

P413

c.1

TEORIA DE PERTURBACIONES ASINTOTICA.  
SUMABILIDAD DE BOREL Y TEORIA DE PERTURBACIONES  
REGULARES ALREDEDOR DE HAMILTONIANOS EXACTAMEN-  
TE SOLUBLES

Tesis

Entregada a la

Universidad de Chile

en cumplimiento parcial de los requisitos

para optar al grado de

Magister en Ciencias Físicas

Facultad de Ciencias

por

Claudio Pereda Bórquez

Diciembre, 1990

Patrocinante: Profesor Rafael Benguria



FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD DE CHILE

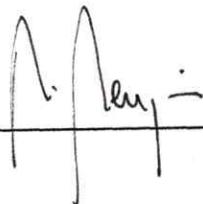
INFORME DE APROBACION  
TESIS DE MAGISTER

Se informe a la Escuela de Postgrado de la Facultad de Ciencias que la Tesis de Magister presentada por el Candidato

CLAUDIO ALBERTO PEREDA BORQUEZ

ha sido aprobada por la Comisión Informante de Tesis como requisito de Tesis para optar al Grado de Magister en Ciencias Físicas.

Director de Tesis  
Dr. Rafael Benguria



---

Comisión Informante de Tesis

Dr. Sergio Hojman



---

Dr. Herbert Massmann



---

Dr. Claudio Teitelboim



---



## AGRADECIMIENTOS

Toda mi gratitud para el Dr. Rafael Benguria, en quien conocí a un ser humano de excepción.



## INDICE

	Página
INTRODUCCION	i
CAPITULO I:	
El Oscilador Anarmónico	1
CAPITULO II:	
El Efecto Stark	23
CAPITULO III:	
Osciladores Anarmónicos exactamente solubles I. Teoría	63
CAPITULO IV:	
Osciladores Anarmónicos exactamente solubles II. Aplicaciones	80
BIBLIOGRAFIA	94



A mis padres, para quienes gracias  
es una palabra escasa.  
A ellos y a los que junto a ellos  
comparten mi afecto.



## INTRODUCCION

Los primeros pasos en el desarrollo de la teoría de perturbaciones fueron dados por RAYLEIGH quien en el siglo pasado, dió a conocer una fórmula que permite calcular las frecuencias naturales y los modos de un sistema vibrante levemente distinto de un sistema más simple cuyas características pertinentes ya son conocidas. Más tarde SCHRODINGER [1928] desarrolló un método similar - con más generalidad y rigor - para el problema de autovalores que aparecen en mecánica cuántica.

Estos trabajos pioneros fueron, sin embargo, bastante incompletos desde el punto de vista matemático, ya que se asumió tácitamente que tanto los autovalores como las autofunciones (autovectores) admitían expansión en serie en función del parámetro que mide la "desviación" del operador perturbado con respecto al operador no perturbado, sin preocuparse de probar que las series convergen.

Desde la publicación de estos primeros resultados, se realizaron varios intentos para estudiar y clarificar el problema de la convergencia, hasta que finalmente en una serie de trabajos publicados

principalmente entre 1937-42, RELICH resolvió esta cuestión (para operadores lineales). Los resultados de Rellich se pueden establecer sucintamente del siguiente modo: Sea  $T(\alpha)$  un operador autoadjunto acotado en un espacio de Hilbert  $H$ , que depende de un parámetro real  $\alpha$  como una serie de potencias convergente:

$$T(\alpha) = T + \alpha T^{(1)} + \alpha^2 T^{(2)} + \dots$$

Supongamos que el operador no-perturbado  $T(0) = T$  tiene un autovalor  $\lambda$  (aislado del resto del espectro) con una multiplicidad finita  $m$ . Entonces  $T(\alpha)$  tiene exactamente  $m$  autovalores  $\mu_j(\alpha)$ ;  $j = 1, \dots, m$  en la vecindad de  $\lambda$  para  $|\alpha|$  suficientemente pequeño y estos autovalores pueden expandirse en series convergentes

$$(I) \quad \mu_j(\alpha) = \lambda + \alpha \mu_j^{(1)} + \alpha^2 \mu_j^{(2)} + \dots, \quad j = 1, \dots, m.$$

Estos resultados habían sido anticipados por RAYLEIGH, SCHRODINGER y otros autores, pero probarlos no es de ninguna manera simple. Por otro lado, muchos autores provenientes tanto del área matemática - en su vertiente más pura - como de la física, habían reconocido la incapacidad del método de perturbaciones para resolver un número de problemas originados en diversas áreas de la física-matemática; por ejemplo, POINCARÉ en su célebre análisis del problema de los 3 cuerpos, llega a la conclusión de que las series de perturbación allí surgidas, son divergentes. En tiempos más cercanos TITSCHMARCH y KATO [1949-50] observaron de manera rigurosa que hay casos en que la serie formal (I) diverge o tiene solamente un número finito

de términos significativos (en este último caso  $\mu_j(\alpha)$  es aproximado en el sentido de expansión asintótica). De manera general se puede afirmar que el hecho de que los métodos de perturbación no den o no representen una respuesta de cálculo adecuado a problemas físicos es una situación con la que se ha tropezado desde el comienzo mismo de su utilización.

La cuestión que surge de manera natural es la del significado que ha de atribuírsele a estas series divergentes (o asintóticas: en general singulares; una discusión más detallada de estos términos se dará en el inicio del Capítulo I). La investigación y estudio de métodos que den solución a esta pregunta ha sido copiosa y relativamente moderna (1970 en adelante), si bien los métodos en sí mismos eran conocidos por los matemáticos desde mucho tiempo antes.

Uno de los problemas que primero llamaron la atención de quienes fueron los pioneros en este tipo de trabajo, fue el del oscilador armónico, que originalmente surgió de la teoría cuántica de campos, como un modelo adecuado para el tratamiento del hamiltoniano  $\lambda\phi^4$  en un espacio-tiempo unidimensional. Los primeros en enfrentar este problema, desde el punto de vista discutido en los párrafos anteriores, fueron GRAFFI, GRECCHI, y SIMON [1970]. La serie de perturbaciones es rápidamente divergente y los autores antes mencionados consiguieron darle significado por medio del uso de métodos regulares de suma, tales como el de STIELTJES-PADE y/o BOREL, recursos estos ya conocidos por los matemáticos desde comienzos de siglo [1901]. Lo que se demuestra esencialmente en estos trabajos es que, bajo ciertas condiciones, se puede obtener teoremas de unicidad a través de estos recursos para sumar series.

divergentes, de manera que los resultados numéricos correspondan exactamente con los valores reales. Esto no sólo contribuye a darle significado a las series simplemente divergentes, sino que también resuelve el problema de las series asintóticas (mucho más frecuentes), pues es sabido que para cada serie asintótica existe un número infinito de funciones analíticas que le están asociadas.

También en los primeros años de la década del 70, KEEKEN estudió problemas de perturbaciones regulares utilizando la suma de BOREL y demostrando su sumabilidad. A partir de estos primeros trabajos se han ido aplicando estos procedimientos a nuevos y diferentes problemas de física-matemática, como por ejemplo las resonancias en el efecto Stark que fueron tratadas por SILVERSTONE, ADAMS, CIZEK y OTTO [1979] y también nuevamente por GRAFFI y GRECCHI [1978] quienes probaron rigurosamente que estaban determinadas únicamente por las series de perturbación a través del método de Borel. Posteriormente, este mismo camino se ha utilizado para tratar el efecto Zeeman por parte de AVRON [1981] y REED & SIMON [1978].

Toda esta investigación ha contribuido a resolver claramente el problema del significado de las series no convergentes y además mediante la combinación de los métodos de BOREL - que tiene utilidad principalmente abstracta, i.e.: permite probar la unicidad del desarrollo en serie - y PADE - que resulta conveniente desde un punto de vista más pragmático, pues permite iniciar el proceso de "suma" de la serie acelerando la convergencia - se pueden obtener resultados numéricos que se ajustan muy bien a los obtenidos por otros métodos.

En los capítulos que siguen se estudiarán dos ejemplos de estas técnicas, a saber, el oscilador anarmónico con perturbación  $x^4$  (cuártica) y el efecto Stark. Mediante estos ejemplos esperamos presentar el método de Borel (o Borel-Padé, pues es la conjunción de los dos, la que optimiza los resultados), de manera de darle la relevancia justa a su utilidad que en general no se comenta en los textos de Mecánica Cuántica.

En el capítulo penúltimo se introducen ciertos hamiltonianos anarmónicos pares que poseen un número finito de soluciones exactas. Se demuestra mediante un método combinado, que recurre a fracciones continuas y a la definición de ciertos polinomios tipo Hermite, porqué esto es así. Finalmente, en el último capítulo se intenta implementar el método de Silverstone ya desarrollado previamente, a éstos operadores a fin de conseguir aproximaciones al estado fundamental de un hamiltoniano, que desde el punto de vista de la Teoría de Perturbaciones es fuertemente singular. Los resultados numéricos se discuten y analizan con mayor extensión el antedicho capítulo. La finalidad principal de esta última parte del presente trabajo, a saber, encontrar un método de cálculo que evite la intrínseca singularidad de ciertos potenciales perturbativos, se cumple de modo alentador sólo para un cierto operador dentro de la clase definida anteriormente, pero esto no es sorprendente si se toma en cuenta que, en relación a los objetivos perseguido, estos operadores poseen tanto propiedades benéficas como perjudiciales, de modo que su balance puede explicar la existencia de este comportamiento.

## CAPITULO I

### EL OSCILADOR ANARMONICO

La teoría de perturbaciones que se aprende en los cursos tradicionales de Mecánica Cuántica, soslaya el problema de la convergencia (o divergencia) de las series de perturbación correspondientes. En general, los problemas usualmente estudiados representan casos, en que la perturbación es regular, esto es, las series de potencia en  $\lambda$  (constante de acoplamiento) que resultan, tienen un radio de convergencia no nulo. La característica esencial de estos problemas - que en la práctica, no siempre son los más frecuentes - es que la solución exacta para  $|\lambda|$  pequeño se aproxima suavemente a la solución no-perturbada o de orden cero, cuando  $\lambda \rightarrow 0$ . Dicho de un modo más útil, para las aplicaciones físicas, la teoría de perturbaciones es estrictamente aplicable sólo en el caso en que si  $\lambda \rightarrow 0$ , ambos, tanto los autovalores como las autofunciones de  $\hat{H}$  se transforman continuamente en las autofunciones y autovalores del operador  $\hat{H}_0$ .

Una situación común en física, es la de enfrentarse con series de perturbación divergentes - pero finitas orden a orden - y en tales casos se debe decidir que significado atribuirle a su "suma", en un sentido general que tenga significación práctica para los problemas concretos que representan. Se trata pues, de utilizar técnicas de mayor o menor sofisticación a fin de hacer sumables series que esencialmente no lo son. A modo de aproximación general al problema se puede decir que las series de perturbación con radio de convergencia nulo son un tipo incluido en la clase más general de las series de perturbación singulares que incluyen también a aquellas que simplemente no toman la forma de series de potencia, las asintóticas, etc. En todos los casos, una perturbación se dice singular, cuando la solución exacta para  $\lambda = 0$  es fundamentalmente diferente en carácter a las soluciones obtenidas en la vecindad de  $\lambda \rightarrow 0$ . Este cambio abrupto en el carácter, permite clasificarlo como un problema de perturbaciones singulares.

El ejemplo que analizaremos en este primer capítulo es el del oscilador anarmónico, con una perturbación cuártica. En este caso la Teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger fracasa, porque como se observa de inmediato la perturbación no es "pequeña" comparada con el Hamiltoniano no perturbado:

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 \quad \text{y la perturbación} \quad \lambda x^4$$

Esbozaremos un camino para demostrar que efectivamente el problema del oscilador anarmónico cuártico es un problema de perturbación singular. Para ello estimaremos el "factor de control" del "leading behaviour" de ambas soluciones, tanto de la no perturbada como de la perturbada, para  $x$  grande (pues es ahí donde se hace más evidente la singularidad). Lo que queremos en suma, es formalizar algo más el hecho intuitivo de que esta perturbación llevará a una serie singular (divergente).

Definiremos nuestro operador no perturbado como:

$$(1) \quad \check{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{4} \quad \text{y la perturbación como:}$$

$$(2) \quad \check{W}(x) = \frac{x^4}{4} .$$

La razón de elegir esta forma del operador, es simplemente la de seguir el modelo usado por Bender and Wu [1969] y/o [1973], de modo de simplificar al máximo la comparación de los resultados obtenidos en este capítulo con los conseguidos en esos artículos, que han sido fundamentales en relación a este tema.

La ecuación diferencial para el oscilador armónico es entonces:

$$(3) \quad -\frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{x^2}{4} y - Ey = 0 \quad , \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} y(x) = 0 .$$

Como se sabe, hay un conjunto discreto de valores del parámetro  $E$  para los cuales la ecuación y su condición de borde tienen solución. Las soluciones son las funciones cilíndricas parabólicas:

$$(4) \quad y_n(x) = e^{-x^2/4} \text{He}_n(x)$$

donde los polinomios  $\text{He}_n(x)$ ,  
son polinomios de Hermite de  
grado  $n$ .

$$(5) \quad E_n = n + \frac{1}{2}$$

(Estos polinomios de Hermite, no son idénticos a los usados habitualmente, dada la diferente forma del operador original. En este caso la función generatriz es:

$$(5a) \quad f(t,x) = e^{tx-t^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n \text{He}_n(x)}{n!}$$

y la relación de recurrencia esencial es:

$$(5b) \quad \text{He}_{n+1}(x) = x\text{He}_n(x) - n\text{He}_{n-1}(x),$$

como se ve hay una ligera diferencia respecto a las definiciones usuales).

La ecuación diferencial que satisface el operador perturbado es:

$$(6) \quad -\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{x^2}{4} y + \frac{\lambda x^4}{4} y - Ey = 0.$$

Examinemos su comportamiento para  $x \rightarrow \infty$  y supongamos que:

$$y(x) = e^{S(x)}.$$

La expresión anterior proviene de un método standard de búsqueda del "factor de control" de una expansión o aproximación para soluciones de ecuaciones diferenciales en torno a puntos singulares irregulares

(como lo es  $x = \infty$  para (6)). Se puede justificar sin rigor, observando que el factor de control para el "término líder" en una expansión cualquiera, es aquel que varía más rápidamente en torno al punto en cuestión. Habitualmente la exponencial cumple ese rol.

El método usual supone también que:

$$(*) \quad S'' \ll (S')^2 \quad x \rightarrow \infty .$$

Reemplazando en (6) resulta la ecuación

$$(7) \quad -S'' - (S')^2 + \left[ \frac{x^2}{4} + \frac{\lambda x^4}{4} - E \right] = 0 .$$

Para  $x \rightarrow \infty$ , usando la suposición (\*), (7) cambia a:

$$(8) \quad (S')^2 \sim \frac{\lambda x^4}{4} \quad \text{que implica que el comportamiento}$$

$$(9) \quad y(x) \sim e^{-\frac{\sqrt{\lambda} x^3}{6}} . \quad \text{fundamental de la solución para}$$

$x$  grande es:

En (9) se ha considerado sólo la exponencial decreciente a fin de satisfacer las condiciones de borde naturales.

Por (4) sabemos cual es el comportamiento de las soluciones del oscilador armónico para  $x \rightarrow \infty$ :

$$(10) \quad y_n(x) \sim e^{-x^2/4} \quad x \rightarrow \infty .$$

Comparando (9) y (10) se ve que en este caso, la naturaleza de las soluciones asintóticas es esencialmente diferente, aún cuando

hacemos tender  $\lambda \rightarrow 0$ . Este cambio abrupto es el que nos informa de la singularidad del problema perturbado, de acuerdo con el análisis realizado previamente.

Al efectuar los cálculos mediante la Teoría de R-S<sup>(\*)</sup>, para los primeros términos de la serie, se advierte de inmediato que comienzan a crecer velozmente, lo que sugiere que para  $\lambda \neq 0$  la expansión es divergente. La demostración de que la serie es efectivamente divergente fue hecha por Bender y Wu [1969] y/o [1973], mediante dos caminos distintos, ninguno de los cuales es trivial. En estos artículos se determina que la conducta de la serie para órdenes muy grandes satisface:

$$(11) \quad E_\nu \sim \frac{(-3)^\nu \Gamma(\nu + \frac{1}{2}) \sqrt{6}}{\pi^{3/2}} \quad \nu \rightarrow \infty,$$

en que  $E_\nu$  es el término  $\nu$ -ésimo en el desarrollo de la serie de perturbaciones.

El paso siguiente consiste en implementar un esquema mediante el cual se puedan obtener los términos sucesivos para la serie de perturbaciones, hasta cualquier orden, con el objeto de "resumar" esta serie asintótica posteriormente mediante el método de Borel.

El camino seguido estará basado en una idea de H. Silverstone [1978], (que la aplicó al efecto Stark) que permite resolver este

-----

(\*) Reyleigh-Schrödinger

problema de manera mucho más simple y rápida que mediante los esquemas de Bender y Wu.

Reescribamos las ecuaciones perturbada y no-perturbada:

$$(I) \quad \check{H}_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{4} \quad ; \quad \check{H} = \check{H}_0 + \frac{\lambda x^4}{4}$$

$$\check{H}_0 |n\rangle = (n + \frac{1}{2}) |n\rangle; \quad \check{H}\psi = E\psi ,$$

con

$$(II) \quad |n\rangle = A e^{-x^2/4} He_n(x) \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm} .$$

La normalización de las funciones  $\{|n\rangle\}$  demanda el cálculo de la integral:

$$(III) \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} He_n^2(x) dx = 4n! \sqrt{\pi} \rightarrow A = (4n! \sqrt{\pi})^{-1/2} .$$

La integral anterior se calcula usando la relación de recurrencia definida en (5b).

