

DIVERGENZA DELLO SVILUPPO PERTURBATIVO PER L'OSCILLATORE ANARMONICO

MANUEL DEODATO

INDICE

| | | |
|----------|---|----------|
| 1 | Un esempio di divergenza | 3 |
| 2 | Origine della divergenza | 4 |
| 3 | Analiticità del dominio | 5 |
| 3.1 | I teoremi di Kato e Kato-Rellich | 5 |
| 3.2 | Scaling di Symanzik | 6 |
| 4 | Calcoli utili | 7 |
| 4.1 | Teorema di Kato per potenziale quartico perturbato da potenziale quadratico | 7 |

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 possibilità 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

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

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

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

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:

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

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 $2E = \sum_{k=0}^{+\infty} \epsilon_k g^k$, 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:

$$\begin{aligned} B_k'' - 2B_k' - x^4 B_{k-1} + \sum_{s=0}^k \epsilon_s B_{k-s} - B_k &= 0 \\ \Rightarrow \sum_{\ell=1}^{2k} 2\ell(2\ell-1)A_{k,\ell}x^{2\ell-1} - 2\sum_{j=1}^{2k} 2jA_{k,j}x^{2j} - \sum_{\ell=0}^{2k-2} A_{k-1,\ell}x^{2\ell+4} \\ &\quad - \sum_{j=0}^{2k} A_{k,j}x^{2j} + \sum_{s=0}^k \epsilon_s \sum_{j=0}^{2k-2s} A_{k-s,j}x^{2j} = 0 \end{aligned}$$

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 $-A_{k,j}$:

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

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 $A_{k,1}$:

$$\epsilon_k = -2A_{k,1} - \sum_{s=1}^{k-1} \epsilon_s \quad (1.4)$$

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 $A_{k,j}$:

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

con $j = 2k, 2k-1, \dots, 1$.

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:

$$E(g) = E_0 + \sum E_n g^n \quad (2.1)$$

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:

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

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

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

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 approssima 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:

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

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

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

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 $E_n(g) \sim g^{1/3}$.

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

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

4 CALCOLI UTILI

4.1 Teorema di Kato per potenziale quartico perturbato da potenziale quadratico

Si verifica che $\forall \psi \in \mathcal{D}(\hat{H}_0) \cup \mathcal{D}(\hat{V}) \subset L^2$, con $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2 + \hat{x}^4/2$ e $\hat{V} = \hat{x}^2/2$, vale

$$\|x^2\psi(x)\| \leq a \|\hat{x}^4\psi(x)\| + b \|\psi(x)\| \quad (4.1)$$

con $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{L^2}$.

Dimostrazione. Visto che $\hat{V} \propto \hat{x}^2$ e visto che (per $\hbar = 1$) $\hat{p}^2 \geq 0$ perché, integrando per parti¹²:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle &= - \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \psi''(x) dx = [\psi^*(x) \psi'(x)]_{+\infty}^{-\infty} + \int_{\mathbb{R}} |\psi'(x)|^2 dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} |\psi'(x)|^2 dx \geq 0 \end{aligned}$$

si ha $\hat{H}_0 \geq \hat{x}^4/2$, quindi si può verificare la disuguaglianza in eq. 4.1 perché, se vale quella, il teorema di Kato è automaticamente soddisfatto. Allora si osserva che:

$$\begin{aligned} \|x^2\psi\|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x^2\psi(x)|^2 dx = 2 \int_0^{+\infty} x^4 |\psi(x)|^2 dx \\ &= 2 \int_0^1 x^4 |\psi(x)|^2 dx + 2 \int_1^{+\infty} x^4 |\psi(x)|^2 dx \\ &\leq 2 \int_0^1 x^4 |\psi(x)|^2 dx + 2 \int_1^{+\infty} x^8 |\psi(x)|^2 dx \\ &\leq 2 \int_0^1 |\psi(x)|^2 dx + 2 \int_0^{+\infty} x^8 |\psi(x)|^2 dx \\ &\leq 2 \int_0^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx + 2 \int_0^{+\infty} x^8 |\psi(x)|^2 dx \\ &= 2 \|\psi(x)\|^2 + 2 \|x^4\psi(x)\|^2 \end{aligned}$$

Allora si ottiene che:

$$\|x^2\psi(x)\| \leq \sqrt{2} \left(\|\psi(x)\|^2 + \|x^4\psi(x)\|^2 \right)^{1/2} \leq \sqrt{2} \left(\|\psi(x)\| + \|x^4\psi(x)\| \right)$$

dove si è completato il quadrato. ■

¹²Si nota che le $\psi \in \mathcal{D}(\hat{H}_0)$ devono avere valore finito quando si calcola il loro valore medio sulla parte cinetica perché

$$\langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle \propto \int_{\mathbb{R}} \psi^* \hat{p}^2 \psi(x) dx + \int_{\mathbb{R}} x^4 |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{<} \infty$$

Essendo il valore medio del potenziale quartico positivo, allora deve essere finito anche l'altro integrale.