

20. Rácstérelmélet alapjai és alkalmazásai

2004. június 15.

1. Rácstérelmélet alapjai

A kvantumtérelméletek matematikai megfogalmazásában a részecskék mint mezők szerepelnek, az x_μ téridő-koordináták függvényei, ahol x_0 -t tekintjük az időnek. Ezek dinamikáját leíró klasszikus mezőegyenletek differenciálegyenletek. A numerikus kezeléshez e differenciálegyenleteket diszkrétizáljuk a rácállandóval. Ennek megfelelően differenciál-operátorok helyett differencia-operátorokat használunk, és a mezőket csak a téridő-rács pontjaiban értelmezzük (1. ábra).

1.1. Áttérés euklideszibe

A szokásos Minkowski téridőben minden vákuum várható érték kifejezhető a vákuum generátorfunkcionál és deriváltjai segítségével. Például az $\mathcal{O}(\phi)$ operátor várható értéke

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left[i \int d^4x L(\phi, \partial\phi, J) \right] \quad (1)$$

$$\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle_{J=0} = \frac{1}{Z[0]} \int \mathcal{D}\phi e^{iS(\phi, J=0)} \quad (2)$$

A $\mathcal{D}\phi$ azt jelenti, hogy az összes mezőkonfigurációra integrálni kell.

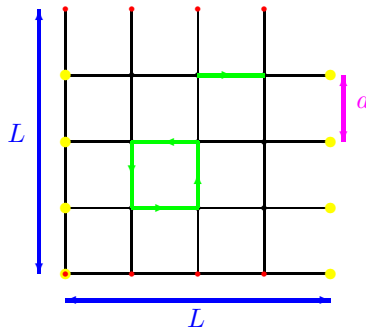
Az idő koordinátában egy analitikus átfolytatást végzünk, így az elméletet Euklideszi téridőben definiáljuk:

$$t \longrightarrow ix_4$$

Ekkor a várható érték számítása

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left[- \int d^4x L_E(\phi, \partial\phi, J) \right] \quad (3)$$

$$\langle \mathcal{O}(\phi) \rangle_{J=0} = \frac{1}{Z[0]} \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E(\phi, J=0)} \quad (4)$$



1. ábra. A 4 dimenziós téridő-rács 2 dimenziós metszete. A periodikus határfeltétel szerint a bal oldalon levő pontokat azonosítjuk a jobb oldaliakkal, az alsó pontokat pedig a felsőkkel.

Ekkor Z -t úgy interpretálhatjuk, mint egy négy dimenziós klasszikus fizikai rendszer állapotösszegét, melynek a Hamilton-függvényét

$$\beta H = S_E$$

adja meg. Ezáltal a kvantumtérelméleti problémát egy klasszikus mezőkből álló statisztikus rendszer tanulmányozására transzformáltuk át. Az így kapott eredményeket egy Wick-forgatással visszaforgathatjuk az eredeti Minkowski téridőbe.

Az euklideszi térelmélet és a klasszikus statisztikus fizikai rendszerek közötti megfeleltetés a következő táblázatban látható.

Euklideszi térelmélet	Klasszikus statisztikus rendszer
hatás	Hamilton-függvény
a hatás egysége \hbar	az energia egysége $\beta = 1/kT$
$e^{-S/\hbar}$ az amplitúdók Feynman-faktora	$e^{-\beta H}$ Boltzmann-súlyok
$\int \mathcal{D}\phi e^{-S/\hbar}$ vákuum-vákuum amplitúdó	$\sum_{\text{konf.}} e^{-\beta H}$ állapotösszeg
vákuumenergia	szabadenergia
$\langle 0 \mathcal{O} 0 \rangle$ vákuum várható érték	$\langle \mathcal{O} \rangle$ kanonikus sokaságátlag
időrendezett szorzat	sima szorzat
$\langle 0 T[\mathcal{O}_1 \dots \mathcal{O}_n] 0 \rangle$ Green-függvények	$\langle \mathcal{O}_1 \dots \mathcal{O}_n \rangle$ korrelációs függvények
M tömeg	$\xi = 1/M$ korrelációs hossz
regularizáció: Λ levágás	a rácscsillapítós
renormalizáció: $\Lambda \rightarrow \infty$	$a \rightarrow 0$ kontinuum limesz
a vákuumállapot változása	fázisátalakulás

1.2. A rácstérelméletek alapgondolata

A kvantálás a Feynman-féle pályaintegrál módszerrel történik. Ebben a megközelítésben a kiszámolandó mennyiséget először kifejezzük, mint egy \mathcal{O} operátor vákuumbeli várható értékét.

$$\langle 0 | \mathcal{O} | 0 \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}A_\mu \mathcal{O}[\psi, \bar{\psi}, A_\mu] e^{-S[\psi, \bar{\psi}, A_\mu]}}{\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}A_\mu e^{-S[\psi, \bar{\psi}, A_\mu]}}, \quad (5)$$

ahol S a hatás, az \mathcal{L} Lagrange-sűrűség integrálja:

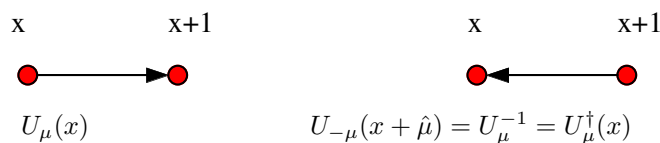
$$S = \int \mathcal{L} d^4x. \quad (6)$$

Mivel Minkowski helyett képzetes időt bevezetve Euklideszi téridőt használunk, így az integrandusban megjelenő oszcilláló e^{iS} tényező helyett a numerikusan is könnyebben kezelhető e^{-S} szerepel. Ekkor a vektorok indexei $\mu = 0, 1, 2, 3$ helyett $\mu = 1, 2, 3, 4$ lehetnek, ahol $\mu = 4$ jelenti a képzetes időt. Ha a téridőpontok számát végessé tesszük, akkor az (5) integrál már numerikusan elvégezhető.

