DIVERGENZA DELLO SVILUPPO PERTURBATIVO PER L'OSCILLATORE ANARMONICO

Manuel Deodato

INDICE

I	Un esempio di divergenza		3
2	Ori	gine della divergenza	4
3	Ana	aliticità del dominio	5
	3.I	I teoremi di Kato e Kato-Rellich	5
	3.2	Scaling di Symanzik	6

I Un esempio di divergenza

Molte serie perturbative in meccanica quantistica sono divergenti; l'origine di questa divergenza appare connessa con altri aspetti, apparentemente sconnessi, fra cui:

- la possibilià di ricostruire il risultato esatto da uno sviluppo asintotico;
- l'analiticità della struttura del problema in esame;
- la stabilità del sistema.

Si vuole studiare un esempio concreto per capire come approcciare il problema. A tal proposito, si usa, come sistema esempio, un oscillatore anarmonico descritto da

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x}^2 + \frac{1}{2}g\hat{x}^4 \tag{1.1}$$

dove si sono scelti $m=1, \omega=1$. Esprimendo \hat{x}^4 tramite gli operatori di creazione e distruzione, ci si convince che gli elementi di matrice della perturbazione possono connettere solamente stati che hanno $|\Delta n| \leq 4$. L'espansione perturbativa dell'energia è della forma $E=1/2+\sum g^n E_n$, mentre la funzione d'onda del fondamentale imperturbato è della forma $\psi_0 \propto e^{-x^2/2}$. Visto che la funzione d'onda dell'n-esimo stato è un polinomio di grado n moltiplicato per ψ_0 , si cerca soluzione della forma $B(x)e^{-x^2/2}$ all'equazione differenziale

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}gx^4\right)\psi = E\psi\tag{1.2}$$

Sostituendo l'ansatz, si trova

$$\frac{d^2B}{dx^2} - 2x\frac{dB}{dx} - gx^4B + (2E - 1)B = 0$$

Essendo interessati particolarmente allo sviluppo dello stato fondamentale e visto che \hat{P}_a commuta con la perturbazione, lo stato fondamentale, che originariamente è pari, rimane pari; allora avrà senso la seguente scelta:

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

con $A_{k0}=1$ derivante dalla condizione $B_k(0)=1$, che, a sua volta, serve a fissare il grado di libertà vacante del polinomio. Le energie si potranno scrivere come $2E=\sum_{k=0}^{+\infty}\epsilon_kg^k$, dove $\epsilon_0=1$. La condizione di normalizzazione per queste funzioni d'onda è $B_k(0)=1$. Sostituendo nell'equazione trovata per B, si ottiene:

$$B_{k}'' - 2B_{k}' - x^{4}B_{k-1} + \sum_{s=0}^{k} \epsilon_{s}B_{k-s} - B_{k} = 0$$

$$\Rightarrow \sum_{\ell=1}^{2k} 2\ell(2\ell-1)A_{k,\ell}x^{2\ell-1} - 2\sum_{j=1}^{2k} 2jA_{k,j}x^{2j} - \sum_{\ell=0}^{2k-2} A_{k-1,\ell}x^{2\ell+4}$$

$$- \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j}x^{2j} + \sum_{s=0}^{k} \epsilon_{s} \sum_{j=0}^{2k-2s} A_{k-s,j}x^{2j} = 0$$

Si adotta la convenzione per cui $A_{k,j}=0$ per j>2k; così facendo, sostituendo nella prima somma $\ell=j+1$ e nella terza $\ell=j-2$, si trova che:

$$\sum_{j=0}^{2k} x^{2j} \left[(2j+2)(2j+1)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - A_{k-1,j-2} - A_{k,j} + \sum_{s=0}^{k} \epsilon_s A_{k-s,j} \right] = 0$$

Tutti i coefficienti di questo polinomio devono essere nulli. Usando che $\epsilon_0=1$, si trova che il termine s=0 cancella $-A_{k,j}$:

$$(2j+2)(2j+1)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - A_{k-1,j-2} + \sum_{s=1}^{k} \epsilon_s A_{k-s,j} = 0$$
 (1.3)