De acuerdo a la relación de recurrencia (5b) se ve que (usando (II)) la matriz de la perturbación sobre los autoestados n.p. se deduce de:

$$(12) \quad x|n\rangle = (\sqrt{n+1} |n+1\rangle + \sqrt{n} |n-1\rangle) .$$

De esta se obtiene:

$$(13) \quad \frac{x^4}{4} |n\rangle = \sum_i t_{in} |i\rangle .$$

Los  $t_{ij}$  son no nulos sólo para ciertos valores de  $i$ :

$$\begin{aligned}
 (14) \quad t_{in} &= \frac{1}{4} \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} & i = n + 4 \\
 &= \frac{1}{4} (4n + 6) \sqrt{(n+1)(n+2)} & i = n + 2 \\
 &= \frac{3}{4} [2n^2 + 2n + 1] & i = n \\
 &= \frac{1}{4} (4n-2) \sqrt{n(n-1)} & i = n-2 \\
 &= \frac{1}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} & i = n-4 .
 \end{aligned}$$

Expandamos ahora las autofunciones perturbadas  $\psi^{(N)}$  ( $N$  designa a las distintas órdenes de perturbación) en la base  $\{|n\rangle\}$ :

$$(15) \quad \psi = \sum_N \lambda_N \psi^{(N)} ; \quad E = \sum_N \lambda_N E^{(N)} .$$

Sea:

$$(16) \quad \psi^{(N)} = \sum_{j \neq n} c_j^{(N)} |j\rangle ; \quad n: \text{rótulo del nivel de energía que se está perturbando!}$$

De (15) se ve:

$$(17) \quad \psi^{(0)} = |n\rangle ; \quad E^{(0)} = n + 1/2 .$$

Como es convencional, toda la dependencia de la autofunción perturbada respecto al autoestado no perturbado en el que nos encontramos  $|n\rangle$ , está contenida en  $\psi^{(0)}$ , de allí la condición  $j \neq n$  en (16). Esto unido a (17) impone la condición:

$$(18) \quad c_j^{(0)} = \delta_{jn}$$

Usando (15), (16) y (17) resultan las siguientes dos ecuaciones:

$$N = 0$$

$$(19) \quad H_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)}$$

que corresponde - como debe ser - al problema no perturbado

$$N \geq 1$$

$$(20) \quad H_0 \psi^{(N)} + \frac{x^4}{4} \psi^{(N-1)} = \sum_{v=0}^N E^{(N-v)} \psi^{(v)}$$

De aquí usando (16) queda:

$$(21) \quad c_j^{(N)} \left( j + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i \neq n} c_i^{(N-1)} t_{ji} = \sum_{v=0}^N E^{(N-v)} c_j^{(v)}$$

Para el caso particular  $N = 1$ , esta ecuación proporciona más información importante:

$$(21a) \quad C_j^{(1)}(j-n) = E^{(1)} \delta_{jn} - t_{jn}$$

$$(21b) \quad \text{Si } j \neq n \rightarrow C_j^{(1)} = \frac{1}{n-j} t_{jn}$$

$$(21c) \quad \text{Si } j = n \rightarrow E^{(1)} = t_{nn}$$

(21c) es el resultado conocido de la Teoría de Perturbaciones usual. En (21), se ha usado la condición (18), pese a que el contador en la suma in dica  $i \neq n$ . Esto se debe a que  $N-1 = 0$  en este caso y  $C_i^{(0)}$  no es nula; está dada por (18).

La ecuación general para los  $C_j^{(N)}$  es:

$$(22) \quad C_j^{(N)} = \frac{1}{j-n} \left| \sum_{\nu=1}^{N-1} E^{(N-\nu)} C_j^{(\nu)} - \sum_{i \neq n} t_{ji} C_i^{(N-1)} \right|$$

Para  $j = n$ , podemos encontrar las perturbaciones de la energía: (Pues aquí debemos usar  $E^{(N)} C_j^{(0)} = E^{(N)}$  en (21))

$$(23) \quad E^{(N)} = \sum_{i \neq n} C_i^{(N-1)} t_{ni} - \sum_{\nu=1}^{N-1} C_n^{(\nu)} E^{(N-\nu)}$$

Los resultados (22) y (23) permiten calcular mediante relaciones iterativas, las diferentes órdenes de perturbación tanto para las autofunciones como para las autoenergías, hasta el orden que se desee.

Usaremos nuestros resultados para calcular un número de términos de la serie de perturbación de la energía, para el estado fundamental, esto es  $n = 0$ .

En la ecuación (23), se puede ver que si  $n = 0$  la segunda sumatoria se anula, pues  $C_0^{(\nu)} = 0 \quad \forall \nu \neq 0$ , además dado que estamos trabajando con el oscilador armónico (problema n-p), los rótulos de energía son positivos (o cero), es decir, en la primera sumatoria sólo subsisten los términos  $t_{02}$  y  $t_{04}$  (por las reglas de selección (14)) entonces:

$$(24) \quad E^{(N)} = C_2^{(N-1)} t_{02} + C_4^{(N-1)} t_{04} \quad \text{y} \quad E^{(1)} = t_{00} \quad \text{de} \quad (21c)$$

Los valores que resultan son:

$$n = 0$$

TABLA I

N	$E^{(N)}$	N	$E^{(N)}$
1	3/4	11	$0.7893333 \cdot 10^{12}$
2	-42/16	12	$-0.2773877 \cdot 10^{14}$
3	1.332/64	13	$0.1055646 \cdot 10^{16}$
4	$-61.770/4^4$	14	$-0.4326810 \cdot 10^{17}$
5	$3.666.924/4^5$	15	$0.1900817 \cdot 10^{19}$
6	-63982.81348	16	$-0.8912101 \cdot 10^{20}$
7	$0.1329733 \cdot 10^7$	17	$0.4442550 \cdot 10^{22}$
8	$-0.3144821 \cdot 10^8$	18	$-0.2346464 \cdot 10^{24}$
9	$0.8335416 \cdot 10^9$	19	$0.1309150 \cdot 10^{26}$
10	$-0.2447894 \cdot 10^{11}$	20	$-0.7693999 \cdot 10^{27}$

Observando la tabla anterior se ve como los términos se hacen cada vez mayores en valor absoluto y la rápida proporción en que este proceso tiene lugar.

(Una estimación basada en el examen de los primeros 75 términos permite estimar que  $|E^{(n)}| < (3/2)^{n-1} 3^n n!$ ).

Para acometer el propósito final de este capítulo será necesario introducir previamente ciertas herramientas analíticas que se usarán posteriormente. La más importante de ellas es el método de sumabilidad de Borel, establecido por éste en 1901 en su obra 'Leçons sur les series divergentes' .

Dada una serie que representa a una función analítica dentro de un círculo  $|z| \leq r$ :

$$(a) \quad f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n .$$

Se define la función o transformada de Borel asociada con  $f(z)$  a:

$$(b) \quad \phi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n z^n}{n!} .$$

A partir de estas magnitudes se puede demostrar que:

$$(c) \quad f(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} \phi(z t) dt .$$

La demostración de la igualdad (c) se encuentra, por ejemplo en Whittaker & Watson, pág. 140. La ecuación (c), conocida como Teorema de Borel, nos asegura su validez dentro del círculo de convergencia de  $f(z)$ . Lo que la hace un instrumento útil para sumar series no-convergentes es que por continuidad analítica el resultado anterior se puede ampliar para regiones fuera del círculo de convergencia de la serie original.

El que se pueda usar el método de suma de Borel, para el caso específico del oscilador anarmónico, es un resultado demostrado por Graffi, Grecchi & Simon [1970].

Se establecen a continuación las condiciones para que ello tenga lugar:

- (i) Dada una función analítica  $f(z)$  en  $D: \{0 < |z| < B, |\arg z| < \lambda, \frac{3\pi}{2} > \lambda > \pi/2\}$  con la serie  $\sum_0^{\infty} a_n z^n$  como serie asintótica en  $D$ :

$$f(z) = \sum_0^N a_n z^n + R_N(z)$$

- (ii) Existen  $\sigma, C$  tales que

$$|a_n| < C \sigma^n n! ; \quad |R_N(z)| < C \sigma^{N+1} (N+1)! |z|^{N+1}$$

Entonces la serie  $\sum_0^{\infty} a_n z^n$  es sumable Borel a  $f(z)$  en

$\bar{D}: \{0 < |z| < B, |\arg z| \leq \delta < \lambda - \pi/2\}$  y en este dominio se tiene:

$$f(z) = \int_0^{\infty} e^{-a} F(za) da \quad \text{con} \quad F(z) = \sum_0^{\infty} \frac{a_n z^n}{n!}$$

con  $F(z)$  convergente para  $|z| < 1/\sigma$ .

Para los osciladores anarmónicos definidos por el Hamiltoniano:

$$(25) \quad H_m = p^2 + x^2 + \beta x^{2m}.$$

Se ha demostrado (Simon [1970]) que las funciones  $E^{(m)}/\beta$  (energía del op. pert.) son analíticas en un dominio  $D(E)$ :  $\{0 < |\beta| < B(E); |\arg \beta| < \frac{1}{2}(m+1)\pi - E\} \forall E$ , también que las series de perturbación son asintóticas a  $E^{(m)}(\beta)$  uniformemente en cada  $D(E)$  y por último que los coeficientes  $E_n^{(m)}$  de la serie de perturbación para  $E^{(m)}(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n^{(m)} \beta^n$  son  $a_n^{(m)} = O(\sigma^n / ((m-1)n!))$ .

Comparando con lo dicho anteriormente, se ve que para el oscilador tratado aquí ( $m = 2$ ), la condición esencial es:

$$|R_n(\beta)| \leq C \sigma^{n+1} (n+1)! \beta^{n+1}.$$

La principal dificultad técnica que enfrentamos a continuación es obvia: para poder usar directamente la suma de Borel necesitamos conocer teóricamente la expresión completa de la serie original, i.e., todo el conjunto de los  $\{E_n\}$  o  $E^{(N)}$  como los hemos llamado anteriormente. Lo que haremos para evitar esa complicación es usar los resultados del artículo de Loeffel et al. (1969), quien demostró que las series de

perturbación del oscilador cuártico se pueden sumar mediante el método de Padé y dan los resultados reales con la habitual convergencia veloz de los aproximantes de Padé.

La principal ventaja de este método de suma es que, a diferencia de otros (entre los cuales está el de Borel), con el basta conocer sólo unos pocos términos de una serie divergente para comenzar a dar una estimación crecientemente buena de la "suma exacta" de la serie divergente. De acuerdo con lo anterior parece mucho más eficiente investigar los aproximantes de Padé de la Transformada de Borel de la serie original (que como sabemos es convergente para  $|\beta| < 1/\sigma$ ) y luego calculamos la suma de Borel de estos aproximantes:

El proceso, entonces, puede ser resumido así:

i) Tenemos la serie divergente original

$$(*) E(\beta) = \sum E_n \beta^n \quad \text{o} \quad (*) E(\lambda) = \sum_N E^{(N)} \lambda^N$$

ii) Aplicamos la transformada de Borel:

$$F(\beta) = \sum_0^{\infty} \frac{E_n}{n!} \beta^n$$

-----

(\*)  $E(\beta)$  y  $E(\lambda)$  están relacionadas por un cambio de escala, debido a las diferentes formas del operador que las define:  $x = \sqrt{2}y$ . Se desarrolla más adelante.

- iii) A la anterior serie (que sólo converge dentro de  $|\beta| < 1/\sigma$ ) le aplicamos las aproximaciones de Padé (específicamente las aproximaciones diagonales de Padé, una secuencia usada frecuentemente que se caracteriza por tener ambos índices iguales)

$$F^{[N,N]}(\beta) := \text{Aprox. diagonales de Padé para } F(\beta) .$$

- iv) A continuación y asumiendo la rápida convergencia de  $F^{[N,N]}(\beta)$  usamos el Teorema de Borel, ya enunciado:

$$f_B^{[N,N]}(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-t} F^{[N,N]}(\beta t) dt$$

que converge a  $E(\beta)$  cuando  $N \rightarrow \infty$ . Hay que realizar un comentario sobre este último punto; el problema más profundo que disminuye la eficacia de cálculo del método de Borel, es que hay involucrado tácitamente una continuación analítica (fuera de la región de convergencia de la transformada de Borel). Se puede realizar esta continuación a través de las aproximaciones de Padé, ya que se sabe que una secuencia de aproximación de Padé, libre de polos y ceros (en una cierta región que contenga al origen), converge uniformemente a una función analítica en esa región que es la continuación analítica de las series de Taylor, y es a esta característica a la que apelamos al desarrollar el método esbozado anteriormente.

Ahora definamos brevemente el método de las aproximaciones de Padé. La idea esencial aquí es reemplazar una serie de potencia  $a_n z^n$  por una sucesión de funciones racionales (cuociente de dos polinomios) de la forma:

$$(I) \quad p^{[N,M]}(z) = \frac{\sum_{n=0}^N A_n z^n}{\sum_{n=0}^M B_n z^n}$$

Sin pérdida de generalidad podemos escoger  $B_0 = 1$ . Escogemos los restantes  $(M + N + 1)$  coeficientes  $A_0, A_1, \dots, A_N, B_1, \dots, B_M$  de modo que los primeros  $(M + N + 1)$  términos en la expansión de Taylor de (5) se igualen con los primeros  $(M + N + 1)$  términos de la serie de potencia  $\sum_{n=0} a_n z^n$ . La función racional que resulta  $p^{[N,M]}(z)$  se llama una aproximación de Padé. Usualmente se considera la sucesión convergente:  $p^{[J,0]}, p^{[J+1,1]}, p^{[J+2,2]}, \dots$  con  $J$  fijo,  $N = M + J$  y  $M \rightarrow \infty$ .

Aquí usaremos la secuencia diagonal  $J = 0 \rightarrow p^{[1,1]}, p^{[2,2]},$  etc.

Antes de realizar los cálculos, llevaremos a cabo la transformación de escala sugerida en (\*) de la página anterior a fin de homogeneizar la notación y los coeficientes que de ella resultan para los dos operadores definidos:

Teníamos de (6):

$$(26) \quad \left[ -\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4} x^2 + \frac{1}{4} \lambda x^4 \right] u = Eu$$

Usando la transformada de escala  $x = \sqrt{2} y$  obtenemos:

$$(27) \left[ -\frac{d^2}{2dy^2} + \frac{1}{2}y^2 + \lambda y^4 \right] u = Eu$$

$$(28) \left[ -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 + 2\lambda y^4 \right] u = 2Eu$$

Comparando con (25) para  $m = 2$

$$(25) \quad (p^2 + y^2 + \beta y^4)u = E'u \quad \text{se ve que con}$$

$$(29) \quad \beta = 2\lambda \quad ; \quad E' = 2E \quad \text{se pueden homologar los coeficientes}$$

de los desarrollo de perturbaciones respectivas:

$$E'(\beta) = \sum_{N=0} E_N \beta^N ; \quad E(\lambda) = \sum_{N=0} E^{(N)} \lambda^N \quad \text{con (29) dá:}$$

$$(30) \quad 2^N E_N = 2E^{(N)} \quad \rightarrow \quad E_N = 2^{1-N} E^{(N)}$$

Es decir en función de estos nuevos coeficientes  $E_n$  los desarrollo en serie anteriores son - siempre para el estado fundamental - los que se indican a continuación, obtenidos de la Tabla I:

$$(31) \quad E(\beta) = 1 + \frac{3}{4}\beta - \frac{21}{16}\beta^2 + \frac{333}{64}\beta^3 - \frac{30885}{1024}\beta^4 + \dots$$

Los sucesivos términos son  $\frac{E^{(N)}}{2^{N-1}}$  de la Tabla I.

De aquí, la transformada de Borel es:

$$(32) \quad F(\beta) = 1 + \frac{3}{4} \beta - \frac{21}{16 \cdot 2} \beta^2 + \frac{333}{64 \cdot 6} \beta^3 - \frac{30885}{1024 \cdot 4!} \beta^4 + \dots$$

Calculemos la primera aproximación de Padé  $F^{[1,1]}(\beta)$ , necesitamos sólo hasta el término  $\beta^2$  de  $F(\beta)$  (De manera general para  $F^{[N,N]}(\beta)$  necesitamos  $\beta^{2N}$ ). Entonces:

$$F^{[1,1]}(\beta) = \frac{a + b\beta}{1 + c\beta} = (a + b\beta)(1 - c\beta + c^2\beta^2 - \dots)$$

$$F^{[1,1]}(\beta) = a + (b - ac)\beta + c(ac - b)\beta^2 + \dots$$

Comparando, según la receta, con (32) encontramos

$$a = 1; \quad b - ac = 3/4; \quad c(ac - b) = -\frac{21}{32}$$

De aquí:

$$a = 1; \quad b = 13/8; \quad c = 7/8$$

luego:

$$(33) \quad F^{[1,1]}(\beta) = \frac{1 + 13/8 \beta}{1 + 7/8 \beta}$$

Consideremos ahora  $\beta = 0.1$ , a fin de poder comparar nuestros resultados con el artículo de Loeffel citado. Entonces para  $\beta = 0.1$

$$F^{[1,1]}(\beta t) = F^{[1,1]}(0.1t) = \frac{1 + 0.1625t}{1 + 0.0875t}$$

La integral a calcular es pues:

$$(34) \quad f^{[1,1]}(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-t} \frac{1 + 13/8 \beta t}{1 + 7/8 \beta t} dt$$

$$\beta = 0.1$$

Las integrales como la (34) se pueden integrar mediante una cuadratura gaussiana como por ejemplo las integrales de Gauss-Laguerre que son muy adecuadas pues su factor de "peso" es precisamente  $e^{-t}$ . Las fórmulas son las siguientes:

$$\int_0^{\infty} e^{-t} y(t) dt \sim \sum_{i=1}^n A_i y(t_i) .$$

Los argumentos  $t_i$  son los ceros del polinomio de Laguerre de orden  $n$

$$L_n(t) = e^t \frac{d^n}{dt^n} (e^{-t} t^n)$$

y los coeficientes  $A_i$  son

$$A_i = \frac{(n!)^2}{t_i [L'_n(t_i)]^2}$$

Tanto los números  $t_i$  como  $A_i$  estan disponibles en tablas [Abramowitz & Stegun, pág. 923]

Para los datos anteriores con  $n = 6$ , se obtienen valores exactos hasta el octavo decimal con relación a las cifras calculadas por Graffi et al.