Az integrál a ψ és A mezők értékeit futja végig minden téridőpontban. A téridőpontok számát úgy tesszük végessé, hogy kiválasztunk egy 4 dimenziós téglát a téridőből, és kockarácsnak megfelelően diszkrétizáljuk. A folyonos (x, t) téridőkoordináták indexelt (x_i, t_i) vagy $(n_i a, n_t a)$ rácskoordinátákká válnak, ahol a a rácspontok közötti legrövidebb távolság, a *rácscsillapítós*. A hatást szintén diszkrétizálni kell. A Lagrange-sűrűség a mezőket és azok deriváltjait tartalmazza. A mezőket kicseréljük a rácspontokban vett értékeivel, a deriváltakat pedig a véges differenciákkal. A Lagrange-sűrűség téridőre vett integrálját pedig az összes rácspontra vett szummával helyettesítjük: $\int d^4x \rightarrow \sum_x a^4$.

Elkerülhetetlenül fellépnek diszkrétizációs hibák, mert a rács Lagrange-függvény csak az $a = 0$ esetben egyezik meg a kontinuum Lagrange-függvénnyel. Nem nulla a esetén nemkívánt extra tagok jelennek meg a Lagrange-függvényben. Jelöljön R egy dimenziótlan megfigyelhető mennyiséget. Ennek a rácson vett várható értéke különbözik a kontinuum várható értékétől egy a^p rendű taggal:

$$R^{\text{lat}} = R^{\text{cont}} + O(a^p), \quad (7)$$



2. ábra. Mértékmező a rácson.

ahol a p kitevő attól függ, hogy hogyan diszkrétizáltuk a hatást. Ha a hatás tisztán bozonikus, vagy pedig staggered fermionokat használunk, akkor $p = 2$, ha pedig Wilson-fermionokat használunk, akkor $p = 1$.

Más szempöngből nézve a rác egy ultraibolya levágást okoz az impulzus térben, mivel az impulzus nem lehet nagyobb, mint π/a (a hullámhossz kisebb lenne, mint a). Ezzel egy természetes regularizációját valóítja meg az ultraibolya divergenciáknak. A számítások során az eredmények végesek maradnak, és így valóítható meg a kontinuum limesz.

A rác-megfogalmazásra az egyik legegyszerűbb példa a skalármező. Ennek euklideszi Lagrange-függvénye

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \lambda \phi^4. \quad (8)$$

Ennek megfelelően a diszkrétizált rác-hatás

$$S = \sum_x a^4 \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[\frac{\phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_{x-\hat{\mu}}}{2a} \right]^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi_x^2 + \lambda \phi_x^4 \right), \quad (9)$$

ahol $\hat{\mu}$ a μ irányú, rácállandó nagyságú vektor, tehát az $x + \hat{\mu}$ rácspont az x rácspontnak a μ irányban levő szomszédja. A paramétereket és a mezőket átskálázzuk a rácállandó hatványaival, hogy azok dimenziótlanok legyenek. Ekkor minden *rác-egységben* lesz kifejezve. A skalármezőnél a dimenziótlan mennyiségek $\phi' = \phi a$, $m' = ma$ és $\lambda' = \lambda$. Ekkor

$$S = \sum_x \left(\phi_x'^2 \left[2 + \frac{1}{2} m'^2 \right] + \lambda' \phi_x'^4 - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^4 \phi_{x+\hat{\mu}}' \phi_{x-\hat{\mu}}' \right). \quad (10)$$

Az átskálázásnak az az eredménye, hogy a hatásban a rácállandó nem jelenik meg explicit módon. A számolás a rácállandó ismerete nélkül zajlik, annak értéke általában azután derül ki, hogy a számolás eredményeit a kísérleti eredményekkel összehasonlítjuk.

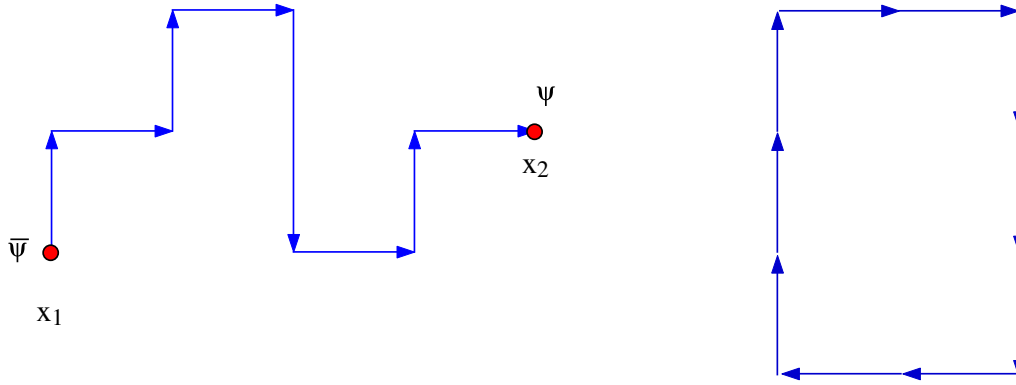
1.3. Mértékterek rácson

A mértékelméleteknek a leglényegesebb eleme a lokális mértékinvariancia. Ezért oly módon kell a diszkrétizációjukat megoldani, hogy a lokális mértékinvariancia a rácson is megmaradjon. A mértéktérnek a kontinuum esetben az a szerepe, hogy a lokális mértéktranszformációk hatását kiegyensúlyozza. Ezért ha a fermionok a rácspontokon vannak, akkor természetesnek adódik, hogy a mértékterek a rácspontokat összekötő *linkeken* ülnek.

