Variationsstörungstheorie

Axel Pelster

Freie Universität Berlin

1. Einleitung:
   - 1.1. Grundlagen
   - 1.2. Quantenmechanisches Beispiel
2. Anwendungen:
   - 2.1. Weiche Materie
   - 2.2. Quantenstatistik
   - 2.3. Bose-Einstein-Kondensation
3. Ausblick

1.1. Grundlagen

Störungstheorie:

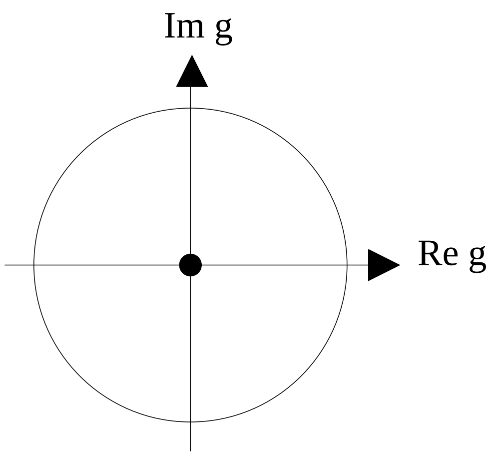
Schwachkopplungsreihe: $$f_N(g) = \sum_{n=0}^{N} a_n \, g^n$$

Beispiel:

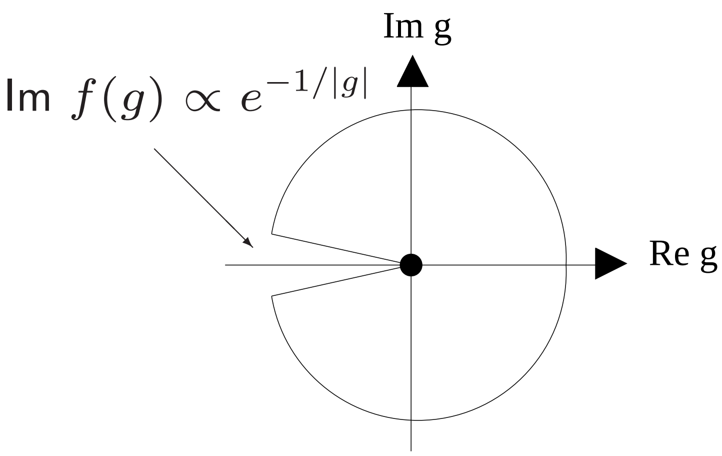
Anomales magnetisches Moment des Elektrons (QED)

Störungsreihe: Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante α

Analytische Eigenschaften:



konvergente Reihe



asymptotische Reihe

$$a_n \propto (-1)^n \, n!$$

Variationsstörungstheorie:

$\Longrightarrow$ Optimierung bezüglich Variationsparameter

$\Longrightarrow$ Resummation der Schwachkopplungsreihe

Grundgedanke:

Schwachkopplungsreihe: $$f_N(g) = \sum_{n=0}^{N} a_n \; g^n$$

Variationsstörungstheorie
im Starkkopplungslimes

Starkkopplungsreihe: $$f_M(g) = g^{p/q} \sum_{m=0}^{M} b_m \; g^{-2m/q}$$

Beispiel:

	p	q	p/q	$2/q$
anharmonischer Oszillator	1	3	$1/3$	$2/3$

1.2. Quantenmechanisches Beispiel

Anharmonischer Oszillator:

$$V(x) = \frac{1}{2}\,\omega^2 x^2 + g\,x^4$$

Schwachkopplungsreihe der Grundzustandsenergie:

$$E_0 = \frac{\omega}{2} + g\,\frac{3}{4\omega^2} - g^2\,\frac{21}{8\omega^5} + g^3\,\frac{333}{16\omega^8} + \dots$$

Identische Umformung:

$$V(x) = \underbrace{\frac{1}{2}\,\Omega^2 x^2}_{\text{effektiver harmonischer Oszillator}} + \underbrace{g\,x^4 + \frac{1}{2}\left(\omega^2 - \Omega^2\right) x^2}_{\text{Störung}}$$

Ω: Variationsparameter

Substitution:

$$V(x) = \frac{1}{2}\left(\Omega\sqrt{1 + g\,\frac{\omega^2 - \Omega^2}{g\Omega^2}}\right)^2 x^2 + g\,x^4$$

$$\omega \Rightarrow \Omega\sqrt{1 + gr}\,, \qquad r = \frac{\omega^2 - \Omega^2}{g\Omega^2}$$

Erste Ordnung:

$$E_0^{(1)} = \frac{\omega}{2} + g\,\frac{3}{4\omega^2}$$

$$E_0^{(1)}(\Omega) = \frac{\Omega}{4} + \frac{\omega^2}{4\Omega} + g\,\frac{3}{4\Omega^2}$$

