



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

Vienna University of Technology

DIPLOMARBEIT

**Numerische Analyse an Dipolkonfigurationen
im Modell topologischer Fermionen**

ausgeführt am
Atominstitut der
Technischen Universität Wien

unter der Anleitung von
a.o.Univ.-Prof. Dr. techn. Manfred Faber

durch
Josef Resch
Hermann Bahr-Straße 18/4
1210 Wien

Datum

Unterschrift

Danksagung

An Manfred Faber:

Lieber Manfred,

vielen Dank für Deine anschaulichen Erklärungen (der „Trick“ mit dem Gürtel und das Ausdrehen der Mozartkugel zur Verdeutlichung der $SU(2)$ waren sehr beeindruckend) und für Deine Geduld. Du hast immer Zeit gefunden, meine Fragen zu beantworten und mit mir über schwierige Themen zu diskutieren. Nochmals vielen, vielen Dank für die hervorragende Betreuung während meiner Diplomarbeit!

An Roman Höllwieser:

Lieber Roman,

egal, ob die `op1` gebockt hat oder sich mein USB-Stick nicht anmelden ließ - immer warst Du zur Stelle und hast mir geholfen. Ohne Deine Unterstützung bei den ersten Schritten mit `python` und den Solitonprogrammen hätte ich viel länger gebraucht. Danke!

An Mario Pitschmann:

Lieber Mario,

Deine „Nachhilfestunden“ in Differentialgeometrie und über Eichfelder waren äußerst hilfreich. Danke!

An Thomas Engleitner:

Lieber Thomas,

ohne Dein akribisches Korrekturlesen wäre so mancher Patzer in der Arbeit verblieben. Danke!

An Eva, Anna und Felix:

Meine Lieben,

ohne Eure Unterstützung wäre es nicht gegangen! Ihr seid super!

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einführung	3
2.1	Modelle der Materie	3
2.1.1	Teilchenmodelle	3
2.1.2	Wellenmodelle	4
2.1.3	Quanten	4
2.2	Das Elektron	5
2.3	Solitonen	6
2.3.1	Die Entdeckung der Solitonen	6
2.3.2	Fermionen als topologische Solitonen	6
2.3.3	Dirac's magnetische Monopole und die Ladungsquantisierung	7
2.4	Von der Geometrie der S^2 zur Elektrodynamik	9
2.5	Die Geometrie der S^3 und die duale Elektrodynamik	11
2.6	Monopolstabilisierung	13
2.7	Elektrodynamischer Grenzfall	14
3	Feldkonfigurationen	15
3.1	Monopolkonfigurationen	15
3.2	Dipolkonfigurationen	15
3.3	Wirkungsberechnung	29
3.3.1	Die Gammawirkung	29
3.3.2	Die Wilsonwirkung	30
3.3.3	Energieberechnung im Außenraum	36
4	Wirkungsberechnung	39
4.1	Wirkungsberechnung am Gitter - Volumsterme	39
4.1.1	Gammawirkung	39
4.1.2	Wilsonwirkung	39
4.1.3	Verhältnis der Wirkungsichten im Gitter	41
4.2	Wirkungsberechnung an der Oberfläche	43
4.2.1	Oberflächenterme der Energie	43

5	Simulationen am Gitter - Experimente	45
5.1	Wirkungsminimierung	45
5.1.1	Monte-Carlo-Methode	45
5.1.2	Variation der nullten Komponente - eindimensionales Gradientenverfahren	57
5.1.3	Gradientenverfahren in mehreren Dimensionen	57
5.2	Variation des Solitonfeldes an der Oberfläche	69
5.2.1	Berechnung und Korrektur des Potentials	69
5.2.2	Oberflächenminimierung mit Potenzialaktualisierung	72
5.2.3	Oberflächenminimierung ohne Potenzialaktualisierung	73
5.2.4	Oberflächenminimierung mit Potenzialaktualisierung und Nichtnegativitätsbedingung	73
5.3	Überführung unterschiedlicher Konfigurationen ineinander	77
5.4	Zusammenfassung	77
A	Verwendete Pythonmodule	81
A.1	Modul <code>SolitonDipoleSettings.py</code>	81
A.1.1	Variablen	81
A.2	Modul <code>SolitonDipole.py</code>	83
A.2.1	Variablen	83
A.2.2	Methoden	83
A.3	Modul <code>dipoleaction.py</code>	86
A.3.1	Methoden	86
A.4	Modul <code>dipolefieldstrength.py</code>	88
A.4.1	Methoden	88
A.5	Modul <code>dipoleminimization.py</code>	89
A.5.1	Methoden	90
B	Mathematischer Anhang	95
B.1	Integralsätze	95
B.2	Die Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$	96
B.2.1	$SO(3)$	96
B.2.2	$SU(2)$	97
B.3	Das Konzept der Eichtheorien	99
B.3.1	Die Maxwelltheorie als Abelsche Eichtheorie	99
B.3.2	Nichtabelsche Eichtheorien	103

Kapitel 1

Einleitung

Das Modell topologischer Fermionen beschreibt Teilchen mit halbzahligem Spin als topologisch stabile Lösungen einer nichtlinearen partiellen Differentialgleichung - diese räumlich ausgedehnten Objekte werden als topologische Solitonen bezeichnet.

Für die Formulierung der Lagrangedichte werden Vektorfelder auf einer, im \mathbb{R}^4 eingebetteten Oberfläche einer vierdimensionalen Kugel definiert, mit deren Hilfe ein Feldstärketensor als Krümmungstensor gewonnen werden kann. Diese Lagrangedichte liefert im elektrodynamischen Grenzfall die Maxwell'schen Gleichungen.

Die Definition dieser Vektorfelder und die Formulierung der Lagrangedichte wird - neben einem kurzen historischen Abriss - in Kapitel 2, ausgehend von der Idee der Diracschen magnetischen Monopole bis hin zur Formulierung einer dualen Elektrodynamik, dargestellt.

In Kapitel 3 werden Lösungen mit zwei Solitonen diskutiert. Es werden zwei alternative Möglichkeiten für die Wirkungsrechnung vorgestellt, die Γ -Wirkung, die sich aus dem Zusammenhang $\vec{\Gamma}$ berechnet und die Wilsonwirkung, welche sich aus dem Konzept des Paralleltransportes ableiten läßt. Letztere wird schließlich in den Computersimulationen vorrangig verwendet.

Da bei den Berechnungen an einem diskreten Gitter naturgemäß die Größe des Gitters begrenzt ist, wird zusätzlich für den Außenraum ein Oberflächenenergieterm verwendet, um die Gesamtenergie korrekt darzustellen.

Bei der numerischen Berechnung am Gitter sind die entsprechenden Ausdrücke für die Wirkungsrechnung zu diskretisieren - dies wird in Kapitel 4 ausführlich dargelegt. Außerdem werden die Kopplungskonstanten für die Krümmungsanteile der Wirkung bestimmt und numerisch verifiziert und die beiden Wirkungsanteile im elektrodynamischen Grenzfall gegenübergestellt. Schließlich wird der Oberflächenanteil der Wirkung numerisch ermittelt und mit dem exakten Wert der klassischen Elektrodynamik verglichen.

Kapitel 5 behandelt unterschiedliche Verfahren zur Energieminimierung am Gitter um numerische Lösungen für Zweiteilchenkonfigurationen zu er-

halten. Neben dem Monte-Carlo-Algorithmus werden das eindimensionale und das mehrdimensionale Gradientenverfahren vorgestellt und bezüglich der ermittelten Lösungen verglichen.

Das letztere Verfahren berücksichtigt in einer weiteren Ausbaustufe auch die Minimierung der Oberflächenterme. Es werden umfangreiche numerische Experimente an unterschiedlichen Dipolkonfigurationen durchgeführt. Abschließend wird eine angeregte Konfiguration in den Grundzustand überführt, wobei hier auch Oberflächenterme berücksichtigt werden.

Kapitel 2

Einführung

2.1 Modelle der Materie

Mit dem Ausdruck Elementarteilchen werden die kleinsten Bausteine unseres Universums bezeichnet. Dass unsere Welt aus diskreten Entitäten¹ besteht, ist historisch gesehen erst seit kurzer Zeit gesichert. Auf Grund der winzigen Dimensionen - ein Proton hat einen Durchmesser von etwa 10^{-15} Metern - ist es erst seit ungefähr hundert Jahren möglich, diese Teilchen experimentell festzustellen.

Es gab zu allen Zeiten Vorstellungen und Spekulationen, wie die Materie aufgebaut ist. Abgesehen von esoterischen und theologischen Erklärungsversuchen, lassen sich zwei grundsätzliche Ideen in der Entwicklung der Naturwissenschaft feststellen - einerseits Teilchenmodelle und andererseits Kontinuums- oder Wellenmodelle. Beide Ansätze vereinen sich Anfang des 20. Jahrhunderts zur Quantenmechanik.

2.1.1 Teilchenmodelle

Die Idee, dass die uns bekannte Materie aus einzelnen unteilbaren Teilchen besteht, geht bereits auf das antike Griechenland zurück. DEMOKRIT, der um 400 vor Christus lebte, beschrieb die Welt als aus unteilbaren Teilchen – den Atomen – bestehend. Der Raum zwischen den Teilchen ist leer, die Eigenschaften der Stoffe ergeben sich aus der Wechselwirkung der Atome. Für die damalige Zeit war diese Ansicht zu radikal – sie widersprach vor allen Dingen einer göttlichen Weltordnung – und wurde durchwegs abgelehnt.

Erst 2200 Jahre später griff JOHN DALTON die Idee Demokrits auf und erklärte die konstanten Mengenverhältnisse bei chemischen Reaktionen mit Hilfe der Atomtheorie der Elemente (Daltons Gesetz der konstanten und multiplen Proportionen).

¹von lateinisch: ens = seiend, bezeichnet ein Seiendes oder eine Sache, ohne dieses näher zu spezifizieren oder auf sein Wesen einzugehen.

Die theoretischen Arbeiten von LUDWIG BOLTZMANN (1844 - 1906) zur statistischen Mechanik stützten sich auf die Atomhypothese, die aber noch von vielen seiner Zeitgenossen abgelehnt wurde. 1897 entdeckte JOSEPH JOHN THOMSON (1856-1940) das Elektron. Es ist der erste Nachweis eines Elementarteilchens in der Wissenschaftsgeschichte und war der erste Hinweis auf eine innere Struktur der bis zu diesem Zeitpunkt als unteilbar geltenden Atome. 1906 konnte ERNEST RUTHERFORD (1871-1937) die Existenz eines geladenen Atomkerns (Rutherford'sches Streuexperiment mit α -Teilchen) und damit das Proton nachweisen.

2.1.2 Wellenmodelle

Das Phänomen des Lichtes wurde schon von ISAAC NEWTON (1643-1727) mit einem Partikelmodell beschrieben, das sich aber gegen das Wellenmodell von CHRISTIAAN HUYGENS (1629 - 1695) nicht durchsetzen konnte. Der überwältigende Erfolg der Wellentheorie begründete sich auf die zwanglose Erklärung von Brechungs-, Interferenz- und Beugungseffekten.

JAMES CLERK MAXWELL (1831-1879) entwickelte die nach ihm benannten Gleichungen, die die Erzeugung von elektrischen und magnetischen Feldern, verursacht durch elektrische Ladungen und Ströme, beschreiben. Eine Konsequenz der Maxwellschen Gleichungen ist die Existenz von elektromagnetischen Wellen - Licht lässt sich nach dieser Theorie als Störung im elektromagnetischen Feld verstehen, welche sich relativ zu jedem Inertialsystem mit konstanter Geschwindigkeit ausbreitet.

2.1.3 Quanten

Die Entdeckung des Gesetzes der Hohlraumstrahlung im Jahr 1900 durch MAX PLANCK (1858-1947) markiert einen der bedeutendsten Paradigmenwandel in der Physik. Ab diesem Zeitpunkt verfestigt sich immer mehr das Bild einer körnigen Struktur unserer Welt.

Diese Körnigkeit ist durch eine Eigentümlichkeit gekennzeichnet, die als Welle-Teilchen-Dualismus bekannt ist. Einerseits treten Teilchen wie Elektronen als punktförmige Partikel auf und werden auch bei Messungen immer als einzelne Teilchen detektiert. Gleichzeitig lassen sich mit Elektronenstrahlen am Doppelspalt die charakteristischen Beugungsbilder und Interferenzerscheinungen, die aus der Optik bekannt sind, erzeugen.

Aus der von PAUL ADRIEN MAURICE DIRAC (1902-1984) entwickelten relativistischen Wellengleichung folgt, dass sich das Elektron nur mit Hilfe von Spinoren² beschreiben lässt, wobei sich der Spin des Elektrons als halbzahlig herausstellt.

Mit der Entwicklung der Quantenelektrodynamik und der Quantenchromodynamik werden sowohl die geladenen Teilchen und als auch die erzeug-

²Dirac-Spinoren sind 4-komponentige Größen, aber keine 4er-Vektoren

Tabelle 2.1: Elementarteilchen

Leptonen					
Elektron-Neutrino	ν_e	Myon-Neutrino	ν_μ	Tau-Neutrino	ν_τ
Elektron	e	Myon	μ	Tauon	τ
Quarks					
up	u	charm	c	top	t
down	d	strange	s	bottom	b
Eichbosonen					
Elektromagnetische Wechselwirkung			Photon		
Schwache Wechselwirkung			Z^0 -Boson, W^+ -Boson, W^- -Boson		
Starke Wechselwirkung			Gluon		
Gravitation			Graviton ⁴		

ten Felder als quantisierte Objekte betrachtet. Selbst die Wechselwirkungen zwischen den Materieteilchen sind nun als Austausch von Quantenobjekten verstehbar.

Die Bestandteile der Materie lassen sich demnach durch Fermionen (Teilchen mit halbzahligem Spin), die Austauschteilchen der Wechselwirkungen mit Hilfe von Bosonen (Teilchen mit ganzzahligem Spin) beschreiben.

Die Existenz der heute bekannten Elementarteilchen³ (siehe Tabelle 2.1) läßt sich mit dem Standardmodell theoretisch nicht erklären - man muss sie als gegeben voraussetzen. Die Massen und die quantisierten Ladungen der Fermionen treten als Parameter der Theorie auf.

2.2 Das Elektron

Das Elektron zeigt bei allen bisher durchgeführten Experimenten keine innere Struktur. Es kann deshalb als punktförmig angenommen werden, solange die beobachteten Distanzen größer als 10^{-19} Meter sind. Das Antiteilchen zum Elektron heißt Positron und besitzt genau entgegengesetzte Ladung. Die in Tabelle 2.2 angeführten Werte für Masse und Ladung des Elektrons sind - wie schon erwähnt - im Standardmodell nicht theoretisch erklärt.

³= nicht weiter teilbare Fundamentarteilchen

⁴experimentell nicht nachgewiesen

Tabelle 2.2: Eigenschaften des Elektrons und Positrons

Ladung	$\pm 1,602176 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Ruhemasse in MeV	0,510999 MeV
Ruhemasse in kg	$9,109382 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Spin	$\frac{1}{2}$

2.3 Solitonen

Solitonen sind Wellenphänomene. Durch geeignete Überlagerung von Wellenzügen, die einerseits dispergieren⁵ und sich andererseits in einem nicht-linearem Medium ausbreiten, können sich stabile Wellenpakete bilden, die ihre Form beibehalten. Der destabilisierende Effekt der Dispersion wird in diesem Fall durch die Nichtlinearität des Mediums gerade kompensiert.

2.3.1 Die Entdeckung der Solitonen

Die Entdeckung von solitären Wellen⁶ geht auf JOHN SCOTT RUSSELL zurück [3]. RUSSELL war 1834 mit Experimenten in engen Kanälen beschäftigt, um die Gesetzmäßigkeiten des Fahrtwiderstandes von Schiffen zu erforschen. Bei der plötzlichen Bremsung eines Kahns bemerkte er, dass sich der Wellenberg, der sich vor dem Bug gebildet hatte, gleichförmig und ohne seine Form merklich zu ändern, über mehrere Kilometer im Kanal weiterbewegte.

Die theoretische Erklärung von solitären Wasserwellen erfolgte erstmals 1895 durch DIEDERIK KORTEWEG und GUSTAV DE VRIES durch eine nicht-lineare, partielle Differenzialgleichung dritter Ordnung. Die Korteweg-de-Vries Gleichung liefert als Lösung die von RUSSELL beobachteten Solitonen.

2.3.2 Fermionen als topologische Solitonen

Grundsätzlich kann jede nichtlineare Differenzialgleichung solitäre Lösungen besitzen und demnach Solitonen beschreiben. Das Modell der topologischen Fermionen [2] versucht die Materieteilchen als stabile Überlagerungen von Lösungen einer nichtlinearen Differenzialgleichung eines Vektorfeldes zu erklären. Das Vektorfeld wäre demnach identisch mit den bosonischen Austauscheteilchen, die sich bildenden stabilen Solitonen entsprechen den Fermionen.

⁵Wellen unterschiedlicher Wellenlänge besitzen unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten. Dadurch kommt es bei linearen Wellengleichungen zu einem Zerfließen des Wellenpakets.

⁶der Begriff solitäre Wellen und Solitonen werden in dieser Arbeit synonym verwendet. Genau genommen können solitäre Wellen bei gegenseitiger Durchdringung Energie austauschen, Solitonen hingegen nicht.

Es handelt sich hierbei um eine nichtquantisierte, relativistische Theorie, also ein Kontinuumsmodell. Das Modell enthält auf Grund seiner Voraussetzungen die Quantisierung der elektrischen Ladung und liefert im elektrodynamischen Grenzfall die Vorhersagen der Maxwell'schen Theorie. Der Ausgangspunkt für topologische Fermionen ist eine Idee Diracs – die Diracschen magnetischen Monopole.

2.3.3 Dirac's magnetische Monopole und die Ladungsquantisierung

Magnetische Monopole treten bei der Symmetrisierung der Maxwellgleichungen

$$\vec{\nabla} \vec{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0} \quad \vec{\nabla} \vec{B} = 0 \quad (2.1)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{j}_e$$

auf, wenn man diese mit einer magnetischen Ladungsdichte ergänzt.

$$\vec{\nabla} \vec{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0} \quad \vec{\nabla} \vec{B} = \rho_m \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \vec{j}_m \quad \vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \mu_0 \vec{j}_e$$

Bei der Annahme einer punktförmigen magnetischen Ladungsverteilung

$$\vec{\nabla} \vec{B} = g \delta(\vec{r}) \quad (2.3)$$

führt dies zu einem Vektorpotenzial

$$\vec{A} = \frac{g}{4\pi r} \frac{\vec{r} \times \vec{n}}{\vec{r} + r\vec{n}} \quad \text{mit} \quad \vec{n} = \vec{e}_z, \quad (2.4)$$

das Diracpotenzial⁷, welches auf der negativen z-Achse nicht definiert ist. Bei der Berechnung der magnetischen Feldstärke \vec{B} erhält man, bis auf den Bereich der negativen z-Achse, das Feld einer magnetischen Punktladung. Da

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (2.5)$$

gilt, muss der Fluss über die gesamte Oberfläche verschwinden, da ein Wirbelfeld quellenfrei sein muss. Eine genaue Analyse zeigt, dass der Fluss über die negative z-Achse genau dem Fluss durch die restliche Kugeloberfläche entspricht und damit in Summe Null ergibt. Damit läßt sich ein Feld einer Punktladung analog zur elektrischen Ladung konstruieren, welches gleichzeitig ein Wirbelfeld ist. Die magnetische Ladungsdichte am Ursprung entspricht dem Ende einer unendlich dünnen und unendlich langen Spule, dem Diracstring (siehe Abbildung 2.1).

⁷eine ausführliche und verständliche Herleitung ist in [4] gegeben.

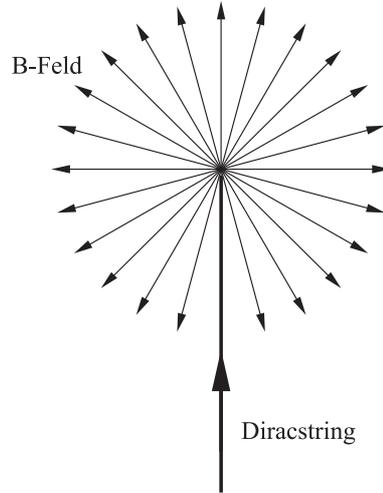


Abbildung 2.1: Feld eines Diracmonopols

Bei Vorhandenseins eines Vektorpotenzials in einem sonst feldfreien Raumgebiet, läßt sich beim Verschieben einer Wellenfunktion entlang einer Kurve C_A^B eine Änderung der Phase der Wellenfunktion beobachten, der Aharonov-Bohm Effekt [1].

$$\psi(x) \stackrel{A \text{ nach } B}{\longrightarrow} \tilde{\psi}(y) = e^{\frac{ie}{\hbar} \int_A^B A_\mu(x) dx^\mu} \psi(x) \quad (2.6)$$

Durch die Forderung Dirac's, dass der Fluss des Diracstrings keine physikalischen Konsequenzen zeitigt, folgt, dass das Kurvenintegral um den String entlang eines geschlossenen Weges

$$\frac{ie}{\hbar} \oint_C A_\mu(x) dx^\mu = i2\pi n \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z} \quad (2.7)$$

ergeben muss (Abbildung 2.2). Der Stokesche Satz

$$\frac{ie}{\hbar} \oint_C A_\mu(x) dx^\mu = \frac{ie}{\hbar} \int_{S_C} dS^{\mu\nu} (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) = \frac{ie}{\hbar} \int_{S_C} dS^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (2.8)$$

liefert ein Oberflächenintegral, welches dem magnetischen Fluss, verursacht durch den Diracstring entspricht. Dieser Fluss ist quantisiert und liefert die Diracsche Quantisierungsbedingung

$$\frac{eg}{\hbar} = n \quad \text{mit } g = \int_{S_C} dS^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (2.9)$$

für die elektrische Ladung. Magnetische Monopole wurden bis heute experimentell nicht nachgewiesen. Berechnungen im Rahmen der GUT (Grand

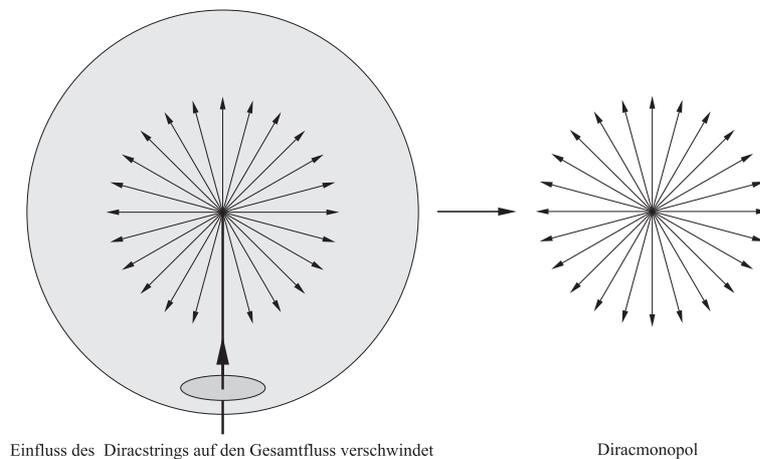


Abbildung 2.2: Verschwinden des Diracstrings

Unified Theory) postulieren Massen der magnetischen Monopole in der Größenordnung von 10^{15} Protonenmassen - eine Energie, die heutzutage experimentell nicht bereitstellbar ist.

Beim Studium der Geometrie der S^2 ergibt sich ein bemerkenswerter Zusammenhang zwischen dem gerade vorgestellten Diracpotenzial und dem Paralleltransport von Koordinatensystemen auf einer Kugeloberfläche.

2.4 Von der Geometrie der S^2 zur Elektrodynamik

Man betrachtet lokale Koordinatensysteme [4] auf einer S^2 , die durch Paralleltransport auf der Kugeloberfläche entstehen. Verfolgt man die Bewegung zweier Koordinatensysteme entlang unterschiedlicher Meridiane (Abbildung 2.3), so ergibt sich am Äquator der Kugel eine Verdrehung der Koordinatensysteme zueinander, die als Phasenfaktor

$$e^{-i\phi\Gamma_\phi} \quad (2.10)$$

darstellbar ist. Bei Verallgemeinerung auf beliebige Paralleltransporte ergibt sich ein Phasenfaktor der Form

$$e^{-i\int_C \frac{1-\cos(\theta)}{r\sin\theta} \vec{e}_\phi d\vec{s}}. \quad (2.11)$$

Der aus dem Diracpotenzial aus (2.4) gebildete Paralleltransporter U stimmt bis auf einen Faktor $\frac{1}{2}$ mit diesem Phasenfaktor überein. Dieser Unterschied ergibt sich durch die Forderung Diracs nach Verschwinden des Diracstrings, wodurch der Wert des Integrals auf Vielfache von 2π eingeschränkt wird. Eine genaue Analyse von (2.11) in [4] zeigt, dass das Kurvenintegral die von der Kurve eingeschlossene Fläche um den Südpol misst und die ergibt nach dem Satz von Stokes genau 4π .

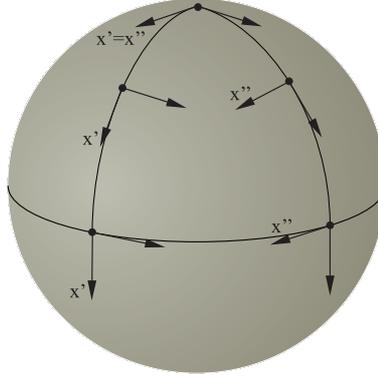


Abbildung 2.3: Koordinatensysteme auf der S^2

Wie beim Diracpotenzial ergibt sich eine Singularität am Südpol, da die Koordinatensysteme entlang unterschiedlicher Meridiane an diesem Punkt nicht eindeutig anordenbar sind. Um diese Singularität zu vermeiden, wird jede einzelne skalare Komponente des Vektorpotenzials A_μ durch einen dreidimensionalen Vektor ersetzt. Diese Idee geht auf CHEN NING YANG und TAI TSUN WU zurück. Dadurch besteht das Vektorpotenzial

$$\vec{A}^0 = 0, \quad \vec{A}^r = 0, \quad \vec{A}^\vartheta = \frac{g}{4\pi} \frac{\vec{e}_\phi}{r}, \quad \vec{A}^\varphi = -\frac{g}{4\pi} \frac{\vec{e}_\theta}{r \sin \theta} \quad (2.12)$$

aus 12 Komponenten. Die hochgestellten Indizes bezeichnen die Koordinaten im vierdimensionalen Minkowskiraum, die Pfeile symbolisieren die Ausrichtung im inneren Farbraum, dem Vektorraum der dreidimensionalen Komponentenvektoren.

Dieses Feld läßt sich durch eine Eichtransformation auf die Form von (2.4) bringen. Diese sphärisch symmetrische Monopollösung ist im Ursprung singularär und ist aus einem auf 1 normierten \vec{n} -Feld

$$\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.13)$$

ableitbar [4]. Dabei erhält man für die Änderung des \vec{n} -Feldes bei Bewegung in der Raumzeit die Veränderung

$$\partial_\mu \vec{n} = -\vec{\Gamma}_\mu \times \vec{n} \quad (2.14)$$

wobei $\vec{\Gamma}_\mu(x)$ als *Zusammenhang* bezeichnet wird. $\vec{\Gamma}_\mu(x)$ vermittelt eine Drehung der lokalen Koordinatensysteme bei Bewegung in der Raumzeit. Man findet weiters, dass sich der Zusammenhang als

$$\vec{\Gamma}_\mu = \partial_\mu \vec{n} \times \vec{n} \quad (2.15)$$

darstellen läßt. Diese Beziehung ist in Hinblick auf die numerische Bestimmung der Gammafelder aus den Solitonfeldern von Bedeutung. Der Vergleich

von (2.12) mit (2.15) zeigt die Übereinstimmung bis auf den Faktor $\frac{g}{4\pi}$.

$$\vec{A}^\mu = \frac{g}{4\pi} \vec{\Gamma}^\mu \quad (2.16)$$

Betrachtet man nun Verschiebungen in Richtung δx und δy im Minkowski-Raum, so spannen diese ein Flächenelement $\delta x \delta y$ auf. Im zugehörigen Farbraum wird analog ein Flächenelement zugeordnet, welches sich aus den zugeordneten Verschiebungen auf der S^2

$$\begin{aligned} \delta x^\mu \delta y^\nu &\rightarrow (\partial_\mu \vec{n} \times \partial_\nu \vec{n}) \delta x^\mu \delta y^\nu = (\vec{n} \times \partial_\mu \vec{n}) \times (\vec{n} \times \partial_\nu \vec{n}) \delta x^\mu \delta y^\nu \\ &= (\vec{\Gamma}^\mu \times \vec{\Gamma}^\nu) \delta x^\mu \delta y^\nu \end{aligned} \quad (2.17)$$

ergibt. Das Verhältnis der beiden Flächenelemente zueinander wird als *Krümmungstensor* bezeichnet. Das Oberflächenintegral über das Feld eines Monopols ergibt genau g und die Oberfläche einer Einheitskugel beträgt 4π . Damit läßt sich die Zuordnung

$$\begin{aligned} F^{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{E_x}{c} & -\frac{E_y}{c} & -\frac{E_z}{c} \\ \frac{E_x}{c} & 0 & -B_z & B_y \\ \frac{E_y}{c} & B_z & 0 & -B_x \\ \frac{E_z}{c} & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{g}{4\pi} R^{\mu\nu} = -\frac{g}{4\pi} \vec{R}^{\mu\nu} \vec{n} \end{aligned} \quad (2.18)$$

als Flussdichte motivieren. Der Feldstärketensor der Elektrodynamik ist demnach proportional dem Krümmungstensor und folglich proportional dem Verhältnis der Flächenelemente im Minkowski- und Farbraum. Mit Hilfe dieses Ansatzes lassen sich demnach magnetische Monopole mit Hilfe von nichtabelschen \vec{n} -Feldern beschreiben. Diese wären auf Grund der Diracschen Quantisierungsbedingung quantisiert.

Da noch keine magnetischen Monopole entdeckt wurden und außerdem die elektrische Ladung quantisiert ist, versucht man nun mit Hilfe nichtabelscher \vec{n} -Felder eine duale Elektrodynamik zu formulieren, die als Lösung elektrische Monopole besitzt – die Quantisierung der elektrischen Ladung würde dann automatisch folgen.

2.5 Die Geometrie der S^3 und die duale Elektrodynamik

Das Problem der Singularitäten der \vec{n} -Felder des vorangestellten Ansatzes – die Felder lassen sich an den Polen der Kugel nicht eindeutig anordnen – wird durch Felder der Form

$$\vec{q} = \vec{n} \sin \alpha \quad , \quad \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \quad (2.19)$$

mit der Ergänzung

$$q_0 = \cos \alpha \quad (2.20)$$

gelöst. Damit erhält man einen zusätzlichen Freiheitsgrad und die Beschreibung erfolgt am einfachsten über eine im vierdimensionalen Raum eingebettete Hälfte einer dreidimensionalen Einheitskugel S^3 , da

$$q_0^2 + \vec{q}^2 = 1 \quad (2.21)$$

ergibt. Zur Beschreibung dieser Mannigfaltigkeit werden üblicherweise die Gruppen $SU(2)$ beziehungsweise $SO(3)$ (siehe Anhang B.2) verwendet. In der Darstellung mittels Paulimatrizen nehmen die, erstmals von WILLIAM ROWAN HAMILTON beschriebenen, *Quaternionen*, folgende Form an:

$$Q = q_0 \cdot \mathbb{1} + i\sigma_K q_K = \begin{pmatrix} q_0 + iq_3 & q_2 + iq_1 \\ -q_2 + iq_1 & q_0 - iq_3 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Weiters definiert man das Skalarprodukt zweier Quaternionen als

$$P \cdot Q = q_0 p_0 + \vec{q} \vec{p} = \frac{1}{2} \text{Sp}(Q \cdot P^\dagger). \quad (2.23)$$

An der Einheit $Q = \mathbb{1}$ spannen die σ_K einen Tangentialraum auf. Damit sind alle Linearkombinationen $v_K \sigma_K$ Elemente der zugehörigen Lie-Algebra (siehe Anhang B.2). Für beliebiges Q läßt sich analog ein lokales Koordinatensystem definieren, wenn man beachtet, dass

$$V = v_K \sigma_K Q \quad (2.24)$$

im jeweiligen Tangentialraum liegt, weil das Skalarprodukt $Q \cdot V$ verschwindet. Das lokale Koordinatensystem entsteht durch Wirkung von Q auf die σ_K . Damit werden im Tangentialraum von Q drei orthogonale Vektoren

$$\sigma_K^Q := \sigma_K \cdot Q \quad (2.25)$$

definiert. Betrachtet man nun beliebige Wege mit einem Parameter s , so ergibt sich die Änderung von Q

$$\partial_s Q = i \vec{\Gamma}_s \vec{\sigma}^Q \quad (2.26)$$

als Linearkombination der Basisvektoren σ_K^Q im jeweiligen Tangentialraum. $\vec{\Gamma}_s$ ist der bereits in Kapitel 2.4 eingeführte Zusammenhang. Die Verdrehung der lokalen Basen entlang eines mit s parametrisierten Weges folgt dann mit

$$\partial_s \vec{\sigma}^Q = -\vec{\Gamma}_s \times \vec{\sigma}^Q + i \vec{\Gamma}_s Q. \quad (2.27)$$

Dies sind die aus der Differenzialgeometrie bekannten Formeln von Gauß. Nun definiert man den Krümmungstensor

$$\vec{R}_{st} = \vec{\Gamma}_s \times \vec{\Gamma}_t \quad (2.28)$$

als das Kreuzprodukt der Zusammenhänge im Schnittpunkt zweier, sich kreuzender Koordinatenlinien. Dieser läßt sich mit Hilfe der Maurer-Cartan-Beziehung (Herleitung siehe [4])

$$\partial_s \vec{\Gamma}_t - \partial_t \vec{\Gamma}_s = -2\vec{\Gamma}_s \times \vec{\Gamma}_t \quad (2.29)$$

als koordinatenunabhängige Größe

$$\vec{R}_{st} = \partial_t \vec{\Gamma}_s - \partial_s \vec{\Gamma}_t + \vec{\Gamma}_t \times \vec{\Gamma}_s \quad (2.30)$$

formulieren. Die Verdrehung des Basen entlang einer geodätische Linie wird über einen Paralleltransporter

$$\sigma_K(s + ds) = (1 + i\vec{\Gamma}_s ds)_{KL} \sigma_L(s) \quad (2.31)$$

vermittelt. Bei Bildung der Ableitung ist es notwendig den Anteil der Basisverdrehung bei der Differenzbildung zu berücksichtigen und damit den Ableitungsbegriff zu verallgemeinern.

$$\hat{D}_s = \partial_s - i\hat{\Gamma}_s \quad (2.32)$$

Entwickelt man den Paralleltransport bis zu Termen 2. Ordnung und berechnet damit die Umrundung eines infinitesimalen Rechteckes, so führt dies schließlich genau zum Ausdruck in (2.30).