A kontinuum leírásban a mértéktereket leíró $A_\mu(x)$ valójában n darab kovektormező (ahol n dimenziós a G mértékcsoport), az $A_\mu^b(x)$ együtthatók szorzata a G Lie-algebrájának n darab T_b generátorával. A rácson a Lie-algebra elemei helyett a linkeken célszerűbb magukat a mértékcsoport elemeit venni. A rácson a mértéktereket $A_\mu(x)$ helyett így $U_\mu(x)$ -szel jelöljük, ahol μ a link irányát mutatja, x pedig a link kezdőpontjának rác-koordinátáit. A rác és a kontinuum mezők között a kapcsolat exponenciális

$$U_\mu = e^{iagA_\mu}, \quad (11)$$

ahol a a rácállandó, g pedig a (csupasz) csatolási állandó. Egy link két rácspontoz is csatlakozik, így egy linkre kétféleképpen tekinthetünk. Ha az x rácspontból induló, az x -et az $x + \hat{\mu}$ rácsponttal összekötő μ irányú linken a mértékmező értéke $U_\mu(x)$, akkor az $x + \hat{\mu}$ -ből induló ugyanezen linken levő $U_{-\mu}(x + \hat{\mu})$ -ra $U_{-\mu}(x + \hat{\mu}) = U_\mu^{-1}(x) = U_\mu^\dagger(x)$ teljesül (2. ábra).



3. ábra. Mértékinvariáns operátorok: egy fermiont és egy antifermiont összekötő mértéktér-útvonal (balra) és egy zárt mértéktér-hurok (jobbra).

A mértékmezőknek ezen formája lehetővé teszi, hogy az egzakt mértékinvariánciát a rácson is megőrizzük. Egy lokális mértéktranszformációt itt ugyanis úgy hajthatunk végre, hogy minden rácspontban megadunk egy $G(x) \in G$ transzformációs mátrixot, majd a mérték- és fermionmezőket az

$$\begin{aligned} U_\mu^{(g)}(x) &= G(x)U_\mu(x)G^\dagger(x + \hat{\mu}) \\ \psi_x^{(g)} &= G(x)\psi_x \\ \bar{\psi}_x^{(g)} &= \bar{\psi}_x G^\dagger(x) \end{aligned} \quad (12)$$

képletek szerint transzformáljuk. Könnyen megmutatható, hogy ez a mértéktranszformáció ekvivalens a kontinuum

$$A_\mu^{(g)} = GA_\mu G^\dagger - \frac{i}{g} (\partial_\mu G) G^\dagger \quad (13)$$

mértéktranszformációjával.

Mértékinvariáns mennyiségek könnyen formálhatók a rácson, például zárt mértéktér-hurkokból, vagy olyan $\bar{\psi}_{x_1} U_\mu(x_1) U_\nu(x_1 + \hat{\mu}) \dots U_\epsilon(x_n - \hat{\epsilon}) \psi_{x_n}$ mértékterekből álló útvonalakból, amelyeknek egyik végén egy fermion, másik végén pedig egy antifermion található (3. ábra).

A tiszta mértékelmélet hatása a kontinuumban

$$S_g^{\text{kont.}} = \int d^4x \frac{1}{2g^2} \text{Tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (14)$$

Ennek a legegyszerűbb mértékinvariáns diszkrétizációja az ún. Wilson-hatás:

$$S_g^{\text{rács}} = \beta \sum_p \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re}\{\text{Tr} U_p\} \right), \quad \beta = \frac{6}{g^2}. \quad (15)$$

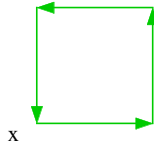
U_p az 1×1 -es zárt hurok, az ún. *plakett*. Ez egy G -beli mátrix, amelyet a négyzet 4 oldalát alkotó linkeken levő mértékmező értékek megfelelő sorrendbeli összesorzásával kapunk. A μ, ν síkban fekvő plakett, amelynek az egyik sarka x , az

$$U_p(x) = U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\mu} + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \quad (16)$$

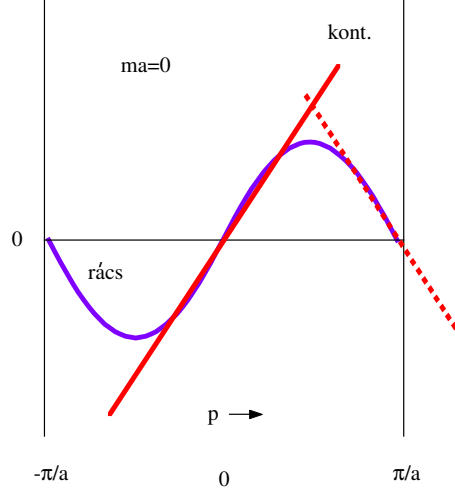
módon néz ki.

1.4. Fermionok

A kölcsönhatásokban nem csak a mértékmezők, hanem fermionok is részt vesznek, ezért a fermionok rácsrelméletével is foglalkoznunk kell. Amellett, hogy a fermionoknak a hatásba történő bevétele jelentősen megnöveli a számítási igényt, a fermion jellegük miatt több más nehézséggel is szembe kell néznünk.



4. ábra. Egy plakett a rácson.



5. ábra. A rácsmegkettőződési problémája. A szinuszgörbe mutatja egy dimenzióban a rácspromagátor inverzét. A $p = 0$ és a $p = \pi/a$ pontokon átmenő folytonos ill. szaggatott egyenesek kontinuum fermionpromagátorok inverzét mutatják.

