Entscheidender Schritt zur Lösung des Protonen-Spin-Puzzles mit Hilfe von «Piz Daint»

Wissenschaftler der Forschungsgruppe von Constantia Alexandrou, Professorin am Cyprus Institute und der Universität Zypern gelang ein wichtiger Schritt bei der Lösung eines drei Jahrzehnte alten Puzzles: Sie entschlüsselten, wie sich der Eigendrehimpuls (Spin) des Nukleons aus seinen innersten Bestandteilen zusammensetzt. «Piz Daint» lieferte hierfür die benötigte Rechenpower.

Protonen und Neutronen bilden zusammen als Nukleonen die wesentlichen Bausteine der Atomkerne. Die beiden Teilchen sind jedoch aus noch kleineren Elementarteilchen, sogenannten Konstituentenquarks und Gluonen, aufgebaut. Jedes dieser Teilchen besitzt einen spezifischen Eigendrehimpuls (Spin). Die Kenntnis des Spins der Elementarteilchen ist für das Verständnis physikalischer und chemischer Prozesse von Bedeutung. Er ist verantwortlich für die fundamentalen Eigenschaften eines Materials, beispielsweise für die Phasenübergänge von nichtleitenden Materialien die bei sehr tiefen Temperaturen plötzlich zu sogenannten Supraleitern werden.

«Protonen Spin-Krise»

Theoretische Modelle gingen ursprünglich davon aus, dass sich der Spin der Nukleonen ausschliesslich aus seinen Konstituentenquarks zusammensetzt. Doch dann kam 1987 die sogenannten «Protonen Spin-Krise», ausgelöst durch Hochenergie-Experimente der European Muon Collaboration. Die Experimente am CERN (European Organization for Nuclear Research), DESY (Deutsches Elektronen-Synchrotron) und SLAC (Stanford Linear Accelerator Center) zeigten, dass die Quarks nur zu 30 Prozent zum Spin der Protonen beitragen. Seither war unklar, welche sonstigen «Effekte» in welchem Ausmass den Spin ausmachen. Die Studien der Hochenergiephysik liessen vermuten, dass unter anderem die dort sichtbar werdenden kurzlebigen Zwischenzustände von virtuellen Quark-Antiquark-Paaren – reine relativistische Quanteneffekte – dazu beitragen könnten.

Genau 30 Jahre später gelang es nun einer internationalen Forschungsgruppe diese rätselhaften Effekte in ihren Berechnungen auf «Piz Daint» zu entschlüsseln. Constantia Alexandrou, vom Computation-based Science and Technology Research Center des Cyprus Institute und Physik Departements der Universität von Zypern in Nicosia und Forscher vom DESY-Zeuthen und der Temple und Utah Universität in den USA, berechneten erstmals die quantitativen Beiträge der sogenannten Konstituentenquarks, Gluonen und Seequarks zum Nukleonen-Spin - Seequarks sind eine Art kurzlebige Zwischenzustände von virtuellen Quark-Antiquark-Paaren im Nukleon. Mit den Berechnungen gelang ihnen ein wichtiger Schritt zur Lösung des Puzzles, das zur «Protonen Spin-Krise» führte.

Um den Spin der einzelnen Teilchen zu ermitteln, müssen die Forscher in den Simulationen die reale physikalische Masse der Quarks berücksichtigen. «Dies ist numerisch herausfordernd, aber enorm wichtig, um sicher zu stellen, dass die in den Simulationen verwendeten Parameterwerte der Wirklichkeit entsprechen», sagt Karl Jansen vom DESY-Zeuthen und Co-Autor der Studie. Quarks wechselwirken untereinander über Gluonenteilchen, die sogenannte Farbladungen tragen. Die dabei wirkende, und von den Gluonen übermittelte, starke Kraft (starke Wechselwirkung), ist einer der vier Grundkräfte der Physik. Sie ist so stark, dass sie verhindert, dass ein Quark aus einem Proton herausgelöst werden kann. Diese als Confinement beschriebene Eigenschaft führt zu einer

enorm grossen Bindungsenergie, die schlussendlich die Teilchen im Nukleon zusammenhält. Die Forscher benutzten die Masse des Pions, ein Meson, das aus einem Up- und Down-Anti-Quark (Light Quark) besteht, um die physikalische Masse der Quarks in den Simulationen einzustellen. Stimmt die in den Simulationen berechnete Masse des Pions mit den experimentell ermittelten Wert überein, ist das für die Forscher ein Hinweis darauf, dass die tatsächlichen physikalischen Werte der Quarkmassen simuliert wurden. Genau dies gelang nun den Forschern um Alexandrou mit dem Projekt, das der Publikation zugrunde liegt, die heute in der Fachzeitschrift «Physical Review Letters» publiziert wurde.

In den Simulationen berücksichtigten sie darüber hinaus die Valenzquarks (Konstituentenquarks), Seequarks und Gluonen. Diesen «See» an Teilchen, und wie diese untereinander über die QCD wechselwirken, berechneten die Wissenschaftler mit Hilfe der Gittertheorie der Quanten Chromodynamik (Gitter QCD), auf einem sogenannten vierdimensionalen Euklidischen Gitter. (siehe Artikel vom 24. Juni 2016).

Aufwendige Umrechnung auf physikalische Werte

«Die grösste Herausforderung bei den Simulationen bestand darin, bei der Berechnung des "Spin-Beitrags" der Seequarks und Gluonen die statistischen Fehler zu reduzieren», sagt Alexandrou. «Ein massgeblicher Teil der Arbeit war die Renormierung der Werte.» Das heisst, die dimensionslosen Zahlen aus den Simulation so in physikalische Einheiten umzurechnen - wie etwa dem Spin der Konstituentenquarks, Seequarks und Gluonen, auf deren Suche die Forscher sind - dass sie mit dem Experiment verglichen werden können. Erstmals sind den Forschern diese Berechnungen gelungen. Sie mussten hierfür Millionen von sogenannten Propagatoren, die die Bewegung von Quarks zwischen zwei Raum-Zeit Punkten beschreiben, berechnen. «Das Beispiel zeigt, wie wichtig der Zugang zu derart leistungsstarke Supercomputer wie "Piz Daint" für die europäische Forschung ist», sagt Jansen. «Diese aufwendigen Simulationen waren nur dank der Leistungsstärke von "Piz Daint" möglich und weil wir die verwendeten Algorithmen für eine perfekte Ausnutzung der Graphikprozessoren im Vorfeld optimierten», ergänzt Alexandrou.

Literaturhinweis: Alexandrou C et al.: Nucleon Spin and Momentum Decomposition Using Lattice QCD Simulations, arXiv:1706.02973