Se puede seguir calculando los sucesivos  $F^{[N,N]}(\beta)$  hasta  $F^{[9,9]}(\beta)$ , aquí ya estaremos usando los coeficientes  $E^{(19)}$  que es nuestro penúltimo valor obtenido (en tabla I) y de allí calcular las integrales  $f_B^{[N,N]}(\beta)$  correspondientes. Lo interesante es que al comparar los valores obtenidos para  $\beta = 0.1$ , la convergencia hacia los autovalores correctos es más rápida que la usual de los aproximantes de Padé por sí solos, cuyo comportamiento está estudiado en Loeffel et al. La comparación de los valores en cuestión se da en la tabla siguiente:

TABLA II

N	$f^{[N,N]}(\beta)$	$\beta = 0.1$
1	1.064 466 872	
2	1.065 280 567	
4	1.065 285 503	
5	1.065 285 508	
6	1.065 285 509	
8	1.065 285 509	
9	1.065 285 509	

Para ese valor de  $\beta$  la aproximación de Padé:

$$f^{[20,20]}_{[0,1]} = 1.0652855095$$

Esto es desde luego muy destacable, porque  $f^{[20,20]}(\beta)$  necesita 41 términos de la serie original divergente. (Esto es lo que significa aproximación de Padé por sí sólo)

Los  $f^{[N,N]}(\beta)$  que aparecen en Loeffel, resultan de aplicar directamente el método de Padé a la serie divergente original. La conclusión general del capítulo es por un lado que al ser sumable Borel el oscilador determina de manera única los autovalores (que pueden calcularse para estados excitados igualmente mediante las fórmulas generales (22), (23)) y por otro lado que los resultados numéricos parecen resultar mejores que los conseguidos con el uso directo de los aproximantes de Padé.

## CAPITULO II

### EL EFECTO STARK

A lo largo de este capítulo nos centraremos en un nuevo ejemplo más elaborado y complejo que el previo. Se trata del análisis mediante teoría de perturbaciones del efecto Stark para el átomo de hidrógeno usando esencialmente el método desarrollado por Silverstone, ya visto en el capítulo anterior.

Como se sabe la acción de un campo eléctrico externo sobre los niveles de energía de un átomo, es lo que se conoce como efecto Stark. La serie de perturbaciones que se genera en este caso es también singular; de hecho es asintótica como está demostrado por Titchmarsh [1958]; estas series que son divergentes tienen la propiedad de que existe un término  $n$  óptimo, más allá del cual, añadir términos a la aproximación no es ventajoso, pues generalmente aumenta y no disminuye el error - respecto de la función aproximada - al realizarse la operación indicada.

Se sabe ya desde Schrödinger [1926] que la ecuación que lleva su nombre para el caso del efecto Stark (átomo de hidrógeno) es separable

en coordenadas parabólicas. Seguiremos la definición del artículo por Silverstone [1977] que es levemente diferente de las definiciones usuales. La solución del problema del átomo de hidrógeno (y de cualquier movimiento de un campo central) en coordenadas parabólicas es útil para una serie de problemas donde se privilegia a una dirección determinada del espacio; en este caso la dirección del campo eléctrico externo.

Las coordenadas parabólicas  $\sigma$ ,  $\rho$ ,  $\phi$  se definen mediante las fórmulas:

$$(1) \quad \begin{aligned} x &= (-2E)^{-1/2} (\sigma\rho)^{1/2} \cos \phi & \sigma &= (-2E)^{1/2} (r + z) \\ y &= (-2E)^{-1/2} (\sigma\rho)^{1/2} \sin \phi & \rho &= (-2E)^{1/2} (r - z) \\ z &= \frac{1}{2} (-2E)^{-1/2} (\sigma - \rho) & \phi &= \arctg y/x \end{aligned}$$

De aquí entonces usando que las coordenadas son ortogonales y las fórmulas usuales para transformación de coordenadas:

$$(2) \quad h_{\sigma}^2 = \frac{1}{(-2E)} \frac{\sigma + \rho}{4\sigma} ; \quad h_{\rho}^2 = \frac{1}{(-2E)} \frac{\sigma + \rho}{4\rho} ; \quad h_{\phi}^2 = \frac{1}{(-2E)} (\sigma\rho)$$

Entonces el elemento de longitud viene dado por:

$$(3) \quad ds^2 = \frac{1}{(-2E)} \left[ \frac{\sigma + \rho}{4\sigma} d\sigma^2 + \frac{\sigma + \rho}{4\rho} d\rho^2 + (\sigma\rho) d\phi^2 \right]$$

La ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno en un campo uniforme electrostático es:

$$(4) \quad \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} + Fz - E \right] \psi = 0$$

Aquí el campo  $F$  está dirigido en el sentido positivo del eje  $z$  y el operador de perturbación (Energía del electrón en el campo  $F$ ) es  $Fz$ . El campo de atracción coulombiano está representado por el término inverso de  $r$ . Se trabaja en unidades atómicas ( $\hbar = 1$ ,  $m = 1$ , etc.).

La fórmula del laplaciano en coordenadas curvilíneas es:

$$(I) \quad \nabla^2 \psi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left| \frac{\partial}{\partial q_1} \left[ \frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \psi}{\partial q_1} \right] + \frac{\partial}{\partial q_2} \left[ \frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial \psi}{\partial q_2} \right] + \frac{\partial}{\partial q_3} \left[ \frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \psi}{\partial q_3} \right] \right|$$

Usando esta fórmula obtenemos la ecuación de Schrödinger (4) en coordenadas parabólicas.

Usando las definiciones auxiliares:

$$(5a) \quad a = (-2E)^{-1/2} ; \quad f = \frac{1}{4} (-2E)^{-3/2} F$$

$$(5b) \quad E = -\frac{1}{2} (\beta_1 + \beta_2)^{-2}$$

En que  $\beta_1$  y  $\beta_2$  son las constantes de separación (acoplamiento) que aparecen al separar en coordenadas parabólicas.

$$(6) \quad \nabla^2 = \frac{1}{a^2} \left\{ \frac{4}{(\sigma+\rho)} \left| \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ \sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} \right] + \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right] \right| + \frac{1}{\partial \rho} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

$$\frac{1}{r} = \frac{2}{a(\rho+\sigma)} ; \quad Fz = \frac{Fa}{2} (\sigma-\rho)$$

La separación de variables impone que definamos la función-separación como:

$$(7) \quad \psi = (\sigma\rho)^{-1/2} \phi_1(\sigma)\phi_2(\rho) e^{im\phi}$$

Con ello la ecuación de Schrödinger queda:

$$(8) \quad \left[ \frac{m-1}{4\sigma} \right] - \frac{\sigma\phi_1''(\sigma)}{\phi_1(\sigma)} + \frac{Fa^3\sigma^2}{4} - (\beta_1 + \beta_2) - \frac{Fa^3\rho^2}{4} +$$

$$\left[ \frac{m^2-1}{4\rho} \right] - \frac{\rho\phi_2''(\rho)}{\phi_2(\rho)} - \frac{Ea^2}{2} (\sigma+\rho) = 0$$

Pero  $Ea^2 = E(-2E)^{-1} = -1/2$  entonces, separando variables queda:

$$(9a) \quad \left[ -\sigma \frac{d^2}{d\sigma^2} + \frac{(m^2-1)}{4} + f\sigma^2 + \frac{1}{4}\sigma - \beta_1 \right] \phi_1(\sigma) = 0$$

$$(9b) \quad \left[ -\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{(m^2-1)}{4\rho} - f\rho^2 + \frac{1}{4}\rho - \beta_2 \right] \phi_2(\rho) = 0$$

La energía se determina a partir de la constante de separación usando (5b). El número cuántico magnético  $m$  aparece sólo en la forma  $\frac{1}{4}(m^2-1)$ , por lo que usaremos esta combinación y la llamaremos  $M$ :

$$(9c) \quad M = \frac{1}{4}(m^2-1)$$

Consideraremos la ecuación (9a) o (9b) como ecuaciones perturbadas, en que el rol de la perturbación lo jugará obviamente el término correspondiente a el campo eléctrico "f" y el papel de la "energía perturbada" habitual lo desempeñarán las constantes de acoplamiento  $\beta_i$ . A fin de hacer más cómoda la notación para las necesidades futuras definiremos el símbolo  $k_i$ , para las constantes de separación no-perturbadas:

$$(10) \quad k_i = \beta_i^{(0)} = n_i + \frac{1}{2} |m| + \frac{1}{2} \quad i = 1, 2 \quad n_i = 0, 1, 2, \dots$$

En (10) hemos introducido la definición habitual usada en Landau & Lifshitz [M.C.] cuando trata el movimiento general coulombiano en coordenadas parabólicas (salvo pequeñas diferencias en las definiciones que son sólo convencionales). En el problema general en coordenadas parabólicas los números cuánticos son entonces  $n_1$ ,  $n_2$  y  $m$ . Los 2 primeros se conocen como "números cuánticos parabólicos",  $m$  es el usual rótulo magnético. De más está decir, que estamos considerando el espectro discreto de energía ( $E < 0$ ). De allí la definición para  $\underline{a}$ .

Las ecuaciones para el átomo de hidrógeno sin perturbación tienen soluciones que son funciones hipergeométricas confluentes las que se pueden expresar como los polinomios de Laguerre generalizados. A partir de ellos se pueden definir un conjunto de funciones base que nos sirvan para resolver el problema perturbativo. Puesto que la diferencia esencial entre las ecuaciones (9a) y (9b) es el signo de  $f$ , es suficiente considerar sólomente cualquiera de ellas, digamos (9a)

$$(11) \quad -\sigma \frac{d^2 \phi_1(\sigma)}{d\sigma^2} + \frac{M}{\sigma} \phi_1(\sigma) + \frac{1}{4} \sigma \phi_1(\sigma) + f \sigma^2 \phi_1(\sigma) = \beta_1 \phi_1(\sigma)$$

perturbación

Como siempre supondremos que se pueden desarrollar las cantidades necesarias (autofunciones y autovalores) como una serie de potencias en  $f$ . Suprimiendo los sub-índices (salvo  $n_1$  y  $n_2$ , pues  $n$  es el número cuántico principal), se puede escribir el problema perturbativo así:

$$(12) \quad \beta_i = \beta(k_i, M, f) \quad i = 1, 2$$

↓

$$(13) \quad \beta(k, M, f) = \sum_{N=0}^{\infty} \beta^{(N)} f^N \quad (\beta = \beta_1 \text{ o } \beta_2)$$

Siguiendo a Silverstone [1978], introduciremos una base de funciones  $\{|j\rangle\}$  que no están normalizadas y que son autofunciones del Hamiltoniano no perturbado  $H^{(0)}$ :

$$(14) \quad H^{(0)} |j\rangle = \left[ -\sigma \frac{d^2}{d\sigma^2} + \frac{M}{\sigma} + \frac{1}{4} \sigma \right] |j\rangle = (k + j) |j\rangle$$

Las autofunciones  $|j\rangle$  se definen así:

$$(15) \quad |j\rangle = N_j \left[ \frac{(n_1+j)!}{(n_1+j+m)!} \right]^{1/2} \sigma^{(|m|+1)/2} e^{-\sigma/2} (-1)^{n_1+j} \times$$

$$\times L_{n_1+j}^{|m|}(\sigma)$$

(¡Insistimos en que estamos sólo usando la variable  $\sigma$  pues el desarrollo en relación a la variable  $\rho$  es prácticamente idéntico!)

La forma aparentemente complicada de las autofunciones  $|j\rangle$  proviene esencialmente de las relaciones de ortonormalidad de los polinomios generalizados de Laguerre  $L_n^m(x)$ .  $N_j$  es una constante que "rompe" la normalización y está dada por:

$$\begin{aligned}
 (16) \quad N_j &= \prod_{i=0}^{j-1} [(k+i)(k+i+1)-M]^{1/2} & (j \geq 1) \\
 &= 1 & (j = 0) \\
 &= \prod_{i=1}^{|j|} [(k-i)(k-i+1)-M]^{-1/2} & (-1 \geq j \geq -n_1)
 \end{aligned}$$

i Nuevamente observamos que  $k$  en las fórmulas de arriba es el  $k_1$  definido anteriormente ( $k_1$  está relacionado con  $\underline{\sigma}$ ,  $k_2$  con  $\underline{\rho}$  )!

La función  $|0\rangle$ , está normalizada a la unidad como se puede verificar usando (16) y las propiedades de ortonormalidad de los polinomios de Laguerre. Observando (14) se ve que esta autofunción  $|0\rangle$  corresponde a la autofunción no-perturbada perteneciente a la constante de separación no-perturbada  $k$ .

Se trata ahora de calcular la matriz de perturbación sobre estas funciones-base (Usando el mismo camino desarrollado en el primer capítulo, al desarrollar  $c/r$  a las funciones propias del operador no perturbado).

Previamente recordaremos algunas propiedades de los polinomios de Laguerre generalizados que nos serán útiles:

Las relaciones que nos interesan son fundamentalmente las de recurrencia

$$(a) \quad xL_n^k(x) = (2n+k+1)L_n^k(x) - (n+1)L_{n+1}^k(x) - (n+k)L_{n-1}^k(x)$$

$$(b) \quad \int_0^{\infty} e^{-x} x^k L_n^k(x) L_m^k(x) dx = \frac{\Gamma(k+n+1)}{n!} \delta_{nm}$$

A partir de (a) se puede deducir la relación que necesitamos, a saber:

$$(c) \quad x^2 L_n^k(x) = (n+k)(n+k-1)L_{n-2}^k(x) - 2(2n+k)(n+k)L_{n-1}^k(x) + \\ + \{(n+1)(4n+3k+2) + (n+k)(2n+k)\} L_n^k(x) - 2(n+1)(2n+k+2)L_{n+1}^k(x) + \\ + (n+1)(n+2)L_{n+2}^k(x)$$

A partir de ésta última se puede calcular la matriz deseada:

$$(17) \quad \sigma^2 |j\rangle = \sum_i v_{ij}(k, M) |i\rangle$$

Como se ve por (c), solamente subsisten 5 términos para cada índice  $j$ . Realizaremos los cálculos explícitamente sólo para uno de ellos

a modo de ejemplo, pues el álgebra a usar es algo engorrosa

$$(18) \quad \sigma^2 |j\rangle = N_j [(n_1+j)!/(n_1+j+m)!]^{1/2} \sigma^{(m+1)/2} e^{-\sigma/2} (-1)^{n_1+j} \\
\left[ (n_1+j+m)(n_1+j+m-1) L_{n_1+j-2}^m(\sigma) - (n_1+j+m)(1(n_1+j)+2m) L_{n_1+j-1}^m(\sigma) + \right. \\
+ \left. \{ [2(n_1+j)+m+1]^2 + (n_1+j+1)(n_1+j+m+1) + (n_1+j)(n_1+j+m) \} L_{n_1+j}^m(\sigma) - \right. \\
\left. - 2(n_1+j+1)[2(n_1+j)+m+2] L_{n_1+j+1}^m(\sigma) + (n_1+j+1)(n_1+j+2) L_{n_1+j+2}^m(\sigma) \right]$$

Comparando (17) con (18) y usando la definición (15) se ve que para, por ejemplo  $i = j+2$ , y ya que:

$$|j+2\rangle = N_{j+2} [(n_1+j+2)!/(n_1+j+m+2)!]^{1/2} \sigma^{(m+1)/2} e^{-\sigma/2} (-1)^{n_1+j+2} \times \\
\times L_{n_1+j+2}^m(\sigma)$$

Entonces:

$$v_{j+2,j} |j+2\rangle = \frac{N_j}{N_{j+2}} \{ (n_1+j+m+1)(n_1+j+m+2)(n_1+j+1)(n_1+j+2) \}^{1/2} |j+2\rangle$$

pero recordando que  $k = n_1 + \frac{1}{2}m + \frac{1}{2}$  y usando la definición de  $N_j$  (para  $j \geq 1$ , por ejemplo, ya que idénticos resultados se obtienen para los otros casos explicitados en (16)).

$$\begin{aligned}
& (n_1 + j + m + 1)(n_1 + j + m + 2)(n_1 + j + 1)(n_1 + j + 2) = \\
& = \left[ k + \frac{1}{2} m + j + \frac{1}{2} \right] \left[ k + \frac{1}{2} m + j + \frac{3}{2} \right] \times \left[ k - \frac{m}{2} + \frac{1}{2} + j \right] \left[ k - \frac{m}{2} + \frac{3}{2} + j \right] = \\
& = \left[ (k+j) + \frac{m+1}{2} \right] \left[ (k+j+1) + \frac{m+1}{2} \right] \times \left[ (k+j) - \frac{m-1}{2} \right] \left[ (k+j+1) - \frac{m-1}{2} \right] ;
\end{aligned}$$

pero  $\left[ \frac{m+1}{2} \right] \left[ \frac{m-1}{2} \right] = \frac{1}{4} (m^2 - 1) = M$  luego la expresión anterior es:

$$\begin{aligned}
& = [(k+j)^2 + (k+j)-M][(k+j+1)^2 + (k+j+1)-M] = \\
& = [(k+j)(k+j+1)-M][(k+j+1)(k+j+2)-M] .-
\end{aligned}$$

Pero

$$\frac{N_j}{N_{j+2}} = [[(k+j)(k+j+1)-M][(k+j+1)(k+j+2)-M]]^{-1/2}$$

luego

$$v_{j+2,j} = 1$$

De igual manera se pueden calcular los restantes términos no-nulos cuyos valores como polinomios en  $k$  y  $M$  se proporcionan a renglón seguido:

$$\begin{aligned}
 (19) \quad v_{ij}(k,M) &= 1 & i &= j+2 \\
 &= -4(k + j + \frac{1}{2}) & i &= j+1 \\
 &= 6(k+j)^2 - 2M & i &= j \\
 &= -4(k+j - \frac{1}{2})[(k+j+1)(k+j)-M] & i &= j-1 \\
 &= [(k+j-2)(k+j-1)-M][(k+j-1)(k+j)-M] & i &= j-2 \\
 &= 0 & & \text{para otros valores de } i.
 \end{aligned}$$

A continuación seguiremos el mismo camino ya usado en el primer capítulo y expandiremos los sucesivos órdenes de perturbación  $\phi^{(N)}$  sobre las bases  $\{|j\rangle\}$  a fin de obtener las relaciones de recurrencia para los coeficientes de esa expansión y para las constantes de separación (que como recordaremos juegan el papel de autovalores de nuestras ecuaciones). Sea:

$$(20) \quad \phi = \sum \phi_f^{(N)}$$

$$(21) \quad \phi^{(N)} = \sum_{j \neq 0} c_j^{(N)}(k,M) |j\rangle \quad - \quad \phi^{(0)} = |0\rangle$$

Insistimos en las definiciones, a fin de evitar las confusiones,  $\phi$  representa la autofunción del operador perturbado con sus correspondientes términos perturbados  $\phi^{(N)}$ . Las  $\{|j\rangle\}$  son autofunciones del operador no-perturbado.