A legszembetűnőbb probléma, amely már szabad fermionok esetén is jelentkezik az ún. fermion-megkettőződés. Egy szabad fermionmező kontinuum hatása

$$S_f = \int d^4x \bar{\psi}(\gamma^\mu \partial_\mu + m)\psi. \quad (17)$$

Ezt naív módon diszkretizálva az

$$S_f^{\text{naív}} = a^4 \sum_x \left[\bar{\psi}_x \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{\psi_{x+\hat{\mu}} - \psi_{x-\hat{\mu}}}{2a} + m \bar{\psi}_x \psi_x \right] \quad (18)$$

rács-hatást kapjuk. Ezen hatásból adódó rácspromagátor inverze

$$G_{\text{naív}}^{-1}(p) = i\gamma_\mu \frac{\sin p_\mu a}{a} + m. \quad (19)$$

Könnyen láthatóvá válik a probléma, ha ezt összevetjük a (17) kontinuum hatásból adódó

$$G_{\text{kont.}}^{-1}(p) = i\gamma_\mu p_\mu + m \quad (20)$$

promagátorral. A két inverz promagátor az 5. ábrán látható egy dimenziós tömegetlen fermion esetére az első Brillouin-zónában. A nemnulla rácsmállandó miatt a $p = \pi/a$ és $p = -\pi/a$ pontok periodikusan csatoltak. A $p = 0$ pontban mind a rácsm-, mind a kontinuum promagátornak pólusa van. Ezen pont környékén a rácsm-eredmény összhangban van a kontinuummal. A rácspromagátornak azonban a $p = -\pi/a$ pontban is pólusa van, és ebben a pontban szintén egy kontinuum-szerű egyenes húzható. Tehát egy dimenzióban a rácson egy helyett kettő, egy 4 dimenziós rácson pedig egy helyett már $2^4 = 16$ kontinuum-szerű fermion található. Itt a *valódi* fermion mellett 15 másolat jelent meg. Ezt hívjuk a fermion-megkettőződés problémájának.

1.4.1. Wilson fermionok

A fermion-megkettőződés kikerülésére több különböző mód létezik. Ezek közül az alkalmazásokban az egyik legelterjedtebb a Wilson fermionhatás. A hatáshoz adott Wilson-tag teljesen kiküszöböli a másolatokat azáltal, hogy azoknak ma -nál sokkal nagyobb tömeget ad, így azok nem adnak járulékot. A Wilson-tag lényege, hogy második deriváltat tartalmaz, így a dimenziótlanság megőrzése érdekében a -nak eggyel magasabb hatványával kell szorozni, mint a többi tagot:

$$S_f^W = S_f^{\text{naív}} - \frac{r}{2} a^5 \sum_x \bar{\psi}_x \square \psi_x, \quad (21)$$

ahol

$$\square \psi_x = \sum_{\mu=1}^4 \frac{\psi_{x+\hat{\mu}} - 2\psi_x + \psi_{x-\hat{\mu}}}{a^2}. \quad (22)$$

Az r az ún. Wilson paraméter, amit legtöbbször 1-nek választanak. A (21) hatásból számolt propagátor inverze

$$G_W^{-1}(p) = G_{\text{naív}}^{-1}(p) + \frac{2r}{a^2} \sum_{\mu=1}^4 \sin^2(p_\mu a/2) \quad (23)$$

alakú. Ezt a $p = 0$ körül sorbafejtve

$$G_W^{-1}(p) = i\gamma_\mu p_\mu + m + \frac{ra}{2} \sum_{\nu=1}^4 p_\nu^2. \quad (24)$$

Ezt a (20) kontinuum esettel összevetve azt láthatjuk, hogy az $a \rightarrow 0$ esetben az r -et tartalmazó tag eltűnik, és az m tömegré a megfelelő értéket kapjuk. Vizsgáljuk meg a másolatokat. Ha \tilde{p} jelöli a p és π/a különbségét, akkor a másolatoknál sorbafejtve \tilde{p}_μ szerint

$$G^{-1}(\tilde{p}) = i\gamma_\mu \tilde{p}_\mu + m + \frac{br}{a} + \dots \quad (25)$$

adódik, ahol b lehetséges értékei 2, 4, 6 vagy 8, attól függően, hogy melyik másolatot vizsgáljuk. Tehát ha $a \rightarrow 0$, akkor a másolatok tömege végtelenhez tart, így a hatás valóban egy fermiont ír le.

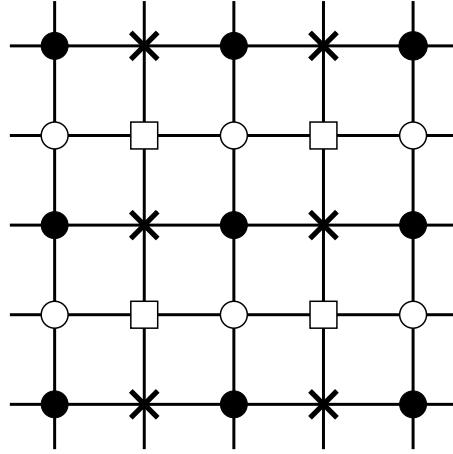
Az $a^{3/2}\psi \rightarrow \psi$ dimenziótlantítás után a Wilson hatás a

$$S_f^W = \sum_x \left\{ \bar{\psi}_x \sum_\mu [(\gamma_\mu - r) \psi_{x+\hat{\mu}} - (\gamma_\mu + r) \psi_{x-\hat{\mu}}] + (ma + 4r) \bar{\psi}_x \psi_x \right\} \quad (26)$$

alakot ölti. A tömeghez hasonló szerepe miatt szokás bevezetni a $\kappa = 1/(2ma + 8r)$ ún. *hopping paramétert*, és a fermionmezőt $\sqrt{2\kappa}$ -val átskálázni. A mértékmezőkhöz csatolva a fermionok minden egyes rácspontban már $n(\text{mérték}) \times 4(\text{spin})$ dimenziós vektorok lesznek. Az U mértékmezőt úgy lehet mértékinvariáns módon betenni a hatásba, hogy egy szomszédos ψ és $\bar{\psi}$ közé írjuk. Így a teljes mértékinvariáns Wilson hatás:

$$S_f^W = \sum_x \left\{ \kappa \left[\sum_\mu \bar{\psi}_x (\gamma_\mu - r) U_\mu(x) \psi_{x+\hat{\mu}} - \bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} (\gamma_\mu + r) U_\mu^\dagger(x) \psi_x \right] + \bar{\psi}_x \psi_x \right\}. \quad (27)$$

