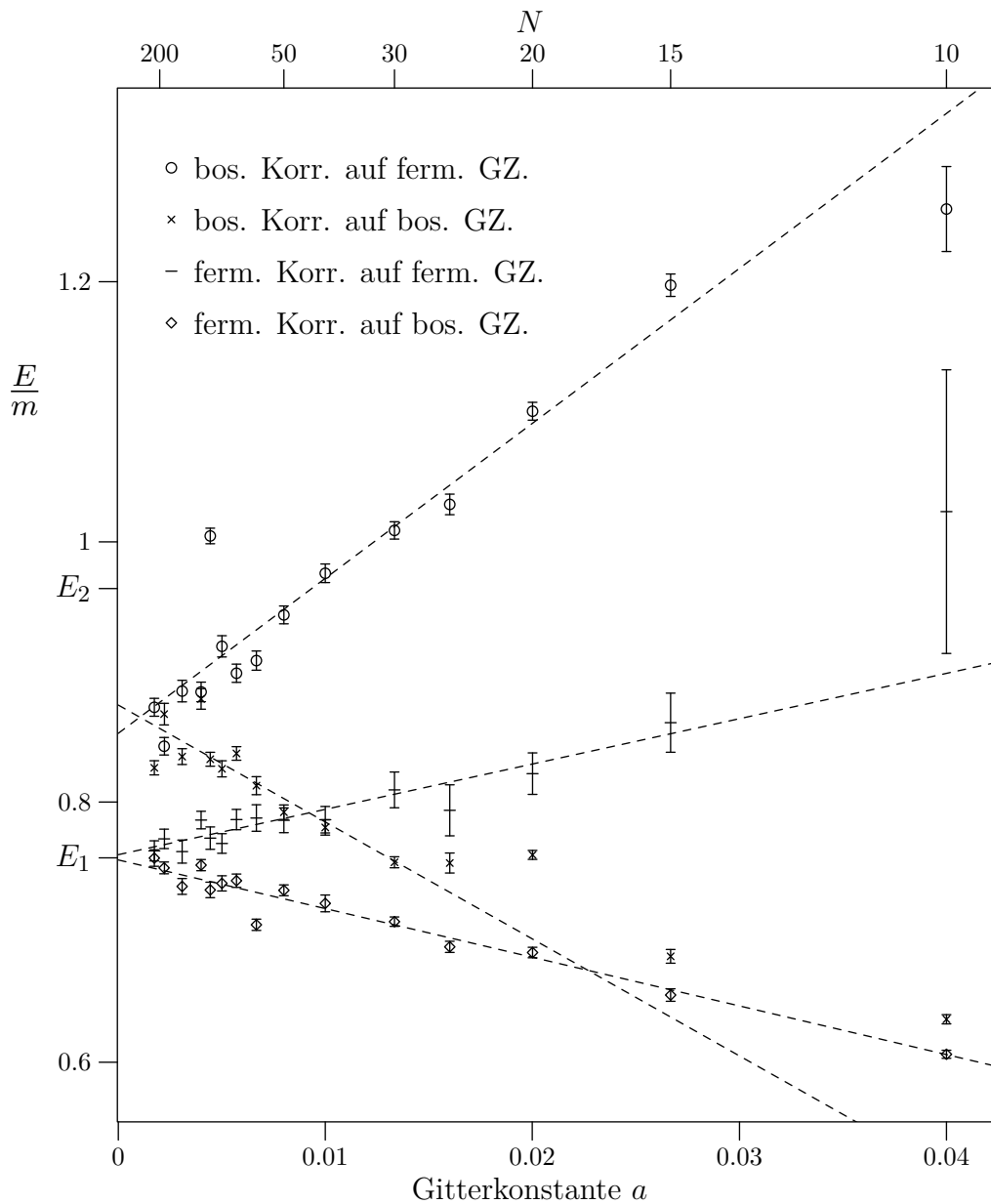


Abbildung 6: Aus den Fits der Korrelationsfunktionen geschätzte Energiegaps aufgetragen gegen die Gitterkonstante $a = \frac{\beta}{N}$ und ins Kontinuum extrapoliert. Die Ergebnisse der Daten aus den fermionischen Korrelationsfunktionen liefern das (mittels direkter Diagonalisierung der Hamiltonoperators gewonnene) richtige Energiegap E_1 . Die bosonischen Daten liefern einen Wert zwischen der ersten und zweiten Energie im Spektrum.