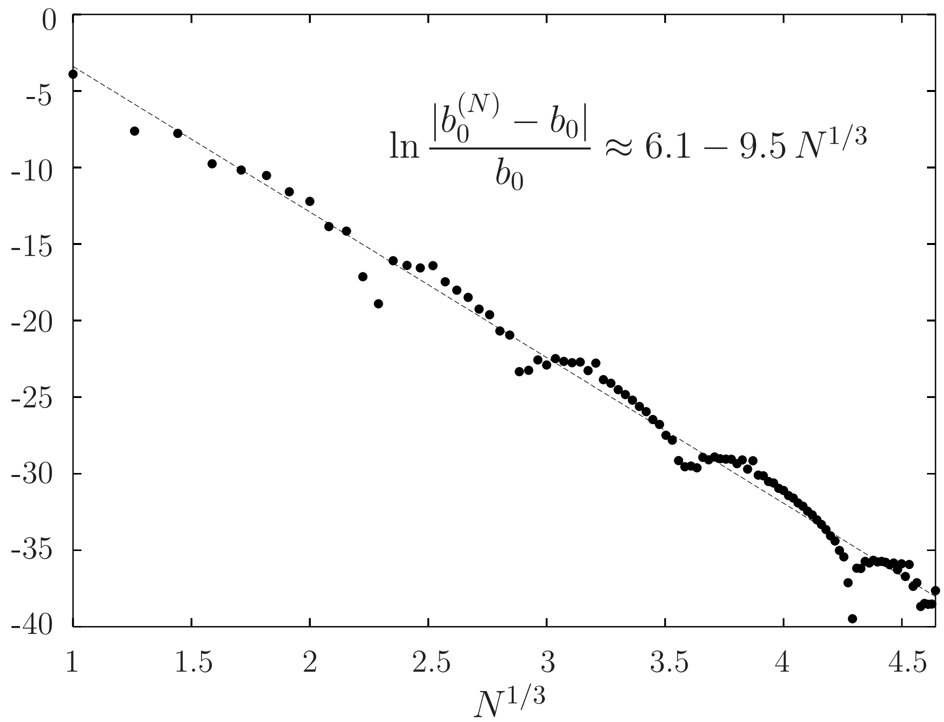
Prinzip der minimalen Sensitivität:

$$\frac{\partial E_0^{(1)}(\Omega)}{\partial \Omega} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Omega^{(1)} \quad \Rightarrow \quad E_0^{(1)} \approx E_0^{(1)}(\Omega^{(1)})$$

Starkkopplungslimes $g \to \infty$:

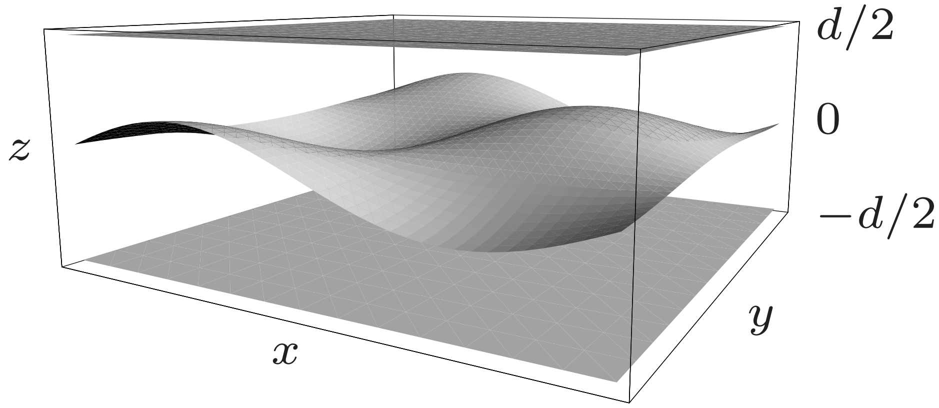
$$E_0^{(1)} = g^{1/3}\left(b_0^{(1)} + b_1^{(1)}\,g^{-2/3} + b_2^{(1)}\,g^{-4/3} + \ldots\right)$$

Exponentielle Konvergenz:



2.1. Weiche Materie

Modell:



Harmonische Krümmungsenergie:

$$E = \frac{\kappa}{2} \int d^2x \left[\boldsymbol{\nabla}^2 \varphi(\mathbf{x}) \right]^2$$

κ: Krümmungssteifigkeit

$\varphi(\mathbf{x})$: vertikale Auslenkung bei $\mathbf{x} = (x, y)$

Druckgesetz:

$$p = \alpha \frac{(k_B T)^2}{\kappa (d/2)^3}$$

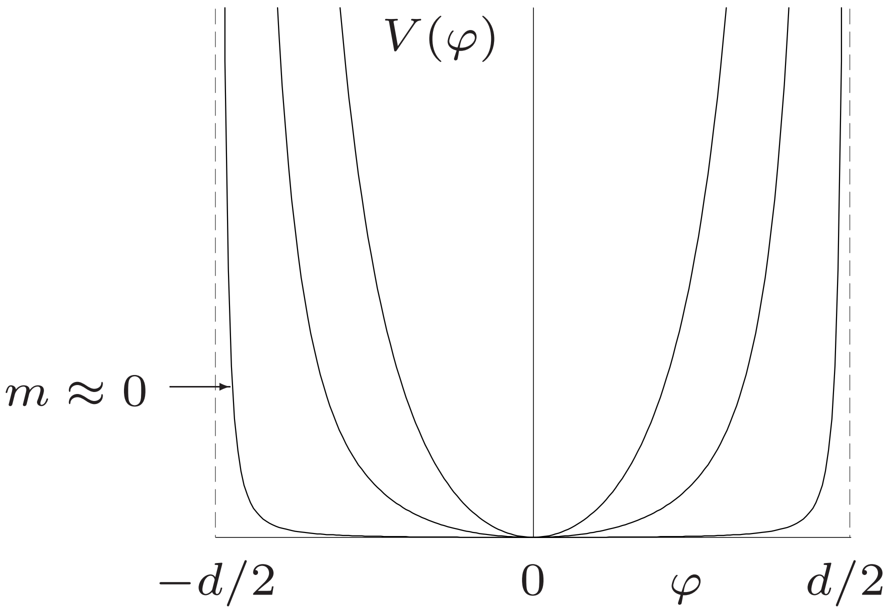
W. Helfrich: Z. Naturforschung **A 33**, 305 (1978)

