Teil I

Zusammenfassende Diskussion

Die in Teil II enthaltenen Arbeiten, die über das Habilitationsthema

“Berechnung von Massen, Zerfällen und Struktur von Hadronen mit Methoden der Gitter-QCD”

in thematischem Zusammenhang stehen, werden im Folgenden zusammengefasst.

Berechnung von Massen, Zerfällen und Struktur von Hadronen mit Methoden der Gitter-QCD

Marc Wagner
Goethe-Universität Frankfurt am Main, Institut für Theoretische Physik,
Max-von-Laue-Straße 1, D-60438 Frankfurt am Main, Germany

11. Januar 2015

Es wird eine Reihe von thematisch ähnlichen Arbeiten aus dem Bereich der Gitter-QCD zusammengefasst, die sich mit der Berechnung von Massen, Zerfällen und der Struktur von Hadronen befassen. In diesen Arbeiten werden verschiedene Systeme untersucht, unter anderem leichte skalare Mesonen, D- und D_s-Mesonen, Charmoniumzustände, B- und B_s-Mesonen sowie b-Baryonen. Die verwendeten Techniken decken ebenfalls ein breites Spektrum ab. Einfach strukturierte Hadronen werden mit Standard-$q\bar{q}$- und -qqq-Erzeugungsoperatoren untersucht, während für weniger gut verstandene Hadronen, wie z.B. leichte skalare Mesonen und andere Tetraquarkkandidaten, mehrere Erzeugungsoperatoren unterschiedlicher Struktur eingesetzt werden. Außerdem werden Kräfte zwischen schweren Mesonen berechnet, die, weiterverwendet in Modellrechnungen, Hinweise auf die Existenz von Tetraquarkzuständen geben.

---

1 Einleitung

Bei diesem vorliegenden Teil I handelt es sich um eine zusammenfassende Diskussion der Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15], die Teil der schriftlichen Habilitationsleistungen in einem kumulativen Verfahren ist. Der Inhalt, insbesondere die wesentlichen Ergebnisse der Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] werden grob skizziert und ihr Zusammenhang über das Habilitationsthema **"Berechnung von Massen, Zerfällen und Struktur von Hadronen mit Methoden der Gitter-QCD"** wird herausgearbeitet. Weitere Details sind den Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] selbst zu entnehmen, die in Teil II abgedruckt sind. Da diese Zusammenfassung eine ganze Reihe von Unterthemen abdeckt, würde eine vollständige Diskussionen existierender Literatur ihren Umfang bei weitem sprengen. Auch hierfür sei auf die Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] verwiesen.

1.1 Motivation

QCD (Quantenchromodynamik) ist die Theorie der starken Wechselwirkung. Sie beschreibt Quarks, Gluonen und die zwischen ihnen wirkenden Kräfte. Sie erklärt damit auch die Existenz der aus Quarks und Gluonen zusammengesetzten Hadronen, d.h. Mesonen, in der Regel Quark-Antiquark-Paare $q\bar{q}$, und Baryonen, gebundene Zustände von drei Quarks qqq oder drei Antiquarks $\bar{q}\bar{q}\bar{q}$.

Analytisch kann QCD nur bei hohen Energien mit Hilfe von Störungstheorie behandelt werden, da in diesem Regime die Kopplungskonstante der QCD klein ist und QCD sich ähnlich, wie eine freie Theorie verhält. Will man Rechnungen abseits von hohen Energien ausführen, z.B. Hadronmassen ausgehend von der QCD, d.h. von den elementaren Quarks und Gluonen, berechnen, ist man auf numerische Methoden, die sogenannte Gitter-QCD angewiesen.

Es gibt eine lange Reihe von interessanten Fragestellungen, die mit Hilfe von Gitter-QCD untersucht werden können, von denen im Folgenden nur einige wenige exemplarisch genannt werden. Z.B. kann durch Nachrechnen experimentell beobachteter Eigenschaften von Hadronen die QCD bzw. das Standardmodell als korrekte Theorie der Teilchenphysik verifiziert werden, zumindest bis zur experimentellen Mess- und theoretischen Rechengenauigkeit. Auf gleichem Weg kann auch versucht werden, neue Physik jenseits des Standardmodells zu entdecken. Eine andere Möglichkeit besteht darin, mit Hilfe von Gitter-QCD hadronische Zustände vorauszuberechnen, die experimentell noch gar nicht gemessen wurden. Ferner ist es möglich, Massen, Quantenzahlen und Struktur von experimentell weniger gut vermessenen und/oder theoretisch verstandenen Hadronen (z.B. "omitted from summary table" im "Review of Particle Physics" [16]) zu bestimmen. Des Weiteren liefern Gitter-QCD-Rechnungen Einsichten in Systeme und Bereiche, die experimentell nur schwer zugänglich sind, z.B. die Kraft zwischen einem Quark und einem Antiquark oder das Verhalten von QCD bei sehr hohen Temperaturen.

Hier werden Arbeiten aus dem Bereich der Gitter-QCD zusammengefasst und diskutiert, die sich mit der Berechnung von Massen und teilweise auch von Zerfällen von Hadronen, insbesondere von Mesonen beschäftigen. In mehreren Fällen wird auch versucht, Aussagen über die Struktur dieser Mesonen zu treffen (z.B. ob es sich um ein Quark-Antiquark-Paar oder um ein Tetraquark handelt, oder welchen Anteil am Gesamtspin die leichten Quarks und Gluonen tragen). Dabei wird ein breites Spektrum von Hadronen studiert: leichte skalare Mesonen, D- und D_s-Mesonen, Charmonium-Zustände, B- und B_s-Mesonen sowie b-Baryonen. Ein signifikanter

Teil der Untersuchungen gilt weniger gut verstandenen Mesonen, insbesondere solchen, bei denen eine 4-Quark-Struktur, also zwei Quarks und zwei Antiquarks, vermutet wird, sogenannte Tetraquark-Kandidaten. Das globale Ziel der diskutierten Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] und auch sich aktuell anschließender und zukünftiger Folgeprojekte besteht darin, ein umfassendes theoretisches Bild von Hadronen, vor allem von Mesonen, zu erhalten: präzise Ergebnisse für Massen und spezielle Zerfälle der gut verstandenen und einfach strukturierten Mesonen (z.B. pseudoskalare Mesonen) und zumindest grobe Ergebnisse und qualitative Einsichten bezüglich Massen und Struktur der weniger gut verstandenen Mesonen (radial oder orbital angeregte Mesonen, Tetraquark-Kandidaten, Resonanzen).

1.2 Gliederung

Die vorliegende zusammenfassende Diskussion ist wie folgt gegliedert. In Kapitel 2 werden Grundlagen der Gitter-QCD und -hadronspektroskopie oberflächlich skizziert. Dieses Kapitel eignet sich vor allem für Leser, die bestenfalls ein oberflächliches Wissen über Gitter-QCD mitbringen und kann von Experten problemlos übersprungen werden. Das sich anschließende kurze Kapitel 3 nennt wesentliche Eigenschaften des verwendeten Gitter-QCD-Setups, insbesondere auch der eingesetzten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung. Im Hauptteil, der aus den Kapiteln 4, 5 und 6 besteht, werden die Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] zusammengefasst. Zuerst werden in Kapitel 4 Gitter-QCD-Rechnungen diskutiert, in denen Standard-$q\bar{q}$- und -qqq-Erzeugungsoperatoren verwendet werden. Ein derartiges Vorgehen eignet sich für das Studium von Hadronen, die eine solche $q\bar{q}$- oder qqq-Struktur aufweisen. Im folgenden Kapitel 5 wird die sehr viel aufwändigere Untersuchung von Tetraquarkkandidaten mit einer Vielzahl von Erzeugungsoperatoren unterschiedlicher Struktur besprochen. Schließlich geht es in Kapitel 6 um die Berechnung von Kräften zwischen zwei schwere Mesonen. Diese Ergebnisse werden dann in Modellrechnungen weiterverwendet, um herauszufinden, in welchen Kanälen möglicherweise Tetraquarks existieren. Kapitel 7 enthält eine kurze Zusammenfassung und einen Ausblick.

2 Grundlagen der Gitter-QCD und -hadronspektroskopie

In diesem Kapitel werden einige Elemente der QCD und der Gitter-QCD kurz wiederholt, die zum Verständnis der Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] wesentlich sind. Damit soll unter anderem die in dieser Zusammenfassung verwendete Notation eingeführt werden. Ausführliche Erklärungen, Herleitungen und technische Details können z.B. in den Lehrbüchern [17, 18, 19, 20, 21, 22, 23] oder in den Vorlesungsaufzeichnungen [24] nachgelesen werden.

2.1 Die QCD-Wirkung

Die Freiheitsgrade der QCD sind die sechs Quarkfelder

$$\psi^{(q)}(x) \quad \equiv \quad \psi^{(q)}(\mathbf{r},t) \quad , \quad q \quad \in \quad \{u,d,s,c,t,b\} \tag{1}$$

(up (u), down (d), strange (s), charm (c), bottom (b) und top (t) bezeichnet man als Flavors) und das Gluonfeld

$$A_\mu(x) \quad \equiv \quad A_\mu(\mathbf{r},t). \tag{2}$$

Diese Felder setzen sich aus einer Reihe von Komponenten zusammen, nummeriert durch verschiedene Indizes.

Die Quarkfelder $\psi_A^{a,(q)}$ besitzen einen Farbindex $a = 1,\ldots,3$ (Quarks tragen Farbladung, die in drei Sorten auftritt, bezeichnet als rot, grün und blau). Da Quarks Spin-1/2-Fermionen sind, tragen sie auch einen Spinindex $A = 1,\ldots,4$ (die vier Komponenten beschreiben Spin "up" und "down", sowie Teilchen und Antiteilchen). Außerdem existiert der bereits angesprochene Flavorindex $q = u,d,s,c,b,t$. Quarks verschiedener Flavors unterscheiden sich in ihrer Masse, $m_u \approx 2.3\,\mathrm{MeV}$, $m_d \approx 4.8\,\mathrm{MeV}$, $m_s \approx 95\,\mathrm{MeV}$, $m_c \approx 1.28\,\mathrm{GeV}$, $m_b \approx 4.18\,\mathrm{GeV}$, $m_t \approx 173\,\mathrm{GeV}$[1] [16].

Das Gluonfeld A_μ^a besitzt ebenfalls einen Farbindex $a = 1,\ldots,8$. Häufig ist es zweckmäßig, das Gluonfeld als Matrix $A_\mu = A_\mu^a \lambda^a/2$ zu schreiben, wobei λ^a die acht 3×3-Gell-Mann-Matrizen bezeichnen,

$$\lambda^1 \quad = \quad \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \lambda^2 \quad = \quad \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ +i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \ldots \tag{3}$$

Die drei Zeilen und Spalten der Gell-Mann-Matrizen entsprechen den Quarkfarben rot, grün und blau bzw. den Farbindizes $a = 1,\ldots,3$ der Quarkfelder. Z.B. vermitteln Gluonen, die Anregungen der Feldkomponente A_μ^1 entsprechen, Kräfte zwischen roten und grünen Quarks. Da Gluonen Spin-1-Teilchen sind, gibt es auch einen Lorentz-Index $\mu = 0,\ldots,3$.

Der Quarkanteil der QCD-Wirkung[2] hängt sowohl von den Quarkfeldern und dem Gluonfeld

[1] In dieser Zusammenfassung werden durchgehend natürliche Einheiten verwendet, d.h. $\hbar = c = 1$.
[2] In dieser Zusammenfassung wird ausschließlich die Euklidische Version der QCD verwendet.

ab,

$$\begin{aligned} S_{\text{quark}}[\psi, \bar{\psi}, A] &= \int d^4x \sum_f \bar{\psi}^{(q)} \Big(\gamma_\mu D_\mu + m_q\Big) \psi^{(q)} = \\ &= \int d^4x \sum_f \bar{\psi}^{a,(q)}_A \Big(\gamma_{\mu,AB} \Big(\delta^{ab} \partial_\mu - ig A^c_\mu \lambda^{c,ab}/2\Big) + \delta^{ab} \delta_{AB} m_q\Big) \psi^{b,(q)}_B . \end{aligned} \tag{4}$$

$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_0$, $D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu$ bezeichnet die kovariante Ableitung und g die QCD-Kopplungskonstante. γ_μ sind die bekannten 4×4-Dirac-Matrizen, die z.B. in der Standarddarstellung

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad , \quad \gamma_j = \begin{pmatrix} 0 & +i\sigma_j \\ -i\sigma_j & 0 \end{pmatrix} , \tag{5}$$

lauten mit den Pauli-Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \tag{6}$$

Der Gluonanteil der QCD-Wirkung hängt nur vom Gluonfeld ab,

$$S_{\text{gluon}}[A] = \frac{1}{4} \int d^4x \, F^a_{\mu\nu} F^a_{\mu\nu} \quad , \quad F^a_{\mu\nu} = \partial_\mu A^a_\nu - \partial_\nu A^a_\mu + g f^{abc} A^b_\mu A^c_\nu \tag{7}$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$\begin{aligned} S_{\text{gluon}}[A] &= \frac{1}{2} \int d^4x \, \mathrm{Tr}\Big(F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}\Big) \quad , \\ F_{\mu\nu} &= F^a_{\mu\nu} \frac{\lambda^a}{2} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu] \end{aligned} \tag{8}$$

(f^{abc} sind die antisymmetrischen Strukturkonstanten der Gruppe SU(3),
$[\lambda^a/2, \lambda^b/2] = i f^{abc} \lambda^c/2$).

Die vollständige QCD-Wirkung entspricht der Summe der beiden genannten Anteile,

$$S_{\text{QCD}}[\psi, \bar{\psi}, A] = S_{\text{quark}}[\psi, \bar{\psi}, A] + S_{\text{gluon}}[A]. \tag{9}$$

2.2 Quantisierung der QCD

Die zur numerischen Umsetzung mit Hilfe von Gitter-QCD geeignete Methode der Quantisierung der QCD ist der Pfadintegralformalismus. Vakuumerwartungswerte von zeitgeordneten Produkten von Feldoperatoren können wie folgt durch Pfadintegrale ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \langle \Omega | T\Big\{\mathcal{O}_1(t_1) \ldots \mathcal{O}_n(t_n)\Big\} | \Omega \rangle &= \frac{1}{Z} \int D\psi \, D\bar{\psi} \int DA \, \mathcal{O}_1(t_1) \ldots \mathcal{O}_n(t_n) e^{-S_{\text{QCD}}[\psi, \bar{\psi}, A]} \quad , \\ Z &= \int D\psi \, D\bar{\psi} \int DA \, e^{-S_{\text{QCD}}[\psi, \bar{\psi}, A]}, \end{aligned} \tag{10}$$

wobei

- $|\Omega\rangle$ der QCD-Grundzustand, also das Vakuum ist,
- $\int D\psi\, D\bar{\psi}$ die Integration über alle denkbaren Quarkfeldkonfigurationen $\psi^{(q)}$ beschreibt,
- $\int DA$ die Integration über alle denkbaren Gluonfeldkonfigurationen A_μ beschreibt,
- $\mathcal{O}_j(t_j)$ ein aus den Quarkfeldern $\psi^{(q)}(\mathbf{r})$ und $\bar{\psi}^{(q)}(\mathbf{r})$ zum Zeitpunkt t_j und dem Gluonfeld $A_\mu(\mathbf{r})$ zum Zeitpunkt t_j zusammengesetzter Operator ist,
- $T\{\ldots\}$ Zeitordnung bezeichnet, d.h. die Operatoren innerhalb $\{\ldots\}$ so umzuordnen sind, dass sie von links nach rechts gemäß ihren Zeitargumenten absteigend sortiert sind.

Zur Bestimmung von Hadronmassen werden Korrelationsfunktionen von Hadron-Erzeugungsoperatoren benötigt. Als Beispiel kann hier die für die Berechnung der Pionmasse erforderliche Korrelationsfunktion

$$\langle\Omega|\Big(\mathcal{O}_\pi(t_2)\Big)^\dagger \mathcal{O}_\pi(t_1)|\Omega\rangle \quad = \quad \frac{1}{Z}\int D\psi\, D\bar{\psi} \int DA \Big(\mathcal{O}_\pi(t_2)\Big)^\dagger \mathcal{O}_\pi(t_1) e^{-S_{\mathrm{QCD}}[\psi,\bar{\psi},A]} \tag{11}$$

mit dem Pion-Erzeugungsoperator

$$\mathcal{O}_\pi(t) \quad \equiv \quad \int d^3r\, \bar{u}(\mathbf{r},t)\gamma_5 d(\mathbf{r},t) \tag{12}$$

($\gamma_5 = \gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$) genannt werden.

2.3 Gitter-QCD: Numerische Berechnung von QCD-Pfadintegralen

QCD-Pfadintegrale (10) analytisch zu lösen scheint mit momentan bekannten Techniken der Mathematik nicht möglich zu sein. QCD-Pfadintegrale eignen sich allerdings zur numerischen Auswertung auf Hochleistungscomputersystemen. Die dazu erforderlichen Techniken werden als Gitter-QCD bezeichnet.

Die grundlegenden Ideen der Gitter-QCD sind die Folgenden:

- Die Raumzeit wird durch ein kubisches Gitter diskretisiert, $x_\mu \in \mathbb{R}^4 \quad \rightarrow \quad x_\mu = an_\mu$, $n_\mu \in \mathbb{Z}^4$ (a bezeichnet den Gitterabstand; siehe Abbildung 1).
- Die Raumzeit wird in Form eines 4-dimensionalen Torus periodisiert. Die Ausdehnung ist $L = aN_L$, wobei N_L die Anzahl der Gitterplätze in jeder Raumzeitrichtung bezeichnet, also insgesamt N_L^4 Gitterplätze. Folglich gilt $x_\mu \equiv x_\mu + Le_\mu^{(\nu)}$ ($e^{(\nu)}$ ist der Einheitsvektor in ν-Richtung).
- Die im Kontinuum unendliche Anzahl der Freiheitsgrade einer Quarkfeldkomponente $\psi_A^{b,(q)}$, parametrisiert durch ein kontinuierliches Raumzeitargument, ist nun auf die endliche Anzahl N_L^4 reduziert, eine Feldvariable $\psi_A^{b,(q)}(an_\mu)$ pro Gitterpunkt n_μ.

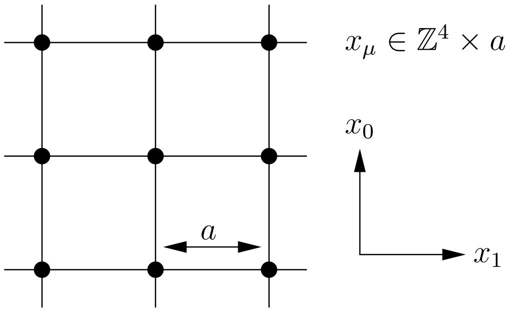

Abbildung 1: Kubische Gitterdiskretisierung der Raumzeit.

- Um die in der QCD wichtige Eichsymmetrie zu erhalten, wird nach der Diskretisierung nicht das Gluonfeld an den Gitterpunkten betrachtet, sondern sogenannte Links oder Linkvariablen $U_\nu(an_\mu) \in \mathrm{SU}(3)$, die benachbarte Gitterpunkte n_μ und $n_\mu + e_\mu^{(\nu)}$ verbinden. Im Kontinuum entsprechen diese Links den bekannten Paralleltransportern,

$$U_\nu(an_\mu) \quad \rightarrow \quad P \exp\bigg(- ig \int_{an_\mu}^{a(n_\mu + e_\mu^{(\nu)})} dz_\rho \, A_\rho(z) \bigg), \tag{13}$$

die vom Gluonfeld abhängen.

- Es resultiert ein endlich-dimensionales Gitter-QCD-Pfadintegral

$$\begin{aligned} \int D\psi \, D\bar{\psi} \int DA \quad \rightarrow \\ \rightarrow \prod_{n_\mu} \bigg(\prod_{A,b,q} \int d\psi_A^{b,(q)}(an_\mu) \, d\bar{\psi}_A^{b,(q)}(an_\mu) \bigg) \bigg(\prod_\nu \int dU_\nu(an_\mu) \bigg), \end{aligned} \tag{14}$$

das numerisch gelöst werden kann.

- Sämtliche Kontinuumsausdrücke, die Quarkfelder und das Gluonfeld enthalten, müssen durch entsprechende Gitterausdrücke approximiert werden, die sich ausschließlich aus den Quarkfeldern an den Gitterpunkten $\psi^{(q)}(an_\mu)$ und den Linkvariablen $U_\nu(an_\mu)$ zusammensetzen. Eine solche Diskretisierung ist nicht eindeutig. Gitterausdrücke müssen lediglich im Limes $a \rightarrow 0$ in die entsprechenden Kontinuumsausdrücke übergehen. Als Beispiel kann die sogenannte Wilson-Plaketten-Wirkung genannt werden, die eine Diskretisierung des Gluonanteils der QCD-Wirkung ist,

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{gluon}}^{\mathrm{lattice,WP}}(U) \quad &= \quad \frac{1}{g^2} \sum_{n_\mu} \sum_{\rho,\sigma} \mathrm{Tr}\bigg(1 - \frac{1}{2}\Big(U_{\rho\sigma}(an_\mu) + U_{\rho\sigma}^\dagger(an_\mu) \Big) \bigg) \quad \stackrel{a \rightarrow 0}{=} \\ \stackrel{a \rightarrow 0}{=} \quad S_{\mathrm{gluon}}[A] \quad &= \quad \frac{1}{2} \int d^4x \, \mathrm{Tr}\Big(F_{\rho\sigma} F_{\rho\sigma} \Big) \end{aligned} \tag{15}$$

mit der Plakette

$$U_{\rho\sigma}(an_\mu) \quad \equiv \quad U_\rho(an_\mu) U_\sigma(a(n_\mu + e_\mu^{(\rho)})) U_\rho^\dagger(a(n_\mu + e_\mu^{(\sigma)})) U_\sigma^\dagger(an_\mu) \tag{16}$$

(für eine Herleitung dieser Beziehung siehe z.B. [21]).

Wird der Gitterabstand a klein und die Gitterausdehnung L gleichzeitig groß gewählt, weichen Gitter-QCD-Ergebnisse von QCD-Ergebnissen kaum ab. Die kleinen Differenzen aufgrund von Diskretisierungs- und Periodizitätsfehlern können quantifiziert oder sogar mit Hilfe geeigneter Extrapolationen entfernt werden, wenn Gitter-QCD-Rechnungen für verschiedene Werte von a und von L ausgeführt werden.

Die Dimensionalität eines typischen Gitter-QCD-Pfadintegrals kann leicht abgeschätzt werden:

- $n_\mu \in \{0, 1, \ldots, N_L - 1\}^4$: Z.B. für $N_L = 32$, $32^4 \approx 10^6$ Gitterplätze (eine typische Anzahl von Gitterplätzen für gegenwärtige Rechnungen).
- $\psi_A^{b,(q)}$: 24 Quarkfreiheitsgrade für jeden Quarkflavor (Real- und Imaginärteil von ψ, Farbe $b = 1, \ldots, 3$, Spin $A = 1, \ldots, 4$); ≥ 2 Flavors, d.h. mindestens u- und d-Quarks, oft auch s- und c-Quarks.
- U_ν (das Gitteräquivalent zu A_ν^a): 32 Gluonfreiheitsgrade (Farbe $a = 1, \ldots, 8$, Spin $\nu = 0, \ldots, 3$).
- Insgesamt ein $32^4 \times (2 \times 24 + 32) \approx 83 \times 10^6$-dimensionales Integral.

Offensichtlich erfordern solche hochdimensionalen Integrale ausgefeilte Integrationsalgorithmen sowie Hochleistungscomputersysteme. Man verwendet stochastische Integrationsverfahren, sogenannte Monte-Carlo-Techniken, die mit Hilfe von Zufallsexperimenten eine kleine aber repräsentative Menge von Eichfeldkonfigurationen (beschrieben durch Angabe sämtlicher Linkvariablen) generieren. Repräsentativ heißt in diesem Zusammenhang gemäß dem Integrationsmaß und dem exponentiellen Gewichtungsfaktor im Pfadintegral zufällig verteilt. Liegt eine solche repräsentative Menge von Eichfeldkonfigurationen erst einmal vor, können Vakuumerwartungswerte einfach dadurch bestimmt werden, dass die entsprechende Größe auf jeder der Eichfeldkonfigurationen ausgewertet wird und die Ergebnisse gemittelt werden.

2.4 Berechnung von Hadron-Massen

2.4.1 Klassifikation von Hadronen

Hadronen und ihre Eigenschaften, wie z.B. Massen und Zerfallsraten, werden von der Particle-Data-Group zusammengestellt und regelmäßig aktualisiert [16]. Hadronische Zustände werden im Wesentlichen durch QCD-Quantenzahlen klassifiziert:

- Gesamtspin bzw. -drehimpuls J (geradzahlig für Bosonen, $J = 0, 1, 2, \ldots$; ungeradzahlig für Fermionen $J = 1/2, 3/2, 5/2, \ldots$).
- Parität (Raumspiegelung) $P = \pm 1$.
- Ladungskonjugation (Vertauschen von Quarks und Antiquarks) $C = \pm 1$ (nur für flavorneutrale Mesonen).
- Flavorquantenzahlen:
  Isospin: I; $I_z = +1/2$ (u), $I_z = -1/2$ (d).
  Strangeness: $S = -1$ (s), $S = +1$ $(\bar{s})$.

Charm: $C' = +1$ (c), $C' = -1$ ($\bar{c}$).
Bottomness: $B' = -1$ (b), $B' = +1$ ($\bar{b}$).
Topness: $T = +1$ (t), $T = -1$ ($\bar{t}$).

- Da Elektromagnetismus nicht Teil der QCD ist, wird elektrische Ladung in dieser Zusammenfassung nicht diskutiert oder berücksichtigt.

Quantenzahlen entsprechen Eigenwerten von Operatoren, die mit dem QCD-Hamilton-Operator vertauschen. Diese Operatoren generieren Symmetrietransformationen, die hadronische Zustände mit entsprechenden Quantenzahlen unverändert lassen. Typische Beispiele sind $[H, J^2] = 0$ (QCD ist rotationsinvariant) oder $[H, P] = 0$ (QCD ist symmetrisch unter Raumspiegelungen).

Ein im Rahmen der QCD stabiles Hadron mit Quantenzahlen $I(J^P)$ bzw. $I(J^{PC})$ (und S, C', B', T, die oft oft nicht explizit genannt werden, da sie aus dem jeweiligen Zusammenhang hervorgehen) entspricht einem tiefliegenden Eigenzustand des QCD-Hamilton-Operators mit diesen Quantenzahlen und seine Masse dem entsprechenden Eigenwert abzüglich der Energie des Vakuums E_Ω. Beispiele für solche stabilen Hadronen sind nicht-flavorneutrale pseudoskalare Mesonen charakterisiert durch $J^P = 0^-$ (Pion, Kaon, D-Meson, D_s-Meson, B-Meson, B_s-Meson) oder auch das Proton und das Neutron. Für das Pion $|\pi\rangle$, charakterisiert durch $I(J^P) = 1(0^-)$, gilt z.B.