Como operador perturbado podemos usar cualquiera de los dos (9a) o (9b), que tienen la misma forma salvo el signo de  $f$ . Esta última diferencia implica entonces que:

$$(22a) \quad \beta_1 = \beta(k_1, M, f) ; \quad \beta_2 = \beta(k_2, M, -f) \quad \rightarrow$$

$$(22b) \quad \beta_1 = \sum_{N=0}^{\infty} \beta^{(N)}(k, M) f^N ; \quad \beta_2 = \sum_{N=0}^{\infty} \beta^{(N)}(k_2, M) (-1)^N f^N$$

Escogemos entonces el primero de ellos y desarrollamos:

Usando entonces (9a) y (14) tenemos:

$$(23) \quad H = H^{(0)} + f\sigma^2 \quad \text{que es el operador perturbado.}$$

La ecuación de autovalores correspondiente es:

$$(24) \quad H\phi = \beta_1\phi \quad \text{con } \phi \text{ dado por (20) y } \beta_1 \text{ por (22b).}$$

A partir de ahora volveremos a la convención ya considerada de llamar  $\beta$  a  $\beta_1$  con fines generalizadores.

Entonces se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$(25) \quad \sum_N f^N H^{(0)} \phi(N) + \sum_N f^{N+1} \sigma^2 \phi(N) = \sum_{N=0} f^N \sum_{\nu=0}^N \beta^{(N-\nu)} \phi(\nu)$$

Para  $N = 0$  esta ecuación queda:

$$(26a) \quad H^{(0)}\phi^{(0)} = \beta^{(0)}\phi^{(0)}$$

que es la ecuación no perturbada si tomamos en cuenta las equivalencias:

$$(26b) \quad \phi^{(0)} = |0\rangle; \quad \beta^{(0)} = k \rightarrow H^{(0)}|0\rangle = k|0\rangle$$

que corresponde a (14) para la autofunción no perturbada perteneciente a la constante de separación no perturbada.

Para  $N \geq 1$  la ecuación queda:

$$(27) \quad H^{(0)}\phi^{(N)} + \sigma^2\phi^{(N-1)} = \sum_{\nu=0}^N \beta^{(N-\nu)}\phi^{(\nu)}$$

Ahora utilizando la definición (21) queda:

$$\sum_{j \neq 0} C_j^{(N)} H^{(0)}|j\rangle + \sum_{j \neq 0} C_j^{(N-1)} \sigma^2|j\rangle = \sum_{\nu=0}^N \beta^{(N-\nu)} \sum_{m \neq 0} C_m^{(\nu)}|m\rangle$$

Utilizando las definiciones previas respecto a  $\sigma^2$  y  $H^{(0)}$

$$\sum_{j \neq 0} C_j^{(N)} (k+j)|j\rangle + \sum_{j \neq 0} C_j^{(N-1)} \sum_i v_{ij}|i\rangle = \sum_{m \neq 0} C_m^{(\nu)} \sum_{\nu=0}^N \beta^{(N-\nu)}|m\rangle$$

Cambiando índices y reordenando:

$$\sum_{j \neq 0} c_j^{(N)} (k+j) |j\rangle + \sum_j \sum_{i \neq 0} c_i^{(N-1)} v_{ji} |j\rangle = \sum_{j \neq 0} \sum_{v=0}^N \beta^{(N-v)} c_j^{(v)} |j\rangle$$

A partir de esta última podemos obtener la relación:

$$(28) \quad c_j^{(N)} = - \frac{1}{(k+j)} \left[ \sum_{i \neq 0} v_{ji} c_i^{(N-1)} - \sum_{v=0} \beta^{(N-v)} c_j^{(v)} \right] \quad (j \neq 0)$$

En (28) se pueden observar ciertos detalles, a saber:

En la segunda suma del segundo miembro hay dos términos que podemos separar: i)  $v = 0$ ; ii)  $v = N$ . Analizemos separadamente cada uno de ellos.

i) Para  $v = 0$  el término resulta ser  $\beta^{(N)} c_j^{(0)} = \beta^{(N)} \delta_{j0}$ . Esto último surge de comparar (26b) y (21) como condición de consistencia de las definiciones. Esto implica que - ya que  $j \neq 0$  - el término en cuestión es nulo.

ii) Para  $v = N$ , el término correspondiente es:  $\beta^{(0)} c_j^{(N)}$ , pero  $\beta^{(0)}$  es el término no perturbado de la constante de separación, por definición  $\beta^{(0)} = k$  - el término es  $k c_j^{(N)}$  - la expresión (28) modificada por este análisis es:

$$c_j^{(N)} = - \frac{1}{(k+j)} \left[ \sum_{i \neq 0} v_{ji} c_i^{(N-1)} - \sum_{v=1}^{N-1} \beta^{(N-v)} c_j^{(v)} - k c_j^{(N)} \right]$$

De la que se puede deducir:

$$(29) \quad C_j^{(N)} = -\frac{1}{j} \left[ \sum_{i \neq 0} v_{ji} C_i^{(N-1)} - \sum_{v=1}^{N-1} \beta^{(N-v)} C_j^{(v)} \right]$$

Esta es una de las dos relaciones que buscábamos. La otra se obtiene del siguiente modo:

Observando las relaciones (20) y (21) se ve que el único modo de darle significado lógicamente consistente a los coeficientes con sub-índice ce cero está dado por la delta de Kroenecker, i.e.:

$$(*) \quad C_0^{(v)} = \delta_{0v}$$

Insertando esta relación en (28) queda:

$$C_0^{(N)} = 0 = -\frac{1}{k} \left[ \sum_{i \neq 0} v_{0i} C_i^{(N-1)} - \beta^{(N)} \right] \rightarrow$$

$$(30) \quad \beta^{(N)}(k, M) = \sum_{i \neq 0} v_{0i} C_i^{(N-1)}$$

Así obtenemos las dos cantidades que nos interesan. Las constantes de separación  $\beta^{(N)}$  son polinomios en  $k$  y  $M$ , como asimismo los coeficientes  $C_j^{(N)}$ .

A partir de estas relaciones de recurrencia y las expresiones de la matriz de perturbaciones podemos calcular los valores numéricos de los coeficientes polinomiales.

Tomando en cuenta (\*) e incluyendo en (29) y (30) el valor correspondiente a  $i = 0$  (para evitar inconsistencias) se obtienen:

$$C_{\ell}^{(1)} = -\frac{v_{\ell 0}}{\ell} \quad y \quad \beta^{(1)} = v_{00}$$

Estos resultados coinciden con los que se obtendría mediante Teoría de Perturbaciones común, para el primer orden. A partir de ellos se establece la siguiente tabla de valores para los coeficientes polinomiales que corresponden a los sucesivos términos  $\beta^{(N)}$  de la serie de perturbación de la constante de separación. Ejemplo:

$$\beta^{(1)} = v_{00} = 6k^2 - 2M$$

De manera general:

$$\beta^{(N)} = \sum_{rs} \beta_{rs}^{(N)} M^r k^s$$

TABLA 2: Constantes de separación (Orden de perturbación hasta N° 8)

N	r	s	$B_{rs}^{(N)}$	N	r	s	$B_{rs}^{(N)}$
1	0	2	6	6	0	1	-1656500
	1	0	-2		0	3	-43002592
2	0	1	-10		0	5	-113822520
	0	3	-68		0	7	-50118384
	1	1	36		1	1	12051720
3	0	2	660		1	3	72439200
	0	4	1500		1	5	55719216
	1	0	-120		2	1	-5881416
	1	2	-1032		2	3	-12182480
	2	0	44		3	1	552912
4	0	1	-2210	7	0	2	484419360
	0	3	-37900		0	4	3997074984
	0	5	-42756		0	6	6142374000
	1	1	12960		0	8	1905807816
	1	3	35640		1	0	-60441600
	2	1	-3636		1	2	-1663495776
5	0	2	381264		1	4	-4778464320
	0	4	2093280		1	6	-2379352416
	0	6	1400784		2	0	46142240
	1	0	-54240		2	2	657768432
	1	2	-1029600		2	4	728298480
	1	4	-1364160		3	0	-8886688
	2	0	33712		3	2	-53877984
	2	2	229200		4	0	450696
	3	0	-3680				

continuación Tabla 2:

N	r	s	$\beta_{rs}^{(N)}$
	0	1	-2564063050
	0	3	-83943936120
	0	5	-331953386940
	0	7	-330097271640
	0	9	-75783847700
	1	1	20998605600
8	1	3	182925628704
	1	5	302909140800
	1	7	104928884208
	2	1	-12837436200
	2	3	-60110940120
	2	5	-39436837272
	3	1	2155524912
	3	3	4336206000
	4	1	-98489884

Hasta aquí tenemos - o podemos calcular en general- los sucesivos órdenes de perturbación para las constantes de separación (recordemos que son dos) en función de los parámetros  $k$  y  $M$ . Lo que verdaderamente necesitamos es, obviamente, la serie de perturbación correspondiente para las energías (autoenergías) del sistema. Esto es:

$$(31) \quad E = E^{(0)} + E^{(1)}_F + E^{(2)}_{F^2} + \dots$$

Donde como recordaremos  $F$  es la magnitud del campo aplicado. Es cribiremos de nuevo las relaciones que ligan las diversas variables que nos preocupan:

$$(5a) \quad f = \frac{1}{4} (-2E)^{-3/2} F ; \quad (5b) \quad E = -\frac{1}{2} (\beta_1 + \beta_2)^{-2}$$

Se trata pues de encontrar una expresión para (31) en función de las series conocidas de  $\beta_i$ .

La cuestión aquí, es que las series de  $\beta_i$  están dadas en función de  $f$ . Una manera - la más directa - de hacerlo es expresar el cociente (5b) como serie en  $f$ , usando las series de  $\beta_1$  y  $\beta_2$ . Este camino resulta extraordinariamente engorroso pues ya sea que se use la expansión:

$$E = -(\beta_1 + \beta_2)^{-2} = \frac{1}{\beta_1^2} \left[ -1 + 2 \frac{\beta_2}{\beta_1} - 3 \left[ \frac{\beta_2}{\beta_1} \right]^2 + 4 \left[ \frac{\beta_2}{\beta_1} \right]^3 - \dots \right]$$

o más directamente el reemplazo en la fórmula que da  $E$  de la suma de las series  $\beta(k_1, M, f)$   $\beta(k_2, M, -f)$  el cálculo de solamente los primeros términos de la serie en función de  $f$  requiere demasiados pasos (y necesariamente crecientes aproximaciones). Un método alternativo y más eficiente nos lo proporciona la "expansión o fórmula de Lagrange" cuya forma y justificación puede encontrarse en textos standard de Análisis Matemático como por ejemplo en Whittaker y Watson, pág. 133. La manera formal usual de presentarla es la siguiente:

Si  $f(z)$  y  $\phi(z)$  son funciones analíticas en una región  $C$  que rodea al punto  $a$  entonces la ecuación:

$$\xi = a + t\phi(\xi)$$

tiene una raíz en el interior de  $C$  (Mirada como ecuación en  $\xi$ ). Además cualquier función de  $\xi$  analítica en y dentro de  $C$  puede expandirse como una serie de potencia por fórmula:

$$(I) \quad f(\xi) = f(a) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \frac{d^{n-1}}{da^{n-1}} \left[ f'(a) \{\phi(a)\}^n \right]$$

Intentaremos hacer uso de esta fórmula para nuestro objetivo. A tal fin definiremos ciertas variables que permitirán convertir directamente la serie de la energía como una expansión en  $F$ .

Denotaremos por  $\gamma$  la suma de las constantes de separación:

$$(32) \quad \gamma = \beta_1 + \beta_2 = \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)}_f + \gamma^{(2)}_f{}^2 + \dots$$

con

$$(33) \quad \gamma^{(N)} = \beta_1^{(N)} + \beta_2^{(N)} \quad \text{esto es:}$$

$$= \beta^{(N)}(k_1, M) + (-1)^N \beta^{(N)}(k_2, M)$$

Con esta definición  $\gamma$  puede ser caracterizado como "número cuántico principal perturbado" ya que  $\gamma^{(0)}$  es el habitual número cuántico  $n$  (principal) sin perturbar:

$$(34) \quad \gamma^{(0)} = \beta_1^{(0)} + \beta_2^{(0)} = k_1 + k_2 = n_1 + n_2 + |m| + 1 = n.$$

De acuerdo a las definiciones convencionales (Landau & Lifschitz).

Usando (5a), (5b) y (32) se ve que:

$$(35) \quad E = -\frac{1}{2} \gamma^{-2} ; \quad f = \frac{1}{4} (\gamma^3 F)$$

$$(36) \quad \gamma = \gamma^{(0)} + \gamma^{(1)} \left( \frac{1}{4} \gamma^3 F \right) + \gamma^{(2)} \left( \frac{1}{4} \gamma^3 F \right)^2 + \dots$$

Esta es una ecuación implícita para  $\gamma$  que se puede simbolizar de modo más general:

$$\gamma = \gamma^{(0)} + \Phi(\gamma) \quad \text{Siendo } F \text{ un parámetro.}$$

De acuerdo a esta expresión y la fórmula (I) la expansión de Lagrange para la energía dada por (35) (que corresponde a la  $f$  de (I)) sería:

$$E = -\frac{1}{2} \gamma^{-2} = -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \frac{d}{d\gamma^{(0)}} \right]^{n-1} \left\{ \left[ \frac{d}{d\gamma^{(0)}} \left[ -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} \right] \right] \left\{ \Phi(\gamma^{(0)}) \right\}^n \right\}$$

$$\text{Pero } \Phi(\gamma) = \gamma - \gamma^{(0)} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \gamma^{(\nu)} \left[ \frac{1}{4} \gamma^3 F \right]^{\nu}$$

Esto a partir de (36), luego la fórmula de la página anterior queda así:

$$(37) \quad E = -\frac{1}{2} \gamma^{-2} = -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[ \frac{d}{d\gamma} \right]^{n-1} \left\{ \left[ \frac{d}{d\gamma} \left[ -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} \right] \right] \left[ \sum_{\nu=1}^{\infty} \gamma^{(\nu)} \left[ \frac{1}{4} \gamma^{(0)3_F} \right]^{\nu} \right]^n \right\}$$

La expresión de arriba parece muy complicada, pero se puede obtener una forma más manejable y útil si seguimos el siguiente camino:

Tomemos la expresión dentro del segundo paréntesis cuadrado; la llamaremos convencionalmente  $\mathbb{P}$ .

$$\left[ \sum_{\nu=1}^{\infty} \gamma^{(\nu)} \left[ \frac{1}{4} \gamma^{(0)3_F} \right]^{\nu} \right]^n$$

$\mathbb{P}$  puede ser considerado como un "polinomio" infinito elevado al exponente  $n$ . De consiguiente estudiaremos el desarrollo general de la potencia de un polinomio.