Bei genauer Analyse der Bewegung um ein infinitesimales Rechteck zeigt sich, dass nach Vollendung des Umlaufes - wie auch zu erwarten - Q gleich bleibt, während die Basis nur halb so schnell rotiert.

$$Q(s + ds) = e^{2i\vec{\Gamma}_s ds} Q(s) \quad (2.33)$$

$$\sigma(s + ds) = e^{i\hat{\Gamma}_s ds} \sigma(s) \quad (2.34)$$

Grund dafür sind die unterschiedlichen Generatoren der jeweiligen Darstellung der Lie-Algebren.

2.6 Monopolstabilisierung

Man definiert nun in Analogie zu (2.18) einen dualen Feldstärketensor

$${}^* \vec{F}_{\mu\nu} = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{R}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{B}_x & \vec{B}_y & \vec{B}_z \\ -\vec{B}_x & 0 & \frac{\vec{E}_z}{c} & -\frac{\vec{E}_y}{c} \\ -\vec{B}_x & -\frac{\vec{E}_z}{c} & 0 & \frac{\vec{E}_x}{c} \\ -\vec{B}_x & \frac{\vec{E}_y}{c} & -\frac{\vec{E}_x}{c} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Bildet man die dementsprechende duale Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_{dual} = -\frac{1}{2\mu_0} \left(\frac{\vec{E}^2}{c^2} - \vec{B}^2 \right) = \frac{\alpha \hbar c}{4\pi} \frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu}, \quad (2.36)$$

so zeigt sich, dass diese keine stabilen Lösungen liefert – das Soliton zerfließt. Man addiert deshalb einen stabilisierenden Potentialterm

$$\mathcal{H}_p = \frac{\alpha \hbar c}{4\pi} \frac{q_0^{2m}}{r_0^4} \text{ mit } m = 1, 2, 3... \quad (2.37)$$

zur Lagrangedichte und erhält somit

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{dual} - \mathcal{H}_p = -\frac{\alpha \hbar c}{4\pi} \left(\frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu} + \frac{q_0^{2m}}{r_0^4} \right). \quad (2.38)$$

Diese Lagrangedichte ist Ausgangspunkt für die folgenden numerischen Berechnungen am diskreten Gitter. Im nächsten Kapitel werden zwei alternative Formulierungen der Berechnung des Krümmungsanteils der Wirkung vorgestellt, die im Grenzfall verschwindender Gitterkonstante a gleiche Ergebnisse liefern – die Gammawirkung und die Wilsonwirkung.

2.7 Elektrodynamischer Grenzfall

Für Abstände, die sehr viel größer als r_0 sind, beziehungsweise im Limes r_0 gegen 0, verschwindet der Potentialterm aus (2.37) und es verbleibt für den Krümmungstensor der Term

$$\vec{R}^{\mu\nu}(x) = \partial^\mu \vec{n}(x) \times \partial^\nu \vec{n}(x), \quad (2.39)$$

der in \vec{n} -Richtung zeigt. Folglich läßt sich der Abelsche Feldstärketensor als Betrag von $\vec{R}^{\mu\nu}(x)$ definieren

$$*f_{\mu\nu}(x) = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 & B_x & B_y & B_z \\ -B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & -\frac{E_y}{c} \\ -B_x & -\frac{E_z}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ -B_x & \frac{E_y}{c} & -\frac{E_x}{c} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Man sieht, dass sich in genügend großer Entfernung von den Solitonenkernen die klassischen Feldstärken der Maxwelltheorie ergeben. Bei der Simulation von Zweiteilchenzuständen wird dieses Ergebnis für die Berechnung der Energien an der Oberfläche des Gitters verwendet.

Kapitel 3

Feldkonfigurationen

3.1 Monopolkonfigurationen

Feldkonfigurationen mit einem Solitonzentrum – also einem Monopol – sind ausführlich in [4] beschrieben. Auf Grund der Symmetrie der Anordnung läßt sich das Monopolfeld aus einem Igelansatz mit $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$ ermitteln. Für die Exponenten $m = 2$ und $m = 3$ des Potenzialterms wurden analytische Lösungen für das Solitonfeld gefunden, für $m = 1$ lassen sich die Differentialgleichungen nur numerisch lösen.

3.2 Dipolkonfigurationen

Vorüberlegungen zum Aufbau von Dipolen aus Monopolen

Dipolkonfigurationen wurden bereits in der Arbeit von Joachim Wabnig [5] numerisch untersucht und unterschiedliche Feldkonfigurationen betrachtet. In den Simulationen wurde die Zylindersymmetrie des Problems ausgenutzt und die Energieminimierung in Zylinderkoordinaten ausgeführt. In der vorliegenden Arbeit werden alle Berechnungen in einem kartesischen Koordinatensystem durchgeführt.

Die Anzahl der möglichen Dipolkonfigurationen ist durch die Forderung nach einem stetigen Übergang zwischen den Einteilchenzuständen eingeschränkt. Die Monopollösungen sind spärlich symmetrisch. Durch eine globale Rotation der Feldvektoren um den Winkel π um die z - beziehungsweise x -Achse ergeben sich energetisch gleichwertige Lösungen. Zusätzlich ergibt eine Invertierung der Solitonfelder ebenso energetisch gleichwertige Konfigurationen. Diese sind aber in Bezug auf die Feldstärken nicht äquivalent.

Überlegt man sich Anordnungen von unterschiedlich geladenen Monopolen zu einem Dipol, so erkennt man zwei Möglichkeiten, diese an der Grenze $z = 0$ stetig zusammenzufügen (siehe Abbildung 3.1). Es ergibt sich entweder eine Anordnung aus unverdrehtem e^+ - und unverdrehtem e^- -Monopol

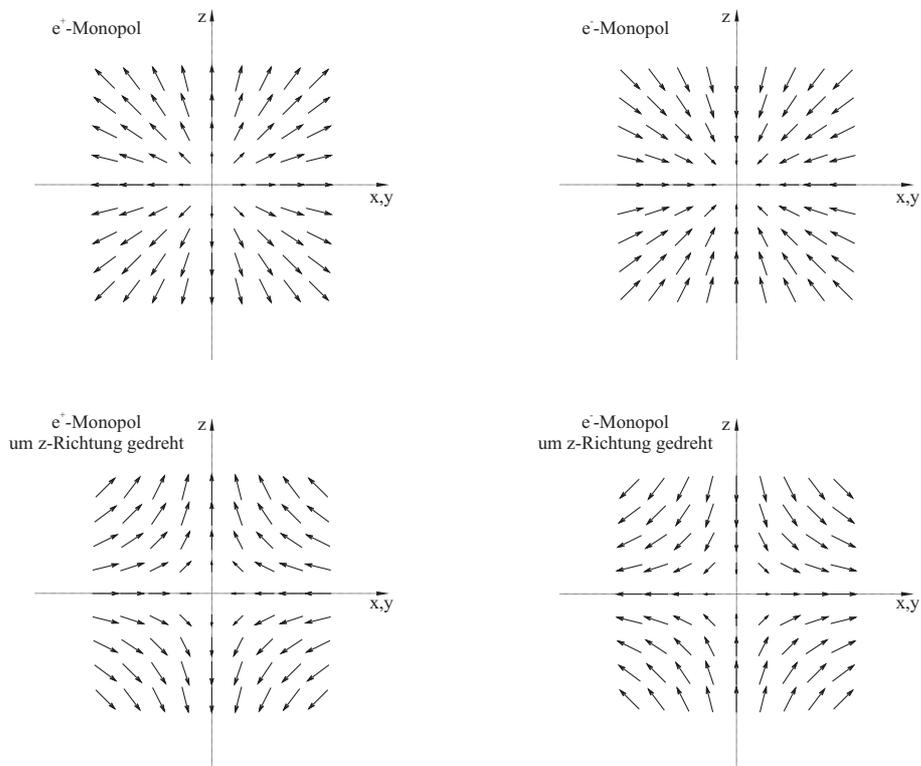


Abbildung 3.1: Mögliche Monopolkonfigurationen bei Rotation um die z -Achse

oder eine Anordnung aus unverdrehtem e^+ - und verdrehtem e^- -Monopol.

Welche der beiden die energetisch günstigere ist, ist erst nach der Energieminimierung im Gitter entscheidbar - erkennbar ist aber schon jetzt, dass die Kombination eines nichtverdrehten mit einem um π verdrehten Monopol weniger Krümmungsenergie tragen wird, als die Anordnung gebildet aus zwei nichtverdrehten Monopolen.

Bei Konfigurationen mit gleichnamigen Ladungen muss einer der beiden Monopole um die x -Achse verdreht werden. Dann ist auch bei diesen ein stetiger Übergang bei $z = 0$ möglich (siehe Abbildung 3.2). In Tabelle 3.1 sind die möglichen stetigen Konfigurationen für den elektromagnetischen Grenzfall zusammengefasst – berücksichtigt man noch alle Kombinationsmöglichkeiten mit den zwei Solitonzentren, so ergeben sich insgesamt 24 mögliche Konfigurationen.

Abbildung 3.3 zeigt eine nichtverdrehte Monopol-Antimonopol-Anordnung, in Abbildung 3.4 erkennt man gut die geringere Krümmung bei Verdrehung des Solitonfeldes für $z < 0$. In Abbildung 3.5 ergeben sich durch die Verdrehung um die x -Achse unterschiedliche Anordnungen in der xz - bzw

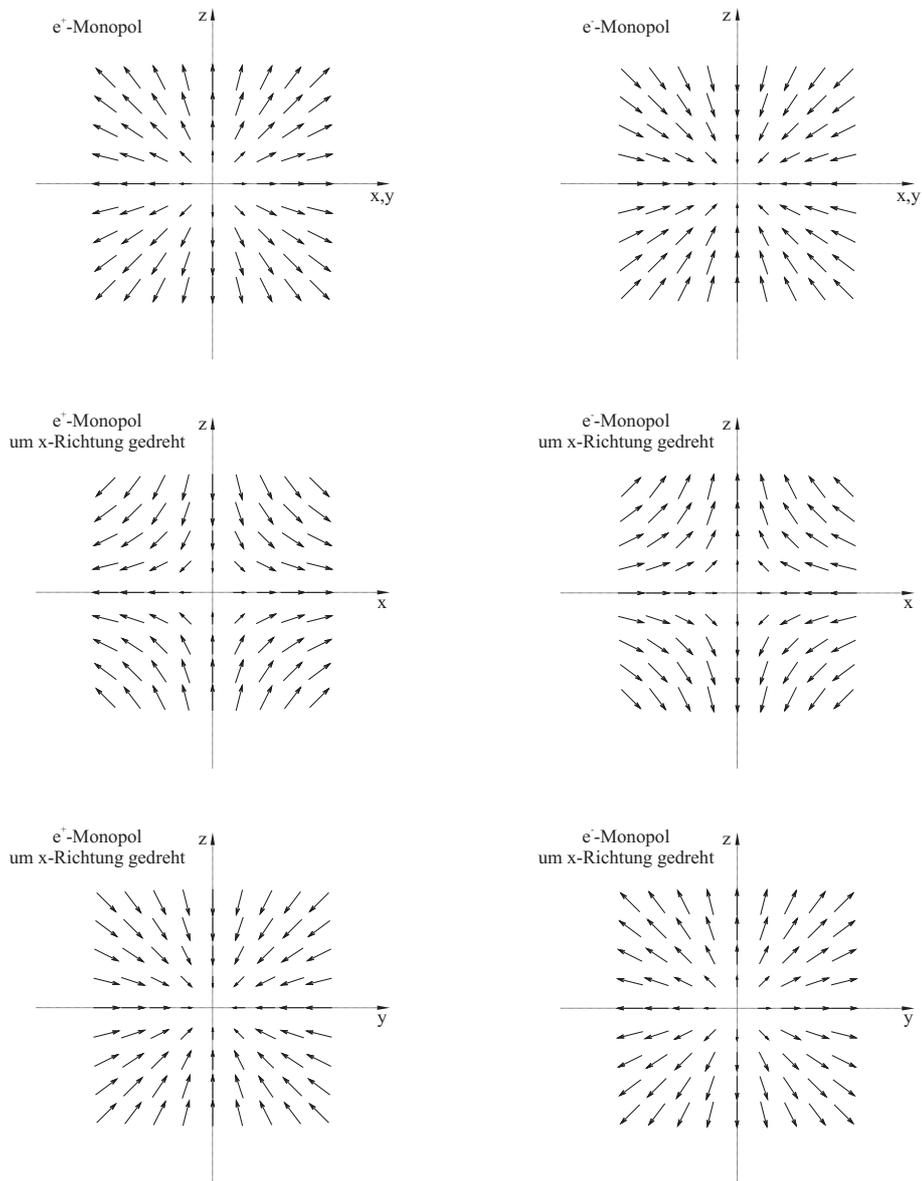


Abbildung 3.2: Mögliche Monopolkonfigurationen bei Rotation um die x -Achse

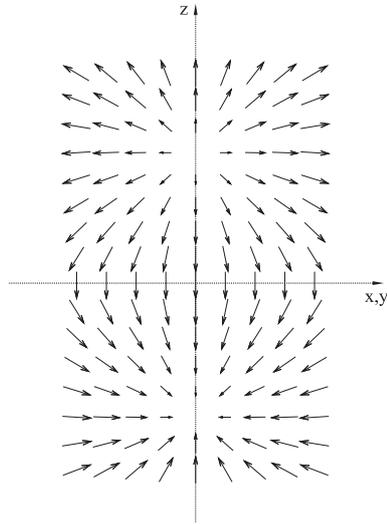


Abbildung 3.3: Monopol-Antimonopol-Konfiguration unverdreht

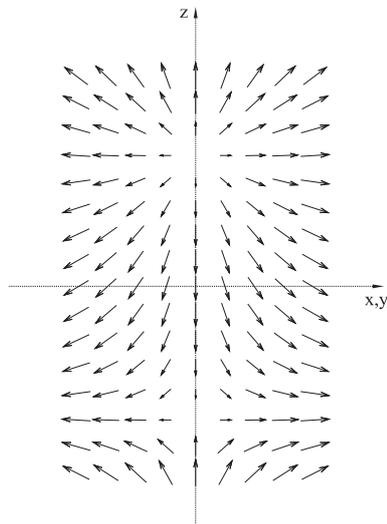


Abbildung 3.4: Monopol-Antimonopol-Konfiguration um z -Achse verdreht

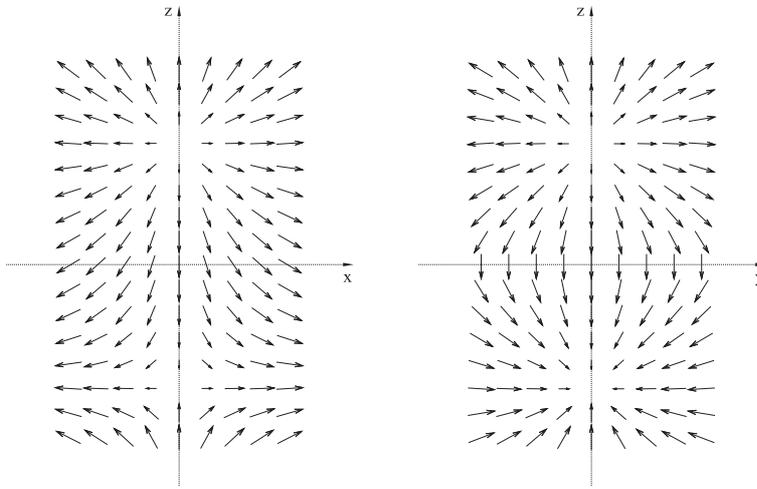


Abbildung 3.5: Monopol-Monopol-Konfiguration um x -Achse verdreht

Tabelle 3.1: Dipolkonfigurationen

Ladung 1	Ladung 2	Rotation des 2. Monopols
+	-	nein
+	-	z -Achse
+	+	x -Achse
-	+	nein
-	+	z -Achse
-	-	x -Achse

yz -Ebene¹.

Berechnung der Startkonfiguration

Für die Berechnung von Zweiteilchenkonfigurationen werden Solitonkerne an den Positionen

$$\vec{R}_+ = (0, 0, z_0), \vec{R}_- = (0, 0, -z_0) \quad (3.1)$$

mit Werten für $Q = \pm 1$ betrachtet. Der einfache Igelansatz kann nicht mehr verwendet werden, für die Erstellung der Anfangskonfigurationen wird folgende Eigenschaft der Solitonfelder herangezogen [2][9]:

Im elektrodynamischen Grenzfall bleiben die \vec{n} -Felder entlang der Feldlinien des elektrischen Feldes konstant.

¹Für die Abbildungen der Dipolkonfigurationen wurden Bilder bereits energieminimierter Anordnungen verwendet.

Die Startkonfiguration für Simulationsrechnungen an den zugehörigen \vec{n} -Feldern läßt sich somit in der Nähe der Solitonkerne aus der elektrischen Feldstärke berechnen und damit die Integrationskonstante C und ϕ aus

$$\frac{z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} - \frac{z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} = C, \quad \text{und} \quad \varphi = \text{const} \quad (3.2)$$

bestimmen. Das \vec{n} -Feld

$$\vec{n}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \sin \theta(\mathbf{x}) \cos \phi(\mathbf{x}) \\ \sin \theta(\mathbf{x}) \sin \phi(\mathbf{x}) \\ \cos \theta(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

ist in der Nähe der Solitonkerne parallel zum elektrischen Feld und damit auch parallel zu den Feldlinien. Betrachtet man die Feldlinien eines Elektron-Positron-Systems mit der Ladung $-e$ an $z = a$ und $+e$ an $z = -a$ in der Nähe des Elektrons, so erhält man

$$C = \lim_{a \rightarrow 0, z \rightarrow a} \frac{z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} - \frac{z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} = 1 - \cos \theta, \quad \text{und} \quad \phi = \varphi \quad (3.4)$$

wenn θ den Winkel zwischen \vec{n} -Feld und der z -Achse bezeichnet und $z_{\pm} = z \pm a$ bedeutet. Es ergibt sich damit für das Solitonfeld \vec{n}

$$\vec{n}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \left(1 - \frac{z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}}\right)^2} \cos \phi \\ \sqrt{1 - \left(1 - \frac{z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}}\right)^2} \sin \phi \\ 1 - \frac{z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Für den allgemeinen Fall zweier Ladungen ergeben sich die Feldstärken

$$E_{\rho}(\rho, z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{q_+\rho}{(z_+^2 + \rho^2)^{3/2}} + \frac{q_-\rho}{(z_-^2 + \rho^2)^{3/2}} \right], \quad (3.6)$$

$$E_z(\rho, z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{q_+z_+}{(z_+^2 + \rho^2)^{3/2}} + \frac{q_-z_-}{(z_-^2 + \rho^2)^{3/2}} \right]$$

wobei q_+ und q_- die jeweiligen Ladungen an den Punkten $z = a$ beziehungsweise $z = -a$ bezeichnet. Man erhält schließlich die allgemeine Form des \vec{n} -Feldes

$$\vec{n}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \left(\frac{q_+z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{q_-z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} - \frac{q_+}{q_-}\right)^2} \cos \phi \\ \sqrt{1 - \left(\frac{q_+z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{q_-z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} - \frac{q_+}{q_-}\right)^2} \sin \phi \\ \frac{q_+z_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{q_-z_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} - \frac{q_+}{q_-} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

für zwei beliebige Ladungen $\pm e$.

Für eine Konfiguration mit zwei Ladungen im Abstand von $10a$ auf der z -Achse ergeben sich je nachdem, ob zwei gleiche oder zwei ungleiche Ladungen vorhanden sind, unterschiedliche \vec{n} -Felder.

In Abbildung 3.6 ist das \vec{n} -Feld einer e^+e^- -Anordnung in der xz -Ebene mit den dazugehörigen Feldlinien des elektrischen Feldes dargestellt,

Bemerkenswert ist die Tatsache, dass sich im Falle ungleichnamiger Ladungen eine im unteren Bereich (für $z < 0$) eine um die z -Achse verdrehte Feldanordnung ergibt und nicht die nichtverdrehte Konfiguration. Diese Anordnung entspricht einer $(+, -)$ -Konfiguration im Grundzustand.

Bei der Berechnung der Startkonfigurationen ist zu beachten, dass im Falle gleichnamiger Ladungen die Feldlinien des elektrischen Feldes nicht verbunden sind. In diesem Fall muss das \vec{n} -Feld ausgehend von beiden Zentren berechnet werden. Dadurch würden sich idente Feldanordnungen im oberen und unteren Bereich der z -Achse ergeben und damit ein unstetiger Übergang bei $z = 0$.

Da über die Richtung der \vec{n} -Vektoren in obigem Theorem keine Aussage gemacht wird, wurden (siehe Abbildung 3.7) alle \vec{n} -Vektoren für negative z -Werte invertiert, um einen optimalen Anschluss an das Feld im oberen Bereich zu erreichen. Diese ist - wie sich noch zeigen wird - topologisch äquivalent zu einer Konfiguration mit ungleichnamigen Ladungen. Sie wird deshalb im Folgenden als angeregte $(+, -)$ -Konfiguration bezeichnet.

Um eine Konfiguration mit gleichnamigen Ladungen zu erzeugen, wurden die x -Komponenten des Solitonfeldes für $z < 0$ nochmals invertiert, um eine Startkonfiguration wie in Abbildung 3.5 zu erhalten. Diese Konfiguration entspricht einer im unteren Bereich um die x -Achse verdrehten Anordnung von zwei gleichgeladenen Monopolen.

Die endgültige Identifikation der korrekten Dipolanordnungen erfolgt nach der Energieminimierung - die elektrische Energie der anziehenden Monopole muss geringer sein als die der abstossenden - und nach Ermittlung der Feldstärken im elektromagnetischen Grenzfall.

Berechnung der Feldstärken aus dem Solitonfeld

Der Krümmungstensor

$$\vec{R}_{\mu\nu} = \vec{\Gamma}_\mu \times \vec{\Gamma}_\nu \quad (3.8)$$

wird aus den $\vec{\Gamma}$ -Feldern berechnet und besteht insgesamt aus 6×3 Feldstärkekomponenten. Im elektrodynamischen Grenzfall folgt der duale Feldstärketensor zu

$$*f_{\mu\nu} = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{n}. \quad (3.9)$$

Damit ergeben sich schließlich die 3 Komponenten des elektrischen Feldes aus der Maxwelltheorie.

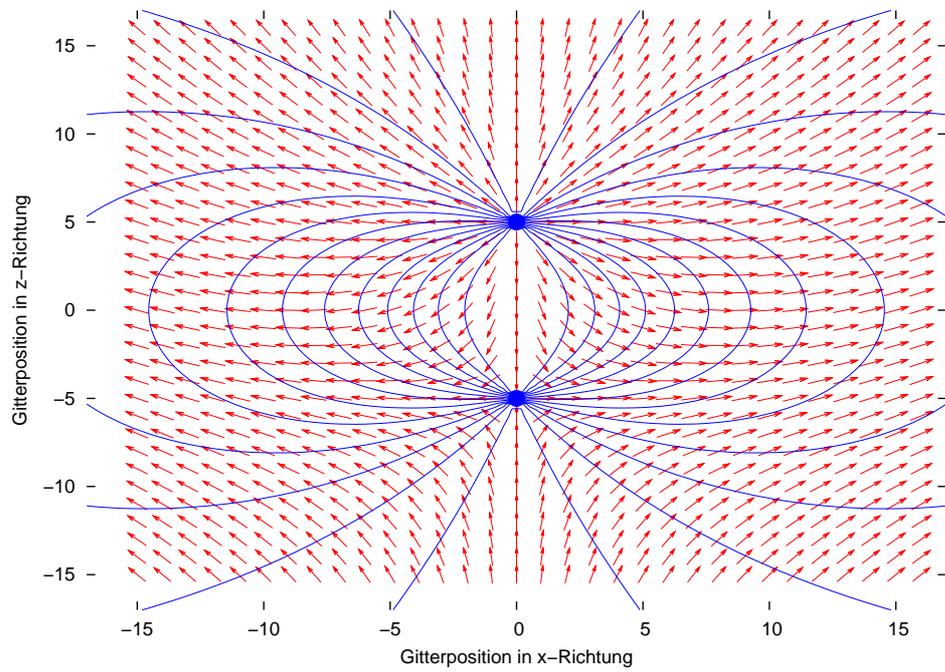


Abbildung 3.6: Anfangskonfiguration eines e^+e^- -Dipols

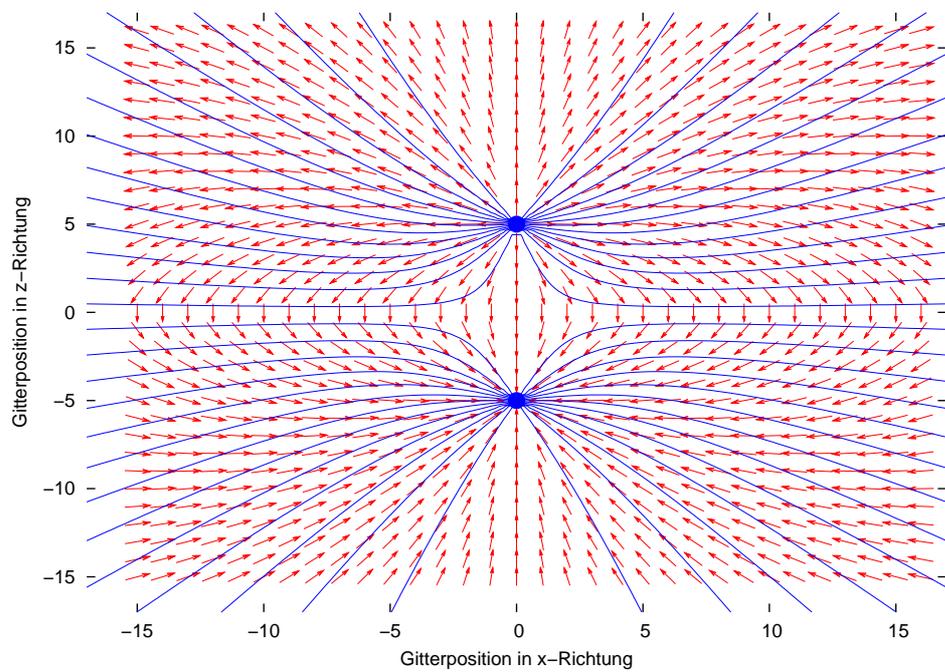


Abbildung 3.7: Anfangskonfiguration eines angeregten e^+e^- -Dipols

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{n} \left(\vec{\Gamma}_2 \times \vec{\Gamma}_3 \right) \\
E_2 &= \frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{n} \left(\vec{\Gamma}_3 \times \vec{\Gamma}_1 \right) \\
E_3 &= \frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{n} \left(\vec{\Gamma}_1 \times \vec{\Gamma}_2 \right)
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Bei der Berechnung der Feldstärken wurden Anfangskonfigurationen und bereits minimierte Konfigurationen verwendet. In Abbildung 3.8 handelt es sich um die angeregte Positron-Elektron-Konfiguration, bei Abbildung 3.9 um die Positron-Elektron-Konfiguration im Grundzustand.

Die Übereinstimmung mit den Feldlinienrichtungen ist in beiden Fällen sehr gut. Im Fall der, durch Invertierung der unteren Hälfte einer gleichgeladenen Dipolanordnung gewonnenen angeregten Positron-Elektron-Konfiguration, sind die elektrischen Feldstärkevektoren für $z < 0$ in der erwarteten Richtung orientiert. Dies ist ein Hinweis darauf, dass diese Konfiguration topologisch äquivalent zur Positron-Elektron-Konfiguration ist.

Die Invertierung der \vec{n} -Felder bei Berechnung der Startkonfiguration bewirkt zwar keine Vorzeichenänderung bei der Bildung des Kreuzproduktes der $\vec{\Gamma}$ -Vektoren. Wie aus (3.10) aber ersichtlich ist, wird der Feldstärketensor skalar mit \vec{n} multipliziert und ergibt deshalb den Vorzeichenwechsel.

Im Gegensatz dazu liefert die Positron-Positron-Konfiguration mit der um die x -verdrehten unteren Hälfte die korrekten Feldstärken einer gleichgeladenen Dipolanordnung (siehe Abbildung 3.12).

Es fällt auf, dass bei der Anfangskonfiguration manche Feldstärkevektoren „verkippt“ wirken - unter Umständen ein Effekt, der sich auf die starke Änderung von q_0 beim Zentrum zurückführen lässt. Bei der minimierten Konfiguration verschwindet dieser Effekt.

Im Bereich der Zentren sind die Feldstärken betragsmäßig stark unterschiedlich zu den „klassischen“ elektrischen Feldstärken, in großer Entfernung von den Zentren sind sie praktisch gleich (siehe Abbildungen 3.13 und 3.14). Alle Feldstärken sind in Einheiten von $\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a^2}$ aufgetragen.

Bei Berechnung der Feldstärken aus den Plaquetten tritt der Effekt der Verkipfung nicht auf (siehe Abbildung 3.10 und 3.11).