- $\hat{I}^2|\pi\rangle = I(I+1)|\pi\rangle = 2|\pi\rangle$,
- $\hat{J}^2|\pi\rangle = J(J+1)|\pi\rangle = 0|\pi\rangle$,
- $\hat{P}|\pi\rangle = P|\pi\rangle = -|\pi\rangle$,

für seine Masse m_π

- $\hat{H}|\pi\rangle = E|\pi\rangle = (m_\pi + E_\Omega)|\pi\rangle \quad \rightarrow \quad m_\pi = E - E_\Omega$

(in diesen Gleichungen wurden Operatoren durch Dächer ˆ kenntlich gemacht, um sie von Quantenzahlen abzuheben).

Instabile Hadronen, also Hadronen, die nach kurzer Zeit in andere Hadronen zerfallen, z.B. $\kappa \equiv K_0^*(800) \rightarrow K + \pi$ mit $I(J^P) = 1/2(0^+)$, entsprechen dagegen nicht Eigenzuständen des QCD-Hamilton-Operators. Um solche sogenannten Resonanzen zu studieren, d.h. um ihre Massen und Zerfallsbreiten zu berechnen, sind sehr aufwändige numerische Rechnungen erforderlich (siehe Abschnitt 2.4.3).

Es sei außerdem angemerkt, dass Quantenzahlen ein Hadron nicht eindeutig klassifizieren. Z.B. existieren mehrere Versionen des Pions mit identischen Quantenzahlen: Sowohl der Grundzustand π^0 ($m_\pi \approx 135\,\mathrm{MeV}$) als auch die angeregten Zustände $\pi(1300)$ ($m_{\pi(1300)} \approx 1300\,\mathrm{MeV}$) und $\pi(1800)$ ($m_{\pi(1800)} \approx 1812\,\mathrm{MeV}$) werden durch $I(J^P) = 1(0^-)$ beschrieben.

2.4.2 Berechnung von Massen stabiler Hadronen

Um die Masse m_H eines stabilen Hadrons H, beschrieben durch die Quantenzahlen $I(J^P)$, ..., mit Hilfe von Gitter-QCD zu berechnen, sind zwei wesentliche Schritte auszuführen:

(1) Definition eines geeigneten Hadron-Erzeugungsoperators.

(2) Gitter-QCD-Berechnung der Korrelationsfunktion des Hadron-Erzeugungsoperators $\mathcal{O}_H$, Ablesen der Hadronmasse m_H an Hand des asymptotischen exponentiellen Abfalls der Korrelationsfunktion.

Hadron-Erzeugungsoperatoren

Ein Hadron-Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_H$ ist ein Operator, der sich aus den Quarkfeldern und dem Gluonfeld zusammensetzt. Wird er auf das Vakuum $|\Omega\rangle$ angewendet, generiert er einen sogenannten Testzustand $|\phi\rangle \equiv \mathcal{O}_H|\Omega\rangle$ mit den Quantenzahlen des Hadrons H, d.h. einen Zustand mit $I(J^P)$, ... Der Testzustand sollte dem Hadron ähnlich sein, also $|\phi\rangle \approx |H\rangle$.

Im Normalfall ist es nicht möglich, einen Hadron-Erzeugungsoperator zu konstruieren, der genau das Hadron H erzeugt, also für den $|\phi\rangle = |H\rangle$ gilt. Stattdessen handelt es sich bei dem Testzustand $|\phi\rangle$ in der Regel um eine lineare Superposition sämtlicher Eigenzustände des QCD-Hamilton-Operators mit Quantenzahlen $I(J^P)$, ... (auch von Mehrhadronzuständen),

$$|\phi\rangle \quad = \quad \mathcal{O}_H|\Omega\rangle \quad = \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n |I(J^P),\ldots;n\rangle \tag{17}$$

(im Folgenden werden Zustandsbezeichnungen gemäß $|n\rangle \equiv |I(J^P),\ldots;n\rangle$ abgekürzt; außerdem, sollen die Zustände ihren Energien entsprechend geordnet sein, d.h. aufsteigende Indizes entsprechen ansteigenden Energien bzw. Hadronmassen, $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \ldots$). Der Koeffizient $a_n \equiv \langle n|\mathcal{O}_H|\Omega\rangle$ beschreibt den Überlapp des Testzustands und des Energieeigenzustands $|n\rangle$. Sein Absolutbetrag ist ein Maß dafür, in welchem Ausmaß der Hadron-Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_H$ den hadronischen Zustand $|n\rangle$ anregt. Häufig ist man am leichtesten hadronischen Zustand in dem durch die Quantenzahlen $I(J^P)$, ... charakterisierten Sektor interessiert, d.h. $|H\rangle = |0\rangle$.

Beispiel: Pion, Quantenzahlen $I(J^P) = 1(0^-)$

Das Pion ist der Grundzustand im $1(0^-)$-Sektor:

$$|H\rangle \quad = \quad |0\rangle \quad = \quad |\pi\rangle. \tag{18}$$

In einer vereinfachten Form der QCD, in der Quark-Antiquark-Paarerzeugung nicht stattfinden kann[3], sind die angeregten Zustände im $1(0^-)$-Sektor die oben genannten angeregten Versionen des Pions,

$$|n\rangle \quad \in \quad \Big\{|\pi(1300)\rangle \ , \ |\pi(1800)\rangle \ , \ \ldots\Big\} \quad , \quad n \geq 1. \tag{19}$$

In näherungsfreier QCD, in der Quark-Antiquark-Paarerzeugung stattfinden kann, sind typischer Weise bereits viele der tiefliegenden Energieeigenzustände Mehrhadronzustände. Z.B. ist im

[3]Gitter-QCD-Rechnungen in dieser Näherung (der sogenannten quenched Näherung) benötigen weit weniger Rechenzeit und sind daher vor allem in der älteren Literatur häufig zu finden.

Pionsektor der erste angeregte Zustand ein 3-Pionzustand,

$$|n\rangle \quad \in \quad \Big\{ |\pi + \pi + \pi\rangle \; , \; \ldots \Big\} \quad , \quad n \geq 1. \tag{20}$$

Hadron-Erzeugungsoperatoren sind keineswegs eindeutig. Ein guter Hadron-Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_H$ regt im wesentlichen das Hadron H an, weitere Zustände jedoch nur in geringem Maß. Mathematisch wird dies im Fall $|H\rangle = |0\rangle$ durch $|a_n|/|a_0| \approx 0$, $n \geq 1$ beschrieben.

Ein typischer Hadron-Erzeugungsoperator für das Pion ist

$$\mathcal{O}_\pi \quad \equiv \quad \int d^3r \, \bar{u}(\mathbf{r}) \gamma_5 d(\mathbf{r}). \tag{21}$$

- Die Flavorkombination $\bar{u}(\mathbf{r}) d(\mathbf{r})$ realisiert $I = 1$.
- γ_5 realisiert $J^P = 0^-$.
- $\int d^3r$ realisiert Gesamtimpuls $\mathbf{p} = 0$ (ohne $\int d^3r$ würden Hadronen mit nicht-verschwindendem Impuls in (17), (19) und (20) auftreten).

Eine dem Pion-Erzeugungsoperator (21) entsprechende Gitterversion ergibt sich geradlinig und lautet

$$\mathcal{O}_\pi \quad \equiv \quad \sum_{\mathbf{n}} \bar{u}(a\mathbf{n}) \gamma_5 d(a\mathbf{n}). \tag{22}$$

Um die Lesbarkeit dieser Zusammenfassung zu erleichtern, werden im weiteren Verlauf überwiegend Kontinuumsausdrücke verwendet. Die entsprechenden Gitterversionen können in den Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] nachgeschlagen werden.

Korrelationsfunktionen von Hadron-Erzeugungsoperatoren

Der Vakuumerwartungswert eines Hadron-Erzeugungsoperators $\mathcal{O}_H$ zum Zeitpunkt t_1 und seiner hermitesch konjugierten Version $\mathcal{O}_H^\dagger$ zum Zeitpunkt t_2 wird als Korrelationsfunktion bezeichnet:

$$C_H(\Delta t) \quad \equiv \quad \langle \Omega | \mathcal{O}_H^\dagger(t_2) \mathcal{O}_H(t_1) | \Omega \rangle \quad = \quad \frac{1}{Z} \int D\psi \, D\bar{\psi} \int DA \, \mathcal{O}_H^\dagger(t_2) \mathcal{O}_H(t_1) e^{-S_{\mathrm{QCD}}[\psi,\bar{\psi},A]}, \tag{23}$$

wobei $\Delta t = t_2 - t_1$.

Wie die folgende Rechnung zeigt, wird eine Korrelationsfunktion für große Zeitseparationen Δt vom Grundzustand des vom Hadron-Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_H$ angeregten Sektors dominiert:

$$\begin{aligned} C_H(\Delta t) \quad &= \quad \sum_{n=0}^{\infty} \langle \Omega | \mathcal{O}_H^\dagger(t_2) | n \rangle \langle n | \mathcal{O}_H(t_1) | \Omega \rangle \quad = \\ &= \quad \sum_{n=0}^{\infty} \langle \Omega | e^{+H\Delta t} \mathcal{O}_H^\dagger(t_1) e^{-H\Delta t} | n \rangle \langle n | \mathcal{O}_H(t_1) | \Omega \rangle \quad = \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\Big|\langle n|\mathcal{O}_H|\Omega\rangle\Big|^2}_{=|a_n|^2} \exp\Big(- \underbrace{(E_n - E_\Omega)}_{=m_n} \Delta t\Big) \quad \stackrel{\Delta t \to \infty}{=} \quad |a_0|^2 e^{-m_0 \Delta t}, \tag{24}$$

wobei (17) benutzt wurde.

Um die dem Grundzustand entsprechende Hadronmasse $m_H = m_0$ zu bestimmen, kann man die Funktion $Ae^{-m_H \Delta t}$ mit den Parametern A und m_H an die Gitter-QCD-Ergebnisse für die Korrelationsfunktion $C_H(\Delta t)$ im Bereich hinreichend großer Δt fitten. Ein Beispiel, die Bestimmung der Masse des leichtesten statisch-leichten Mesons (eine Approximation eines B-Mesons; siehe auch Abschnitt 4.1.1) ist in Abbildung 2 (links) zu sehen. Für $\Delta t/a \geq 6$ (blaue Punkte) entspricht die berechnete Korrelationsfunktion einer abfallenden Exponentialfunktion und die entsprechende statisch-leichte Mesonmasse m_H kann durch einen Fit (orange Kurve) zuverlässig bestimmt werden.

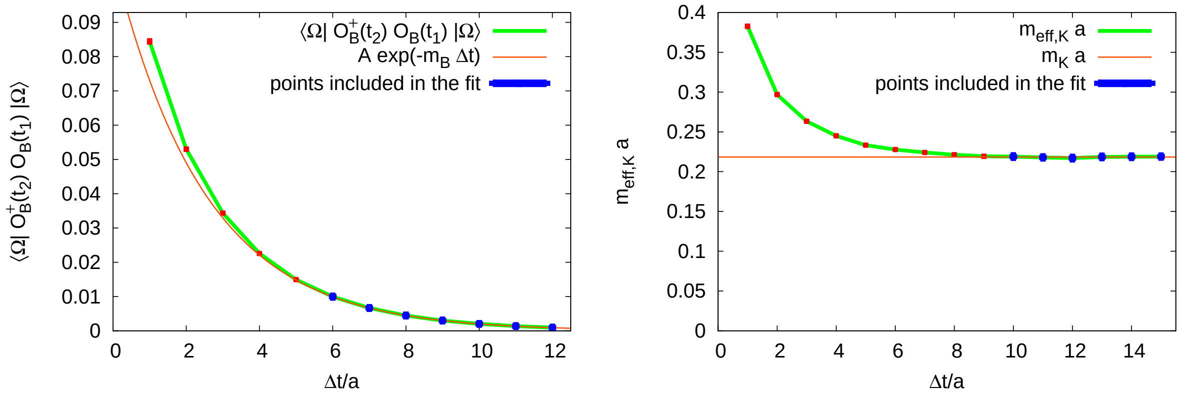

Abbildung 2: (entstammt [24]) **(links)** Korrelationsfunktion eines statisch-leichten Meson-Erzeugungsoperators als Funktion der Zeitseparation $\Delta t/a$. **(rechts)** Effektive Masse des Kaons als Funktion der Zeitseparation $\Delta t/a$.

Häufig wird die Hadronmasse m_H auch mit Hilfe einer abgeleiteten Größe, der sogenannten effektiven Masse, bestimmt,

$$m_{\mathrm{eff},H}(\Delta t) \quad \equiv \quad \frac{1}{a} \log\left(\frac{C_H(\Delta t)}{C_H(\Delta t + a)}\right). \tag{25}$$

Einsetzen von (24) führt auf

$$\begin{aligned} m_{\mathrm{eff},H}(\Delta t) \quad &= \quad \frac{1}{a} \log\left(\frac{\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 e^{-m_n \Delta t}}{\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 e^{-m_n (\Delta t + a)}}\right) \quad = \\ &= \quad \frac{1}{a} \log\left(e^{+m_H a} \underbrace{\frac{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|a_n|^2}{|a_0|^2} e^{-(m_n - m_H)\Delta t}}{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|a_n|^2}{|a_0|^2} e^{-(m_n - m_H)(\Delta t + a)}}}_{=1+\mathcal{O}(e^{-(m_1 - m_H)\Delta t})}\right) \quad \stackrel{\Delta t \to \infty}{=} \quad m_H. \end{aligned} \tag{26}$$

Die effektive Masse wird im Limes $\Delta t \to \infty$ zu einer Konstante, die der Hadronmasse $m_H = m_0$ entspricht. Um m_H zu bestimmen, muss lediglich eine Konstante an die Gitter-QCD-Ergebnisse für die effektive Masse $m_{\mathrm{eff},H}(\Delta t)$ im Bereich hinreichend großer Δt gefittet werden. Ein Beispiel, die effektive Masse des Kaons, ist in Abbildung 2 (rechts) zu sehen (siehe auch Abschnitt 4.3). Für $\Delta t/a \geq 10$ kann die effektive Masse mit der Konstante m_K gefittet und so die Masse des Kaons bestimmt werden (blaue Punkte und orange Linie).

Streng genommen sind die Gleichungen (24) bis (26) nur dann korrekt, wenn die Zeitrichtung nicht periodisch, sondern unendlich ausgedehnt ist. Für ein endliches periodisches Raumzeitgitter (Ausdehnung L), sind die entsprechenden Ausdrücke komplizierter. Z.B. ist (24) durch $C_H(\Delta t) \stackrel{\Delta t \approx L/2}{\approx} |a_0|^2(e^{-m_0 \Delta t} + e^{-m_0(L-\Delta t)})$ zu ersetzen. Details hierzu können in [25] gefunden werden.

2.4.3 Instabile Hadronen (Resonanzen)

Instabile Hadronen werden nicht nur durch Massen, sondern auch durch Zerfallsbreiten charakterisiert. Solche Resonanzparameter mit Hilfe von Gitter-QCD zu berechnen, ist sehr schwierig und rechenzeitaufwändig.

In einem ersten Schritt müssen dafür die Massen tiefliegender stabiler Mehrhadronzustände mit den Quantenzahlen des instabilen Hadrons bestimmt werden. Im bereits genannten Beispiel von $\kappa \equiv K_0^*(800)$ sind dies die 2-Hadronzustände $K + \pi$. Da es sich dabei um Eigenzustände des QCD-Hamilton-Operators handelt, kann ähnlich wie in Abschnitt 2.4.2 vorgegangen werden. Diese Massenberechnungen von Mehrhadronzuständen müssen für eine Reihe unterschiedlich großer räumlicher Volumina wiederholt werden. Aus der so erhaltenen Volumenabhängigkeit des Spektrums können dann in einem zweiten Schritt Rückschlüsse auf die Masse und Breite von z.B. κ gezogen werden.

Theoretische Grundlagen zur Behandlung instabiler Hadronen finden sich in [26, 27, 28]. Eine moderne Gitter-QCD-Studie von κ ist [29].

2.4.4 Korrelationsmatrizen und das generalisierte Eigenwertproblem

In vielen Fällen ist es zweckmäßig nicht nur die Korrelationsfunktion eines einzelnen Hadron-Erzeugungsoperators, sondern die Korrelationsmatrix einer Reihe solcher Operatoren $\mathcal{O}_{H,1}, \ldots, \mathcal{O}_{H,N}$ zu betrachten,

$$C_{H,jk}(\Delta t) \equiv \langle \Omega | \mathcal{O}_{H,j}^\dagger(t_2) \mathcal{O}_{H,k}(t_1) | \Omega \rangle. \qquad (27)$$

Hierbei ist es wichtig, dass die Hadron-Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}_{H,j}$ Testzustände $\mathcal{O}_{H,j}|\Omega\rangle$ mit identischen Quantenzahlen generieren. Davon abgesehen unterscheiden sie sich in der Regel erheblich.

Ein gängiger Weg, Hadronmassen aus einer Korrelationsmatrix zu extrahieren, besteht darin, das generalisierte Eigenwertproblem

$$C_H(\Delta t)\mathbf{v}^{(n)}(\Delta t, t_0) = \lambda^{(n)}(\Delta t, t_0) C_H(t_0) \mathbf{v}^{(n)}(\Delta t, t_0) \qquad (28)$$

zu lösen. Daraus ergeben sich effektive Massen gemäß

$$m^{(n)}_{\mathrm{eff},H}(\Delta t, t_0) \quad \equiv \quad \frac{1}{a} \log \left(\frac{\lambda^{(n)}(\Delta t, t_0)}{\lambda^{(n)}(\Delta t + a, t_0)} \right). \tag{29}$$

t_0 ist ein freier Parameter, der in der Praxis nicht zu groß gewählt werden sollte, z.B. $t_0 = a$. Es lässt sich zeigen, dass diese effektiven Massen, genau wie (25), für hinreichend große Zeitseparationen Δt Plateaus aufweisen. $m^{(0)}_{\mathrm{eff},H}$ liefert dabei den Grundzustand m_0 und $m^{(1)}_{\mathrm{eff},H}$, $m^{(2)}_{\mathrm{eff},H}$, ... die angeregten Zustände m_1, m_2, ... im entsprechenden Sektor. Durch Berechnen einer Korrelationsmatrix und anschließendes Lösen des generalisierten Eigenwertproblems (28) lassen sich also auch die Massen radial angeregter Hadronen oder angeregter hadronischer Zustände bestimmen.

Die über (28) berechneten Eigenvektoren enthalten außerdem wertvolle Informationen über die Struktur der untersuchten Energieeigenzustände. Die Beträge der Komponenten von $v^{(n)}_j(\Delta t, t_0)$ stellen ein Maß dafür da, wie stark der Hadron-Erzeugungsoperator $\mathcal{O}_{H,j}$ den n-ten extrahierten Energieeigenzustand angeregt hat. Verwendet man z.B. einen Quark-Antiquark-Erzeugungsoperator ($q\bar{q}$) und einen 4-Quark-Erzeugungsoperator ($qq\bar{q}\bar{q}$) mit gleichen Quantenzahlen in einer 2×2-Korrelationsmatrix, würde $|v^{(0)}_{q\bar{q}}| \ll |v^{(0)}_{qq\bar{q}\bar{q}}|$ auf eine Tetraquarkstruktur des Grundzustands hinweisen. Umgekehrt würde $|v^{(0)}_{q\bar{q}}| \gg |v^{(0)}_{qq\bar{q}\bar{q}}|$ andeuten, dass es sich um einen gewöhnlichen Quark-Antiquark-Zustand handelt. Solche qualitativen Untersuchungen der Struktur von Hadronen finden sich insbesondere in Abschnitt 4.2.2 und in Kapitel 5.

Eine umfangreiche Diskussion des generalisierten Eigenwertproblems bietet z.B. [30].

3 Gitter-QCD-Setup

3.1 Die Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung

Für die in den folgenden Kapiteln zusammengefassten Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] wurde für den Quarkanteil der QCD-Wirkung fast ausschließlich die Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung verwendet (siehe [31] und Referenzen darin). Teilweise wurden 2 Seequarkflavors (u- und d-Quarks), teilweise auch 2+1+1 Seequarkflavors (zusätzlich noch s- und c-Quarks) verwendet. Der Gluonanteil der Wirkung ist entweder die Symanzik-Improved-Eichwirkung [32] (für 2 Seequarkflavors) oder die Iwasaki-Eichwirkung [33] (für 2+1+1 Seequarkflavors). Ein solches Gitter-QCD-Setup ist $\mathcal{O}(a)$-verbessert, d.h. Diskretisierungsfehler treten niemals linear, sondern höchstens quadratisch im kleinen Gitterabstand a auf. Diese $\mathcal{O}(a)$-Verbesserung ist eine wichtige Eigenschaft, wenn man mit Hilfe von Gitterrechnungen präzise QCD-Ergebnisse erzielen will.

Ein Nachteil der Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung besteht darin, dass Parität sowie Isospin, Strangeness und Charm bei endlichem Gitterabstand keine exakten, sondern nur approximative Symmetrien sind. Dies hat die unschöne Konsequenz, dass Sektoren mit $P = -$ und $P = +$ aber ansonsten gleichen Quantenzahlen zu einem gemeinsamen Sektor verschmelzen. Für Mesonen mit Gesamtspin $J = 0$ in einem solchen Sektor ist z.B. das pseudoskalare Meson der Grundzustand und der skalare Paritätspartner häufig der erste angeregte Zustand im kombinierten $P = \pm$-Sektor. Die Masse des sklaren Mesons muss also als Masse eines angeregten Zustands über eine Korrelationsmatrix und Lösen des zugehörigen generalisierten Eigenwertproblems extrahiert werden, wie in Abschnitt 2.4.4 skizziert. Dies ist technisch schwieriger und hat häufig größere statistische Fehler zur Folge, als eine analoge Gitter-QCD-Massenberechnung in einer paritätserhaltenden Formulierung. Ähnliches gilt für Isospin ($I = 0$ und $I = 1$ Sektoren verschmelzen z.B. ebenfalls) sowie für Strangeness und Charm (S und C' sind keine Quantenzahlen mehr, nur noch $S - C'$, d.h. ein s-Quark kann zu einem c-Quark werden und umgekehrt). Die Verletzung von Charm hat dramatische Folgen für die Bestimmung der D-Meson-Masse (siehe [9] und Abschnitt 4.3) und anderer Hadronen die c-Quarks enthalten.

Aufgrund dieser Schwierigkeiten verwendet man in der Regel eine Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung der Valenz-s- und -c-Quarks, die sich von der entsprechenden oben genannten Seequarkdiskretisierung unterscheidet (siehe z.B. [10]). Diese Valenzquarkdiskretisierung, die für Simulationen, d.h. für Seequarks ungeeignet ist, verletzt nach wie vor die Parität, erhält aber zumindest Strangeness und Charm. Nur bei Einsatz eines solchen Mixed-Action-Setups ist es möglich, Präzisionsrechnungen für D- und D_s-Mesonen und Charmonium-Zustände auszuführen, wie z.B. in [6, 7] (zusammengefasst in Abschnitt 4.2).

3.2 Parameter der verwendeten Eichfeldkonfigurationen

Die zur Berechnung von Vakuumerwartungswerten verwendeten Eichfeldkonfigurationen wurden von der European-Twisted-Mass-Collaboration (ETMC) erzeugt. Technische Details der 2-Flavor-Simulationen finden sich in [34, 35], der 2+1+1-Flavor-Simulationen in [8, 9].

Aus technischen Gründen wurde die u/d-Quarkmasse unphysikalisch schwer gewählt. Es wurden aber jeweils Eichfeldkonfigurationen für mehrere unterschiedliche Werte der u/d-Quarkmasse erzeugt, so dass Extrapolationen von Ergebnissen zum physikalischen Wert der u/d-Quarkmasse möglich sind. Die entsprechenden Pionmassen liegen etwa im Bereich $250\,\mathrm{MeV} \ldots 650\,\mathrm{MeV}$.

Des Weiteren liegen Eichfeldkonfigurationen für drei verschieden feine Gitterabstände der Größenordnung $0.05\,\mathrm{fm} \ldots 0.09\,\mathrm{fm}$ vor. Dies erlaubt eine Abschätzung der Diskretisierungsfehler bzw. eine Kontinuumsextrapolation.

Die Anzahl der Gitterplätze liegt zwischen $24^3 \times 48$ und $48^3 \times 96$, wobei für feine Gitterabstände und leichte Pionmassen mehr Gitterplätze verwendet wurden, um Finite-Volume-Effekte gering zu halten. Auch hier liegen für einige Gitterabstände und Pionmassen mehrere verschieden große Volumina vor, so dass Finite-Volume-Effekte quantitativ untersucht werden können.

Welche Eichfeldkonfigurationen konkret für welches Projekt verwendet wurden und in wie weit die u/d-Quarkmassen-, Gitterabstands- und Finite-Volume-Abhängigkeiten bei den entsprechenden Ergebnissen untersucht oder sogar durch Extrapolationen entfernt wurden, wird in den Zusammenfassungen der folgenden Kapitel nur in Einzelfällen diskutiert. Diese Informationen können den Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] selbst entnommen werden.

4 Hadronmassen, -zerfälle und -struktur mit $q\bar{q}$- und qqq-Hadron-Erzeugungsoperatoren

Die in diesem Kapitel zusammengefassten Untersuchungen wurden mit typischen Hadron-Erzeugungsoperatoren durchgeführt, die im Fall von Mesonen eine Quark-Antiquark- und im Fall von Baryonen eine 3-Quark-Struktur besitzen. Eine solche Vorgehensweise ist erfolgversprechend, wenn die untersuchten Hadronen auch eine solche $q\bar{q}$- bzw. qqq-Quarkstruktur aufweisen (also es sich z.B. nicht um Tetraquarks handelt) und sie gleichzeitig relativ stabil sind (also hadronische Zerfälle ausgeschlossen sind oder deren Effekte im Rahmen der statistischen Fehler vernachlässigbar sind; siehe hierzu auch die kurze Diskussion in Abschnitt 2.4.3).

4.1 B- und B_s-Mesonen (statisch-leichte Mesonen) und b-Baryonen (statisch-leichte Baryonen)

4.1.1 Spektrum von B- und B_s-Mesonen [1, 2]

Vorbemerkung:
Das in diesem Abschnitt zusammengefasste Projekt [1, 2] wird bewusst ausführlicher geschildert als alle weiteren diskutierten Projekte. Dies hat pädagogische Gründe und richtet sich vor allem an Leser, die kein fundiertes Wissen im Bereich der Gitter-QCD und -hadronspektroskopie mitbringen. Die umfangreichere, teilweise technische Darstellung soll die in Kapitel 2 grob skizzierten Gitter-QCD-Techniken anhand eines konkreten Beispiels ergänzen und damit besser erläutern.