Sea:

$$f(z) = (a_1 z + a_2 z^2 + a_3 z^3 + \dots + a_k z^k)^n$$

el término genérico del desarrollo de  $f(z)$  es:

$$(IIa) \quad \frac{n!}{i_1! i_2! \dots i_k!} a_1^{i_1} a_2^{i_2} \dots a_k^{i_k} z^{i_1 + 2i_2 + 3i_3 + \dots + ki_k}$$

Con la condición:

$$(IIb) \quad i_1 + i_2 + i_3 + \dots + i_k = n.$$

Para futuros usos advertiremos las cotas del exponente  $\underline{r}$  de  $z$  en (IIa):

$$(III) \quad \begin{array}{l} r_{\text{mín}} = n \quad \leftarrow \quad i_1 = n \quad \quad i_j = 0 \quad \quad \forall j \neq 1 \\ r_{\text{máx}} = kn \quad \leftarrow \quad i_k = n \quad \quad i_j = 0 \quad \quad \forall j \neq k \end{array}$$

es decir:

$$n \leq r \leq kn .$$

La expresión (IIa) se obtiene sinteticamente así: Observemos que cada término de  $f(z)$  es el resultado de multiplicar  $n$  términos independientes provenientes de cualesquiera de los respectivos  $n$  paréntesis polinomiales idénticos. Para un exponente fijo de  $z$  (digamos  $r_1$ ) existen un conjunto de particiones distintas del conjunto  $\{i_j\}_{j=1, \dots, k}$  cuya suma es  $r_1$ . A cada una de estas particiones se les asocia un coeficiente multiplicativo que se obtiene considerando que los  $i_1$  términos  $a_1$  se pueden escoger de  $\binom{n}{i_1}$  maneras, los  $i_2$  términos  $a_2$  de  $\binom{n-i_1}{i_2}$  maneras, los  $i_3 a_3$  de  $\binom{n-i_1-i_2}{i_3}$  modos, etc. Es decir el número de maneras total en que se puede obtener esta partición específica es:

$$(IV) \quad \binom{n}{i_1} \binom{n-i_1}{i_2} \binom{n-i_1-i_2}{i_3} \dots \binom{i_{k-1} + i_k}{i_{k-1}} \binom{i_k}{i_k} =$$

$$= \frac{n!(n-i_1)!(n-i_1-i_2)! \dots (i_{k-1} + i_k)!i_k!}{i_1!(n-i_1)!i_2!(n-i_1-i_2)! \dots i_{k-2}!(i_{k-1}+i_k)!i_{k-1}!(i_k)!i_k!} = \frac{n!}{i_1!i_2! \dots i_k!}$$

que es el resultado (IIa) deseado. La forma del exponente de  $z$  correspondiente resulta obviamente, como se ve al observar el término susodicho, que sin tomar en cuenta el coeficiente anterior es:

$$(a_1 z)^{i_1} (a_2 z^2)^{i_2} (a_3 z^3)^{i_3} \dots (a_k z^k)^{i_k}$$

Ya establecidos los resultados necesarios nos abocamos a usarlos en nuestra expresión original.

De acuerdo a lo anterior el término genérico de  $\mathbb{P}$  es:

$$\frac{n!}{i_1!i_2! \dots i_k!} \gamma^{(1)i_1} \gamma^{(2)i_2} \dots \gamma^{(k)i_k} \times$$

$$\times \left[ \frac{1}{4} \gamma^{(0)}_3 F \right]^{i_2 + 2i_2 + 3i_3 + \dots + ki_k}$$

con  $i_1 + \dots + i_k = n$ .

Entonces  $\mathbb{P}$  se puede escribir de un modo más claro y utilizable en la forma de una serie infinita en  $F$ .

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P} = & \sum_{i_1+2i_2+\dots+ki_k=N} \frac{n!}{i_1!i_2!\dots i_k!} \gamma^{(1)i_1} \gamma^{(2)i_2} \dots \gamma^{(k)i_k} \times \\
 & \times \left[ \frac{1}{4} \gamma^{(0)3} \right]^{i_1+2i_2+3i_3+\dots+ki_k}
 \end{aligned}$$

Es decir estamos ordenando  $\mathbb{P}$  según potencias de  $N$  (con todas las particiones asociadas a  $N$ , como ya se estableció).

Volviendo al resultado (37), vemos que ya podemos transformar todo lo que aparece a la derecha de la derivada enésima en una sola gran suma:

$$\frac{d}{d\gamma^{(0)}} \left[ -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} \right] = \gamma^{(0)-3} - \gamma^{(0)-3} \times \mathbb{P} = \mathbb{Q}$$

$$\mathbb{Q} = \sum_{i_1+2i_2+\dots+ki_k=N} \frac{n!}{i_1!i_2!\dots i_k!} \gamma^{(1)i_1} \dots \gamma^{(k)i_k} \gamma^{(0)3(N-1)} 4^{-N} \mathbb{F}^{-N}$$

Recordar que (IIb)  $\sum_{j=1}^k i_j = n$ .

Donde hemos simplemente reducido la sumatoria a su valor  $N$  para los términos en que importa sólo ese valor.

Dada la condición (IIb)  $\rightarrow$  sabemos que el exponente mínimo es  $n \Rightarrow$

$N \geq n$  De modo que al derivar la expresión  $Q$  a los  $(n-1)$  ésima potencia se obtendrá:

$$(38) \quad \frac{d^{n-1}}{d\gamma^{(0)n-1}} Q = \sum_{i_1+2i_2+\dots+ki_k=N} \frac{4^{-N} F^N n!}{i_1! i_2! \dots i_k!} \times$$

$$\times \left[ \prod_{j=1}^k \gamma^{(j)i_j} \right] (3N-3)(3N-4)\dots(3N-(n+1)] \gamma^{(0)} (3N-n-2)$$

Entonces (37) se hace:

$$(39) \quad E = -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} + \sum_{N=1}^k \sum_{i_1+2i_2+\dots+ki_k=N} \frac{(3N-3)! 4^{-N} F^N}{(3N-2-\sum_j i_j) i_1! i_2! \dots i_k!} \times$$

$$\times \gamma^{(1)i_1} \gamma^{(2)i_2} \dots \gamma^{(k)i_k} \gamma^{(0)[3N-2-\sum_j i_j]}$$

Donde hemos explicitado la condición (IIb) en los exponentes. Antes de establecer la fórmula final hay que hacer un comentario respecto a la cota  $k$  de las sumatorias involucradas.

$k$  es la cota superior de las sumas usadas. Dado que

$$\sum_{j=1}^k j i_j = N$$

Se ve que ese valor máximo ha de ser precisamente  $N$ . Supongamos que no fuera así  $\Rightarrow \exists k > N$  con  $i_k \neq 0$  tal que  $i_1 + 2i_2 + \dots + Ni_n + \dots + ki_k = N$  lo cual evidentemente es imposible, dado que  $i_j \geq 0 \quad \forall j$

(entero) cuando  $k = N \rightarrow i_k = i_N = 1$  y todos los demás  $i_j$  son nulos. Entonces el término general que acompaña a  $F^N$  en la serie de la energía (39) es:

$$(40) \quad E^{(N)} = 4^{-N} \sum_{i_1+2i_2+\dots+Ni_N=N} \frac{(3N-3)!}{(3N-2-\sum_j i_j) i_1! i_2! \dots i_N!} \gamma^{(1)i_1} \gamma^{(2)i_2} \dots \gamma^{(N)i_N} \gamma^{(0)[3N-2-\sum_j i_j]}$$

con  $i_j \geq 0 \quad \forall j$ .

A modo de ejemplo calcularemos algunos valores para las distintas órdenes de perturbación más básicos:

i) Si  $N = 1$  sólo es posible  $i_1 = 1 \rightarrow 3 \cdot 1 - 2 \cdot 1 = 1 \rightarrow$

$$E^{(1)} = \frac{1}{4} \gamma^{(1)}$$

ii)  $N = 2$   $\left. \begin{array}{l} i_1 = 0; \quad i_2 = 1 \\ i_1 = 2; \quad i_2 = 0 \end{array} \right\} = \gamma^{(0)3} \gamma^{(2)}$   
 $\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} = \gamma^{(0)2} \gamma^{(1)2}$

luego

$$E^{(2)} = 4^{-2} (\gamma^{(0)3} \gamma^{(2)} + \frac{3}{2} \gamma^{(0)2} \gamma^{(1)2})$$

iii)  $N = 3$ 

$$(3N-3)! = 6!$$

$i_1$	$i_2$	$i_3$
0	0	1
1	1	0
3	0	0

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 6 \gamma^{(3)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 5 \gamma^{(1)} \gamma^{(2)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 4 \gamma^{(1)} 3$$

$$E^{(3)} = 4^{-3} (\gamma^{(0)} 6 \gamma^{(3)} + 6 \gamma^{(0)} 5 \gamma^{(1)} \gamma^{(2)} + 5 \gamma^{(0)} 4 \gamma^{(1)} 3)$$

iv)  $N = 4$ 

$$(3N-3)! = 9!$$

$i_1$	$i_2$	$i_3$	$i_4$
0	0	0	1
1	0	1	0
2	1	0	0
4	0	0	0

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 9 \gamma^{(4)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 8 \gamma^{(1)} \gamma^{(3)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 7 \gamma^{(1)} 2 \gamma^{(2)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 6 \gamma^{(1)} 4$$

$$E^{(4)} = 4^{-4} (\gamma^{(0)} 9 \gamma^{(4)} + 9 \gamma^{(0)} 8 \gamma^{(1)} \gamma^{(3)} + 36 \gamma^{(0)} 7 \gamma^{(1)} \gamma^{(2)} + 21 \gamma^{(0)} 6 \gamma^{(1)} 4)$$

v)  $N = 5$ 

$$(3N-3)! = 12!$$

$i_1$	$i_2$	$i_3$	$i_4$	$i_5$
0	0	0	0	1
1	0	0	1	0
1	2	0	0	0
2	0	1	0	0
3	1	0	0	0
5	0	0	0	0

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 12 \gamma^{(5)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 11 \gamma^{(1)} \gamma^{(4)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 10 \gamma^{(1)} \gamma^{(2)} 2$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 10 \gamma^{(1)} 2 \gamma^{(3)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 9 \gamma^{(1)} 3 \gamma^{(2)}$$

$$\Rightarrow \gamma^{(0)} 8 \gamma^{(1)} 5$$

$$E^{(5)} = 4^{-5} [\gamma^{(0)} 12 \gamma^{(5)} + 12 \gamma^{(0)} 11 \gamma^{(1)} \gamma^{(4)} + 66 \gamma^{(0)} 10 \gamma^{(2)} 2 + \gamma^{(1)} 2 \gamma^{(3)} + 220 \gamma^{(0)} 9 \gamma^{(1)} 3 \gamma^{(2)} + 99 \gamma^{(0)} 8 \gamma^{(1)} 5].$$

Los términos sucesivos se van haciendo cada vez más numerosos e incluyen desde  $\gamma^{(1)}$  hasta  $\gamma^{(N)}$ . El mínimo exponente de  $\gamma^{(0)}$  para cada  $N$  es  $2N-2$ . Asimismo el máximo es  $3N-3$ .

Puesto que  $\gamma^{(N)} = \beta_1^{(N)} + \beta_2^{(N)}$  y cada una de estas cantidades ( $\beta$ ) se pueden desarrollar como funciones polinomiales de  $k$  y  $M$  ( $k_1, k_2$  y  $M$  realmente), entonces cada uno de los  $\gamma^{(N)}$  es a su vez un polinomio en  $k_1, k_2$  y  $M$ . Es entonces en principio posible expresar  $E^{(N)}$  como un polinomio en esas cantidades. A modo de ejemplo realizaremos algunos cálculos utilizando a ese efecto la tabla 2 ya considerada:

$$\begin{aligned} \text{i) } E^{(1)} &= \frac{1}{4} \gamma^{(1)} = \frac{1}{4} (\beta_1^{(1)} + \beta_2^{(1)}) = \frac{1}{4} [(6k_1^2 - 2M) - (6k_2^2 - 2M)] \\ &= \frac{1}{4} 6(k_1^2 - k_2^2) = \frac{3}{2} (k_1 + k_2)(k_1 - k_2) = \frac{3}{2} n(k_1 - k_2) \end{aligned}$$

Se debe recordar que

$$\beta_2 = \beta(k_2, M_1 - f) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \beta^{(N)} f^N$$

así es que en la tabla 2, hay que tomar en cuenta el  $(-1)^N$  para el caso en que se considera  $\beta_2^{(N)}$ .

Entonces con  $n$  el número cuántico principal

$$E^{(1)} = \frac{3}{2} n (k_1 - k_2) .$$

$$ii) \quad E^{(2)} = 4^{-2} [(k_1+k_2)^3 (\beta_1^{(2)} + \beta_2^{(2)}) + \frac{3}{2} (k_1+k_2)^2 (\beta_1^{(1)} + \beta_2^{(1)})^2]$$

$$\begin{aligned} \beta_1^{(2)} + \beta_2^{(2)} &= (-10k_1 - 68k_1^3 + 36k_1M) + (-10k_2 - 68k_2^3 + 36k_2M) \\ &= -10(k_1+k_2) - 68(k_1^3+k_2^3) + 36M(k_1+k_2) \end{aligned}$$

Todos son términos divisibles por  $(k_1 + k_2) \Rightarrow$

$$\beta_1^{(2)} + \beta_2^{(2)} = (k_1 + k_2) [36M - 10 - 68(k_1^2 - k_1k_2 + k_2^2)] .$$

Usando el resultado anterior de  $\beta_1^{(1)} + \beta_2^{(1)}$  se ve que:

$$E^{(2)} = 4^{-2} [(k_1+k_2)^4 \{36M - 10 - 68(k_1^2 - k_1k_2 + k_2^2)\} + 54(k_1+k_2)^4 (k_1-k_2)^2]$$

$$E^{(2)} = 4^{-2} (k_1+k_2)^4 [36M - 10 - 14k_1^2 - 14k_2^2 - 40k_1k_2]$$

Se aprecia que  $E^{(2)}$  es al igual que  $E^{(1)}$  factorizable por  $(k_1 + k_2)$ , esto es válido para todo  $N$ , pues todos los términos de  $E^{(N)}$  contienen a  $\gamma^{(0)} = k_1 + k_2$  (Salvo naturalmente  $E^{(1)}$  pero este también es simplificable por  $k_1 + k_2$ ).

Estos ejemplos - los más simples - indican cual es la mecánica a seguir para calcular los sucesivos términos de perturbación (en la energía) en función de los números cuánticos y el parámetro  $M$ , a través del cual se establece la dependencia en relación al número cuántico magnético:  $M = \frac{1}{4} (m^2 - 1)$ . A continuación damos una tabla de los distintos órdenes de perturbación hasta  $N = 6$ , factorizados por  $n = k_1 + k_2$ . El término genérico es:

$$E^{(N)} = 4^{-N} n^{3N-2} \sum E_{rij}^{(N)} M^r k_1^i k_2^j .$$

TABLA 3

N	r	i	j	$E_{rij}^{(N)}$	N	r	i	j	$E_{rij}^{(N)}$
1	0	1	0	6	4	0	4	0	-1860
	0	0	1	-6		0	3	1	-5340
2	0	2	0	-14		0	2	2	-7548
	0	1	1	-40		0	1	3	-5340
	0	0	2	-14		0	0	4	-1860
	0	0	0	-10		0	2	0	-9100
	1	0	0	36		0	1	1	-13580
3	0	3	0	132		0	0	2	-9100
	0	2	1	156		0	0	0	-1760
	0	1	2	-156		1	2	0	4536
	0	0	3	-132		1	1	1	4536
	0	1	0	300		1	0	2	4536
	0	0	1	-300		1	0	0	9720
	1	1	0	264		2	0	0	2196
	1	0	1	264					

continuación Tabla 3:

N	r	i	j	$E_{rij}^{(N)}$	N	r	i	j	$E_{rij}^{(N)}$
5	0	5	0	31920	6	0	6	0	-616216
	0	4	1	95088		0	5	1	-2327664
	0	3	2	62160		0	4	2	-3758904
	0	2	3	-62160		0	3	3	-4106816
	0	1	4	-95088		0	2	4	-3758904
	0	3	0	277440		0	1	5	-2327664
	0	2	1	265440		0	0	6	-616216
	0	1	2	-265440		0	4	0	-8482320
	0	0	3	-277440		0	3	1	-18397680
	0	1	0	182544		0	2	2	-19846320
	0	0	1	-182544		0	1	3	-18397680
	1	3	0	11904		0	0	4	-8482320
	1	2	1	1344		0	2	0	-12409432
	1	1	2	-1344		0	1	1	-10958628
	1	0	3	-11904		0	0	2	-12409432
	1	1	0	27360		0	0	0	-1360000
	1	0	1	-27360		1	4	0	909216
	2	1	0	34800		1	3	1	3445344
	2	0	1	-34800		1	2	2	5047776
6	1	0	0	9292300		1	1	3	3445344
	2	2	0	421200		1	0	4	929216
	2	1	1	-324000		1	2	0	9907200
	2	0	2	421200		1	1	1	18734400
	2	0	0	301584		1	0	2	9907200
	3	0	0	222432					

La energía perturbada (su serie) para un estado específico se puede calcular entonces simplemente reemplazando los valores para  $n$ ,  $k_1$ ,  $k_2$  y  $M$  para cada uno de los términos perturbados.