Zustandssumme:

$$
\begin{aligned}
Z &= \prod_{\mathbf{x}} \left[\int_{-d/2}^{+d/2} \frac{d\varphi(\mathbf{x})}{\sqrt{2\pi k_B T/\kappa}} \right] \\
&\quad \times \exp\left\{ -\frac{\kappa}{2k_B T} \int d^2x \, [\boldsymbol{\nabla}^2 \varphi(\mathbf{x})]^2 \right\}
\end{aligned}
$$

Potential beschränkt Fluktuationen:

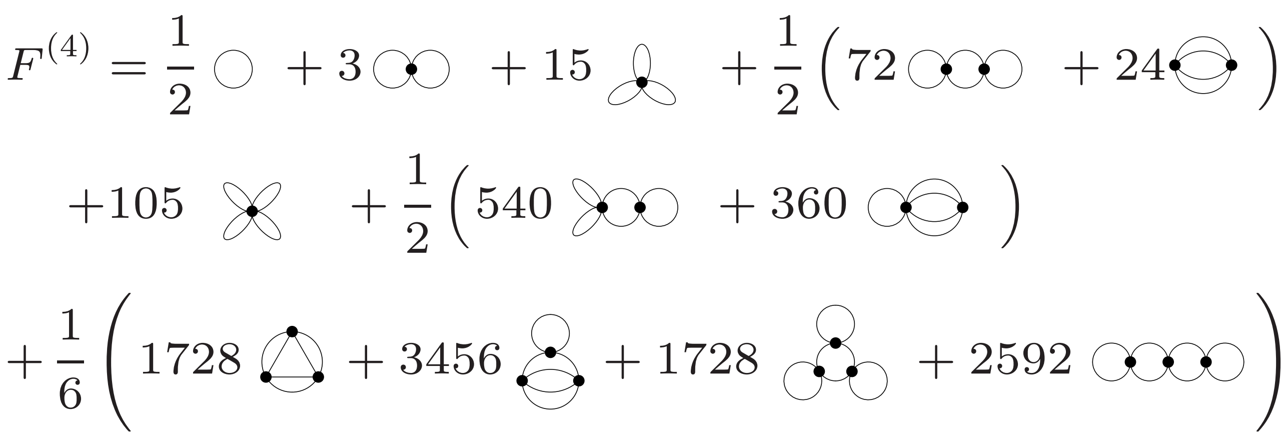
$$
V(\varphi) = m^4 \frac{d^2}{\pi^2} \tan^2\left(\frac{\pi\varphi}{d}\right)
$$



Taylor-Reihe:

$$
V(\varphi) = m^4 \varphi^2 + m^4 \frac{\pi^2}{d^2} \left\{ \frac{2}{3} \varphi^4 + \frac{17}{45} \frac{\pi^2}{d^2} \varphi^6 + \dots \right\}
$$

Freie Energie:



Schwachkopplungsreihe:

$$F^{(L)} = m^2 \sum_{n=0}^{L-1} a_n \left(\frac{\pi^2}{m^2 d^2} \right)^n$$

Starkkopplungslimes ($m \to 0$): $\alpha_{\mathrm{VPT}}^{(4)} \approx 0.0797$

M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster: Phys. Lett. **A 261**, 127 (1999)

Monte-Carlo Ergebnis: $\alpha_{\mathrm{MC}} = 0.0798 \pm 0.0003$

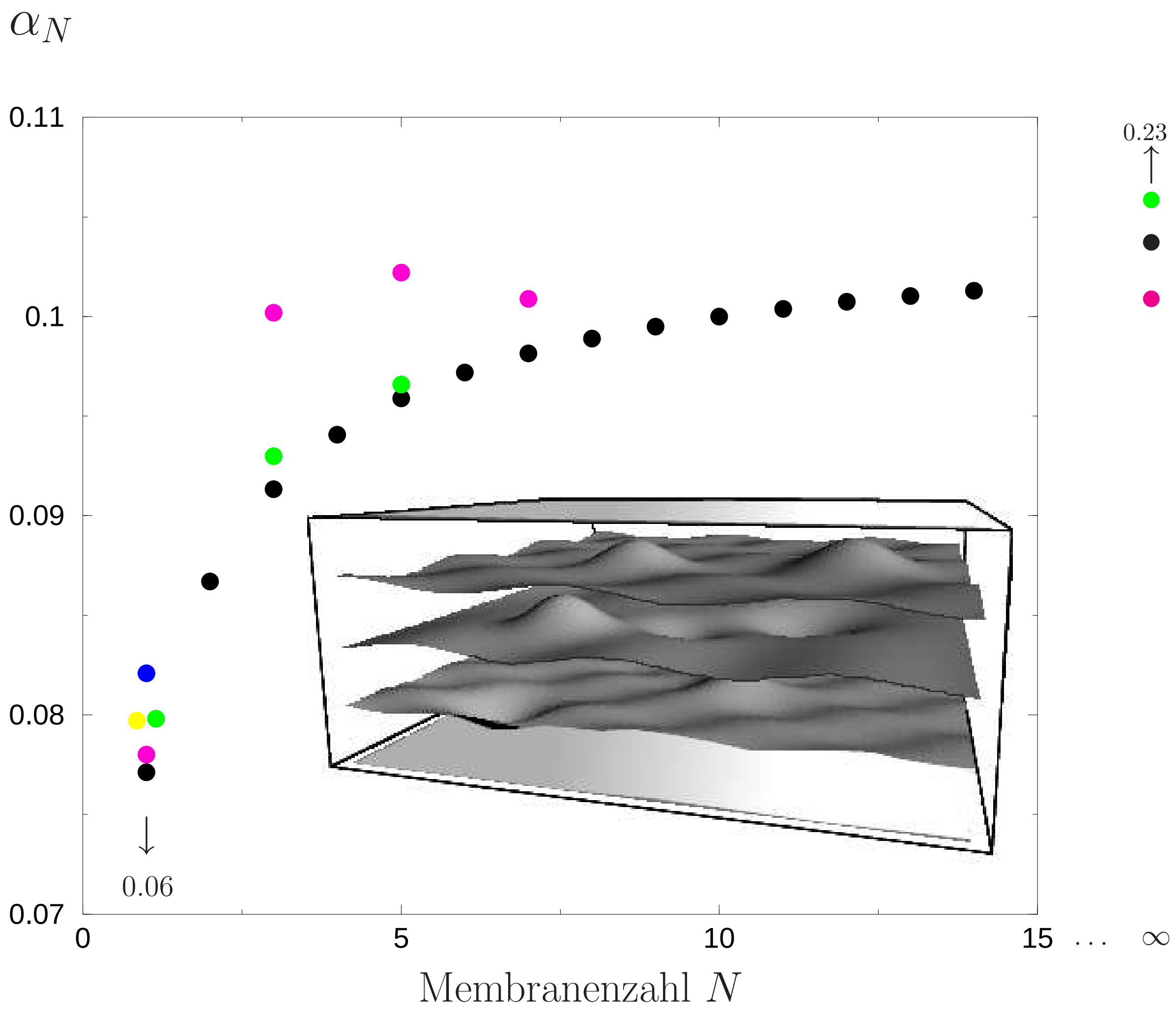
W. Janke, H. Kleinert: Phys. Lett. **A 117**, 353 (1986)
G. Gompper, D.M. Kroll: Europhys. Lett. **9**, 59 (1989)