B- und B_s-Mesonen bestehen aus einem schweren b-Antiquark und einem leichten u-, d- oder s-Quark, oder umgekehrt. Während die leichten Quarks mit den in Abschnitt 2.3 skizzierten Methoden behandelt werden können (konkret mit der in Abschnitt 3.1 diskutierten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung), ist für das b-Antiquark ein anderer Formalismus erforderlich. Der Grund hierfür ist, dass $am_b > 1$ für typischer Weise verfügbare Gitterabstände a (siehe Abschnitt 3.2), was wiederum zu sehr großen bzw. schwer kontrollierbaren Diskretisierungsfehlern führen würde (Diskretisierungsfehler treten in Potenzen von am_q auf). Eine Möglichkeit, b-Quarks im Rahmen der Gitter-QCD zu realisieren, ist die Heavy-Quark-Effective-Theory (HQET) [36, 37]. Die führende Ordnung entspricht dem statischen Limes, d.h. unendlich schweren b-Quarks, während höhere Ordnungen Korrekturen in Form einer Potenzreihe in $1/m_b$ liefern.

Im statischen Limes, der den Abschnitt 4.1 zusammengefassten Gitter-QCD-Rechnungen zugrunde liegt, ist der Spin des statischen Quarks irrelevant, d.h. er ist nicht Teil des QCD-Hamilton-Operators. Folglich ist die Masse eines statisch-leichten Mesons nur abhängig vom Spin und Bahndrehimpuls j der leichten Freiheitsgrade, dem leichten Quark und den Gluonen. Es ist daher üblich solche Mesonen mit den Quantenzahlen j^P zu charakterisieren, wobei j halbzahlig ist. Eine ebenfalls gängige, Quarkmodellen entstammende Notation ist $S \equiv (1/2)^-$, $P_- \equiv (1/2)^+$, $P_+ \equiv (3/2)^+$, $D_- \equiv (3/2)^-$, ...

Die verwendeten statisch-leichten B- und B_s-Meson-Erzeugungsoperatoren sind von der Form

$$\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(q)}}(\mathbf{r}) \quad \equiv \quad \bar{Q}(\mathbf{r}) \int d\hat{\mathbf{n}}\, U(\mathbf{r};\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}})\Gamma(\hat{\mathbf{n}})\psi^{(q)}(\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}}). \tag{30}$$

$\bar{Q}(\mathbf{r})$ beschreibt das statische Antiquark bei $\mathbf{r}$, $\int d\hat{\mathbf{n}}$ bezeichnet eine Integration über eine Einheitskugel, U ist ein gerader Paralleltransporter und $\psi^{(q)}(\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}})$, $q \in \{u, d, s\}$ erzeugt ein leichtes Quark bei $\mathbf{r} + d\hat{\mathbf{n}}$, also um den Abstand d versetzt zum Antiquark. Γ ist eine geeignete Kombination von Kugelflächenfunktionen und γ-Matrizen, die für definierte Quantenzahlen j^P sorgen. Die verwendeten Kombinationen Γ sind in Tabelle 1 aufgelistet. Gleichung (30) ist bildlich in Abbildung 3 dargestellt.

$\Gamma(\hat{\mathbf{n}})$	J^P	j^P	$\mathrm{O_h}$	Gitter-j^P	Notation
γ_5 , $\gamma_5\gamma_j\hat{n}_j$	0^- $[1^-]$	$(1/2)^-$	A_1	$(1/2)^-$, $(7/2)^-$, ...	S
1 , $\gamma_j\hat{n}_j$	0^+ $[1^+]$	$(1/2)^+$		$(1/2)^+$, $(7/2)^+$, ...	P_-
$\gamma_1\hat{n}_1 - \gamma_2\hat{n}_2$ (und zyklisch)	2^+ $[1^+]$	$(3/2)^+$	E	$(3/2)^+$, $(5/2)^+$, ...	P_+
$\gamma_5(\gamma_1\hat{n}_1 - \gamma_2\hat{n}_2)$ (und zyklisch)	2^- $[1^-]$	$(3/2)^-$		$(3/2)^-$, $(5/2)^-$, ...	$D_\pm$
$\gamma_1\hat{n}_2\hat{n}_3 + \gamma_2\hat{n}_3\hat{n}_1 + \gamma_3\hat{n}_1\hat{n}_2$	3^- $[2^-]$	$(5/2)^-$	A_2	$(5/2)^-$, $(7/2)^-$, ...	D_+
$\gamma_5(\gamma_1\hat{n}_2\hat{n}_3 + \gamma_2\hat{n}_3\hat{n}_1 + \gamma_3\hat{n}_1\hat{n}_2)$	3^+ $[2^+]$	$(5/2)^+$		$(5/2)^+$, $(7/2)^+$, ...	$F_\pm$

Tabelle 1: Statisch-leichte B- und B_s-Meson-Erzeugungsoperatoren. J^P-Zustände, die aufgrund des entkoppelten statischen Spins die gleiche Masse aufweisen, sind in eckigen Klammern angegeben.

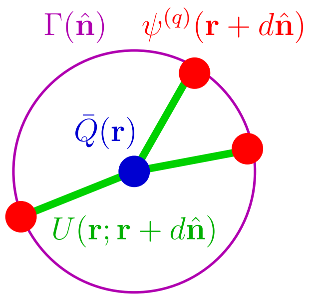

Abbildung 3: Bildliche Darstellung der verwendeten statisch-leichten B- und B_s-Meson-Erzeugungsoperatoren (Gleichung (30)).

Die Gitterversionen der Erzeugungsoperatoren (30) entstehen, indem die Integration über die Einheitskugel $\int d\hat{\mathbf{n}}$ durch eine Summe über sechs (für $j^P = 1/2, 3/2$) bzw. acht (für $j^P = 5/2$) benachbarte Gitterplätze ersetzt wird. Eine der Konsequenzen der kubischen Gitterdiskretisierung ist, dass die von diesen Erzeugungsoperatoren generierten Testzustände keine irreduzible Darstellung der Rotationsgruppe SO(3) bilden, sondern nur der Untergruppe $\mathrm{O_h}$ der kubischen Rotationen. Folglich besitzen Gitterzustände keinen definierten Gesamtspin J bzw. j, sondern fallen in eine der irreduziblen $\mathrm{O_h}$-Darstellungen, die eine unendliche Menge von Kontinuumsdrehimpulsen beinhalten (siehe Spalten “$\mathrm{O_h}$” und “Gitter-j^P” in Tabelle 1).

Gitter-QCD-Rechnungen liefern typischer Weise den leichtesten Zustand eines Sektors. Dieser hat in der Regel den niedrigsten möglichen Gesamtspin. Da für die D_-- und die D_+-Zustände genau wie die F_-- und F_+-Zustände eine sehr ähnliche Masse zu erwarten ist (bekannt aus Modellrechnungen, z.B. [38]), kann davon ausgegangen werden, dass die entsprechenden Erzeugungsoperatoren mit Kontinuumsquantenzahlen $j^P = (3/2)^-$ und $j^P = (5/2)^+$ Testzustände generieren und Ergebnisse liefern, die Mischungen aus $D_\pm$ und $F_\pm$ entsprechen. Dementsprechend werden diese Erzeugungsoperatoren mit $D_\pm$ und $F_\pm$ bezeichnet (siehe Spalte "Notation" in Tabelle 1).

Um den Überlapp der Testzustände $\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(q)}}(\mathbf{r})|\Omega\rangle$ zu den untersuchten statisch-leichten Mesonzuständen zu optimieren (siehe die entsprechende Diskussion in Abschnitt 2.4.2), wurden Standard-Smearingtechniken verwendet (APE-Smearing für räumliche Links, Gauß-Smearing für leichte Quarkfelder, HYP2-Smearing für zeitlich Links, die das statische Antiquark beschreiben; Details sind in [1] zu finden). Dieses Smearing ist essentiell, um präzise numerische Ergebnisse für statisch-leichte Mesonmassen zu erhalten.

Mit Gitter-QCD-Techniken wurden 6×6-Korrelationsmatrizen für jeden der Kontinuumsspins $j = 1/2, 3/2, 5/2$ berechnet. Die entsprechenden sechs Erzeugungsoperatoren weisen negative und positive Parität auf (die für die leichten Quarks verwendete Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung bricht Parität; siehe Abschnitt 3.1) und verschiedenen Smearing-Stufen, d.h. verschiedene räumliche Ausdehnungen. Die Korrelationsmatrizen wurden dann mit Techniken analysiert, wie in Abschnitt 2.4.2 beschrieben. Die resultierenden statisch-leichten Mesonmassen sind für sich genommen allerdings bedeutungslos, da ein statisches Quark eine unendliche Masse besitzt und außerdem (im Kontinuumslimes) eine unendliche Selbstenergie zur Mesonmasse besteuert. Physikalisch bedeutungsvoll sind jedoch Massendifferenzen von statisch-leichten Mesonen, da sich in diesen Größen die eben genannten Unendlichkeiten gegenseitig exakt eliminieren.

In Abbildung 4 sind Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen $m(j^P)-m(S)$ für $q \in \{u, d\}$, also Näherungen für B-Mesonen, zu sehen. Verschiedene Farben entsprechen den Gitterabständen $a \approx 0.080\,\mathrm{fm}$ (grün), $a \approx 0.064\,\mathrm{fm}$ (blau) und $a \approx 0.051\,\mathrm{fm}$ (magenta). Die horizontale Achse entspricht der u/d-Quarkmasse, $m_{u,d} \propto (m_\pi)^2$, wobei Rechnungen im Bereich $m_\pi \approx 284 \ldots 637\,\mathrm{MeV}$ ausgeführt wurden. Die sechs Plots entsprechen den Massendifferenzen $m(j^P) - m(S)$,
$j^P = P_-, P_+, D_\pm, D_+, F_\pm, S^*$ (S^* bezeichnet den ersten angeregten Zustand im $(1/2)^-$-Sektor), wie auch in den Plotüberschriften angegeben. Die Tatsache, dass die Ergebnisse für die drei verfügbaren Gitterabstände jeweils auf eine einzige Kurve fallen, zeigt an, dass Diskretisierungsfehler im Rahmen der statistischen Fehler vernachlässigbar sind. Dies war zu erwarten, da sowohl sehr feine Gitterabstände verwendet wurden, als auch die Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung, die garantiert, dass Diskretisierungsfehler nie linear, sondern höchstens quadratisch im kleinen Gitterabstand a auftreten (siehe die entsprechende Diskussion in Abschnitt 3.1). Analoge und qualitativ identische Plots für statisch-leichte Mesonen mit s-Quarks (Näherungen für B_s-Mesonen) finden sich in [2].

Da die Gitter-QCD-Ergebnisse für Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen konsistent mit einer Gerade in $m_{u,d} \propto (m_\pi)^2$ sind und noch keine hinreichende Beschreibung durch effektive Feldtheorien verfügbar ist, wurde die Extrapolation zu physikalischer u/d-Quarkmasse ($m_\pi \approx 135\,\mathrm{MeV}$) linear durchgeführt. Entsprechende Ergebnisse sind in Tabelle 2 zusammengefasst.

Die angeregten statisch-leichten Mesonen P_-, P_+, D_-, D_+, F_-, F_+ und S^* entsprechen streng genommen nicht Eigenzuständen des QCD-Hamilton-Operators, da sie z.B. in Mehrmesonzustände

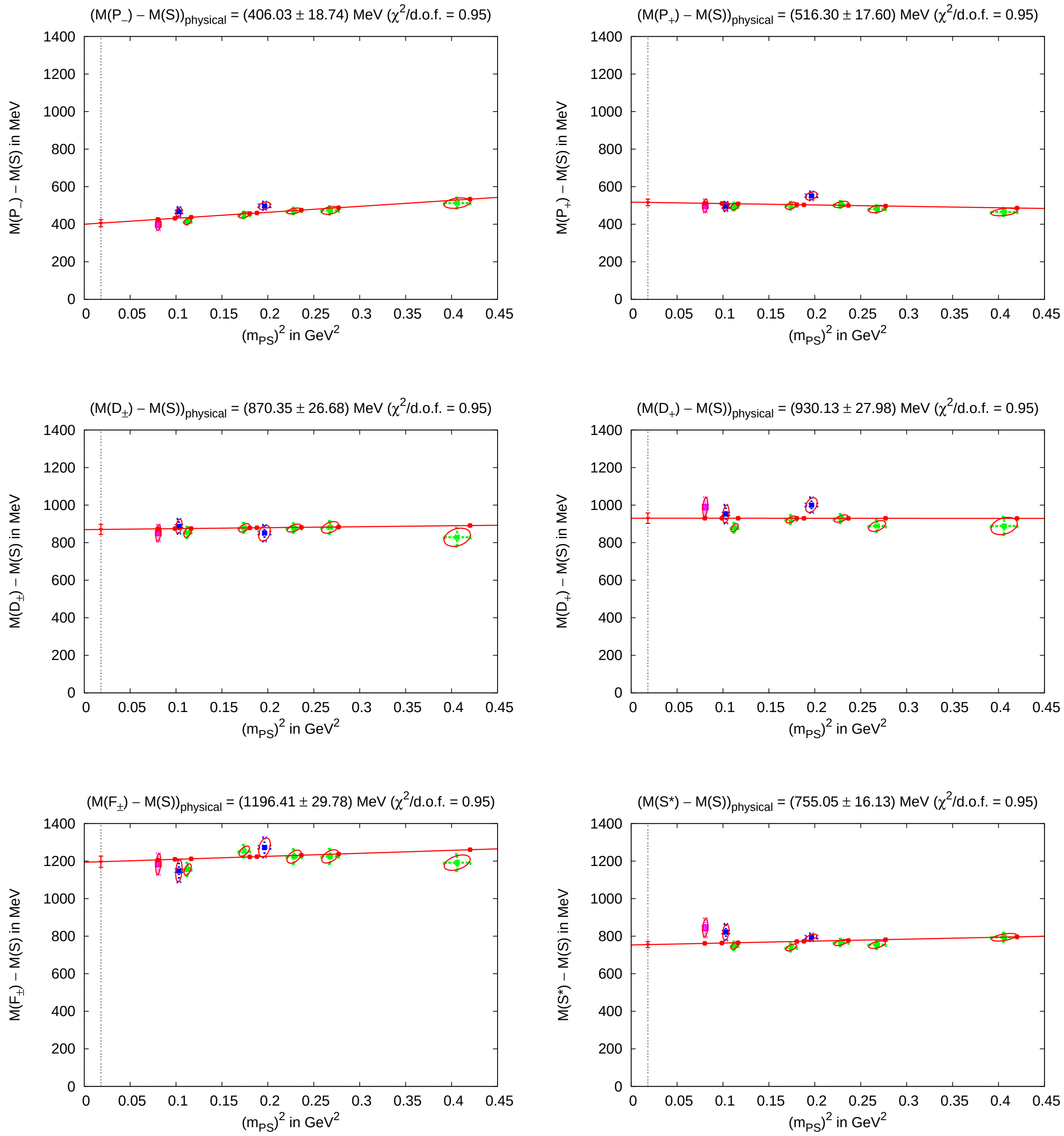

Abbildung 4: (entstammt [2]) Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen $M(j^P) - M(S) \equiv m(j^P) - m(S)$ ($q \in \{u, d\}$, d.h. Näherungen für B-Mesonen) als Funktionen von $(m_{\mathrm{PS}})^2 \equiv (m_\pi)^2$. Die Geraden entsprechen linearen Extrapolationen zur physikalischen u/d-Quarkmasse ($m_\pi \approx 135\,\mathrm{MeV}$).

	P_-	P_+	$D_\pm$	D_+	$F_\pm$	S^*
B-Mesonen	406(19)	516(18)	870(27)	930(28)	1196(30)	755(16)
B_s-Mesonen	413(12)	504(12)	770(26)	960(24)	1179(37)	751(26)

Tabelle 2: Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen $m(j^P) - m(S)$ in MeV für physikalische u/d-Quarkmasse.

$S + n \times \pi$ zerfallen können, eventuell mit entsprechendem relativen Bahndrehimpuls zwischen dem S-Meson und den Pionen, so dass die gleichen Quantenzahlen j^P vorliegen (siehe die entsprechende Diskussion in Abschnitt 2.4.1). Insbesondere für das P_--Meson sollte ein solcher Zerfall in $S + \pi$ vergleichsweise wahrscheinlich sein, da es in einer S-Welle zerfallen kann (also kein relativer Bahndrehimpuls) und deshalb nicht von einer Drehimpulsbarriere vor dem Zerfall beschützt wird. Im Rahmen von Modellrechnungen und unter Verwendung des Matrixelements $\langle S + \pi(t_2)|P_-(t_1)\rangle$ [39, 40, 41] wurde in [2] für das P_--Meson gezeigt, dass die über die Korrelationsmatrix bestimmte Mesonmasse vom möglichen Zerfall in $S + \pi$ nur vernachlässigbar beeinflusst wird. Aufgrund der erwähnten Drehimpulsbarriere sollte der Effekt auf die höheren Anregungen P_+, D_-, D_+, F_- und F_+ noch kleiner und damit ebenfalls vernachlässigbar sein.

Um Kontakt zu existierenden experimentellen Ergebnissen für B- und B_s-Mesonen herzustellen bzw. um entsprechende Vorhersagen zu treffen, ist es erforderlich, Korrekturen aufgrund der endlichen Masse des b-Quarks zu berücksichtigen. In der verwendeten HQET ist die führende Korrektur zum statischen Limes proportional zu $1/m_b$. Im Prinzip können diese Korrekturen im Rahmen der Gitter-QCD berechnet werden (siehe z.B. [42, 43, 44, 45, 46]). Dies ist aber ausgesprochen aufwändig, weshalb hier ein anderer Weg eingeschlagen wurde, nämlich die lineare Interpolation in $1/m_h$ zwischen den Gitter-QCD-Resultaten für statisch-leichte Mesonmassen und den experimentell zumindest teilweise relativ präzise gemessenen D- und D_s-Mesonmassen (m_h bezeichnet die schwere Quarkmasse, die durch die Masse des Grundzustandsmesons B bzw. D beschrieben werden kann)[4]. Abbildung 5 zeigt Interpolationen für die Quantenzahlen P_- und P_+ (diese Mesonmassen sind im D- und D_s-Sektor experimentell bekannt, weitere dagegen nicht [16]). Die entsprechenden numerischen Ergebnisse für die Massen von $B^*_{(s)0}$, $B^*_{(s)1}$, $B_{(s)1}$ und $B^*_{(s)2}$ sind in Tabelle 3 zusammengestellt.

Während eine Reihe von Fehlerquellen systematisch untersucht wurde, z.B. Gitterdiskretisierungseffekte oder Verfälschung der berechneten Mesonmassen durch mögliche Zerfälle in Mehrmesonzustände $S + n \times \pi$, ist dies für andere Fehlerquellen nicht oder nur schwer möglich. Zu nennen sind hier elektromagnetische Effekte, Isospinbrechung, Vernachlässigung höherer Ordnungen $\propto 1/(m_h)^2$ bei der Interpolation in der schweren Quarkmasse und Vernachlässigung der s-Seequarks (es wurden 2-Flavor-Eichfeldkonfigurationen verwendet; siehe Abschnitt 3.2). Eine grobe konservative Abschätzung dieser Fehlerquellen beläuft sich auf etwa 20 MeV (siehe [2]).

Vergleicht man die erzielten Gitter-QCD-Ergebnisse für Massendifferenzen von B- und B_s-Mesonen mit entsprechenden experimentellen Ergebnissen (Tabelle 3), findet man im Rahmen der Fehler keine perfekte Übereinstimmung, sondern eine Abweichung von etwa 15%. Vergleicht

[4]Ein guter Test, dass solche Interpolationen verlässliche Ergebnisse liefern, ist das Massensplitting von $m_{B^*} - m_B$. Die beschriebene Interpolation liefert mit $m_{D^*} - m_D = 141$ MeV und $m_D/m_B = 0.35$ das Ergebnis $m_{B^*} - m_B = 49$ MeV, das sehr gut mit dem experimentell bekannten $m_{B^*} - m_B = 46$ MeV übereinstimmt [16].

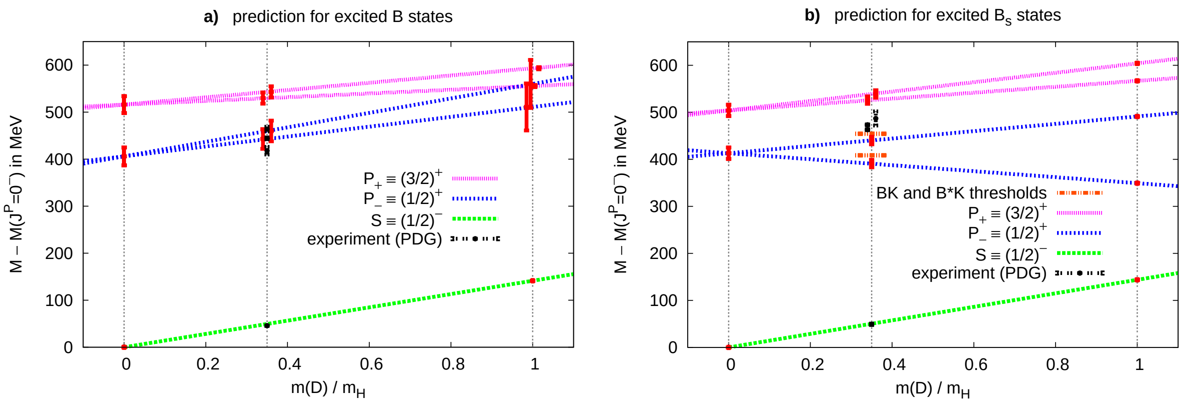

Abbildung 5: (entstammt [2]) Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen $M - M(J^P = 0^-) \equiv m - m_{B_{(s)}}$ linear in $m(D)/m_H \equiv m_D/m_h$ zur physikalischen b-Quarkmasse interpoliert. **(links)** B-Mesonen. **(rechts)** B_s-Mesonen.

	$m - m_B$ in MeV			$m - mB_s$ in MeV	
Meson	Gitter-QCD	Experiment	Meson	Gitter-QCD	Experiment
B_0^*	443(21)		B_{s0}^*	391(8)	
B_1^*	460(22)		B_{s1}^*	440(8)	
B_1	530(12)	444(2)	B_{s1}	526(8)	463(1)
B_2^*	543(12)	464(5)	B_{s2}^*	539(8)	473(1)

Tabelle 3: Gitter-QCD- und experimentelle Ergebnisse für Massendifferenzen von $B_{(s)0}^*$, $B_{(s)1}^*$, $B_{(s)1}$ und $B_{(s)2}^*$ zum Grundzustand $B_{(s)}$.

man die erzielten Gitter-QCD-Ergebnisse dagegen mit anderen unabhängigen Gitter-QCD-Studien, z.B. [47], liegt Übereinstimmung vor, wenn dies in Einheiten der typischen Skala von Gitter-QCD-Rechnungen geschieht, dem Abstand r_0 [5]. Bezüglich r_0 in fm bzw. der Skalensetzung allgemein liegt zwischen verschiedenen Gitter-QCD-Gruppen und -Kollaborationen keine Einigkeit vor. Insbesondere für 2-Flavor-Simulationen sind die Abweichungen in der Größenordnung von ebenfalls 15% (während z.B. die ETM-Kollaboration $r_0 = 0.420\,\mathrm{fm}$ findet [diese Eichfeldkonfigurationen wurden für die hier beschriebene Studie verwendet], gibt die ALPHA-Kollaboration $r_0 = 0.485\,\mathrm{fm}$ an [49]). Diese Unsicherheit, deren Ursache nicht in der Gitterberechnung der B- und B_s-Mesonmassen begründet liegt, liefert eine mögliche Erklärung der in Tabelle 3 zu sehenden Abweichungen.

Die erzielten Ergebnisse für die Massen von statisch-leichten Mesonen und von B- und B_s-Mesonen sind in mehrfacher Weise von Bedeutung:

- Das Spektrum statisch-leichter Mesonen und zum Teil auch von B- und B_s-Mesonen wurde vom Gitter-QCD-Standpunkt sehr umfassend bestimmt (sechs Massendifferenzen im B-

[5] r_0 ist über das statische Quark-Antiquark-Potential $V(r)$ gemäß $|V'(r_0)|r_0^2 \equiv 1.65$ definiert [48].

und sechs im B_s-Sektor). Diese Gitter-QCD-Ergebnisse liefern wertvolle Tests für existierende phänomenologische Modelle bzw. erleichtern deren zukünftige Konstruktion. Insbesondere zeigen die hier erzielten Gitter-QCD-Ergebnisse keine Anzeichen für eine umgekehrte Ordnung der P_- und P_+ B- und B_s-Mesonen ($B^*_{(s)0}$ und $B^*_{(s)1}$ sind deutlich leichter als $B_{(s)1}$ und $B^*_{(s)2}$). Dies ist im Widerspruch zu Ergebnissen von einer Reihe phänomenologischer Modelle [50, 51, 52, 53, 38].

- Statisch-leichte Mesonmassen wurden für zahlreiche Werte der u/d-Quarkmasse berechnet. Solche Ergebnisse sind hilfreich für die Entwicklung, den Vergleich mit und damit den Test von entsprechenden chiralen effektiven Feldtheorien.

- Die Berechnung statisch-leichter mesonischer Korrelationsfunktionen und entsprechender Mesonmassen ist ein notwendiger erster Schritt, um Zerfälle zu studieren, an denen B- und B_s-Mesonen beteiligt sind. Solche Zerfälle werden in [4, 5] untersucht und in Abschnitt 4.1.3 und Abschnitt 4.1.4 zusammengefasst.

4.1.2 Spektrum von b-Baryonen (Spektrum von Diquarks und Antidiquarks) [3]

Mit nahezu identischen Methoden, wie im vorangegangenen Abschnitt, wurde auch das Spektrum statisch-leichter Baryonen berechnet, also Baryonen die aus einem unendlich schweren Quark (eine Approximation eines b-Quarks) und zwei leichten u-, d- und/oder s-Quarks bestehen. Es wurden alle möglichen leichten Flavor-Kombinationen betrachtet, d.h. Λ_b-, Σ_b-, Ξ_b- und Ω_b-Baryonen studiert, die Isospin $I \in \{0, 1/2, 1\}$ und Strangeness $S \in \{0, -1, -2\}$ entsprechen. Die entsprechenden Erzeugungsoperatoren sind von der Form

$$\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(1)}\psi^{(2)}}(\mathbf{r}) \quad \equiv \quad \epsilon^{abc} Q^a(\mathbf{r}) \Big((\psi^{b,(1)}(\mathbf{r}))^T \mathcal{C}\Gamma \psi^{c,(2)}(\mathbf{r}) \Big) \tag{31}$$

mit der Ladungskonjugationsmatrix $\mathcal{C} \equiv \gamma_0\gamma_2$. Im Gegensatz zu den Erzeugungsoperatoren für statisch-leichte Mesonen (30) setzt sich der Gesamtspin ausschließlich aus den Quarkspins zusammen, d.h. es wird kein Bahndrehimpuls mit Hilfe von Kugelflächenfunktionen und gluonischen Parallelstransportern erzeugt. Da auch hier der physikalisch relevante Spin ausschließlich von den leichten Freiheitsgraden getragen wird, ermöglichen die Erzeugungsoperatoren (31) die Berechnung von Baryonmassen in Sektoren mit $j = 0$ (d.h. Gesamtspin $J = 1/2$) und $j = 1$ (d.h. Gesamtspin $J = 1/2$ oder $J = 3/2$). Durch entsprechende Wahl von Γ kann positive und negative Parität realisiert werden. Die Erzeugungsoperatoren und die von ihnen angeregten Quantenzahlen sind in Tabelle 4 zusammengefasst (einige Erzeugungsoperatoren existieren nicht, da die rechte Seite von (31) aufgrund der Antivertauschungsrelationen für Quarkfelder verschwindet, und sind daher mit "X" markiert).