Ejemplificaremos para el estado fundamental del sistema. Para este caso evaluaremos en primer lugar los valores de los respectivos números cuánticos. Para el estado fundamental (el único no degenerado)  $n = 1$ ,  $\ell = 0$ ,  $m = 0$ . Utilizando la definición de los números cuánticos parabólicos:

$$k_1 = n_1 + \frac{1}{2} |m| + \frac{1}{2} ; \quad k_2 = n_2 + \frac{1}{2} |m| + \frac{1}{2}$$

los números  $n_1$  y  $n_2$  cumplen la relación (34):

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1$$

como sabemos el número  $|m|$  puede tomar en general  $n$  valores distintos desde 0, ...  $n-1$ . Entonces una vez fijadas  $n$  y  $|m|$ , el máximo valor de  $n_1 + n_2$  es  $n - |m| - 1$ . Cada  $n_1$  y  $n_2$  por separado tienen como valor mínimo 0 (pues el estado fundamental corresponde a  $n = 1$ ,  $|m| = 0$ ). Entonces  $n_1 = 0, \dots, n - |m| - 1$  y lo mismo vale para  $n_2$  con la obvia condición de cumplir (34). Para  $n = 1$ ,  $|m| = 0 \Rightarrow n_1 = 0 = n_2$  para el estado fundamental tenemos:

$$(41) \quad n = 1 ; \quad k_1 = \frac{1}{2} ; \quad k_2 = \frac{1}{2} ; \quad M = -\frac{1}{4}$$

Con estos valores procedemos al cálculo:

$$E^{(0)} = -\frac{1}{2} \gamma^{(0)-2} = -\frac{1}{2} (\beta_1^{(0)} + \beta_2^{(0)})^{-2} = -\frac{1}{2} (k_1 + k_2)^{-2} = -\frac{1}{2}$$

que corresponde naturalmente al operador no perturbado  $E_n = \frac{1}{2n^2}$  ya conocido para todo campo coulombiano.

Los sucesivos valores se dan en tabla a continuación. Se ha utilizado los resultados de la literatura ad hoc para valores de  $N$  mayores que 6, a fin de corroborar. Existen tablas para órdenes hasta  $N = 17$ . Se comprueba que en general los órdenes impares son nulos debido a que son factorizables por  $(k_1 - k_2)$  esto surge del hecho que  $\gamma^{(N)} = \beta_1^{(N)} + \beta_2^{(N)} = \beta^{(N)}(k_1, M) + (-1)\beta^{(N)}(k_2, M)$ . De allí también que los términos pares sean divisibles por  $(k_1 + k_2)$ .

TABLA 4

N	$E^{(N)}$	N	$E^{(N)}$
0	-0.500000	10	-194531250.00000
2	-2.250000	12	-6.616211 · 10 <sup>10</sup>
4	-55.546875	14	-2.990723 · 10 <sup>13</sup>
6	-4907.765625	16	-1.678467 · 10 <sup>16</sup>
8	-794218.750000		

De manera que la serie de perturbaciones de la energía contiene sólo términos pares (esto vale para todo estado de energía en que  $k_1 = k_2$ ) y crece aceleradamente en valor absoluto. Como ya sabemos se trata de una serie asintótica pero naturalmente este carácter se hace más o menos evidente de acuerdo a la magnitud del campo utilizado. Usaremos nuestro método de suma para dos valores distintos del campo. El primero con  $F = 0.02$  u.a. y el segundo para  $F = 0.10$  u.a.

En primer lugar realizaremos la transformada de Borel de la serie dada; los valores son los que se detallan a continuación:

$$(42) \quad G(F) = -0.500000 - 1.125000 F^2 - 2.314453 F^4 - 6.816341 F^6 - \\ - 19.69786 F^8 - 53.607598 F^{10} - 138.125029 F^{12} - \\ - 343.058227 F^{14} - 802.219498 F^{16} - \dots$$

(I) Para el caso (I) (campo pequeño) los términos de la serie anterior decrecen monótonamente debido al efecto compensatorio de los términos  $F^N$ , cuya magnitud decrece de tal modo que impide notar la cualidad asintótica de la serie. Obtendremos los aproximantes de Padé para esta serie. Dado que se trata de una serie conformada sólo por cifras pares, entonces todo aproximante de Padé que la represente deberá ser igualmente una función par, i.e., tanto numerador como denominador habrán de estar formados sólo por términos pares.

Como ya sabemos, las aproximantes de Padé, tienen la forma de un cociente de polinomios y proporcionan una rápida convergencia con los primeros  $N+M+1$  términos de la serie original.

Dado lo expuesto en el párrafo previo, usaremos los aproximantes de Padé de la serie diagonal para números pares, iniciando el cálculo para  $P_N^N(F)$  con  $N = 2$ . De manera general el camino para encontrar los sucesivos aproximantes de Padé impone expandirlos en serie de Taylor, como ya se mostró en el primer capítulo. Para el caso que estamos estudiando, significa resolver sistemas de ecuaciones lineales de orden  $N/2$  a fin de encontrar los valores de los coeficientes del denominador ( $B_i$ ); a partir de ellos se pueden despejar todas las incógnitas pertinentes del numerador ( $A_i$ )

$$P_N^N(F) = \frac{\sum_{i=0}^{N/2} A_{2i} F^{2i}}{\sum_{i=0}^{N/2} B_{2i} F^{2i}} \quad \text{con } B_0 = 1$$

y  $N$  par.

Los valores obtenidos hasta  $N = 8$  (con 8 cifras decimales) para  $F = 0.02$  u.a., se dan a continuación:

TABLA 5

$P^{[N,N]}[F]$	$F = 0.02$
$N = 2$	- 0.50086216
4	- 0.50045307
6	- 0.50045307
8	- 0.50045309

Llevando a cabo el mismo proceso anterior, calcularemos a continuación las sumas de Borel para cada uno de estos aproximantes considerados como integrandos en función de  $t$ . Digamos:

$$f_B^{[N,N]}[F] = \int_0^{\infty} e^{-t} p^{[N,N]}[Ft] dt .$$

Utilizamos nuevamente la integración de Gauss-Laguerre con seis puntos. Damos los valores calculados para  $f_B^{[2,2]}[F]$  a modo de ejemplo y luego presentamos la tabla:

$$(43) \quad p^{[2,2]}[F] = \frac{A_0 + A_2 F^2}{1 + B_2 F^2} = \frac{E_0 + E_2 F^2}{1 - \frac{E_4}{E_2} F^2}$$

Arriba  $E_n = \frac{E(N)}{N!}$ , i.e., los términos correspondientes a (42) (serie transformada de Borel). De acuerdo a (43) y (42) entonces la integral-suma de Borel correspondiente es:

$$(44) \quad f_B^{[2,2]}[0,02] = \int_0^{\infty} e^{-t} \left[ \frac{-0.5 - 4 \cdot 5 \cdot 10^{-4} t^2}{1 - 8.229166 \cdot 10^{-4} t^2} \right] dt$$

la expresión anterior adquiere distintos valores dependiendo del número de puntos que se use en el método Gauss-Laguerre:

$$\text{Para } n = 2 \quad f_B^{[2,2]}[0.02] = -0.50173722$$

$$n = 4 \quad f_B^{[2,2]}[0.02] = -0.50169145$$

$$n = 6 \quad f_B^{[2,2]}[0.02] = -0.5016532$$

Considerando ahora  $n = 6$  como "standard" de uso escribimos la tabla:

TABLA 6

N	$f_B^{[N,N]}[F]$ N = 0.02
2	- 0.5016532
4	- 0.5007569
6	- 0.5009092
8	- 0.5009092

Comparando las Tablas 5 y 6 se pueden apreciar los mismos resultados que en el capítulo previo, i.e., que aplicar la suma de Borel a los aproximantes de Padé es mucho más eficiente que el uso de los aproximantes de Padé por sí solos. Esto es mucho más notorio aún para valores pequeños del campo, donde el carácter asintótico de la serie es menos notorio. El valor exacto de la suma hasta  $N = 16$  es  $- 0.500909224$ , y se ve que, dentro de la precisión usada, basta con  $f_B^{[6,6]}(0.02)$  para dar un buen resultado, al paso que los aproximantes de Padé para  $N = 8$  todavía contienen un error del orden de  $0.000456$  hasta el sexto decimal.

Veamos ahora que sucede para un campo mayor,  $F = 0.1$  u.a. De antemano es necesario dar a conocer el valor exacto que ha sido estimado por Hehenberger, McIntosh y Brändas [1974] en  $- 0.5275$  u.a.

Las tablas homólogas a 5 y 6 se dan a continuación:

TABLA 7

N	$P^{[N,N]}[F] F = 0.1$
2	- 0.5219883
4	- 0.5114885
6	- 0.5114882
8	- 0.5114896

TABLA 8

N	$f_B^{[N,N]}[F] F = 0.1$
2	- 0.5685372
4	- 0.5295134
6	- 0.5286464
8	- 0.5279511

Se aprecia aquí una diferencia respecto al caso anterior; los aproximantes de Padé se alejan lentamente del valor exacto a medida que crece el número de términos usados. La razón de que suceda esto ha de deberse al hecho de que a medida que tomamos más términos en nuestros cálculos estamos haciendo más evidente el carácter asintótico de la serie, que en este caso si se hace manifiesto como se ve al representar la serie original, sin realizar la T. de Borel para este valor de F.

TABLA 9

N	$F_E^{(N)} \cdot 10^4$
0	- 5000
2	- 225
4	- 56
6	- 49
8	- 79
10	- 195
12	- 663
14	- 2992
16	-17347

Se advierte de inmediato que los términos decrecen monótonamente hasta el sexto orden y luego se incrementan monótonamente de modo que término de orden 16 es casi 3.5 veces el término de orden cero. Este es el comportamiento típico de las series asintóticas.

Pese a que los aproximantes de Padé por sí solos convergen más lentamente para el caso abiertamente asintótico, las transformadas de Bo rel unidas a los aproximantes de Padé dan nuevamente mejor resultado aun que lo hacen también más lentamente. Creemos que en general la fusión de estas dos herramientas permiten acelerar la convergencia y por consiguiente establecer mucho más rápidamente un valor muy certero para la su ma de series divergentes.

## CAPITULO III

### OSCILADORES ANARMONICOS EXACTAMENTE SOLUBLES I. TEORIA

En el curso de este capítulo nos centraremos en la investigación de ciertos operadores anarmónicos, que para algunas combinaciones especiales de las constantes de acoplamiento, poseen un número finito de soluciones analíticas exactas que por supuesto, corresponden a los niveles de energía más bajos.

La existencia de estos operadores - que para nuestros fines reduciremos a cierto subconjunto particular - es conocida desde hace ya cierto tiempo, como se puede ver a través de la abundante literatura publicada el respecto. Se pueden citar por ejemplo: Singh, Biswas y Datta [1978]; Flessas [1979]; [1981]; Magyarí [1981]; Datta y Wiley [1987]. En estos trabajos se estudia desde distintos ángulos la generación de estas soluciones que se generalizan para el caso  $n$ -dimensional y que son obtenidas por caminos diferentes y adecuados a cada modelo particular. Por ejemplo Flessas resuelve, en el primero de sus trabajos, la ecuación diferencial para el oscilador anarmónico doble, encontrando dos soluciones

exactas condicionadas por los coeficientes del potencial. En la segunda de sus publicaciones consigue soluciones semejantes a las anteriores mediante transformadas integrales. En general todos estos autoestados exhiben ciertas características comunes, a saber: a) Son polinomios multiplicados por exponenciales decrecientes con autovalores dados por funciones analíticas de las constantes de acoplamiento, b) Se puede encontrar sólo un número limitado de ellos (frecuentemente sólo uno) y c) Existen solamente para ciertos potenciales dentro de una clase de ellos.

Los potenciales a que se refiere el punto c) anterior son en general expresables como polinomios en  $x^2$ , cuyo término mayor es del tipo  $x^{2(2m+1)}$ ; esta expresión implica que para el más simple de los sistemas anarmónicos, el oscilador cuártico, no se conozcan esta clase de soluciones exactas, cuestión conocida también desde hace tiempo.

Definiremos a continuación el hamiltoniano con el cual trabajaremos en lo sucesivo, estudiando algo más detalladamente sus propiedades y desarrollaremos una manera de comprender porque poseen este comportamiento.

Nuestro operador genérico será:

$$(1) \quad H(k) = -\frac{d^2}{dx^2} + (x^6 - kx^2)$$

La forma elegida es la más conveniente para nuestros fines posteriores.

El problema de autovalores puede escribirse así:

$$(2) \quad H(k)\psi = \epsilon\psi$$

Utilizemos el ansatz:

$$(3) \quad \psi(x) = e^{f(x)}\phi(x) \quad \text{con}$$

$$(4) \quad f(x) = -x^4/4$$

El hecho de que estemos tratando con una ecuación lineal de segundo orden, hace muy razonable la elección de (3) y (4), pues el comportamiento del factor de control de su conducta asintótica corresponde (como es razonable esperar) a una exponencial de esa forma.

Reemplazando (4) y (3) en (2) obtenemos la ecuación diferencial satisfecha por  $\phi(x)$ :

$$(5) \quad \phi'' - 2x^3\phi' + [(k-3)x^2 + \epsilon]\phi = 0 .$$

Puesto que la ecuación posee un punto ordinario en  $x = 0$ , se puede desarrollar en serie de Taylor:

$$(6) \quad \phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

lo que origina la siguiente relación de recurrencia:

$$(7) \quad (n+2)(n+1)a_{n+2} + \epsilon a_n + [k-(2n-1)]a_{n-2} = 0 .$$

Esta relación permite observar que se generan dos secuencias una para las soluciones pares y otra para las impares en términos de constantes arbitrarias  $a_0$  y  $a_1$  respectivamente.

Se probará más adelante que para ciertos valores especiales de  $k$  (constante armónica) se puede truncar la serie par, transformándola en un polinomio que es la solución exacta del problema (para otra elección de las ligaduras, se podría haber seleccionado las soluciones impares). Demostraremos que, cumplida esa condición, las soluciones impares se hacen inaceptables. La solución general para ese caso sería:

$$(I) \quad \psi(x) = e^{-x^4/4} \left| \sum_{n=0}^M a_{2n} x^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n+1} x^{2n+1} \right|$$

Escribamos la parte impar separadamente:

$$\psi_I = a_1 x \sum_{n=0}^{\infty} g_n x^{2n} \quad \text{con} \quad g_n = \frac{a_{2n+1}}{a_1}$$

El comportamiento asintótico de  $\{g_n\}$  está determinado por (7) cuando  $n \rightarrow \infty$ . Veamos:

$$(II) \quad 4n^2 g_n + \epsilon g_{n-1} - 4n g_{n-2} \sim 0 \quad n \rightarrow \infty$$

Entonces:

$$(III) \quad \frac{g_n}{g_{n-2}} \sim \frac{1}{n} \quad n \rightarrow \infty$$

Pero  $e^{x^4/2} = \sum c_{2n} x^{4n}$  con  $c_{2n} = \frac{1}{2^n n!}$

$$(IV) \quad \frac{c_{2n}}{c_{2(n-1)}} = \frac{1}{2n}$$

Entonces por homología de términos hay que comparar (IV) con:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{g_{2n}}{g_{2(n-1)}} \sim \frac{1}{2n}$$

Es decir el comportamiento del término dentro de la suma para  $x \rightarrow \infty$  en  $\psi_I$  es

$$\psi_I \sim a_1 x e^{x^4/2}$$

$x \rightarrow \infty$

luego por (I) se ve que hay que desechar la solución impar.

De manera que ahora podemos quedarnos sólo con las soluciones pares y a partir de esta suposición mostrar que efectivamente se las puede encontrar de modo que sean exactas. Para este fin definiremos ciertos polinomios  $f_n(x)$  por medio de una fórmula del tipo Rodríguez:

Sea

$$(V) \quad f_n(x) = \frac{1}{2^n n!} e^{x^4/2} \left[ -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right]^n e^{-x^4/2}$$

Estos polinomios expanden el conjunto de las funciones pares sobre  $(-\infty, \infty)$  pero no son ortogonales respecto a la densidad  $e^{-x^2/2}$ . Interesa obtener las relaciones de recurrencia de estos polinomios y un camino para obtenerlas es el que mostraremos a continuación:

De la relación

$$(VI) \quad \frac{d}{d(x^2)} = \frac{1}{2x} \frac{d}{dx}$$

el operador  $\left[ -\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right]^n = \left[ -2 \frac{d}{du} \right]^n$  con  $u = x^2$ , entonces de (I) se tiene:

$$(8) \quad f_n(u^{1/2}) 2^n n! e^{-u^2/2} = (-2)^n \left[ \frac{d}{du} \right]^n e^{-u^2/2}$$

Sea  $F(u) = e^{-u^2/2}$  entonces:

$$(9) \quad F(u+\lambda) = e^{-(u+\lambda)^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d^n F}{du^n}$$

pero de (2)  $\frac{d^n F}{du^n} = (-1)^n f_n(u^{1/2}) n! e^{-u^2/2}$ .

Entonces:

$$(10) \quad e^{-u^2/2} F(u+\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \lambda^n f_n(u^{1/2})$$

Si cambiamos  $\lambda \rightarrow -\lambda$  y explicitamos  $F(u-\lambda)$

$$(11) \quad e^{u^2/2} e^{-(u-\lambda)^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n f_n(u^{1/2})$$

De aquí obtenemos finalmente la función generadora:

$$(12) \quad G(x, \lambda) = e^{\lambda x^2 - \lambda^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n f_n(x)$$

De aquí derivando

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda} = (x^2 - \lambda)G = \sum_{n=0} n \lambda^{n-1} f_n$$

$$\sum_{n=0} x^2 \lambda^n f_n - \sum_{n=1} \lambda^n f_{n-1} = \sum_{n=0} (n+1) f_{n+1} \lambda^n$$

Y obtenemos la primera relación de recurrencia:

$$(13)a \quad (n+1)f_{n+1} = x^2 f_n - f_{n-1}$$

De igual modo derivando con respecto a x:

$$(13)b \quad f'_n = 2x f_{n-1} = 2x^3 f_n - 2x(n+1) f_{n+1}$$

A partir de ellas conseguimos la ecuación diferencial en diferencia de segundo orden:

$$(13)c \quad f''_n - 2x^3 f'_n - 4nx^2 f_n = 2f_{n-1}$$

Definamos a continuación un conjunto de funciones  $\{y_n,$   
 $n = 0, 1, \dots\}$  tal que

$$(14) \quad y_n = f_n e^{-x^4/4} .$$

Esto constituye un conjunto de funciones linealmente independiente que satisface:

$$(15) \quad y_n'' = [x^6 - (4n+3)x^2] y_n + 2y_{n-1}$$

Y nuestra ecuación de Schrödinger será:

$$(16) \quad \psi'' + [\epsilon - x^6 + kx^2]\psi = 0$$

en correspondencia con (1) y (2).