Korrekturen der Feldstärken

Bei der Berechnung der Feldstärken an der Oberfläche ist zu beachten, dass die Feldstärken an den Gitterpunkten der Oberfläche nicht mehr über alle Beiträge gemittelt werden können. Die Schwerpunkte der Plaquettenbeiträge liegen nicht mehr auf den Gitterpunkten (siehe Abbildung 3.15) - die E_z -Komponente wird über 4 Plaquetten gemittelt und liegt damit genau auf dem Gitterpunkt, der Schwerpunkt der E_x - beziehungsweise E_y -

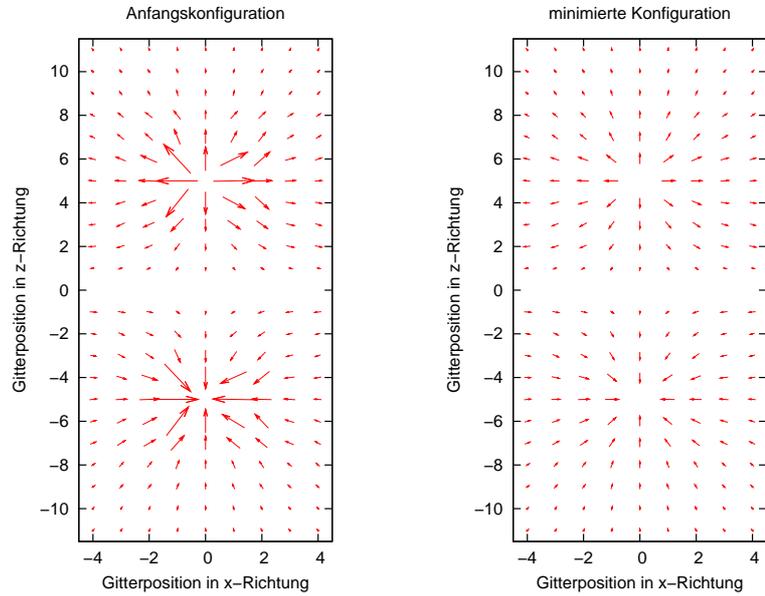


Abbildung 3.8: \vec{E} -Feld einer angeregten e^+e^- -Konfiguration, berechnet aus Γ -Feld

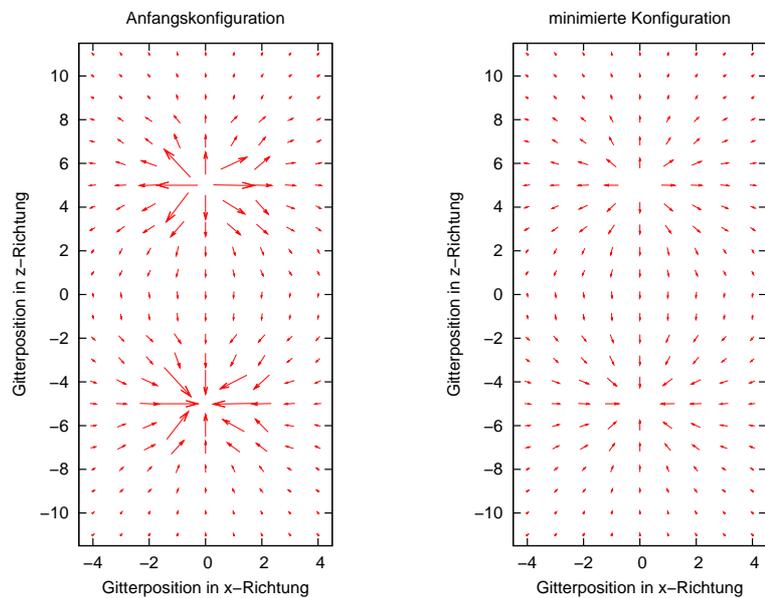


Abbildung 3.9: \vec{E} -Feld einer e^+e^- -Konfiguration, berechnet aus Γ -Feld

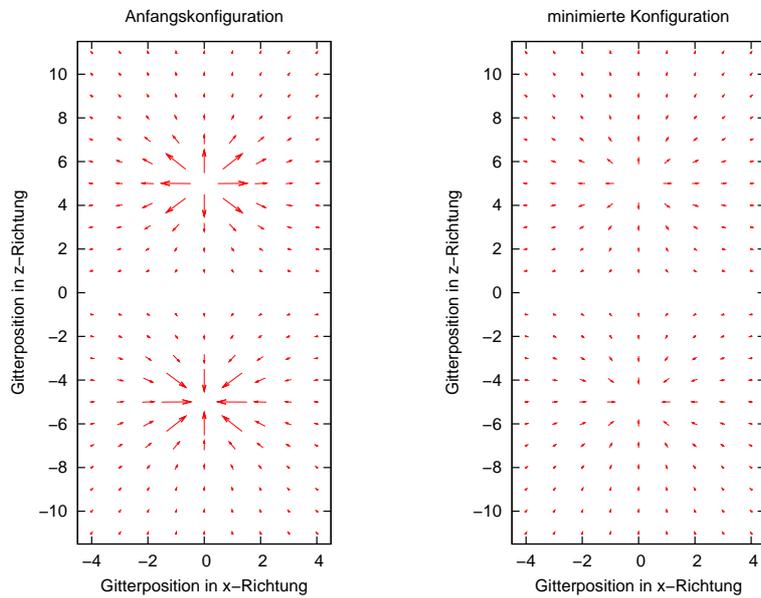


Abbildung 3.10: \vec{E} -Feld einer angeregten e^+e^- -Konfiguration, berechnet aus Plaquetten-Feld

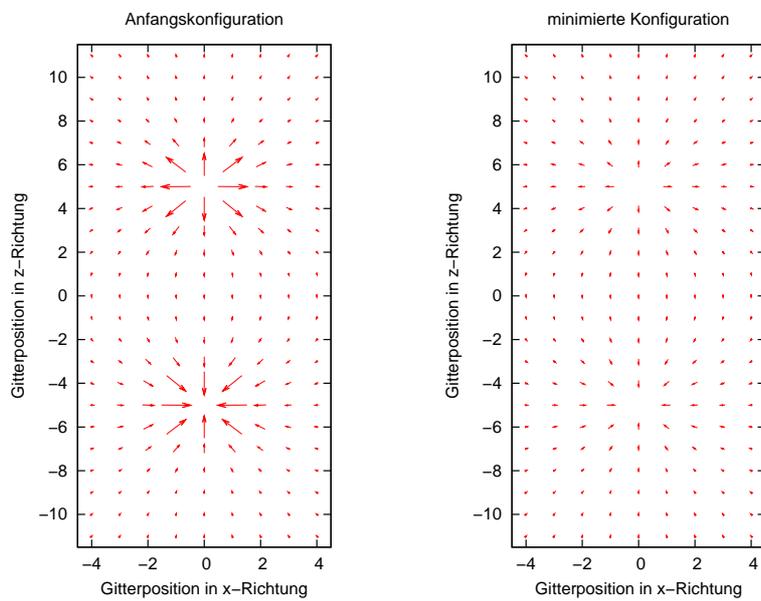


Abbildung 3.11: \vec{E} -Feld einer e^+e^- -Konfiguration, berechnet aus Plaquetten-Feld

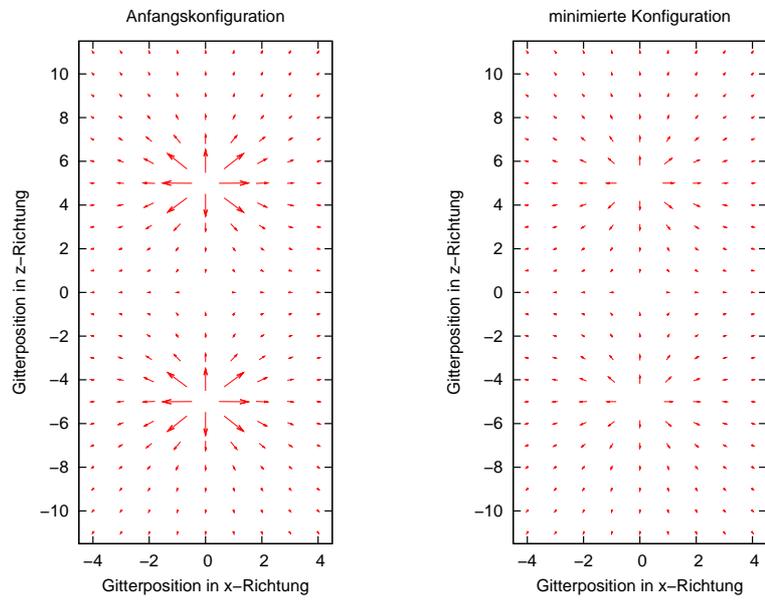


Abbildung 3.12: \vec{E} -Feld einer um die x -Achse verdrehten e^+e^- -Konfiguration, berechnet aus Plaquetten-Feld

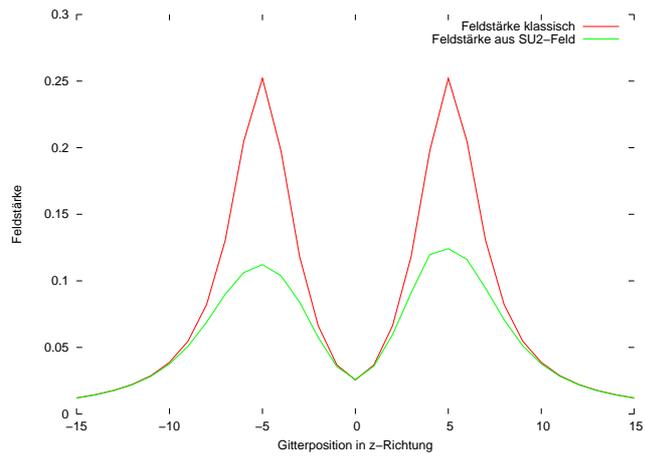


Abbildung 3.13: Vergleich klassisches \vec{E} -Feld mit $SU(2)$ - \vec{E} -Feld bei $x = 2$ und $y = 0$ entlang der z -Achse

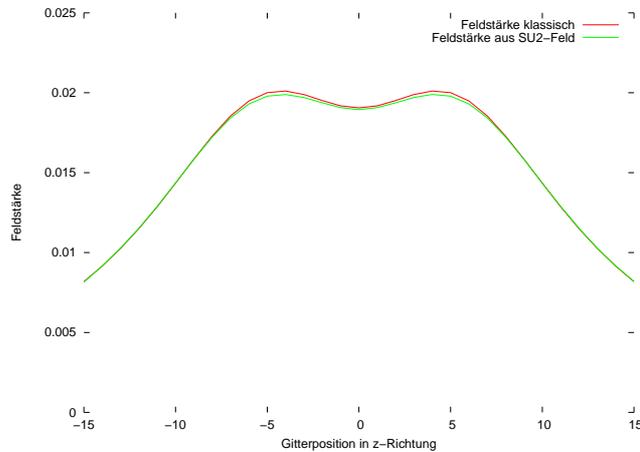


Abbildung 3.14: Vergleich klassisches \vec{E} -Feld mit $SU(2)$ - \vec{E} -Feld bei $x = 8$ und $y = 0$ entlang der z -Achse

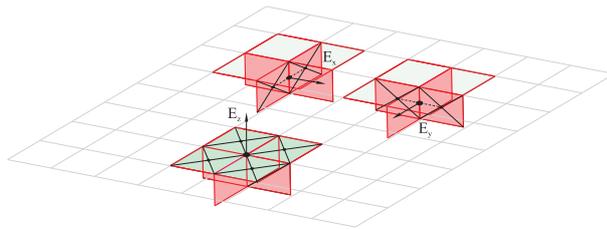


Abbildung 3.15: Plaquettenbeiträge zur Feldstärke an der Gitteroberfläche

Komponente liegt auf der Mitte zwischen zwei Gitterpunkten und demnach ist die berechnete Feldstärke zu groß.

Deshalb wurden die verfälschten Feldstärkekomponenten mittels linearer Extrapolation korrigiert. Man sieht in der Abbildung 3.16 die Korrektur in unterschiedlichen Regionen der Oberfläche einer Monopol-Monopol-Anordnung (Grafik a) bis c)) und einer Monopol-Antimonopol-Anordnung (Grafik d) bis f)).

Speziell in den Abbildung b) und e) ist gut zu erkennen, dass eine quadratische Extrapolationsfunktion bessere Korrekturen ergeben würde. An den Kanten und auf den Oberflächen ergeben sich dadurch teilweise beträchtliche Über- und Unterkorrekturen der Feldstärken.

Abschliessend lässt sich nach der Feldstärkenberechnung folgendes für die Startkonfigurationen festhalten.

- Dipolkonfigurationen mit ungleichnamigen elektrischen Ladungen lassen sich direkt aus dem Feldlinienansatz berechnen und entsprechen einer Anordnung von Monopol und Antimonopol, wobei eine der beiden Feldkonfigurationen um den Winkel π um die z -Achse verdreht

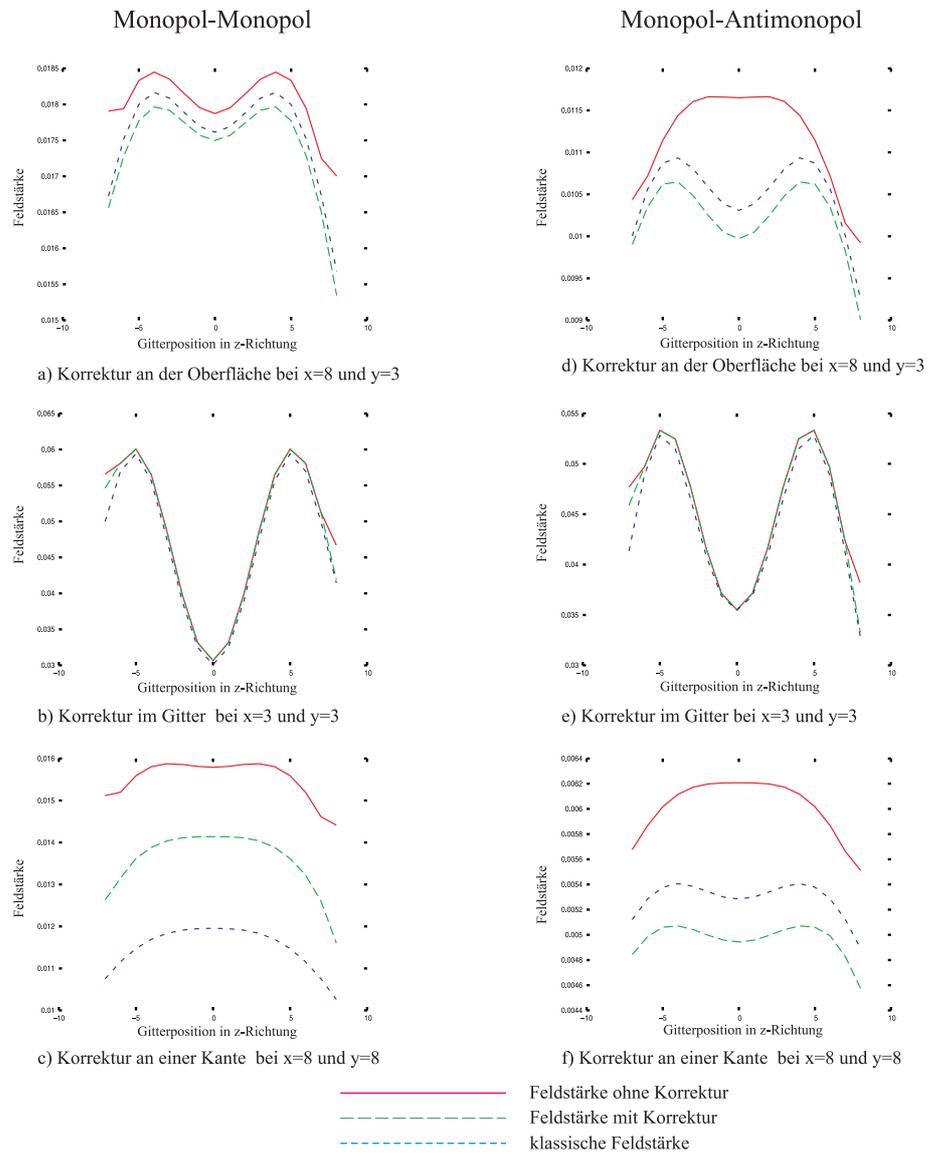


Abbildung 3.16: Korrektur der Feldstärken (in Einheiten von $\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a^2}$)

ist.

- Dipolkonfigurationen mit gleichnamigen elektrischen Ladungen lassen sich auch aus dem Feldlinienansatz berechnen - man muss aber eine der beiden Feldkonfigurationen in der z - und x -Richtung invertieren - dann entspricht diese Anordnung einer Monopol-Monopol-Konfiguration, wobei eine der beiden Feldkonfigurationen um den Winkel π um die x -Achse verdreht ist.
- Eine für $z < 0$ invertierte Anordnung von gleichnamigen elektrischen Ladungen entspricht einer angeregten Dipolkonfiguration mit ungleichnamigen Ladungen.

3.3 Wirkungsberechnung

Die Ermittlung der Konfiguration minimaler Energie erfolgt numerisch an einem diskreten Gitter mit der Gitterkonstanten a . Zur Bestimmung der Energieanteile werden für den Krümmungsanteil der Wirkung zwei alternative Varianten verwendet - die Gammawirkung, die sich aus dem Zusammenhang $\vec{\Gamma}_\mu$ berechnet und die Wilsonwirkung, die über das Linkfeld $e^{i\vec{\Gamma}_s ds}$ bestimmt wird.

3.3.1 Die Gammawirkung

Aus der klassischen Elektrodynamik folgt für die Energie des elektromagnetischen Feldes der Ausdruck

$$H = \frac{1}{2} \left[\epsilon_0 (\vec{E}^2) + \frac{1}{\mu_0} (\vec{B}^2) \right]. \quad (3.11)$$

In Analogie dazu wird die elektromagnetische Wirkungsdichte aus dem dualen Feldstärketensor, einem Krümmungstensorfeld,

$${}^*F_{\mu\nu} = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{R}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{B}_x & \vec{B}_y & \vec{B}_z \\ -\vec{B}_x & 0 & \frac{\vec{E}_z}{c} & -\frac{\vec{E}_y}{c} \\ -\vec{B}_x & -\frac{\vec{E}_z}{c} & 0 & \frac{\vec{E}_x}{c} \\ -\vec{B}_x & \frac{\vec{E}_y}{c} & -\frac{\vec{E}_x}{c} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

berechnet und ergibt sich zu

$$L_{dual} = -\frac{1}{4\mu_0} {}^*F_{\mu\nu} {}^*F^{\mu\nu} = -\frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi} \frac{1}{4} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{R}^{\mu\nu}. \quad (3.13)$$

Mit Berücksichtigung des stabilisierenden Potenzialterms ergibt sich schließlich

$$L_{dual} = -\frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi} \left(\frac{1}{4} (\vec{\Gamma}_\mu \times \vec{\Gamma}_\nu)^2 + \frac{q_0^{2m}}{r_0^4} \right). \quad (3.14)$$

3.3.2 Die Wilsonwirkung

Eine alternative Form der Wirkungsberechnung wird in [7] und [8] dargelegt. Die Berechnung der Wirkung muss unter Eichtransformationen invariant bleiben. Ist die Eichtransformation unabhängig von den Ortskoordinaten, spricht man von einer *globalen* Eichtransformation, andernfalls von einer *lokalen* Eichtransformation (siehe Anhang B.3).

Lokale Eichtransformationen können als ortsabhängiger Basiswechsel und die geforderte Invarianz physikalischer Beziehungen unter diesem Basiswechsel als Bedingung an eine koordinatenunabhängige Formulierung der physikalischen Gesetze verstanden werden - kurz formuliert: die Physik muss unter lokalen Eichtransformationen die gleiche bleiben.

Kovariante Ableitung und Paralleltransport

Das Konzept von lokalen Basiswechseln erfordert eine Modifikation der Ableitung - die *kovariante* Ableitung. Die kovariante Ableitung hängt eng mit dem Begriff des Paralleltransportes zusammen, der folgendermaßen definiert ist:

Man betrachtet eine Kurve \mathcal{C}_{yx} zwischen zwei beliebigen Raumzeitpunkten x^μ und y^μ , die mit einem Parameter s parametrisiert wird.

$$c^\mu(s), \quad s \in [0, 1], \quad c^\mu(0) = x^\mu, \quad c^\mu(1) = y^\mu \quad (3.15)$$

Zu dieser Kurve wird nun eine $SU(N)$ -Matrix, die eine Abbildung zwischen den lokalen Vektorräumen V_x und V_y vermittelt, eingeführt.

$$U(\mathcal{C}_{yx}) : V_x \rightarrow V_y \quad (3.16)$$

Damit definiert man den Vektor

$$U(\mathcal{C}_{yx})\phi(x) \in V_y, \quad (3.17)$$

der dem entlang der Kurve \mathcal{C}_{yx} paralleltransportierten Vektor $\phi(x)$ entspricht. $U(\mathcal{C}_{yx})$ wird als *Paralleltransporter* bezeichnet. Dieser Paralleltransporter muss folgende Bedingungen erfüllen.

1. $U(\emptyset) = \mathbb{1}$
 2. $U(\mathcal{C}_2 \circ \mathcal{C}_1) = U(\mathcal{C}_2)U(\mathcal{C}_1)$
 3. $U(-\mathcal{C}) = U^{-1}(\mathcal{C})$
- (3.18)

Die erste Bedingung ist trivial (\emptyset bezeichnet eine Kurve der Länge 0), Bedingung zwei und drei beziehen sich auf die Hintereinanderausführung beziehungsweise Umkehrung von Paralleltransporten.

Unter einer lokalen Eichtransformation

$$\begin{aligned} \phi(x) &\rightarrow \phi'(x) = \Lambda^{-1}(x)\phi(x) \\ \phi(y) &\rightarrow \phi'(y) = \Lambda^{-1}(y)\phi(y) \end{aligned} \quad (3.19)$$

transformiert sich der Paralleltransporter in der Form

$$U(\mathcal{C}_{yx}) \rightarrow U'(\mathcal{C}_{yx}) = \Lambda^{-1}(y)U(\mathcal{C}_{yx})\Lambda(x) \quad (3.20)$$

Das Problem beim Bilden der Ableitung tritt bei der Differenzbildung zwischen benachbarten Punkten x und $y = x + dx$ auf. Um eine basisunabhängige Berechnung der Differenz zu ermöglichen, muss der benachbarte Punkt mittels Paralleltransport zum Punkt x zurückgeholt werden. Erst dann ist in dieser lokalen Basis eine Differenzbildung und damit das Bilden einer Ableitung sinnvoll.

Der Paralleltransporter zwischen zwei infinitesimal voneinander entfernten Punkten kann als

$$U(\mathcal{C}_{x+dx,x}) = \mathbb{1} + iA_\mu(x)dx^\mu \quad (3.21)$$

geschrieben werden, wobei

$$A_\mu(x) \in su(N) \quad (3.22)$$

ein Element der Lie-Algebra der $SU(N)$ ist. Damit ist A^μ eine spurlose hermitesche Matrix. Man definiert nun das kovariante Differenzial als

$$D\phi(x) = U^{-1}(\mathcal{C}_{x+dx,x})\phi(x + dx) - \phi(x) \quad (3.23)$$

und erhält schließlich

$$D\phi(x) = D_\mu\phi(x)dx^\mu \quad (3.24)$$

und daraus die kovariante Ableitung

$$D_\mu\phi(x) = (\partial_\mu - iA_\mu(x))\phi(x). \quad (3.25)$$

Man bezeichnet $A_\mu(x)$ als *Eichfeld*. Aus dem Transformationsgesetz für den Paralleltransporter in (3.20) folgt mit

$$\Lambda^{-1}(x + dx) = \Lambda^{-1}(x) + \partial_\mu\Lambda^{-1}(x)dx^\mu \quad (3.26)$$

schließlich

$$\begin{aligned} A'_\mu(x) &= \Lambda^{-1}(x)A_\mu(x)\Lambda(x) + i(\partial_\mu\Lambda^{-1}(x))\Lambda(x) \\ &= \Lambda^{-1}(x)(A_\mu(x) - i\partial_\mu)\Lambda(x) \end{aligned} \quad (3.27)$$

wobei

$$(\partial_\mu\Lambda^{-1}(x))\Lambda(x) = \underbrace{\partial_\mu(\Lambda^{-1}(x)\Lambda(x))}_{=0} - \Lambda^{-1}(x)\partial_\mu \quad (3.28)$$

verwendet wird. Damit transformiert sich die kovariante Ableitung eines Vektors wie ein Vektor.

$$D'_\mu\phi'(x) = \Lambda^{-1}(x)D_\mu\phi(x). \quad (3.29)$$

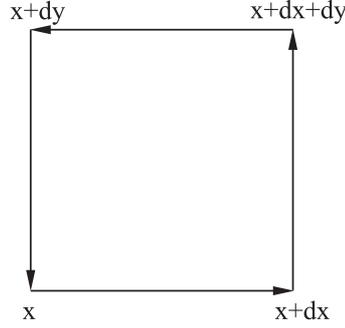


Abbildung 3.17: Paralleltransport um ein infinitesimales Parallelogramm

Von der kovarianten Ableitung zum Krümmungstensor

Der Krümmungstensor wird weiters als Kommutator zweier kovarianter Ableitungen

$$iR_{\mu\nu}(x) = [D_\mu, D_\nu] = i(-\partial_\mu A_\nu(x) + \partial_\nu A_\mu(x) + i[A_\mu, A_\nu]) \quad (3.30)$$

definiert. Dies entspricht einem Paralleltransport rund um ein Parallelogramm, aufgespannt von dx und dy (Abbildung 3.17). Der zugehörige Paralleltransporter ergibt sich zu

$$U(\mathcal{C}_{x,x}) = \mathbb{1} - iR_{\mu\nu}dx^\mu dx^\nu. \quad (3.31)$$

Der Krümmungstensor transformiert sich dann unter lokalen Eichtransformationen wie

$$R'_{\mu\nu}(x) = \Lambda^{-1}(x)R_{\mu\nu}(x)\Lambda(x) \quad (3.32)$$

Die Elemente einer Lie-Algebra $su(N)$ lassen sich als Linearkombination

$$A = \sum_{j=1}^{N^2-1} A^a T_a \quad , \quad A^a \in \mathbb{R} \quad (3.33)$$

darstellen. Die T_a sind spurlose, hermitesche Matrizen und werden *Generatoren* genannt. Sie werden üblicherweise über ihre Spur

$$Tr(T_a T_b) = \frac{1}{2} \delta_{ab} \quad (3.34)$$

normiert und erfüllen folgende Kommutatorrelationen

$$[T_a, T_b] = i f_{abc} T_c \quad (3.35)$$

mit den *Strukturkonstanten* f_{abc} als antisymmetrische, reelle Größen. Jedes Element einer $SU(N)$ läßt sich in der Form

$$V = e^{iT_a A^a} \quad (3.36)$$

darstellen. Im Falle der $SU(2)$ ergibt sich für

$$T_a = \frac{\sigma_a}{2} \quad , \quad a = 1, 2, 3 \quad (3.37)$$

mit den σ_a als Paulimatrizen und $f_{abc} = \epsilon_{abc}$, dem antisymmetrischen Epsilontensor. Damit läßt sich in Komponentennotation das Feld $A_\mu(x)$

$$A_\mu(x) = gA_\mu^a(x)T_a \quad (3.38)$$

und der, zum Krümmungstensor proportionale Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$

$$F_{\mu\nu}(x) = gF_{\mu\nu}^a(x)T_a \quad (3.39)$$

mit Hilfe der Basis T_a anschreiben, wobei die beiden Felder über

$$F_{\mu\nu}^a = -\partial_\mu A_\nu^a + \partial_\nu A_\mu^a - gf_{abc}A_\mu^b A_\nu^c \quad (3.40)$$

verknüpft sind. Der Vorfaktor g ist eine willkürliche Kopplungskonstante. Mit Hilfe der kovarianten Ableitung lassen sich nun eichinvariante Ausdrücke für die Wirkung eines Systems formulieren.

Gittereichfelder und Wilsonwirkung

Für die Berechnung der Wirkung am Gitter muss die kovariante Ableitung des Kontinuums durch einen Ausdruck für ein diskretes Gitter ersetzt werden. Dasselbe gilt für den Paralleltransporter U . Geht man von einem hyperkubischen Gitter mit der Indizierung $\mu = 0, 1, 2, 3$ aus, so ergibt sich für einen *link* zwischen zwei Gitterpunkten x und $y = x + a\hat{\mu}$ die Notation

$$b = \langle x + a\hat{\mu}, x \rangle \equiv (x, \mu) \quad (3.41)$$

mit a als Abstand zweier benachbarter Gitterpunkte in der Richtung μ und $\hat{\mu}$ als Einheitsvektor in dieser Richtung. Der zugehörige Paralleltransporter ergibt sich zu

$$U(b) \equiv U(x + a\hat{\mu}) \equiv U_{x\mu} \in \mathbb{G} \quad (3.42)$$

mit \mathbb{G} als *Eichgruppe*. $U_{x\mu}$ wird als *Linkvariable* bezeichnet und erfüllt die Beziehung

$$U(y, x) = U^{-1}(x, y) \quad (3.43)$$

und damit die Bedingungen (3.18) für Paralleltransporter. Für beliebige Kurven

$$\mathcal{C} = b_n \circ b_{n-1} \circ \dots \circ b_2 \circ b_0 \quad (3.44)$$

ergibt sich der zusammengesetzte Paralleltransporter zu

$$U(\mathcal{C}) = U(b_n) \dots U(b_0) \equiv \prod_{b \in \mathcal{C}} U(b). \quad (3.45)$$

Die Menge $\{U_b\}$ aller Linkvariablen wird als *Gittereichfeld* bezeichnet. Die Linkvariablen transformieren unter einer lokalen Eichtransformation wie

$$U'(y, x) = \Lambda^{-1}(y)U(y, x)\Lambda(x). \quad (3.46)$$

Analog zum Kontinuum wird die kovariante Ableitung

$$D_\mu\phi(x) = \frac{1}{a}(U^{-1}(x, \mu)\phi(x + a\hat{\mu}) - \phi(x)) \quad (3.47)$$

definiert. Mit dieser Definition der Ableitung am Gitter sind verschiedene eichinvariante Ausdrücke für Gitterwirkungen formulierbar. Zum Beispiel ergeben sich für den kinetischen Anteil der Wirkung

$$S_\phi = \int d^4x D_\mu\phi(x)D_\mu\phi(x) \quad (3.48)$$

in der Gitterformulierung der eichinvariante Ausdruck

$$S_\phi = \frac{1}{2} \sum_x a^4 D_\mu\phi D_\mu\phi = - \sum_{\langle x, y \rangle} a^2 \phi(x)U(x, y)\phi(y) + 4 \sum_x a^2 \phi^2(x), \quad (3.49)$$

wobei hier über die nächsten Nachbarn summiert wird. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Wirkungsrechnung über

$$S = \text{Tr}(U(\mathcal{C}_{x,x})), \quad (3.50)$$

mit $\mathcal{C}_{x,x}$ als geschlossene Kurve im Gitter. Letztere Möglichkeit wird im Folgenden zur Konstruktion einer eichinvarianten Wirkung für das Modell topologischer Fermionen verwendet.

Wilsonwirkung im Modell topologischer Fermionen

Ausgehend von vier Punkten

$$x \quad , \quad x + a\hat{\mu} \quad , \quad x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu} \quad , \quad x + a\hat{\nu} \quad (3.51)$$

wie in Abbildung 3.17, ergibt sich der entsprechende Paralleltransporter zu

$$U_p \equiv U_{x;\mu x} \equiv U(x, x + a\hat{\mu})U(x + a\hat{\nu}, x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu})U(x + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}, x + a\hat{\mu})U(x + a\hat{\mu}, x) \quad (3.52)$$

Dieser Umlauf um vier benachbarte Punkt wird als Plakettenvariable U_p bezeichnet. Die von Wilson vorgeschlagene Wirkung wird als Summe über alle Plakettenvariablen des Gitters berechnet.

$$S[U] = \sum_p S_p(U_p) \quad (3.53)$$

Der Plakettenterm für $SU(N)$ -Felder

$$\begin{aligned} S_p(U) &= -\beta \left\{ \frac{1}{2\text{Tr}(\mathbb{1})} (\text{Tr}(U) + \text{Tr}(U^{-1})) - 1 \right\} \\ &= \beta \left\{ 1 - \frac{1}{N} \text{Re}(\text{Tr}(U)) \right\} \end{aligned} \quad (3.54)$$

wird hierbei für jeden Punkt nur einmal durchlaufen. Wie aus (3.54) direkt ersichtlich ist, ergibt sich kein Wirkungsbeitrag für die Plakette, wenn der Paralleltransporter gleich der Einheit ist. β ist wieder eine Kopplungskonstante.

Betrachtet man nun Eichfelder der Form

$$A_\mu(x) = gA_\mu^a(x)T_a \quad (3.55)$$

und berechnet Paralleltransporter der Form

$$U(x, \mu) \equiv e^{iaA_\mu(x)} = 1 + iaA_\mu(x) - \frac{a^2}{2}A_\mu^2(x) + \dots \quad (3.56)$$

so ergeben sich für den Falle der $SU(2)$ -Solitonfelder analoge Ausdrücke für Eichfeld und Paralleltransporter.

$$A_\mu(x) \rightarrow 2\Gamma_\mu = 2\Gamma_\mu^a T_a \quad (3.57)$$

$$e^{iaA_\mu(x)} \rightarrow e^{ia2\Gamma_\mu} = 1 + a2i\Gamma_\mu - \frac{a^2}{2}(2\Gamma_\mu)^2 + \dots \quad (3.58)$$

Damit läßt sich der Paralleltransporter im Fall des Solitonfeldes rund um eine Plakette als

$$\begin{aligned} U_4 U_3 U_2 U_1 &= 1 - i \{ -\Delta_\mu \Gamma_\nu + \Delta_\nu \Gamma_\mu + i\Gamma_\mu \Gamma_\nu - i\Gamma_\nu \Gamma_\mu \} a^2 + \mathcal{O}(a^3) \\ &= 1 - iR_{\mu\nu} a^2 + \dots = e^{-ia^2 R_{\mu\nu}} \end{aligned} \quad (3.59)$$

anschreiben. Bei der Spurbildung ist zu berücksichtigen, dass $R_{\mu\nu}$ spurlos ist und erst Terme mit Ordnung a^4 beitragen.

$$\text{Tr}(U_p + U_p^{-1}) = 2\text{Tr}(\mathbb{1}) + a^4 \text{Tr}(R_{\mu\nu}^2) + \mathcal{O}(a^5) \quad (3.60)$$

Damit ergibt sich für die Wilsonwirkung folgender Term

$$S = -\frac{\beta}{2N} a^4 \sum_p \text{Tr}(R_{\mu\nu}^2) \quad (3.61)$$

mit β als Kopplungskonstante und N abhängig von $SU(N)$.

3.3.3 Energieberechnung im Außenraum

Die Berechnung der Energie außerhalb des Gitters wird für den elektrodynamischen Grenzfall durchgeführt. Voraussetzung dafür ist, dass am Gitterrand nur die Radialkomponente der elektrischen Farbfeldstärke in Richtung des \vec{n} -Feldes einen nennenswerten Beitrag zur Energiedichte liefert. Die Energie des Gitters wird über das Volumsintegral

$$E = H_e + H_p = \frac{\varepsilon_0}{2} \int d^3x \vec{E}_\mu^2 + \frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi r_0^4} \int d^3x \cos^{2m} \alpha \quad (3.62)$$

in Analogie zur klassischen Elektrodynamik ermittelt. Es ergeben sich vier Summanden aus den drei Farbkomponenten des Feldstärketensors und dem Potenzialterm.