Statisch-leichte Baryonmassen sind, genau wie statisch-leichte Mesonmassen, aufgrund der unendlichen Masse und Selbstenergie des statischen Quarks zunächst physikalisch bedeutungslos. Um diese Unendlichkeiten loszuwerden, werden im Folgenden Massendifferenzen zwischen statisch-leichten Baryonen und dem leichtesten statisch leichten Meson (S-Meson bzw. B; siehe Abschnitt 4.1.1) betrachtet, $\Delta m(S, I, j^P) \equiv m(\text{baryon} : S, I, j^P) - m_B$.

Die Extrapolationen in der u/d-Quarkmasse zum physikalischen Wert wurden analog zu denen für statisch-leichte Mesonen durchgeführt. Zur physikalischen b-Quarkmasse wurde ebenfalls in

Γ	$j^{\mathcal{P}}$	J	I	S	Name	I	S	Name	I	S	Name
γ_5	0^+	$1/2$	0	0	Λ_b	$1/2$	-1	Ξ_b	X	X	X
$\gamma_0\gamma_5$	0^+	$1/2$	0	0	Λ_b	$1/2$	-1	Ξ_b	X	X	X
1	0^-	$1/2$	0	0		$1/2$	-1		X	X	X
γ_0	0^-	$1/2$	1	0		$1/2$	-1		0	-2	
γ_j	1^+	$1/2,\ 3/2$	1	0	Σ_b, Σ_b^*	$1/2$	-1		0	-2	Ω_b
$\gamma_0\gamma_j$	1^+	$1/2,\ 3/2$	1	0	Σ_b, Σ_b^*	$1/2$	-1		0	-2	Ω_b
$\gamma_j\gamma_5$	1^-	$1/2,\ 3/2$	0	0		$1/2$	-1		X	X	X
$\gamma_0\gamma_j\gamma_5$	1^-	$1/2,\ 3/2$	1	0		$1/2$	-1		0	-2	

Tabelle 4: Statisch-leichte Baryon-Erzeugungsoperatoren.

Anlehnung an den vorangegangenen Abschnitt mit Hilfe von experimentellen Ergebnissen für Charmbaryonen interpoliert.

Wie bereits in Abschnitt 4.1.1 erwähnt, bestehen gewisse Unstimmigkeiten bezüglich der Skalensetzung bei Gitter-QCD-Rechnungen. Z.B. wird der Gitterabstand bei den verwendeten Eichfeldkonfigurationen der ETM-Kollaboration als $a = 0.079(3)$ fm angegeben, wenn zur Skalensetzung die Pionzerfallskonstante benutzt wird [35], bzw. als $a = 0.089(5)$ fm bei Verwendung der Nukleonmasse [54]. Die Gitter-QCD-Ergebnisse für b-Baryonen werden daher für beide Versionen von a in Tabelle 5 angegeben. Erneut sei darauf hinwiesen, dass diese mit der Skalensetzung verknüpfte Unsicherheit vollkommen losgelöst von der hier vorgestellten Gitter-QCD-Berechnung statisch-leichter Baryonmassen ist. Um diese Unsicherheit weitestgehend zu eliminieren, sind in Tabelle 5 auch dimensionslose Verhältnisse

$$R(S, I, j^P) \quad \equiv \quad \frac{\Delta m(S, I, j^P)}{\Delta m(\Omega_b)} \tag{32}$$

angegeben. Diese Verhältnisse können als verlässliche Vorhersagen verwendet werden oder um mit theoretischen Ergebnissen anderer Gruppen oder experimentellen Daten zu vergleichen.

Die berechneten statisch-leichten Baryonmassen mit $P = +$ (siehe Tabelle 6 in [3]) stimmen im Rahmen statistischer Fehler gut mit existierenden Gitter-QCD-Studien überein [55, 56, 57]. Darüber hinaus wurden erstmals auch die Massen acht statisch-leichter Baryonzustände mit $P = -$ mit Gitter-QCD-Methoden vorhergesagt. Ein Vergleich dieser Vorhersagen mit einer phänomenologischen Modellrechnung liefert ebenfalls gute Übereinstimmung [58].

Die entsprechenden b-Baryonmassen sind in Tabelle 5 zusammengestellt. Für die experimentell bekannten Massen von b-Baryonen mit $P = +$, Λ_b, Σ_b, Σ_b^*, Ξ_b und Ω_b, liegt exzellente Übereinstimmung vor, wenn man die Verhältnisse $R(S, I, j^P)$ vergleicht. Darüberhinaus konnten auch einige $P = -$-Massen sowie die Masse von Ξ_b' vorhergesagt werden, die bisher nicht experimentell gemessen wurden. Die $P = -$-Massen wurden auch erstmalig mit Gitter-QCD-Methoden berechnet.

Eine konservative Abschätzung des systematischen Fehlers aufgrund der Interpolationen in der schweren Quarkmasse, von Diskretisierungsfehlern, der Vernachlässigung von s-Seequarks, elektromagnetischer Effekte und Isospinbrechung und der Verfälschung angeregter Zustände durch

S	I	J^P	b/c-Name	Δm^{lat} in MeV, a aus [35]	Δm^{lat} in MeV, a aus [54]	Δm^{exp} in MeV [1]	R^{lat}	R^{exp}
0	0	$(1/2)^+$	Λ_b/Λ_c	426(26)	395(25)	341(2)	0.489(27)	0.440(5)
		$(1/2)^-$	$-/\Lambda_c(2595)$	697(75)	648(69)	–	0.802(83)	–
		$(3/2)^-$	$-/\Lambda_c(2625)$	709(75)	660(69)	–	0.816(83)	–
0	1	$(1/2)^+$	$\Sigma_b/\Sigma_c(2455)$	602(29)	558(30)	532(6)	0.691(30)	0.687(11)
		$(3/2)^+$	$\Sigma_b^*/\Sigma_c(2520)$	628(29)	584(30)	553(7)	0.718(30)	0.714(11)
-1	1/2	$(1/2)^+$	Ξ_b/Ξ_c	602(21)	558(24)	511(3)	0.691(20)	0.660(8)
		$(1/2)^+$	$-/\Xi_c'$	747(25)	691(29)	–	0.857(22)	–
		$(3/2)^+$	$-/\Xi_c(2645)$	771(25)	715(29)	–	0.886(21)	–
		$(1/2)^-$	$-/\Xi_c(2790)$	1013(46)	936(48)	–	1.160(45)	–
		$(3/2)^-$	$-/\Xi_c(2815)$	1023(46)	946(48)	–	1.172(45)	–
-2	0	$(1/2)^+$	Ω_b/Ω_c	872(25)	807(31)	775(8)	1	1
		$(3/2)^+$	$-/\Omega_c(2770)$	905(25)	839(31)	–	*1.030(2)* [1]	–

Tabelle 5: Massendifferenzen von b-Baryonen $\Delta m(S, I, J^P) = m(\text{baryon} : S, I, J^P) - m(B)$ in MeV (Skalensetzung über f_π, $a = 0.079(3)\,\text{fm}$ [35] und über m_N, $a = 0.089(5)\,\text{fm}$ [54]) und dimensionslose Verhältnisse (siehe Gleichung (32)). ([1] Dieses Ergebnis benötigt keine Gitter-QCD-Rechnung sondern ergibt sich allein aus der Interpolation in der schweren Quarkmasse.)

mögliche Zerfälle beläuft sich auf $\lesssim 25\,\text{MeV}$ [3]. Für die Verhältnisse $R^{\text{lat}}(S, I, j^P)$ in Tabelle 5 entspricht dies etwa einem zusätzlichen systematischen Fehler von 5%.

Neben der Berechnung und Vorhersage zahlreicher statisch-leichter Baryonmassen und b-Baryonmassen, die z.B. für den Test phänomenologischer Modelle oder die Entwicklung effektiver chiraler Feldtheorien wertvoll sind, liefern diese Ergebnisse auch wertvolle Hinweise zur Konstruktion geeigneter Tetraquark-Erzeugungsoperatoren. Diese bestehen häufig aus einem Diquark-Antidiquark-Paar, wobei sowohl Diquark als auch Antidiquark möglichst leicht sein sollten. In (31) entspricht der Anteil $\epsilon^{abc}((\psi^{b,(1)}(\mathbf{r}))^T \mathcal{C}\Gamma\psi^{c,(2)}(\mathbf{r}))$ gerade einem Diquark, das an eine statische Farbladung $Q^a(\mathbf{r})$ gekoppelt ist. Die statisch-leichten Baryonmassen und -massendifferenzen können daher auch als Maß für die Diquark bzw. Antidiquarkmasse interpretiert werden. Die leichtesten Massen findet man für $\Gamma = \gamma_5$, weshalb (Anti-)Diquarks dieses Typs z.B. in [10, 11] zur Konstruktion von Tetraquark-Erzeugungsoperatoren für $a_0(980)$ und κ verwendet wurden (siehe auch Kapitel 5, Gleichung (51)).

4.1.3 Zerfallskonstanten f_B und f_{B_s} [4]

Vorbemerkung:
[4] beschreibt ein umfangreiches Projekt der ETM-Kollaboration, das sich im Wesentlichen in zwei Teile gliedert. Zum einen Teil, der in Kapitel 4 in [4] beschriebenen "Interpolation-Method", habe ich wesentliche Beiträge geleistet, die im Folgenden zusammengefasst werden. Am anderen Teil, der in Kapitel 3 in [4] beschriebenen "Ratio-Method" habe ich kaum mitgewirkt.

Die Zerfallskonstanten f_B und f_{B_s} sind Standardgrößen der QCD und des Standardmodells, die eine Reihe interessanter Zerfälle parametrisieren. Als Beispiele können $B \to \tau + \nu_\tau$ und $B_s \to \mu^+ + \mu^-$ genannt werden, die beide als sensitiv bezüglich neuer Physik angesehen werden. Präzise Gitter-QCD-Vorhersagen für f_B und f_{B_s} sind daher ausgesprochen wünschenswert, um solche möglicher Weise existierende Effekte neuer Physik identifizieren zu können.

Zur Bestimmung von f_B und f_{B_s} mit der oben genannten Interpolation-Method ist es notwendig, die Matrixelemente

$$\phi_B^{\mathrm{stat}} = \langle\Omega|\bar{Q}\gamma_5 u|B^{\mathrm{stat}}\rangle^{\mathrm{ren}} \quad , \quad \phi_{B_s}^{\mathrm{stat}} = \langle\Omega|\bar{Q}\gamma_5 s|B_s^{\mathrm{stat}}\rangle^{\mathrm{ren}} \tag{33}$$

zu berechnen, wobei $|B^{\mathrm{stat}}\rangle$ und $|B_s^{\mathrm{stat}}\rangle$ das jeweils leichteste statisch-leichte Meson, d.h. $j^P = (1/2)^-$, bezeichnen. Im Rahmen der in Abschnitt 4.1.1 beschriebenen Berechnungen statisch-leichter Mesonmassen erhält man diese Matrixelemente in ihrer nicht-renormierten Form, da sie in gewissen Korrelationsfunktionen, z.B.

$$\langle\Omega|\Big(\bar{Q}\gamma_5 u\Big)^\dagger(t)\Big(\bar{Q}\gamma_5 u\Big)(0)|\Omega\rangle, \tag{34}$$

als führende Terme auftreten (der Operator $\bar{Q}\gamma_5 u$ entspricht dem B-Meson-Erzeugungsoperator (30), wenn $\Gamma = \gamma_5$ und $r = 0$ gesetzt und keine Smearing-Techniken für Quark- und Gluonfelder verwendet werden). Diese nicht-renormierten Matrixelemente unterscheiden sich von ihren renormierten Gegenstücken um Renormierungsfaktoren, die z.B. mit Gitterstörungstheorie berechnet werden können [59]. Details der Umrechnung von nicht-renormierten Matrixelementen in renormierte im Rahmen der verwendeten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung sind in [4] beschrieben.

Ähnlich wie in den beiden vorangegangenen Abschnitten 4.1.1 und 4.1.2 werden dann die Matrixelemente ϕ_B^{stat} und $\phi_{B_s}^{\mathrm{stat}}$ und entsprechende Matrixelemente für schwere Quarkmassen im Charmbereich verwendet, um zur physikalischen b-Quarkmasse zu interpolieren. Im Gegensatz zu den Massenberechnungen von B- und B_s-Mesonen und von b-Baryonen wurden hier allerdings Gitterergebnisse statt experimenteller Ergebnisse für die Matrixelemente ϕ_B und ϕ_{B_s} im Charmbereich verwendet. Mit den Interpolationsergebnissen für $\phi_{B_s}^b$ und $\phi_B^b/\phi_{B_s}^b$ ergeben sich die Zerfallskonstanten gemäß

$$f_{B_s} = \frac{1}{\sqrt{m(B_s)}}\phi_{B_s}^b = 238(10)\,\mathrm{MeV} \quad , \quad \frac{f_{B_s}}{f_B} = \frac{\sqrt{m(B)}}{\sqrt{m(B_s)}}\frac{\phi_{B_s}^b}{\phi_B^b} = 1.19(6). \tag{35}$$

In Kombination mit der sogenannten Ratio-Methode konnte die Präzision der Vorhersagen für f_B und f_{B_s} im Vergleich zu existierenden Vorhersagen leicht verbessert werden [60].

4.1.4 Isgur-Wise-Funktionen $\tau_{1/2}$ und $\tau_{3/2}$ und Zerfälle $B \to D^{**} + l + \nu$ [5]

Ein B-Meson kann semileptonisch in ein D^{**}-Meson zerfallen. D^{**} bezeichnet die vier D-Mesonen mit $J^P = 0^+$, $J^P = 1^+$ (tritt zweifach auf) und $J^P = 2^+$. Im in Abschnitt 4.1.1 diskutierten statischen Limes entspricht $j^P = (1/2)^+$ (bzw. P_-) dem $J^P = 0^+$- und einem der beiden $J^P = 1^+$-Zustände, dagegen $j^P = (3/2)^+$ (bzw. P_+) dem anderen $J^P = 1^+$- und dem $J^P = 2^+$-Zustand.

Dieser Zerfall ist von großem Interesse, da seit vielen Jahren ein hartnäckiger Konflikt zwischen Experiment und Theorie existiert. Während experimentelle Ergebnisse andeuten, dass der Zerfall in ein D^{**}-Meson mit $j = 1/2$ deutlich wahrscheinlicher ist als in ein D^{**}-Meson mit $j = 3/2$, liefern theoretische Rechnungen (QCD-Summenregeln, Modellrechnungen) genau die gegenteilige Aussage. Auf beiden Seiten gibt es jedoch ungeklärte Fragen und Probleme. Im Experiment ist insbesondere die Identifikation der breiten $j = 1/2$-Zustände sehr schwierig und mag daher fehlerhaft sein. Auf der Theorie-Seite werden Modellannahmen gemacht bzw. Rechnungen nur in der "Zero-Recoil-Situation" ausgeführt, in der das B- und das D-Meson die gleiche Geschwindigkeit aufweisen, oder im statischen Limes, d.h. im Limes $m_b, m_c \to \infty$. Da die Zerfälle nach D^{**} etwa ein Viertel aller semileptonischen Zerfälle von B- in D-Mesonen ausmachen, ist ein gutes Verständnis von $B \to D^{**} + l + \nu$ ausgesprochen wichtig, will man den Standardmodell-Parameter V_{cb} präzise bestimmen bzw. vermessen. Eine umfangreiche Diskussion dieses sogenannten "1/2-Versus-3/2-Puzzles" findet sich in [61]. Eine Untersuchung dieses Zerfalls mit Methoden der Gitter-QCD ist also sehr wünschenswert und mag zur Klärung dieses lange bestehenden Konflikts beitragen.

Im statischen Limes wird der Zerfall $B \to D^{**} + l + \nu$ vollständig durch zwei Formfaktoren beschrieben, die Isgur-Wise-Funktionen $\tau_{1/2}(w)$ (Zerfall in $j^P = (1/2)^+$ bzw. P_-) und $\tau_{3/2}(w)$ (Zerfall in $j^P = (3/2)^+$ bzw. P_+) mit $w = v_B \cdot v_{D^{**}} \geq 1$ [62]. Eine bekannte QCD-Summenregel, hergeleitet im statischen Limes, lautet

$$\sum_n \left|\tau_{3/2}^{(n)}(1)\right|^2 - \left|\tau_{1/2}^{(n)}(1)\right|^2 \quad = \quad \frac{1}{4}, \tag{36}$$

wobei die Indizes (n) neben den Grundzuständen ($n = 0$, $\tau_{1/2,3/2} \equiv \tau_{1/2,3/2}^{(n)}$) auch sämtliche Anregungen mit den Quantenzahlen $j^P = (1/2)^+$ bzw. $j^P = (3/2)^+$ nummerieren [63]. Unter der Annahme, dass (36) in guter Näherung bereits von den Grundzuständen erfüllt wird, d.h. $|\tau_{3/2}^{(0)}(1)|^2 - |\tau_{1/2}^{(0)}(1)|^2 \approx 1/4$ gilt, legt diese Summenregel nahe, dass ein Zerfall in $j^P = (3/2)^+$ wahrscheinlicher als ein Zerfall in $j^P = (1/2)^+$ ist.

Das Ziel der im folgenden skizzierten Arbeit [5] beseht darin, die Gültigkeit dieser Annahme zu überprüfen, also $\tau_{1/2}(1)$ und $\tau_{3/2}(1)$ mit Gitter-QCD-Methoden zu berechnen. Eine Umschreibung von $\tau_{1/2}(1)$ und $\tau_{3/2}(1)$ in mit solchen Methoden zugängliche Ausdrücke findet sich in [5],

$$\tau_{1/2}(1) \quad = \quad \left|\frac{\langle H_0^* | \bar{Q} \gamma_5 \gamma_z D_z Q | H \rangle}{m_{H_0^*} - m_H}\right| \tag{37}$$

$$\tau_{3/2}(1) \quad = \quad \left|\frac{\langle H_2^* | \bar{Q} \gamma_5 (\gamma_x D_x - \gamma_y D_y) Q | H \rangle}{\sqrt{6}(m_{H_2^*} - m_H)}\right|. \tag{38}$$

Im Nenner finden sich die in Abschnitt 30 bereits berechneten Massendifferenzen statisch-leichter Mesonen, wobei $m_H \equiv m(S)$, $m_{H_0^*} \equiv m(P_-)$ und $m_{H_2^*} \equiv m(P_+)$. Die Matrixelemente im Zähler ergeben sich aus sogenannten 3-Punktfunktionen, die im Wesentlichen den Erwartungswerten von zwei statisch-leichten Mesonerzeugungsoperatoren (30) und dem Operator $\bar{Q}\gamma_5\gamma_z D_z Q$ bzw. $\bar{Q}\gamma_5(\gamma_x D_x - \gamma_y D_y)Q$ entsprechen. Wie schon im vorangegangenen Abschnitt 4.1.3 ist auch hier die Renormierung der Matrixelemente (37) und (38) bzw. der darin auftretenden Operatoren $\bar{Q}\gamma_5\gamma_z D_z Q$ und $\bar{Q}\gamma_5(\gamma_x D_x - \gamma_y D_y)Q$ notwendig. Die Renormierung wurde mit Hilfe von Gitterstörungstheorie vorgenommen und ist in [5], Kapitel 4 im Detail beschrieben.

Die Formfaktoren $\tau_{1/2}$ und $\tau_{3/2}$ wurden für verschiedene unphysikalisch schwere u/d-Quarkmassen berechnet, sind aber so gut wie unabhängig von dieser (siehe Tabelle 6). Eine lineare Extrapolation zur physikalischen u/d-Quarkmasse ist in Abbildung 6 zu sehen und liefert

$$\tau_{1/2}(1) \quad = \quad 0.296(26) \quad , \quad \tau_{3/2}(1) \quad = \quad 0.526(23). \tag{39}$$

m_π in MeV	$\tau_{1/2}$	$\tau_{3/2}$	$(\tau_{3/2})^2 - (\tau_{1/2})^2$
314	0.299(14)	0.519(13)	0.180(16)
391	0.312(10)	0.538(13)	0.193(13)
448	0.308(12)	0.522(8)	0.177(9)

Tabelle 6: $\tau_{1/2}$ und $\tau_{3/2}$ für verschiedene u/d-Quarkmassen.

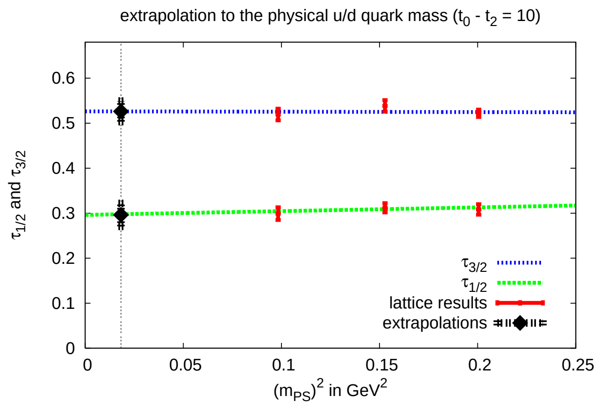

Abbildung 6: (entstammt [5]) $\tau_{1/2}$ und $\tau_{3/2}$ als Funktionen von $(m_{\mathrm{PS}})^2 \equiv (m_\pi)^2$. Die Geraden entsprechen linearen Extrapolationen zur physikalischen u/d-Quarkmasse ($m_\pi \approx 135\,\mathrm{MeV}$).

Die erzielten Gitter-QCD-Ergebnisse (39) zeigen, dass die Summenregel (36) bereits in guter Näherung, d.h. zu etwa 80%, von den Grundzuständen erfüllt wird,

$$\left|\tau_{3/2}(1)\right|^2 - \left|\tau_{3/2}(1)\right|^2 \quad \approx \quad 0.17\ldots 0.21. \tag{40}$$

Diese häufig getroffenen Annahme (siehe Diskussion weiter oben in diesem Abschnitt) wurde damit erstmalig mit Hilfe von Gitter-QCD präzise und mit dynamischen leichten Quarks nachgewiesen. Sie ist erforderlich, um aus der Summenregel (36) zu schließen, dass ein Zerfall in $j^P = (3/2)^+$ wahrscheinlicher als ein Zerfall in $j^P = (1/2)^+$ ist.

Experimentell wurde z.B. in einer Arbeit der BELLE-Kollaboration $\tau_{3/2}(1) = 0.75$ und $\tau_{1/2}(1) = 1.28$ bestimmt [64]. Während für $j^P = (3/2)^+$ die Ergebnisse von Theorie und Experiment also zumindest von ähnlicher Größenordnung sind, liegt für $j^P = (1/2)^+$ eine starke qualitative Diskrepanz vor. Ein Grund für diese Diskrepanz könnte auf experimenteller Seite die problematische Identifikation der breiten $j = 1/2$-Zustände sein (diese Vermutung wird auch dadurch unterstützt, dass die experimentellen Resultate $\tau_{3/2}(1) = 0.75$ und $\tau_{1/2}(1) = 1.28$ die Summenregel (36) stark verletzen). Auf theoretischer Seite könnte die Verwendung des statischen Limes anstatt endlicher b- und c-Quarkmassen zu Verzerrungen führen, genau wie die Einschränkung auf die Zero-Recoil-Situation $w = 1$. Erst wenn die Formfaktoren $\tau_{1/2}$ und $\tau_{3/2}$ auch für $w > 1$ berechnet werden, können die entsprechenden Zerfallsraten nicht nur abgeschätzt, sondern sauber berechnet werden, z.B. für $D_0^* \in D^{**}$ gemäß

$$\Gamma(B \to D_0^* + l + \nu) \quad = \quad \frac{G_F^2 V_{cb}^2 m_B^5 r^3}{48\pi^3} \int_1^\infty dw\, 4(1-r)^2 (w^2-1)^{3/2} \Big|\tau_{1/2}(w)\Big|^2 \tag{41}$$

($r = m_D/m_B$; dieser und analoge Ausdrücke für die verbleibenden drei D^{**}-Mesonen können geradlinig analytisch berechnet werden [65, 66]). Im Prinzip ist eine solche Berechnung mit Gitter-QCD-Methoden möglich und befindet sich teilweise bereits in Arbeit [67, 68]. Voraussetzung dafür ist die Massenberechnung der vier D^{**}-Mesonen mit c-Quarks endlicher Masse sowie die Trennung und eindeutige Identifikation der beiden $J^P = 1^+$-Zustände einmal mit $j^P = (1/2)^+$ und einmal mit $j^P = (3/2)^+$. Ein entsprechendes Gitter-QCD-Projekt ist Teil der hier zusammengefassten Arbeiten, [6, 7], und wird in Abschnitt 4.2, insbesondere in Abschnitt 4.2.2 diskutiert.

4.2 D-Mesonen, D_s-Mesonen und Charmonium [6, 7]

4.2.1 Spektrum von D-Mesonen, D_s-Mesonen und Charmonium

In [6, 7] wird das tiefliegende Spektrum von D-Mesonen, D_s-Mesonen und Charmonium-Zuständen berechnet. Die verwendeten Gitter-QCD-Methoden sind dabei sehr ähnlich, wie die zur Berechnung von statisch-leichten Mesonmassen (ausführlich beschrieben in Abschnitt 4.1.1). Im Folgenden wird daher vorwiegend auf Veränderungen und Verbesserungen gegenüber [1, 2] in diesem aktuell noch immer laufenden Projekt eingegangen.

Es werden Meson-Erzeugungsoperatoren verwendet, die ein Quark und ein Antiquark enthalten, wobei beide Quarks, $\bar{\psi}^{(1)}$ und $\psi^{(2)}$, endliche Masse besitzen, mindestens eines von beiden die Masse des c-Quarks,

$$O_{\Gamma,\bar{\psi}^{(1)}\psi^{(2)}} \quad \equiv \quad \int d^3r\, \bar{\psi}^{(1)}(\mathbf{r}) \int d\hat{\mathbf{n}}\, U(\mathbf{r};\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}})\Gamma(\hat{\mathbf{n}})\psi^{(2)}(\mathbf{r}+d\hat{\mathbf{n}}). \tag{42}$$

Folglich sind bei diesen Rechnungen auch die resultierenden Mesonmassen selbst und nicht nur Differenzen davon physikalisch aussagekräftig (das Problem mit der unendlichen Masse eines statischen Quarks und dessen unendlicher Selbstenergie tritt nicht mehr auf). Um Gesamtspin $J \geq 2$ untersuchen zu können, werden auch Erzeugungsoperatoren betrachtet, bei denen Quark und Antiquark einen relativen Bahndrehimpuls aufweisen, realisiert durch die Integration über eine Kugel $\int d\hat{\mathbf{n}}$, die Paralleltransporter U und den Gewichtsfaktor Γ, der eine Kombination von Kugelflächenfunktionen (verantwortlich für Bahndrehimpuls L) und γ-Matrizen (verantwortlich für Spin S) ist. Neben ihren Flavorquantenzahlen werden diese Mesonen durch Gesamtspin und Parität J^P charakterisiert und im Fall von Charmonium auch noch durch Ladungskonjugation C. In Tabelle 7 sind die verwendeten Erzeugungsoperatoren zusammengestellt. Diese Liste von Erzeugungsoperatoren ist sehr umfangreich, da die tiefliegenden physikalischen Zustände optimal angeregt werden sollen und auch Aussagen über deren Struktur gewünscht sind (z.B. im Fall der D^{**}-Mesonen mit $J^P = 1^+$ welcher Anteil des Gesamtspins vom leichten Quark und von den Gluonen getragen wird).