Asumiremos que las soluciones pares de (16) se pueden expandir en función del conjunto base (no ortogonal)  $\{y_n\}$ . Es decir

$$(17) \quad \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n y_n$$

substituyendo (17) en (16) queda:

$$(18) \quad \sum_{n=0}^{\infty} c_n \{[\epsilon + (k-4n-3)x^2]y_n + 2y_{n-1}\} = 0$$

Usando (13a) queda:

$$(19) \quad \sum_{n=0} C_n \{ (k-4n-3)(n+1)y_{n+1} + \epsilon y_n + (k-4n-1)y_{n-1} \} = 0$$

Esto es una relación de recurrencia para los  $C_n$ .

$$(20) \quad (k-4n+1)n C_{n-1} + \epsilon C_n + (k-4n-5)C_{n+1} = 0$$

Con la condición  $C_{-k} = 0 \quad k = 1, 2, \dots$

A partir de (19) se pueden escribir las relaciones entre los coeficientes como una fracción continua:

$$\text{Sea: } A_n = (k-4n-5); \quad B_n = \epsilon; \quad D_n = n(k-4n+1).$$

Entonces:

$$(21) \quad A_n C_{n+1} + B_n C_n + D_n C_{n-1} = 0$$

De aquí:

$$A_n \frac{C_{n+1}}{C_n} + B_n \frac{C_n}{C_{n-1}} + D_n = 0$$

Entonces:

$$(22) \quad \frac{C_n}{C_{n-1}} = \frac{-D_n}{B_n - \frac{A_n D_{n+1}}{B_{n+1} - \frac{A_{n+1} D_{n+2}}{B_{n+2} - \frac{A_{n+2} D_{n+3}}{B_{n+3} + \dots}}}}$$

Antes de establecer los resultados exactos a que deseamos llegar, probaremos algunos previos y necesarios. La idea es ver de que manera se puede trincar esta fracción infinita donde los  $B_n$  son constantes (no dependen de  $n$ ):

En el desarrollo anterior se ve que:

$$i) \quad \text{Si } D_{n+1} = 0 \rightarrow A_n \neq 0 \quad \forall n$$

$$\frac{C_n}{C_{n-1}} = \frac{-D_n}{B_n} \rightarrow B_n C_n = -D_n C_{n-1}$$

luego en (21)

$$A_n C_{n+1} = 0 \Rightarrow C_{n+1} = 0 \rightarrow$$

evaluando (21) para  $C_{n+1}$  queda:

$$(23) \quad A_{n+1} C_{n+2} + B_{n+1} \cancel{C_{n+1}} + D_{n+1} \cancel{C_n} = 0$$

Entonces  $C_{n+2} = 0$ . Luego  $C_{n+k} = 0 \quad \forall k \geq 1$ . Es decir si  $D_{n+1} = 0$ , sólo son no nulos los coeficientes  $C_0, \dots, C_n$ .

ii) Si  $A_n = 0 \Rightarrow$  Igualmente  $B_n C_n = -D_n C_{n-1}$

Entonces nuevamente  $A_n C_{n+1} = 0$  pero ahora  $C_{n+1}$  no necesariamente es nulo y en (23) nada se anula luego esta alternativa no significa truncamiento (Más exactamente aunque se estipulara  $C_{n+1} = 0$  en (23)  $C_{n+2} \neq 0$ , etc.)

De modo que la opción a elegir es anular  $D_{n+1}$ . Sabemos además de (20) que:

$$(24) \quad \frac{C_1}{C_0} = -\frac{\epsilon}{(k-5)} \quad \rightarrow \quad \text{podemos escribir}$$

$$(25) \quad -\frac{\epsilon}{(k-5)} = \frac{- (k-3)}{\epsilon - \frac{2(k-9)(k-7)}{\epsilon - \frac{3(k-13)(k-11)}{\epsilon - \dots}}}$$

Del análisis anterior se desprende que la fracción (22) se truncará si:

$$D_{n+1} = (k-4n-3)(n+1) = 0 \quad \rightarrow$$

$$(26) \quad k = 4n + 3 \quad n = 1, 2, \dots$$

Hemos desechado  $n = 0$  pues por (25)  $\Rightarrow \epsilon = 0$  y correspondería a un operador que sólo tiene un autoestado exacto con energía 0.  $C_0$  responde a  $-\frac{d^2}{dx^2} + (x^6 - 3x^2)$  con autofunción del tipo

$$\psi_0 = C_0 e^{x^4/4}$$

Al truncar para  $k = 7, 11, 15, \dots$  (25) generará un polinomio de grado  $n+1$  en  $\epsilon$ . Se obtienen así  $n+1$  autovalores con  $n+1$  autofunciones asociadas que son polinomios multiplicados por la exponencial conocida y cuyo grado esta dado por  $y_n$  (es decir  $2n$ ) como se puede ver por (17).

De acuerdo a lo anterior llamaremos a nuestro hamiltoniano original:

$$(27) \quad H(M) = -\frac{d^2}{dx^2} + [x^6 - (4M+3)] \quad M = 1, 2, \dots$$

Posee  $M+1$  autovalores (reales) y  $M+1$  autofunciones de paridad par asociadas.

Los polinomios en  $\epsilon$  que determinan esos autovalores permiten mostrar que efectivamente son cantidades reales. A tal efecto se exponen a continuación los correspondientes a los 5 primeros valores de  $M$ :

$$\begin{aligned} M = 1 ; & \quad P_1(\epsilon) = \epsilon^2 = 8 \\ M = 2 ; & \quad P_2(\epsilon) = \epsilon^3 - 64\epsilon \\ M = 3 ; & \quad P_3(\epsilon) = \epsilon^4 - 240\epsilon^2 + 2880 \\ M = 4 ; & \quad P_4(\epsilon) = \epsilon^5 - 640\epsilon^3 + 47104\epsilon \\ M = 5 ; & \quad P_5(\epsilon) = \epsilon^6 - 1400\epsilon^4 + 331456\epsilon^2 - 5184000 \end{aligned}$$

Para  $M$  impar, los polinomios (de grado  $M+1$ ) poseen  $\frac{M+1}{2}$  cambios de signo y como solamente contienen potencias pares, por la regla de los signos de Descartes tendran  $M+1$  autovalores reales, la mitad de los cuales serán negativos y la otra positivos.

Para  $M$  par, los polinomios pueden factorizarse por  $\epsilon$ , de modo que  $\epsilon = 0$  es una solución y el polinomio restante es par y posee las mismas características anteriores de modo que aquí habra  $\frac{M}{2}$  autovalores reales negativos y  $\frac{M}{2}$  positivos.

Los coeficientes  $C_n$  que permiten la expansión de  $\psi$  pueden calcularse para cualquier  $M$ , mediante el siguiente algoritmo:

A partir de las relaciones de recurrencia se definen los siguientes polinomios en  $\epsilon$ :

$$(28a) \quad A_n(M, \epsilon) = \epsilon A_{n-1}(M, \epsilon) - 8(2n-5)(n-2)[M-(n-3)]A_{n-2}(M, \epsilon)$$

con

$$(28b) \quad A_1(M, \epsilon) = 1 ; \quad A_2(M, \epsilon) = \epsilon$$

Entonces

$$(28c) \quad C_{M-k} = \frac{(-1)^{M-k} C_0 \epsilon^{4[M-(k+1)]} (M-k)! (M-1)! A_{k+1}(M, \epsilon)}{D_M(\epsilon) (4M-2)k!}$$

Donde

$$(28d) \quad D_M(\epsilon) = A_n(M = n, \epsilon)$$

Estas mismas cantidades permiten definir un algoritmo para generar las ecuaciones  $P_M(E) = 0 \quad \forall M$  que resuelven el problema de autovalores finitos:

Para  $M$  fijo la ecuación es:

$$(29) \quad 8\epsilon (M-1)(4M-6)A_{M-1}(M, \epsilon) = [\epsilon^2 - 4M(4M-2)]D_M(\epsilon)$$

Antes de terminar el capítulo quisieramos dejar esbozada otra manera en que se pueden comprender los resultados anteriores, a fin de atar algunos cabos. Este esquema es el de los determinantes de Hill (ver: Biswar et al [1971], [1973]).

Suscintamente esto es así. Si miramos la relación (7) y dado que sabemos que estamos considerando las soluciones de paridad par, podemos escribir

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} x^{2n} \quad \rightarrow$$

$$(30) \quad (2n+2)(2n+1)a_{2(n+1)} + \epsilon a_{2n} + [k-(4n-1)]a_{2(n-1)} = 0$$

Es decir se puede escribir la ecuación matricial:

$$(31) \quad \begin{pmatrix} \epsilon & 2 \cdot 1 & 0 & \dots\dots\dots \\ k-3 & \epsilon & 4 \cdot 3 & 0 & \dots\dots \\ 0 & k-7 & \epsilon & 6 \cdot 5 & \dots\dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_2 \\ a_4 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

La ecuación matricial infinita anterior sólo tiene soluciones no triviales para los  $a_{2n}$  si el siguiente determinante se anula:

$$(32) \quad \begin{vmatrix} \epsilon & 2 \cdot 1 & 0 & \dots\dots\dots \\ k-3 & \epsilon & 4 \cdot 3 & 0 & \dots\dots \\ 0 & k-7 & \epsilon & 6 \cdot 5 & \dots\dots \\ 0 & 0 & k-11 & \epsilon & 8 \cdot 7 \dots \end{vmatrix} = 0$$

Para el caso estudiado este determinante se puede factorizar en dos, uno finito de dimensión  $(M+1) \times (M+1)$  y uno infinito. Ejemplifiquemos para  $M = 1$ ;  $k = 7$ .

El determinante anterior queda así

$$(33) \quad \begin{vmatrix} \epsilon & 2 \cdot 1 \\ 4 & \epsilon \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} \epsilon & 6 \cdot 5 & 0 & \dots\dots \\ -4 & \epsilon & 8 \cdot 7 & \dots\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{vmatrix} = 0$$

El número de raíces finitas aparece al hacer cero el determinante de  $2 \times 2$ , corresponde a nuestro  $P_1(\epsilon) = 0$  de la página 8. Las restantes (infinitas) soluciones se obtienen de los ceros del determinante infinito de la derecha.

El determinante de la derecha satisface la relación de recurrencia:

$$(34) \quad D_n = \epsilon D_{n-1} - (7 - (4n+3))(2n+1)(2n+2)D_{n-2}$$

$$\text{Con } D_1 = \epsilon ; \quad D_2 = \epsilon^2 + 120$$

Como este caso se puede generalizar, vale la pena decir algo acerca de él. Se ve de (34) y de la relación de recurrencia que todos los sucesivos  $D_n$  que aparezcan tienen sólo términos positivos esto nos dice que los aproximantes  $D_n$  no tienen soluciones reales, salvo los aproximantes  $D_{2n+1}$  que aceptan la solución  $\epsilon = 0$ . De modo general se puede decir que esto sucede para todos los  $k = 4M+3$  ya establecidos, puesto que el determinante remanente (infinito) siempre poseerá su diagonal inferior negativa. De modo que para este específico hamiltoniano con potencial  $(x^6 - kx^2)$  tenemos un espectro finito de valores reales y un infinito de autovalores complejos, todos de paridad par.

Resumiendo: Para operadores de la forma descrita, se pueden obtener los  $(M+1)$  primeros autovalores con  $(M+1)$  autofunciones asociadas expresadas de manera exacta. Estos resultados se usarán en el próximo capítulo.

A continuación se muestran algunos de los primeros polinomios  $f_n$  definidos mediante (13) y (V):

$$f_0 = 1 ; \quad f_1 = x^2 ; \quad f_2 = \frac{x^4 - 1}{2} ; \quad f_3 = \frac{x^6 - 3x^2}{6} ;$$

$$f_4 = \frac{x^8 - 6x^4 + 3}{24} ; \quad f_5 = \frac{x^{10} - 10x^6 + 15x^2}{5!} ; \quad \text{etc.}$$

Esto demuestra por inducción y la relación de recurrencia (13a) que son polinomios pares de orden  $2n$ , como se había dicho previamente.

## CAPITULO IV

### OSCILADORES ANARMONICOS EXACTAMENTE SOLUBLES II. APLICACIONES

Este capítulo se destinará a estudiar que sucede cuando se aplica el método de Silverstone a operadores hamiltonianos del tipo definido en el capítulo precedente. La idea que nos guía es la de poder calcular el valor del estado fundamental de la energía para un operador cuya forma, mirada como perturbación del oscilador armónico es fuertemente singular. El operador en cuestión será:

$$(1) \quad H(x) = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 + x^6$$

De acuerdo con el análisis hecho en el Primer Capítulo, la serie de perturbaciones es rápidamente divergente - considerando  $\lambda x^6$  como potencial perturbativo del oscilador armónico - dado que  $x^6$  es una perturbación demasiado "grande" en relación a  $x^2$ .

Los operadores definidos en Capítulo III son:

$$(2) \quad H(M) = -\frac{d^2}{dx^2} + (x^6 - (4M + 3)x^2)$$

y tienen como ya sabemos  $M+1$  autofunciones de la forma:

$$(3) \quad \psi_n^{(M)} = \sum_{j=0}^M C_{nj} y_j = e^{-x^4/4} \sum_{j=0}^M C_{nj} f_j$$

$n = 0, \dots, M.$

Los coeficientes  $C_{nj}$  están calculados en el capítulo anterior en función de  $C_{n0}$  (indeterminado) y  $\epsilon_n$ , que es la energía (autovalor) asociada con cada  $\psi_n$ . Las energías  $\epsilon_n$ , para cada  $M$  son solución de un polinomio (de grado  $M+1$ ) designado  $P_M(\epsilon)$  en el capítulo previo. Las autofunciones  $\psi_n$  son ortogonales (para cada operador  $H(M)$ ) por construcción: dado que  $H(M)$  es un operador autoadjunto (corresponde a la ecuación de Schrödinger) y sus soluciones  $\psi_n(x)$  satisfacen condiciones de borde muy generales por el carácter de la exponencial que controla su comportamiento según (3).

$$(3)a \quad \psi_n \psi_m' \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

Los polinomios  $f_j(x)$  de la expresión (3) fueron igualmente definidos previamente y si bien expanden el conjunto de funciones pares, no son ortogonales con respecto a la función densidad  $e^{-x^4/2}$ .

El camino que seguiremos es el siguiente; al operador genérico  $H(M)$  que definimos en (2) le sumaremos la perturbación  $(4M+4)x^2$ , con lo cual el hamiltoniano resultante será exactamente (1). Esta perturbación es pequeña comparada con el hamiltoniano  $H(M)$ , de modo que es esperable que la serie de Rayleigh-Schrödinger para las perturbaciones de la energía sea convergente.

El método de Silverstone supone dos condiciones esenciales que, dado el carácter finito y muy breve del espectro que disponemos en este caso, no se cumplen. Estas condiciones son:

- i) Poseer un conjunto completo de autofunciones que permitan expandir las expresiones ya desarrolladas en capítulos anteriores:

$$(4) \quad \phi^{(N)} = \sum_{j \neq n} b_j^{(N)} \psi_j$$

En la expresión anterior:

$$\phi = \lambda^N \phi^{(N)}$$

en la autofunción del operador perturbado y  $\lambda$  corresponde al parámetro de perturbación que aquí, dado lo dicho anteriormente es:

$$(5) \quad \lambda = (k+1) = (4M+4)$$

El desarrollo (4) para las situaciones exactas requiere pues de un conjunto infinito de funciones  $\psi_j$ . Este no es nuestro caso ya que contamos solamente con  $M+1$  funciones linealmente independientes. La aproximación que llevaremos adelante para el estado fundamental ( $n = 0$ ) consistirá en usar las  $M$  funciones  $\psi_j$  ( $j \neq 0$ ) que disponemos, de modo que el desarrollo será realmente una suma finita dada por:

$$\phi^{(N)} = \sum_{j=1}^M b_j^{(N)} \psi_j$$

- ii) Definir el efecto de hacer actuar el operador de perturbación  $x^2$  sobre las autofunciones  $\psi_j$  del hamiltoniano no perturbado  $H(M)$ . Es decir darle significado a las cantidades  $\alpha_{ij}$  determinadas por:

$$(6) \quad x^2 \psi_j = \sum \alpha_{ij} \psi_i$$

En los casos ya analizados se saben exactamente las reglas de selección que permiten conocer el desarrollo (6) unívocamente. Ahora no sólo no las conocemos, sino que nos enfrentamos nuevamente al problema de la incompletitud del conjunto  $\{\psi_j\}$   $j = 0, \dots, M$ .

A fin de caracterizar a los  $\alpha_{ij}$  se ha hecho uso de la ortogonalidad de  $\{\psi_j\}$  lo que permite escribir:

$$(7) \quad \langle \psi_i | x^2 | \psi_j \rangle = \alpha_{ij}$$

Dado que según las ecuaciones de Silverstone los diferentes órdenes de perturbación de la energía son:

$$(8) \quad E^{(N)} = \sum_{i \neq 0} \alpha_{0i} b_i^{(N-1)}$$

y considerando la aproximación establecida en (i)  $E^{(N)}$  se transforma también en una suma finita en que los coeficientes relevantes son:

$$\alpha_{01}, \dots, \alpha_{0M}$$

Todo esto válido como siempre para el estado fundamental.