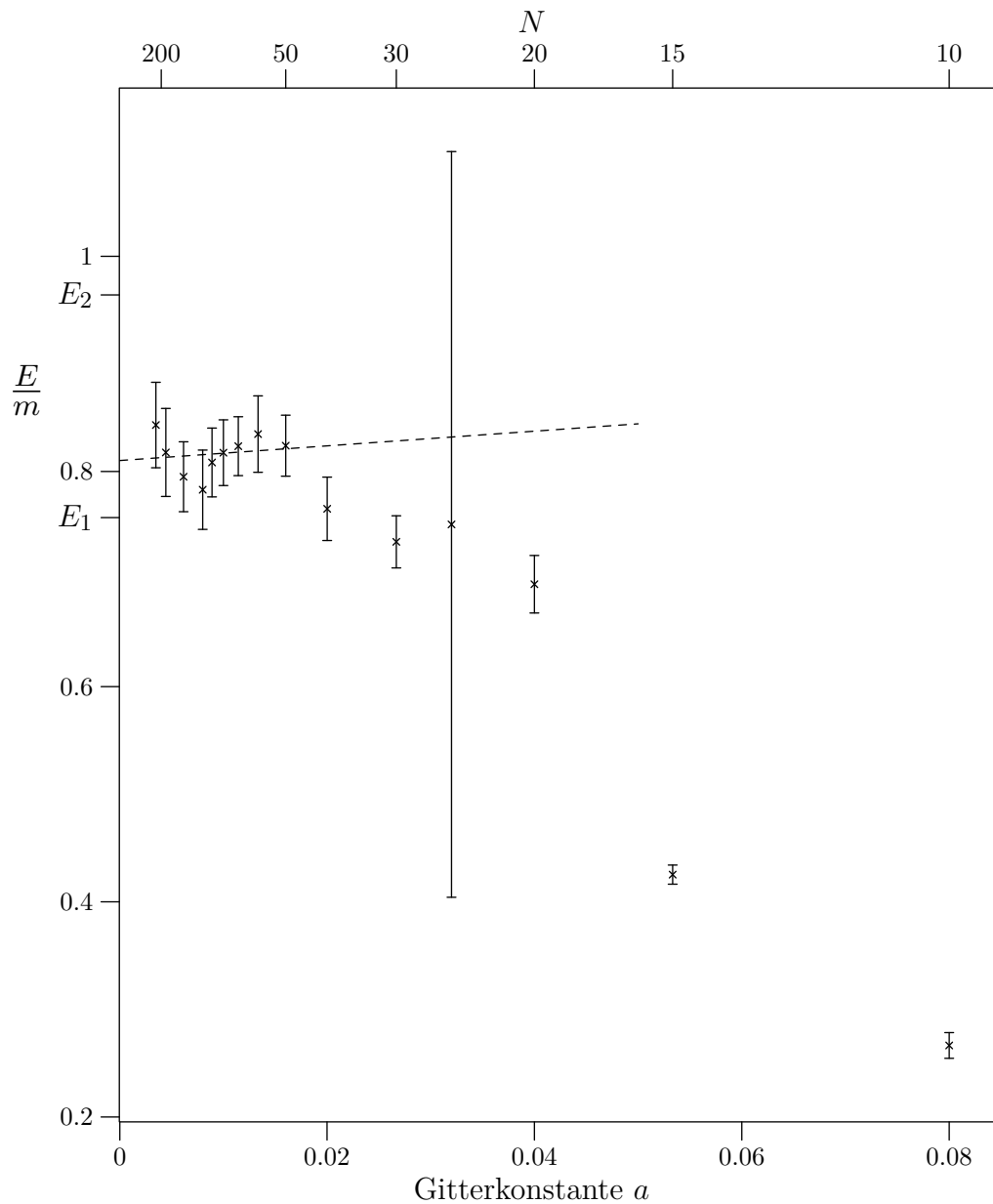


Abbildung 7: Aus den Fits der bosonischen Korrelationsfunktion geschätzte Energiegaps aufgetragen gegen die Gitterkonstante $a = \frac{\beta}{N}$ und ins Kontinuum extrapoliert. Die inverse Temperatur ist hier $\beta = 0.8$. Der Datenpunkt für $N = 25$ weist einen außerordentlich großen Fehlerbalken auf, da die Fits schon bei geringfügig anderen Daten zu deutlich unterschiedlichen Ergebnissen kommen.