Sämtliche Mesonmassenberechnungen wurden für jeweils zwei Werte der s-Quarkmasse und der c-Quarkmasse ausgeführt (Unterschied der beiden s- und c-Quarkmassen jeweils etwa 10%, beide in der Umgebung der physikalischen Werte). Dies liefert in linearer Näherung die Abhängigkeiten der Mesonmassen von den s- und c-Quarkmassen. Insbesondere das in Abschnitt 4.1.1 genannte Problem mit den Unstimmigkeiten und offenen Fragen die Skalensetzung bei Gitter-QCD-Rechnungen betreffend wird durch ein derartiges Vorgehen abgeschwächt. Es ist im Vorfeld der Rechnungen nicht mehr notwendig, sich auf einen speziellen Wert des Gitterabstand festzulegen und mit diesem die s- und c-Quarkmassen auf ihre physikalische Werte zu tunen. Stattdessen ist es möglich, nach Abschluss der zeitaufwändigen eigentlichen Gitter-QCD-Rechnungen ohne nennenswerten zusätzlichen Einsatz von Computerzeit eine umfangreiche Auswertung durchzuführen. Dabei können verschiedene Werte des Gitterabstands untersucht werden (z.B. Skalensetzung sowohl durch die Pionzerfallskonstante als auch durch die Nukleonmasse, wie in Abschnitt 4.1.2 erwähnt). Alternativ kann der Gitterabstand auch zunächst als unbestimmter Parameter betrachtet werden, der im Lauf der Auswertung über die berechneten D- und D_s-Meson- und Charmoniummassen gesetzt wird.

In Abbildung 7 ist der aktuelle Stand der Mesonspektren zu sehen. Verwendet wurden Eichfeldkonfigurationen, die mit 2+1+1 dynamischen Quarkflavors generiert wurden. Die leichte u/d-Quarkmasse ist erneut unphysikalisch schwer, Rechnungen für verschiedene u/d-Quarkmassen (rot: $m_\pi \approx 285\,\mathrm{MeV}$; blau: $m_\pi \approx 325\,\mathrm{MeV}$; schwarz: $m_\pi \approx 457\,\mathrm{MeV}$) ermöglichen aber eine Extrapolation zum physikalischen Wert. Die s- und die c-Quarkmasse wurde so gewählt, dass die Gitter-QCD-Ergebnisse für $2(m_K)^2 - (m_\pi)^2$ und m_D ihre physikalischen Werte annehmen (diese Größen sind so gut wie unabhängig von $m_{u,d}$, d.h. auch für unphysikalisch schwere u/d-Quarkmassen, sind die s- und c-Quarkmassen sehr nahe an ihren entsprechenden physikalischen Werten). Gegenwärtig liegen nur Ergebnisse für einen Wert des Gitterabstands vor, $a \approx 0.086\,\mathrm{fm}$, bestimmt von der ETM-Kollaboration über die Pionzerfallskonstante. Daher konnte noch keine Kontinuumsextrapolation ausgeführt werden. Dennoch lassen sich Diskretisierungsfehler zumindest grob abschätzen, da in der Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung jeweils zwei unterschiedliche Gitterausdrücke für jeden Kontinuums-Meson-Erzeugungsoperator existieren und sich die resultierenden Mesonmassen um Diskretisierungsfehler unterscheiden (Details sind in [7] erklärt). Diese paarweise auftretenden Ergebnisse sind in Abbildung 7 mit Kreisen bzw. Kreuzen gekennzeichnet. Ihre Differenz beträgt für die meisten D- und D_s-Meson- und Charmoniummassen um die $50\,\mathrm{MeV}$, also $\approx 2.5\%$.

Experimentelle Ergebnisse sind ebenfalls in Abbildung 7 zu sehen. Die meisten Gitter-QCD-Ergebnisse stimmen nach einer Extrapolation zur physikalischen u/d-Quarkmasse im Rahmen der statistischen und grob geschätzten Diskretisierungsfehler mit diesen experimentellen Daten

	$\Gamma(\hat{\mathbf{n}})$	J	PC	$S \otimes L$	O_h
1	γ_5	0	$-+$	$0 \otimes 0$	A_1
2	$\gamma_0\gamma_5$		$-+$		
3	1		$++$		
4	γ_0		$+-$		
5	$\gamma_5\gamma_1\hat{n}_1$		$--$	$1 \otimes 1$	
6	$\gamma_0\gamma_5\gamma_1\hat{n}_1$		$-+$		
7	$\gamma_1\hat{n}_1$		$++$		
8	$\gamma_0\gamma_1\hat{n}_1$		$++$		
1	γ_1	1	$--$	$1 \otimes 0$	T_1
2	$\gamma_0\gamma_1$		$--$		
3	$\gamma_5\gamma_1$		$++$		
4	$\gamma_0\gamma_5\gamma_1$		$+-$		
5	$\hat{n}_1$		$--$	$0 \otimes 1$	
6	$\gamma_0\hat{n}_1$		$-+$		
7	$\gamma_5\hat{n}_1$		$+-$		
8	$\gamma_0\gamma_5\hat{n}_1$		$+-$		
9	$(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\gamma})_1$		$++$	$1 \otimes 1$	
10	$\gamma_0(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\gamma})_1$		$++$		
11	$\gamma_5(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\gamma})_1$		$--$		
12	$\gamma_0\gamma_5(\hat{\mathbf{n}} \times \vec{\gamma})_1$		$-+$		
13	$\gamma_1(2\hat{n}_1^2 - \hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$--$	$1 \otimes 2$	
14	$\gamma_0\gamma_1(2\hat{n}_1^2 - \hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$--$		
15	$\gamma_5\gamma_1(2\hat{n}_1^2 - \hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$++$		
16	$\gamma_0\gamma_5\gamma_1(2\hat{n}_1^2 - \hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$+-$		
1	$\hat{n}_1^2 + \hat{n}_2^2 - 2\hat{n}_3^2$	2	$++$	$0 \otimes 2$	E
2	$\gamma_0\hat{n}_1^2 + \hat{n}_2^2 - 2\hat{n}_3^2$		$-+$		
3	$\gamma_5\hat{n}_1^2 + \hat{n}_2^2 - 2\hat{n}_3^2$		$-+$		
4	$\gamma_0\gamma_5\hat{n}_1^2 + \hat{n}_2^2 - 2\hat{n}_3^2$		$+-$		
5	$(\gamma_1\hat{n}_1 + \gamma_2\hat{n}_2 - 2\gamma_3\hat{n}_3)$		$++$	$1 \otimes 1$	
6	$\gamma_0(\gamma_1\hat{n}_1 + \gamma_2\hat{n}_2 - 2\gamma_3\hat{n}_3)$		$++$		
7	$\gamma_5(\gamma_1\hat{n}_1 + \gamma_2\hat{n}_2 - 2\gamma_3\hat{n}_3)$		$--$		
8	$\gamma_0\gamma_5(\gamma_1\hat{n}_1 + \gamma_2\hat{n}_2 - 2\gamma_3\hat{n}_3)$		$-+$		
1	$(\gamma_2\hat{n}_1 + \gamma_1\hat{n}_2)$	2	$++$	$1 \otimes 1$	T_2
2	$\gamma_0(\gamma_2\hat{n}_1 + \gamma_1\hat{n}_2)$		$++$		
3	$\gamma_5(\gamma_2\hat{n}_1 + \gamma_1\hat{n}_2)$		$--$		
4	$\gamma_0\gamma_5(\gamma_2\hat{n}_1 + \gamma_1\hat{n}_2)$		$-+$		
5	$\gamma_1(\hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$--$	$1 \otimes 2$	
6	$\gamma_0\gamma_1(\hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$--$		
7	$\gamma_5\gamma_1(\hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$++$		
8	$\gamma_0\gamma_5\gamma_1(\hat{n}_2^2 - \hat{n}_3^2)$		$+-$		

Tabelle 7: Erzeugungsoperatoren für D-Mesonen, D_s-Mesonen und Charmonium.

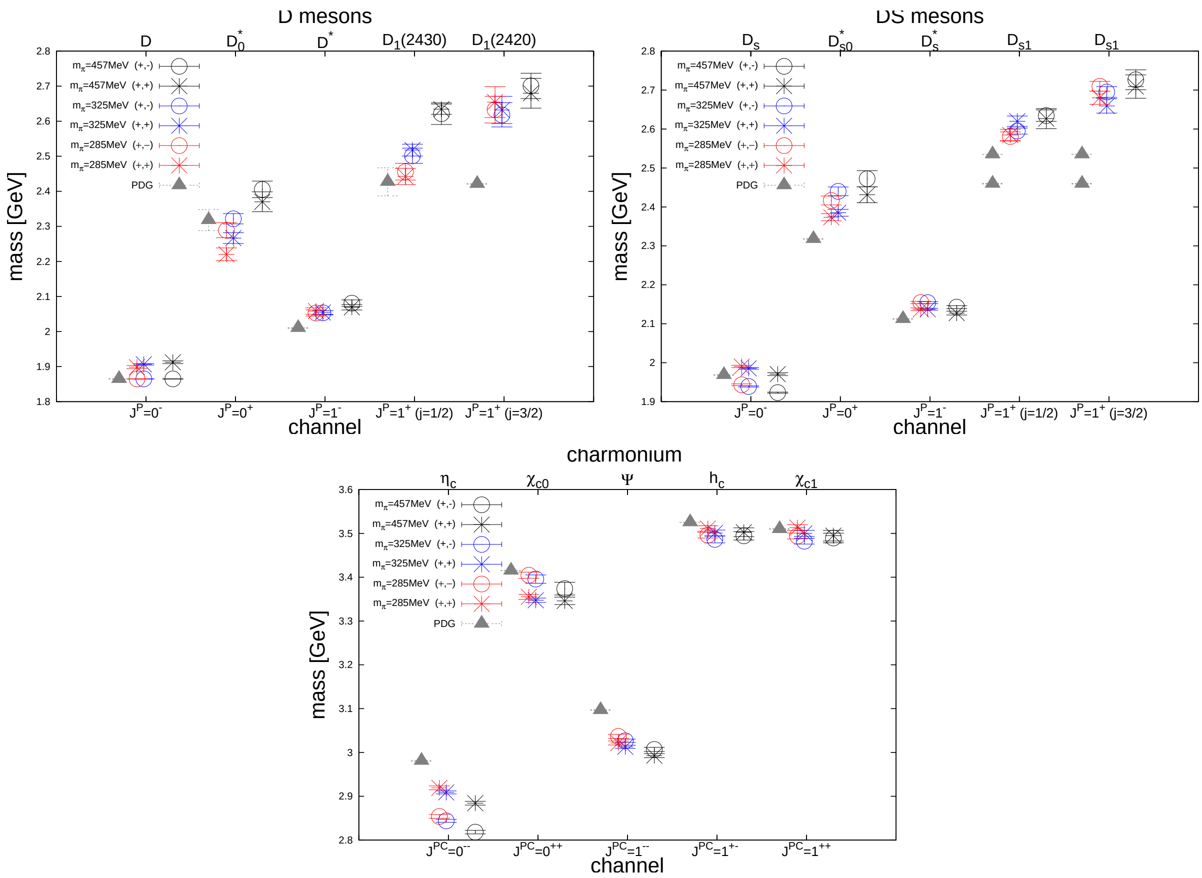

Abbildung 7: (entstammt [7]) Die Spektren von D-Mesonen, D_s-Mesonen und Charmonium für Gitterabstand $a \approx 0.086\,\mathrm{fm}$ und drei verschiedene u/d-Quarkmassen, die Pionmassen $m_\pi \approx 285\,\mathrm{MeV}$ (rot), $m_\pi \approx 325\,\mathrm{MeV}$ (blau) und $m_\pi \approx 457\,\mathrm{MeV}$ (schwarz) entsprechen.

überein. Eine umfangreiche Analyse und Diskussion wird in einer in naher Zukunft erscheinenden Arbeit enthalten sein. Auffällig und interessant ist eine vergleichsweise starke Abhängigkeit der Massen von D- und -D_s-Mesonen mit Quantenzahlen $J = 0^+$ und $J = 1^+$ von der leichten u/d-Quarkmasse. Dies deutet darauf hin, dass die Gitter-QCD-Ergebnisse nicht den Massen von D_0^* und D_1 bzw. D_{s0}^* und D_{s1} entsprechen, sondern durch Beiträge der 2-Mesonzustände $D^{(*)} + \pi$ bzw. $D_s^{(*)} + K$ mit gleichen Quantenzahlen verfälscht werden. Dies würde auch mit dem experimentellen Ergebnis übereinstimmen, dass $D_0^*(2400)$ und $D_1(2430)$ große Breiten besitzen. Insbesondere für $D_{s0}^*(2317)$ und $D_{s1}(2460)$ wird auch eine Tetraquark-Struktur diskutiert, da diese Zustände, verglichen mit Ergebnissen aus Quarkmodellen (z.B. [38]), unerwartet leicht sind. In jedem Fall wäre für diese D- und -D_s-Mesonen mit $J = 0^+$ und $J = 1^+$ eine umfassendere Gitter-QCD-Studie von Interesse, bei der neben den hier verwendeten Quark-Antiquark-Erzeugungsoperatoren auch 4-Quark-Erzeugungsoperatoren verschiedenen Typs (mesonische Moleküle, Diquark-Antidiquark-Paare, 2-Mesonstruktur) verwendet werden. Entsprechende Techniken befinden sich in der Entwicklung [10, 11] und werden in Kapitel 5 zusammengefasst.

Die gezeigten und sich gegenwärtig in Berechnung befindlichen Spektren von D- und D_s-Mesonen und Charmonium sind im Kontext aktueller und zukünftig geplanter Experimente, z.B. dem PANDA-Experiment bei FAIR, von großem Interesse. Diese Zustände werden sehr präzise Vermessen werden, weshalb entsprechende theoretische QCD-Ergebnisse wünschenswert sind.

Eine weitere interessante in naher Zukunft geplante Weiterverwendung der berechneten Mesonmassen ist ihre Kombination mit den entsprechenden statisch-leichten Mesonmassen aus Abschnitt 4.1.1. Dies würde die dort verwendeten experimentellen Ergebnisse für D- und D_s-Mesonen durch Gitter-QCD-Ergebnisse ersetzen und gleichzeitig ermöglichen, Datenpunkte für mehrere unterschiedliche c-Quarkmassen im physikalischen Bereich zu erzeugen. Dies würde präzisere Extrapolation zu m_b und damit auch präzisere Ergebnisse für B- und B_s-Mesonmassen zur Folge haben. Außerdem könnten auch B- und B_s-Mesonen studiert werden, für die noch keine entsprechenden experimentellen D- und D_s-Ergebnisse vorliegen.

Da die D- und D_s-Meson- und Charmoniumspektren für verschiedene u/d-Quarkmassen und verschiedene Volumina berechnet wurden, sind auch Fits mit effektiven chiralen Theorien von Interesse. Erste Schritte in diese Richtung befinden sich bereits in Arbeit.

4.2.2 Separation und Struktur von D^{**}-Mesonen mit $J^P = 1^+$

Wie am Ende von Abschnitt 4.1.4 erwähnt, wurden erste Aktivitäten unternommen, die Isgur-Wise-Formfaktoren $\tau_{1/2}(w)$ und $\tau_{3/2}(w)$ mit b- und c-Quarks endlicher Masse zu berechnen [67, 68]. Ein notwendiger vorbereitender Schritt und gleichzeitig eine technische Herausforderung besteht darin, die finalen D^{**}-Mesonen mit entsprechenden Erzeugungsoperatoren in Form von Testzuständen zu präparieren. Wichtig ist dabei nicht nur die Massenberechnung der beiden ähnlich schweren $J^P = 1^+$-Zustände, sondern auch eine Untersuchung ihrer Struktur, d.h. eine Identifikation dieser Zustände mit $j \approx 1/2$ bzw. $j \approx 3/2$.

Mit den im vorangegangenen Abschnitt 4.2.1 beschriebenen Techniken ist dieser vorbereitende Schritt erstmals erfolgreich mit Gitter-QCD-Methoden ausgeführt worden. Aufgrund der Paritätsbrechung der verwendeten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung (siehe Abschnitt 3.1) muss das tiefliegende $J = 1$-Spektrum, also der $J^P = 1^-$-Grundzustand und die beiden $J^P = 1^+$-Anregungen, aus einer Korrelationsmatrix extrahiert werden (siehe Abschnitt 2.4.4). Zu diesem Zweck wurde z.B. eine 12×12-Korrelationsmatrix berechnet, die folgende Erzeugungsoperatoren enthält:

- für $J = 1$ und $j = 1/2$

$$\Gamma(\mathbf{n}) = \gamma_1 \gamma_5 G \tag{43}$$

  (entspricht $L = 0$ und damit offensichtlich $j = 1/2$) und

$$\Gamma(\mathbf{n}) = \Big((\mathbf{n} \times \vec{\gamma})_1 - \hat{n}_1 \gamma_0 \gamma_5\Big) G \tag{44}$$

  (so konstruiert, dass die Kombination von $L = 1$ mit $S = 0$ bzw. $S = 1$ gerade $j = 1/2$, nicht jedoch $j = 3/2$ ergibt),

- für $J = 1$ und $j = 3/2$

$$\Gamma(\mathbf{n}) = \Big((\mathbf{n} \times \vec{\gamma})_1 + 2\hat{n}_1 \gamma_0 \gamma_5\Big) G \tag{45}$$

(so konstruiert, dass die Kombination von $L = 1$ mit $S = 0$ bzw. $S = 1$ gerade $j = 3/2$, nicht jedoch $j = 1/2$ ergibt)

mit $G \in \{1, \gamma_0\}$ für $P = +$ und $G \in \{\gamma_5, \gamma_0\gamma_5\}$ für $P = -$. Dies entspricht geeigneten Linearkombinationen der Erzeugungsoperatoren mit $J = 1$ und Indizes 1 bis 12 in Tabelle 7.

Die Analyse dieser 12×12-Korrelationsmatrix geschieht durch Lösung eines generalisierten Eigenwertproblems (siehe Abschnitt 2.4.4). Die resultierenden Massen wurden bereits im vorangegangenen Abschnitt gezeigt (siehe Abbildung 7) und diskutiert. Die Zuordnung der Quantenzahlen zu den drei genannten $J = 1$-Zuständen geschieht über die Komponenten der erhaltenen 12-dimensionalen Eigenvektoren. Der Übersichtlichkeit halber wurden mehrere Komponenten zu jeweils einer Größe zusammengefasst (durch Addition der Betragsquadrate der entsprechenden Komponenten):

- die sechs Operatoren (43), (44) und (45) mit $P = -$ (hellblaue Kurven in Abbildung 8),
- die beiden $j = 1/2$-Operatoren (43) mit $P = +$ (grüne Kurven in Abbildung 8),
- die beiden $j = 1/2$-Operatoren (44) mit $P = +$ (blaue Kurven in Abbildung 8),
- die beiden $j = 3/2$-Operatoren (44) mit $P = +$ (magenta Kurven in Abbildung 8).

Diese Größen, die ein Maß für die Beiträge der entsprechenden Erzeugungsoperatoren zu einem extrahierten Zustand darstellen, sind in Abbildung 8 zu sehen und erlauben die folgenden Schlussfolgerungen:

- Wie erwartet ist der Grundzustand von $P = -$-Erzeugungsoperatoren dominiert (hellblaue Kurve). Es handelt sich um das D^*-Meson ($J^P = 1^-$).
- Die erste Anregung ist klar von $P = +$-Erzeugungsoperatoren mit $j \approx 1/2$ dominiert. Erzeugungsoperatoren mit $L = 0$ (grüne Kurve) leisten stärkeren Beitrag als Erzeugungsoperatoren mit $L = 1$ (blaue Kurve). Folglich wird diese Anregung als das breite $D_1(2430)$-Meson identifiziert ($J^P = 1^+$, $j \approx 1/2$), wobei $J = 1$ hauptsächlich durch den Quarkspin realisiert wird.
- Die zweite Anregung ist klar von $P = +$-Erzeugungsoperatoren mit $j \approx 3/2$ dominiert (magenta Kurve). Folglich wird diese Anregung als der $D_1(2420)$-Zustand identifiziert ($J^P = 1^+$, $j \approx 3/2$).

In noch nicht publizierten Untersuchungen wurden weitere vier Erzeugungsoperatoren verwendet, die $L = 2$ und $S = 1$ und damit $j = 3/2$ entsprechen (Erzeugungsoperatoren mit $J = 1$ und Indizes 13 bis 16 in Tabelle 7), also eine 16×16-Korrelationsmatrix analysiert. Die Ergebnisse bleiben qualitativ gleich, d.h. der 3/2-Zustand scheint im Wesentlichen $L = 1$, nicht aber $L = 2$ zu entsprechen.

Qualitativ identische Resultate erhält man im D_s-Mesonsektor.

Wie eingangs erwähnt, können diese Ergebnisse und die hierfür entwickelten Techniken direkt in einem bereits gestarteten längerfristigen Projekt zur Berechnung der Isgur-Wise-Formfaktoren $\tau_{1/2}(w)$ und $\tau_{3/2}(w)$ mit b- und c-Quarks endlicher Masse verwendet werden [67, 68].

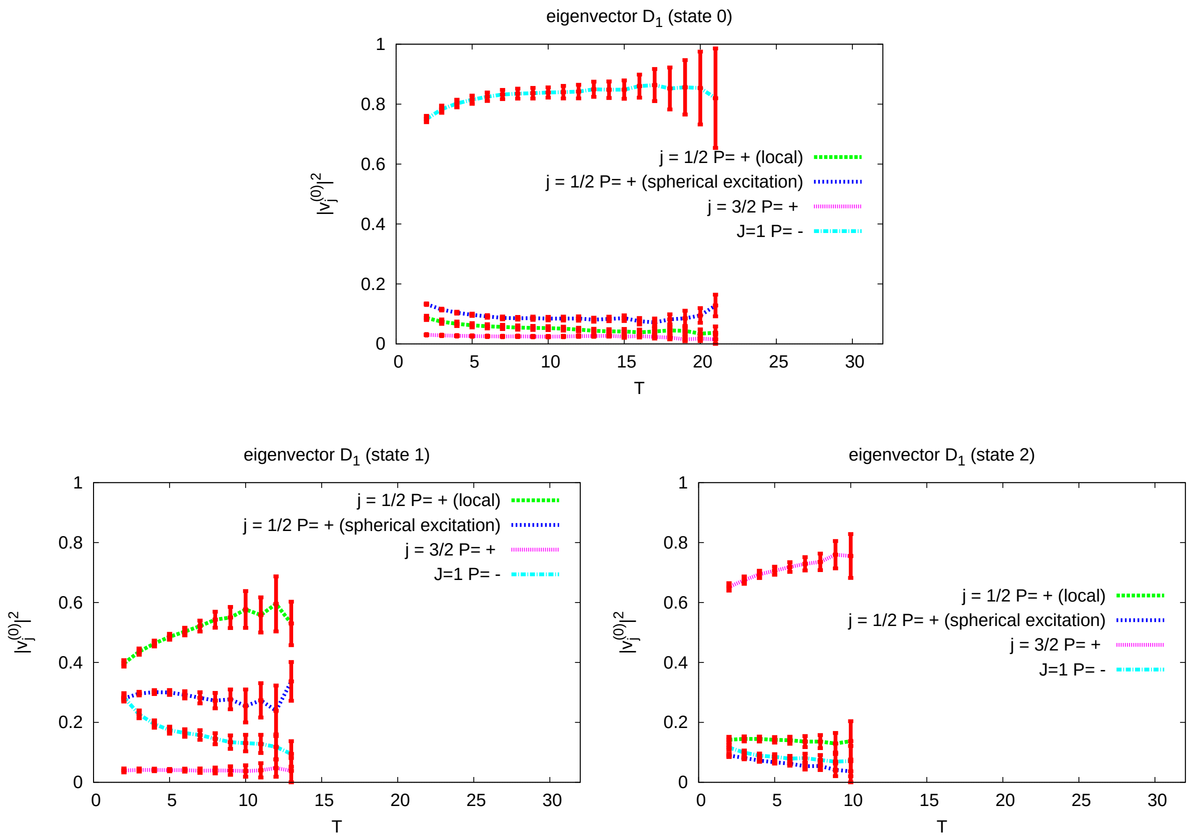

Abbildung 8: (entstammt [7]) Der “Operatorinhalt” der drei leichtesten D-Mesonzustände mit $J = 1$ als Funktion der Zeitseparation $\Delta t/a$. Der Grundzustand (oben) wurde als D^* ($J^P = 1^-$) identifiziert, die erste Anregung (links unten) als $D_1(2430)$ ($J^P = 1^+$, $j \approx 1/2$), die zweite Anregung (rechts unten) als $D_1(2420)$ ($J^P = 1^+$, $j \approx 3/2$).

4.3 Massenbestimmung des Kaons und des D-Mesons im unitären 2+1+1-Flavor-Wilson-Twisted-Mass-Gitter-QCD-Setup [8, 9]

Vorbemerkung:
[8] beschreibt das umfangreiche 2+1+1-Flavor-Simulationsprogramm der ETM-Kollaboration. Ich habe dazu im Wesentlichen durch Entwicklung geeigneter Techniken zur Massenbestimmung des Kaons und des D-Mesons beigetragen. Diese Techniken werden in [9] ausführlich beschrieben. Ich bin einer von drei Hauptautoren dieser Arbeit.

Die ETM-Kollaboration, der ich seit einigen Jahren angehöre, hat als eine der ersten Gitter-QCD-Kollaborationen weltweit umfangreiche Simulationen mit 2+1+1 dynamischen Quarkflavors durchgeführt [8]. Für diese Simulationen war es notwendig, die Masse der s- und c-Seequarks zumindest approximativ auf deren physikalische Werte einzustellen. Dieser Prozess ist relativ aufwändig, da zunächst Simulationen mit geratenen nackten s- und c-Quarkmassen ausgeführt werden müssen. In einem zweiten Schritt werden dann Größen berechnet, die zeigen, wie weit entfernt m_s und m_c von ihren entsprechenden physikalischen Werten gewählt wurden. Hierfür bietet sich die Verwendung von $2(m_K)^2 - (m_\pi)^2$ sowie m_D an, da diese Größen kaum abhängig von der u/d-Quarkmasse sind. D.h. auch für unphysikalisch schwere u/d-Quarks kann m_s und m_c in guter Näherung auf physikalische Werte eingestellt werden. Diese beiden Schritte werden iteriert, d.h. abhängig von den Ergebnissen für $2(m_K)^2 - (m_\pi)^2$ und m_D werden m_s und m_c korrigiert und die Simulationen werden wiederholt.