Im elektrodynamischen Grenzfall läßt sich nach dem ersten Greenschen Satz (Gleichung B.3) das Volumsintegral über die Quadrate der Feldstärken in ein Oberflächenintegral umwandeln. Über die Umformung

$$E_\mu^2 = (\nabla_\mu \phi)^2 = \nabla_\mu (\phi \nabla_\mu \phi) - \phi \Delta \phi \quad (3.63)$$

ergibt sich der Energieanteil im Außenraum

$$H_e = \frac{\varepsilon_0}{2} \oint d^2f_\mu \phi \nabla_\mu \phi = \frac{\varepsilon_0}{2} \oint d^2f_\mu E_\mu \phi \quad (3.64)$$

als Oberflächenintegral über den Rand des betrachteten Volumens, da die Ladungsdichte im betrachteten Volumen verschwindet.

Für große Gitter und Solitonen mit im Verhältnis dazu kleinen Ausdehnungen, überlebt am Gitterrand nur die Radialkomponente der elektrischen Farbfeldstärke in Richtung des \vec{n} -Feldes. Das entspricht einem Solitonfeld der Form

$$Q = i\vec{\sigma}\vec{n} \quad (3.65)$$

mit einem Winkel $\alpha = \frac{\pi}{2}$ und demnach $q_0 = \cos \alpha = 0$. Dadurch verschwindet der Potenzialterm in großer Entfernung von den Solitonenkernen. Die duale Feldstärke am Gitterrand im elektrodynamischen Grenzfall mit

$${}^*f_{\mu\nu} = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0 c} \vec{R}_{\mu\nu} \vec{n} = \begin{pmatrix} 0 & B_x & B_y & B_z \\ -B_x & 0 & \frac{E_z}{c} & -\frac{E_y}{c} \\ -B_x & -\frac{E_z}{c} & 0 & \frac{E_x}{c} \\ -B_x & \frac{E_y}{c} & -\frac{E_x}{c} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

und

$$\vec{R}_{\mu\nu} = \vec{\Gamma}_\mu \times \vec{\Gamma}_\nu = (\partial_\mu \vec{n} \times \vec{n}) \times (\partial_\nu \vec{n} \times \vec{n}). \quad (3.67)$$

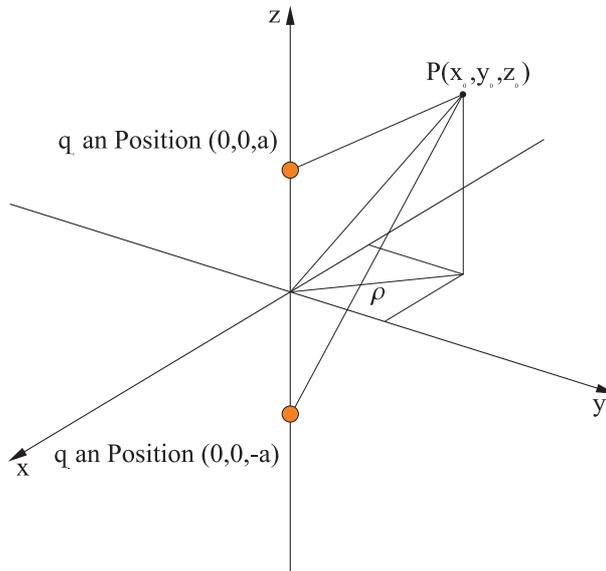


Abbildung 3.18: Geometrie der Dipolanordnung

berechnet. Damit ergibt sich für die elektrische Feldstärke:

$$\begin{aligned}
 E_1 &= \vec{E}_1 \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \vec{R}_{23} \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} (\vec{\Gamma}_2 \times \vec{\Gamma}_3) \vec{n} \\
 E_2 &= \vec{E}_2 \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \vec{R}_{31} \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} (\vec{\Gamma}_3 \times \vec{\Gamma}_1) \vec{n} \\
 E_3 &= \vec{E}_3 \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \vec{R}_{12} \vec{n} = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} (\vec{\Gamma}_1 \times \vec{\Gamma}_2) \vec{n}
 \end{aligned} \tag{3.68}$$

Bei natürlichen Randbedingungen berechnet sich das Potenzial ϕ einfach aus

$$\phi = \frac{e_0}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{q_+}{\sqrt{z_+^2 + \rho^2}} + \frac{q_-}{\sqrt{z_-^2 + \rho^2}} \right), \tag{3.69}$$

wobei $z_+ = z + a$ und $z_- = z - a$ bedeutet (siehe Abbildung 3.18).

Nach Berechnung des Potentials und der Feldstärke am Rand läßt sich der Energieanteil im Außenraum über

$$H_{e,class} = \frac{\epsilon_0}{2} \oint d^2 f_\mu E_\mu \phi = \frac{\epsilon_0}{2} \sum_i \Delta f_{\mu,i} E_{\mu,i} \phi \tag{3.70}$$

näherungsweise berechnen, wobei über alle Flächenstücke summiert wird.

Kapitel 4

Wirkungsberechnung

4.1 Wirkungsberechnung am Gitter - Volumsterme

4.1.1 Gammawirkung

Im Programm wird die Krümmungs- oder Gammawirkung aus dem zugeordneten Gammafeld der Konfiguration berechnet. Berücksichtigt werden an einem Punkt des Gitters die Gammfelder in Vorwärts- und Rückwärtsrichtung (siehe Abbildung 4.1). Damit ergeben sich insgesamt 4 Beiträge bei Verwendung der Methode `simplecurvcontribution` aus dem Modul `action.py` in jeder der möglichen Gitterebenen.

Bei der Berechnung der Wirkungsichte

$$\frac{\beta}{4}(\vec{R}_{\mu\nu})^2 = \frac{\beta}{4}(\vec{\Gamma}_\mu \times \vec{\Gamma}_\nu)^2 \quad (4.1)$$

aus dem Feldstärketensor, ist zu berücksichtigen, dass jede Feldstärkekomponente nur einmal gezählt wird. Somit ergibt sich für diese Energieanteile ein Vorfaktor

$$\frac{\beta}{4} \cdot \frac{2 \text{ (berücksichtigt Einfachzählung der Feldstärken)}}{4 \text{ (4 Beiträge in jeder Ebene)}} = \frac{\beta}{8} \quad (4.2)$$

mit

$$\beta = \frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi} \quad (4.3)$$

als Einheitenkonstante.

4.1.2 Wilsonwirkung

Bei der Berechnung der Wilsonwirkung greift man auf die Darstellung des Krümmungstensors durch Plaquettenvariablen

$$U_p = U_4 U_3 U_2 U_1 = \mathbb{1} - i R_{st}^a T_a ds dt \quad (4.4)$$

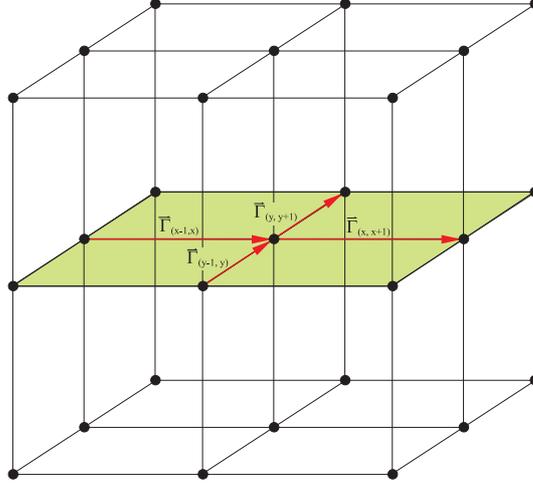


Abbildung 4.1: Lage der $\vec{\Gamma}$ -Felder im Gitter

mit $T_a = \frac{\sigma_a}{2}$, den Generatoren der $SU(2)$, zurück. Die Wirkung einer Plaquette

$$S_p(U) = \beta \left\{ 1 - \frac{1}{2} \text{Re Tr } U_p \right\} \quad (4.5)$$

läßt sich mit dem Feldenergiebeitrag an einem Punkt über

$$1 - \frac{1}{2} \text{Re Tr}(U_p) = a^4 \frac{\text{Tr}(R_{\mu\nu})^2}{2N} \quad (4.6)$$

mit $N = 2$ identifizieren [7]. Damit ergibt sich, wenn die Gitterkonstante a gleich 1 gesetzt wird, für eine Plaquette der Beitrag

$$\frac{\text{Tr}(R_{\mu\nu}^a T_a)^2}{4} = \frac{(R_{\mu\nu})^2}{8} \quad (4.7)$$

wenn man die Relation

$$\text{Tr}(\sigma_a \sigma_b) = \text{Tr}(\delta_{ab} - i\epsilon_{abc} \sigma_c) = 2 \quad (4.8)$$

berücksichtigt. Summiert man nun über alle Plaquetten des Gitters (siehe Abbildung 4.2), so erhält man bei Berücksichtigung von

$$\sum_p R_{\mu\nu}^2 = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu,\nu} R_{\mu\nu}^2 \quad (4.9)$$

schließlich für die Wilsonwirkung den Ausdruck

$$\frac{\beta}{4} \sum_{x,\mu,\nu} R_{\mu\nu}^2 = 4 \sum_p \left(1 - \frac{1}{2} \text{Re Tr}(U_p) \right). \quad (4.10)$$

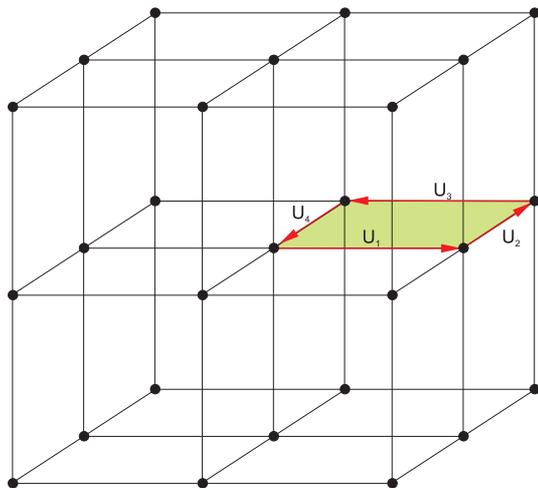


Abbildung 4.2: Plaquetten im Gitter

Es ergibt sich ein Beitrag bei Berechnung des Plaquetterms in der Methode `simpleSU2wils` aus dem Modul `action.py` in jeder der möglichen Gitterebenen. Bei der Bestimmung des korrekten Vorfaktors in Analogie zur Gammawirkung ist zu berücksichtigen, dass bei der Berechnung der Wirkung über die Plaquetten laut (4.10) nur $\frac{1}{4}$ des gesuchten Wertes ermittelt wird.

Damit ist die entstehende Wirkungsichte mit einem zusätzlichen Faktor 4 zu multiplizieren und es ergibt sich der Vorfaktor 4β .

4.1.3 Verhältnis der Wirkungsichten im Gitter

Mit den jeweiligen Vorfaktoren der Wirkungsichten erhält man im elektrodynamischen Grenzfall beziehungsweise bei großem Abstand von den Solitonzentren gleiche Wirkungsbeiträge. In Abbildung 4.3 ist die Übereinstimmung der Wirkungsichten gut erkennbar - das Verhältnis der Wirkungsichten ist hier für ein bereits energieminiertes Gitter (Gitterkonstante a) mit $r_0 = 3a$ und einem Abstand der Zentren von $10a$ aufgetragen. Die Gittergröße beträgt $32a$.

In der Nähe der Zentren ist im Profilplot (Abbildung 4.4) entlang der z -Achse erkennbar, dass die Γ -Wirkung auf ungefähr 90% der Wilsonwirkung abfällt.

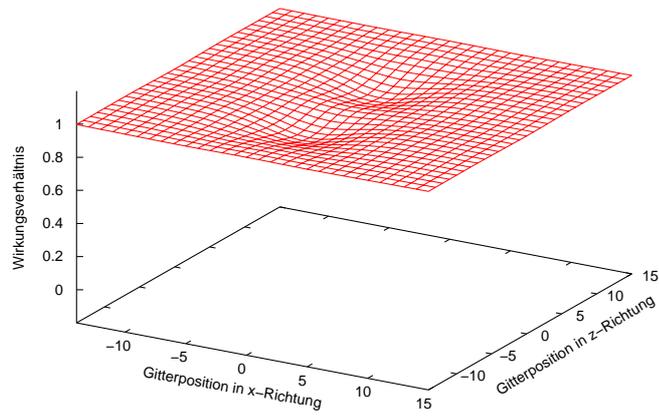


Abbildung 4.3: Verhältnis von Wilson- zu Γ -Wirkungsdichte im Gitter

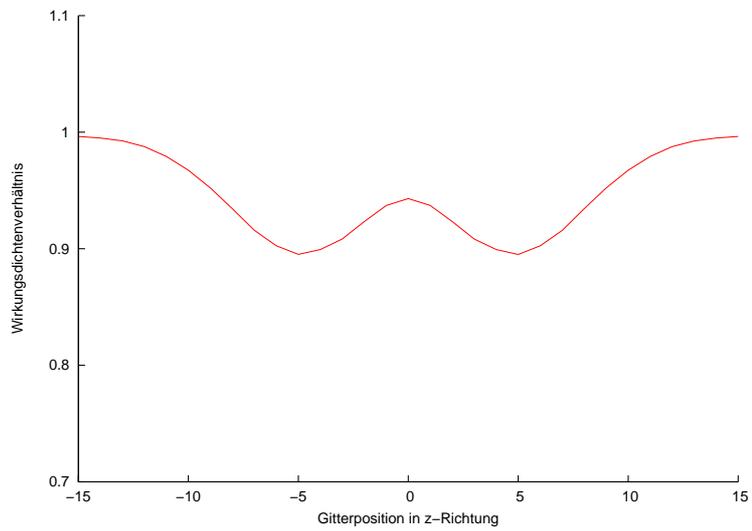


Abbildung 4.4: Verhältnis der Wirkungsdichten entlang der z-Achse

Tabelle 4.1: Vergleich der klassischen Oberflächenenergierme

Konfiguration				Oberflächenterm	Verfahren
+	+	1	1	2.71037	Numerische Integration
+	+	1	1	2.71546	MATHEMATICA
+	-	1	1	0.13932	Numerische Integration
+	-	-1	1	0.13989	MATHEMATICA

4.2 Wirkungsberechnung an der Oberfläche

4.2.1 Oberflächenterme der Energie

Für die Berechnung der Oberflächenbeiträge aus (3.70) müssen die Potenzialwerte an der Oberfläche bekannt sein. Diese werden aus den klassischen Werten

$$\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{q_+}{|\vec{r} - \vec{r}_+|} - \frac{q_-}{|\vec{r} - \vec{r}_-|} \right) \quad (4.11)$$

berechnet. Diese Näherung ist zulässig, wenn die Punkte an der Oberfläche weit von den Solitonzentren entfernt sind und der Potenzialterm in der Lagrangedichte vernachlässigt werden kann. Die elektrischen Feldstärken werden bei den numerischen Berechnungen aus den $SU(2)$ -Linkfeldern ermittelt und, wie in 3.2 bereits beschrieben, korrigiert.

In Tabelle 4.1 sind die numerisch berechneten Werte der Oberflächenenergie von Anordnungen mit ungleichnamigen und gleichnamigen Ladungen im Vergleich zu den, mit dem Programm MATHEMATICA exakt integrierten Werten angeführt. Dabei wurden bei der exakten Integration die klassisch berechneten Feldstärken zweier Punktladungen verwendet. Die Anordnung besitzt eine Gittergröße von 32 Einheiten, die Solitonzentren beziehungsweise Ladungen befinden sich auf der z -Achse 5 Einheiten vom Ursprung entfernt.

Die Wahl der Solitonzentren mit ± 1 ist unerheblich, da an der Oberfläche im elektrodynamischen Grenzfall gerechnet wird. Die Energien sind in Einheiten von $\frac{\alpha_{fhc}}{4\pi}$ angegeben.

Die Übereinstimmung der beiden Energiewerte ist sehr gut. Der numerischen Wert besitzt im Fall der abstoßenden Dipolkonfiguration eine Abweichung von $-0,2\%$, die anziehende Ladungsanordnung eine Abweichung von $-0,4\%$.

Kapitel 5

Simulationen am Gitter - Experimente

5.1 Wirkungsminimierung

Im Folgenden werden alle Simulationen mit der $SU(2)$ -Wilsonwirkung gerechnet. Die sich ergebenden Aussagen gelten analog für die Gammawirkung. Im Anhang A ist ein kurzer Überblick über die verwendeten Pythonmodule gegeben.

5.1.1 Monte-Carlo-Methode

Verfahren

Bei der Monte-Carlo-Methode wird das Solitonfeld mit einem Zufallswert verändert. Die Veränderung des Feldes kann den gesamten Feldvektor betreffen oder nur die Komponente q_0 des Solitonfeldes. Anschließend wird die Wirkungsichte am veränderten Gitterpunkt berechnet. Das Verfahren minimiert die Wirkung des Gitters bei festgehaltenen Solitonfeldwerten an der Gitteroberfläche und fixierten Solitonzentren – Oberflächenterme bleiben unberücksichtigt.

Bei der Minimierung der Wirkungsichte stehen zwei Möglichkeiten zur Verfügung. Einerseits werden nach der Veränderung des Solitonfeldes ausschließlich Feldwerte mit verringerter Energie akzeptiert (reine Kühlung des Gitters), andererseits ist es im sogenannten *Metropolisalgorithmus* möglich, Feldwerte, deren Energieinhalt größer geworden ist, mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit zuzulassen - Punkte mit verringerter Energie werden auch hier in jedem Fall akzeptiert. Die folgenden Simulationen wurden mit reiner Kühlung durchgeführt.

Da die Veränderung zufällig erfolgt, ist es nicht gewährleistet, dass bei größeren Schrittweiten eine ausreichende Anzahl von Gitterpunkten geändert werden kann. Um einerseits die Anzahl der veränderten Gitterpunkte mög-

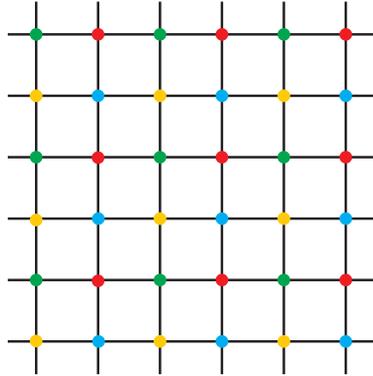


Abbildung 5.1: Einteilung des Gitters in Farbuntergitter

lichst groß zu halten und andererseits eine akzeptable Schrittweite zu ermöglichen, wird der Anteil der veränderten Punkte zur Steuerung der Schrittweite verwendet.

Das von Julia Fornleitner [6] geschriebene Pythonmodul `MC.py` enthält die Methode `mcstep`, welche eine Veränderung des gesamten Feldvektors ausführt und damit die Wirkungsichte minimiert. Ausgehend von dieser Routine wurde die Methode `mcstep_q0` erstellt, mit der nur die Komponente q_0 geändert wird.

Bei allen Verfahren wird das Gitter in Farbuntergitter unterteilt, damit sich die Änderungen an den Gitterpunkten nicht gegenseitig beeinflussen (Abbildung 5.1). Alle Module basieren auf dem, von Roman Bertle erstellten Programmpaket `lft`, das unterschiedlichste Methoden zur Erstellung und Manipulation von Gittern und der, auf diesen Gittern definierten Feldern ermöglicht.

Beide Methoden werden als Vergleichsverfahren für die weiter unten angeführten Minimierungsroutinen verwendet und sind im Modul `dipoleminimization.py` in der Methode `doMCsteps` zusammengefasst (Struktogramm siehe Abbildung 5.2). Alle Energien sind in Einheiten von $\frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi}$ angegeben.

Variation der nullten Komponente

Die folgenden Simulationen wurden auf ein kubisches Gitter mit Kantenlänge 31 (das entspricht 32 Gitterpunkten), einem Solitonabstand von $10a$ und einem Solitonradius $r_0 = 3a$ angewendet. Die Ränder und die Solitonzentren wurden fixiert.

Für Vergleichszwecke wurde an allen möglichen Kombinationen von Ladungskonfigurationen 500 Iterationsschritten des Monte-Carlo-Algorithmus durchgeführt und die Energieanteile und die Gesamtenergie für gleichnamige Ladungen in Tabelle 5.1 und 5.2 und für ungleichnamige Ladungen in

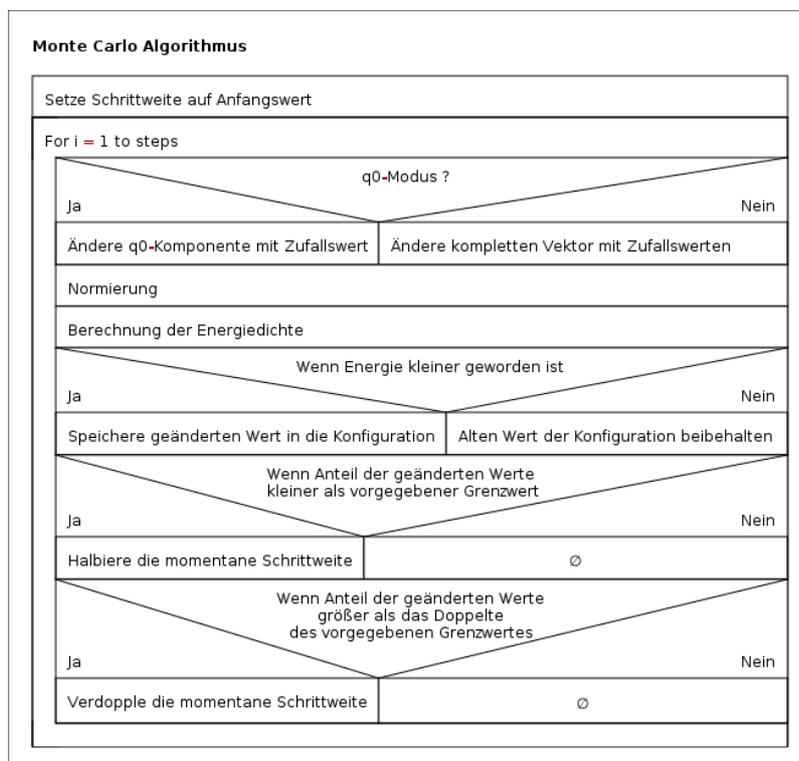


Abbildung 5.2: Struktogramm Monte-Carlo-Algorithmus

Tabelle 5.1: Energieanteile nach 500 Monte-Carlo-Iterationen bei gleichnamigen Ladungen

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}
Verdrehung der unteren Konfiguration um x -Achse						
+	+	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.8769	8.5831	11.4601
+	+	$-\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8750	8.5849	11.4600
+	+	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8702	8.5933	11.4635
+	+	$-\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.8711	8.5923	11.4635
-	-	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.8741	8.5859	11.4600
-	-	$-\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8739	8.5861	11.4600
-	-	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8706	8.5929	11.4635
-	-	$-\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.8726	8.5909	11.4635

Tabelle 5.3 angeführt.

Folgendes lässt sich unschwer erkennen:

- Dipolkonfigurationen mit ungleichnamigen elektrischen Ladungen besitzen geringere Gesamtenergie als solche mit gleichnamigen Ladungen.
- Dipolkonfigurationen mit gleichnamigen elektrischen Ladungen, die im Zuge der Startkonfigurationserstellung im unteren Bereich invertiert wurden, liefern gleiche Energiewerte (Tabelle 5.2) wie solche, die um die x -Achse verdreht wurden (Tabelle 5.1). Da diese invertierten Anordnungen - wie schon früher untersucht - eigentlich einer angeregten Anordnung ungleichnamiger Ladungen entspricht, werden sie in den folgenden Untersuchungen nicht mehr betrachtet. Die um die x -Achse verdrehten Anordnungen sind demnach als die korrekte Anordnung für gleichnamige Ladungen identifiziert.
- Ladungsanordnungen mit gleichnamigen Solitonzentren liegen energetisch geringfügig niedriger als solche mit ungleichnamigen Zentren.
- Eine Invertierung von Ladungen und/oder Solitonzentren hat keinen Einfluß auf die Energie.

Im Folgenden ist es demnach ausreichend, die weiteren Untersuchungen an Konfigurationen der Form $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$, $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$, $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ durchzuführen.

Zum Beispiel ergibt sich bei der Variation der q_0 -Komponente in einem Gitter mit zwei gleichnamigen Ladungen ein rasches Absinken der Energie auf einen Wert von 11,4601 nach 500 Iterationsschritten (siehe Abbildung 5.3). Die Energieanteile sind in Einheiten von $\frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi}$ angegeben. In Abbildung 5.4 ist das \vec{n} -Feld dieser Anordnung in der xz -Ebene dargestellt, in Abbildung 5.5 das $\cos \alpha$ -Profil in der xz -Ebene.

Tabelle 5.2: Energieanteile nach 500 Monte-Carlo-Iterationen bei gleichnamigen Ladungen mit Invertierung des unteren z -Bereichs

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}
Invertierung der unteren Konfiguration						
+	+	1	1	2.8762	8.5838	11.4600
+	+	-1	-1	2.8760	8.5841	11.4600
+	+	1	-1	2.8698	8.5936	11.4635
+	+	-1	1	2.8708	8.5927	11.4635
-	-	1	1	2.8763	8.5837	11.4600
-	-	-1	-1	2.8747	8.5853	11.4600
-	-	1	-1	2.8706	8.5929	11.4635
-	-	-1	1	2.8700	8.5935	11.4635

Tabelle 5.3: Energieanteile nach 500 Monte-Carlo-Iterationen bei ungleichnamigen Ladungen

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}
+	-	1	1	3.0874	6.9766	10.0639
+	-	-1	-1	3.0879	6.9760	10.0639
+	-	1	-1	2.6589	7.7453	10.4042
+	-	-1	1	2.6583	7.7459	10.4042
-	+	1	1	3.0888	6.9751	10.0640
-	+	-1	-1	3.0875	6.9764	10.0639
-	+	1	-1	2.6584	7.7458	10.4042
-	+	-1	1	2.6587	7.7453	10.4042

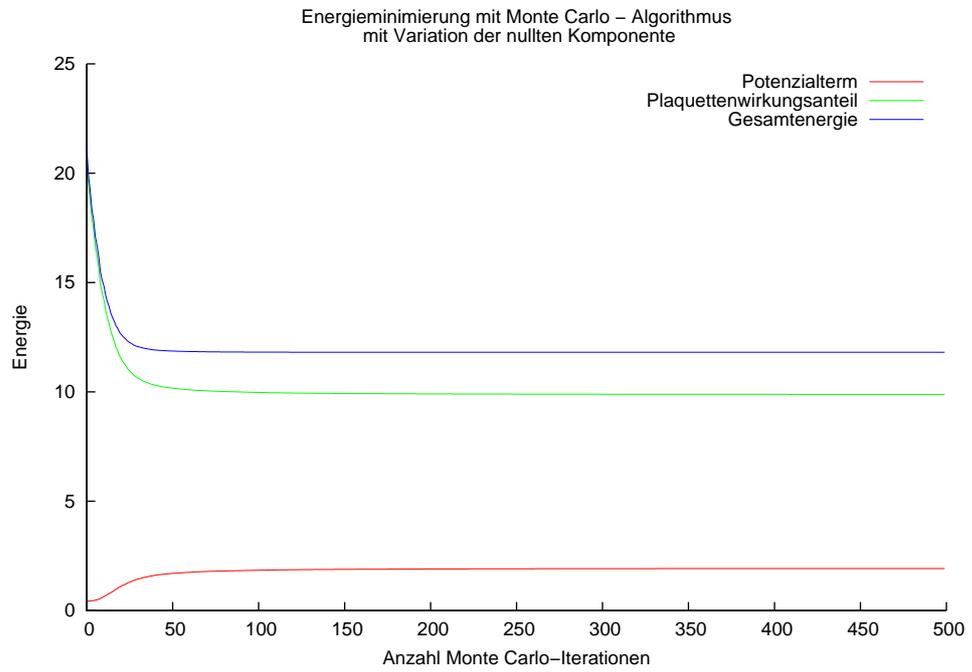


Abbildung 5.3: Energien für eine $(+, +, 1, 1)$ -Anordnung nach 500 Monte-Carlo-Schritten

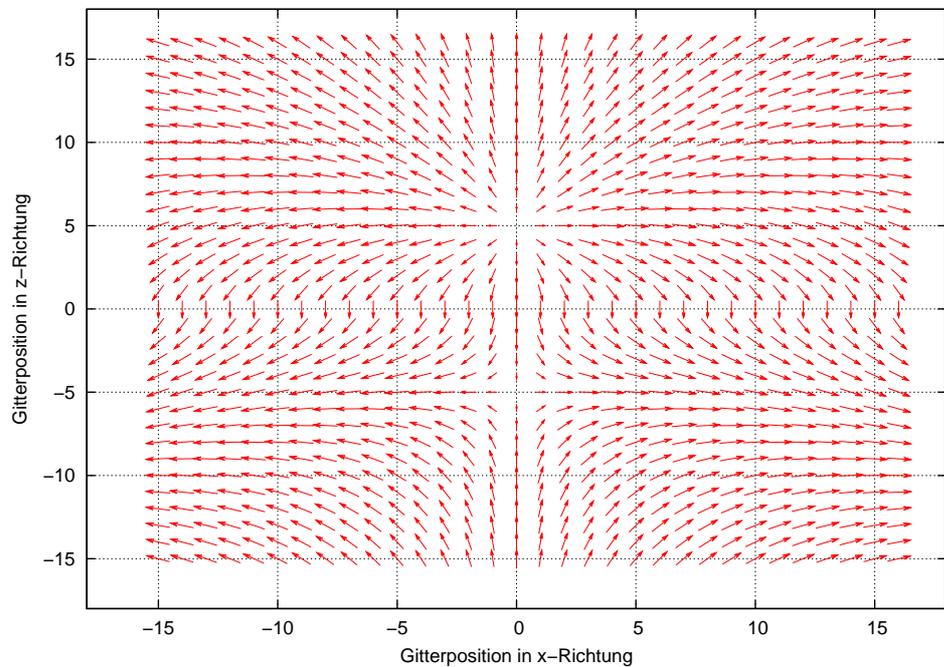


Abbildung 5.4: \vec{n} -Feld für eine $(+, +, 1, 1)$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Schritten

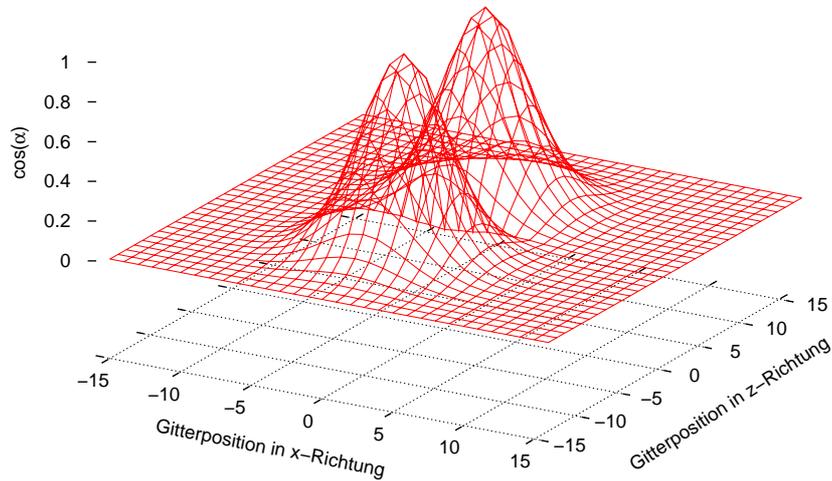


Abbildung 5.5: $\cos \alpha$ -Profil für eine $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Schritten

Variation des gesamten Solitonfeldes

Nach der Durchführung von anfänglich 500 Iterationsschritten mit Variation von q_0 wurden weitere 500 Iterationsschritte mit Variation des gesamten Solitonvektors durchgeführt. Dabei wurden wieder die Ränder und die Zentren fixiert. Die Energien sind in Tabelle 5.4 angeführt. Auffällig ist die starke Energieabnahme im Fall der $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Konfiguration.

Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ und $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$

Man erkennt in Abbildung 5.6 und Abbildung 5.7 bei beiden Konfigurationen eine leichte Verschiebung der Solitonzentren auf der z -Achse vom

Tabelle 5.4: Energieanteile nach 500 Monte-Carlo-Iterationen bei Änderung des gesamten Feldvektors

Konfiguration	E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}
$+ + \mathbb{1} \mathbb{1}$	2.8774	8.5016	11.3791
$+ + \mathbb{1} -\mathbb{1}$	2.8725	8.5057	11.3782
$+ - \mathbb{1} \mathbb{1}$	1.7960	2.9686	4.7646
$+ - \mathbb{1} -\mathbb{1}$	2.6658	7.7209	10.3867

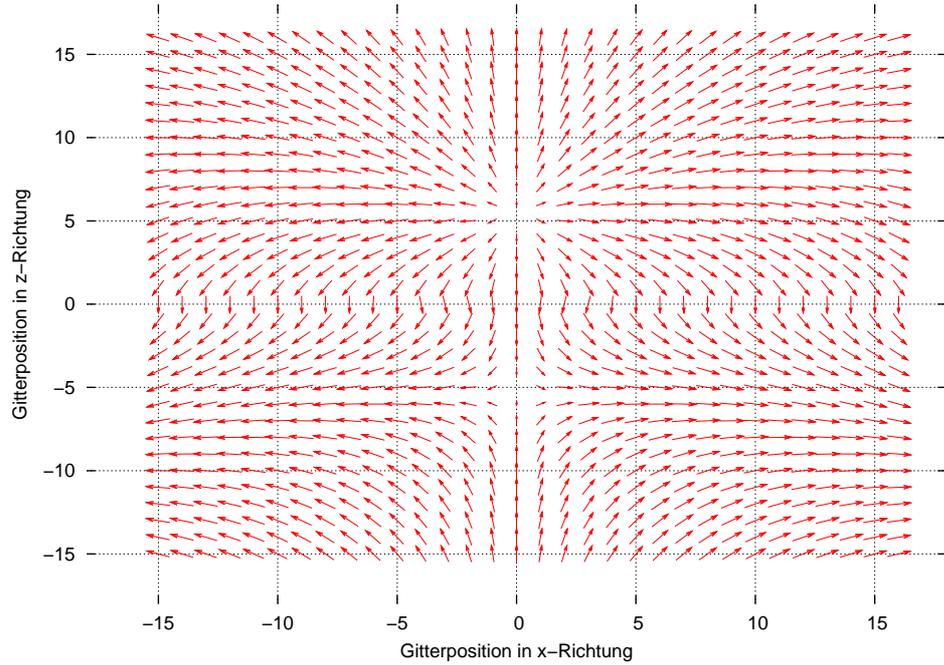


Abbildung 5.6: \vec{n} -Feld für eine $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

Ursprung weg. Offenbar verhindert der festgehaltene Rand, dass die Solitonzentren sich noch weiter von ihren ursprünglichen Positionen entfernen.

Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$

Auch diese Konfiguration zeigt leichte Verschiebungen der Zentren entlang der z -Achse, erscheint aber sonst als stabile Anordnung (Abbildung 5.8).

Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$

Diese Konfiguration unterscheidet sich erheblich von den vorhergehenden - das gesamte Solitonfeld hat sich nach 500 Iterationsschritten ausgedreht (siehe Abbildung 5.9) und die beiden Zentren haben sich zum Ursprung verschoben (Abbildung 5.10).

Nach 3000 Iterationen sind die Solitonzentren - bis auf die fixierten Zentren - verschwunden und das verbleibende \vec{n} -Feld hat sich entsprechend dem fixierten Rand parallel ausgerichtet und somit die Krümmungsenergie minimiert (Abbildung 5.11 und Abbildung 5.12).

In Abbildung 5.13 ist deutlich das Absinken der potenziellen Energie gegen den Wert 0 erkennbar, für die verbleibenden Krümmungsenergieanteile ist der festgehaltene Rand verantwortlich. Die Simulation ergibt Energieanteile beziehungsweise eine Gesamtenergie von

$$E_{pot} = 0,024875 \quad E_{Plaquette} = 0,16870 \quad \text{und} \quad E_{Gesamt} = 0,19358 \quad (5.1)$$

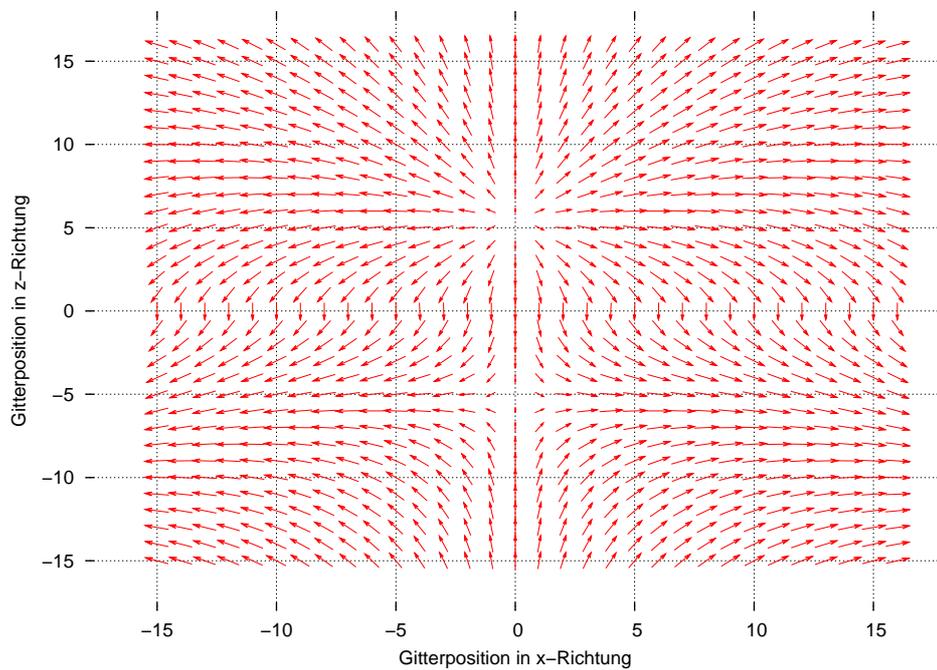


Abbildung 5.7: \vec{n} -Feld für eine $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

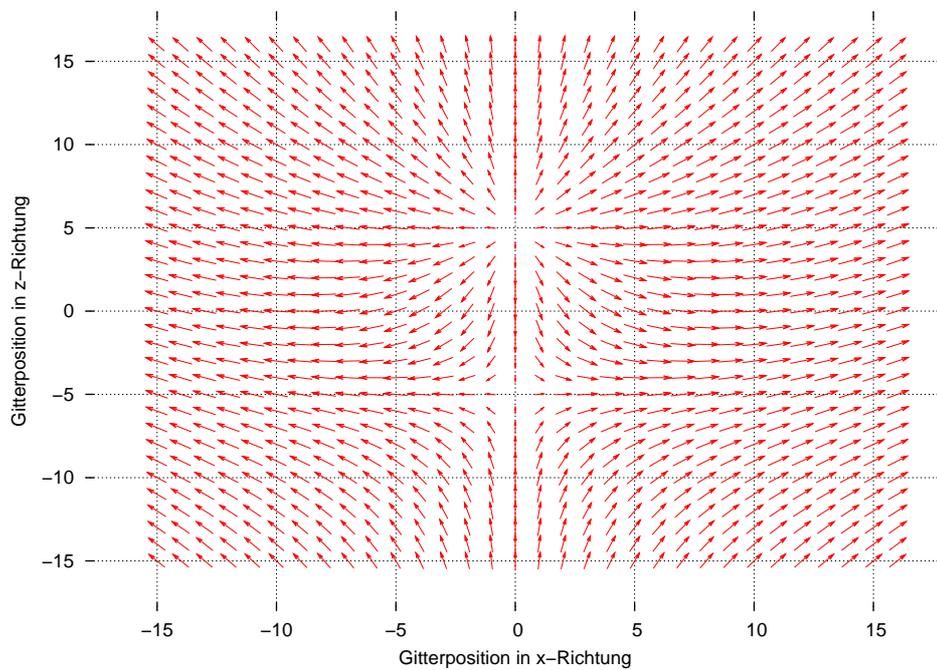


Abbildung 5.8: \vec{n} -Feld für eine $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

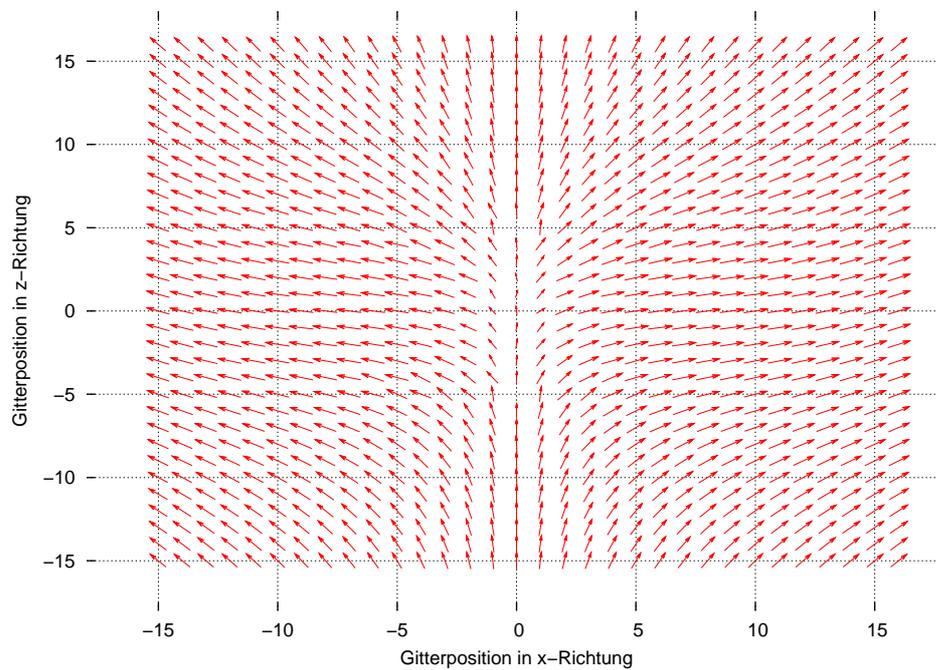


Abbildung 5.9: \vec{n} -Feld für eine $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

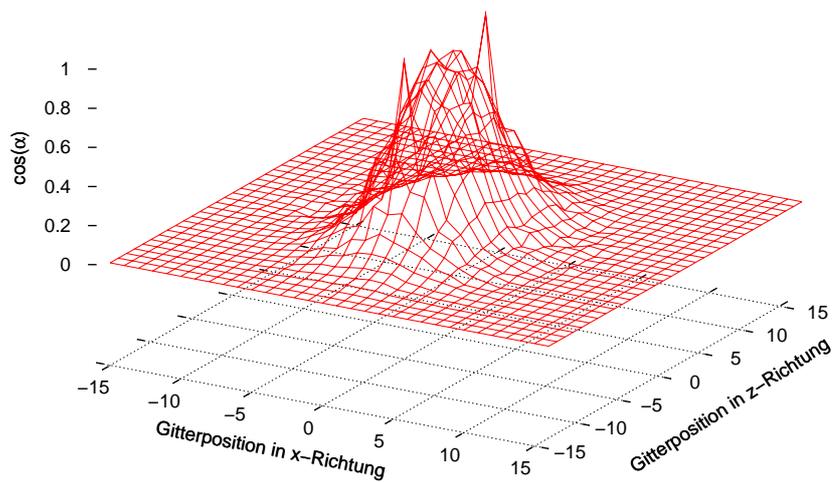


Abbildung 5.10: $\cos \alpha$ -Wert für eine $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 500 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

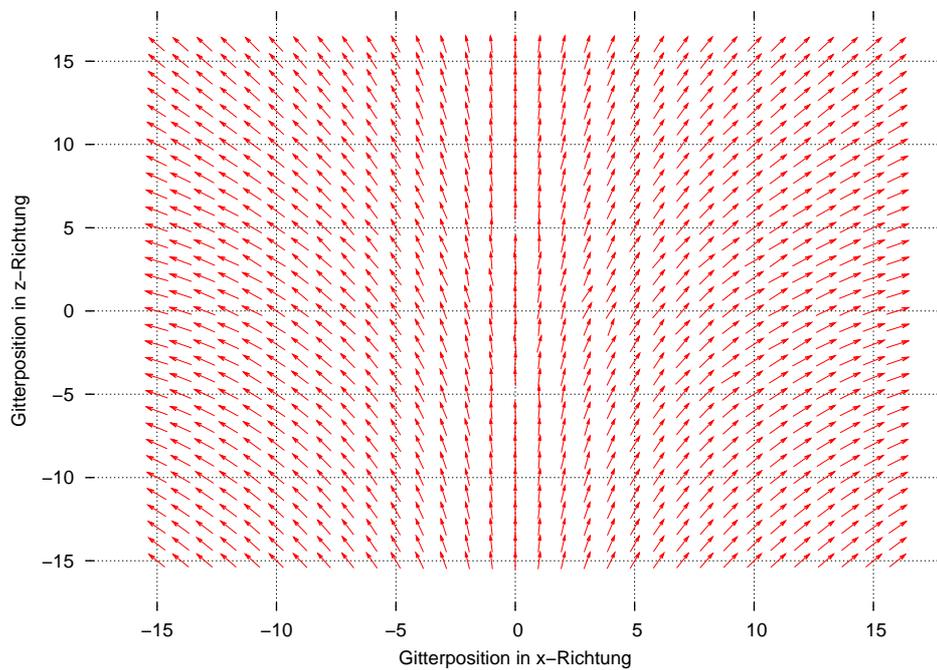


Abbildung 5.11: \vec{n} -Feld für eine $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 3000 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

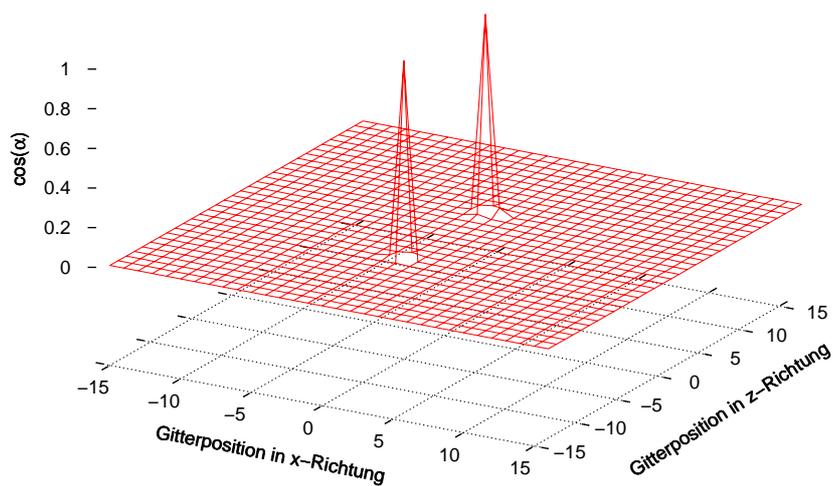


Abbildung 5.12: $\cos \alpha$ -Wert für eine $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung in der xz -Ebene nach 3000 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

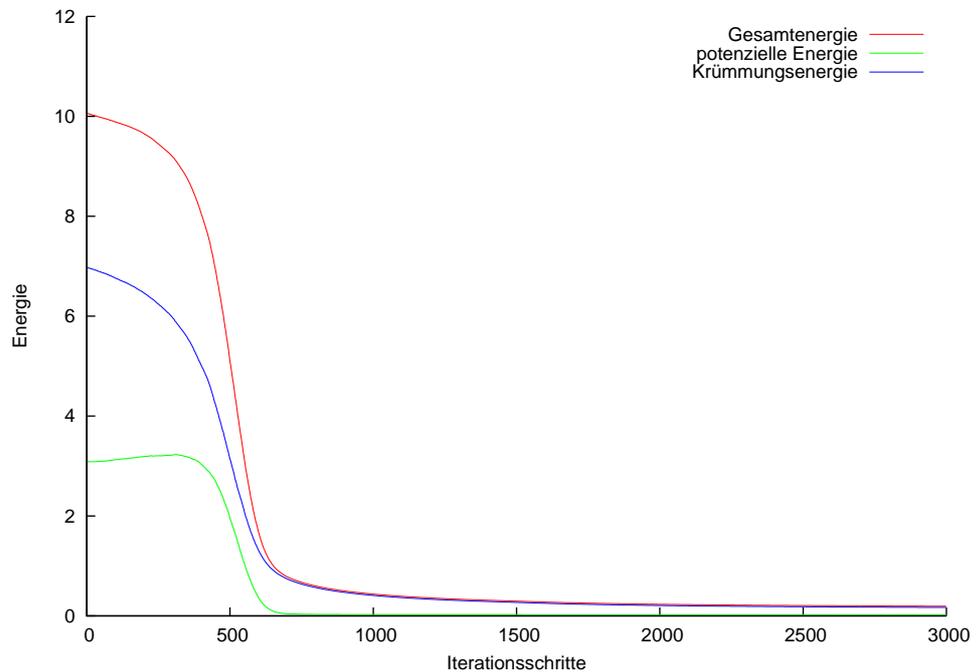


Abbildung 5.13: Energien für Anordnung mit $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -Anordnung nach 3000 Monte-Carlo-Iterationen mit Variation des gesamten Feldvektors

Energieeinheiten.

Abschließend lässt sich Folgendes zusammenfassen:

- Konfigurationen mit gleichnamigen Ladungen sind unabhängig von der Wahl der Solitonzentren bei der Variation und Minimierung des gesamten Solitonfeldes stabil. Es ergibt sich eine leichte Verschiebung auf der z -Achse vom Ursprung weg - dies lässt sich als Abstoßung gleichnamiger Ladungen verstehen. Der festgehaltene Rand des untersuchten Gitters verhindert offenbar eine weitere Entfernung der beiden gleichgeladenen Solitonen.
- Konfigurationen mit ungleichnamigen Ladungen und ungleichen Solitonzentren sind ebenfalls stabil. Dieser Effekt lässt sich im elektrodynamischen Grenzfall nicht erklären.
- Konfigurationen mit ungleichnamigen Ladungen und gleichen Solitonzentren sind nicht stabil. Das gesamte Feld minimiert seine Krümmungsenergie mit Berücksichtigung des festgehaltenen Randes und die potenzielle Energie verschwindet. Dies lässt sich als Paarvernichtung interpretieren.
- Der Einfluss der fixierten Solitonzentren auf die Stabilität der Konfiguration ist minimal. Die Fixierung der Solitonzentren kann das Aus-

Tabelle 5.5: Energieanteile nach 30 beziehungsweise 50 Iterationen im eindimensionalen Gradientenverfahren

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}	Iterationen
+	+	1	1	2.8834	8.5763	11.4598	50
+	+	1	-1	2.8789	8.5844	11.4633	50
+	-	1	1	3.0919	6.9721	10.0639	30
+	-	1	-1	2.6609	7.7432	10.4042	30

drehen des \vec{n} -Feldes im Falle der Konfiguration $(+, -, 1, 1)$ nicht verhindern.

5.1.2 Variation der nullten Komponente - eindimensionales Gradientenverfahren

Verfahren

Ein weiteres Verfahren zur Minimierung der Gitterwirkung ist das Gradientenverfahren in einer Dimension. Variiert wird in diesem Fall nur die Komponente q_0 des Solitonfeldes. Anfänglich wird bestimmt, in welcher Richtung die Variation von q_0 zu erfolgen hat, damit die Energie in diesem Punkt kleiner wird. Dies erfolgt durch Bildung der ersten Ableitung

$$\frac{\Delta E}{\Delta q_0} = \frac{E(q_0 + \Delta q_0) - E(q_0)}{\Delta q_0}. \quad (5.2)$$

Es ist schließlich ausreichend, nur das Vorzeichen der Energiedifferenz zu bestimmen, da dieses die Richtung der Energieminimierung festlegt (Abbildung 5.15). Anschließend wird mit einem Intervallhalbierungsverfahren das lokale Minimum der Energie gesucht (siehe Struktogramm in Abbildung 5.14).

Das Verfahren konvergiert deutlich schneller als das Monte-Carlo-Verfahren, nachteilig ist die längere Rechenzeit pro Iterationsschritt. Vorteilhaft erscheint deshalb eine Kombination beider Verfahren bei der Energieminimierung von Gittern.

Das Gradientenverfahren liefert kleinere Energiewerte als das Monte-Carlo-Verfahren - die Differenz ist aber nur in der Größenordnung von 10^{-4} Energieeinheiten (siehe Tabelle 5.5).

5.1.3 Gradientenverfahren in mehreren Dimensionen

Bei der Minimierung der Gitterenergie unter Berücksichtigung von Änderungen des gesamten Solitonvektors, wird auf das Gradientenverfahren¹, beschrieben in [17], zurückgegriffen. Bei diesem Verfahren wird der Gradient

¹auch Methode des steilsten Abstiegs genannt

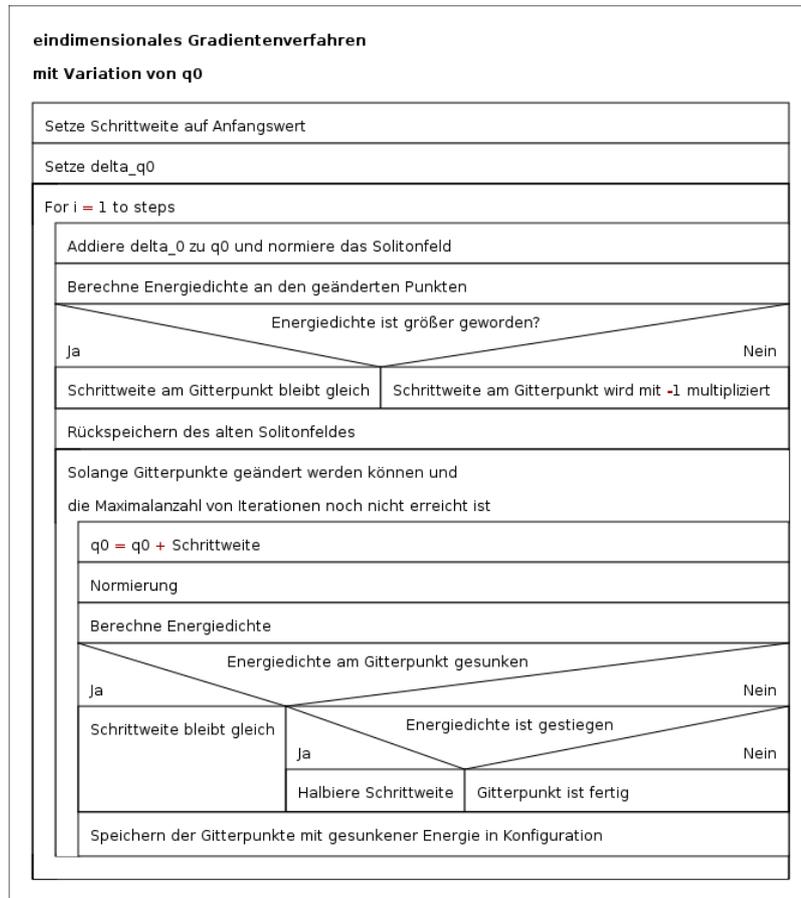


Abbildung 5.14: Struktogramm Gradientenverfahren in einer Dimension

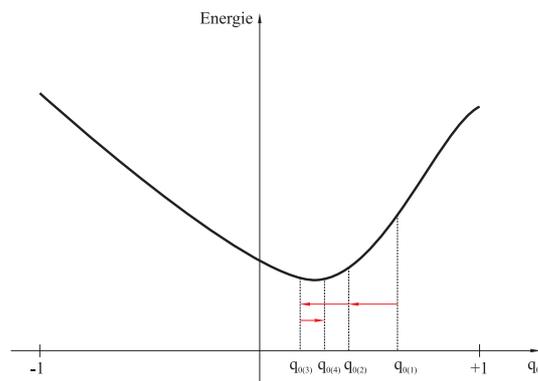


Abbildung 5.15: Gradientenverfahren in einer Dimension

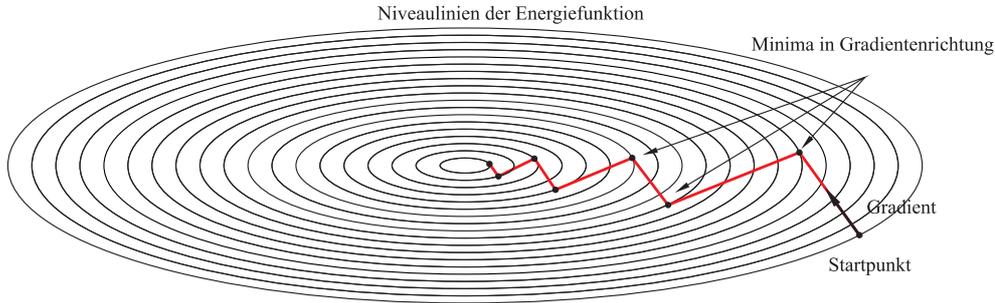


Abbildung 5.16: Minimierung mit dem Gradientenverfahren

der Energiefunktion

$$\vec{G}(Q_i) = \vec{\nabla} E(Q_i) \quad (5.3)$$

an einem Gitterpunkt berechnet. Die Änderung der Solitonfeldvektoren erfolgt anschließend in Richtung des Gradienten \vec{G} und es wird das lokale Minimum mit einem Intervallhalbierungsverfahren ermittelt.

Man erkennt in Abbildung 5.16, dass sich bei der Änderung der Feldvektoren der Gradient mitändert und damit das Auffinden des Minimums lange dauern kann. Für zukünftige Verbesserungen bietet sich das in [17] beschriebene *konjugierte Gradientenverfahren* an.

Die Berechnung des Gradienten im verwendeten Minimierungsprogramm erfolgte durch Differenzbildung der Energien nach Variation der einzelnen Feldkomponenten

$$\vec{G}(Q_i) = \begin{pmatrix} E(q_0 + \Delta, q_1, q_2, q_3) - E(q_0, q_1, q_2, q_3) \\ E(q_0, q_1 + \Delta, q_2, q_3) - E(q_0, q_1, q_2, q_3) \\ E(q_0, q_1, q_2 + \Delta, q_3) - E(q_0, q_1, q_2, q_3) \\ E(q_0, q_1, q_2, q_3 + \Delta) - E(q_0, q_1, q_2, q_3) \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

und anschließender Normierung auf 1^2 . Dann wird der Gradient mit der Anfangsschrittweite multipliziert und das Minimum der Energie gesucht (siehe Struktogramm in Abbildung 5.17).

Durchgeführt wurde die Minimierung an Gittern, die bereits mit dem eindimensionalen Gradientenverfahren minimiert wurden. Das Gradientenverfahren liefert die gleichen Ergebnisse wie der Monte-Carlo-Algorithmus. Die Konfiguration mit $(+, -, 1, 1)$ dreht sich wieder komplett aus, die anderen Dipolanordnungen verschieben sich nur geringfügig entlang der z -Achse. In Tabelle 5.6 sind die erreichten Energiebeiträge und die Gesamtenergiewerte in Abhängigkeit von der Anzahl der Iterationen angeführt.

²Grundsätzlich ist die Energie nur von 3 Koordinaten abhängig, nämlich von den Winkeln ϕ , θ und α . Damit wäre auch die Normierung des Feldvektors nach der Änderung nicht mehr notwendig. Da die Änderung der Feldvektoren sehr gering ist, lässt sich der Gradient einfacher direkt aus der Komponentenänderung mit nachfolgender Normierung berechnen - etwaige Fehler in der Gradientenrichtung sind vernachlässigbar.

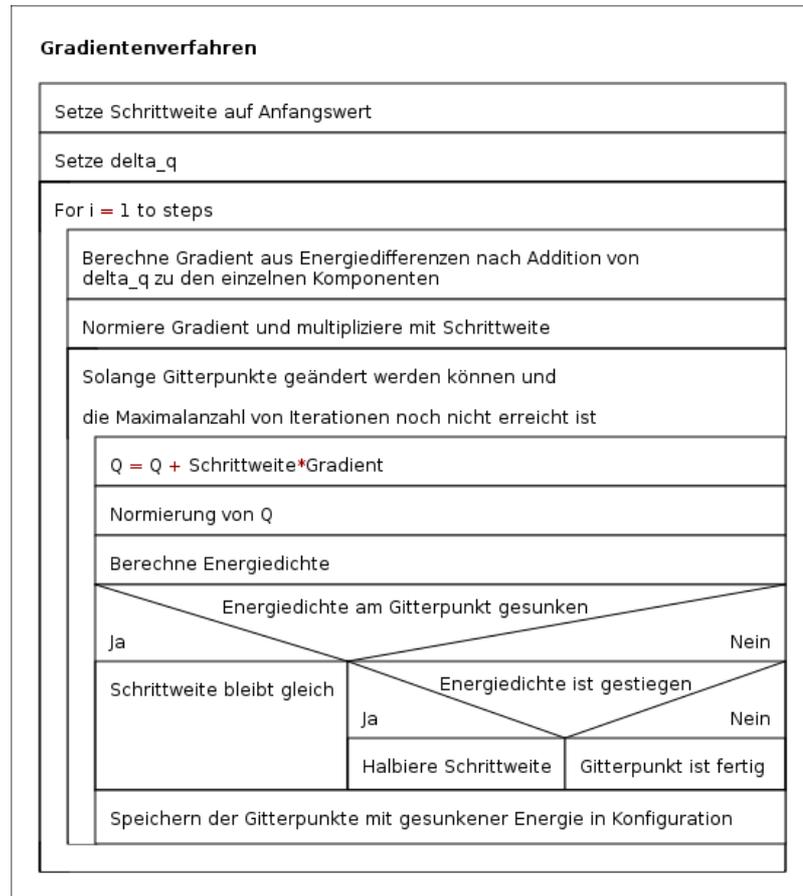


Abbildung 5.17: Struktogramm Gradientenverfahren in mehreren Dimensionen

Tabelle 5.6: Energieanteile nach 50 beziehungsweise 500 Iterationen im Gradientenverfahren

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}	Iterationen
+	+	1	1	2.7982	8.3559	11.1541	50
+	+	1	-1	2.7841	8.3516	11.1357	50
+	-	1	1	0.03119	0.5319	0.5631	50
+	-	1	1	0.02469	0.1544	0.1790	500
+	-	1	-1	2.6186	7.7262	10.3449	50

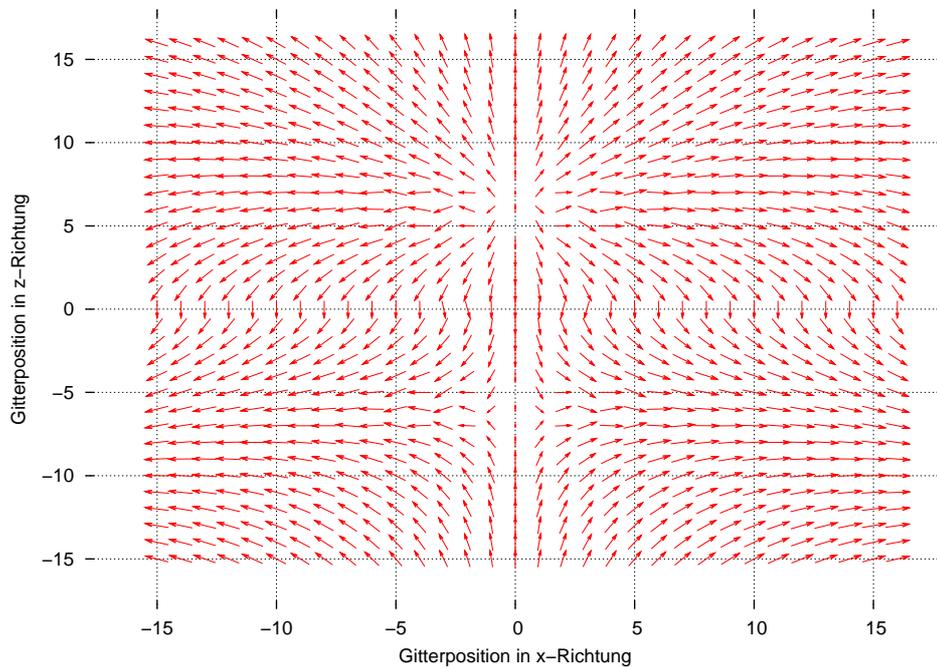


Abbildung 5.18: Ausbildung von Gitterartefakten beim Gradientenverfahren an einer $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ - Konfiguration

Nach fünfhundert Iterationsschritten sind die Energiebeiträge der Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ deutlich niedriger als beim Monte-Carlo-Verfahren. Die potenzielle Energie entspricht fast dem theoretisch niedrigsten Wert von $\frac{2}{r_0^4} = \frac{2}{81}$ der beiden fixierten Solitonzentren.

Anzumerken ist die Ausbildung von Gitterartefakten³ in beiden Verfahren in der Nähe der Solitonzentren (siehe Abbildung 5.18), insbesondere bei Konfigurationen mit gleichen elektrischen Ladungen.

Das mehrdimensionale Gradientenverfahren minimiert die Energie in deutlich geringerer Schrittzahl - dem entgegen steht die höhere Rechenzeit, verursacht durch die Gradientenbestimmung und die schrittweise Annäherung an das Minimum in Gradientenrichtung. Wegen der sehr geringen Trefferquote beim Monte-Carlo-Verfahren bei gleichzeitig akzeptablen Schrittweiten scheint das Gradientenverfahren das effizientere Verfahren zu sein. Problematisch bei beiden Verfahren ist die doch deutliche Ausbildung von unphysikalischen Gitterartefakten bei hohen Iterationszahlen.

³Bei numerischen Berechnungen an Gittern kann es auf Grund der Diskretisierung des Problems und durch Rundungsfehlern bei der Gleitkommaberechnung, bei hohen Iterationszahlen zu fehlerhaften Ergebnissen, die nicht aus den Ausgangsdaten erklärbar sind, kommen.

Tabelle 5.7: Energieanteile nach 50 Iterationen im Gradientenverfahren mit nichtfixierten Solitonzentren

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}	Iterationen
+	+	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.8740	8.3333	11.2073	50
+	+	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8726	8.3352	11.2078	50
+	-	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	0.0015	0.3200	0.3215	50
+	-	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.6222	7.7489	10.3711	50

Aufhebung der Fixierung der Solitonzentren

In Abbildung 5.18 ist - neben den Gitterartefakten - deutlich zu erkennen, dass sich das Solitonfeld auf der z -Achse wegen der fixierten Solitonzentren nicht richtig ausrichten kann. Da die fixierten Solitonzentren energetisch kaum ins Gewicht fallen, aber offensichtlich die Ausrichtung des Solitonfeldes deutlich stören, wurden an den Konfigurationen $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$, $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$, $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ wiederum 50 Iterationsschritte - nach einer vorhergehenden Minimierung mit dem eindimensionalen Gradientenverfahren - durchgeführt, wobei die Fixierung der Zentren aufgehoben wurde. Der Rand wurde weiterhin fixiert.

- Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$:

Die Konfiguration besitzt nach der Minimierung praktisch keine potenziellen Energieanteile, die Ausrichtung der Vektoren entspricht Abbildung 5.10, wobei sich an den ursprünglichen Positionen der Solitonzentren parallel ausgerichtete Feldvektoren befinden.

- Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$:

Bei dieser Konfiguration verschieben sich die Zentren auf der z -Achse Richtung Ursprung. Das Solitonfeld kann sich in der Umgebung der Zentren korrekt ausrichten.

- Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, \pm\mathbb{1})$:

Im Gegensatz zu Abbildung 5.18 ergeben sich nach 50 Iterationsschritten keine erkennbaren Gitterartefakte (siehe Abbildung 5.19), die Zentren sind auf der z -Achse nach außen verschoben und die Vektoren an den ehemaligen Zentrumspositionen können sich in der erwarteten Richtung ausrichten.

Es ergeben sich bei der Energieminimierung nach Aufhebung der Fixierung der Zentren bei gleicher Iterationszahl geringfügig höhere Energiewerte als bei der Minimierung mit fixierten Solitonzentren (siehe Tabelle 5.6 und 5.7).

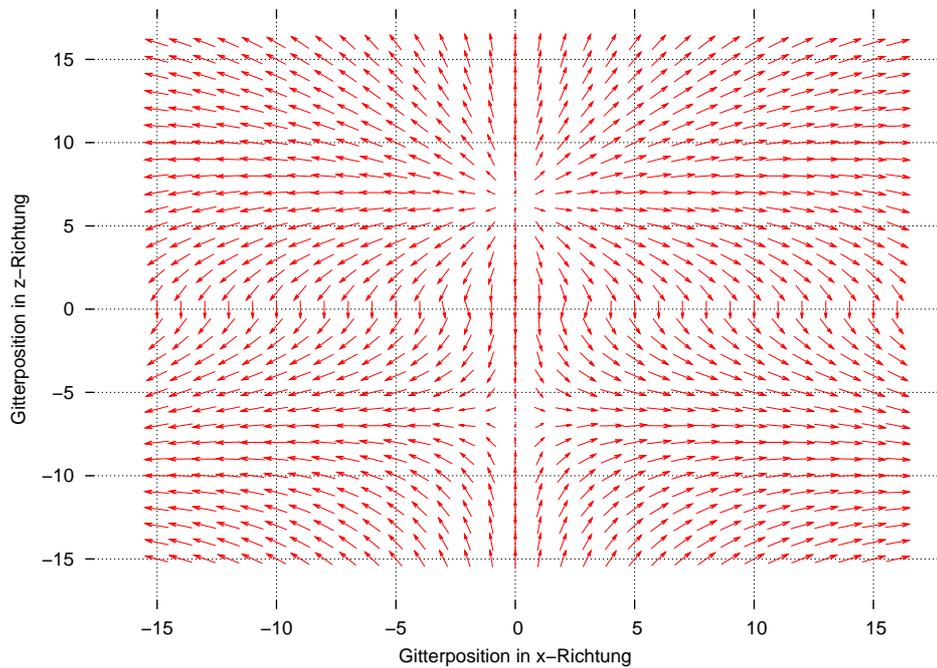


Abbildung 5.19: Solitonfeld einer $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ - Konfiguration in der xz -Ebene nach Aufhebung der Zentrumsfixierung

Fixierung der Umgebung der Solitonzentren

Um das Verschieben der Solitonzentren bei Anwendung des mehrdimensionalen Gradientenverfahrens zu verhindern, gibt es im Modul `SolitonDipole.py` die Methode `setfixedpoints`, um die Nachbarn der Solitonzentren mitzufixieren.

Die Methode besitzt 5 Parameter, die mit dem Wert `True` oder `False` belegt werden können:

- `center` ... nur die Solitonzentren sind fixiert
- `nearcenter` ... die direkten Gitternachbarn werden fixiert
- `nearcenter2` ... ein Würfel um die Zentren wird fixiert
- `nearcenter3` ... ein Würfel mit Schichtdicke 2 um die Zentren wird fixiert
- `border` ... alle Punkte der Oberfläche werden fixiert

Bei den Konfigurationen $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$, $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$, $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ wurden die Solitonzentren und die umgebenden Würfel fixiert (`center=True`, `nearcenter2=True`, `border=True`) und 50 Schritte des Gradientenverfahrens angewendet.

Tabelle 5.8: Energieanteile nach 50 Iterationen im Gradientenverfahren mit Fixierung der Solitonzentren und deren Nachbarn

Konfiguration				E_{pot}	$E_{plaquette}$	E_{Gesamt}	Iterationen
+	+	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	2.9029	8.5277	11.4306	50
+	+	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.8973	8.5366	11.4339	50
+	-	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}$	3.4827	4.5507	8.0334	50
+	-	$\mathbb{1}$	$-\mathbb{1}$	2.6724	7.7179	10.3903	50

In Abbildung 5.20 sind die Verläufe von $\cos \alpha$ bei unterschiedlichen Fixierungen der Umgebungen der Zentren auf der z -Achse dargestellt. Man erkennt bei der Anordnung $(+, +, \mathbb{1}, \pm \mathbb{1})$ (Abbildung 5.20 a) und 5.20 b)) deutlich die Verschiebung der Solitonzentren bei Variation des gesamten Feldes, wenn die Fixierung aufgehoben ist und das Feld sich frei einstellen kann.

Man sieht auch, dass bei ausschließlicher Fixierung der Zentren eine Verschiebung erfolgt (rote Linie), wobei diese weniger stark ausgeprägt ist. Nur im Fall der Fixierung aller Nachbarn lässt sich ein Ausweichen der Zentren entlang der z -Achse zuverlässig verhindern.

Auch bei ungleichnamigen Ladungen ist im Fall ungleicher Solitonzentren (Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$) eine zuverlässige Fixierung der Zentren nur über das Festhalten aller Nachbarn zu erreichen (Abbildung 5.20 c)).

Bei der Anordnung $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ ist sehr gut das Ausdrehen des Solitonfeldes zu erkennen. Bei Aufhebung der Fixierung verschwindet der Anteil von $\cos \alpha$ nach 50 Iterationsschritten komplett.

Selbst bei Fixierung aller Nachbarn, versuchen die beiden ungleichnamigen Ladungen sich entlang der z -Achse Richtung Ursprung zu verschieben. Eine Fixierung der Zentren ist hier nicht möglich (Abbildung 5.20 d)).

Die Energiewerte liegen bei dieser Form der Feldfixierung höher als bei Anordnungen, deren Zentren nicht mehr fixiert sind (Tabelle 5.8). In Abbildung 5.21 sind die Gesamtenergien nach der Minimierung mit unterschiedlichen Fixierungen der Konfigurationen $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$. Deutlich ist zu erkennen, dass bei beiden Konfigurationen die Energie am stärksten im Fall der alleinigen Fixierung der Zentren absinkt. Sind die Zentren samt Umgebung fixiert, ergibt sich die geringste Absenkung der Gesamtenergie. Abschließend lässt sich zusammenfassen:

- Bei Anwendung des mehrdimensionalen Gradientenverfahren reicht die alleinige Fixierung der Zentren nicht aus, die Ausweichbewegung der Ladungen entlang der z -Achse zu verhindern. Es ergeben sich störende Gitterartefakte.
- Bei Freigabe der Zentrumsfixierung, treten Gitterartefakte bei Iterationszahlen ≤ 50 nicht mehr auf. Die Ladungen verschieben sich deutlich

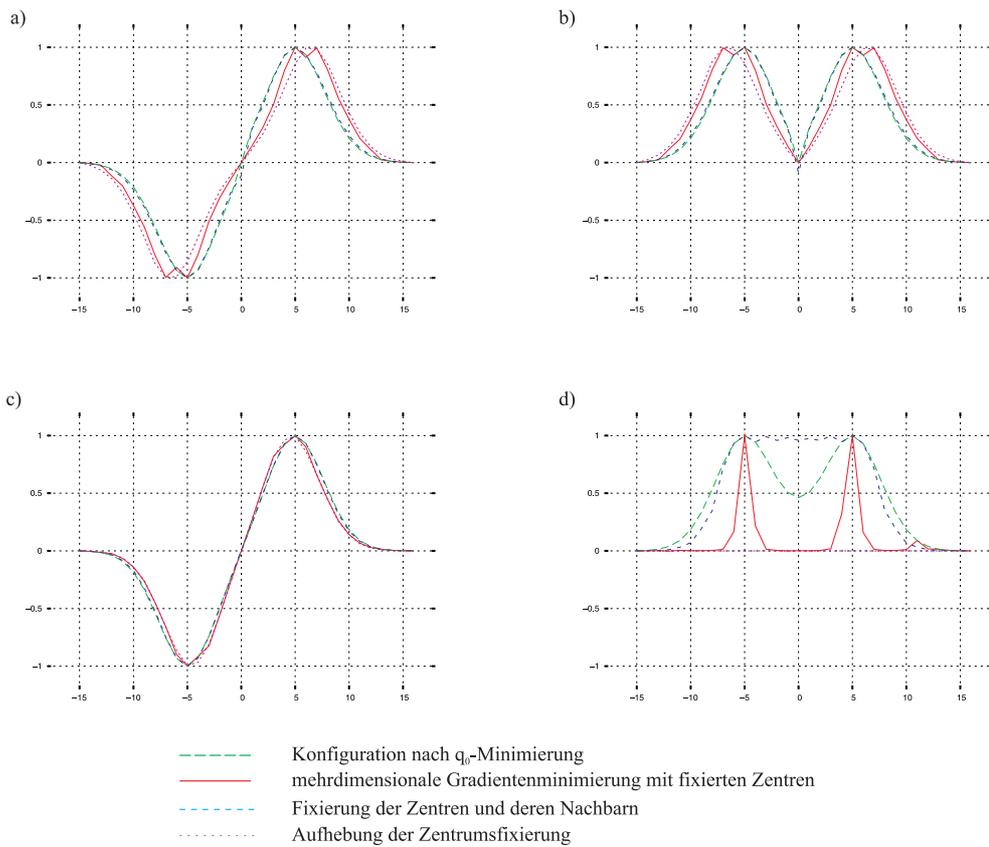


Abbildung 5.20: $\cos \alpha$ -Profile entlang der z -Achse bei unterschiedlichen Fixierungen der Solitonzentren bei a) Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$, b) Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$, c) Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ und d) Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$

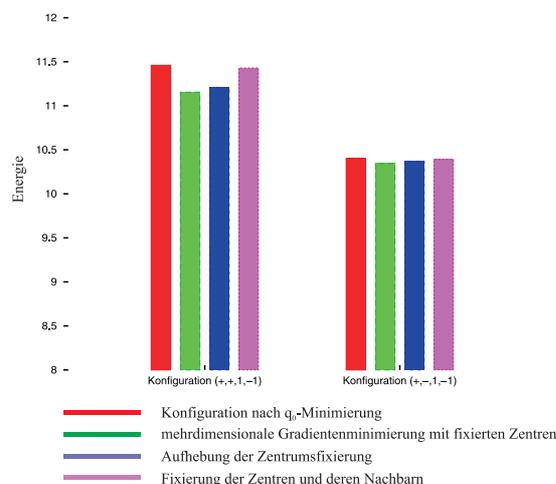


Abbildung 5.21: Energien der Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ bei unterschiedlichen Fixierungen der Zentren

auf der z -Achse.

- Fixiert man zusätzlich zu den Solitonzentren auch deren Nachbarn, ist bis auf die Konfiguration $(+, -, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ ein zuverlässiges Festhalten der Ladungen an den ursprünglichen Positionen möglich.
- Den niedrigsten Energiewert erhält man überraschenderweise bei Fixierung der Zentren, bei Aufhebung der Zentrierung ergibt sich ein geringfügig höherer Energiewert.

Numerische Probleme bei hohen Iterationszahlen

Es wurde eine Energieminimierung an drei Gittern (Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$, $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$) mit je 500 Iterationsschritten im mehrdimensionalen Gradientenverfahren mit nichtfixierten Zentren durchgeführt. Es ergeben sich Feldkonfigurationen, die sich stark von den ursprünglichen unterscheiden (siehe Abbildung 5.22 für die Konfiguration $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$).

Es gibt offensichtlich eine kritische Anzahl von Iterationen, nach der es zur Ausbildung von Gitterartefakten kommt. Bei der Untersuchung des Gesamtenergieverlaufes bei 500 Iterationen, ist zu erkennen, dass es bei ungefähr 60 bis 70 Iterationen zu einem Abfall der Gesamtenergie kommt (Abbildung 5.23). Es zeigt sich auch, dass bei dieser kritischen Anzahl von Iterationen, die ersten sichtbaren Artefakte rund um die Solitonzentren auftreten - gleichzeitig geht der Energieverlauf von einem degressiven in einen progressiv abfallenden Verlauf über.

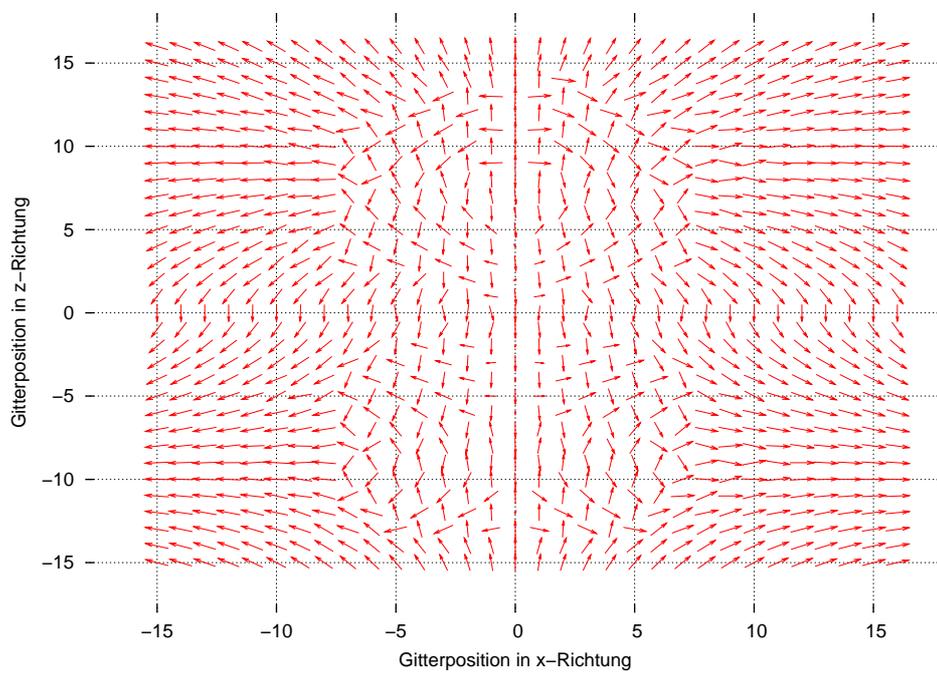


Abbildung 5.22: Gitterartefakte nach 500 Iterationen im mehrdimensionalen Gradientenverfahren mit nichtfixierten Zentren für eine $(+, +, 1, -1)$ -Anordnung

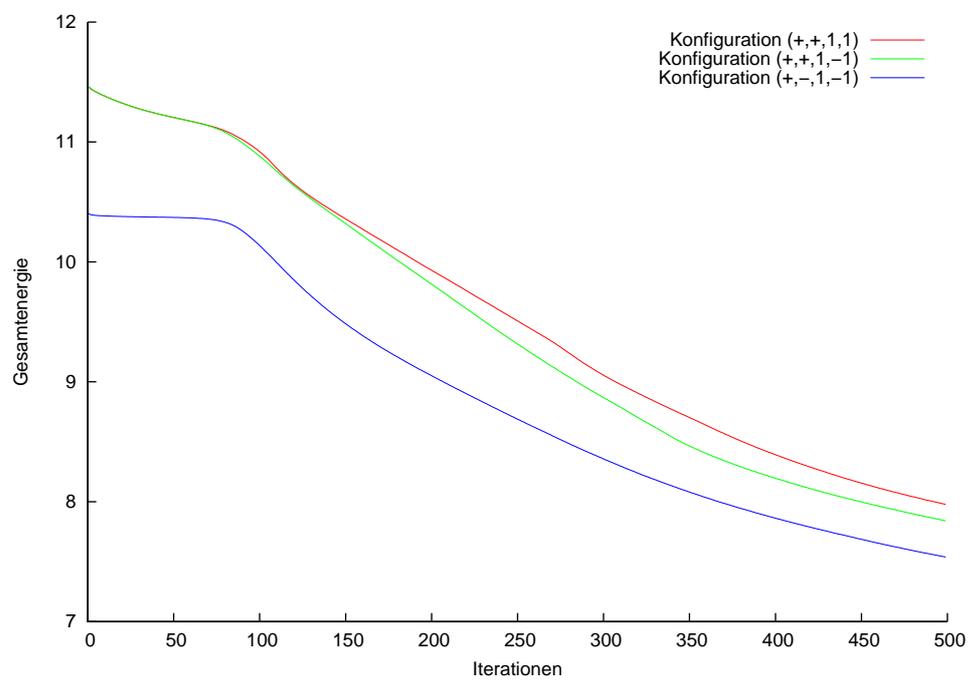


Abbildung 5.23: Energieverlauf bei 500 Iterationen im mehrdimensionalen Gradientenverfahren für die $(+, +, \mathbb{1}, \mathbb{1})$ -, $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ - und $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Konfiguration

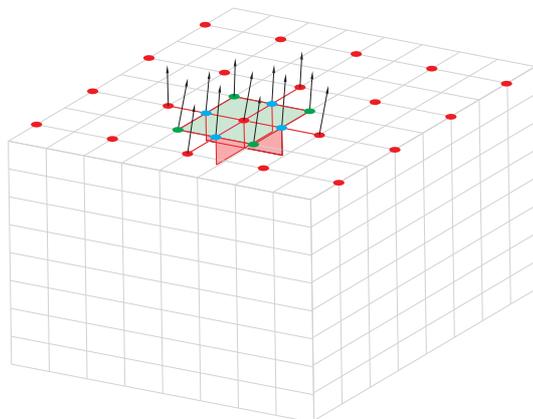


Abbildung 5.24: Feldstärken an einem Punkt der Gitteroberfläche

Es erscheint demnach vorteilhaft, nicht mehr als 50 bis 60 Iterationen im mehrdimensionalen Gradientenverfahren durchzuführen.

5.2 Variation des Solitonfeldes an der Oberfläche

Bei der Variation des Solitonfeldes an der Oberfläche ist zu beachten, dass sich die elektrischen Feldstärken und Potenziale in der unmittelbaren Umgebung eines Punktes am Gitterrand ändern. Wie bereits in Kapitel 3.3.3 dargelegt, ergeben sich dadurch veränderte Oberflächenenergierterme, die bei der Minimierung an der Gitteroberfläche zusätzlich zu den Volumsanteilen zu berücksichtigen sind.

Berechnung der Energieanteile an der Oberfläche

An einem Gitterpunkt ergibt sich der Oberflächenenergieanteil im elektrodynamischen Grenzfall zu

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \sum_i \Delta f_{\mu,i} E_{\mu,i} \phi . \quad (5.5)$$

In Abbildung 5.24 ist leicht zu erkennen, dass sich in der Umgebung des roten Punktes durch die Änderung der $SU(2)$ -Linkfelder die Feldstärken aller Nachbarn mitändern werden (Punkte in grün und blau). Man sieht in der Grafik auch, dass das Solitonfeld nur in jedem zweiten Punkt einer Gitterfarbe geändert werden darf, um eine gegenseitige Beeinflussung der Feldstärken zu vermeiden.

5.2.1 Berechnung und Korrektur des Potentials

Bei der Variation eines \vec{n} -Vektors am Rand ergibt sich ein neuer Potentialwert aus den veränderten Feldstärken am jeweiligen Punkt und seinen

direkten Nachbarn an der Oberfläche.

Die Potenzialänderungen am und in der Umgebung des Punktes werden dann einzeln aus dieser Variation berechnet und in der Energiesumme berücksichtigt.

Die Änderung der Potenzialwerte läßt sich mit Hilfe von

$$\vec{E} = -\vec{\partial}\phi \quad (5.6)$$

beziehungsweise

$$\phi = - \int_{\vec{x}_1}^{\vec{x}_2} \vec{E} d\vec{s} \quad (5.7)$$

berechnen. Am diskreten Gitter ergibt sich damit das neue Potenzial aus den gemittelten Feldstärken entlang der Gitterkanten.

$$U(i, j) = U(i + 1, j) - \frac{E_i(i, j) + E_i(i + 1, j)}{2} a \quad (5.8)$$

a bezeichnet die Länge der Gitterkonstante und wird in den Berechnungen auf 1 gesetzt. i und j sind die Positionen am Gitter in x - beziehungsweise y -Richtung.

Problematisch in diesem Zusammenhang ist die Tatsache, dass die Potentialwerte ausgehend von den klassischen Werten berechnet werden. Der Nullpunkt des Potentials liegt bei natürlichen Randbedingungen im Unendlichen - man hat deshalb keine Möglichkeit, während der Minimierung - ausgehend von einem feststehenden Wert - das Potenzial zu aktualisieren.

Da sich die Feldkonfiguration im Laufe der später noch vorgestellten Verfahren zum Teil stark ändert - speziell in dem Fall der Überführung zweier Dipolkonfigurationen ineinander - wurde bei der Variation der \vec{n} -Felder eine Änderung der nullten Komponente des Solitonfeldes an der Oberfläche verhindert. Damit bewegt man sich bei der Berechnung der Potentialwerte immer im elektrodynamischen Grenzfall.

Die Aktualisierung der Potenzialwerte erfolgt anfänglich mit Hilfe des klassischen Potentials der Startkonfiguration durch Integration ausgehend von Punkten der gleichen Gitterfarbe. Abbildung 5.25 zeigt unterschiedliche Integrationswege auf der Gitteroberfläche.

Ausgehend von den roten Nachbarn des Punktes im Zentrum des jeweils grün unterlegten Bereichs, wird das Potenzial an den direkten Nachbarn und schließlich am geänderten Gitterpunkt nach Gleichung (5.7) berechnet. Durch die zahlreichen unterschiedlichen Möglichkeiten der Integration an Ecken, Kanten und innerhalb der Seitenflächen des Gitters ergeben sich insgesamt 6 verschiedene Bereiche für die Aktualisierung der elektrischen Potenziale (Abbildung 5.26).

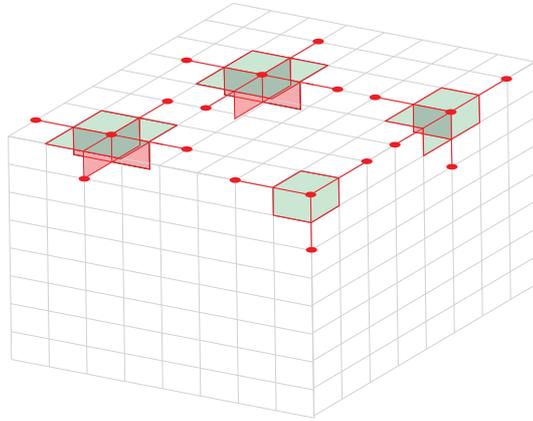


Abbildung 5.25: Unterschiedliche Integrationswege für die Potenziale an der Oberfläche

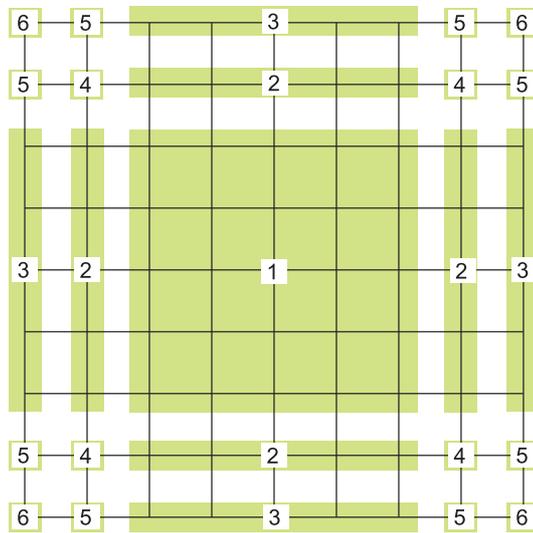


Abbildung 5.26: Bereiche für die Aktualisierung der Potenziale an einer Seitenfläche des Gitters

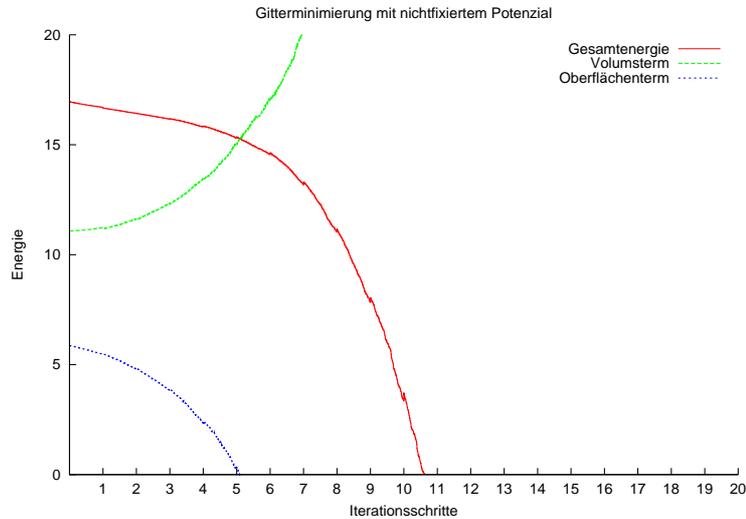


Abbildung 5.27: Energieverlauf bei Minimierung eines $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Gitters mit Aktualisierung der Potenzialwerte

5.2.2 Oberflächenminimierung mit Potenzialaktualisierung

Auf Grund der langen Rechenzeiten wurde die Energieminimierung an einem $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Gitter mit 16 Gitterpunkten in jeder Raumrichtung durchgeführt. Das Gitter wurde zuvor mit 500 Iterationsschritten des Monte-Carlo-Verfahrens bei Variation der q_0 -Komponente minimiert. Dann wurden in 20 Schritten jeweils 10 Oberflächenminimierungen, gefolgt von einem Iterationsschritt im mehrdimensionalen Gradientenverfahren ausgeführt. Das Potenzial wird, ausgehend vom klassischen Potenzial eines gleichartig geladenen Dipols über Gleichung (5.8) aktualisiert.

Im Energieverlauf (Abbildung 5.27) ist deutlich zu erkennen, dass die Oberflächenenergie nach ungefähr 50 Iterationen (das entspricht 5 Iterationsschritten in der durchgeführten Simulation) gegen den Wert 0 geht und schließlich - unphysikalisch - negativ wird.

Vergleicht man die aktualisierten Potenzialwerte an der Oberfläche (Abbildung 5.28 und 5.29), so erkennt man sofort die starken Veränderungen der Potenzialwerte an den Kanten mit steigender Iterationszahl. Nach einem Iterationsschritt ist bereits eine Erhöhung des Potenzials erkennbar, welche sich mit fortschreitender Minimierung verstärkt.

Gerade an den Kanten und den Eckpunkten müssen die klassischen Feldstärken mittels linearer Extrapolation stark korrigiert werden und beeinflussen dadurch die Potenzialaktualisierung. Durch die Über- und Unterkorrekturen der Feldstärken an den Kanten und Ecken kommt es auch rasch zur Ausbildung von unphysikalischen Verdrehungen in Kantennähe.

Zusätzlich kann es durch den Minimierungsprozess zu negativen Ober-

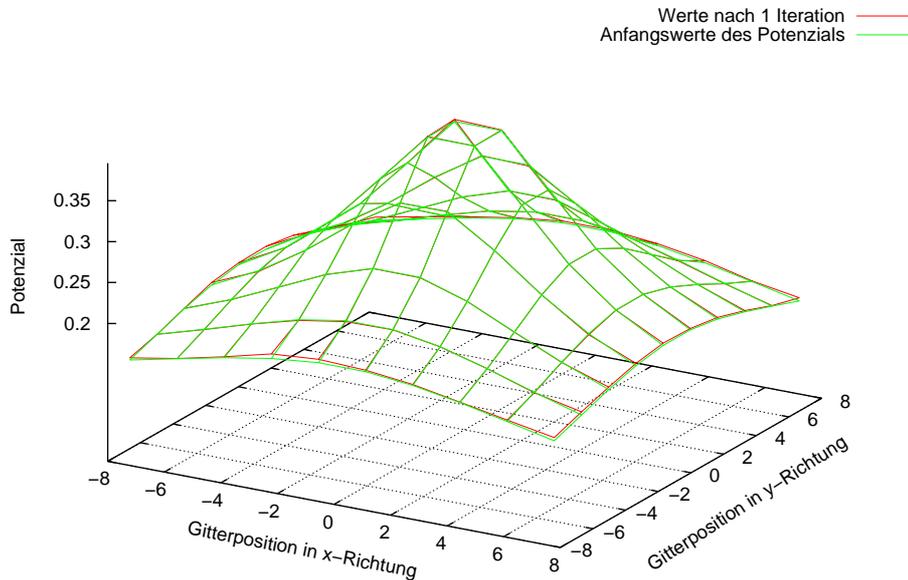


Abbildung 5.28: Potenzialwerte an der Oberfläche nach einem Iterationsschritt

flächenenergietermen kommen, da diese Terme linear in \vec{E} und ϕ sind. Bei den Volumstermen ist dies wegen der quadratischen Abhängigkeit von \vec{E} nicht möglich.

5.2.3 Oberflächenminimierung ohne Potenzialaktualisierung

Da die Minimierung an der Oberfläche im elektrodynamischen Limes erfolgen soll ($q_0 = 0$) und um die Eskalation der Potenziale an den Kanten und Ecken zu vermeiden, wurde die Minimierung der Oberflächenterme an der gleichen Konfiguration ohne Potenzialaktualisierung durchgeführt. Hier zeigen sich deutlich bessere Ergebnisse, was den Energieverlauf betrifft (Abbildung 5.30). Man erkennt deutlich die Abstufungen bei den Volumsterminimierungen und die Gesamtenergie strebt gegen einen stabilen Wert.