A Wilson hatás nagy előnye, hogy a fermion-megkettőződés során keletkező összes másolatot megszünteti. Ezen előnye mellett azonban hátrányai is vannak. A Wilson tag a királis szimmetriát explicit módon sérti. Ha $a \rightarrow 0$, akkor a szimmetria visszaáll, de a valódi, $a \neq 0$ melletti rác-számolásokban a királis szimmetria hiánya sokszor nehézséget okozhat. A Wilson hatás egy másik hátránya, hogy használatakor nagy diszkretizációs hibák léphetnek föl. A naív hatás használatakor a fizikai mennyiségek várható értékének hibája a^2 -tel arányos. A hatáshoz adott Wilson-tag azonban a -val arányos, azaz $S_f^W = S_f^{\text{kont.}} + O(a)$, így a kapott hibák itt a -val lesznek arányosak.



6. ábra. A 2^d szabadsági fok szétosztása a kétdimenziós ($d = 2$) rácson staggered fermionok esetén.

1.4.2. Staggered fermionok

Amint azt fentebb láttuk, a fermion-megkettőződés abból ered, hogy a rác-propagátor (19) inverzének a Brillouin-zóna szélein is zérushelyei vannak. Ezáltal felmerül az a lehetőség, hogy a nemkívánt másolatokat a Brillouin-zóna méretének csökkentésével távolítsuk el. Ez elérhető, ha a fermion szabadsági fokokat a rácspontok között oly módon osztjuk szét, hogy az effektív rácállandó kétszerese legyen az eredetinek, és a kontinuum határesetben visszakapjuk a kontinuum hatást. Az eredetileg egy rácspontban levő különböző spinkomponenseket szétosztjuk egy rácállandó elhosszúságú hiperkocka csúcsaiba. Egy d dimenziós hiperkockának 2^d csúcsa van, így a rendelkezésre álló szabadsági fokok száma 2^d (6. ábra). A Dirac-spinoroknak d dimenzióban $2^{d/2}$ komponense van, így egy hiperkocka minden csúcsába egy komponenszt írva $2^d/2^{d/2} = 2^{d/2}$ fermionmezőt tudunk leírni. A $d = 4$ dimenziós téridőben tehát $2^{4/2} = 4$ degenerált fermiont kapunk. Az eredeti ψ_x mezők helyett minden rácspontban bevezetjük a $n(\text{mérték}) \times 1(\text{spin})$ komponenssel rendelkező χ_x mezőt, melyekre a mértékinvariáns teljes staggered (Kogut–Susskind) hatás:

$$S_f^S = \sum_x \bar{\chi}_x \left\{ \frac{1}{2} \sum_{\mu} \eta_{x,\mu} (U_{\mu}(x) \chi_{x+\hat{\mu}} - U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \chi_{x-\hat{\mu}}) + ma \chi_x \right\}, \quad (28)$$

ahol

$$\eta_{x,\mu} = (-1)^{\sum_{\nu=1}^{\mu-1} x_{\nu}}. \quad (29)$$

Ez a hatás 4 degenerált (azonos tömegű) fermiont ír le, de az ízek (a 4 fermion) szétválasztása az egy hiperkocka csúcsaiban levő 16 különböző χ értékből bonyolult feladat. A Staggered hatásnak azonban van egy maradék királis szimmetriája, aminek következtében jobban kezelhető, és gyorsabban lehet vele dolgozni, mint a Wilson hatással. Továbbá a staggered hatás esetén a diszkretizációs hibák a^2 -tel arányosak, csak úgy, mint a naív hatás esetében.

1.5. Számolási algoritmus

Egyelőre tekintsük csak a mértékmezőket a rácson, \mathcal{O} pedig egy csupán a mértékmezőktől függő operátor, aminek a várható értékét szeretnénk meghatározni. Ekkor az (5) Feynman pályaintegrál a

$$\langle 0 | \mathcal{O} | 0 \rangle = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O} e^{-S_g(U)}}{\int \mathcal{D}U e^{-S_g(U)}} \quad (30)$$

alakú. Ezen pályaintegrál kiszámításához generálunk véletlen $\{U\}_\alpha$ mértékmező *konfigurációkat*, majd kiszámítjuk a

$$\langle 0 | \mathcal{O} | 0 \rangle = \frac{\sum_\alpha \mathcal{O}_\alpha e^{-S_\alpha}}{\sum_\alpha e^{-S_\alpha}} \quad (31)$$

súlyozott átlagot. Itt \mathcal{O}_α az \mathcal{O} operátor értéke, S_α pedig az S_g hatás értéke az α konfigurációban. A konfigurációk összességét *sokaságnak* hívjuk.