Eine spezielle Schwierigkeit dabei ist in der verwendeten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung begründet, die nicht nur Parität, sondern auch die Strange- und Charmflavorsymmetrie bricht. In anderen Worten kann sich ein s-Quark in ein c-Quark verwandeln und umgekehrt, d.h. es gibt Propagatoren von s nach $\bar{c}$ und von c nach $\bar{s}$. Während Strangeness S und Charm C' bei endlichem Gitterabstand nur noch approximative Quantenzahlen sind, verschwindet diese Symmetriebrechung im Kontinuumslimes und man erhält QCD zurück. Die Simulationen werden natürlich stets bei endlichen Werten des Gitterabstands ausgeführt. Außerdem muss im vorliegenden speziellen Fall bei Berechnung von m_K und m_D (und damit indirekt $2(m_K)^2 - (m_\pi)^2$) für die s- und c-Valenzquarks die gleiche Diskretisierung wie im See verwendet werden (ein sogenanntes unitäres Setup)[6], da die Seequarkmassen mit den physikalischen s- und c-Quarkmassen abgeglichen und auf deren Werte eingestellt werden sollen. Insgesamt führt dies zu schwerwiegenden technischen Problemen bei der Berechnung der D-Mesonmasse, da das D-Meson nicht mehr durch Symmetrien vom sehr viel leichteren Kaon oder dessen Paritätspartner unterscheidbar ist. Das D-Meson ist also ein hochgradig angeregter Zustand im kombinierten $P = -$- und $P = +$- bzw. S- und C'-Sektor. Eine verlässliche Berechnung der D-Mesonmasse erfordert also die Analyse einer hinreichend großen Korrelationsmatrix. Dabei ist die gleichzeitige Berechnung der darunterliegenden Zustände K ($J^P = 0^-$) und $\kappa \equiv K_0^*$ ($J^P = 0^+$) notwendig. Verfälschungen durch Vielteilchenzustände, bestehend aus K oder κ und einem oder mehreren Pionen, müssen außerdem ausgeschlossen werden.

Um eine hinreichend zuverlässige und genaue Bestimmung der D-Mesonmasse unter den oben skizzierten Schwierigkeiten zu gewährleisten, wurden drei unterschiedliche Methoden entwickelt und implementiert. Sie liefern im Rahmen der statistischen und abgeschätzten systematischen Fehler identische Ergebnisse [9]. Abbildung 9 zeigt eine Bestimmung der D-Mesonmasse durch Lösen eines generalisierten Eigenwertproblems und der anschließenden Berechnung von effektiven Massen (links) und Interpretation der Eigenvektorkomponenten (rechts). Das D-Meson ist der zweite angeregte Zustand (magenta Kurve im linken Plot), was aus der deutlichen Dominanz eines Erzeugungsoperators der Struktur $\bar{c}\gamma_5 u$ geschlossen werden kann (blaue Kurve im rechten Plot). Im untersuchten Bereich der Zeitseparationen $\Delta t/a \leq 16$ ist keine Abweichung der effektiven Masse des D-Mesons von einer exponentiellen Plateauannäherung erkennbar. Die Tatsache, dass die beiden anderen angesprochenen Methoden äquivalente Ergebnisse liefern (siehe Figure 10 in [9]), führt zur Schlussfolgerung, dass bei den verwendeten Erzeugungsoperatoren und Gitterabständen $a \lesssim 0.09\,\mathrm{fm}$ die Twisted-Mass-Flavorbrechung schwach und eine hinreichend genaue Bestimmung der D-Mesonmasse möglich ist (relativer Fehler etwa 2.5%).

[6] Dies steht im Gegensatz zu allen anderen in dieser Zusammenfassung diskutierten Wilson-Twisted-Mass-Projekten, insbesondere z.B. der Berechnung des D-Mesonspektrums in Abschnitt 4.2.1, bei denen zumindest für die Valenzquarks eine Diskretisierung verwendet wird, die Strangeness und Charm erhält (siehe auch die Diskussion in Abschnitt 3.1).

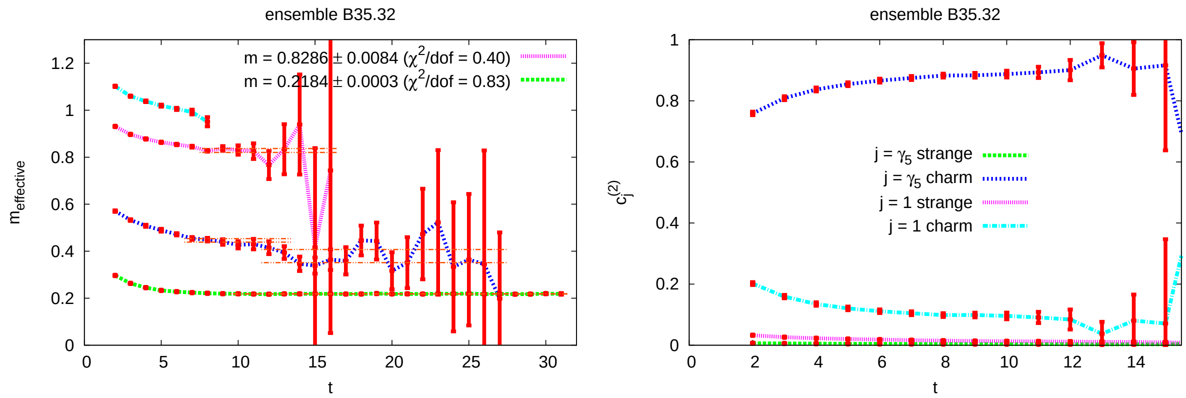

Abbildung 9: (entstammt [9]) **(links)** Effektive Massen der Zustände K (grün), $\kappa = K_0^*$ (blau), D (magenta) und D_0^* (hellblau) als Funktionen der Zeitseparation $\Delta t/a$. **(rechts)** Betragsquadrate der Eigenvektorkomponenten des zweiten angeregten Zustands (“Operatorinhalt”) als Funktionen der Zeitseparation $\Delta t/a$. Die klare Dominanz eines Erzeugungsoperators von der Struktur $\bar{c}\gamma_5 u$ erlaubt eine Identifikation dieses Zustands als D-Meson.

5 Untersuchung von Tetraquarkkandidaten mit $qq\bar{q}\bar{q}$-Erzeugungsoperatoren [10, 11]

Die bisher geschilderten Methoden eignen sich gut zum Studium von Mesonen, die im Wesentlichen aus einem Quark und einem Antiquark aufgebaut sind. Bei einigen Mesonen, insbesondere den relativ schlecht verstandenen skalaren Mesonen, vermutet man an Stelle eines Quark-Antiquark-Paares eher einen gebundenen Zustand von vier Quarks (zwei Quarks und zwei Antiquarks), ein sogenanntes Tetraquark. Dabei werden verschiedene Anordnungen der vier Quarks diskutiert. Sind im Wesentlichen je ein Quark und ein Antiquark zu einem Meson zusammengebunden und führen die Restkräfte zwischen diesen beiden Mesonen zu einem gebundenen 4-Quarkzustand, spricht man von einem mesonischen Molekül. Sind dagegen die beiden Quarks zu einem sogenannten Diquark und die beiden Antiquarks zu einem sogenannten Antidiquark zusammengebunden und dann erst Diquark und Antidiquark zu einem Farbsinglett, spricht man von einem Diquark-Antidiquark-Paar[7]. Um solche Tetraquarkkandidaten mit Gitter-QCD-Methoden zu studieren, sind aufwändigere Verfahren und Rechnungen erforderlich.

In [10, 11] wird unter anderem das $a_0(980)$-Meson untersucht. Es ist Teil des Nonetts leichter skalarer Mesonen mit Quantenzahlen $I(J^P) = 1(0^+)$. Diese leichten Mesonen sind theoretisch relativ schlecht verstanden und werden seit vielen Jahren als Tetraquarkkandidaten gehandelt. Zum einen ist die beobachtete Massenhierarchie der Zustände σ, $f_0(980)$, κ und $a_0(980)$ umgekehrt zu der, die man von einem Standardquarkmodell erwarten würde (siehe Abbildung 10, links und mittig). Mit einem Quark und einem Antiquark kann Isospin $I = 1$ nur mit zwei leichten Quarks realisiert werden. Im Gegensatz dazu sind für $I = 0$ sowohl zwei leichte Quarks als auch zwei s-Quarks möglich. In einem Standardquarkmodell ist die Flavor-Struktur des Nonetts also die Folgende:

$$\begin{aligned}
I = 0 \quad &\rightarrow \quad \sigma \;\equiv\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(u\bar{u} + d\bar{d}\Big) \quad , \quad f_0 \;\equiv\; s\bar{s} \\
I = 1/2 \quad &\rightarrow \quad \kappa \;\equiv\; d\bar{s} \;,\; s\bar{u} \;,\; u\bar{s} \;,\; s\bar{d} \\
I = 1 \quad &\rightarrow \quad a_0 \;\equiv\; d\bar{u} \;,\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(u\bar{u} - d\bar{d}\Big) \;,\; u\bar{d}.
\end{aligned} \tag{46}$$

Darüber hinaus erklärt diese Flavorstruktur auch nicht die Massengleichheit von $f_0(980)$ und $a_0(980)$.

Nimmt man eine Tetraquarkstruktur an, speziell eine Diquark-Antidiquark-Struktur, hat das Nonett die Flavorstruktur

$$\begin{aligned}
I = 0 \quad &\rightarrow \quad \sigma \;\equiv\; [ud][\bar{u}\bar{d}] \quad , \quad f_0 \;\equiv\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big([su][\bar{u}\bar{s}] + [sd][\bar{d}\bar{s}]\Big) \\
I = 1/2 \quad &\rightarrow \quad \kappa \;\equiv\; [sd][\bar{u}\bar{d}] \;,\; [ud][\bar{u}\bar{s}] \;,\; [su][\bar{u}\bar{d}] \;,\; [ud][\bar{d}\bar{s}] \\
I = 1 \quad &\rightarrow \quad a_0 \;\equiv\; [sd][\bar{u}\bar{s}] \;,\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big([su][\bar{u}\bar{s}] - [sd][\bar{d}\bar{s}]\Big) \;,\; [su][\bar{d}\bar{s}]
\end{aligned} \tag{47}$$

[7] An dieser Stelle sei auf eine alternative in der Literatur ebenfalls gängige Notation hingewiesen, in der Tetraquarks ausschließlich Diquark-Antidiquark-Paare bezeichnen.

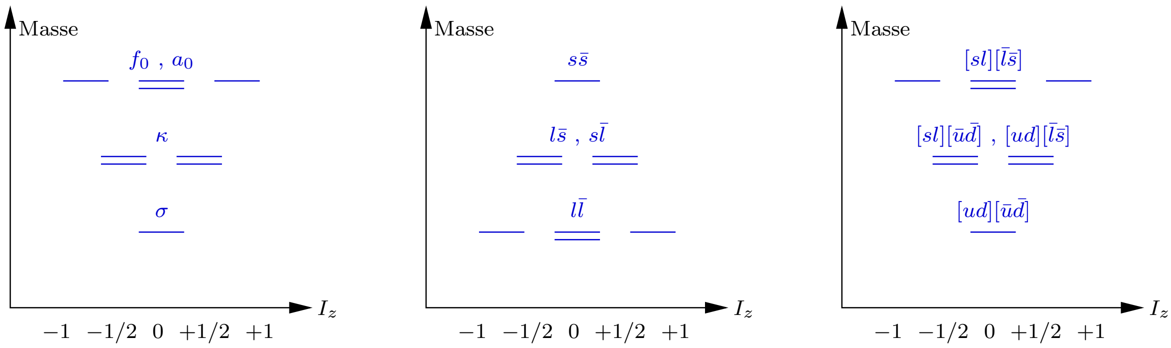

Abbildung 10: Die Flavorstruktur und Massenanordnung des leichten skalaren Nonetts ($J^P = 0^+$). **(links)** Experimentelle Ergebnisse. **(mittig)** Standardquarkmodell ($q\bar{q}$-Struktur). **(rechts)** $qq\bar{q}\bar{q}$-Quark-Struktur.

[69]. Damit lässt sich die Massenanordnung des gesamten Nonetts offensichtlich verstehen, unter anderem auch die Massengleichheit von $f_0(980)$ und $a_0(980)$ (siehe Abbildung 10, rechts).

Um herauszufinden, ob das $a_0(980)$ tatsächlich ein solcher Tetraquarkzustand ist, oder ob es sich doch im Wesentlichen um ein Quark-Antiquark-Paar handelt oder eventuell auch um eine kurzlebige Resonanz, ist es erforderlich eine Reihe von Erzeugungsoperatoren mit den Quantenzahlen des $a_0(980)$ aber von verschiedener Struktur zu verwenden,

$$\mathcal{O}^{q\bar{q}} \equiv \int d^3r \, \Big(\bar{d}(\mathbf{r})u(\mathbf{r})\Big) \tag{48}$$

$$\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}} \equiv \int d^3r \, \Big(\bar{s}(\mathbf{r})\gamma_5 u(\mathbf{r})\Big)\Big(\bar{d}(\mathbf{r})\gamma_5 s(\mathbf{r})\Big) \tag{49}$$

$$\mathcal{O}^{\eta_s\pi\text{ molecule}} \equiv \int d^3r \, \Big(\bar{s}(\mathbf{r})\gamma_5 s(\mathbf{r})\Big)\Big(\bar{d}(\mathbf{r})\gamma_5 u(\mathbf{r})\Big) \tag{50}$$

$$\mathcal{O}^{\text{diquark}} \equiv \int d^3r \, \epsilon^{abc}\Big(\bar{s}^b(\mathbf{r})\mathcal{C}\gamma_5(\bar{d}^c(\mathbf{r}))^T\Big)\epsilon^{ade}\Big((u^d(\mathbf{r}))^T\mathcal{C}\gamma_5 s^e(\mathbf{r})\Big) \tag{51}$$

$$\mathcal{O}^{K+\bar{K}\text{ 2-meson}} \equiv \int d^3r_1 \, \Big(\bar{s}(\mathbf{r}_1)\gamma_5 u(\mathbf{r}_1)\Big) \int d^3r_2 \, \Big(\bar{d}(\mathbf{r}_2)\gamma_5 s(\mathbf{r}_2)\Big) \tag{52}$$

$$\mathcal{O}^{\eta_s+\pi\text{ 2-meson}} \equiv \int d^3r_1 \, \Big(\bar{s}(\mathbf{r}_1)\gamma_5 s(\mathbf{r}_1)\Big) \int d^3r_2 \, \Big(\bar{d}(\mathbf{r}_2)\gamma_5 u(\mathbf{r}_2)\Big). \tag{53}$$

Der Erzeugungsoperator $\mathcal{O}^{q\bar{q}}$ ist dabei ein Standard-Quark-Antiquark-Erzeugungsoperator (wie z.B. in Kapitel 4 durchweg verwendet). Alle weiteren Erzeugungsoperatoren beinhalten zwei Quarks und zwei Antiquarks. Bei $\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}}$, $\mathcal{O}^{\eta_s\pi\text{ molecule}}$ und $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$ befinden sich die Quarks alle am gleichen Raumpunkt, d.h. diese Erzeugungsoperatoren modellieren bei Anwendung auf das Vakuum gebundene 4-Quarkzustände. $\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}}$ und $\mathcal{O}^{\eta_s\pi\text{ molecule}}$ haben dabei die oben diskutierte Struktur eines mesonischen Moleküls, wohingegen $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$ einem Diquark-Antidiquark-Paar entspricht. Dabei wurden leichte pseudoskalare Mesonen $\sim \bar{q}\gamma_5 q$ verwendet bzw. die leichtesten Diquarks $\sim q^T\mathcal{C}\gamma_5 q$ und Antidiquarks $\sim \bar{q}\mathcal{C}\gamma_5\bar{q}^T$ (siehe die entsprechende Spektrumsberechnung von statisch-leichten Baryonen in Abschnitt 4.1.2). Die letzten beiden Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}^{K+\bar{K}\text{ 2-meson}}$ und $\mathcal{O}^{\eta_s+\pi\text{ 2-meson}}$ generieren jeweils zwei Mesonen mit verschwindenden Impulsen, d.h. an unabhängigen Raumpunkten. Zustände, die im Wesentlichen von diesen beiden Erzeugungsoperatoren angeregt werden, sollten nicht als gebundene 4-Quarkzustände interpretiert werden, sondern als 2-Mesonzustände.

Die den Erzeugungsoperatoren (48) bis (53) entsprechende 6×6-Korrelationsmatrix ist in Abbildung 11 diagrammatisch skizziert (Linien entsprechen Quarkpropagatoren). Diese Korrelationsmatrix mit Methoden der Gitter-QCD zu berechnen, ist sehr schwierig und rechenzeitaufwändig. Eine der Hauptursachen dafür ist, dass Quarkpropagatoren von allen Raumzeitpunkten zu allen anderen Raumzeitpunkten nur mit stochastischen Methoden abgeschätzt werden können [70, 71][8]. Mehrere solcher stochastischer Propagatoren für ein Diagramm zu verwenden, führt in der Regel zu einem sehr großen statistischen Fehler und damit zu einem unbrauchbaren Ergebnis. Eine Alternative sind die exakten Punktpropagatoren, Propagatoren von einem ausgezeichneten Raumzeitpunkt zu allen anderen (siehe z.B. [73, 74]). Bei deren Verwendung kann allerdings die auf dem Gitter vorliegende Translationsinvarianz nicht mehr ausgenutzt werden, die wiederum wichtig ist, um vom Gluonfeld verursachte statistische Fluktuationen in den Diagrammen zu reduzieren. Einige Diagramme können aufgrund ihrer komplexen Raumzeitstruktur außerdem gar nicht ausschließlich mit Punktpropagatoren berechnet werden. Die schwierige Aufgabe besteht also darin, für jedes Diagramm die optimale Kombination von Propagatoren (stochastische oder Punktpropagatoren) zu finden, eventuell noch kombiniert mit weiteren Techniken, z.B. dem One-End-Trick [75, 76] oder sequentiellen Propagatoren [77]. Das Finden der optimalen Kombinationen erfordert die Implementation verschiedener Kombinationen von Techniken und umfangreiche numerische Testrechnungen (siehe die ausführliche Diskussion in [11]).

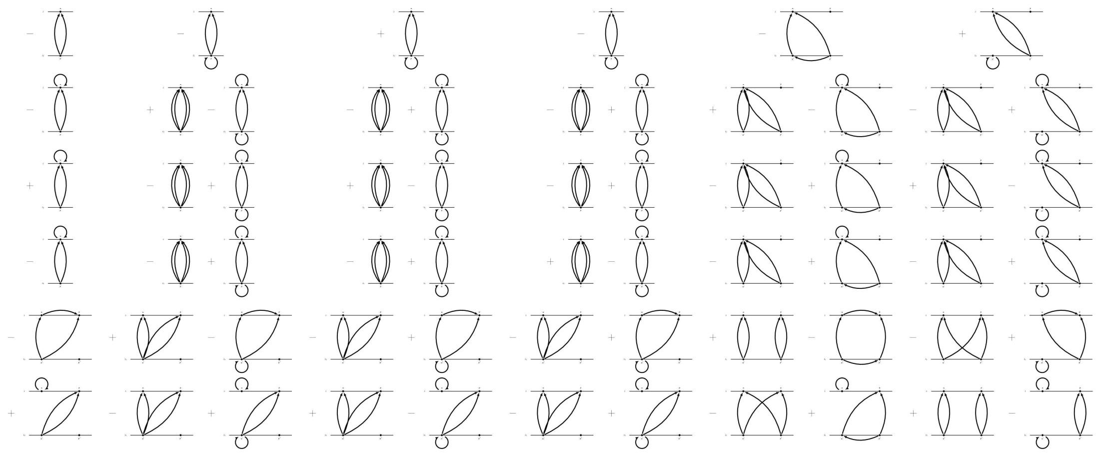

Abbildung 11: (entstammt [11]) Diagrammatische Darstellung der 6×6-Korrelationsmatrix bestehend aus den Erzeugungsoperatoren (48) bis (53).

[8]Neben stochastischen Propagatoren existiert noch die sogenannte Destillation-Technik, um Quarkpropagatoren von allen Raumzeitpunkten zu allen anderen Raumzeitpunkten zu berechnen [72]. Diese Technik ist ebenfalls sehr aufwändig zu implementieren und eher schlecht mit den hier verwendeten Verfahren zu kombinieren. Deshalb wird sie in den hier diskutieren Arbeiten nicht verwendet.

5.1 $a_0(980)$ bei Vernachlässigung von Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht

Die Berechnung der in Abbildung 11 gezeigten Korrelationsmatrix vereinfacht sich erheblich, wenn man Propagatoren vernachlässigt, die am gleichen Zeitpunkt starten und enden, also z.B. geschlossene Quarkloops. Während bei der Berechnung des Charmoniumspektrums (siehe Abschnitt 4.2.1) solchen Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht kaum Bedeutung zukommt (Vernachlässigung von unverbundenen Diagrammen), ist im Fall des $a_0(980)$-Mesons deren Einfluss nicht offensichtlich. Dennoch sind im Rahmen dieser Näherung erzielte Ergebnisse für das $a_0(980)$-Meson zumindest qualitativ von Interesse.

Bei Vernachlässigung von Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht sind sowohl die Anzahl der Valenzquarks als auch die Anzahl der Valenzantiquarks Erhaltungsgrößen, d.h. Korrelationen zwischen dem Quark-Antiquark-Erzeugungsoperator (48) und den 4-Quark-Erzeugungsoperatoren (49) bis (53) verschwinden. Folglich ergibt sich für die in Abbildung 11 gezeigte Korrelationsmatrix eine Blockstruktur bestehend aus einer 1×1- und einer 5×5-Matrix, wobei Letztere von besonderem Interesse ist, wenn man Tetraquarkkandidaten studieren will. In Abbildung 12 (links oben) sind die beiden effektiven Massen der 2×2-Unterkorrelationsmatrix zu sehen, die aus den Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}}$ und $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$ aufgebaut ist. Die beiden Plateaus, also die resultierenden Massen, liegen zwar im Bereich von 1000 MeV, der erwarteten Masse des $a_0(980)$-Mesons [16], sind aber von vergleichsweise schlechter Qualität. Nimmt man die beiden 2-Meson-Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}^{K+\bar{K}\text{ 2-meson}}$ und $\mathcal{O}^{\eta_s+\pi\text{ 2-meson}}$ hinzu, findet man die in Abbildung 12 (rechts oben) gezeigten effektiven Massen. Die beiden niedrigsten Massenplataeus sind im Wesentlichen identisch zu denen von Abbildung 12 (links oben), weisen aber sehr viel geringere Fluktuationen und statistische Fehler auf. Der zweite und der dritte angeregte Zustand liegen deutlich höher. Dies deutet drauf hin, dass die beiden beobachteten Zustände in der Gegend von 1000 MeV keine Tetraquarks sind, sondern zwei im wesentlichen nicht-wechselwirkende Mesonen. Diese Vermutung bestätigt sich bei Analyse der Eigenvektorkomponenten dieser beiden extrahierten Zustände (siehe Abbildung 12 [unten]). Während der niedrigste zu nahezu 100% ein $\eta_s + \pi$-2-Meson-Zustand ist, ist die erste Anregung im Wesentlichen ein $K + \bar{K}$-2-Meson-Zustand (im verwendeten Gitter-QCD-Setup mit unphysikalisch schweren u/d-Quarkmassen gilt $m_{\eta_s} + m_\pi \approx 2m_K \approx 1000\,\text{MeV}$). Die Schlussfolgerung ist (unter der Annahme, dass die Vernachlässigung von Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht die Ergebnisse zumindest qualitativ nicht beeinflusst), dass das $a_0(980)$-Meson kein im Wesentlichen stabiles Tetraquark ist (eine umfangreichere Diskussion findet sich in [10]). Um herauszufinden, ob es sich um einen Quark-Antiquark-Zustand handelt oder eher um einen vergleichsweise instabilen 4-Quarkzustand, ist die Hinzunahme von Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht erforderlich.

5.2 $a_0(980)$ mit Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht

Wie bereits erwähnt ist die hinreichend präzise Gitter-QCD-Berechnung sämtlicher Diagramme der in Abbildung 11 gezeigten Korrelationsmatrix, insbesondere derer mit Propagatoren innerhalb einer Zeitschicht, sehr herausfordernd. In der Regel gibt es mehrere erfolgversprechende Varianten, ein spezielles Diagramm zu berechnen. Als Beispiel kann das in Abbildung 13 gezeigte Diagramm genannt werden, für das die folgenden Strategien denkbar sind:

(1) Drei Punktpropagatoren und ein stochastischer Propagator (Punkt bei $\mathbf{x}$, stochastischer

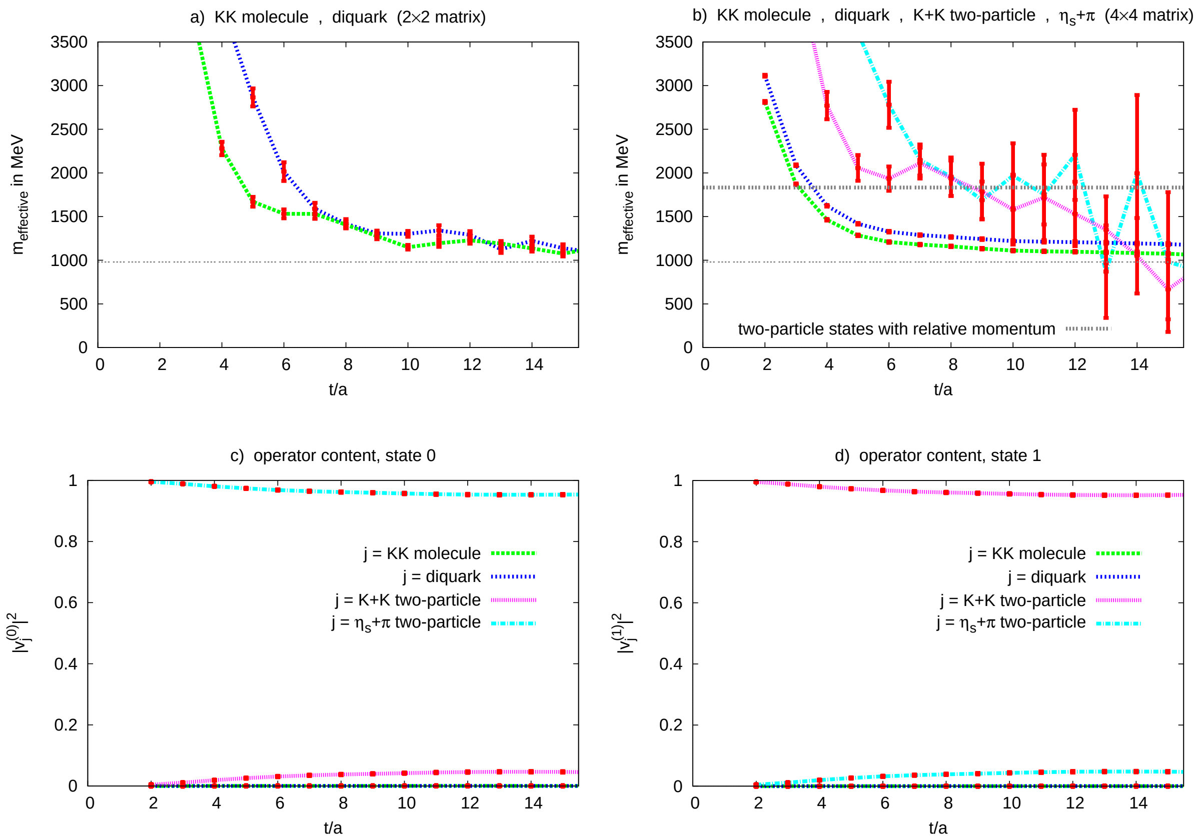

Abbildung 12: (entstammt [10]) **(links oben)** Effektive Massen als Funktionen der Zeitseparation $\Delta t/a$, 2×2-Korrelationsmatrix (Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}}$, $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$). **(rechts oben)** 4×4-Korrelationsmatrix (Erzeugungsoperatoren $\mathcal{O}^{K\bar{K}\text{ molecule}}$, $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$, $\mathcal{O}^{K+\bar{K}\text{ 2-meson}}$, $\mathcal{O}^{\eta_s+\pi\text{ 2-meson}}$). **(unten)** Betragsquadrate der Eigenvektorkomponenten ("Operatorinhalt") der beiden niedrigsten extrahierten Zustände aus der 4×4-Korrelationsmatrix als Funktionen der Zeitseparation $\Delta t/a$.