5.2.4 Oberflächenminimierung mit Potenzialaktualisierung und Nichtnegativitätsbedingung

Um trotzdem eine Aktualisierung der Potenzialwerte bei Änderung der Feldstärken an der Oberfläche zu ermöglichen, wurden schließlich eine Nichtnegativitätsbedingung für die Oberflächenenergieanteile eingeführt. Es werden

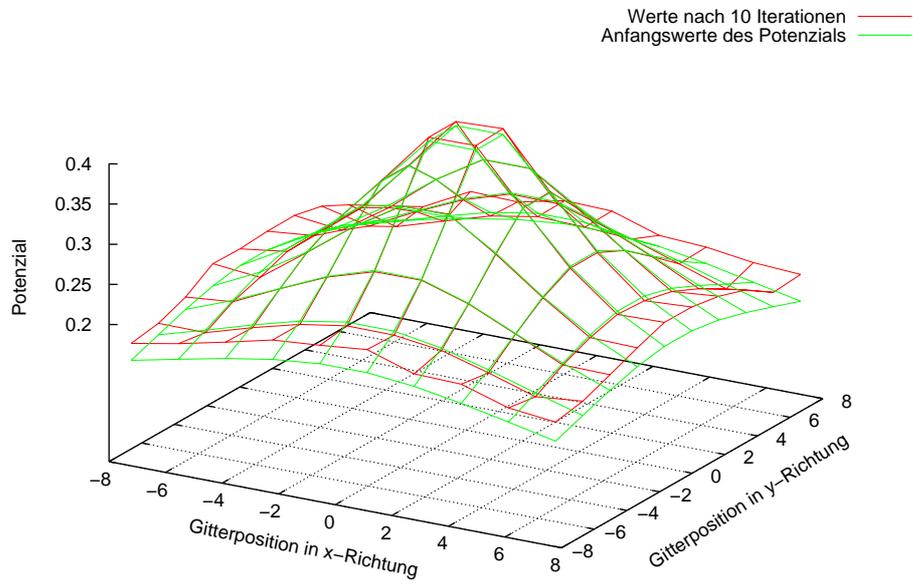


Abbildung 5.29: Potenzialwerte an der Oberfläche nach 10 Iterationsschritten

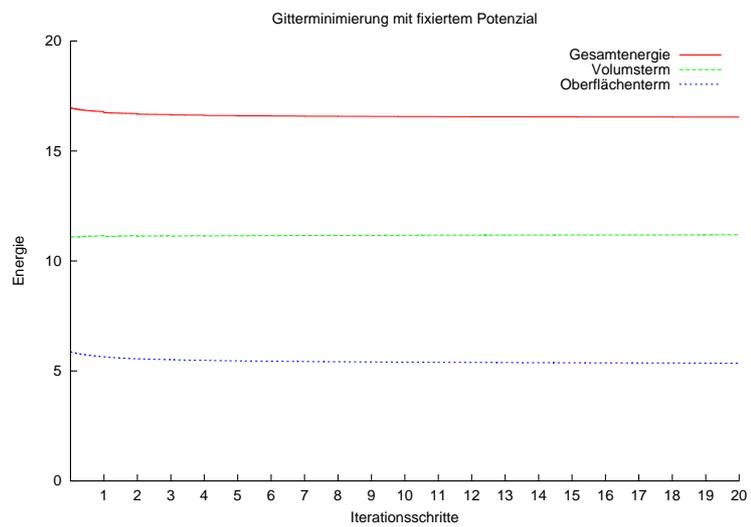


Abbildung 5.30: Energieverlauf bei Minimierung eines $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Gitters ohne Aktualisierung der Potenzialwerte

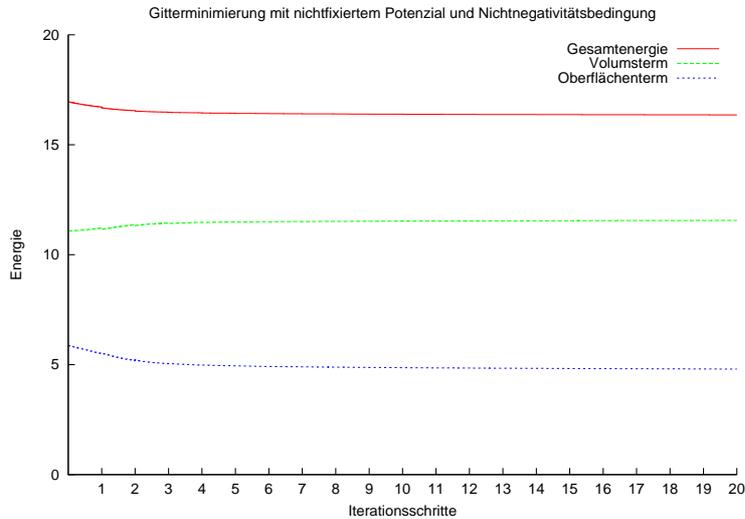


Abbildung 5.31: Energieverlauf bei Minimierung eines $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Gitters mit Aktualisierung der Potenzialwerte und Nichtnegativitätsbedingung der Oberflächenenergie

nur jene geänderten Punkte zugelassen, deren Oberflächenenergiesummen⁴ bei Änderung des Solitonfeldes positiv bleiben. Es zeigt sich, dass bei dieser Form der Einschränkung, die Gesamtenergie an der Oberfläche immer positiv bleibt und sich einem Grenzwert nähert - physikalisch unmögliche Lösungen werden dadurch verhindert. In Abbildung 5.31 erkennt man, dass bei der Oberflächenminimierung der $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Konfiguration mit Potenzialänderung und Verhinderung negativer Energiewerte die Gesamtenergie etwas kleiner wird als beim Minimierungsverfahren mit fixiertem Potenzial. Abschließend läßt sich zusammenfassen:

- Die Minimierung der Oberflächenterme liefert, wenn die Potenzialwerte aus den geänderten Feldstärken aktualisiert werden, bei hohen Iterationszahlen an den Kanten und Ecken unphysikalische Ergebnisse. Grundsätzlich sind die aus den Plaquetten gewonnenen Feldstärken an der Oberfläche, den Kanten und den Eckpunkten der $(+, +, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ zu groß (siehe Abbildung 3.16 in Kapitel 3.2). Die lineare Korrektur mindert diesen Überhang speziell an den Kanten und den Ecken zu wenig ab und durch die überhöhten Feldstärken wird das Potenzial in Richtung zu großer Werte aktualisiert.
- Zusätzlich entstehen durch den Minimierungsprozess bei Aktualisierung der Potenzialwerte negative Oberflächenenergiedichten, verursacht durch die lineare Abhängigkeit der Oberflächenterme vom elek-

⁴Berücksichtigt wird nicht nur die Oberflächenenergie am Punkt selbst, sondern auch Terme aller Nachbarn an der Gitteroberfläche

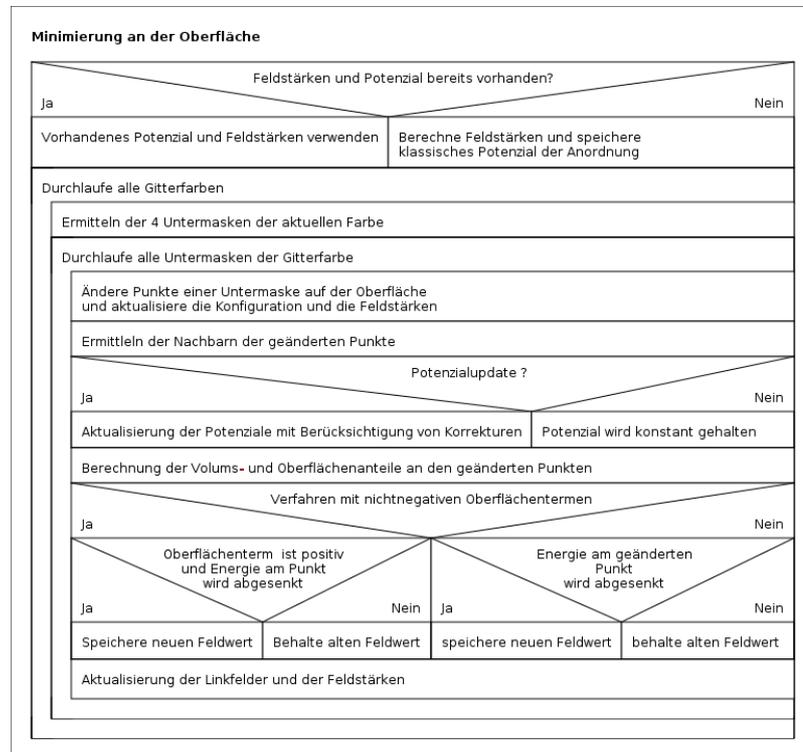


Abbildung 5.32: Struktogramm Oberflächenminimierung

trischen Potenzial und der elektrischen Feldstärke. Durch Einführung einer Nichtnegativitätsbedingung werden diese unphysikalischen Ergebnisse vermieden.

- Trotz der starken Potenzialänderungen in der Nähe der Kanten, bleibt das Potenzial auch bei hohen Iterationszahlen auf der restlichen Oberfläche fast konstant. Es scheint deshalb zulässig, im Falle großer Abstände von den Solitonzentren (elektrodynamischer Limes), das Potenzial bei der Minimierung auf den klassischen Werten zu belassen und nicht zu aktualisieren.
- Minimierungen der Oberflächenterme ohne Potenzialaktualisierung beziehungsweise Minimierungen mit Nichtnegativitätsbedingung liefern stabile Ergebnisse.

Die drei vorgestellten Verfahren sind noch einmal in Abbildung 5.32 schematisch dargestellt.

5.3 Überführung unterschiedlicher Konfigurationen ineinander

Bei der Erstellung der Anfangskonfigurationen aus den klassischen Feldern in Kapitel 3.2 wurde bei gleichnamigen Ladungen auf Grund der Notwendigkeit eines stetigen Überganges des Solitonfeldes von positiven zu negativen z -Werten im Gitter, zwei mögliche Anordnungen mit Hilfe des Feldlinienansatzes ermittelt. Die Konfiguration, welche im negativen z -Bereich um die z und x -Achse um den Winkel π verdreht ist, entspricht einer $(+, +, \pm 1, \pm 1)$ -Konfiguration und ist, wie bereits gezeigt wurde, bei Anwendung der Oberflächenminimierung stabil.

Die zweite Konfiguration, die aus Invertierung der unteren Hälfte des Solitonfeldes gewonnen wurde, entspricht - wie aus Berechnung der klassischen elektrischen Feldstärken bereits gezeigt - einer angeregten $(+, -, \pm 1, \pm 1)$ -Konfiguration. Bei Anwendung der Oberflächenminimierung sollte sich diese Anordnung in eine Feldkonfiguration wie in Abbildung (3.7) ausdrehen.

Dazu wurde eine Startkonfiguration einer angeregten $(+, -, 1, -1)$ -Konfiguration im Bereich $z < 0$ um den Winkel π um die z -Achse verdreht. Dies entspricht einer globalen Eichtransformation und hat keinen Einfluss auf die Gesamtenergie. Dann wurden - wie in den vorangegangenen Simulationen - 20 Iterationsschritte bestehend aus jeweils 10 Oberflächenminimierungen (entweder mit Potenzialaktualisierung und Nichtnegativitätsbedingung oder mit fixiertem Potenzial) und einer Volumsminimierung auf das Gitter angewendet und der Energieverlauf aufgezeichnet.

In Abbildung 5.33 ist das Ausdrehen dieser Konfiguration sehr gut erkennbar.

Bei beiden Verfahren kommt es zu einer Absenkung der Energie in Richtung der Energie des Grundzustandes. Die Energiewerte des Grundzustandes wurden an einer $(+, -, 1, -1)$ -Anordnung, deren Oberfläche mit der gleichen Schrittzahl energieminiert wurde, ermittelt. Man erkennt gut, dass sich die ausgedrehte Anregung den Energiewerten des Grundzustandes annähert (siehe Abbildung 5.34 und 5.35).

Bei der Betrachtung der Gesamtenergieverläufe in Abbildung 5.36 erkennt man, dass bei Fixierung des Potentials auf der Oberfläche die Gesamtenergie schneller abfällt als beim Verfahren mit Nichtnegativitätsbedingung.

5.4 Zusammenfassung

Vergleicht man die Ergebnisse der unterschiedlichen Energieminimierungsverfahren am Gitter mit fixierten Feldwerten an der Oberfläche, so ist eine sehr gute Übereinstimmung der Energiewerte nach Abschluss der Simulationen zu erkennen. (siehe Tabelle 5.1 für das Monte-Carlo-Verfahren in einer

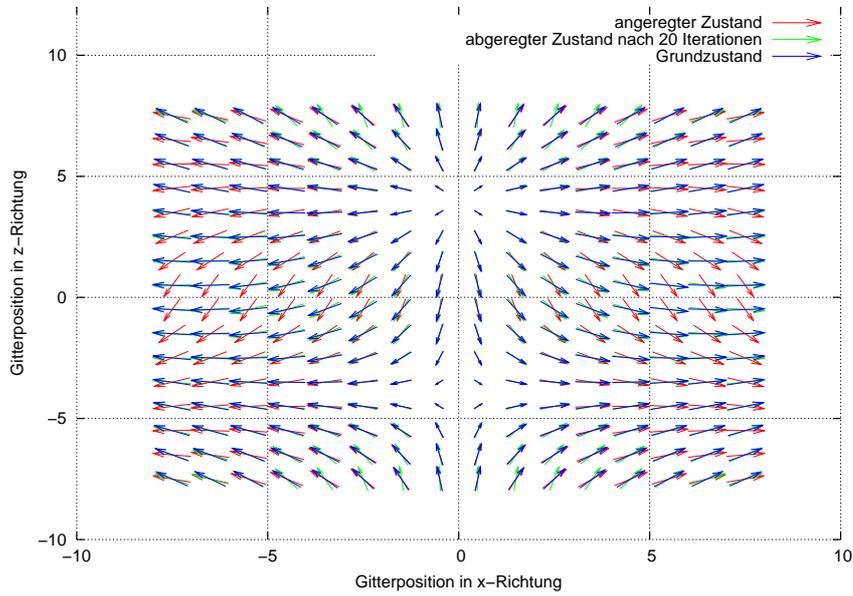


Abbildung 5.33: Ausdrehen einer angeregten $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ - Konfiguration in den Grundzustand

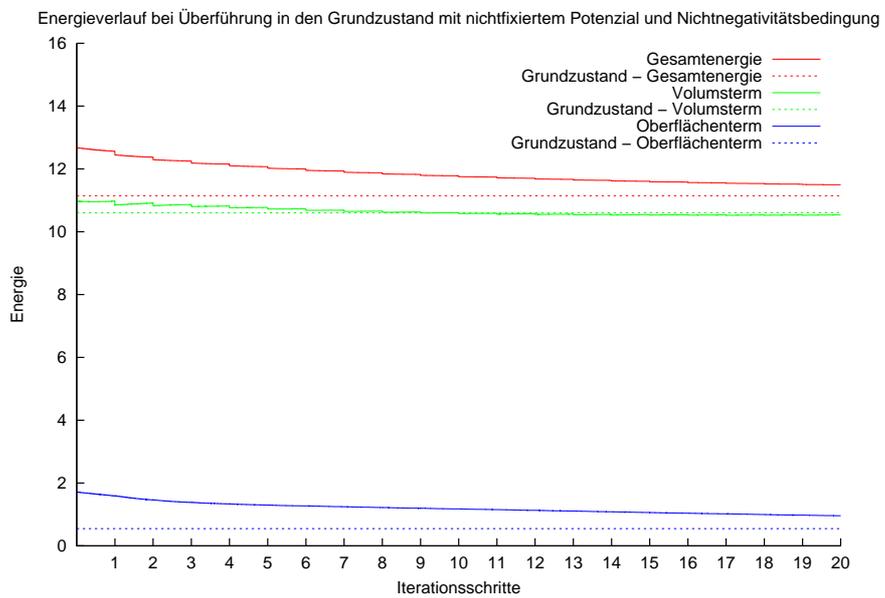


Abbildung 5.34: Verlauf der Energieanteile bei Abregung eines $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Zustandes mit Aktualisierung der Potenzialwerte und Nichtnegativitätsbedingung der Oberflächenenergie

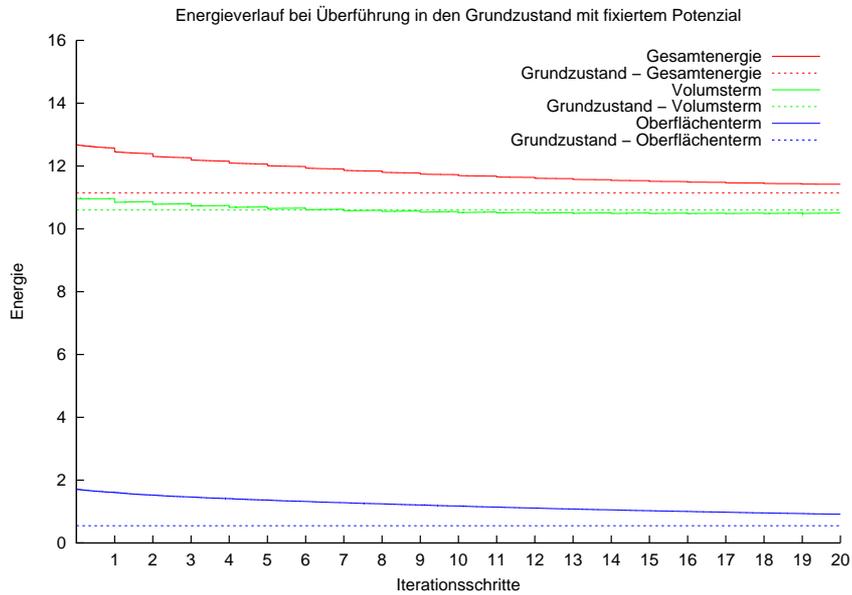


Abbildung 5.35: Verlauf der Energieanteile bei Abregung eines $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Zustandes mit fixiertem Potenzial

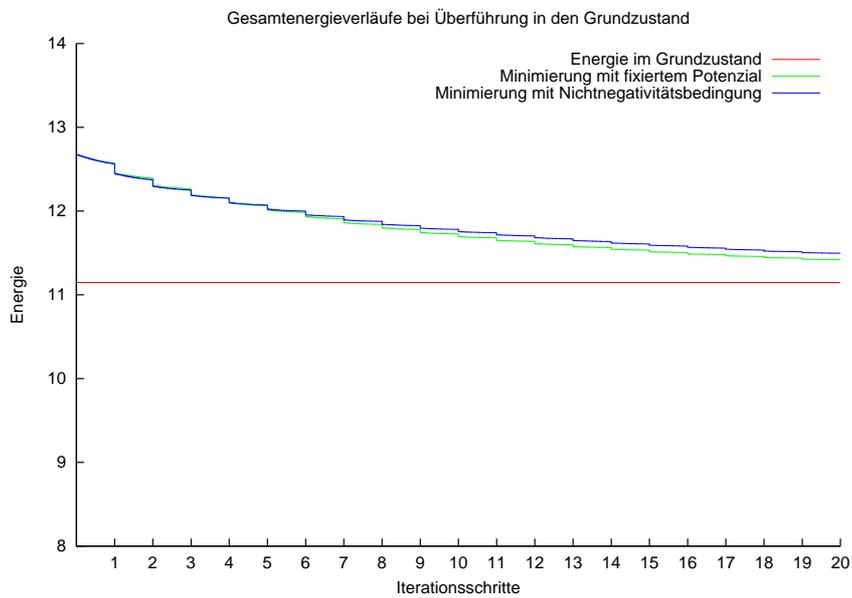


Abbildung 5.36: Gesamtenergieverlauf bei Abregung eines $(+, -, \mathbb{1}, -\mathbb{1})$ -Zustandes

Dimension und Tabelle 5.5 für das eindimensionale Gradientenverfahren beziehungsweise Tabelle 5.4 für das mehrdimensionale Monte-Carlo-Verfahren und Tabelle 5.6 für das mehrdimensionale Gradientenverfahren).

Betrachtet man die Laufzeit pro Iterationsschritt, so ist das Monte-Carlo-Verfahren am schnellsten, die Effektivität bei der Energieminimierung ist aber am geringsten. Im Gegensatz dazu weisen die beiden Gradientenverfahren bezüglich der Laufzeit großen Optimierungsbedarf auf - dafür werden aber nur sehr wenige Iterationsschritte benötigt. Speziell im Bereich der Feldaktualisierung nach Änderung der Solitonfelder sind große Effektivitätssteigerungen möglich.

Bei Minimierung der Dipolkonfigurationen zeigt sich, dass im elektrodynamischen Limes die Γ -Wirkung und die Wilsonwirkung gegen den gleichen Wert streben. Desgleichen ergeben sich analoge klassische Feldstärken, wenn man Bereiche in ausreichender Entfernung von den Solitonzentren wählt.

Bei der Minimierung der Oberflächenterme wurde das Monte-Carlo-Verfahren verwendet. Durch die Vielzahl der unterschiedlichen Integrationswege bei Aktualisierung der Potenzialwerte an Ecken und Kanten ist die Programmausführung im Vergleich zur Minimierung innerhalb des Gitters stark verlangsamt. Zusätzlich kann pro Farbgitter immer nur ein Viertel der Punkte minimiert werden, da es andernfalls zur Beeinflussung von Gitternachbarn kommt. Auch hier gibt es im Bereich der diversen Feldaktualisierungen großes Optimierungspotenzial.

Bei der Minimierung mit Berücksichtigung der Oberflächenterme, konnte eine angeregte $(+, -, \pm 1, \pm 1)$ - Konfiguration in den Grundzustand überführt werden. Um stabile Simulationen zu ermöglichen, war dazu das Einführen einer Nichtnegativitätsbedingung für die Oberflächenenergieanteile notwendig. Damit wurde gezeigt, dass mit Hilfe numerischer Methoden eine Energieminimierung mit Berücksichtigung der Oberflächenterme physikalisch sinnvolle Lösungen liefern kann.

Anhang A

Verwendete Pythonmodule

Im Folgenden werden die verwendeten Pythonmodule überblicksmäßig dargestellt. Genaueres zu den einzelnen Methoden ist in den einzelnen Modulen als Textkommentar angeführt.

A.1 Modul `SolitonDipoleSettings.py`

Das Modul enthält Parameter für die erstmalige Erzeugung von Dipolkonfigurationen.

A.1.1 Variablen

`parameters['startparameters']['latticesize']`

Anzahl der Gitterpunkte pro Raumrichtung.

`parameters['startparameters']['fixedboundarydirs']`

Gibt an, welche Oberflächen des Gitters fixiert werden.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['z_pos']`

Position der Solitonzentren.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['q_plus']`

Elektrische Ladung des Solitonzentrums an Position `+z_pos`.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['q_minus']`

Elektrische Ladung des Solitonzentrums an Position `-z_pos`.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['alpha']`

Rotationswinkel.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['pol_plus']`

Wert des Zentrumslements an Position `+z_pos`.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['pol_minus']`

Wert des Zentrumslements an Position `-z_pos`.

`parameters['startparameters']['Dipolparameters']['MC_kind']`

Einstellung für den Monte-Carlo-Algorithmus - bei Einstellung 0 wird die q_0 -Komponente variiert, bei Einstellung 1 der gesamte Solitonfeldvektor.

`parameters['constants']['beta']`

Kopplungskonstante $\frac{\alpha_f \hbar c}{4\pi}$.

`parameters['constants']['delta']`

Faktor für Gradientenanteil der Wirkung.

`parameters['constants']['r0']`

Größe des Solitons.

`parameters['constants']['minkowski']`

Gibt an, ob mit der Minkowski-Metrik gerechnet wird.

`parameters['constants']['potentialpower']`

Exponent des Potenzialterms der Wirkung.

`parameters['constants']['gradientpower']`

Exponent des Gradiententerms der Wirkung.

`parameters['MC']['spread']`

Streuungsintervall für die Zufallszahlen, verwendet im Monte-Carlo-Algorithmus.

`parameters['MC']['alt_spread']`

Alternatives Streuungsintervall für die Zufallszahlen, verwendet im Monte-Carlo-Algorithmus.

`parameters['MC']['ifcool']`

Einstellung, ob ausschließlich gekühlt wird oder der Metropolis-Algorithmus verwendet wird.

`parameters['MC']['elLimit']`

Einstellung, ob im elektrodynamischen Limes gerechnet wird.

A.2 Modul `SolitonDipole.py`

Klassenmodul für die Erzeugung von Dipolkonfigurationen¹.

A.2.1 Variablen

`actfactors`

Dictionary von Vorfaktoren für die Wirkungsanteile.

`configuration`

Enthält die Konfiguration des Solitondipols, bestehend aus den Variablen `SU2field`, `qfield` und `gamfield`. Zusätzlich ist ein Zufallszahlenobjekt `rng` gespeichert.

`latticeargs`

Dictionary von Gitterparametern.

`origin`

Ursprung des Koordinatensystems des Gitters.

`MCparameters`

Dictionary der Monte-Carlo-Parameter.

`startparameters`

Dictionary der Startparameter.

A.2.2 Methoden

```
SolitonDipole(Load_=None, exp="experiment")
```

Der Konstruktor erzeugt ein Dipolobjekt, bestehend aus Solitonfeld und davon abgeleitetem Gamma- und $SU(2)$ -Linkfeld.

¹Hilfsmethoden, die nur in der Klasse selbst verwendet werden, sind hier nicht angeführt. Sie sind im Modul `SolitonDipole.py` kommentiert

Parameter `Load`.

Name einer Dump-Datei einer Dipolkonfiguration - Vorgabewert `None`

Parameter `exp`

Name des Verzeichnisses, in dem die Daten der Konfiguration und Ergebnisse von Berechnungen abgelegt werden. Das Verzeichnis enthält zusätzlich die Unterverzeichnisse `data` und `graphics`. Das Verzeichnis `data` enthält Dumpdateien von Konfigurationen und von anderen Modulen erzeugte Datendateien. Das Verzeichnis `graphics` enthält erzeugte Grafiken und die dazu notwendigen Datendateien.

Beispiel:

```
#name of directory
exp = "Test"
Dipol1 = SolitonDipole.SolitonDipole(exp=exp)
```

Dipol1 wird mit den Anfangswerten aus `SolitonDipoleSettings.py` erzeugt. Zusätzlich wird das Verzeichnis `Test` samt Unterverzeichnissen angelegt.

Beispiel:

```
#name of directory
exp = "16_P_P_5_3"
#name of dumpfile stored in 16_P_P_5_3/data
df = "MC500SU2"
Dipol1 = SolitonDipole.SolitonDipole(exp=exp, Load=df)
```

Dipol1 wird aus der Dumpdatei `MC500SU2.bin` (die Endung `.bin` wird nicht angegeben) geladen.

```
dump(f_head="soliton_dump")
```

Die Konfiguration und deren Parameter werden in eine Datei gesichert.

Parameter `f_head`

Name der Dump-Datei (ohne Erweiterung `.bin`) für die Dipolkonfiguration.

```
Load(f_head="soliton_dump")
```

Die Konfiguration und deren Parameter werden aus einer Datei geladen.

Parameter `f_head`

Name der Dump-Datei (ohne Erweiterung `.bin`) für die Dipolkonfiguration.

Beispiel:

```
df = "Test1"
Dipol1.Load(f_head=df)
df = "Test2"
Dipol1.dump(f_head=df)
```

Die Konfiguration von Dipol1 wird aus der Datei `Test1.bin` geladen und in die Datei `Test2.bin` gespeichert.

```
updateconf(mode="SU2")
```

Die zugeordneten Gamma- beziehungsweise $SU(2)$ -Linkfelder werden aktualisiert. Notwendig bei Änderungen des Solitonfeldes, da die Energien und Feldstärken aus diesen Feldern berechnet werden.

Parameter `mode`

Gibt an, ob das $SU(2)$ -Linkfeld, das Gammafeld oder beide Felder aktualisiert werden. Möglich sind die Werte "SU2", "Gamma "oder "Both".

Beispiel:

```
Dipol1.updateconf(mode="Both")
```

Das $SU(2)$ -Linkfeld und das Gammafeld der Konfiguration wird aus dem Solitonfeld neu berechnet.

```
setfixedpoints(center, nearcenter, nearcenter2, nearcenter3, border)
```

Die angegebenen Bereiche der Konfiguration werden fixiert und werden bei Minimierungen nicht verändert.

Parameter `center`

Beide Solitonzentren werden fixiert (Vorgabewert `True`).

Parameter `nearcenter`

Die 6 nächsten Nachbarn der Solitonzentren werden fixiert (Vorgabewert `False`).

Parameter `nearcenter2`

Ein Würfel mit Schichtdicke 1 um die Solitonzentren wird fixiert (Vorgabewert `False`).

Parameter `nearcenter3`

Ein Würfel mit Schichtdicke 2 um die Solitonzentren wird fixiert (Vorgabewert `False`).

Parameter `border`

Das Feld wird an der Oberfläche fixiert (Vorgabewert `True`).

Beispiel:

```
Dipol1.setfixedpoints(nearcenter2=True)
```

Das Solitonfeld wird an den Zentren, den umgebenden Punkten mit Schichtdicke 2 und an der Oberfläche fixiert.

```
printqfield(fn_head="qfield.")
```

Das Solitonfeld wird als Textdatei ausgegeben.

Parameter `fn_name`

Name der Textdatei.

```
setqzeronearcenters(value)
```

Die q_0 -Werte des Solitonfeldes werden in der unmittelbaren Umgebung der Solitonzentren auf die vorgegebenen Werte gesetzt.

Parameter **value**

Wert für q_0 .

Beispiel:

```
Dipol1.setqzeronearcenters(0.85)
```

Die q_0 -Werte der Nachbarn der Solitonzentren werden auf den Wert 0,85 gesetzt. Notwendig beim Starten mancher Minimierungsroutinen.

```
invconfy(self)
```

Die Konfiguration wird im Bereich $z < 0$ in der y -Richtung invertiert.

```
rotconfpi(dir=2)
```

Die Konfiguration wird im jeweils unteren Bereich der vorgegebenen Richtung um den Winkel π gedreht. Vorgabewert ist die z -Richtung. Das Solitonfeld bleibt demnach für Koordinatenwerte $z > 0$ unverdreht.

Parameter **dir**

Drehrichtung.

Beispiel:

```
Dipol1.rotconfpi(dir=0)
```

Das Solitonfeld wird für Gitterpunkte, deren x -Koordinate < 0 ist, um den Winkel π verdreht.

A.3 Modul `dipoleaction.py`

Das Modul `dipoleaction.py` stellt Methoden zur Energieberechnung an einer Dipolkonfiguration zur Verfügung.

A.3.1 Methoden

```
surfaceactionclassic(sd,fs=None,classic=True,corr=True)
```

Es wird die Oberflächenenergie einer Konfiguration berechnet.

Parameter **sd**

Dipolkonfiguration

Parameter **fs**

Feldstärkenobjekt - ist dieses auf `None` gesetzt, wird abhängig vom Parameter `classic` ein Feldstärkeobjekt erzeugt.

Parameter `classic`

Wenn dieser Wert auf `True` gesetzt wird, erfolgt die Berechnung der Oberflächenenergie mit der klassischen Feldstärke, ansonsten mit der $SU(2)$ -Feldstärke der Dipolkonfiguration.

Parameter `corr`

Wenn dieser Wert auf `True` gesetzt wird, werden die Feldstärken an der Oberfläche durch eine lineare Extrapolation korrigiert.

Beispiel:

```
dipoleaction.surfaceactionclassic(Dipol1, fs=None, \
                                   classic=False, corr=True)
```

Die Oberflächenenergie der Dipolanordnung wird mit Hilfe der korrigierten $SU(2)$ -Feldstärke berechnet.

```
edSU2(sd)
```

Es wird die Energiedichte aus dem $SU(2)$ -Linkfeld der Dipolkonfiguration berechnet. Geliefert werden einerseits die Plaquettenanteile für jede Raumrichtung und die Gesamtsummen der potenziellen Energie und der Plaquettenenergie des angegebenen Dipolgitters. Plaquettenanteile, die sich aus periodischen Randbedingungen ergeben würden, sind unterdrückt.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration

Beispiel:

```
a = dipoleaction.edSU2(Dipol1)
```

`a[0]` enthält ein Plaquettenenergiedichtenobjekt, `a[1]` enthält die Gesamtenergie des Gitters. In `a[2]` und `a[3]` ist die Summe der Plaquettenenergie und die Summe der potenziellen Energie des Gitters gespeichert.

```
dipoleactionsum(sd, mode='SU2', gradstrength=0.0, border=False)
```

Es wird die Gesamtenergie der Dipolkonfiguration berechnet.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration

Parameter `mode`

Art der Energieberechnung. Möglich sind die Werte `SU2` oder `Gamma`.

Parameter `gradstrength`

Über diesen Parameter kann der Gradientenanteil der Wirkung zugeschaltet werden. Der Wertebereich liegt zwischen 0 und 1.

Parameter **border**

Gibt an, ob die Oberflächenanteile der Wirkung weggelassen werden sollen. Bei periodischen Randbedingungen können die Oberflächenanteile mitgerechnet werden, bei nichtperiodischen Begrenzungen sollten die Oberflächenanteile unterdrückt werden, da sie die berechneten Werte massiv verfälschen. Das Wegschalten der Oberflächenterme erfolgt durch Unterdrückung der Wirkungsanteile in Vorwärtsrichtung an den jeweiligen Maximalwerten der Gitterkoordinaten. Dadurch kommt es zu einer leichten Verfälschung der Energiesummen, da auch Energieanteile, die innerhalb dieser Begrenzungsflächen liegen, unterdrückt werden. Für genaue Berechnungen bei Verwendung der Wilsonwirkung eignet sich deshalb die Methode `edSU2` besser.

Beispiel:

```
a = dipoleaction.dipoleactionsun(Dipol1)
```

`a` enthält die Gesamtenergie der angegebenen Dipolkonfiguration

```
calcenergydensity(sd, simple=0)
```

Es wird die Energiedichte der Dipolkonfiguration berechnet. Es werden die Anteile der potenziellen Energie, der Γ -Energie und der $SU(2)$ -Energie zurückgegeben.

Parameter **sd**

Dipolkonfiguration

Parameter **simple**

Gibt an, ob die Energiedichte nur über die Vorwärtsrichtungen oder als Mittelwert über die Nachbarn eines Punktes im Gitter gerechnet werden sollen.

Beispiel:

```
a = dipoleaction.calcenergydensity(Dipol1)
```

`a` enthält die Energiedichte der angegebenen Dipolkonfiguration in Vorwärtsrichtung.

A.4 Modul `dipolefieldstrength.py`

Das Modul `dipolefieldstrength.py` stellt Methoden zur Feldstärkenberechnung an einer Dipolkonfiguration zur Verfügung.

A.4.1 Methoden

```
calcclassicfieldstrength(sd, fn_head=None)
```

Es wird die klassische elektrische Feldstärke und das klassische elektrische Potenzial einer Konfiguration berechnet.

Parameter **sd**

Dipolkonfiguration

Parameter `fn_head`

Name einer Textdatei, in der die Feldstärken und das Potenzial geschrieben werden..

Beispiel:

```
a = dipolefieldstrength.calcclassicfieldstrength(Dipol1)
```

`a` enthält in `a[color][0]` ein Array der E_x -Werte, in `a[color][1]` ein Array der E_y -Werte und in `a[color][2]` ein Array der E_z -Werte der Farbe `color`. In `a[color][3]` ist das Potenzial der Farbe `color` gespeichert.

```
surfacecorrection(sd, fso)
```

Die als Parameter `fso` übergebene Feldstärke wird an der Oberfläche mittels linearer Extrapolation korrigiert. Diese Methode ist nur für $SU(2)$ -Feldstärken verwendbar.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration

Parameter `fso`

$SU(2)$ -Feldstärkenobjekt.

```
calcfieldstrength(sd, mode='SU2')
```

Berechnet die elektrische Feldstärke aus dem Solitonfeld der Konfiguration.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration

Parameter `mode`

Art der Feldstärkenberechnung. Möglich sind die Werte `SU2` oder `Gamma`.

