

Divergenza delle serie perturbative

Laureando
Manuel Deodato

Relatore
Claudio Bonati

Università di Pisa



Introduzione

In meccanica quantistica, molti problemi non si risolvono esattamente \rightarrow si risolvono perturbativamente, scrivendo $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V}$, con \hat{H}_0 noto e $\lambda \ll 1$.

Così facendo, energie e stati si sviluppano in serie:

$$E = E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \dots$$

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle^{(0)} + \lambda |\psi\rangle^{(1)} + \lambda^2 |\psi\rangle^{(2)} + \dots$$

Potrebbe sembrare che la condizione di *perturbazione piccola*, definita dalla richiesta $\lambda \ll 1$, assicuri la validità dello sviluppo, ma questo non è vero in generale: in molti casi, le serie perturbative divergono.

L'obiettivo è di capire cosa causa questa divergenza e trovare delle condizioni per cui la convergenza è assicurata; a tale scopo, si considererà il caso specifico dell'oscillatore armonico perturbato da un potenziale quartico come riferimento per il caso generale.

L'oscillatore anarmonico

Particella 1D in potenziale (prendendo $m = 1$, $\omega = 1$)

$$\hat{V} = \frac{1}{2}\hat{x}^2 + \frac{1}{2}g\hat{x}^4$$

L'energia del fondamentale è della forma $E = 1/2 + \sum g^n E^{(n)}$. Per studiare lo sviluppo, si nota che le funzioni d'onda degli stati eccitati dell'oscillatore armonico si scrivono come il prodotto di un polinomio per $e^{-x^2/2}$, quindi si cercano soluzioni all'equazione di Schrödinger della forma $B(x)e^{-x^2/2}$. Se $|n\rangle$, $|m\rangle$ sono due autostati di \hat{H}_0 :

$$\langle n|\hat{x}^4|m\rangle \neq 0 \iff \begin{cases} \Delta n = |n - m| \leq 4 \\ \pi_n = \pi_m \end{cases}$$

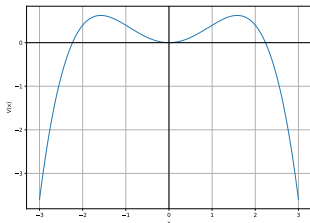
Si parte dal fondamentale, quindi $m \leq 4$ e $\pi_m = +1$; il polinomio $B(x)$ si può scrivere come:

$$B(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} g^k B_k(x) \qquad B_k(x) = \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j} x^{2j}$$

Dall'equazione di Schrödinger, si trovano delle relazioni ricorsive che permettono di determinare i coefficienti dello sviluppo dell'energia; tramite calcolo numerico, si vede che questi hanno un andamento del tipo $E^{(n)} \sim n!$.

Origine della divergenza e scaling di Symanzik

Divergenza \Rightarrow non analiticità di $E(g)$ in un intorno di $g = 0$.



Per $g < 0$, il potenziale è $V = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}|g|x^4$ e lo stato fondamentale del sistema non esiste più: la particella può fuoriuscire dalla buca di potenziale per effetto tunnel, quindi lo stato in cui si trova può solo essere meta-stabile. Questo è, quindi, responsabile della non-analiticità per $g < 0$.

Nel caso dell'oscillatore anarmonico, i problemi di analiticità delle autoenergie di \hat{H} possono essere evidenziati considerando la trasformazione unitaria $\hat{U}(\lambda)\psi(x) = \lambda^{1/2}\psi(\lambda x)$ che, su $\hat{H}(\alpha, g) = \hat{p}^2/2 + \alpha\hat{x}^2/2 + g\hat{x}^4/2$, agisce come:

$$\hat{U}(\lambda)\hat{H}(\alpha, g)\hat{U}(\lambda^{-1}) = \lambda^{-2}\hat{H}(\alpha\lambda^4, g\lambda^6)$$

Ponendo $\lambda = g^{-1/6}$, si ottiene una forma analitica per le autoenergie E_n in termini di una serie convergente:

$$E_n(1, g) = g^{1/3}E_n(g^{-2/3}, 1) \implies E_n(g) = g^{1/3} \sum_k a_k g^{-2k/3}$$

Analiticità del dominio

$D(\hat{H}) \subset L^2$ è caratterizzato dalle funzioni che rendono \hat{H} autoaggiunto; in particolare, il valore medio del potenziale deve esistere. Se $\psi \sim 1/x^2$ (per x grandi):

$$\int dx |\psi(x)|^2 x^2 < \infty \qquad \int dx |\psi(x)|^2 x^4 \sim \int dx \frac{1}{x^4} x^4 \rightarrow \infty$$

Allora $\psi \in D(\hat{H}_0)$, $\psi \notin D(\hat{H})$ perché il valore medio del potenziale perturbato diverge.
 \Rightarrow Per quanto g sia piccolo, la perturbazione non può mai essere considerata tale.

Teorema di Kato-Rellich.

Sia $\hat{H}(g)$ una famiglia di operatori con $g \in S \subset \mathbb{C}$, con S aperto, tale che:

- ① $D(\hat{H}(g))$ è indipendente da g ;
- ② $\forall \psi \in D(\hat{H}(g))$, la funzione $\langle \psi | \hat{H}(g) | \psi \rangle$ è analitica per $g \in S$.

Allora $\forall g_0 \in S$, $\forall E(g_0)$ autovalore isolato di $\hat{H}(g_0)$, esiste un intorno I_{g_0} tale che $\hat{H}(g)$ ha un unico autovalore isolato $E(g)$; in questo intorno, $E(g)$ è analitica e esiste ψ_g anch'essa analitica e tale che $\hat{H}(g)\psi_g = E(g)\psi_g$.

Per l'oscillatore con $\hat{V} = \frac{1}{2}\hat{x}^2 + \frac{1}{2}g\hat{x}^4$ non è verificato il punto (1) del teorema di Kato-Rellich \longrightarrow il dominio dipende da g .

Conclusioni

Il problema della divergenza è, quindi, legato alla presenza di effetti che alterano gli stati del sistema imperturbato, come l'effetto tunnel. Matematicamente, questi effetti si manifestano nella differenza tra i domini dell'Hamiltoniano imperturbato e quello perturbato: nel caso specifico dell'oscillatore anarmonico, $D(\hat{H}(g))$ non è indipendente da g .

In generale, la convergenza dello sviluppo perturbativo può essere verificata dal teorema di Kato-Rellich.

Si nota, però, che questo non rende vano lo sviluppo: qualora la serie fosse asintotica, cioè soddisfa

$$\left| f(z) - \sum_{k=0}^N f_k z^k \right| \leq C_{N+1} |z|^{N+1}, \quad \forall N$$

in un dominio $D \subset \mathbb{C}$ e con $f(z)$ analitica in D , come nel caso dell'oscillatore anarmonico, i primi termini dello sviluppo fornirebbero una buona approssimazione per g relativamente piccolo.