Propagator für den unverbundenen Quarkloop bei $\mathbf{x}'$).

(2) One-End-Trick bei $\mathbf{y}'$ und ein Punktpropagator für den Quarkloop bei $\mathbf{x}$, ein stochastischer Propagator für den unverbundenen Quarkloop bei $\mathbf{x}'$.

(3) One-End-Trick bei $\mathbf{y}'$ kombiniert mit einem stochastischen Propagator für den Quarkloop bei $\mathbf{x}$, ein Punktpropagator für den unverbundenen Quarkloop bei $\mathbf{x}'$.

(4) One-End-Trick bei $\mathbf{y}'$ kombiniert mit einem stochastischen Propagator für den Quarkloop bei $\mathbf{x}$, ein weiterer stochastischer Propagator für den unverbundenen Quarkloop bei $\mathbf{x}'$.

Welche dieser vier Methoden bei vergleichbarem Rechenaufwand den kleinsten statistischen Fehler liefert, lässt sich theoretisch im Vorfeld bestenfalls abschätzen. Die Implementation einiger oder aller dieser Methoden und entsprechende vergleichende Testrechnungen sind unabdingbar, will man die effizienteste Methode ausmachen. Da spätere Rechnungen sehr viel Rechenzeit auf

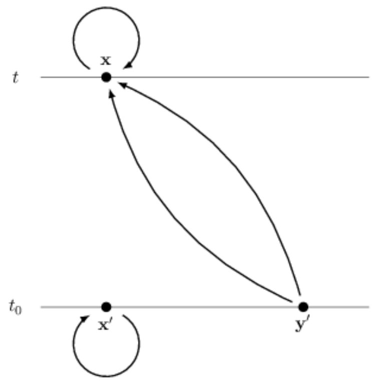

Abbildung 13: (entstammt [11]) Eines der beiden Diagramme, die zur Korrelationsfunktion von $\mathcal{O}^{\eta_s+\pi \text{ 2-meson}}$ und entweder $\mathcal{O}^{K\bar{K} \text{ molecule}}$, $\mathcal{O}^{\eta_s\pi \text{ molecule}}$ oder $\mathcal{O}^{\text{diquark}}$ beitragen.

Hochleistungscomputern benötigen, können derartige Untersuchungen ausgesprochen lohnend sein. Eine Diskussion einiger Diagramme und der Effizienz entsprechender Methoden sowie erste numerische Ergebnisse sind in [11] zu finden. Die Optimierung von Techniken für die komplette Berechnung der Korrelationsmatrix aus Abbildung 11 wird in einer in Kürze erscheinenden Arbeit ausführlich beschrieben werden.

Erwähnenswert ist an dieser Stelle, dass sich die hier entwickelten Techniken und Programmcodes so gut wie unverändert zum Studium nahezu beliebiger Tetraquarkkandidaten eignen. Sobald die eben angesprochenen Optimierungen abgeschlossen sind, können z.B. auch die beiden Tetraquarkkandidaten $D_{s0}^*(2317)$ und $D_{s1}(2460)$ eingehender studiert werden, die in Abschnitt 4.2.1 eher oberflächlich ausschließlich mit Quark-Antiquark-Erzeugungsoperatoren untersucht wurden. Die Bedeutung der Arbeiten [10, 11] geht also weit über das hier exemplarisch diskutierte $a_0(980)$-Meson hinaus. Vielmehr geht es um die Vorbereitung und die Entwicklung von Techniken, mit denen langfristig eine ganze Reihe von Tetraquarkkandidaten mit Gitter-QCD-Methoden untersucht werden sollen.

Ähnliches gilt für die Berechnung von Resonanzparametern (Masse, Breite) von instabilen mesonischen Systemen. Hierfür bietet sich z.B. die sogenannte Lüscher-Methode an, die das volumenabhängige Spektrum von Streuzuständen, also 2-Mesonzuständen benötigt (siehe [26, 27, 28] und die kurze Diskussion in Abschnitt 2.4.3). Dieses Spektrum kann man voraussichtlich in vielen Fällen relativ gut mit Hilfe von Erzeugungsoperatoren mit identischer oder ähnlicher Struktur wie $\mathcal{O}^{K+\bar{K} \text{ 2-meson}}$ und $\mathcal{O}^{\eta_s+\pi \text{ 2-meson}}$ berechnen.

6 Kräfte zwischen schweren Mesonen, Untersuchung von $qq\bar{Q}\bar{Q}$-Tetraquarkkandidaten [12, 13, 14, 15]

Die in Kapitel 5 beschriebenen Methoden zur Untersuchung möglicher Weise existierender Tetraquarkzustände sind sehr rechenzeitaufwändig. Eine alternative kostengünstigere Herangehensweise, die zumindest für gewisse Flavorkombinationen in guter Näherung anwendbar ist, besteht in der Berechnung von Potentialen zwischen zwei statischen Antiquarks in Anwesenheit zweier Quarks endlicher Masse. Diese Potentiale können dann in Modellrechnungen weiterverwendet werden, um zu überprüfen, ob im entsprechenden Sektor ein gebundener $qq\bar{Q}\bar{Q}$-Zustand vorliegen kann, oder nicht.

6.1 BB-, B_sB_s- und B_cB_c-Potentiale

Zur Berechnung eines Potentials zwischen zwei statischen Antiquarks in Anwesenheit zweier Quarks endlicher Masse bieten sich Erzeugungsoperatoren der Form

$$\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(1)}\psi^{(2)}} \equiv (\mathcal{C}\Gamma)_{AB}\tilde{\Gamma}_{CD}\Big(\bar{Q}_C(\mathbf{r}_1)\psi^{(1)}_A(\mathbf{r}_1)\Big)\Big(\bar{Q}_D(\mathbf{r}_2)\psi^{(2)}_B(\mathbf{r}_2)\Big) \tag{54}$$

an. $\bar{Q}(\mathbf{r}_1)$ und $\bar{Q}(\mathbf{r}_2)$ bezeichnen die statischen Antiquarks und $\psi^{(1)}(\mathbf{r}_1)$ und $\psi^{(2)}(\mathbf{r}_2)$ die "leichten" u/d-, s- oder c-Quarks, die für einen farbneutralen Testzustand $\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(1)}\psi^{(2)}}|\Omega\rangle$ sorgen. Da sich jeweils ein statisches Antiquark und ein leichtes Quark den gleichen Raumpunkt teilen, kann man (54) auch als Erzeugungsoperator zweier B-Mesonen (oder B_s- bzw. B_c-Mesonen bei Verwendung von s- oder c-Quarks) betrachten und das entsprechende Potential als BB-Potential. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird die Separation der statischen Antiquarks entlang der z-Achse gewählt, d.h. $\mathbf{r}_1 \equiv (0,0,+r/2)$ und $\mathbf{r}_2 \equiv (0,0,-r/2)$. Im statischen Limes verschwinden die schweren Quarkspins aus dem Hamilton-Operator, haben also keinen Einfluss auf Energieeigenwerte und damit auch nicht auf die gesuchten Potentiale. Es ist daher wichtig, die Spinindizes der leichten Quarks zu koppeln und keinesfalls leichte und statische Quarkspins zu mischen. Die Spinindizes der statischen Quarks können mit $\tilde{\Gamma} \in \{1, \gamma_0, \gamma_3\gamma_5, \gamma_1\gamma_2, \gamma_1\gamma_5, \gamma_2\gamma_5, \gamma_2\gamma_3, \gamma_1\gamma_3\}$ kontrahiert werden, wobei die konkrete Wahl von $\tilde{\Gamma}$ keinen Einfluss auf das resultierende Potential hat.

Die Separation der statischen Antiquarks bricht die Rotationssymmetrie und schränkt sie auf Drehungen um die Separationsachse, also die z-Achse ein. Da nur die beiden leichten Quarks zum Gesamtspin beitragen, ist eine der Quantenzahlen der betrachteten BB-Systeme $j_z = -1, 0, +1$. Parität $P = +, -$ ist ebenfalls eine Quantenzahl. Beschränkt man sich auf $|j_z|$ an Stelle von j_z, ist auch eine Spiegelung entlang der x-Achse (bzw. allgemein entlang einer beliebigen Achse senkrecht zur Separationsachse) eine Symmetrie mit der zugeordneten Quantenzahl $P_x = +, -$. Hinzu kommen noch Flavorquantenzahlen, z.B. im Fall zweier leichter u/d-Quarks Isospin I und die zugehörige z-Komponente. Der vollständige Satz von Quantenzahlen lautet dann $(I, I_z, |j_z|, P, P_x)$. Eine detaillierte Diskussion dieser Symmetrien und Quantenzahlen findet sich in [12, 13].

BB-Potentiale wurden über Korrelationsmatrizen und Lösen von generalisierten Eigenwertproblemen berechnet (siehe Abschnitt 2.4.4), wobei für jeden $\bar{Q}\bar{Q}$-Abstand r eine separate Rechnung auszuführen war. Variiert man die Flavorkombination $\psi^{(1)}\psi^{(2)}$ und die leichte Spinkopplung Γ, erhält man Potentiale für verschiedenen Sektoren, charakterisiert z.B. durch die Quantenzahlen $(I, I_z, |j_z|, P, P_x)$. Diese Potentiale können attraktiv oder repulsiv sein und besitzen für große $\bar{Q}\bar{Q}$-Separationen r verschiedene asymptotische Werte, entweder $2m(S)$, $m(S) + m(P_-)$ oder $2m(P_-)$ ($m(S)$ und $m(P_-)$ stehen für die Massen der entsprechenden statisch-leichten Mesonen; siehe Abschnitt 4.1.1). Die Ergebnisse sind in Tabelle 8 für leichte u/d-Quarks qualitativ zusammengefasst ("A" und "R" bezeichnen attraktiv bzw. repulsiv, "SS", "SP" und "PP" die entsprechenden asymptotischen Werte $2m(S)$, $m(S)+m(P_-)$ und $2m(P_-)$) und in Abbildung 14 zu sehen. Der qualitative Verlauf dieser Potentiale lässt sich wie folgt verstehen:

		$\psi^{(1)}\psi^{(2)} = ud - du$		$\psi^{(1)}\psi^{(2)} = uu\,,\ ud + du\,,\ dd$	
Γ	$\|j_z\|$	$P,\ P_x$	Typ	$P,\ P_x$	Typ
$\gamma_5 + \gamma_0\gamma_5$	0	$-,\ +$	A, SS	$+,\ +$	R, SS
$\gamma_5 - \gamma_0\gamma_5$	0	$-,\ +$	A, PP	$+,\ +$	R, PP
1	0	$+,\ -$	A, SP	$-,\ -$	R, SP
γ_0	0	$-,\ -$	R, SP	$+,\ -$	A, SP
$\gamma_3 + \gamma_0\gamma_3$	0	$+,\ -$	R, SS	$-,\ -$	A, SS
$\gamma_3 - \gamma_0\gamma_3$	0	$+,\ -$	R, PP	$-,\ -$	A, PP
$\gamma_3\gamma_5$	0	$+,\ +$	A, SP	$-,\ +$	R, SP
$\gamma_0\gamma_3\gamma_5$	0	$-,\ +$	R, SP	$+,\ +$	A, SP
$\gamma_{1/2} + \gamma_0\gamma_{1/2}$	1	$+,\ \pm$	R, SS	$-,\ \pm$	A, SS
$\gamma_{1/2} - \gamma_0\gamma_{1/2}$	1	$+,\ \pm$	R, PP	$-,\ \pm$	A, PP
$\gamma_{1/2}\gamma_5$	1	$+,\ \mp$	A, SP	$-,\ \mp$	R, SP
$\gamma_0\gamma_{1/2}\gamma_5$	1	$-,\ \mp$	R, SP	$+,\ \mp$	A, SP

Tabelle 8: Quantenzahlen der BB-Testzustände und -Potentiale. "Typ" beschreibt das qualitative Verhalten des numerisch mit Gitter-QCD bestimmten Potentials ("A": attraktiv; "R": repulsiv; "SS", "SP" und "PP": asymptotischer Potentialwert $2m(S)$, $m(S) + m(P_-)$ oder $2m(P_-)$).

- Attraktivität bzw. Repulsivität bei kurzen Abständen wird vom 1-Gluon-Exchange-Potential zwischen den statischen Antiquarks erzeugt. Je nach Quantenzahlen und aufgrund des Pauli-Prinzips befinden sich die statischen Antiquarks entweder in einem Farbtriplett oder -sextett, was Attraktivität bzw. Repulsivität zur Folge hat [15].

- Die asymptotischen Potentialwerte können verstanden werden, indem man die Erzeugungsoperatoren (54) durch statisch-leichte Meson-Erzeugungsoperatoren ähnlich zu (30) ausdrückt. Z.B. findet man für $\Gamma = 1$ und $\psi^{(1)}\psi^{(2)} = uu$

$$\begin{aligned}(\mathcal{C}1)_{AB}\Big(\bar{Q}_C(\mathbf{r}_1)u_A(\mathbf{r}_1)\Big)\Big(\bar{Q}_C(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_2)\Big) &= \\ = \quad -S_\uparrow(\mathbf{r}_1)P_{-\downarrow}(\mathbf{r}_2) + S_\downarrow(\mathbf{r}_1)P_{-\uparrow}(\mathbf{r}_2) - P_{-\uparrow}(\mathbf{r}_1)S_\downarrow(\mathbf{r}_2) + P_{-\downarrow}(\mathbf{r}_1)S_\uparrow(\mathbf{r}_2) \quad & (55)\end{aligned}$$

  (S und P_- bezeichnen statisch-leichte Meson-Erzeugungsoperatoren für das S- bzw. P_--Meson; dabei geben $\uparrow$ und $\downarrow$ die Ausrichtungen der leichten Quarkspins an). Dieser BB-Erzeugungsoperator generiert also Kombinationen von jeweils einem S-Meson und einem P_--Meson. Das entsprechende BB-Potential nimmt folglich für große $\bar{Q}\bar{Q}$-Separationen r den asymptotischen Wert $m(S) + m(P_-)$ an [12].

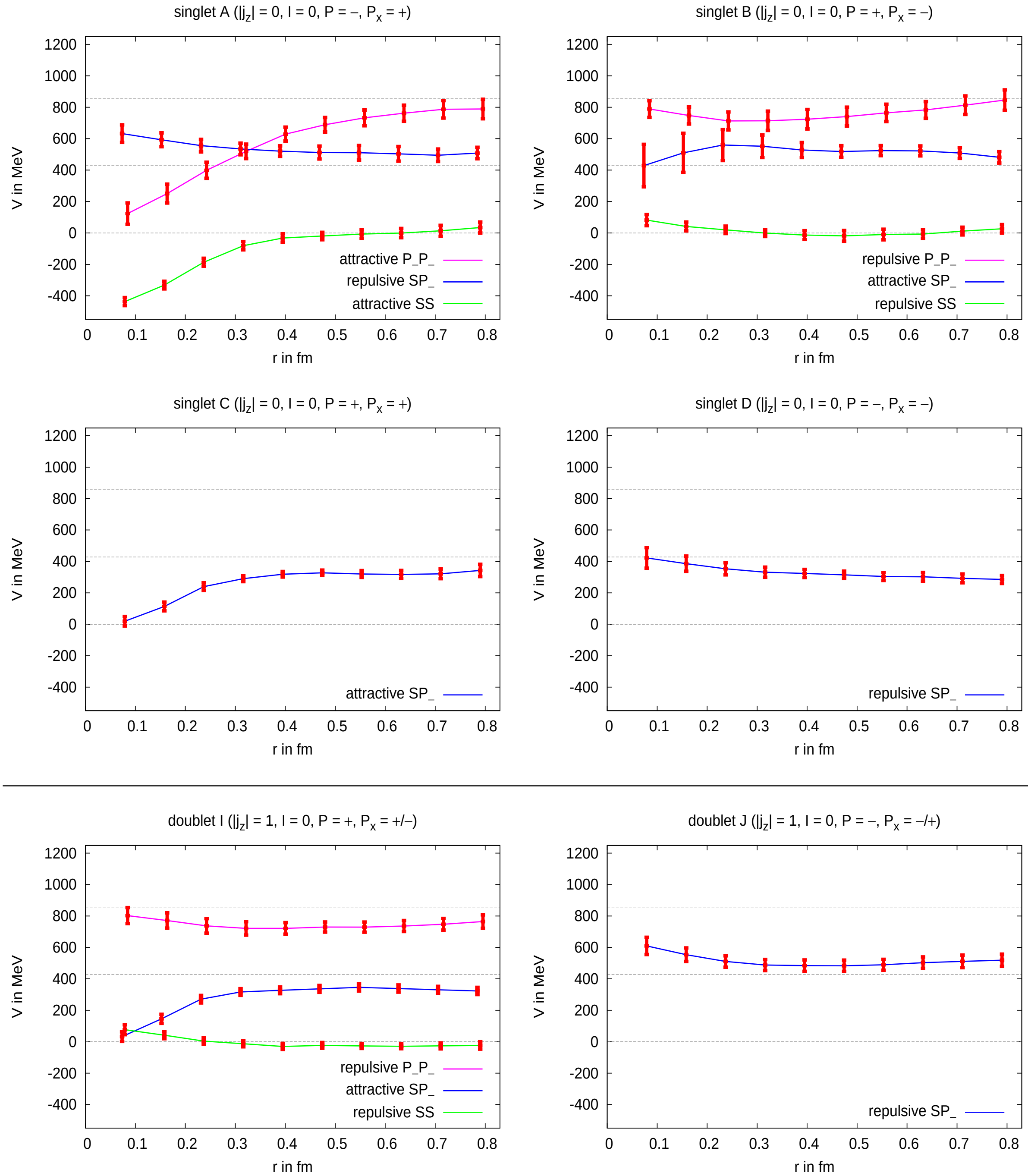

Abbildung 14: BB-Potentiale als Funktionen der $\bar{Q}\bar{Q}$-Separation r für $I = 0$. Die Potentialwerte bei $r = a \approx 0.079\,\mathrm{fm}$ weisen starke Diskretisierungsfehler auf (siehe Diskussion in [12]).

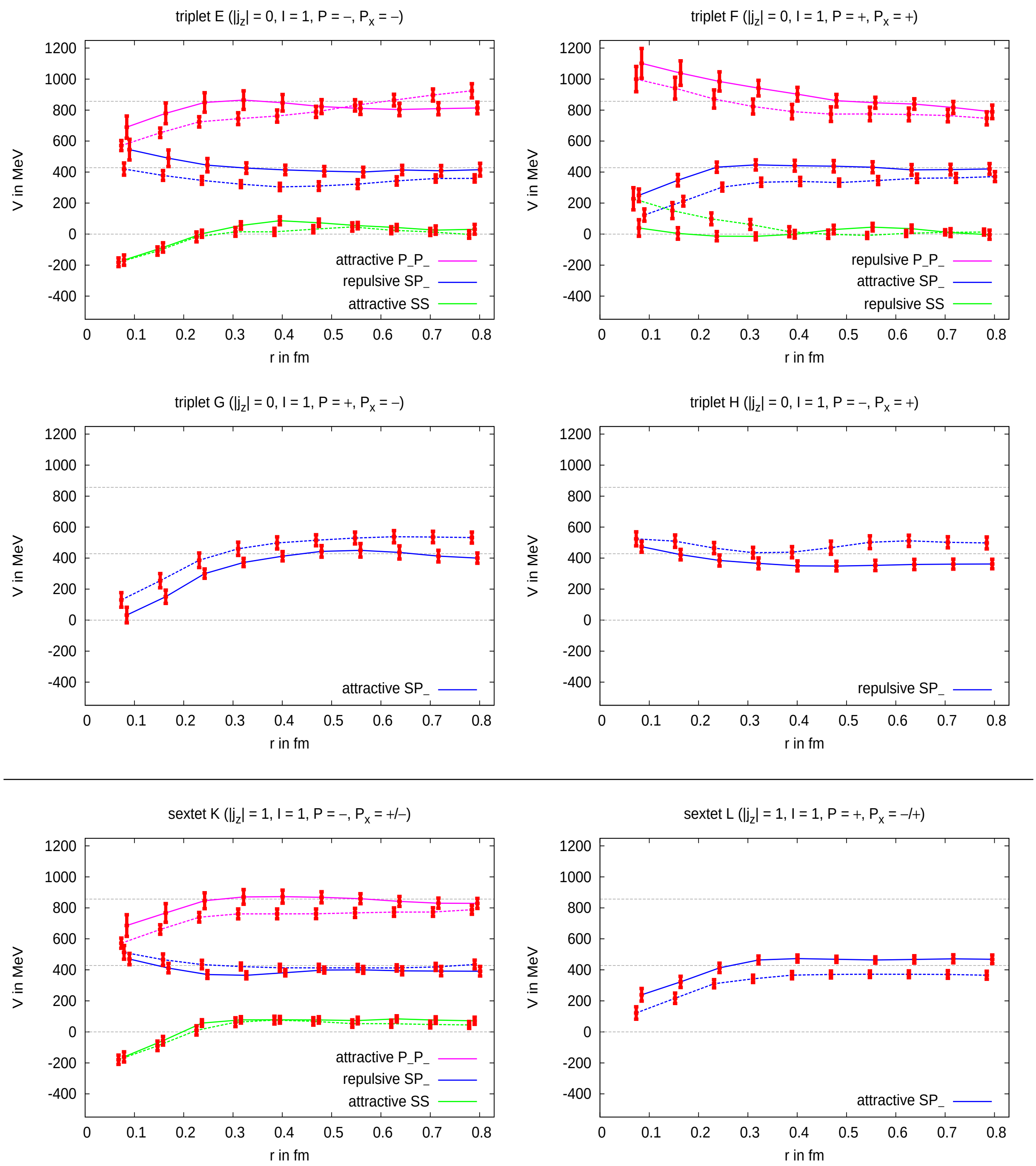

Abbildung 15: BB-Potentiale als Funktionen der $\bar{Q}\bar{Q}$-Separation r für $I = 1$. Die Potentialwerte bei $r = a \approx 0.079\,\mathrm{fm}$ weisen starke Diskretisierungsfehler auf (siehe Diskussion in [12]). Aufgrund der verwendeten Wilson-Twisted-Mass-Diskretisierung unterscheiden sich die Ergebnisse für $I_z = \pm 1$ und $I_z = 0$ um Diskretisierungseffekte. Die Differenzen der paarweise auftretenden Kurven stellen also ein Maß für Diskretisierungsfehler dar.

Auch wenn aufgrund der Wahlmöglichkeiten für Γ (16 Möglichkeiten) und $\psi^{(1)}\psi^{(2)}$ (4 Möglichkeiten bei Beschränkung auf leichte u/d-Quarks) 64 Testzustände existieren, sind die resultierenden BB-Potentiale teilweise aufgrund von Isospinsymmetrie ($I = 1$-Tripletts) oder Rotationssymmetrie ($|j_z| = 1$-Dubletts) entartet. Insgesamt ergibt sich die folgende Struktur [13]:

SS-Potentiale,	attraktiv:	$1(A) \oplus 3(E) \oplus 6(K)$	(10 Testzustände)
	repulsiv:	$1(B) \oplus 3(F) \oplus 2(I)$	(6 Testzustände)
SP_--Potentiale,	attraktiv:	$1(B) \oplus 1(C) \oplus 3(E) \oplus 3(G) \oplus 2(I) \oplus 6(L)$	(16 Testzustände)
	repulsiv:	$1(A) \oplus 1(D) \oplus 3(F) \oplus 3(H) \oplus 2(J) \oplus 6(K)$	(16 Testzustände)
P_-P_--Potentiale,	attraktiv:	$1(A) \oplus 3(E) \oplus 6(K)$	(10 Testzustände)
	repulsiv:	$1(B) \oplus 3(F) \oplus 2(I)$	(6 Testzustände)

Die Buchstaben A bis I nummerieren die Multipletts und sind in Abbildung 14 und Abbildung 15 in den Bildüberschriften angegeben. Die 64 Erzeugungsoperatoren (54) erlauben also die Berechnung von 24 unterschiedlichen BB-Potentialen.

Analoge Rechnungen wurden auch mit $\psi^{(1)}\psi^{(2)} = ss$ und $\psi^{(1)}\psi^{(2)} = cc$ an Stelle von leichten u/d-Quarks ausgeführt. Qualitativ entspricht dies $\psi^{(1)}\psi^{(2)} = uu$ bzw. $\psi^{(1)}\psi^{(2)} = dd$ und damit $I = 1$. Konzeptionell ist es natürlich auch interessant, zwei degenerierte Flavors von s-Quarks und von c-Quarks zu studieren und damit auch Ergebnisse mit "Strange-Isospin" $I_s = 0$ und "Charm-Isospin" $I_c = 0$ zu generieren (siehe Abschnitt 6.2).