A véletlenszerűen generált mértéktér-konfigurációk többségére azonban S_α nagyon nagy, így azok nagyon kis járulékot adnak a (31) átlaghoz. Ilyen módon számolva tehát nagyon sok felesleges számolást végeznénk. Célszerűbb a konfigurációkat eleve olyan eloszlással előállítani, hogy az $\{U_\alpha\}$ konfiguráció e^{-S_α} valószínűséggel kerüljön elő. Ezt hívjuk *fontossági mintavételezésnek*, mert ekkor minden egyes konfiguráció olyan gyakorisággal kerül elő, amekkora járulékot ad a várható érték képzésében. Ha ilyen eloszlással állnak rendelkezésünkre a konfigurációk, akkor

$$\langle 0 | \mathcal{O} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \mathcal{O}_\alpha, \quad (32)$$

tehát az eredmény az \mathcal{O} operátornak az egyes konfigurációkban vett értékének az átlaga. Ha a konfigurációk száma N , akkor a számolás relatív statisztikus hibája $1/\sqrt{N}$ nagyságú.

Többféle algoritmus létezik a konfigurációk e^{-S} eloszlású generálásához. A legkorábbi és egyben a legegyszerűbb eljárás a *Metropolis algoritmus*. Első lépésként generálunk egy véletlenszerű konfigurációt. Ebből kis véletlenszerű változtatással előállítunk egy következő konfigurációt, és közben figyeljük a hatás ΔS változását. Ha S csökken, akkor az újonnan kapott konfigurációt elfogadjuk. Ha S nő, akkor az új konfigurációt $e^{-\Delta S}$ valószínűséggel fogadjuk el. Ezt ilyen módon folytatva minden egyes elfogadott konfigurációban végezhetünk „méréseket”, azaz kiértékelhetjük a különböző \mathcal{O} operátorok várható értékét.

Itt fontos megemlítenünk, hogy minden konfigurációt egy előző konfigurációból kis változtatással hoztunk létre, ezért az egyes konfigurációk nem tekinthetők statisztikusan függetlennek. Figyelembe kell venni tehát a *termalizációs időt* és az *autokorrelációs időt*. A termalizációs idő az ahhoz szükséges lépések száma, hogy a konfigurációk sorozata elérje a kiindulási konfigurációtól független e^{-S} egyensúlyi eloszlást. Az autokorrelációs idő azt mutatja meg, hogy két konfiguráció között hány lépésnek kell megtörténnie ahhoz, hogy az azokban mért mennyiségek már egymástól statisztikusan függetlennek, korrelálatlanak tekinthetők legyenek. Az autokorrelációs idő megállapítható az \mathcal{O} operátornak a konfigurációk sorozatán mért értékeiből. Ez általában függ az \mathcal{O} operátortól. Ha például \mathcal{O} olyan zárt mértékmező hurok, ami szinte az egész rácsot bejárja, akkor hosszabb lesz az autokorrelációs ideje, mint ha csak néhány egymáshoz közeli linken haladna. Ahogy csökkentjük az a rácsállandót, a kontinuum határesethez haladva fellép a *kritikus lelassulás* jelensége. Ez annak a következménye, hogy a -t csökkentve egy adott tipikus fizikai távolság, mint például egy hadron mérete, rács-egységekben mérve nagyobb lesz, azaz több rácsponthoz felel meg. Ahhoz, hogy két konfiguráció ugyanazon a fizikai méretskálán korrelálatlan maradjon, kisebb rácsállandó esetében több lépésnek kell közöttük eltelnie.

Ha a számolásban már a fermionokat is figyelembe vesszük, akkor azok fermion jellege miatt újabb nehézséggel találkozunk szembe magunkat. A fermionokat ugyanis a Pauli-elv miatt nem hagyományos számok, hanem egymással antikommutáló Grassmann-változók írják le helyesen.

A fermionmezők kvadratikusan szerepelnek a (27) és a (28) hatásokban, ezért a teljes (mértékterekre és fermionokra vonatkozó) rácshatás az

$$S(U, \psi, \bar{\psi}) = S_g(U) - \bar{\psi} M(U) \psi \quad (33)$$

alakba írható, ahol S_g a tiszta mértéktér rácshatása, $M(U)$ pedig a mértéktér-konfigurációtól függő *fermionmátrix*. Ekkor az állapotösszegben a fermionokra történő integrálást analitikusan elvégezve

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_g(U) - S_f(U, \psi, \bar{\psi})} = \int \mathcal{D}U e^{-S_g} \det M(U). \quad (34)$$

A mértékmezőkre vonatkozó effektív hatás tehát az

$$S_{\text{eff.}}(U) = S_g(U) - \ln(\det M(U)) \quad (35)$$

alakot ölti. Az $\ln(\det M)$ tagra úgy gondolhatunk, hogy ő a felelős a vákuumban megjelenő és eltűnő fermion-antifermion párokért.

A számolás ezek után úgy történik, hogy a mértéktér-konfigurációkat ezen hatás szerinti $e^{-S_{\text{eff}}}$ eloszlással generáljuk. Egy Metropolis lépésben tehát az új konfiguráció elfogadásának valószínűsége

$$P(U \rightarrow U') = \min \left\{ 1, \exp(S_g(U) - S_g(U')) \frac{[\det M(U')]}{[\det M(U)]} \right\}. \quad (36)$$

Ha fermionokat is tartalmazó operátorok várható értékét szeretnénk meghatározni, akkor a következőt kell tennünk. Legyen például

$$\mathcal{O} = (\bar{\psi}\psi)_y (\bar{\psi}\psi)_x \quad (37)$$

az x pontban egy u és d fermiont tartalmazó mezont keltő, majd azt az y pontban eltüntető operátor. Ekkor a pályaintegrál

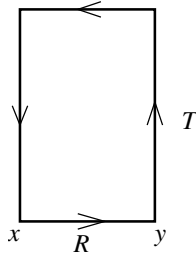
$$\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \psi_y^{u,a} \psi_y^{d,a} \psi_x^{d,b} \psi_x^{u,b} e^{-S} = \int \mathcal{D}U [M_{x,y}^{-1,u}(U)]^{ab} [M_{y,x}^{-1,d}(U)]^{ba} \det M(U) e^{-S_g}. \quad (38)$$

M^{-1} a fermion-propagátor az x pontból az y pontba egy adott mértéktér-konfiguráción. Itt a és b a mérték-indexek, az azokra történő összegzés mértékinvariánssá teszi az \mathcal{O} operátort. Az \mathcal{O} várható értékének meghatározásához tehát a $\text{Tr}_{\text{szín,spin}} [(M_{x,y}^{-1,u})(M_{y,x}^{-1,d})]$ mennyiség értékét kell meghatározni a (35) hatás szerint fontossági mintavételezéssel készült mértéktér-konfigurációkon, majd azokból átlagot venni.