5-/6-Schleifen-Ergebnis:

$\alpha_{\mathrm{VPT}}^{(5)} \approx 0.0820, \qquad \alpha_{\mathrm{VPT}}^{(6)} = 0.0821 \pm 0.0005$

B. Kastening: Phys. Rev. **E 66**, 061102 (2002); in Bearbeitung

Membranstapel: $$p = \alpha_N \frac{(k_B T)^2}{\kappa (d/2)^3}$$



[$\uparrow$] W. Helfrich: Z. Naturforsch. **A 33**, 305 (1978)

[$\downarrow$] W. Janke, H. Kleinert: Phys. Lett. **A 117**, 353 (1986)

[●] W. Janke, H. Kleinert, M. Meinhart: Phys. Lett. **B 217**, 525 (1989)

[●] G. Gompper, D.M. Kroll: Europhys. Lett. **9**, 59 (1989)

[●] M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster: Phys. Lett. **A 261**, 127 (1999)

[●] M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster: Phys. Rev. **E 63**, 051709 (2001)

[●] B. Kastening: Phys. Rev. **E 66**, 061102 (2002); in Bearbeitung

2.2 Quantenstatistik

Zustandssumme:

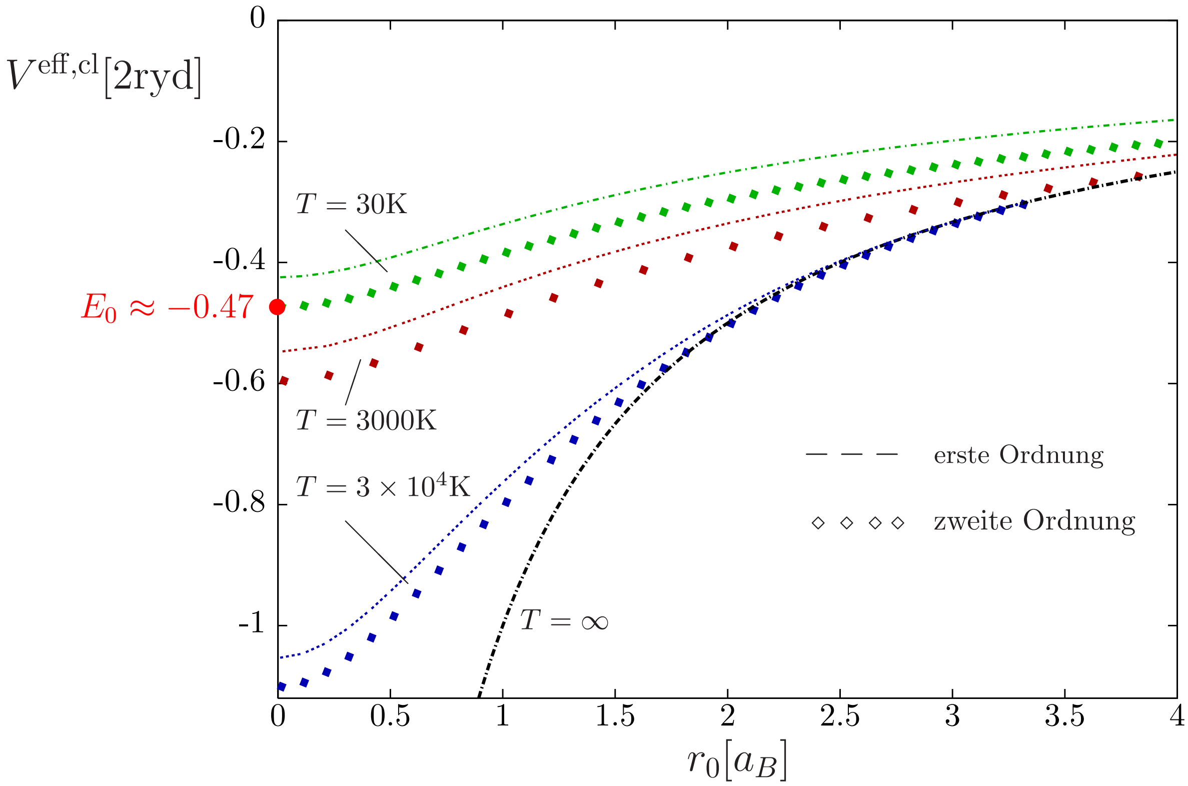
$$Z = \left(\frac{Mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \int d^3\mathbf{x_0}\;\exp\left[-\frac{V^{\mathrm{eff,cl}}(\mathbf{x_0})}{k_BT}\right]$$