Auf ähnlichem Weg können auch $B\bar{B}$-Potentiale studiert werden, wobei hier Erzeugungsoperatoren der Form

$$\mathcal{O}_{\Gamma,\psi^{(1)}\psi^{(2)}} \equiv \Gamma_{AB}\tilde{\Gamma}_{CD}\Big(\bar{Q}_C(\mathbf{r}_1)q_A^{(1)}(\mathbf{r}_1)\Big)\Big(\bar{q}_B^{(2)}(\mathbf{r}_2)Q_D(\mathbf{r}_2)\Big) \quad (56)$$

zu verwenden sind. Dieses System ist technisch schwieriger zu untersuchen, da im Gegensatz zum BB-Fall ein extrahierter Zustand neben einer Tetraquark-Struktur auch ein $Q\bar{Q}$-Zustand neben einem weit entfernten leichten Meson (z.B. einem Pion) sein kann, oder es im Fall von $I = 0$ sogar zur Auslöschung des leichten Quark-Antiquark-Paars kommen kann und man so unter Umständen nur das ordinäre statische Quark-Antiquark-Potential berechnet. Erste vorläufige Ergebnisse zeigen ähnliche Potentiale, wie im BB-Fall, mit dem Unterschied, dass sämtliche $B\bar{B}$-Potentiale attraktiv sind, also keine repulsiven Kanäle existieren [15]. Wie oben skizziert kann auch dieses Ergebnis über das 1-Gluon-Exchange-Potential zwischen dem statischen Quark und dem statischen Antiquark verstanden werden, da in diesem Fall das Pauli-Prinzip einen Beitrag des stark attraktiven Farbsinglettpotentials in keinem Kanal verbietet.

6.2 Modellrechnungen zur Identifikation von Tetraquark-Zuständen

Um festzustellen, ob $qq\bar{Q}\bar{Q}$-Tetraquarkzustände existieren, wird der phänomenologisch orientierte Ansatz

$$V(r) \equiv -\frac{\alpha}{r}\exp\bigg(-\Big(\frac{r}{d}\Big)^p\bigg)$$

an die Gitter-QCD-Ergebnisse für die BB-Potentiale gefittet (Fitparameter α, d, und p). Von besonderem Interesse bei der Suche nach Tetraquarks sind die attraktiven Potentiale zweier statisch-leichter Mesonen im Grundzustand S, also Potentiale mit asymptotischem Wert $2m(S)$. Hier gibt es das stärker attraktive skalare Isosinglett-Potential A und die beiden im Rahmen statistischer Fehler identischen weniger stark attraktiven Vektor-Isotriplett-Potentiale E und K. Die Fits sowohl für A als auch E und K sind in Abbildung 16 zu sehen, jeweils für u/d-, s- und c-Quarkmassen. Es ist offensichtlich, dass leichtere Quarkmassen zu stärker attraktiven Potentialen führen.

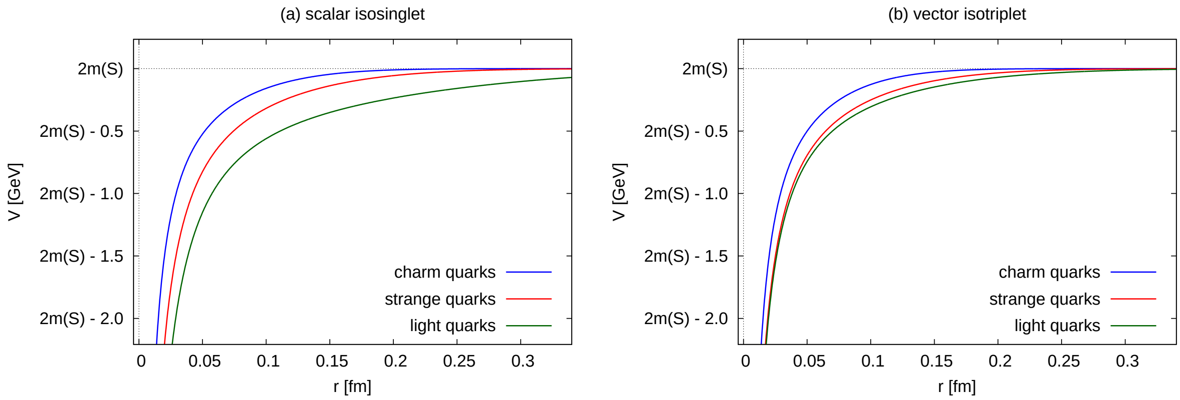

Abbildung 16: (entstammt [15]) Resultierende Fits $V(r)$ (Gleichung (57)) für attraktive BB-Potentiale für u/d-, s- und c-Quarkmassen. **(links)** Skalares Isosinglett-Potential. **(rechts)** Vektor-Isotriplett-Potential.

Um herauszufinden, ob in einem der beiden Kanäle für die untersuchten leichten Quarkmassen ein gebundener 4-Quarkzustand vorliegen kann, wurden diese Potentiale $V(r)$ in der radialen S-Wellen-Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{1}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + 2m_{B_{(s,c)}} + V(r)\right)R(r) \quad = \quad ER(r) \tag{57}$$

mit der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}) \equiv R(r)/r$ und der reduzierten Masse $\mu \equiv m_{B_{(s,c)}}/2$ verwendet. Da eine große reduzierte Masse, also schwere Quarkmassen einen gebundenen Zustand begünstigen, genau wie ein stark attraktives Potential (wie es bei leichten Quarkmassen vorliegt), gibt es zwei entgegenwirkende Effekte. Nach numerischer Lösung von (57) mit Hilfe von Standard-Shooting-Verfahren zeigt sich, dass das skalare Isosinglett-Potential A für leichte u/d-Quarks[9] einen gebundenen Zustand beherbergt, alle anderen Kombinationen von Quarkmassen und Potentialen dagegen nicht. Auch wenn gewisse Näherungen, wie z.B. der statische Limes, verwendet wurden und Gitter-QCD mit Modellrechnungen kombiniert wurde, liefert dieses Ergebnis dennoch klare Anzeichen für die Existenz eines Tetraquarks bestehend aus zwei b-Antiquarks und zwei leichten u/d-Quarks. Das skalare Isosinglett-Potential A für leichte u/d-Quarks ist zusammen mit der radialen Wellenfunktion des gebundenen Zustands in Abbildung 17 zu sehen. Wie aus dieser Abbildung ersichtlich, beträgt der Abstand der beiden schweren Antiquarks etwa 0.25 fm.

Um zu quantifizieren, wie weit die anderen Kombinationen von Quarkmassen und Potentialen von einem Bindungszustand entfernt sind, sind in Tabelle 9 diejenigen Faktoren angegeben,

[9] Die verwendete u/d-Quarkmasse ist unphysikalisch schwer, $m_\pi \approx 340$ MeV.

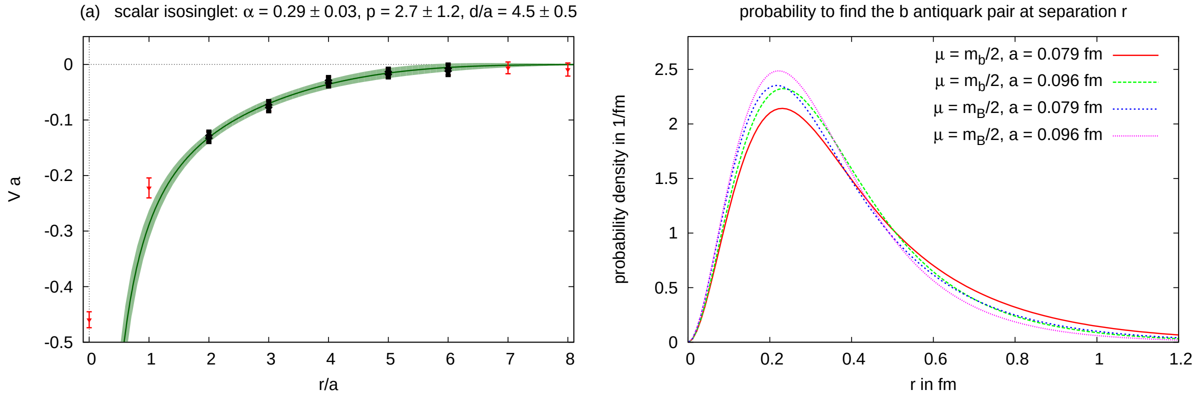

Abbildung 17: (entstammt [14]) **(links)** Das attraktive skalare Isosinglett-Potential für u/d-Quarkmassen als Funktion der $\bar{Q}\bar{Q}$-Separation r/a ($a \approx 0.079\,\mathrm{fm}$; Fit an Gitter-QCD-Resultate für $2 \leq r/a \leq 6$ [schwarze Punkte]). **(rechts)** Das Betragsquadrat der entsprechenden radialen Wellenfunktion $|R|^2$ als Funktion der $\bar{Q}\bar{Q}$-Separation r.

um die die reduzierte Masse μ erhöht werden müsste, um einen Bindungszustand zu erhalten. Die aufgelisteten Faktoren zeigen, dass sich das System bei steigender leichter Quarkmasse immer weiter von einem Bindungszustand entfernt. Da die u/d-Quarkmassen unphysikalisch schwer gewählt wurden, ist es denkbar, dass bei physikalisch leichten u/d-Quarkmassen auch das Vektor-Isotriplett-Potential einen gebundenen Zustand aufweist. Dies wird Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

leichte Quarkmasse	u/d		s		c	
Konfidenzniveau für einen Bindungszustand	$1\,\sigma$	$2\,\sigma$	$1\,\sigma$	$2\,\sigma$	$1\,\sigma$	$2\,\sigma$
skalares Isosinglett-Potential	0.8	1.0	1.9	2.2	3.1	3.2
Vektor-Isotriplett-Potential	1.9	2.1	2.5	2.7	3.4	3.5

Tabelle 9: Faktoren, um die die reduzierte Masse μ erhöht werden müsste, um einen Bindungszustand mit Konfidenzniveau $1\,\sigma$ bzw. $2\,\sigma$ zu erhalten.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Wesentliche Aspekte der thematisch ähnlichen Arbeiten [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] wurden zusammengefasst. Weitere Einzelheiten sind bei Bedarf den Arbeiten selbst zu entnehmen, die im folgenden Teil II vollständig abgedruckt sind.

Die in Kapitel 4 diskutierten Berechnungen von Hadronen mit $q\bar{q}$- und qqq-Erzeugungsoperatoren sind weit fortgeschritten bzw. teilweise bereits abgeschlossen. Im Gegensatz dazu befinden sich die in Kapitel 5 und Kapitel 6 zusammengefassten Untersuchungen von Tetraquarkkandidaten eher in der Anfangsphase. Die Untersuchung solcher Systeme stellt gegenwärtig sicher eine der großen Herausforderungen im Feld der Gitter-QCD dar. Entsprechende Ergebnisse sind und wären auch weit über den Bereich der Gitter-QCD hinaus von großem Interesse, z.B. für die experimentelle Teilchenphysik und die Phänomenologie.

Eine meines Erachtens erfolgversprechende Strategie zur Untersuchung von Tetraquarkkandidaten mit Hilfe von Gitter-QCD besteht im gleichzeitigen Verfolgen der in Kapitel 5 und 6 diskutierten Ansätze. Ein erfolgreicher Einsatz der in Kapitel 5 verwendeten Methoden mag für einige Systeme Informationen über deren Struktur liefern bzw. quantitative verlässliche Ergebnisse für Resonanzparameter (Masse, Breite) liefern. Gleichzeitig erlauben die kostengünstigeren Berechnungen der Kräfte zwischen statischen Quarks bzw. statisch-leichten Mesonen und deren Weiterverwendung in Modellrechnungen aus Kapitel 6 qualitative Einsichten in die Physik von Tetraquarks.

Die Möglichkeiten zur Fortsetzung dieser Projekte sind vielfältig. Ein wichtiger sich gegenwärtig in Arbeit befindlicher Schritt ist sicher die Optimierung der Techniken zur näherungsfreien Berechnung der 6×6-Korrelationsmatrix aus Kapitel 5 (Abbildung 11). Erst dann können verschiedene schlecht verstandene Systeme und Tetraquarkkandidaten quantitativ verlässlich untersucht werden. Ein anderer Aspekt ist die Erweiterung der Berechnung der BB-Potentiale aus Kapitel 6 auf den experimentell relevanteren aber technisch schwierigeren $B\bar{B}$-Fall. Die Implementation und Verwendung weiterer Erzeugungsoperatoren, insbesondere solcher mit Diquark-Antidiquark-Struktur, wäre dabei ebenfalls wünschenswert.

Danksagung

Mein Dank gilt meinen Kollegen, Kollaborationspartnern, Chefs, Mentoren, Mitarbeitern, Doktoranden, Studenten und Physik-Freunden während meiner Gitter-QCD-Zeit von Mai 2007 bis heute. Besonders hervorheben möchte ich in diesem Zusammenhang Owe Philipsen, Michael Müller-Preußker, Karl Jansen, Chris Michael und Olivier Pène.

Besten Dank außerdem an Peter Eschenbrenner, Dietmar Mülhens, Francesco Giacosa und Piero Nicolini für Ratschläge und Tipps rund um das Habilitationsverfahren und die Erstellung dieser Zusammenfassung.

I acknowledge support by the Emmy Noether Programme of the DFG (German Research Foundation), grant WA 3000/1-1.

This work was supported in part by the Helmholtz International Center for FAIR within the framework of the LOEWE program launched by the State of Hesse.

Literatur

[1] K. Jansen, C. Michael, A. Shindler and M. Wagner [ETM Collaboration], "The static-light meson spectrum from twisted mass lattice QCD," JHEP **0812**, 058 (2008) [arXiv:0810.1843 [hep-lat]].

[2] C. Michael, A. Shindler and M. Wagner [ETM Collaboration], "The continuum limit of the static-light meson spectrum," JHEP **1008**, 009 (2010) [arXiv:1004.4235 [hep-lat]].

[3] M. Wagner and C. Wiese [ETM Collaboration], "The static-light baryon spectrum from twisted mass lattice QCD," JHEP **1107**, 016 (2011) [arXiv:1104.4921 [hep-lat]].

[4] P. Dimopoulos *et al.* [ETM Collaboration], "Lattice QCD determination of m_b, f_B and f_{B_s} with twisted mass Wilson fermions," JHEP **1201**, 046 (2012) [arXiv:1107.1441 [hep-lat]].

[5] B. Blossier, M. Wagner and O. Pene [ETM Collaboration], "Lattice calculation of the Isgur-Wise functions $\tau_{1/2}$ and $\tau_{3/2}$ with dynamical quarks," JHEP **0906**, 022 (2009) [arXiv:0903.2298 [hep-lat]].

[6] M. Kalinowski and M. Wagner [ETM Collaboration], "Masses of mesons with charm valence quarks from $2+1+1$ flavor twisted mass lattice QCD," Acta Phys. Polon. Supp. **6**, no. 3, 991 (2013) [arXiv:1304.7974 [hep-lat]].

[7] M. Kalinowski and M. Wagner [ETM Collaboration], "Twisted mass lattice computation of charmed mesons with focus on D^{**}," PoS LATTICE **2013**, 241 (2013) [arXiv:1310.5513 [hep-lat]].

[8] R. Baron *et al.* [ETM Collaboration], "Light hadrons from lattice QCD with light (u, d), strange and charm dynamical quarks," JHEP **1006**, 111 (2010) [arXiv:1004.5284 [hep-lat]].

[9] R. Baron *et al.* [ETM Collaboration], "Computing K and D meson masses with $N_f = 2+1+1$ twisted mass lattice QCD," Comput. Phys. Commun. **182**, 299 (2011) [arXiv:1005.2042 [hep-lat]].

[10] C. Alexandrou *et al.* [ETM Collaboration], "Lattice investigation of the scalar mesons $a_0(980)$ and κ using four-quark operators," JHEP **1304**, 137 (2013) [arXiv:1212.1418].

[11] A. Abdel-Rehim *et al.*, "Investigation of the tetraquark candidate $a_0(980)$: technical aspects and preliminary results," arXiv:1410.8757 [hep-lat].

[12] M. Wagner [ETM Collaboration], "Forces between static-light mesons," PoS LATTICE **2010**, 162 (2010) [arXiv:1008.1538 [hep-lat]].

[13] M. Wagner [ETM Collaboration], "Static-static-light-light tetraquarks in lattice QCD," Acta Phys. Polon. Supp. **4**, 747 (2011) [arXiv:1103.5147 [hep-lat]].

[14] P. Bicudo and M. Wagner, "Lattice QCD signal for a bottom-bottom tetraquark," Phys. Rev. D **87**, 114511 (2013) [arXiv:1209.6274 [hep-ph]].

[15] B. Wagenbach, P. Bicudo and M. Wagner, "Lattice investigation of heavy meson interactions," arXiv:1411.2453 [hep-lat].

[16] K. A. Olive *et al.* [Particle Data Group], "2014 Review of particle physics,", Chin. Phys. C, **38**, 090001 (2014).

[17] L. H. Ryder, "Quantum field theory," Cambridge University Press.

[18] M. Srednicki, "Quantum field theory," Cambridge University Press.

[19] M. Maggiore, "A modern introduction to quantum field theory," Oxford University Press.

[20] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, "An introduction to quantum field theory," Perseus Books.

[21] H. J. Rothe, "Lattice gauge theories: an introduction", World Scientific Lecture Notes.

[22] T. DeGrand, C. DeTar, "Lattice methods for quantum chromodynamics", World Scientific Publishing Company.

[23] C. Gattringer and C. B. Lang, "Quantum chromodynamics on the lattice: an introductory presentation", Springer.

[24] M. Wagner, S. Diehl, T. Kuske and J. Weber, "An introduction to lattice hadron spectroscopy for students without quantum field theoretical background," arXiv:1310.1760 [hep-lat].

[25] M. Creutz, "Gauge fixing, the transfer matrix, and confinement on a lattice," Phys. Rev. D **15**, 1128 (1977).

[26] M. Lüscher, "Volume Dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories. 2. Scattering states," Commun. Math. Phys. **105**, 153 (1986).

[27] M. Lüscher, "Two particle states on a torus and their relation to the scattering matrix," Nucl. Phys. B **354**, 531 (1991).

[28] M. Lüscher, "Signatures of unstable particles in finite volume," Nucl. Phys. B **364**, 237 (1991).

[29] C. B. Lang *et al.*, "$K\pi$ scattering for isospin 1/2 and 3/2 in lattice QCD," Phys. Rev. D **86**, 054508 (2012) [arXiv:1207.3204 [hep-lat]].

[30] B. Blossier *et al.*, "On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory," JHEP **0904**, 094 (2009) [arXiv:0902.1265 [hep-lat]].

[31] A. Shindler, "Twisted mass lattice QCD," Phys. Rept. **461**, 37 (2008) [arXiv:0707.4093 [hep-lat]].

[32] P. Weisz, "Continuum limit improved lattice action for pure Yang-Mills theory. 1.," Nucl. Phys. B **212**, 1 (1983).

[33] Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Kaneko and T. Yoshie, "Scaling in SU(3) pure gauge theory with a renormalization group improved action," Phys. Rev. D **56**, 151 (1997) [hep-lat/9610023].

[34] P. Boucaud *et al.* [ETM Collaboration], "Dynamical twisted mass fermions with light quarks: simulation and analysis details," Comput. Phys. Commun. **179**, 695 (2008) [arXiv:0803.0224 [hep-lat]].

[35] R. Baron *et al.* [ETM Collaboration], "Light meson physics from maximally twisted mass lattice QCD," JHEP **1008**, 097 (2010) [arXiv:0911.5061 [hep-lat]].

[36] M. Neubert, "Heavy quark symmetry," Phys. Rept. **245**, 259 (1994) [arXiv:hep-ph/9306320].

[37] T. Mannel, "Heavy-quark effective field theory," Rept. Prog. Phys. **60**, 1113 (1997).

[38] D. Ebert, R. N. Faustov and V. O. Galkin, "Heavy-light meson spectroscopy and Regge trajectories in the relativistic quark model," arXiv:0910.5612 [hep-ph].

[39] C. McNeile and C. Michael [UKQCD Collaboration], "Mixing of scalar glueballs and flavour-singlet scalar mesons," Phys. Rev. D **63**, 114503 (2001) [arXiv:hep-lat/0010019].

[40] C. McNeile, C. Michael and P. Pennanen [UKQCD Collaboration], "Hybrid meson decay from the lattice," Phys. Rev. D **65**, 094505 (2002) [arXiv:hep-lat/0201006].

[41] C. McNeile, C. Michael and G. Thompson [UKQCD Collaboration], "Hadronic decay of a scalar B meson from the lattice," Phys. Rev. D **70**, 054501 (2004) [arXiv:hep-lat/0404010].

[42] M. Bochicchio *et al.*, "Heavy quark spectroscopy on the lattice," Nucl. Phys. B **372**, 403 (1992).

[43] D. Guazzini, H. B. Meyer and R. Sommer [ALPHA Collaboration], "Non-perturbative renormalization of the chromo-magnetic operator in heavy quark effective theory and the B^*-B mass splitting," JHEP **0710**, 081 (2007) [arXiv:0705.1809 [hep-lat]].

[44] B. Blossier *et al.*, "Spectroscopy and decay constants from non-perturbative HQET at Order $1/m$," PoS LAT **2009**, 106 (2009) [arXiv:0911.1568 [hep-lat]].

[45] B. Blossier, M. Della Morte, N. Garron and R. Sommer, "HQET at order $1/m$: I. Non-perturbative parameters in the quenched approximation," arXiv:1001.4783 [hep-lat].

[46] B. Blossier *et al.*, "HQET at order $1/m$: II. Spectroscopy in the quenched approximation," arXiv:1004.2661 [hep-lat].

[47] T. Burch *et al.*, "Excitations of single-beauty hadrons," Phys. Rev. D **79**, 014504 (2009) [arXiv:0809.1103 [hep-lat]].

[48] R. Sommer, "A New way to set the energy scale in lattice gauge theories and its applications to the static force and 'α_s in SU(2) Yang-Mills theory," Nucl. Phys. B **411**, 839 (1994) [hep-lat/9310022].

[49] R. Sommer, "Scale setting in lattice QCD," PoS LATTICE **2013**, 015 (2014) [arXiv:1401.3270 [hep-lat]].

[50] H. J. Schnitzer, "Spin structure in meson spectroscopy with an effective scalar confinement of quarks," Phys. Rev. D **18**, 3482 (1978).

[51] H. J. Schnitzer, "Where are the inverted multiplets of meson spectroscopy?," Phys. Lett. B **226** (1989) 171.

[52] D. Ebert, V. O. Galkin and R. N. Faustov, “Mass spectrum of orbitally and radially excited heavy-light mesons in the relativistic quark model,” Phys. Rev. D **57**, 5663 (1998) [Erratum-ibid. D **59**, 019902 (1999)] [arXiv:hep-ph/9712318].

[53] N. Isgur, “Spin-orbit inversion of excited heavy quark mesons,” Phys. Rev. D **57**, 4041 (1998).

[54] C. Alexandrou *et al.* [ETM Collaboration], “Nucleon electromagnetic form factors in twisted mass lattice QCD,” arXiv:1102.2208 [hep-lat].

[55] W. Detmold, C. J. Lin and M. Wingate, “Bottom hadron mass splittings in the static limit from 2+1 flavour lattice QCD,” Nucl. Phys. B **818**, 17 (2009) [arXiv:0812.2583 [hep-lat]].

[56] H. W. Lin, S. D. Cohen, N. Mathur and K. Orginos, “Bottom-hadron mass splittings from static-quark action on 2+1-flavor lattices,” Phys. Rev. D **80**, 054027 (2009) [arXiv:0905.4120 [hep-lat]].

[57] H. W. Lin *et al.*, “Heavy-Baryon Spectroscopy from Lattice QCD,” Comput. Phys. Commun. **182**, 24 (2011) [arXiv:1002.4710 [hep-lat]].

[58] D. Ebert, R. N. Faustov and V. O. Galkin, “Masses of excited heavy baryons in the relativistic quark model,” Phys. Lett. B **659**, 612 (2008) [arXiv:0705.2957 [hep-ph]].

[59] B. Blossier, “Lattice renormalisation of ‘$\mathcal{O}(a)$ improved heavy-light operators: an addendum,” Phys. Rev. D **84**, 097501 (2011) [arXiv:1106.2132 [hep-lat]].

[60] B. Blossier *et al.* [ETM Collaboration], “A Proposal for B-physics on current lattices,” JHEP **1004**, 049 (2010) [arXiv:0909.3187 [hep-lat]].

[61] I. I. Bigi *et al.*, “Memorino on the ‘1/2 vs. 3/2 puzzle” in $\bar{B} \to l\,\bar{\nu}\,X_c$ – a year later and a bit wiser,” Eur. Phys. J. C **52**, 975 (2007) [arXiv:0708.1621 [hep-ph]].

[62] N. Isgur and M. B. Wise, “Excited charm mesons in semileptonic $\bar{B}$ decay and their contributions to a Bjorken sum rule,” Phys. Rev. D **43**, 819 (1991).

[63] N. Uraltsev, “New exact heavy quark sum rules,” Phys. Lett. B **501**, 86 (2001) [arXiv:hep-ph/0011124].

[64] D. Liventsev *et al.* [Belle Collaboration], “Study of $B \to D^{**}l\nu$ with full reconstruction tagging,” Phys. Rev. D **77**, 091503 (2008) [arXiv:0711.3252 [hep-ex]].

[65] F. Jugeau, A. Le Yaouanc, L. Oliver and J. C. Raynal, “The decays $\bar{B} \to D^{**}\pi$ and the Isgur-Wise functions $\tau_{1/2}(w)$, $\tau_{3/2}(w)$,” Phys. Rev. D **72**, 094010 (2005) [arXiv:hep-ph/0504206].

[66] C. Riha, “Berechnung von kinematischen Faktoren in differentiellen Zerfallsraten von $B \to D^{**}$,” Bachelorarbeit im Fach Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin (2011).

[67] M. Atoui, “Lattice computation of $B \to D^*, D^{**}l\nu$ form factors at finite heavy masses,” arXiv:1305.0462 [hep-lat].

[68] M. Atoui, B. Blossier, V. Morénas, O. Pène and K. Petrov, “Semileptonic $B \to D^{**}$ decays in Lattice QCD: a feasibility study and first results,” arXiv:1312.2914 [hep-lat].

[69] R. L. Jaffe, "Exotica," Phys. Rept. **409** (2005) 1 [hep-ph/0409065].

[70] S. Bernardson, P. McCarty and C. Thron, "Monte Carlo methods for estimating linear combinations of inverse matrix entries in lattice QCD," Comput. Phys. Commun. **78**, 256 (1993).

[71] S. -J. Dong and K. -F. Liu, "Stochastic estimation with $Z(2)$ noise," Phys. Lett. B **328**, 130 (1994) [hep-lat/9308015].

[72] M. Peardon *et al.* [Hadron Spectrum Collaboration], "A novel quark-field creation operator construction for hadronic physics in lattice QCD," Phys. Rev. D **80**, 054506 (2009) [arXiv:0905.2160 [hep-lat]].

[73] T. DeGrand and C. E. Detar, "Lattice methods for quantum chromodynamics," World Scientific (2006).

[74] C. Gattringer and C. B. Lang, "Quantum chromodynamics on the lattice," Lect. Notes Phys. **788** (2010).

[75] M. Foster *et al.* [UKQCD Collaboration], "Quark mass dependence of hadron masses from lattice QCD," Phys. Rev. D **59** (1999) 074503 [hep-lat/9810021].

[76] C. McNeile *et al.* [UKQCD Collaboration], "Decay width of light quark hybrid meson from the lattice," Phys. Rev. D **73** (2006) 074506 [hep-lat/0603007].

[77] G. Martinelli and C. T. Sachrajda, "A lattice study of nucleon structure," Nucl. Phys. B **316** (1989) 355.