Beispiel:

```
a = dipolefieldstrength.calcfieldstrength(Dipol1)
dipolefieldstrength.surfacecorrection(Dipol1,a)
```

`a[0]` enthält die Farbfeldstärken, berechnet als Mittelwert über alle Plaquetten, `a[1]` enthält die daraus folgenden Feldstärken im elektrodynamischen Limes, `a[2]` speichert die Plaquettenanteile der Farbfeldstärken in Vorwärtsrichtung und in `a[3]` die daraus folgenden klassischen Feldstärken. Die Feldstärke wird anschließend korrigiert.

A.5 Modul `dipoleminimization.py`

Das Modul `dipoleminimization.py` stellt Methoden zur Minimierung der Energie einer Dipolkonfiguration zur Verfügung.

A.5.1 Methoden

```
minimizesurfaceaction(sd, sw=0.01, fname = "en.txt", notneg=True)
```

Es wird die Oberflächenenergie einer Konfiguration im elektrodynamischen Grenzfall minimiert.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration.

Parameter `sw`

Schrittweite für den Zufallszahlengenerator.

Parameter `fname`

Textdatei, für die Energiewerte.

Parameter `notneg`

Wenn `notneg` auf `True` gesetzt wird, werden nur Änderungen des Solitonfeldes akzeptiert, die nichtnegative Oberflächenenergien zur Folge haben.

Beispiel:

```
for i in range(10):
    dipoleminimization.minimizesurfaceaction(Dipol1, notneg=False)
```

Das Gitter der Konfiguration von `Dipol1` wird 10 mal an der Oberfläche minimiert. Der Energieverlauf wird in die Datei `en.txt` gespeichert. Negative Oberflächenterme werden nicht unterdrückt,

```
minqzero(sd, sw=0.1, aswt=1.0e-6, steps=1,
          itmax=10, plot=None, dump=None,
          mode="SU2", gradstrength=0., energyfile=None)
```

Die Energie des Gitters der angegebenen Dipolkonfiguration wird mit dem eindimensionalen Gradientenverfahren minimiert.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration.

Parameter `sw`

Anfangsschrittweite in Gradientenrichtung.

Parameter `aswt`

Schrittweite zur Bestimmung des Gradienten in einer Dimension.

Parameter `steps`

Anzahl der Minimierungsschritte.

Parameter `itmax`

Maximalanzahl der Iterationsschritte pro Minimierungsschritt.

Parameter `plot`

Wenn ein Name einer Datei angegeben wird, wird nach jedem Minimierungsschritt eine Grafik mit dem Solitonfeld in der xz -Ebene ausgegeben.

Parameter `dump`

Name der Datei, in der die minimierte Konfiguration nach Abschluss der Minimierung abgespeichert wird.

Parameter `mode`

Art der Wirkungsberechnung - mögliche Werte sind `SU2` beziehungsweise `Gamma`.

Parameter `gradstrength`

Stärke des Gradientenanteils der Wirkung.

Parameter `energyfile`

Name der Datei, in der die Energieanteile während der Minimierung protokolliert werden.

Beispiel:

```
dipoleminimization.minqzero(Dipol1, itmax=20, dump="Test")
```

Das Gitter der Konfiguration von `Dipol1` wird 20 mal minimiert. Nach Abschluss der Minimierung wird die Konfiguration im File `Test.bin` gespeichert.

```
minqfield(sd, sw=0.1, aswt=1.0e-6, anorm=1.e-15, steps=1,  
          itmax=10, plot=None, dump=None, mode="SU2",  
          gradstrength=0., energyfile=None, divmode=True)
```

Die Energie des Gitters der angegebenen Dipolkonfiguration wird mit dem mehrdimensionalen Gradientenverfahren minimiert.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration.

Parameter `sw`

Anfangsschrittweite in Gradientenrichtung.

Parameter `aswt`

Schrittweite zur Bestimmung des Gradienten.

Parameter `anorm`

Untergrenze für die Norm des Gradienten.

Parameter `steps`

Anzahl der Minimierungsschritte.

Parameter `itmax`

Maximalanzahl der Iterationsschritte pro Minimierungsschritt.

Parameter `plot`

Wenn ein Name einer Datei angegeben wird, wird nach jedem Minimierungsschritt eine Grafik mit dem Solitonfeld in der xz -Ebene ausgegeben.

Parameter `dump`

Name der Datei, in der die minimierte Konfiguration nach Abschluss der Minimierung abgespeichert wird.

Parameter `mode`

Art der Wirkungsberechnung - mögliche Werte sind `SU2` beziehungsweise `Gamma`.

Parameter `gradstrength`

Stärke des Gradientenanteils der Wirkung.

Parameter `energyfile`

Name der Datei, in der die Energieanteile während der Minimierung protokolliert werden.

Parameter `divmode`

Wenn `divmode` auf `True` gesetzt wird, wird die Anfangsschrittweite an die bereits erfolgten Minimierungsschritte angepasst, bei `False` wird sie nicht geändert.

Beispiel:

```
dipoleminimization.minqfield(Dipol1, itmax=30, plot="Plot", dump="Test")
```

Das Gitter der Konfiguration von `Dipol1` wird 30 mal mit dem mehrdimensionalen Gradientenverfahren minimiert und nach jedem Schritt als Grafik ausgegeben. Nach Abschluss der Minimierung wird die Konfiguration im File `Test.bin` gespeichert.

```
doMCsteps(sd, mode="SU2", fn_head="energyMC_",  
          steps=100, method=0)
```

Die Energie des Gitters der angegebenen Dipolkonfiguration wird mit dem Monte-Carlo-Algorithmus minimiert.

Parameter `sd`

Dipolkonfiguration.

Parameter `mode`

Art der Wirkungsberechnung - mögliche Werte sind `SU2` beziehungsweise `Gamma`.

Parameter `steps`

Anzahl der Minimierungsschritte.

Parameter `fn_head`

Name der Datei für die Aufzeichnung der Energiewerte.

Parameter `method`

Bei 0 wird nur die q_0 -Komponente variiert, bei 1 der gesamte Feldvektor.

Beispiel:

```
dipoleminimization.doMCsteps(Dipol1, steps=300, method=1)
Dipol1.dump("AfterMC")
```

Das Gitter der Konfiguration von `Dipol1` wird 300 mal mit dem Monte-Carlo-Algorithmus minimiert. Dabei wird bei der Minimierung der gesamte Feldvektor geändert. Abschließend wird die Konfiguration in der Datei `AfterMC.bin` gespeichert.

Anhang B

Mathematischer Anhang

B.1 Integralsätze

Gaußscher Integralsatz

$$\int_V d^3r (\vec{\nabla} \cdot \vec{a}) = \oint_{\partial V} d^2\vec{f} \vec{a} \quad (\text{B.1})$$

Stokesscher Integralsatz

$$\oint_F d^2\vec{f} (\vec{\nabla} \times \vec{a}) = \oint_{\partial F} d\vec{s} \vec{a} \quad (\text{B.2})$$

1. Greenscher Satz

$$\int_V d^3r [(\vec{\nabla} \phi) (\vec{\nabla} \chi) + \phi \Delta \chi] = \oint_{\partial V} d^2\vec{f} (\phi \vec{\nabla} \chi) \quad (\text{B.3})$$

2. Greenscher Satz

$$\int_V d^3r (\phi \Delta \chi - \chi \Delta \phi) = \oint_{\partial V} d^2\vec{f} (\phi \vec{\nabla} \chi - \chi \vec{\nabla} \phi) \quad (\text{B.4})$$

B.2 Die Gruppen $SO(3)$ und $SU(2)$

B.2.1 $SO(3)$

Die Gruppe $SO(3)$, die *spezielle, orthogonale Gruppe in drei reellen Dimensionen* ist die Gruppe der Drehungen in einem dreidimensionalen reellen Raum mit folgenden Eigenschaften:

$$SO(3) = \{\mathcal{R} : \mathbb{R}^3 \xrightarrow{\text{linear}} \mathbb{R}^3 \mid \det \mathcal{R} = +1, \mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathbb{1}\} \quad (\text{B.5})$$

Die Bedingung

$$\mathcal{R}^T \mathcal{R} = \mathbb{1} \quad (\text{B.6})$$

gewährleistet die Erhaltung der Norm und erfordert $\det \mathcal{R} = \pm 1$.

Die Einschränkung

$$\det \mathcal{R} = +1 \quad (\text{B.7})$$

bedeutet die Orientierungserhaltung bei Drehungen. Folglich sind Spiegelungen ausgeschlossen.

Aus (B.6) erhält man sechs Gleichungen und folglich drei freie Parameter. Eine mögliche Form der Darstellung ist die über eine Drehrichtung

$$\vec{n}_0 = \frac{\vec{n}}{n} \quad (\text{B.8})$$

und den Betrag von $\vec{n} \in [0, 2\pi]$ als Maß für den Drehwinkel (siehe [10], Exkurs über die Drehgruppe).

Damit läßt sich die passive¹ Drehung als

$$\vec{x}' = R(\phi)\vec{x} = (\vec{n}_0\vec{x})\vec{n}_0 - \vec{n}_0 \times \vec{x} \sin(\phi) - \vec{n}_0 \times (\vec{n}_0 \times \vec{x}) \cos(\phi) \quad (\text{B.9})$$

mit $|\vec{n}| = \phi \in [0, 2\pi]$ anschreiben.

Der erste Term bleibt als Projektion des Ortsvektors \vec{x} für beliebige Drehwinkel immer konstant, die beiden verbleibenden Terme beschreiben die Drehung um ϕ in der zur Drehachse normalen Drehebene. Betrachtet man infinitesimale Drehwinkel ϵ , so ergibt sich aus Gleichung (B.9)

$$\vec{x}' = (\vec{n}_0\vec{x})\vec{n}_0 - \vec{n}_0 \times \vec{x} \epsilon - \vec{n}_0 \times (\vec{n}_0 \times \vec{x}) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (\text{B.10})$$

Ausgeschrieben in Komponenten ergibt sich mit $\vec{n}_0 = \hat{n}$

$$\vec{x}' = \vec{x} - \epsilon \begin{pmatrix} 0 & -\hat{n}_3 & \hat{n}_2 \\ \hat{n}_3 & 0 & -\hat{n}_1 \\ -\hat{n}_2 & \hat{n}_1 & 0 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (\text{B.11})$$

¹Bei einer passiven Drehung wird das Koordinatensystem gedreht, die Objekte bleiben an Ort und Stelle. Im Gegensatz dazu, werden bei einer aktiven Drehung die Objekte des Raumes bei festgehaltenem Koordinatensystem verdreht

Die auftretenden Matrizen

$$\mathcal{J}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathcal{J}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathcal{J}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.12})$$

werden als *Erzeugende* bezeichnet - damit lassen sich infinitesimale Drehungen mit $\vec{\mathcal{J}} = (\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \mathcal{J}_3)$ als

$$\vec{x}' = \left(\mathbb{1} - \epsilon \vec{n}_0 \cdot \vec{\mathcal{J}} \right) \vec{x} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (\text{B.13})$$

darstellen. Bei Hintereinanderausführung von n Drehungen um den Drehwinkel $\epsilon = \frac{\phi}{n}$ folgt im Limes $n \rightarrow \infty$

$$\vec{x}' = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - \frac{\phi}{n} \vec{n}_0 \cdot \vec{\mathcal{J}} \right)^n \vec{x} = e^{-\vec{\phi} \cdot \vec{\mathcal{J}}} \vec{x} \quad (\text{B.14})$$

mit $\vec{\phi} = \phi \vec{n}_0$ mit $\phi \in [0, 2\pi]$. Die Erzeugenden bilden eine *Liesche Algebra* - das bedeutet, dass das *Liesche Produkt*

$$[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = \mathcal{J}_i \mathcal{J}_j - \mathcal{J}_j \mathcal{J}_i \quad (\text{B.15})$$

definiert ist und nicht aus der Menge der \mathcal{J}_i herausführt. Für die in (B.12) angeführten Matrizen findet man

$$[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = \epsilon_{ijk} \mathcal{J}_k \quad (\text{B.16})$$

Die Erzeugenden aus (B.14) vermitteln eine lokale Darstellung der Drehgruppe in der Umgebung der Einheit. Die Gruppe $SO(3)$ ist demnach eine Liegruppe² mit einer $so(3)$ -Algebra.

B.2.2 $SU(2)$

Die Gruppe $SU(2)$, die *spezielle, unitäre Gruppe in zwei komplexen Dimensionen* ist die Gruppe der Drehungen in einem zweidimensionalen komplexen Raum mit folgenden Eigenschaften:

$$SU(2) = \{ \mathcal{R} : \mathbb{C}^2 \xrightarrow{\text{linear}} \mathbb{C}^2 \mid \det \mathcal{R} = +1, \mathcal{R}^\dagger \mathcal{R} = 1 \} \quad (\text{B.17})$$

Die Gruppe $SU(2)$ ist isomorph zur Gruppe der Quaternionen mit Betrag 1 und demnach diffeomorph³ zur S^3 , der dreidimensionalen Einheitssphäre. Quaternionische Zahlen lassen sich mit Hilfe der Paulimatrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.18})$$

$$(\text{B.19})$$

²eine Gruppe mit der Struktur einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit

³es existiert eine bijektive, stetig differenzierbare Abbildung zwischen beiden Mannigfaltigkeiten, deren Umkehrabbildung auch stetig, differenzierbar ist

als

$$Q = \mathbb{1}q_0 + i\sigma_K q_K = \begin{pmatrix} q_0 + iq_3 & q_2 + iq_1 \\ q_2 - iq_3 & q_0 - iq_3 \end{pmatrix} \quad (\text{B.20})$$

darstellen. Die zugehörige Algebra $su(2)$ läßt sich am „Nordpol“ $Q = \mathbb{1}$ mit Hilfe der Paulimatrizen als linear unabhängige Einheitsvektoren erstellen. Das Liesche Produkt der Paulimatrizen liefert

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k = c_{ijk}\sigma_k \quad (\text{B.21})$$

mit c_{ijk} als *Strukturkonstante*. Verwendet man die Paulimatrizen als Erzeugende, so spricht man von der *Fundamental-* oder *definierenden* Darstellung⁴.

Eine weitere Darstellung ist die *reguläre* oder *adjungierte* über die Strukturkonstante c_{ijk} (siehe [15]).

$$T_{1(kj)} = 2i \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$T_{2(kj)} = 2i \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.22})$$

$$T_{3(kj)} = 2i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.23})$$

Aus dem Vergleich mit (B.12) erkennt man, dass die Gruppe $SO(3)$ und die Gruppe $SU(2)$ die selbe Lie-Algebra besitzen. Das bedeutet nicht, dass sie global isomorph sind. Im konkreten Fall läßt sich zeigen, dass die Gruppe $SU(2)$ die Überlagerungsgruppe der $SO(3)$ ist.

Die Elemente der $SO(3)$ lassen sich als Punkte innerhalb einer Kugel mit Radius $r \leq \pi$ darstellen. Die gegenüberliegenden Punkte auf der Kugeloberfläche werden als äquivalente Punkte angesehen.

Dieses Gebiet ist nicht einfach zusammenhängend, da sich ein geschlossener Weg, der bei fixer Achsrichtung der Drehung durch die Oberfläche der Kugel führt, nicht auf einen Punkt zusammenziehen läßt. Durch „Ankleben“ einer zweiten Kugel läßt sich nun jeder geschlossene Weg auf einen Punkt zusammenziehen.

Geometrisch betrachtet, entsteht bei der Verklebung der beiden Kugeln eine S^3 , welche isomorph zur Gruppe $SU(2)$ ist. Es läßt sich zeigen, dass jedem Element der $SO(3)$ zwei Elemente der $SU(2)$ zuordenbar sind, also die $SU(2)$ die $SO(3)$ zweifach überdeckt. (siehe [16])

⁴Die Darstellung einer Algebra bedeutet eine Zuordnung von $n \times n$ -Matrizen zu den Elementen der Algebra in der Weise, dass diese Matrizen dieselben algebraischen Relationen wie die Elemente der Algebra erfüllen

B.3 Das Konzept der Eichtheorien

Moderne Formulierungen von Feldtheorien beruhen auf dem Eichprinzip [14][12]. Es gibt einen engen Zusammenhang zwischen Eichtransformationen, dem Noether-Theorem und der Ladungserhaltung. Damit kann über dieses Konzept das Feld als Träger einer Ladung einsichtig verstanden werden [12].

B.3.1 Die Maxwelltheorie als Abelsche Eichtheorie

Die Lagrangedichte \mathcal{L} eines reellen Feldes $\Phi(x)$ ist abhängig vom Feld selbst und seinen Ableitungen. Die Feldgleichung erhält man aus dem Wirkungsprinzip.

$$\delta\mathcal{S} = \delta \int \mathcal{L} d^4x = 0. \quad (\text{B.24})$$

Die Dynamik des Systems erfolgt in der Weise, dass die Wirkung minimal ist.

Globale und lokale Eichinvarianz der Maxwelltheorie

Diese Lagrangedichte eines reellen Feldes ist unabhängig von einer allfälligen Skalierung mit einem Faktor a , wenn die Dichte homogen in der Feldgröße und ihren Ableitungen ist - üblicherweise treten quadratische Terme auf. Der Faktor fällt bei der Variation heraus.

Bei komplexen Feldern verfügt man über zwei Eichmöglichkeiten, wobei bei Normierung der Gesamtskalierung auf 1, ein Eichfreiheitsgrad überbleibt. Damit entspricht eine globale Eichtransformation einer Multiplikation des komplexen Feldes mit einer ortsunabhängigen Phase.

$$\Phi(x) \rightarrow \tilde{\Phi}(x) = e^{i\lambda}\Phi(x), \quad (\text{B.25})$$

eine eindimensionale unitäre Transformation. Ausdrücke wie

$$\Phi^*\Phi = |\Phi|^2 \text{ und } \partial_\mu\Phi\partial^\mu\Phi \quad (\text{B.26})$$

sind demnach invariant gegenüber diesen globalen Eichtransformationen.

Eine stärkere Forderung als die globale Eichinvarianz ist die lokale Eichinvarianz. Darunter versteht man Eichungen, die abhängig vom jeweiligen Raumzeitpunkt sind.

$$\Phi(x) \rightarrow \tilde{\Phi}(x) = e^{i\lambda(x)}\Phi(x) = \Lambda^{-1}(x)\Phi(x), \quad (\text{B.27})$$

Eine global eichinvariante Lagrangedichte ist genau dann lokal eichinvariant, wenn gilt

$$\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L}[\tilde{\Phi}(x), \tilde{d}\tilde{\Phi}(x)] = \mathcal{L}[\Phi(x), d\Phi(x)] \quad (\text{B.28})$$

Terme, die quadratisch von Φ abhängen, sind automatisch auch lokal eichinvariant.

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}^*(x)\tilde{\Phi}(x) &= (\Lambda^{-1}(x)\Phi(x))^*\Lambda^{-1}(x)\Phi(x) \\ &= \Phi^*(x)(\Lambda^{-1}(x))^*U(x)\Phi(x) = \Phi^*(x)\Phi(x)\end{aligned}\quad (\text{B.29})$$

Problematisch wird es bei den üblichen Ableitungen, weil mit

$$\begin{aligned}\widetilde{\partial_\mu\Phi}(x) &= \Lambda^{-1}(x)(\partial_\mu\Phi(x)) \\ &= \partial_\mu(\Lambda^{-1}(x)\Phi(x)) - (\partial_\mu\Lambda^{-1}(x))\Phi(x) \\ &= \partial_\mu\tilde{\Phi}(x) - (\partial_\mu\Lambda^{-1}(x))\Phi(x) \neq \partial_\mu\tilde{\Phi}(x)\end{aligned}\quad (\text{B.30})$$

sich die gewöhnliche Ableitung nicht in geeigneter Weise transformiert. Man führt deshalb eine neu definierte Ableitung ein, die *kovariante* Ableitung mit folgenden Eigenschaften:

- D_μ soll alle Eigenschaften einer normalen Ableitung besitzen,
- D_μ soll sich so transformieren, dass der Zusatzterm in Gleichung (B.30) verschwindet

Man setzt

$$D_\mu := \partial_\mu - igA_\mu(x) \quad (\text{B.31})$$

an, mit $A_\mu(x)$ als noch näher zu bestimmendes Vektorfeld⁵. Unter einer Eichtransformation erhält man

$$\widetilde{D}_\mu = \tilde{\partial}_\mu - ig\tilde{A}_\mu(x) = \partial_\mu - ig\tilde{A}_\mu(x). \quad (\text{B.32})$$

Daraus läßt sich das Transformationsverhalten des Vektorfeldes A_μ bestimmen - die mit Hilfe der neu definierten Ableitung gewonnene Lagrangedichte soll natürlich invariant unter lokalen Eichtransformationen sein. Folglich muss

$$\begin{aligned}\widetilde{D}_\mu\tilde{\Phi} &:= \Lambda^{-1}(x)(D_\mu(x)\Phi) = \Lambda^{-1}(x)D_\mu(x)\Lambda(x)\Lambda^{-1}(x)\Phi = \\ &= \tilde{D}_\mu(x)\tilde{\Phi}(x)\end{aligned}\quad (\text{B.33})$$

und folglich

$$\tilde{D}_\mu(x) = \Lambda^{-1}(x)D_\mu(x)\Lambda(x) \quad (\text{B.34})$$

gelten. Damit ergibt sich mit

$$\begin{aligned}\tilde{\partial}_\mu - ig\tilde{A}_\mu(x) &= e^{i\lambda(x)}(\partial_\mu - igA_\mu(x))e^{-i\lambda(x)} = \\ &= \partial_\mu - i(\partial_\mu\lambda(x)) - igA_\mu(x)\end{aligned}\quad (\text{B.35})$$

und schließlich

$$\tilde{A}_\mu(x) = A_\mu(x) + \frac{1}{g}\partial_\mu\lambda(x). \quad (\text{B.36})$$

Damit läßt sich folgender Satz formulieren[12] :

⁵g ist eine maßsystemsabhängige Kopplungskonstante, der Faktor i ist reine Konvention - damit wird A_μ ein reelles Feld.

Satz: Ist eine Lagrangedichte $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\Phi(x), \partial_\mu \Phi(x))$ mit $\Phi(x)$ als skalares komplexes Feld unter den Transformationen der Transformationsgruppe U_1 global eichinvariant, so läßt sich eine neue lokal eichinvariate Lagrangedichte dadurch konstruieren, indem man die normale Ableitung ∂_μ durch die kovariante Ableitung D_μ aus Gleichung (B.31) ersetzt. Da die Multiplikation zweier Gruppenelemente kommutativ ist, bezeichnet man solche Theorien als Abelsche Eichtheorien.

Das Feld $A_\mu(x)$ wird als Eichfeld bezeichnet. Eine physikalische Bedeutung des Eichfeldes kann es nur geben, wenn es für sich selbst physikalische Realität besitzt. Folglich sollte die Lagrangedichte zumindest einen Term enthalten, der ausschließlich aus dem Eichfeld A_μ und seinen Ableitungen gebildet wird.

$$\mathcal{L}_{total} = \mathcal{L}' + \mathcal{L}_E \text{ mit } \mathcal{L}_E = \mathcal{L}_E(A_\mu(x), \partial^\nu A_\mu(x)) \quad (\text{B.37})$$

Dieser Term muss wieder lokal eichinvariant sein. Damit kann \mathcal{L}_E nicht ausschließlich von $A_\mu(x)$ abhängen, da $A_\mu(x)$ selbst nicht eichinvariant ist. Damit sind „Massenterme“ der Form $\frac{m^2}{2}\Phi^*\Phi$, wie zum Beispiel bei der Lagrangedichte des Klein-Gordon-Feldes⁶ nicht möglich. Eichfelder sind demnach durchwegs masselos.

Ein eichinvarianter Ausdruck läßt sich mit Hilfe der kovarianten Ableitung von A_μ bilden.

$$\begin{aligned} \tilde{D}_\mu \tilde{A}_\nu &= \left(\partial_\mu - ig\tilde{A}_\mu \right) \tilde{A}_\nu = \partial_\mu \left(A_\nu + \frac{1}{g}\partial_\nu \lambda \right) - ig\tilde{A}_\mu \tilde{A}_\nu \\ \tilde{D}_\nu \tilde{A}_\mu &= \left(\partial_\nu - ig\tilde{A}_\nu \right) \tilde{A}_\mu = \partial_\nu \left(A_\mu + \frac{1}{g}\partial_\mu \lambda \right) - ig\tilde{A}_\nu \tilde{A}_\mu \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Die Ausdrücke in Gleichung (B.38) sind für sich selbst nicht eichinvariant, durch Differenzbildung entsteht ein antisymmetrischer Ausdruck

$$\tilde{D}_\mu \tilde{A}_\nu - \tilde{D}_\nu \tilde{A}_\mu = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu =: F_{\mu\nu}, \quad (\text{B.39})$$

der Feldstärketensor. Dieser ist lokal eichinvariant. Aus diesem Tensor läßt sich eine zusätzlich Lorentz-invariante Wirkungsgröße konstruieren⁷.

$$\mathcal{L}_E = \frac{1}{4}(D_\mu A_\nu - D_\nu A_\mu)(D^\mu A^\nu - D^\nu A^\mu) = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad (\text{B.40})$$

Noethertheorem, Noetherstrom und die Ladungserhaltung

Das Noether-Theorem (AMALIE „EMMY“ NOETHER): *Ist ein Systems invariant gegenüber kontinuierlichen Transformationen, so ergibt sich eine, dieser Transformation zugeordnete, Erhaltungsgröße des Systems.*

⁶ $\mathcal{L}_{KG} = \frac{1}{2}\partial_\mu \Phi^* \partial^\mu \Phi - \frac{m^2}{2}\Phi^* \Phi$

⁷ der Faktor $\frac{1}{4}$ ist Konvention.

Die Erhaltungsgrößen (zum Beispiel Energie oder Drehimpuls) sind dem Experiment zugänglich. Die Feldgleichungen ergeben sich aus der Variation (ohne Herleitung) der Wirkung in einer N -dimensionalen Mannigfaltigkeit

$$\delta S = \delta \int dx^N \mathcal{L}(\Phi, \partial_\mu \Phi, x) \quad (\text{B.41})$$

als Satz von M partiellen Differentialgleichungen

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi_a)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\Phi_a)} = 0, \quad a = 1, 2, \dots, M. \quad (\text{B.42})$$

Entwickelt man eine beliebige differenzierbare und von einem Parameter ϵ abhängige Transformation T an der Identität

$$T = \mathbb{1} + \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (\text{B.43})$$

so transformieren sich die Koordinaten wie

$$\tilde{x}^\mu = x^\mu + \alpha^\mu \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (\text{B.44})$$

und die Felder wie

$$\tilde{\Phi}_a(\tilde{x}) = \Phi_a(x) + \beta_a \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad (\text{B.45})$$

α^μ und β beschreiben die Art der Transformation auf Koordinaten und Felder. Man definiert nun den Noether-Strom N

$$N^\mu(x) := \sum_a \Pi^{a\mu} (\alpha^\nu \partial_\nu \Phi_a - \beta_a) - \mathcal{L} \alpha^\mu \quad (\text{B.46})$$

mit

$$\Pi^{a\mu} := \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi_a)} \quad (\text{B.47})$$

als kanonisch konjugiertes „Impuls“-Feld zu Φ_a . Es gilt folgender wichtiger Satz (Beweis siehe [13]):

Satz: Ist das Wirkungsintegral S invariant unter einer Transformation T , so ist der zugehörige Noetherstrom N^μ erhalten

$$\partial_\mu N^\mu = 0 \quad (\text{B.48})$$

Damit läßt sich eine zeitliche Erhaltungsgröße

$$Q := \int_{\text{Raum}} N^0 d^{N-1} \quad (\text{B.49})$$

aus der Zeitkomponente N^0 bilden, deren Zeitableitung

$$\dot{Q} = \frac{dQ}{dt} = \int_{\text{Raum}} \frac{\partial N^0}{\partial t} d^{N-1} = - \int_{\text{Raum}} \vec{\nabla} \vec{N} d^{N-1} = 0, \quad (\text{B.50})$$

weil die Oberflächenterme verschwinden, gleich 0 ist.

Damit erzeugen Eichtransformationen einen zugeordneten erhaltenen Noetherstrom, der im Falle der Maxwelltheorie genau dem Strom j^μ entspricht. Man sieht (Beweis siehe [12] und [13]) aus den Bewegungsgleichungen

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = ig \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \Phi - \Phi^* \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi^*)} \right) \quad (\text{B.51})$$

und dem Noetherstrom laut Gleichung(B.46)

$$N^\mu = i \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi)} \Phi - \Phi^* \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi^*)} \right), \quad (\text{B.52})$$

dass der Noetherstrom genau dem Viererstrom der Elektrodynamik entspricht.

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = gN^\nu \quad (\text{B.53})$$

Wegen der Eichinvarianz ist N^ν und damit auch j^ν erhalten und es folgt die bekannte Kontinuitätsgleichung der Elektrodynamik.

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \quad (\text{B.54})$$

Abschließend läßt sich dieser außergewöhnliche Zusammenhang als Eichprinzip zusammenfassen:

- Es sei eine freie, global eichinvariante Lagrangedichte für ein komplexes Feld gegeben
- Für eine lokal eichinvariante Lagrangedichte ersetzt man alle Ableitungen ∂_μ durch die kovariante Ableitung D_μ
- Das dadurch eingeführte Eichfeld A_μ muss das Transformationsverhalten aus (B.36) erfüllen.
- Zusätzlich führt man einen lokal eichinvarianten Zusatzterm aus Gleichung (B.40) ein.

Man erreicht damit die Kopplung des Eichfeldes A_μ an das Feld Φ und erhält weiters Bewegungsgleichungen, die als Inhomogenität den erhaltenen Noetherstrom enthalten.

B.3.2 Nichtabelsche Eichtheorien

Das Eichprinzip läßt sich auf nicht-Abelsche Liegruppen verallgemeinern [14]. In Bezug auf die Liegruppe $SU(N)$ spricht man auch von *Yang Mills-Theorie*.

Bei der Konstruktion der Lagrangedichte ist zu beachten, dass die Gruppe $SU(N)$ $N^2 - 1$ Generatoren T^a besitzt. Im Fall der $SU(2)$ sind das die drei Paulimatrizen. Damit verallgemeinert sich die kovariante Ableitung zu

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu - ig_N A_\mu^a T_a. \quad (\text{B.55})$$

Der kinetische Anteil der Lagrangedichte \mathcal{L} wird wieder über einen Feldstärketensor

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}^a T_a &= -\frac{i}{g_N} [D_\mu, D_\nu] = \\ &= (\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - g_N f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c) T_a \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

wobei die Kommutatorbeziehung

$$[T^a, T^b] = if_{abc} T^c \quad (\text{B.57})$$

mit der antisymmetrischen Strukturkonstante f_{abc} für die Generatoren T^a der Lie-Algebra verwendet wurde. Durch die zusätzlichen Terme im Feldstärketensor erhält man im kinetischen Term der Lagrangedichte (Herleitung siehe [14])

$$\mathcal{L}_{YangMills} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} \quad (\text{B.58})$$

Selbstkoppelungen der Eichfelder, die unter anderem Monopollösungen ermöglichen.

Schließlich sei noch der Mechanismus der *spontanen Symmetriebrechung* erwähnt, der im Standardmodell als zusätzliches Werkzeug für die theoretische Erklärung der Masse der Eichbosonen benötigt wird.

Literaturverzeichnis

- [1] Yakir Aharonov and David Bohm, Significance of Electromagnetic Potentials in Quantum Theory, *The Physical Review*, vol. 115, no. 3, p. 485-491, Aug 1959
- [2] Manfred Faber, A Model for Topological Fermions, TU Wien, 1999
- [3] Markus Heyerhoff, Die frühe Geschichte der SolitONENTHEORIE, Dissertation, Greifswald, 1997
- [4] Manfred Faber, Solitonen, Differenzialgeometrie und Topologie, Skriptum, TU Wien
- [5] Joachim Wabnig, Interaction in the Model of Topological Fermions, TU Wien 2001
- [6] Julia Fornleitner, Aufbau eines Simulationsprogramms zur Untersuchung des Phasenübergangs im Modell topologischer Fermionen, TU Wien 2005
- [7] István Montvay and Gernot Münster, *Quantum Fields On A Lattice*, Cambridge University Press, 1994
- [8] Heinz J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*, World Scientific Lecture Notes in Physics - Vol. 43
- [9] Manfred Faber and Alexander Kobushkin, Dipole Solution of MTF, TU Vienna and Bogolyubov Institute for Theoretical Physics. 2008
- [10] Florian Scheck, *Mechanik - Von den Newtonschen Gesetzen zum deterministischen Chaos*, Springer-Verlag, 1988
- [11] Florian Scheck, *Klassische Feldtheorie - Von der Elektrodynamik zu den Eichtheorien*, Springer-Verlag, 2002
- [12] Cornelius C. Noack, *Die Elektrodynamik als lokale Eichtheorie*, Vorlesungsskript, Universität Bremen
- [13] Cornelius C. Noack, *Das Noether-Theorem*, Vorlesungsskript, Universität Bremen

- [14] Dietmar Ebert, Eichtheorien - Grundlage der Elementarteilchenphysik, VCH Verlagsgesellschaft, 1989
- [15] Walter Greiner, Quantenmechanik - Symmetrien, Verlag Harry Deutsch, 2005
- [16] Jörg Resag, Die Symmetrie der Naturgesetze, Onlinedokument:
<http://www.joergresag.privat.t-online.de/mybk2htm/start2.htm>
- [17] William H. Press, Numerical Recipes, Cambridge University Press, 2007