Abbildung 7 zeigt den Fit für den bosonischen Korrelator für $\beta = 0.8$. Da hier die Tunnelereignisse bereits äußerst selten sind, ist die Statistik für die auf den Fermionischen Grundzustand projizierte Zweipunktsfunktion sehr schlecht (gestartet wird in einem bosonischen Zustand). Deshalb wurde direkt die Korrelationsfunktion ohne Projektion verwendet. Der lineare Fit wurde für die Daten von $N = 60$ bis $N = 230$ durchgeführt. Damit ist die größte verwendete Gitterkonstante die gleiche, wie bei dem Kontinuumsfit für $\beta = 0.4$. Im Grenzfall $a \rightarrow 0$ ergibt sich

$$E^{\text{gap}} = (0.812 \pm 0.028)m \quad (\text{aus bos. Korrelator, für } \beta = 0.8).$$

Der Wert aus der direkten Diagonalisierung liegt somit innerhalb der doppelten Standardabweichung. An dieser Stelle ist allerdings zu bemerken, dass die Fehlerbalken im verwendeten Bereich alle in der Größenordnung $0.04m$ liegen und somit recht groß sind. Da alle Fehlerbalken der verwendeten Daten die Fitgerade schneiden (statistisch sollten dies zumindest bei einer großen Anzahl an Datenpunkten nur etwa 68% tun), muss davon ausgegangen werden, dass der statistische Fehler für die Kontinuumsmasse hier unterschätzt wurde. Da hier lediglich 8 Datenpunkte für den Fit verwendet wurden, ist es durchaus plausibel, dass dies zufällig eingetreten ist. Es wäre ansonsten auch denkbar, dass die Fehlerbalken überschätzt sind. Da diese auf die gleiche Weise im Fall $\beta = 0.4$ ermittelt wurde und dieser Effekt dort nicht auftritt, scheint dies aber weniger plausibel.

Man kann an dieser Stelle deutlich erkennen, dass die Erhöhung der inversen Temperatur β zu einer Erhöhung der zufälligen Fehler führt. Gleichzeitig werden aber die systematische Fehler dadurch verringert, dass die Terme in der Korrelationsfunktion, welche den Fit stören, besser unterdrückt werden.

Abschließend sei noch darauf hingewiesen, dass die Korrelationsfunktionen aus den HMC-Simulationen für große Gitterkonstanten sowohl für Fermionen als auch für Bosonen bis auf die statistischen Schwankungen mit den durch die direkte Diagonalisierung berechneten Funktionen übereinstimmt. Für kleinere Gitterkonstanten lassen sich Trends ähnlich wie beim Fehler in Abb. 4 ausmachen. Das entspricht durchaus den Erwartungen, da die Masse auf dem Gitter vom Kontinuumswert abweicht.

7 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Theorie der supersymmetrischen Quantenmechanik untersucht. Die allgemeinen Zusammenhänge zwischen Korrelationsfunktionen und dem Spektrum einer Theorie wurden auf die supersymmetrische Quantenmechanik übertragen und insbesondere für den Fall der gebrochenen Supersymmetrie diskutiert. Dabei stellte sich heraus, dass die verbundene bosonische Korrelationsfunktion einen konstanten Anteil hat, welcher auch im Tieftemperaturlimit nicht verschwindet²⁰. Ein solcher Teil existiert bei der fermionischen Zweipunktfunktion genau dann, wenn es im Ortsraum einen Überlapp zwischen dem fermionischen und bosonischen Grundzustand gibt.

