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:

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

In linea di principio, la condizione di *perturbazione piccola*, definita dalla richiesta $\lambda \ll 1$, assicura 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 Shrödinger della forma $B(x)e^{-x^2/2}$. Se $|n\rangle$, $|m\rangle$ sono due autostati di $\hat{H}_0$:

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

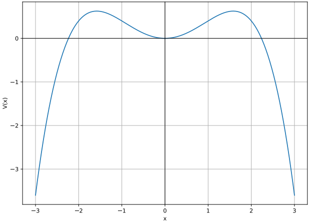
Si parte dal fondamentale, quindi $m \leq 4$ e $\pi_m = +1$; il polinomio $B(x)$ si può scrivere come:

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

Dall'equazione di Schrödinger, si trovano delle relazioni ricorsive che permettono di determinare le energie; tramite calcolo numerico, si vede che queste sono divergenti con $E_n \sim n!$.

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 metastabile. Questo è, quindi, responsabile della non-analiticità per $g < 0$.

Per evidenziare il problema in $g = 0$, si considera 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 ciascun ordine perturbativo 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):

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

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 la forma degli 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

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

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.