Inoltre, il termine per s=k nella somma ha coefficiente $A_{0,j}$, che è pari a 1 per j=0 e nullo altrimenti; da questo, si ottiene una relazione ricorsiva per le energie ϵ_k , quando siano noti i coefficienti $A_{k,1}$:

$$\epsilon_k = -2A_{k,1} - \sum_{s=1}^{k-1} \epsilon_s \tag{I.4}$$

Considerando, invece, $j \neq 0$:

$$(2j+2)(2j+1)A_{k,j+1} - 4jA_{k,j} - A_{k-1,j-2} + \sum_{s=1}^{k-1} \epsilon_s A_{k-s,j} = 0$$

Si nota che in questa espressione, il termine ϵ_k non compare più. Si prende j=2k, per cui $A_{k,2k+1}=0$. Questo permette di trovare una relazione ricorsiva per $A_{k,j}$:

$$A_{k,j} = \frac{1}{4j} \left[(2j+2)(2j+1)A_{k,j+1} - A_{k-1,j-2} + \sum_{s=1}^{k-1} \epsilon_s A_{k-s,j} \right]$$
 (1.5)

con j = 2k, 2k - 1, ..., 1.

Trovati gli $A_{k,1}$, si possono determinare le energie ϵ_k ; facendolo, si osserva che questi termini, di segno alterno, aumentano molto velocemente.

2 Origine della divergenza

Si considera lo studio della serie dell'energia relativa ad uno stato fondamentale (nello specifico, quello dell'oscillatore appena trattato); in generale, questa è data da:

$$E(g) = E_0 + \sum E_n g^n \tag{2.1}$$

Quando questa serie è divergente come nel caso trattato sopra (in cui $E_n \sim n!$), questo vuol dire che E(g) non è analitica in g=0. La motivazione per questa non-analiticità è proposta da Dyson e si basa sul fatto che, se fosse E(g) analitica in g=0, esisterebbe un dominio di convergenza attorno a tale punto, sia questo |g| < R, e, in questo dominio, la somma della serie dovrebbe riprodurre esattamente E(g). Tuttavia, per g<0, l'Hamiltoniano non è limitato dal basso, quindi la funzione E(g) non può essere analitica.

Nel caso dell'oscillatore armonico imperturbato (quindi armonico), una particella nel fondamentale può decadere tramite effetto tunnel attraverso la barriera di potenziale e tale stato può essere unicamente metastabile; questo stesso effetto non può essere descritto tramite una teoria perturbativa, che mantiene gli stati in \mathbb{L}^2 . Allora, nel potenziale perturbato

$$V(x) = \frac{x^2 + gx^4}{2}$$

nel caso di g < 0, l'effetto tunnel è responsabile per la non-analiticità della funzione E(g). Si afferma, inoltre, che la parte immaginaria di E(g) per g < 0, che restituisce lo spessore di linea e il tempo di dimezzamento, deve essere collegata con il comportamento divergente dei coefficienti perturbativi E_n . Questa relazione, si ottiene di seguito come relazione di dispersione.

3 Analiticità del dominio

La mancanza di analiticità si può intendere come segue. Sia \hat{H}_0 l'Hamiltoniano imperturbato al quale è associato un certo dominio $D(\hat{H}_0) \subset \mathbb{L}^2$ dato da tutte quelle funzioni per cui \hat{H}_0 risulta autoaggiunto. Per esempio, il dominio deve essere tale che $\forall \psi \in D(\hat{H}_0)$

$$\int dx |\psi(x)|^2 x^2 < \infty$$

cioè il valore d'aspettazione del potenziale deve esistere. Sia, esempio, $\psi_0 \sim 1/x^2$; per questa, si ha:

$$\int dx |\psi_0(x)|^2 x^2 < \infty \qquad \int dx |\psi_0(x)|^2 x^4 \sim \int dx \frac{1}{x^4} x^4 \to \infty$$

In questo caso, la funzione ψ_0 appartiene al dominio di \hat{H}_0 , ma $\psi_0 \notin D(\hat{H})$. Questo discorso serve per dire che esistono stati perfettamente ammissibili dal punto di vista dall'Hamiltoniano imperturbato, ma che non lo sono da quello di \hat{H} perché, indipendentemente da quanto si prenda g piccolo, la perturbazione non potrà mai essere considerata tale.