2. Alkalmazások

2.1. Sztatikus kvark-potenciál

Ha ki akarjuk számolni a sztatikus kvarkpotenciált, azaz azt, hogy két, egymástól R távolságban elhelyezett nyugvó kvark között mekkora potenciál lép fel (a QCD miatt), akkor azt a következőképpen kell csinálni. Definiáljuk a $\mathcal{C}_{R,T}$ Wilson-hurkot. Vegyünk egy x és egy y pontot a rácson úgy, hogy x és y távolsága R legyen. Az x és y pontokat toljuk el időirányban T -vel, így kapunk egy téglalapot, melynek oldalai R és T nagyságúak.



A nyilak irányában sorban haladva vegyük a linkeken levő gluonmezők (amelyek most $SU(3)$ mátrixok) szorzatát, majd annak a nyomát (mint a 3. ábrán). Vegyük ezen mennyiségeknek a várható értékét, és legyen ez a $W(\mathcal{C}_{R,T})$ Wilson-hurok értéke. Ez mértékinvariáns, és független attól, hogy a hurkon hol kezdjük a szorzást. A Wilson hurok az ún. területi szabályt követi, azaz

$$W(\mathcal{C}_{R,T}) \stackrel{R, T \rightarrow \infty}{\propto} e^{-\alpha RT}.$$

(RT a téglalap területe.) A statikus kvarkpotenciált a

$$V(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln W(\mathcal{C}_{R,T})$$

képlet adja meg.

$$\alpha = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{V(R)}{R}$$

Szokták mondani, hogy nagy távolságokon a kvarkok között ható erő állandó, azaz a potenciál lineárisan nő, ún. string köti össze a két kvarkot. Ez az α a string-állandó.

2.2. Hadronspektrum

A QCD hadronállapotainak tömegét rácstérelmélet segítségével meg lehet határozni.

Válasszunk egy olyan \mathcal{O} operátort, amelynek jó átfedése van a $|P\rangle$ hadronállapottal, azaz

$$\langle 0 | \mathcal{O} | P \rangle \neq 0,$$

de a $|P\rangle$ -vel azonos kvantumszámokkal rendelkező más állapotokkal kicsi az átfedése. Ekkor számoljuk ki az időszelvény korrelációs függvényét:

$$C(t) = \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{O}(\mathbf{x}, t) \mathcal{O}^\dagger(\mathbf{0}, 0) \rangle$$

Ezt úgy csináljuk, hogy minden egyes konfigurációban vesszük a fenti szummát (lényegében a t -hez tartozó időszelvényre szummázunk), majd vesszük a konfigurációkra vett átlagot.

Ebből a $C(t)$ -ből a tömegspektrum a következőképpen kapható meg. Írjunk be az \mathcal{O} és a \mathcal{O}^\dagger közé hadronállapotok egy teljes rendszerét. Az időszelvényre vett összeg az állapotokat határozott impulzusba teszi. Ekkor kapjuk:

$$C(t) = \sum_{\mathbf{x}} \sum_P \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3 2E(\mathbf{k})} \langle 0 | \mathcal{O}(\mathbf{x}, t) | P(\mathbf{k}) \rangle \langle P(\mathbf{k}) | \mathcal{O}^\dagger(\mathbf{0}, 0) | 0 \rangle = \sum_P \frac{|\langle 0 | \mathcal{O} | P \rangle|^2}{2E_P(\mathbf{0})} e^{iE_P(\mathbf{0})t}$$

Mivel euklideszi téridőben vagyunk, ezért valójában ezt kapjuk

$$C(t) = \sum_P \frac{|\langle 0 | \mathcal{O} | P \rangle|^2}{2m_P} e^{-m_P t},$$

ahol m_P a P állapot tömege. Ha $t \rightarrow \infty$, akkor lényegében a legkisebb tömegű állapot fogja a legjelentősebb járulékot adni (feltéve hogy a mátrixeleme nem nulla). Ezért az adott kvantumszámokkal rendelkező legkisebb tömegű állapot tömegére

$$m_0 \propto - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln C(t).$$

Ha az \mathcal{O} operátor határozott kvantumszámokkal rendelkezik, akkor a más kvantumszámokkal rendelkező állapotok mátrixeleme az ortogonalitás miatt nulla lesz. Tehát ha „mérjük” a $C(t)$ -t a t függvényében, akkor abból a legalacsonyabb tömeg megkapható.