R.P. Feynman, H. Kleinert: Phys. Rev. **A 34**, 5080 (1986)

Harmonisches System:

$$V_\Omega^{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = \frac{M}{2}\,\Omega^2(\mathbf{x_0})\,(\mathbf{x}-\mathbf{x_0})^2$$

Effektives klassisches Potential: Wasserstoffatom

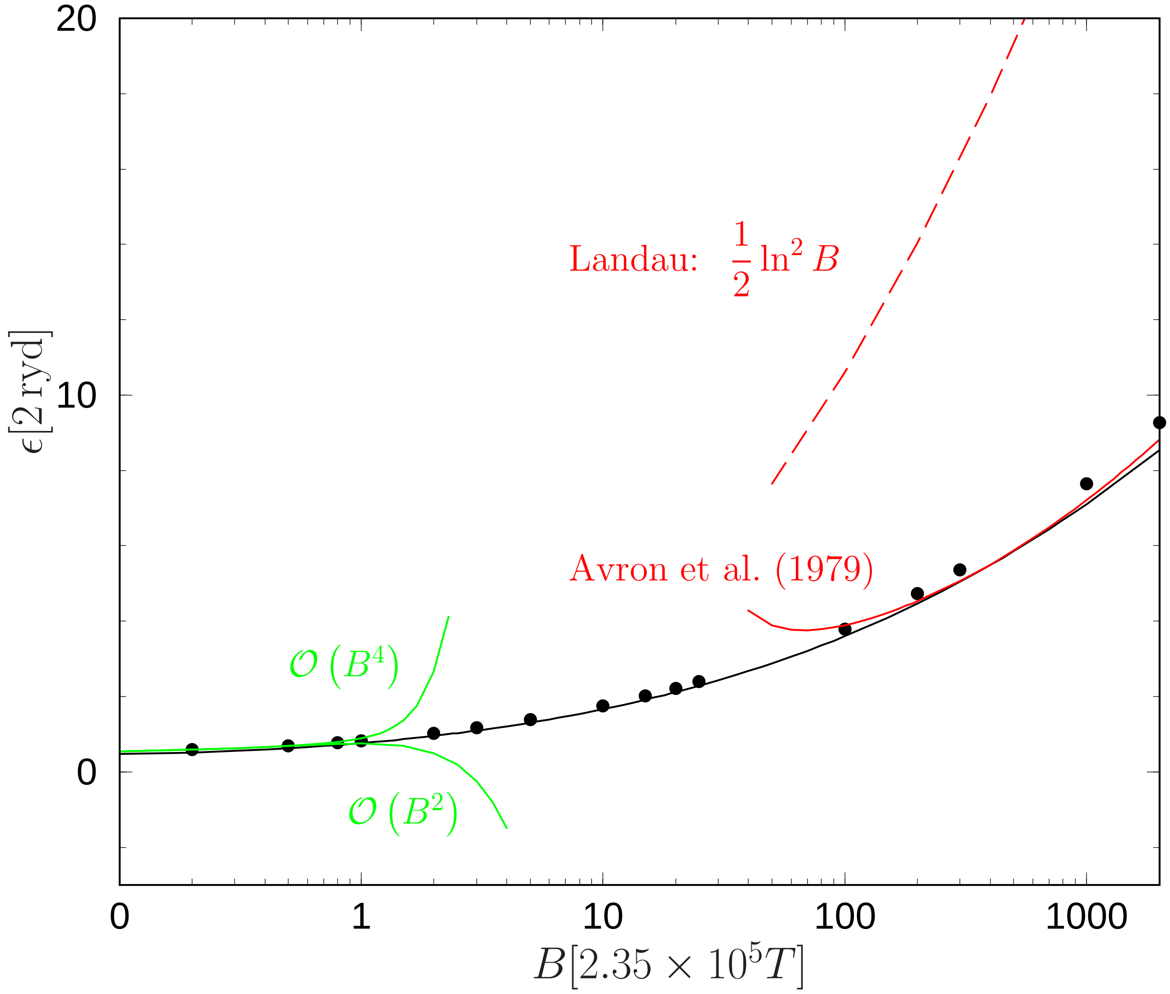


H. Kleinert, W. Kürzinger, A. Pelster: J. Phys. **A 31**, 8307 (1998)

Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld (ohne Spin):

$$H = \frac{1}{2M}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{2}\mathbf{B}\times\mathbf{r}\right)^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{r}|}\,, \qquad \mathbf{B} = B\,\mathbf{e}_z$$

Bindungsenergie: $\epsilon(B) = B/2 - E_0(B)$



—— : M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster: Phys. Rev. **A 62**, 52509 (2000); Phys. Lett. **A 279**, 23 (2001)

•••• : J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin: Ann. Phys. **147**, 57 (1983); H. Ruder, G. Wunner, H. Herold, F. Geyer: Springer (1994)

2.3 Bose-Einstein-Kondensation

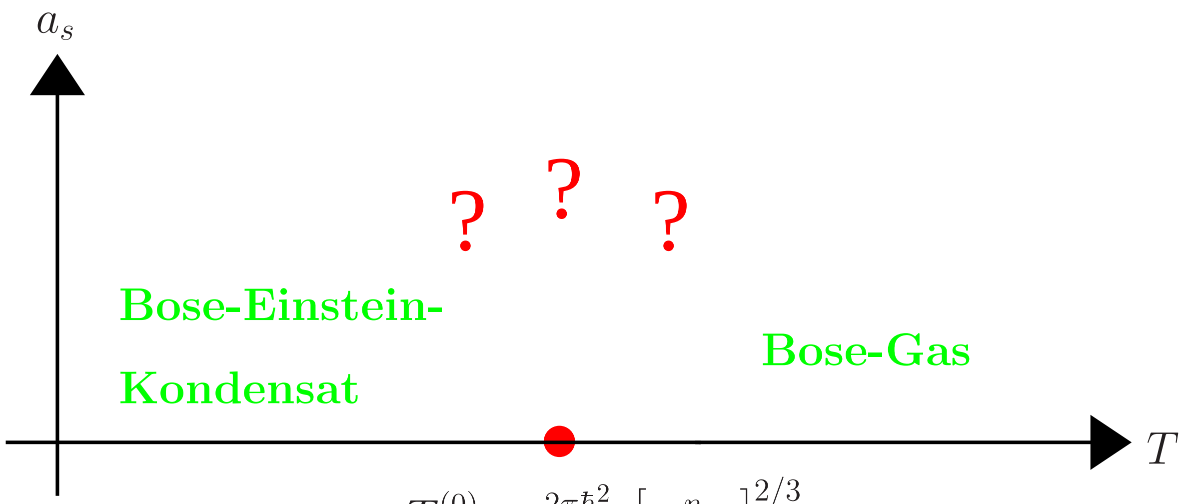
Modell:

Bose-Gas mit lokaler, repulsiver 2-Teilchen-Wechselwirkung

$$\mathcal{L}^{(3+1)} = \psi^* \left(\hbar\, \partial_\tau - \frac{\hbar^2}{2M} \boldsymbol{\Delta} - \mu \right) \psi + \frac{g}{2} |\psi|^4$$

s-Wellenstreulänge: $$a_s = \frac{M}{4\pi\hbar^2}\, g$$

Ziel: a_s-T-Phasendiagramm



$$T_c^{(0)} = \frac{2\pi\hbar^2}{Mk_B} \left[\frac{n}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3}$$

Methoden:

- $T > T_c$: Störungstheorie bezüglich a_s
- $T < T_c$: Schleifenentwicklung

$\Longrightarrow$ Resummation mit Variationsstörungstheorie

Hochtemperaturnäherung:

$$\mathcal{L}^{(3+1)} \Longrightarrow \mathcal{L}^{(3)} = \frac{1}{2}|\boldsymbol{\nabla}\psi_0|^2 + \frac{1}{2}m^2|\psi_0|^2 + \frac{u}{4!}|\psi_0|^4$$

Matsubara-Nullmode: ψ_0 ; $m^2 \propto -\mu$, $u \propto a_s$

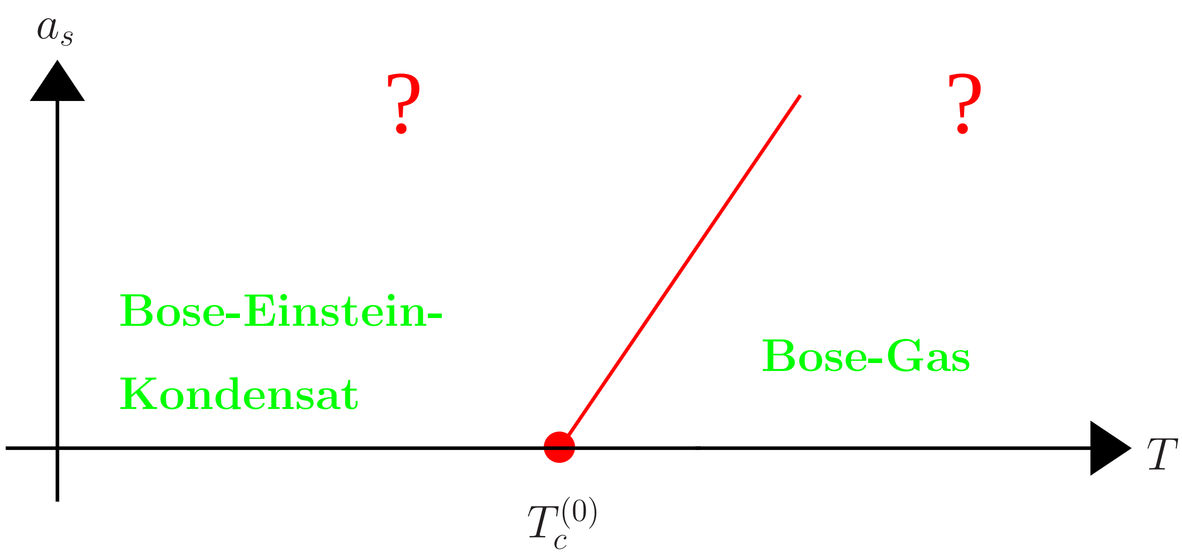
Kritische Temperatur für verdünntes Bose-Gas:

$$\frac{\Delta T_c}{T_c^{(0)}} \approx -\frac{2}{3}\frac{\Delta n}{n} \approx c\, a_s\, n^{1/3}, \qquad c^{(N)} = \sum_{k=1}^{N} c^{(k)} \left(\frac{u}{m_r}\right)^k$$

kritischer Limes $m_r \to 0$ $\Longleftrightarrow$ Starkkopplungsproblem

Ergebnisse für c:

Kleinert (2002)	5-Schleifen VPT	1.23 ± 0.17
Kastening (2003)	6-/7-Schleifen VPT	1.27 ± 0.11
Svistunov et al. (2001)	Monte-Carlo	1.29 ± 0.05
Arnold, Moore (2001)	Monte-Carlo	1.32 ± 0.02



1-Schleifen-Resultat: Effektives Potential

$$
\begin{aligned}
\mathcal{V}(\Psi,\Psi^*) &= V\left(-\mu|\Psi|^2+\frac{g}{2}|\Psi|^4\right) \\
&\quad +\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) + k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln[1-e^{-E(\mathbf{k})/k_B T}] \\
E(\mathbf{k}) &= \sqrt{[\epsilon(\mathbf{k})-\mu+2g|\Psi|^2]^2-g^2|\Psi|^4}
\end{aligned}
$$

Extremalisierung in Ψ, Ψ^*:

$$
\begin{aligned}
\text{Kondensatdichte:}\quad n_0(\mu,T) &= \Psi^*\Psi \\
\text{Großkanonisches Potential:}\quad \Omega(\mu,T) &= \mathcal{V}(\Psi,\Psi^*) \\
\text{Teilchendichte:}\quad n(\mu,T) &= -\frac{1}{V}\frac{\partial\Omega(\mu,T)}{\partial\mu}
\end{aligned}
$$

Elimination von μ und VPT-Resummation:

$$
\begin{aligned}
n &= n_0+\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{\epsilon(\mathbf{k})+gn}{\sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2+2gn\epsilon(\mathbf{k})}} \\
&\quad \times\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{e^{\sqrt{\epsilon(\mathbf{k})^2+2gn\epsilon(\mathbf{k})}/k_B T}-1}\right)
\end{aligned}
$$

Dispersion: $\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M}\,, \qquad \sum_{\mathbf{k}} = V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$

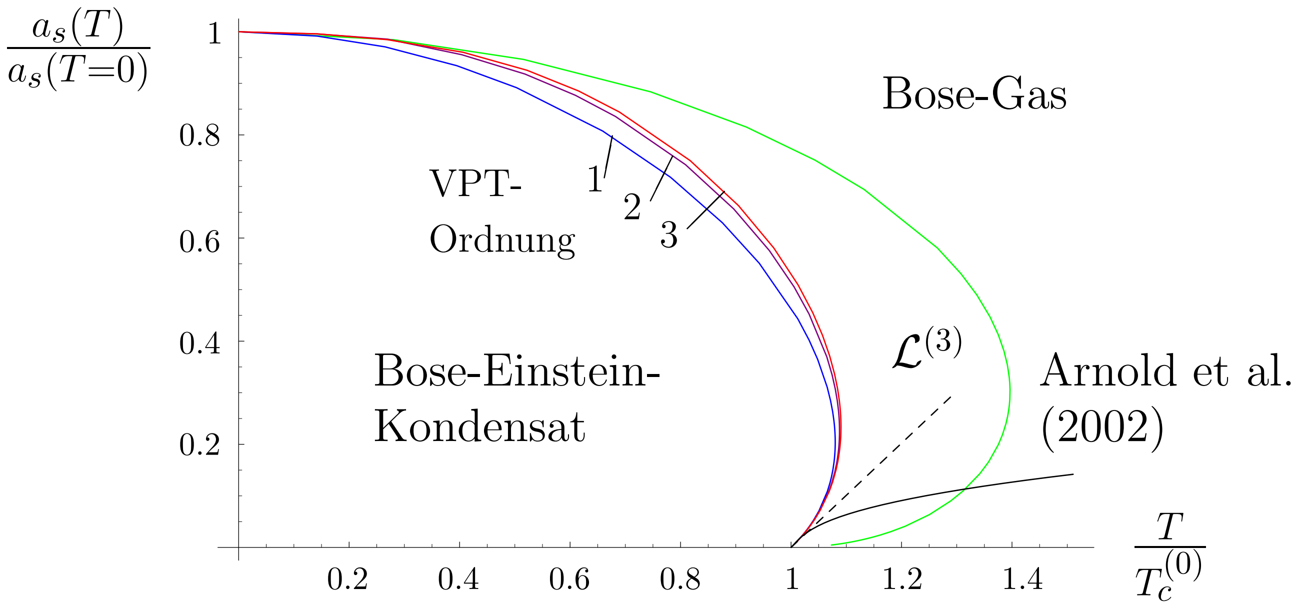
Phasenübergang: $n_0 \equiv 0$

$$\left(\frac{9\pi}{64}\right)^{1/3} = a_s n^{1/3} \left[1 + \frac{3\alpha}{16} I(\alpha)\right]^{2/3}$$

$$I(\alpha) = \int_0^\infty dx \, \frac{x\alpha + 8}{2\sqrt{x\alpha + 16}\,\left(e^{\sqrt{x + x^2\alpha/16}} - 1\right)}$$

$$\alpha = \left(\frac{T}{a_s\, n^{1/3} \zeta(3/2)^{2/3}\, T_c^{(0)}}\right)^2$$

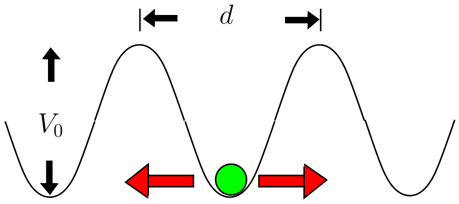
Berechnetes Phasendiagramm:



H. Kleinert, S. Schmidt, A. Pelster: in Bearbeitung

BEC im optischen Gitter:

$$V(\mathbf{x}) = V_0 \sum_{i=1}^{3} \sin^2\left(\frac{\pi x_i}{d}\right)$$



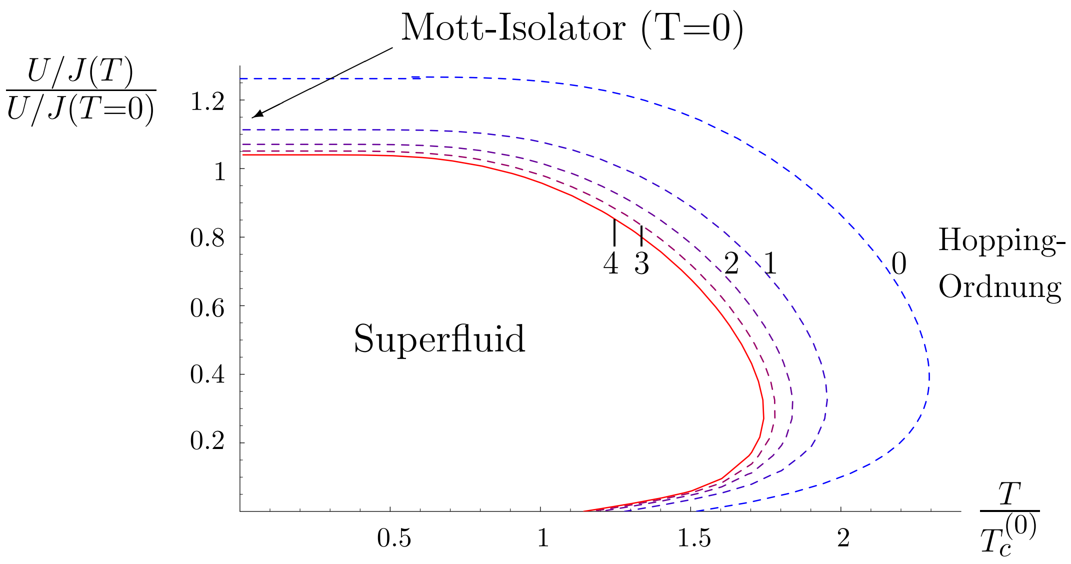
Dispersion:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = 2J \sum_{i=1}^{3} (1 - \cos k_i d)\,, \qquad \sum_{\mathbf{k}} = V \prod_{i=1}^{3} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \frac{dk_i}{2\pi}$$

Phasenübergang: $n_0 \equiv 0$

$$F\left(\frac{k_B T}{J}, \frac{U}{J}\right) = 0\,, \qquad U = g\,n$$

Berechnetes Phasendiagramm:



Experiment (Greiner et al.: 2002): $U/J(T=0) \approx 33-36$

Quantenphasenübergang: $U/J(T=0) \approx 31$

H. Kleinert, S. Schmidt, A. Pelster: in Bearbeitung

3.1. Andere Anwendungen

Quantenstatistik:

- Höhere Ordnungen
  F. Weißbach, A. Pelster, B. Hamprecht: Phys. Rev. **E 66**, 036129 (2002)
- Dichtematrizen
  M. Bachmann, H. Kleinert, A. Pelster: Phys. Rev. **A 60**, 3429 (1999)
- Tunnelamplituden
  B. Hamprecht, H. Kleinert: `hep-th/0302124`

Nichtlineare dynamische Systeme:

A. Pelster, H. Kleinert, M. Schanz: Phys. Rev. **E 67**, 016604 (2003)

Grenzflächen:

C.M. Bender, A. Pelster, F. Weißbach: J. Math. Phys. **43**, 4202 (2002)

Kritische Exponenten:

H. Kleinert, V. Schulte-Frohlinde: *Critical Properties of ϕ^4-Theories*, World Scientific (2001)

3.2. Weitere Fragestellungen

Weiterentwicklung der Variationsstörungstheorie:

- Verschiedene Kopplungskonstanten
- Konfluente Singularitäten

Weiche Materie:

Adhäsion von Vesikeln an Oberflächen

$$E = \int d^2x \left\{ \frac{\kappa}{2} \left[\boldsymbol{\nabla}^2 \varphi(\mathbf{x}) \right]^2 + \nu \left[\boldsymbol{\nabla} \varphi(\mathbf{x}) \right]^2 \right\}$$

Bose-Einstein-Kondensation:

- Einfluß der Falle auf das Phasendiagramm
- Magnetische Dipol-Dipol-Wechselwirkung

Zeitlich verzögerte Systeme:

$$\dot{q}(t) = N\left(q(t), q(t-\tau)\right)$$

- C. Simmendinger, A. Pelster, A. Wunderlin: Phys. Rev. **E 59**, 5344 (1999)
- M. Schanz, A. Pelster: Phys. Rev. **E 67**, 056205 (2003)
- M. Schanz, A. Pelster: SIAM Journal on Applied Dynamical Systems (in press)