Las fórmulas faltantes del método, las recordamos a continuación:

$$(9a) \quad E^{(1)} = \alpha_{00} \quad ; \quad b_j^{(1)} = \frac{\alpha_{j0}}{(\epsilon_0 - \epsilon_j)}$$

$$(9b) \quad b_j^{(N)} = \frac{1}{\epsilon_j - \epsilon_0} \left| \sum_{v=1}^{N-1} E^{(N-v)} b_j^{(v)} - \sum_{i \neq 0} \alpha_{ji} b_i^{(N-1)} \right|$$

Las  $\alpha_{ij}$  en (7) se pueden calcular haciendo uso de:

$$(10) \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^{2k} e^{-x^2/2} dx = 2^{\left[\frac{2k-3}{4}\right]} \Gamma\left[\frac{2k+1}{4}\right]$$

Con estas aproximaciones procedemos a evaluar los resultados de su aplicación para 3 operadores sucesivos con  $M = 1, 2, 3$  que son suficientes para sugerirnos el comportamiento general subsecuente.

Para  $M = 1$ ;  $k = 7$  y hay 2 autofunciones linealmente independientes  $\psi_0, \psi_1$ . Las energías son solución de:

$$(11) \quad P_1(\epsilon) = 0 = \epsilon^2 - 8$$

El estado fundamental es  $\epsilon_0 = -2\sqrt{2}$

Luego  $\epsilon_0 = -2\sqrt{2}$ ;  $\epsilon_1 = 2\sqrt{2}$ . Para este caso los coeficientes  $C_{ij}$  son solamente 4 (2 para cada función). Su expresión de acuerdo a los resultados del Capítulo III es:

$$C_{i1} = -\frac{\epsilon_i}{2} C_{i0} \quad \text{Entonces:}$$

$$(12) \quad \psi_0 = C_{00}(1 + \sqrt{2} x^2) e^{-x^4/4}$$

$$\psi_1 = C_{10}(1 - \sqrt{2} x^2) e^{-x^4/4}$$

Normalizando las funciones se obtienen los valores de  $C_{00}$  y  $C_{10}$ :

$$C_{00} = 0.37200; \quad C_{10} = 0.84605$$

En este caso  $\phi^{(N)} = b_1^{(N)} \psi_1$ . Los coeficientes  $\alpha_{ij}$  son:

$$\alpha_{00} = 0.85355; \quad \alpha_{01} = \alpha_{10} = -0.254204; \quad \alpha_{11} = 0.768085.$$

Los valores sucesivos de las energía hasta  $N = 10$  se dan a continuación:  $E_0 = \epsilon_0 + E^{(1)}\lambda + E^{(2)}\lambda^2 + \dots$

En la práctica se cálculo hasta  $N = 40$ , las sumas sucesivas son:

$$S_n = S_{n-1} + E^{(N)} \cdot \lambda^N$$

con  $\lambda = 8$  ( $M = 1$ ;  $k = 7$ ) y van convergiendo hacia el valor:

$$S_n \sim 3.2742705$$

con equilibrio hasta la séptima cifra decimal.

TABLA I

N	$E^{(N)}$
1	0.853550
2	-1.142325 (-2)
3	-1.725850 (-4)
4	2.046026 (-5)
5	1.006142 (-6)
6	-6.216705 (-8)
7	-6.251215 (-9)
8	1.692410 (-10)
9	3.887543 (-11)
10	1.450801 (-13)

Para  $M = 2$  ;  $k = 11 \Rightarrow \lambda = 12$  ; 3 autofunciones.

Aquí hay que tener cautela pues el polinomio es:

$$P_2(\epsilon) = \epsilon^3 - 64\epsilon = 0 \Rightarrow \epsilon_0 = -8 ; \epsilon_1 = 0 ; \epsilon_2 = 8$$

Puesto que la solución con energía cero (\*) está incluida aparece una singularidad (evitable) en la definición de los coeficientes  $C_{ij}$  del capítulo anterior. Se debe recurrir a la relación de recurrencia original:

$$(13) \quad [4(M-j)+4]jC_{i,j-1} + \epsilon_i C_{i,j} + [4(M-j)-2]C_{i,j+1} = 0$$

Con los valores de  $M$  y la condición de que son no nulos sólo  $C_{i0}$ ,  $C_{i1}$ ,  $C_{i2}$ , los valores reales para  $\epsilon_1 = 0$  son ( $i = 1$ ):

-----  
 (\*) Esta es una propiedad de todo  $M$  par.

$$C_{1,2} = -4 C_{1,0} \quad C_{11} = 0$$

Entonces las autofunciones asociadas a las respectivas energía son:

$$(14) \quad \begin{aligned} \psi_0 &= \frac{C_{00}}{3} [1 + 4x^2 + 2x^4] e^{-x^4/4} & \epsilon_0 &= -8 \\ \psi_1 &= C_{10} [3 - 2x^4] e^{-x^4/4} & \epsilon_1 &= 0 \\ \psi_2 &= \frac{C_{20}}{3} [1 - 4x^2 + 2x^4] e^{-x^4/4} & \epsilon_2 &= 8 \end{aligned}$$

Los  $C_{0j}$  y  $C_{2j}$  se calculan directamente de las fórmulas del capítulo anterior pues en estos casos no hay problemas de definición. Los  $\alpha_{ij}$  resultan ser (después de la normalización de (14) como siempre):

$$\begin{aligned} \alpha_{00} &= 1.561110 ; & \alpha_{01} &= \alpha_{10} = -0.600102 ; & \alpha_{02} &= \alpha_{20} = 0.390115 ; \\ \alpha_{11} &= 0.716985 ; & \alpha_{12} &= \alpha_{21} = -1.109222 ; & \alpha_{22} &= 1.214627 . \end{aligned}$$

La tabla II a continuación, da los valores calculados para sucesivos órdenes de perturbación hasta  $N = 12$ . La tabla también informa sobre las correspondientes sumas parciales con  $\lambda = 12$ :

$$S_N = S_{N-1} + E^{(N)} \cdot 12^N \quad E^{(0)} = \epsilon_0 = -8$$

Los paréntesis en la tabla indican, como es costumbre el exponente en base 10.

TABLA II

N	$E^{(N)}$	$S_N$
1	1.561110	10.73332
2	-5.452753 (-2)	2.881355
3	-8.983429 (-4)	1.329019
4	-1.745440 (-4)	-2.290325
5	-4.166185 (-5)	-12.657128
6	-3.200033 (-6)	-22.212376
7	-9.023719 (-8)	-25.445738
8	5.465978 (-9)	-23.095467
9	4.406813 (-9)	-0.357281
10	1.156478 (-9)	71.248791
11	1.721015 (-10)	199.121639
12	1.849781 (-11)	364.049992

En este caso la sucesión de sumas parciales muestra comportamiento típicamente asintótico, de modo que se la debe truncar a fin de darle significado físico. Antes de comparar con el valor calculado del estado fundamental de (1) pasaremos a mostrar los resultados para  $M = 3$ .

En este caso,  $k = 15$  ;  $\lambda = 16$ . Existen 4 autofunciones  $\psi_j$  y las energías asociadas son las soluciones de:

$$P_3(\epsilon) = \epsilon^4 - 240\epsilon^2 + 2880 = 0$$

Entonces

$$\epsilon_0 = -15.0775 ; \quad \epsilon_1 = -3.5593 ; \quad \epsilon_2 = 3.5593 ; \quad \epsilon_3 = 15.0775$$

Dado que ahora el desarrollo de los  $\phi_j$  comprende desde  $f_0$  hasta  $f_3$  (definidos en Capítulo III), se trata de funciones cuya parte polinomial es de grado séxtico en  $x$ , cuya forma general es:

$$\phi_i = C_{i0} [d_{i0} + d_{i1}x^2 + d_{i2}x^4 + d_{i3}x^6]e^{-x^4/4}$$

Considerando las definiciones de los  $C_{ij}$  en función de  $\epsilon_i$  y  $C_{i0}$  podemos escribir la siguiente tabla:

TABLA III

$n$	$d_{n0}$	$d_{n1}$	$d_{n2}$	$d_{n3}$
0	0.105573	0.795886	0.894427	0.237288
1	1.894409	3.371385	-0.894409	-1.005151
2	1.894409	-3.371385	-0.894409	1.005152
3	0.105573	-0.795886	0.894427	-0.237283

Los  $\alpha_{ij}$  calculados para este caso son:

$$\alpha_{00} = 1.958000 ; \quad \alpha_{01} = \alpha_{10} = -0.232312 ;$$

$$\alpha_{20} = \alpha_{02} = 0.343932 ; \quad \alpha_{03} = \alpha_{30} = -4.111917 ;$$

$$\alpha_{11} = 1.131444 ; \quad \alpha_{12} = \alpha_{21} = -0.831408 ; \quad \alpha_{13} = \alpha_{31} = 0.445829 ;$$

$$\alpha_{22} = 0.978451 ; \quad \alpha_{23} = -0.869967 ; \quad \alpha_{33} = 1.509220 .$$

La serie de perturbaciones para la energía hasta  $N = 12$  con sus correspondientes sumas parciales, al igual que para el caso anterior se da en la tabla IV, a continuación:

$$(\text{con } \epsilon_0 = E^{(0)} = -15.0775)$$

TABLA IV

N	$E^{(N)}$	$S_N$
1	1.958000	16.122628
2	-0.571731	-130.11265
3	-1.564766 (-3)	-136.52193
4	9.969115 (-3)	516.81398
5	-6.08274 (-4)	453.03187
6	-3.35553 (-5)	-5176.60853
7	1.142557 (-5)	-2109.579043
8	1.366503 (-5)	56581.28589
9	-1.168439 (-6)	-23713.23793
10	-6.002926 (-7)	-683741.88960
11	1.022975 (-7)	1115895.74700
12	2.682461 (-8)	8666351.96100

$$S_N = S_{N-1} + E^{(N)} \cdot 16^N$$

La sucesión  $S_n$ , muestra en este caso una conducta totalmente intratable. Es oscilante irregularmente y abiertamente divergente en valor absoluto.

Sin embargo la serie de las energías comparte una característica con las calculadas anteriormente: tiene un radio de convergencia no nulo, como era esperable dado el carácter regular de la perturbación usada en relación con  $H(M)$ . Esto se puede estimar ya que para valores mayores de  $N$  (para cada  $M$ ) el cociente  $\left| \frac{E^{(N+1)}}{E^{(N)}} \right|$  es siempre menor que 1, y de manera general se puede afirmar que para los tres casos el inverso de lo anterior:  $\left| \frac{E^{(N)}}{E^{(N+1)}} \right| = r_N$  es acotado y  $r_N \sim 0(10)$  para  $N$  mayores.

Estas estimaciones permiten explicarnos cualitativamente el comportamiento de las series: para el caso  $M = 1$ , dado que el parámetro de perturbación que estamos usando  $\lambda = 8$  es siempre menor que el cociente  $r_N$  (salvo un número menor de anomalías), podemos suponer que estamos dentro del círculo de convergencia de la serie. Esto explica la satisfactoria convergencia de las sumas parciales para ese caso. Sin embargo, dado que el valor referencial de la energía para el estado fundamental de (1) es  $E_0 = 1.4356246$  (según Biswas et al [1973]), debemos considerar que el caso  $M = 1$ , si bien da una buena convergencia no lo hace aproximándose al valor real.

Para  $M = 2$ , los cocientes  $r_N$  equivalentes se comportan de modo semejante al caso anterior si bien muestran una tendencia mayor a ser más pequeños que los correspondientes a  $M = 1$  y salvo para los primeros valores de  $N$  (y esporádicos casos anómalos para órdenes mayores),  $r_N < 12$ . Esto explicaría la asintoticidad para este caso, pues  $S_3$  da una buena aproximación al valor real:  $S_3 = 1.329019$  y esta en la región

en que  $r_N > 12$ . Es totalmente lícito en este caso truncar la serie, dado su carácter asintótico, y considerar como último valor significativo de la sucesión  $S_n$  a  $S_3$ , puesto que además sabemos que la energía  $E_0$  de (1) ha de ser positiva siempre (ya que  $x^2 + x^6 > 0 \quad \forall x$ ).

En el caso  $M = 3$ , el cociente  $r_1 = 3.42$ , de modo que aún existiendo unos pocos primeros valores en que  $r^N > 16$ , el comportamiento general de estos cocientes es menor que  $\lambda$  y la serie no alcanza a ser asintótica, sino que para  $\lambda = 16$  es simplemente divergente en módulo. Podemos esperar que para  $M$  mayores esta conducta se acentue, pues los sucesivos parámetros de perturbación serán cada vez mayores alejándolos cada vez más del disco de convergencia. Esto se relaciona físicamente con el hecho de que al aumentar  $M$ , el hamiltoniano no perturbado (que es un pozo doble) se va haciendo cada vez más profundo (en sus dos mínimos de energía) y de consiguiente es cada vez más relevante la parte cuadrática en las cercanías del origen. Esto debería hacer disminuir la regularidad de la perturbación en esa región ( $x$  pequeño) que es precisamente la más importante dado el comportamiento del factor de control exponencial para los  $\psi_j$ , que decae muy rápidamente.

Creemos que  $M = 2$  da una muy buena aproximación al valor calculado por Biswas et al, en el trabajo citado en la bibliografía, considerando la rusticidad de las aproximaciones discutidas en (i) e (ii) del presente capítulo. Recordemos que la solución exacta para el operador  $\mathcal{H}(x)$  definido en (1) debe ser una función determinada por una serie in finita (en  $x$  par) atenuada por la exponencial característica. Esto

sugiere una explicación para la mala convergencia en  $M = 1$ . Aquí estamos usando una sola función (en  $x^2$ ) para desarrollar la solución general, lo que evidentemente es demasiado pobre.

En síntesis el método de Silverstone, nos da un buen valor al menos para un operador de la clase definida en el capítulo anterior, balanceando para ese hamiltoniano la escasez de autofunciones utilizables con la relativa pequeñez de  $M$ .

## BIBLIOGRAFIA

- (1) LORD RAYLEIGH; "The theory of bound", 1927.
- (2) LANDAU & LIFSCHITZ; "Mecánica Cuántica", Reverté, 1963.
- (3) WHITTAKER and WATSON: "Modern Analysis", Cambirdge University Press, 1927.
- (4) T. KATO: "Perturbation theory for linear operators", Springer-Verlag, 1966.
- (5) BENDER and ORSZAG: "Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers", Mc Graw Hill, 1978.
- (6) GRAFFI, GRECCHI y SIMON: "Borel Summability: Application to the anharmonic oscillators", Physics Letter 32B, 1970, pag.631-634.
- (7) SILVERSTONE, ADAMS, CIZEK y OTTO; "Stark effect in Hydrogen: Disper-tion Relations, Asymptotic Formulas and Calculation of the Ionization", Physical Review Letters 43, 1979, pag. 1493-1501.
- (8) GRAFFI, GRECCHI; "Resonances in Stark Effect and Perturbations Theory", Communications in Mathematical Physics, 62, 1978, pag. 83-96.

- (9) J. AVRON; "Bender-Wu formulas for the Zeeman effect in Hydrogen",  
Annals of Physics, 131, 1981, pag. 73-94.
- (10) C. BENDER, T. WU; "Anharmonic Oscillator", Physical Review, 184,  
1969, pag. 1231-1260.
- (11) C. BENDER, T. WU; "Anharmonic Oscillator II. A study of Perturbation  
Theory in Large Order", Physical Review D, 7, 1973, pag. 1620-  
1636.
- (12) H. SILVERSTONE: "Perturbation theory of the Stark Effect in hydro-  
gen", Physical Review A, 18, 1978, 1853-1863.
- (13) B. SIMON: Annals of Physics, 58, 1970, pag. 76-136.
- (14) J. LOEFFEL et al.; Physics Letters B, 30, 1969, pag. 656.
- (15) E. TITCHMARSH; "Eigenfunctions Expansions Associated with Second-  
Order Differential Equations", Oxfors U.P., 1958.
- (16) HEHENBERGER, Mc INTOSH y BRANDAS: Physical Review A, 10, 1974, pag.  
1494-1505.
- (17) S. BISWAS, K. DATTA et al.; "The Hill Determinant: An application",  
Physical Review D, 4, 1971, pag. 3617-3620.
- (18) S. BISWAS, K. DATTA et al.; "Eigenvalues of  $\lambda x^{2m}$  anharmonic osci-  
llators", Journal of Mathematical Physics 14, 1973, pag.1190-  
1195.
- (19) G. FLESSAS: "Exact Solutions of a sextic anharmonic oscillator",  
Physics Letters A, 72, 1979, pag. 289-290.

- (20) V. SINGH, S. BISWAS, K. DATTA; "Anharmonic Oscillator and the analytic theory of continued fractions", Physical Review D, 18, 1978, 1901-1908.
- (21) E. MAGYARI: "Exact quantum-mechanical solutions for anharmonic oscillators", Physics Letters A, 81, 1981, pag. 116-118.
- (22) K. DUTTA, R. WILLEY: "Exact analytic solutions for the quantum mechanical sextic anharmonic oscillator", Journal of Mathematical Physics, 29, 1988, pag. 892-900.
- (23) M. ABRAMOWITZ, I. STEGUN; "Handbook of Mathematical Functions", Dover, 1964.