Nagyobb tömegű állapotok tömegének meghatározása variációs módszerekkel történik. Ehhez kell vennünk egy \mathcal{O}_i operátorokból álló bázist, ahol mindegyik operátor nagyjából jól megfelel valamenyik állapotnak. Ekkor a rácson kiszámoljuk a korrelátorok mátrixát

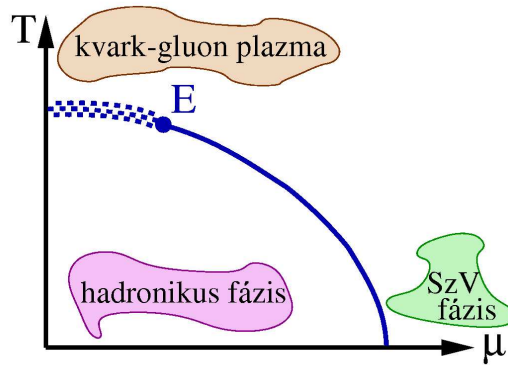
$$C_{ij}(t) = \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathcal{O}_i(\mathbf{x}, t) \mathcal{O}_j^\dagger(\mathbf{0}, 0) \rangle,$$

és a tömegek durván a $C(t)^{-1}C(t+1)$ transzfermátrix diagonalizálásából adódnak.

2.3. A QCD fázisdiagramja

A QCD fázisdiagramjának feltérképezésére is rácstérelméleti módszereket használnak. A fázisdiagramról a jelenlegi ismereteink a 7. ábrán láthatók. Kis (T) hőmérsékleten és kis (μ) kémiai potenciálon (ami egyébként kis sűrűséget jelent) van az ún. hadronikus fázis. Ebben a fázisban a kvarkok szín-semleges hadronokat képeznek. (Az atommagban is ez a fázis van.) Nagy sűrűségen de kis hőmérsékleten szín-szupravezetés van sejtve. Kis sűrűségnél és nagy hőmérsékleten azonban kvark-gluon plazma fázis van. Ebben felszabadulnak az eddig bezárt kvarkok és gluonok, és szabad kvarkok és gluonok alkotnak itt egy plazmaszerű állapotot. (Megjegyzés: sem a szín-szupravezetést, sem a kvark-gluon plazmát még nem igazolták kísérletileg, már amennyire ezeket egyáltalán lehet kísérletileg igazolni.) Az ábrán a vonal egy elsőrendű fázisátmenetet jelent, amely egy végpontban végződik (abban a pontban másodrendű az átmenet), és azon túl pedig nincs valódi fázisátmenet, hanem egy gyors, de analitikus átmenet van a két fázis között.

Ez a következőképpen történik. Az egész rendszert egy statisztikus rendszernek tekintjük, amely két paramétertől függ: T és μ . Figyelve bizonyos mennyiségek várható értékének viselkedését, ill. azok szuszeptibilitását, azok a fázisátmeneteket kritikus viselkedést mutatnak, amely alapján megtalálható a fázisátmenet, és annak típusa is. Az egyik ilyen jellemző mennyiség például a plakett, annak várható értékének változása szépen meghatározza a fázisátmenetet. Egy másik ilyen pl. a $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$. Ez durván a mezonban kötött kvarkok számának várható értéke. A hadronikus fázisból a kvark-gluon plazmába átmenve ennek értéke esik egy nagyot.



7. ábra. A QCD fázisdiagramja.

3. Összefoglalás

Amit ebből az egészből tudni kell, szerintem az a következő:

- A rácstérelmélet lényege, hogy a mezőelmélet kvantálása a funkcionálintegrállal van csinálva, és ezt a funkcionálintegrált akarjuk numerikusan kiszámolni a rácstérelmélet segítségével.
- Áttérünk ekulideszi térelméletbe, ezáltal a gyorsan oszcilláló e^{iS} átmege a numerikusan sokkal könnyebben kezelhető e^{-S} -be. Továbbá a rendszerünk teljesen analóg lesz egy klasszikus statisztikus rendszerrel, ezáltal az ott jól bevált Monte Carlo módszerek alkalmazhatóak.
- A skalármező rács-hatását szerintem tudni kell.
- A mértékelméletekből szerintem elég annyit tudni, hogy a mértékmező nem a rácspontokon, hanem a linkeken van, és nem a csoport Lie-algebrájából veszi fel értékeit, hanem magából a csoportból, és ezáltal az egész mértékinvariáns marad.
- A fermionokból szerintem azt kell tudni, hogy egyrészt Grassmann-változók írják le, ezért a rájuk vonatkozó integrált analitikusan kell elvégezni, és ezért lejön a fermionmátrix determinánsa. Ezért a számolásban csak mértéktér-konfigurációkat generálunk a fermiondeterminánssal módosított effektív hatás alapján, és abból számolunk minden várható értéket. A másik, hogy a fermionoknál fellép a kettőződés problémája. Szerintem érdemes tudni az ennek kikerülésére alkalmazott két legelterjedtebb hatás nevét (Wilson és staggered), és azt, hogy melyik mit alkalmaz a probléma leküzdésére: A Wilson hatás tartalmaz egy extra \square -t tartalmazó tagot, amely kontinuum limeszben eltűnik, a staggered pedig megduplázza az effektív rácsállandót (ezáltal felezve a Brillouin-zónát) a spinor-szabadság fokok szétosztásával. De a konkrét képletüket, meg propagátort, meg ilyesmit szerintem semmi esetre sem kell tudni.
- A számoláshoz fontossági mintavételezést használunk. Érdemes tudni pl. a Metropolis algoritmus lényegét. (A valóságban persze annál sokkal advancedebb algoritmusokat használnak, de az most lényegtelen, az elv a lényeg.)
- Az alkalmazásokból szerintem annyit érdemes tudni, hogy miket lehet meghatározni, meg egy picit azt érteni, hogy hogyan történik egy ilyen. Például a QCD-ben a string-konstanst lehet megkapni a Wilson-hurkok segítségével, a hadronspektrumot pedig időszelvény-korrelátorokkal. A fázisdiagramról szerintem annyit kell tudni, hogy mivel statisztikus rendszerrel analóg lett a rendszerünk, ezért annak lehetnek fázisátmenetei, amiket a hagyományos statfizikus módszerekkel lehet vizsgálni.