Die Invertierung der in der gitterdiskretisierten Theorie auftretenden Fermionmatrix konnte explizit durchgeführt werden. Mittels des so gefunden Zusammenhangs kann die Berechnung der fermionischen Korrelationsfunktion in HMC-Simulationen erheblich schneller durchgeführt werden. Im Kontinuumslimit konnte sowohl die Determinante als auch die Inverse der Fermionmatrix durch das Präpotential ausgedrückt werden (Gl. 33). Da die Behandlung der Fermionmatrix in Gittersimulationen in der Regel den Hauptteil der Rechenzeit beansprucht, wäre es sehr hilfreich diese Ergebnisse auf höherdimensionale Fälle zu übertragen. Dies erscheint allerdings schwierig, da die Fermionmatrix dann zusätzliche Einträge weit von der Hauptdiagonale entfernt aufweist. Es ist jedoch denkbar, dass sich das Kontinuumsresultat auf höhere Dimensionen übertragen lässt. Eine mögliche Verallgemeinerung des auftretenden Integrals über das gesamte Zeitintervall ist ein entsprechendes Integral über das gesamte Volumen. Das im Fall der inversen Matrix auftretende Integral über den Bereich zwischen den Punkten, deren Korrelation bestimmt werden soll, könnte man in einem höherdimensionalen Fall durch ein Linienintegral entlang der kürzesten Strecke ersetzen. Die sich daraus ergebenden Resultate könnten dann wieder auf dem Gitter approximiert werden. Dieses Verfahren würde sicherlich nicht die gleichen Resultate, wie die exakte Berechnung der Determinanten und Korrelationsfunktionen liefern. Es besteht aber die Hoffnung, dass sich so oder so ähnlich zumindest eine verwendbare Approximation finden lässt. Insbesondere bei Berechnungen, in denen die Fermionmatrix bisher komplett weggelassen wurde und die Determinante durch eins ersetzt wurde, könnte sich so eine deutliche Verbesserung ohne wesentlich größeren Zeitaufwand ergeben.

Die Theorie wurde außerdem für das spezielle Präpotential $W(q) = mq + gq^2$ eingehend untersucht. Bereits auf analytischer Ebene konnten die Energieeigenzustände und das Spektrum im Grenzfall kleiner Kopplung g bestimmt werden. Diese Untersuchung konnte zudem durch einen Zugang, in dem der Hamiltonoperator direkt diagonalisiert wurde, bestätigt werden. Das Spektrum der Theorie sowie die Korrelationsfunktionen wurden für eine mittlere Kopplung ebenfalls durch die direkte Diagonalisierung des Hamiltonoperators bestimmt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der HMC-Simulationen

²⁰Beschränkt man sich durch geeignetes Projizieren auf einen der Grundzustände, entfällt dieser Anteil, siehe [25].

zeigt, dass die Korrelationsfunktionen aus den beiden Zugängen für feine Gitter im Rahmen der statistischen Fehler übereinstimmen.

Die aus den fermionischen Korrelationsfunktionen gewonnenen Parameter ließen eine Kontinuumsextrapolation des Energiegaps zu, welche sehr gut mit dem aus der direkten Diagonalisierung ermittelten Wert übereinstimmt. Im Fall der bosonischen Korrelationsfunktion konnte diese Übereinstimmung erst für eine niedrigere Temperatur festgestellt werden. Bei der Simulation mit einer vergleichsweise hohen Temperatur, wurde das Energiegap dagegen deutlich überschätzt. Dieser Effekt konnte den Termen der Korrelationsfunktion, welche zu höher angeregten Zuständen gehören, zugeordnet werden. Bemerkenswert ist, dass die Fitfunktionen dennoch bis auf Bruchteile eines Prozents mit den aus den Gittersimulationen bestimmten Korrelationsfunktionen übereinstimmen. Dies zeigt, dass es bei derartigen Untersuchungen unverzichtbar ist, die Temperaturunabhängigkeit der Ergebnisse zu verifizieren.

Literaturverzeichnis

- [1] S. R. Coleman and J. Mandula, Phys. Rev. **159** (1967) 1251.
- [2] B. K. Bagchi: „Supersymmetry in Quantum and Classical Mechanics“, Chapman & Hall/CRC, Florida 2001.
- [3] F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, Phys. Rept. **251** (1995) 267 [arXiv:hep-th/9405029].
- [4] E. Witten, Nucl. Phys. B **188** (1981) 513.
- [5] H. Kalka, G. Soff: „Supersymmetrie“, Teubner, Stuttgart 1997.
- [6] A. Wipf, arXiv:hep-th/0504180.
- [7] H. Gies: Skript zur Vorlesung „Quantenfeldtheorie“, Jena 2009.
- [8] E. Witten, Nucl. Phys. B **202** (1982) 253.
- [9] A. Wipf: Skript zur Vorlesung „Quantenfeldtheorie II“, Jena 2009.
- [10] A. Wipf: Skript zur Vorlesung „Pfadintegrale“, Jena 2008.
- [11] A. Kirchberg, J. D. Lange and A. Wipf, Annals Phys. **316** (2005) 357 [arXiv:hep-th/0407207].
- [12] R. W. Johnson, arXiv:1002.2785 [hep-lat].
- [13] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton and D. Roweth, Phys. Lett. B **195** (1987) 216.
- [14] R. Toral and A. L. Ferreira, [arXiv:hep-lat/9409014].

- [15] S. Catterall and S. Karamov, Phys. Lett. B **528** (2002) 301 [arXiv:hep-lat/0112025].
- [16] J. Giedt, R. Koniuk, E. Poppitz and T. Yavin, JHEP **0412** (2004) 033 [arXiv:hep-lat/0410041].
- [17] G. Bergner, T. Kaestner, S. Uhlmann and A. Wipf, Annals Phys. **323** (2008) 946 [arXiv:0705.2212 [hep-lat]].
- [18] B. A. Berg, arXiv:cond-mat/0410490.
- [19] <http://www.physik.uni-bielefeld.de/laine/thermal/lec10.pdf>, Zugriff am 9.06.2010.
- [20] M.E. Peskin, D.V. Schoeder „An Introduction to Quantum Field Theory“, Westview Press, USA, 1995.
- [21] C. Wozar: Vortragsnotizen zu „Introduction to Supersymmetric Quantum Mechanics and Lattice Regularization“, Jena 2010.
- [22] S. Weinberg: „The Quantum Theory of Fields“ Vol. I, Cambridge University Press 1995.
- [23] S. Weinberg: „The Quantum Theory of Fields“ Vol. III, Cambridge University Press 2000.
- [24] G. Bergner, JHEP **1001** (2010) 024 [arXiv:0909.4791 [hep-lat]].
- [25] Christian Wozar: Dissertation „Low Dimensional Supersymmetric Field Theories on the Lattice“, FSU Jena 2010.

Danksagung

Ich möchte mich bei all denen bedanken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Für die gute Betreuung danke ich Prof. Dr. Andreas Wipf, der mir jederzeit als Ansprechpartner zur Verfügung stand und mir bei meiner Arbeit hilfreiche Hinweise und Anstöße gab, aber auch ein weitestgehend selbstständiges Arbeiten ermöglichte. Mein besonderer Dank gilt Christian Wozar, der mein Verständnis der Supersymmetrie und der Korrelationsfunktionen in unzähligen angeregten Diskussionen enorm erweitert hat. Auch wenn ein Programmierfehler mal wieder zu recht abstrusen numerischen Daten führte, konnte Christian oft nach kurzer Überlegung die richtige Fehlerquelle identifizieren.

Des Weiteren möchte ich mich bei der gesamten Arbeitsgruppe am TPI bedanken. Die lockere und offene Atmosphäre machte das Arbeiten sehr angenehm. Für die zahlreichen Hinweise auf Zuruf sowohl in Bezug auf Physik vor allem aber bezüglich der

Lösung diverser Probleme mit Linux, bin ich Daniel Körner sehr dankbar. Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei William Willett. Der Studienstiftung des deutschen Volkes danke ich für die finanzielle Unterstützung während meines gesamten Studiums.

Erklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände, die Arbeit für die öffentliche Nutzung der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena, den 28.10.2010

Falk Tandetzky