3.1 I teoremi di Kato e Kato-Rellich

TEOREMA 3.1 (KATO-RELLICH).

Sia $\hat{H}(g)$ una famiglia di operatori con $g \in S \subset \mathbb{C}$ e valgano i seguenti punti:

- (a). $D(\hat{H}(g))$ è indipendente da g;
- (b). $\forall \psi \in D(\hat{H}(g)), \langle \psi | \hat{H}(g) | \psi \rangle$ è una funzione analitica di g in S.

Allora $\forall g_0 \in S$ e per ogni autovalore isolato $E(g_0)$ relativo a $\hat{H}(g_0)$, esiste un intorno V_{g_0} tale che $\hat{H}(g)$ ha un autovalore unico e isolato E(g) in un intorno di $E(g_0)$. La funzione E(g) è analitica in V_{g_0} ed esiste una funzione ψ_g , analitica in g, tale che

$$\hat{H}(g)\psi_g = E(g)\psi_g$$

Inoltre, la serie di Taylor di E(g) coincide con lo sviluppo perturbativo per $\hat{H}(g)$.

Questo teorema permette di concludere che, soddisfatte le sue condizioni, lo sviluppo perturbativo restituisce il risultato esatto. Una condizione sufficiente per la validità dei due punti del teorema è data dal seguente.

TEOREMA 3.2 (KATO).

Se esistono due numeri a, b tali che $\forall \psi \in D(\hat{H}_0), \ \forall \psi \in D(\hat{V})$ risulta soddisfatta

$$\|\hat{V}\psi\| \le a \|\hat{H}_0\psi\| + b \|\psi\|$$
 (3.1)

allora le condizioni del teorema di Kato-Rellich sono soddisfatte.

Nel caso dell'oscillatore anarmonico, il problema sorge nella condizione (a) del teorema di Kato-Rellich: di fatto, la funzione E(g) non può essere espansa in g=0, anche se è espandibile $\forall g>0$. Quello che si verifica è che, man mano che si approccia lo zero, il raggio di convergenza dello sviluppo diventa sempre più piccolo fino a risultare nullo.

3.2 Scaling di Symanzik

Ora si considera la trasformazione di scaling $\hat{U}(\lambda)\psi(x)=\lambda^{1/2}\psi(\lambda x)$, che si nota essere unitaria¹, tale che per un Hamiltoniano della forma $\hat{H}=\hat{p}^2/2+\alpha\hat{x}^2/2+g\hat{x}^4/2$, soddisfa:

$$\hat{U}(\lambda)\hat{H}(\alpha,g)\hat{U}(\lambda^{-1}) = \lambda^{-2}\hat{H}(\alpha\lambda^4,g\lambda^6)$$
(3.2)

Per gli autovalori, si nota che prendendo $\lambda = g^{-1/6}$, si ha:

$$E_n(1,g) = g^{1/3}E_n(g^{-2/3},1)$$
 (3.3)

Questa relazione permette di concludere che la singolarità per g=0 di E(g) è quella di una radice cubica; inoltre, per il criterio di Kato, l'espansione

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

è convergente e, asintoticamente, si ha $E_n(g) \sim g^{1/3}$.

$$\left\langle \hat{U}(\lambda)\psi,\hat{U}(\lambda)\phi\right\rangle = \int \lambda\psi^*(\lambda x)\phi(\lambda x)dx = \int \psi^*(y)\phi(y)dy = \left\langle \psi,\phi\right\rangle$$

¹L'unitarietà si può vedere direttamente dal fatto che $\langle \psi, \phi \rangle = \langle \hat{U}(\lambda)\psi, \hat{U}(\lambda)\phi \rangle$; infatti: