

\mathcal{PT} szimmetrikus kvantummechanikai
problémák vizsgálata

BSc szakdolgozat

Zsigmond Anna Julia

ELTE TTK Fizika BSc 3. évfolyam

Témavezető: dr. Takács Gábor
MTA-ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport

Budapest,
2010

Kivonat

Egy kvantumelmélet energiaszintjeit és időfejlődését a Hamilton-operátor határozza meg. A kvantummechanika szokásos axiómája, hogy a Hamilton-operátor legyen hermitikus, mert ez garantálja a spektrum valóságát és az időfejlődés unitaritását. A dolgozatban egy alternatív kvantummechanikai formalizmust mutatunk be röviden, melyben a hermiticitást felcseréljük egy fizikailag értelmezhetőbb feltételre, hogy a Hamilton-operátor legyen invariáns a kombinált tér- és időtükrözés alatt (legyen \mathcal{PT} szimmetrikus).

Elsőként a $H = p^2 - (ix)^\alpha$ Hamilton-operátorral foglalkozunk. Megmutatható a komplex síkba kiterjesztett klasszikus pályák szimmetriája, és a kvantummechanikai energiaszintek valóságának kapcsolata. Ha a Hamilton-operátor \mathcal{PT} szimmetriája sértetlen, vagyis a sajátfüggvények is \mathcal{PT} szimmetrikusak, akkor a spektrum valós és pozitív. Ennek feltétele, hogy $\alpha \geq 2$. Ha $\alpha < 2$, akkor a kvantumos energiaszintek a felsőbb energiaszintek felől komplexszé válnak, és a klasszikus pályák nyíltak és nem periodikusak. Ez egy spontán szimmetriasértés, hiszen a Hamilton-operátor \mathcal{PT} szimmetrikus, de a hozzá tartozó klasszikus pályák illetve sajátfüggvények nem.

Az ilyen Hamilton-operátorral létrehozott kvantumelmélet fizikailag értelmezhető, mivel található megfelelő skalárszorzat, melyre a sajátfüggvények ortogonálisak, valamint a norma pozitív és időben megmarad. Ehhez a konzisztens valószínűségi értelmezéshez be kell vezetni egy új szimmetriaoperátort, mely a sajátfüggvények normáját méri.

Végül a $H = p^2 - (ix)^\alpha - \lambda(ix)^\beta$ ($\alpha \geq 2$) Hamilton-operátor perturbációs számítását vizsgáltuk kis λ együttható esetén. Arra a következtetésre jutottuk, hogy a spontán szimmetriasértés, amit $\beta < 2$ esetén várnánk, nem perturbatív. Más módszereket kell találnunk a szimmetriasértés vizsgálatára.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	2
1. \mathcal{PT} szimmetrikus klasszikus mechanika	4
1.1. $\alpha = 2$ esete a klasszikus harmonikus oszcillátor	5
1.2. $\alpha = 3$ esete	6
1.3. $\alpha = 4$ esete	7
1.4. Általános eset: $\alpha \geq 2$ valós szám	8
1.5. Spontán szimmetriasértés	10
1.6. $\alpha = 1$ esete	11
2. \mathcal{PT} szimmetrikus kvantummechanika	12
2.1. Az energia sajátértékek meghatározásának módszerei	13
2.2. A $H = p^2 - (ix)^\alpha$ Hamilton-operátor spektruma α függvényében . . .	17
2.3. Skalárszorzat \mathcal{PT} szimmetrikus kvantumelméletben	18
3. Összetett potenciál	21
Összefoglalás	25
Irodalomjegyzék	26
Köszönetnyilvánítás	28

Bevezetés

A kvantumelmélet már több mint száz éves és a kísérletekkel egyező eredményeket ad. Egy bevezető kvantumelmélet előadásban megtanuljuk, milyen axiómáknak kell teljesülnie egy kvantumelméletre. Ezek egy kivételével mind fizikai követelmények. Az egyetlen kivétel kevésbé fizikai inkább matematikai követelmény, mégpedig a rendszer Hamilton-operátorától és a megfigyelhető mennyiségekhez rendelt operátoroktól megköveteljük, hogy hermitikusak legyenek. A hermitikusság elegendő feltétele a spektrum valóságának, de nem szükséges. Az utóbbi néhány évtizedben egyre több nem-hermitikus Hamilton-operátorról fedezték fel, hogy a spektrumuk valós [1], [2], [3].

Ebben a dolgozatban olyan nem-hermitikus Hamilton-operátorokkal foglalkozunk, melyek a kombinált tér- és időtükrözésre invariánsak, vagyis \mathcal{PT} szimmetrikusak [4]. Megmutatható, hogy a \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátorok köre magában foglalja a hermitikus Hamilton-operátorokat [5]. Röviden: minden hermitikus Hamilton-operátorhoz található egy \mathcal{P} operátor, mely kommutál H -val, és a tulajdonságai megfelelnek a paritás operátornak. Ha a Hamilton-operátor $H = p^2 + V(x)$ alakú, ahol $V(x)$ valós, vagyis invariáns az időtükrözésre, akkor H automatikusan \mathcal{PT} szimmetrikus. Tehát a \mathcal{PT} szimmetria tekinthető a hermiticitás egy általánosításának [6].

A paritás és az időtükrözés operátorok hatása a koordinátára és az impulzusra:

$$\begin{aligned}\mathcal{P} : \operatorname{Re} x &\rightarrow -\operatorname{Re} x, \operatorname{Im} x \rightarrow \operatorname{Im} x \\ \operatorname{Re} p &\rightarrow -\operatorname{Re} p, \operatorname{Im} p \rightarrow -\operatorname{Im} p \\ \mathcal{T} : \operatorname{Re} x &\rightarrow \operatorname{Re} x, \operatorname{Im} x \rightarrow -\operatorname{Im} x \\ \operatorname{Re} p &\rightarrow -\operatorname{Re} p, \operatorname{Im} p \rightarrow \operatorname{Im} p \\ i &\rightarrow -i\end{aligned}\tag{1}$$

A \mathcal{P} és \mathcal{T} operátorok négyzete 1, így a kombinált \mathcal{PT} operátorra is $(\mathcal{PT})^2 = 1$. Az időtükrözés operátora nem lineáris, mivel komplex konjugálást tartalmaz, így a \mathcal{T}

operátort antilineárisnak szoktuk nevezni.

Mai fizikai kutatásokban sokféle új elméletet vizsgálnak, melyek kidolgozása több problémát is megoldhat az elméleti fizikában. A \mathcal{PT} szimmetrikus kvantumelméletet is vizsgálhatjuk a kvantumtérelméletben. Mint látni fogjuk, a vizsgált \mathcal{PT} szimmetrikus elméletek egy részében fellép egy dinamikai eredetű spontán szimmetriasértés, tehát nem kell a Lagrange-függvény szintjén bevezetni egy szimmetriasértő potenciált. Ettől remélhetjük, hogy a Standard modellben a Higgs szektor néhány elméleti problémáját megoldja, és akár kísérleti jóslatokkal is szolgálhat [7]. Megmutatható, hogy a $-g\phi^4$ elmélet aszimptotikusan szabad és spontán szimmetriasértésre vezet [7]. Ennek kvantummechanikai analógját a későbbiekben tárgyaljuk, és megmutatjuk, hogy megfelelő határfeltételek esetén a spektrum alulról korlátos, viszont a paritás szimmetria spontán sérül. Vizsgáltak további \mathcal{PT} szimmetrikus térelméleteket is, melyek renormálhatók és aszimptotikusan szabadok [8], [9].

Ebben a dolgozatban a következő alakú Hamilton-operátorral foglalkozunk:

$$H = p^2 - (ix)^\alpha \tag{2}$$

Ennek a tulajdonságait azért is érdekes vizsgálni, mert a tekinthetünk rá úgy, mint a harmonikus oszcillátor kiterjesztésére, hiszen $\alpha = 2$ esetén visszakapjuk a harmonikus oszcillátor jól ismert Hamilton-operátorát.

Az első fejezetben a \mathcal{PT} szimmetrikus klasszikus mechanika, a másodikban pedig a kvantummechanika néhány eredményét tekintjük át. A harmadik fejezetben pedig azt az esetet vizsgáljuk meg, hogy milyen hatással van, ha hozzáadunk az előzőhöz még egy \mathcal{PT} szimmetrikus potenciált valamilyen kis együtthatóval.

1. fejezet

\mathcal{PT} szimmetrikus klasszikus mechanika

Az $H = p^2 - (ix)^\alpha$ Hamilton-függvénnyel leírt klasszikus részecske egy komplex potenciálban mozog, ezért a mozgását a valós tengelyről ki kell terjesztenünk a komplex síkra. A részecske klasszikus mozgásegyenlete a kanonikus egyenletekből kapható meg.

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = 2p \quad (1.1)$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = i\alpha(ix)^{\alpha-1}$$

Ezen két egyenlet kombinációjából megkaphatjuk a Newton-törvény komplex verzióját.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = 2i\alpha(ix)^{\alpha-1} \quad (1.2)$$

Ha ezt egyszer integráljuk, akkor megkapjuk a komplex sebesség kifejezését.

$$\frac{dx}{dt} = \pm \sqrt{E + (ix)^\alpha} \quad (1.3)$$

Az időt valós változóként kezeljük, ami parametrizálja az $x(t)$ komplex pályát. Mivel minket a valós energiák érdekelnek a Hamilton-függvény \mathcal{PT} invarianciája miatt, ezért az energiát valósnak feltételezzük. Ezzel a feltételezéssel az x és t átskálázható úgy, hogy az energiát 1-nek választjuk, ettől a pályák alakja nem változik meg. Így a (1.3) egyenlet a következő módon egyszerűsödik.

$$\frac{dx}{dt} = \pm \sqrt{1 + (ix)^\alpha} \quad (1.4)$$

A pályák, melyek megoldásai a (1.4) egyenletnek egy Riemann-felületen fekszenek, amelyen a $\sqrt{1 + (ix)^\alpha}$ függvény egyértékű. A vágások egyik része a következő

egyenlet megoldásaiból ágazik szét:

$$1 + (ix)^\alpha = 0 \tag{1.5}$$

A (1.5) egyenlet gyökei a klasszikus fordulópontjai a mozgásnak. A fordulópontok a komplex egységkörön helyezkednek el. Nem egész α esetén egészen sok is lehet belőlük [10]. Ezeket a következő kifejezés adja meg

$$x = \exp\left(i\pi \frac{4N - \alpha - 2}{2\alpha}\right) \tag{1.6}$$

ahol N egész szám. A vágások másik része csak akkor van jelen, ha α nem egész szám. Ezt a vágást úgy választjuk meg, hogy explicit legyen a \mathcal{PT} szimmetria. A \mathcal{PT} szimmetria a komplex síkban a (1) alapján bal-jobb szimmetriának felel meg, vagyis a \mathcal{PT} szimmetrikus pályák szimmetrikusak az imaginárius tengelyre nézve. Tehát a vágást az imaginárius tengelynek választjuk. A fordulópontok is párokat alkotnak szimmetrikusan az imaginárius tengelyre nézve. Például egy-egy pár az $N = 0$ és $N = 1$ illetve az $N = -1$ és $N = 2$ értékekhez tartozó pontok.

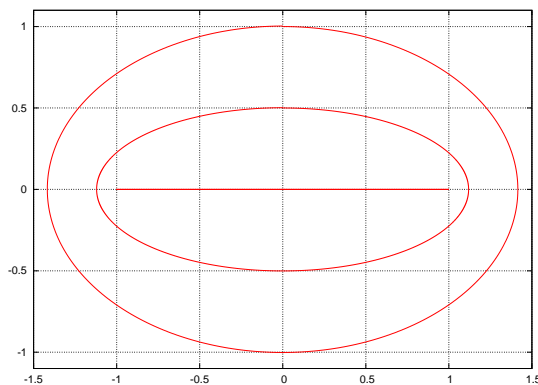
Mivel a (1.4) egyenlet megoldásai igen sokfélék lehetnek, megnézzünk néhány speciális α értékhez tartozó megoldást.

1.1. $\alpha = 2$ esete a klasszikus harmonikus oszcillátor

A legegyszerűbb eset a klasszikus harmonikus oszcillátor, melynek fordulópontjai $x_\pm = \pm 1$. Ha a kezdeti feltételben a koordinátát úgy állítjuk be, hogy a valós tengelyen e két ponton vagy közöttük legyen, akkor mivel az energiát lerögzítettük, a kezdeti sebesség is adott egy előjel erejéig. Ebben az esetben a mozgás a valós tengelyen a fordulópontok közötti oszcillátor mozgás. A $H = p^2 + x^2$ hermitikus, de így is kapunk új megoldásokat a komplex kiterjesztéssel, hiszen a kezdeti feltételnek bármely pontot választhatjuk a komplex síkban. Az 1.1. ábrán láthatóak a pályák a komplex síkban.

A pályák ellipszisek, melyek fókuszpontjai megegyeznek, mert a pályák nem metszhetik egymást. Az ellipszisek fókuszpontjai a fordulópontok. A klasszikus oszcillátor mozgás a valós tengelyen egy degenerált ellipszis. Az összes pálya periódusideje megegyezik az oszcillátor mozgás periódusidejével a Cauchy-tétel miatt, tehát $T = 2\pi$.

Vegyük észre, hogy az összes elliptikus pálya szimmetrikus az origóra, vagyis invariáns a \mathcal{P} paritás operátorra nézve, szimmetrikus a valós tengelyre, vagyis invariáns a \mathcal{T} időtükrözés operátorra nézve, és szimmetrikus az imaginárius tengelyre



1.1. ábra. Harmonikus oszcillátor pályák a komplex síkban

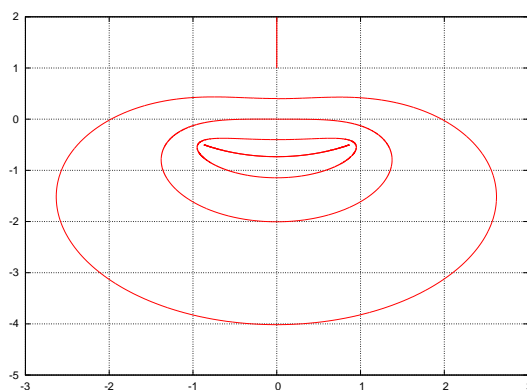
is, vagyis \mathcal{PT} invariáns.

1.2. $\alpha = 3$ esete

A Hamilton-operátor

$$H = p^2 + ix^3$$

Ebben az esetben három fordulópont van. Kettő az alsó félsíkban szimmetrikusan az imaginárius tengelyre: $x_- = e^{-5i\pi/6}$ és $x_+ = e^{-i\pi/6}$. Ezek \mathcal{PT} tükrözés hatására felcserélődnek. A harmadik fordulópont pedig az imaginárius tengelyen helyezkedik el: $x_0 = i$.



1.2. ábra. Klasszikus pályák $\alpha = 3$ esetén különböző kezdeti feltételekkel

Néhány lehetséges pályát mutat az 1.2. ábra. Ha az x_- vagy x_+ fordulópontból indulunk, akkor az $\alpha = 2$ esethez hasonlóan egy oszcillátor pályát kapunk, de ez deformálódva van. Ha a harmadik x_0 fordulópontból indulunk, akkor egy az imaginárius tengelyen a végtelenbe kifutó pályát ír le a részecske. Egyéb kezdeti feltételek esetén a pályák zártak és periodikusak, amik körüljárják az alsó két fordulópontot. A pályák nem metszhetik egymást, tehát ezek az eldeformált változatai

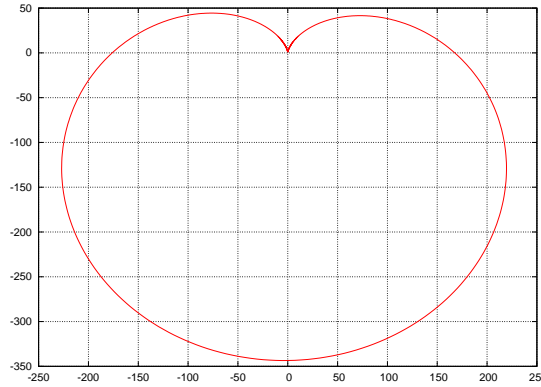
az $\alpha = 2$ esetén bemutatott ellipsziseknek.

A zárt pályák periódusideje megegyezik a fordulópontokat összekötő pálya periódusidejével:

$$T = 2\sqrt{3\pi}\Gamma\left(\frac{4}{3}\right) / \Gamma\left(\frac{5}{6}\right)$$

Ezek a periodikus pályák időtükrözésre nézve szimmetrikusak. Az imaginárius tengelyen végigfutó részecske véges idő alatt éri el a végtelent: $\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{4}{3}\right) / \Gamma\left(\frac{5}{6}\right)$. Ez a pálya nem periodikus, és nem invariáns időtükrözés alatt.

Ahogy a pályák egyre nőnek a kezdeti feltétel miatt, egy határoló szív alakú görbéhez tartanak, mert nem metszhetik az imaginárius tengelyen futó pályát. Egy ehhez hasonló pálya látható az 1.3. ábrán (a tengelyeket a jobb láthatóság érdekében átskáláztuk). Ennek a határoló görbének analízise részletesebben a [11] cikkben található.



1.3. ábra. $\alpha = 3$ esetén a szív alakú határoló görbe

1.3. $\alpha = 4$ esete

Amikor $\alpha = 4$, akkor a Hamilton-operátor

$$H = p^2 - x^4.$$

Ekkor négy fordulópont van, kettő-kettő szimmetrikusan a tengelyekre: $x_1 = e^{-3i\pi/4}$, $x_2 = e^{-i\pi/4}$, $x_3 = e^{i\pi/4}$, $x_4 = e^{3i\pi/4}$. Ebben az esetben két oszcillátor pálya van, az egyik az x_1 és x_2 , a másik az x_3 és x_4 pontokat köti össze. Az zárt pályák periódusideje:

$$T = 2\sqrt{2\pi}\Gamma\left(\frac{5}{4}\right) / \Gamma\left(\frac{3}{4}\right)$$

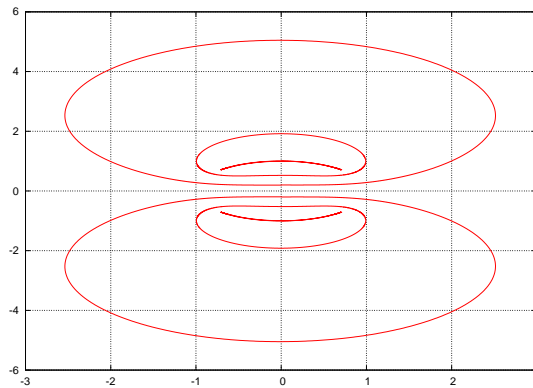
Azok a pályák, melyek máshol indulnak a komplex síkban, egymást nem metsző periodikus pályák az oszcillátor pályák körül. A Cauchy-tétel értelmében ezeknek is

megegyezik a periódusideje az oszcilláló pálya periódusidejével. Néhány lehetséges pálya látható az 1.4. ábrán.

Minden pálya periodikus kivéve azok, amik a valós tengelyen indulnak. Ha a kezdeti feltétel a valós tengelyen helyezkedik el, akkor a részecske a valós tengely mentén kifut a végtelenbe, tehát nem periodikus a pálya. Ez azt jelenti, hogy a $-x^4$ elméletet a valós tengelyen nem tudjuk kvantálni. A következő fejezetben megmutatjuk, hogy egy komplex kontúron lehet kvantálni az elméletet úgy, hogy a spektruma korlátos és valós.

A pályák alakjából az is kitűnik, hogy bár megőrzik a $-x^4$ potenciál \mathcal{PT} szimmetriáját, de a \mathcal{P} paritás szimmetriát sértik.

Ebben az esetben is van határoló görbe a végtelenben, amihez a növekvő pályák tartanak. Itt ez a görbe két körvonal, amik az origóban érintik egymást.



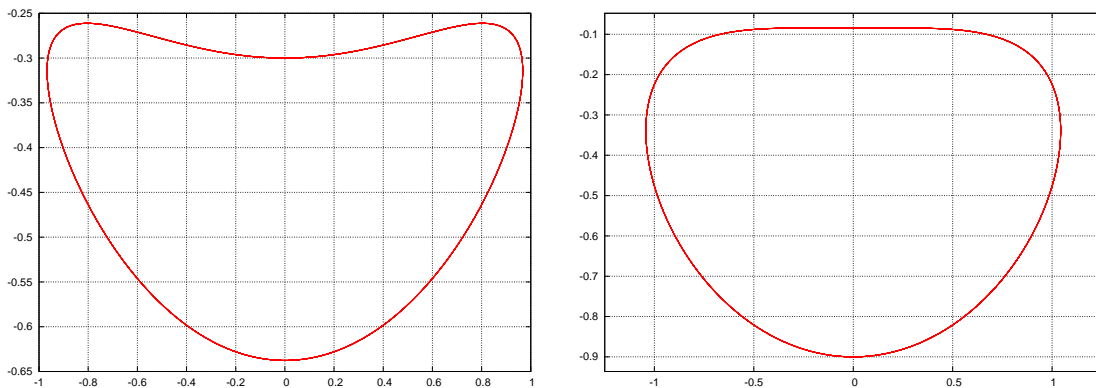
1.4. ábra. Klasszikus pályák $\alpha = 4$ esetén különböző kezdeti feltételekkel

1.4. Általános eset: $\alpha \geq 2$ valós szám

Általánosan megfigyelhető, hogy $\alpha \geq 2$ esetén a pályák periodikusak, és szimmetrikusak az imaginárius tengelyre. Periodikus pályák esetén várjuk a kvantált elmélettől, hogy diszkrét és valós energia sajátértékekkel rendelkezik.

Mint azt már említettük, minden esetben vannak a mozgásnak klasszikus fordulópontjai, de az egyes fordulópont párok mindig a Riemann-felület más-más levelén vannak. A legegyszerűbb pályák minden esetben azok, amelyek az $N=0$ és $N=1$ fordulópontot járják körbe, vagyis a harmonikus oszcillátor mozgás eldeformáltjai. Ilyen pályák láthatók az 1.5. ábrán.

Ezekre a pályákra a periódusidő is egyszerű módon számolható. A Cauchy-tétel értelmében elegendő a fordulópontokat összekötő kontúr mentén kiszámolni a periódusidőt, az ezt körüljáró pályák periódusideje megegyezik. A periódusidőt a következő integrál adja meg, ahol felhasználtuk az (1.4) egyenletet.



1.5. ábra. Klasszikus pályák $\alpha = 2.5$ esetén különböző kezdeti feltételekkel

$$T = 2 \int_{x_-}^{x_+} \frac{dx}{p} = 2 \int_{x_-}^{x_+} \frac{dx}{\sqrt{1 + (ix)^\alpha}} \quad (1.7)$$

Itt $x_\pm = e^{-i\pi(\frac{\alpha \pm 2}{2\alpha})}$ a fordulópontok. A zárt pálya mentén az integrál minden esetben összehúzható a fordulópontokhoz húzott sugarakra, mivel a fordulópontokban nincs pólus, csak négyzetgyökös vágás. Az (1.7) integrált ezért úgy alakítjuk át, hogy a fordulópontokat és az origót összekötő egyeneseken paraméterezzük: $x = tx_+$.

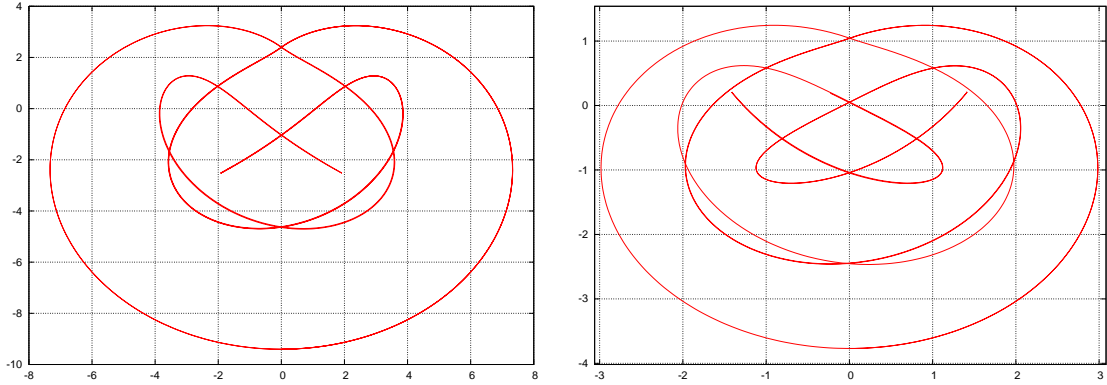
$$T = 2(x_+ - x_-) \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1 - t^\alpha}} = 2 \cos\left(\pi \frac{\alpha - 2}{2\alpha}\right) \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{1 - t^\alpha}} \quad (1.8)$$

Eddig nem vettük figyelembe, hogy a periódusidő függ az energiától is. Ezt az energiától való függést az idő átskálázása alapján kaphatjuk meg. Végeredményben a periódusidő kifejezése az integrál értékének felhasználásával a következő egyszerű formulával adható meg.

$$T = 4\sqrt{\pi} E^{-\frac{\alpha-2}{2\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{\alpha+1}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(\frac{\alpha+2}{2\alpha}\right)} \cos\left(\pi \frac{\alpha - 2}{2\alpha}\right) \quad (1.9)$$

Léteznek bonyolultabb pályák is, amelyek több levelét érintik a Riemann-felületnek. Ez akkor történik, ha a pálya metszi a pozitív imaginárius tengelyen lévő vágást, és elhagyja a fő Riemann-levelét. Ha bármelyik pályát levetítjük a komplex síkra, akkor láthatjuk, hogy szimmetrikusak az imaginárius tengelyre, vagyis \mathcal{PT} szimmetrikusak. Ezeknek a több fordulópontot körüljáró pályáknak a Cauchy-tétel értelmében a periódusidejük hosszabb. Ilyen bonyolultabb pályákra látható két példa az 1.6. ábrán.

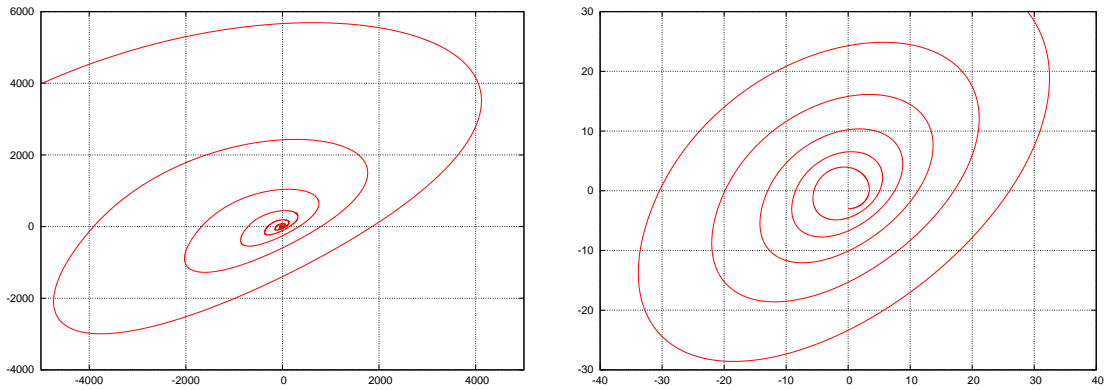
A klasszikus pályák $\alpha \geq 2$ esetén az α illetve a kezdeti feltétel függvényében nagyon gazdag és változatos topológiát mutatnak. A [10] cikk részletesebben foglalkozik azzal, hogy a kezdeti feltételtől és az α kitevőtől hogyan függ a pálya alakja illetve periódusa.



1.6. ábra. Klasszikus pályák $\alpha = 2, 5$ esetén különböző kezdeti feltételekkel

1.5. Spontán szimmetriasértés

Ha $1 < \alpha < 2$, akkor a klasszikus pályák viselkedése alapvetően megváltozik. A pályák ebben az esetben nem \mathcal{PT} szimmetrikusak, hanem nyíltak és a végtelenbe spiráloznak végtelen idő alatt. A \mathcal{PT} szimmetria sérülését legegyszerűbben úgy láthatjuk, hogy a kezdeti koordinátát képzetesnek választjuk, és nézzük a kezdeti sebesség értékét rögzített valós energia mellett. Ha $\alpha < 2$, akkor a kezdeti sebesség komplexszé válik, ami azt jelenti, hogy a pálya az imaginárius tengelyt nem merőlegesen metszi. Ilyen szimmetriasértő pályákat láthatunk az 1.7. ábrán.

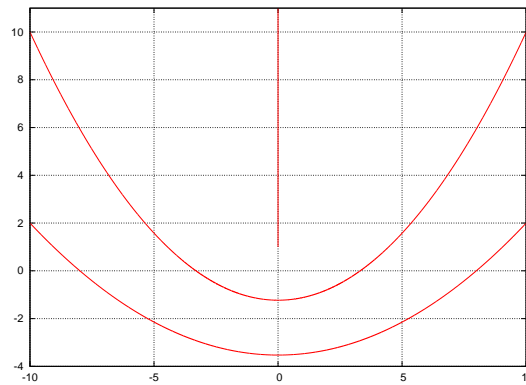


1.7. ábra. Klasszikus pálya $\alpha = 1.8$ (bal) és $\alpha = 1.9$ (jobb) esetén

Az α paraméter függvényében $\alpha = 2$ -nél történő spontán szimmetriasértést nevezhetjük fázisátalakulásnak, hiszen Hamilton-függvény továbbra is \mathcal{PT} szimmetrikus, de a megoldásoknak két különböző tartománya van. A két tartományt az $\alpha = 2$ választja el, alatta a szimmetria sértett fázis, fölötté pedig a sértetlen fázis található.

1.6. $\alpha = 1$ esete

Érdekességképp megmutatjuk, hogyan néznek ki a klasszikus pályák $\alpha = 1$ esetén. Ahogy az az 1.8. ábrán látható a klasszikus pályák \mathcal{PT} szimmetrikusak, vagyis szimmetrikusak az imaginárius tengelyre. Ugyanakkor a klasszikus pályák nyíltak, vagyis a megfelelő kvantummechanikai problémának nem lesznek kötött állapotai, vagyis valós energia sajátértékei. Ehhez hasonlóan $\alpha < 1$ esetén sincsenek zárt pályák.



1.8. ábra. Klasszikus pályák $\alpha = 1$ esetén

2. fejezet

\mathcal{PT} szimmetrikus kvantummechanika

A Hamilton-operátor tulajdonságai fontosak egy új kvantumelmélet vizsgálatakor, mivel a Hamilton-operátor határozza meg az energiaszinteket, a hullámfüggvény és az operátorok időfejlődését illetve magában foglalja a rendszer szimmetriáit.

Az energiaszintek meghatározásához az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet, mint energia sajátérték-egyenletet kell megoldanunk:

$$H\psi = E\psi \quad (2.1)$$

A (2.1) egyenlet általában egy differenciálegyenlet, amit a megfelelő peremfeltételekkel kell megoldani. A peremfeltételek meghatározása nem feltétlen egyszerű feladat, ha fizikailag értelmes elméletet szeretnénk kapni. Erre található egy példa a következő fejezetben.

A \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátor esetén H kommutál a \mathcal{PT} operátorral. A \mathcal{PT} operátor antilineáris, ezért nem minden esetben igaz, hogy a H sajátállapotai sajátállapotai a \mathcal{PT} -nek is. Ettől függetlenül, ha a ψ hullámfüggvény sajátállapota a H és a \mathcal{PT} operátornak is, akkor az energia sajátértékek biztosan valósak. Tegyük fel, hogy ψ sajátfüggvénye a \mathcal{PT} operátornak λ sajátértékkel:

$$\mathcal{PT}\psi = \lambda\psi \quad (2.2)$$

Hattassuk a \mathcal{PT} operátort még egyszer az (2.2) egyenletre, és vegyük figyelembe, hogy $(\mathcal{PT})^2 = 1$:

$$\psi = (\mathcal{PT})\lambda(\mathcal{PT})^2\psi \quad (2.3)$$

Mivel a \mathcal{T} operátor antilineáris (1), a következőre jutunk:

$$\psi = \lambda^*\lambda\psi = |\lambda|^2\psi \quad (2.4)$$

Tehát $|\lambda|^2 = 1$, vagyis a \mathcal{PT} operátor sajátértéke egy fázis:

$$\lambda = e^{i\varphi} \quad (2.5)$$

Ezután hattassuk a \mathcal{PT} operátort a (2.1) egyenletre, és megint vegyük figyelembe, hogy $(\mathcal{PT})^2 = 1$:

$$(\mathcal{PT})H\psi = (\mathcal{PT})E(\mathcal{PT})^2\psi \quad (2.6)$$

Ha kihasználjuk a (2.2) sajátérték egyenletet és, hogy \mathcal{PT} kommutál H -val, a következő egyenletre jutunk:

$$H\lambda\psi = \mathcal{PT}E\mathcal{PT}\lambda\psi \quad (2.7)$$

Végül megint felhasználva \mathcal{T} antilinearitását azt kapjuk, hogy

$$E\lambda\psi = E^*\lambda\psi \quad (2.8)$$

Vagyis, mivel λ nem nulla, arra jutunk, hogy E valós, tehát $E = E^*$.

Tehát ha a \mathcal{PT} sajátállapotai H -nak is sajátállapotai, akkor a \mathcal{PT} szimmetria sértetlen, és az energia sajátértékek valósak. Ez azt jelenti, hogy a spektrum komplex voltából következik a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülése. Ez hasonlít arra, hogy klasszikus esetben a zárt periodikus pályák \mathcal{PT} szimmetrikusak. A következő fejezetekben pedig megmutatjuk, hogy $\alpha = 2$ -nél kvantumozás esetén is bekövetkezik egy fázisátalakulás.

2.1. Az energia sajátértékek meghatározásának módszerei

Az energiaspektrumra a WKB-módszer [12] nagyon jó analitikus közelítést ad, ha $\alpha \geq 2$. A hatásintegrál kvantálási feltétele vezető rendben a következő:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi = \int_{x_-}^{x_+} dx \sqrt{E + (ix)^\alpha} \quad (2.9)$$

Az újdonság az, hogy az integrált a komplex síkban kell elvégezni. Az x_\pm fordulópontok az $E + (ix)^\alpha = 0$ egyenlet gyökei:

$$x_- = E^{\frac{1}{\alpha}} e^{i\pi \frac{3\alpha-2}{2\alpha}}, x_+ = E^{\frac{1}{\alpha}} e^{-i\pi \frac{\alpha-2}{2\alpha}} \quad (2.10)$$

Ha $\alpha = 2$, akkor az integrál a valós tengelyen van. A fordulópontok a valós tengelyről a komplex sík alsó felébe fordulnak, ahogy α nő, tehát ekkor az integrálási útvonal folytonos. Ha $\alpha < 2$, akkor a végpontok a felső félsíkban vannak, és az integrálási görbe metszi a vágást az imaginárius tengelyen, tehát az integrálási útvonal nem folytonos, vagyis a WKB-módszer nem használható $\alpha < 2$ esetén.

Az integrálási görbét az x_- pontból az origóba, az origóból az x_+ pontba futó szakaszokból rakjuk össze. Ezt figyelembe véve és az integrálási görbét átparaméterezve a (2.9) egyenletből a következő egyenletre jutunk:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi = 2 \sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) E^{\frac{2+\alpha}{2\alpha}} \int_0^1 ds \sqrt{1+s^\alpha} \quad (2.11)$$

Innen az integrál elvégzésével az energiaszintek kifejezhetők minden $\alpha \geq 2$ -re:

$$E_n = \left[\frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) \sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{3\alpha+2}{2\alpha}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{\alpha+1}{\alpha}\right)} \right]^{\frac{2\alpha}{\alpha+2}} \quad (2.12)$$

Ezeket az energiaszinteket láthatjuk fekete vonallal jelölve a 2.2. ábrán.

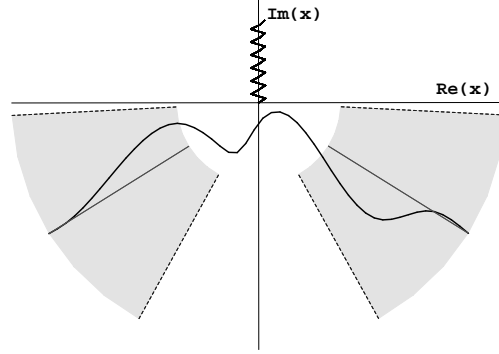
Az energiaszintek numerikus meghatározásának több lehetősége is van. Minden esetben az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet kell megoldanunk:

$$-\psi''(x) - (ix)^\alpha \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.13)$$

Adott energia esetén a (2.13) differenciálegyenletet Numerov vagy Runge-Kutta módszerrel oldhatjuk meg. A Numerov módszer [13] előnye, hogy ötödrendű módszer és nagyon gyors. Probléma akkor lép fel, amikor $\alpha \geq 4$, mert ekkor már nem lehet a differenciálegyenletet a valós tengelyen integrálni [14]. Ekkor használhatjuk a negyedrendű Runge-Kutta módszert [15], és az integrálást a komplex síkban végezzük.

A peremfeltételeket általában úgy határozzuk meg, hogy $\psi(x) \rightarrow 0$, ha $|x| \rightarrow \infty$ a valós tengelyen. Ez a feltétel kielégítő, ha $1 < \alpha < 4$, de tetszőleges valós α -ra a problémát el kell folytatnunk a komplex síkra. Az integrálási kontúrt a valós tengely helyett egy komplex síkban futó kontúrra cseréljük, amely mentén a differenciálegyenlet fennáll, és kirójuk a peremfeltételeket ennek a kontúrnak a végpontjain.

Azok a tartományok a vágott komplex síkban, melyekben $\psi(x)$ eltűnik, ahogy $|x| \rightarrow \infty$, azok szektorok (2.1. ábra), melyeket a differenciálegyenlet Stokes vonalai határolnak [12]. A szektorok közepeit, amelyek mentén a $\psi(x)$ a leggyorsabban tűnik el, anti-Stokes vonalaknak nevezzük.



2.1. ábra. Szektorok a komplex síkban $\alpha = 4.2$ esetén, amelyek tartalmazzák a differenciálegyenlet integrálási kontúráját

Tetszőleges α esetén az anti-Stokes vonalak a bal és jobb félsíkban a következő szögeknél találhatóak:

$$\Theta_L = -\pi + \frac{\alpha - 2\pi}{\alpha + 2} \quad \text{és} \quad \Theta_R = -\frac{\alpha - 2\pi}{\alpha + 2} \quad (2.14)$$

A szektorok nyílásszöge $\Delta = 2\pi/(\alpha + 2)$. A (2.13) differenciálegyenletet bármilyen görbén integrálhatjuk a komplex síkban, ha az a végtelent a szektorok belsejében közelíti meg. A szektorok $1 < \alpha < 4$ esetén tartalmazzák a valós tengelyt. A $-x^4$ potenciál esetén a Stokes-vonalak a valós tengelyen fekszenek, tehát ha a valós tengelytől elmozdítjuk a kvantálási kontúrt, akkor kapunk korlátos valós spektrumot.

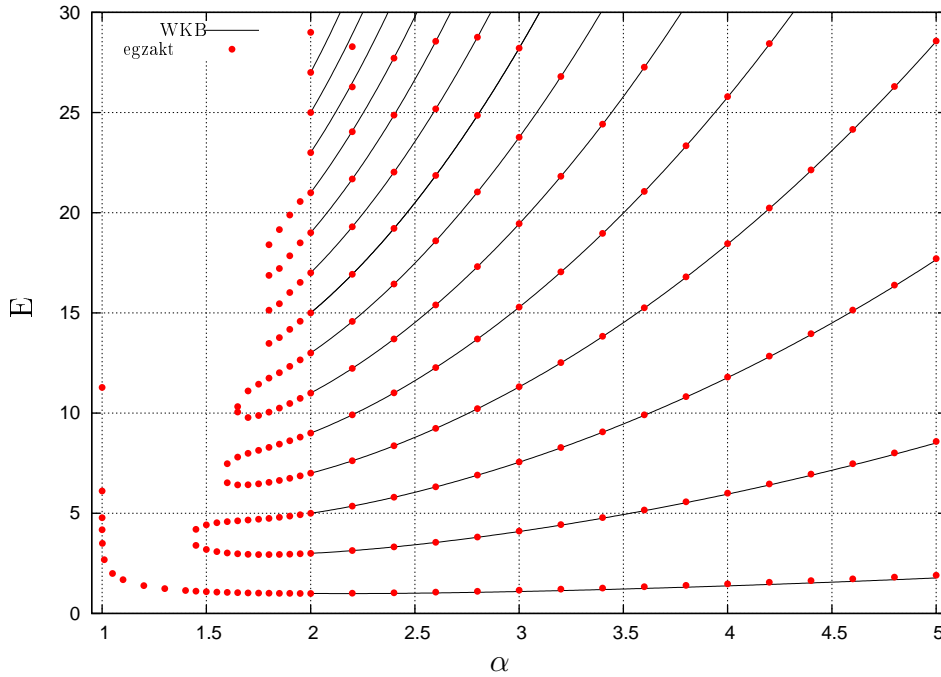
Ahogy α nő 2-től a szektorok lefelé fordulnak az imaginárius tengely negatív oldala felé, és egyre szűkülnek. $\alpha \rightarrow \infty$ esetén a kontúr az imaginárius tengely negatív oldalán fut fel és le, vagyis nem értelmezhető a sajátérték probléma. Ezt láthatjuk is a 2.2. ábrán, hogy $\alpha \rightarrow \infty$ mellett a sajátértékek is a végtelenbe divergálnak. Ha α csökken 2-től, akkor a szektorok felfelé forognak a valós tengelytől, és szélesednek. $\alpha = 1$ esetén a két oldali szektor összeér az imaginárius tengely pozitív felén, így a kontúr kitolható végtelenbe, tehát ebben az esetben sem értelmezhető a sajátérték probléma. Ennek megfelelően az alapállapot energiája divergál, ha $\alpha \rightarrow 1^+$ (2.2. ábra).

Ha adott energián meg tudjuk oldani a differenciálegyenletet, akkor már csak meg kell keresni a megfelelő energiát, ahol a megoldás teljesíti a peremfeltételeket. Ezt a „shooting method,” nevű eljárással tehetjük meg [15], melynek alapja, hogy adott energiánál megoldjuk a differenciálegyenletet a negatív oldalról és a pozitív oldalról is. A kezdeti feltételeket úgy választjuk, hogy $\psi_0 = 0$ és $\psi'_0 = h$, ahol

\hbar a lépésköz, így a peremfeltételeket teljesíti a megoldás. Ezután a megoldásokat az origóban összeillesztjük, hogy a megoldás függvényre igaz legyen a következő folytonossági feltétel:

$$\frac{\psi'_L(0)}{\psi_L(0)} = \frac{\psi'_R(0)}{\psi_R(0)} \quad (2.15)$$

Tehát a megfelelő energia sajátértéket egyszerűen a (2.15) kifejezés két oldalának különbségének zérushely keresésével találhatjuk meg. Ezzel a módszerrel számolt energia sajátértékeket láthatjuk a 2.2. ábrán piros pontokkal.



2.2. ábra. A $H = p^2 - (ix)^\alpha$ Hamilton-operátor energiaszintjei WKB illetve shooting módszerrel. Az $\alpha = 2$ felel meg a harmonikus oszcillátor energiaszintjeinek.

Az energiaszintek meghatározásának előzőekben tárgyalt módszerét ellenőrizhetjük ettől független mátrixokat használó módszerekkel. A legegyszerűbb, ha koordináta reprezentációban felírjuk a Hamilton-operátor mátrixát, és megoldjuk a sajátérték problémáját. Mivel csak véges méretű mátrixokkal tudunk számolni, ezért jól kell megválasztani a doboz méretét, amibe a véges mátrix esetén a részecske be van zárva. Ezt egyszerűen úgy választjuk meg, ahogyan a differenciálegyenletek megoldásánál sem konkrétan a végtelenből indítjuk a megoldást, hanem valami véges az origótól távolinak tekinthető helyről.

Egy másikfajta mátrixos felírása a Hamilton-operátornak a harmonikus oszcillátor bázis. A bázisfüggvények $e^{-x^2/2} H_n(x) \pi^{-1/4} / \sqrt{2^n n!}$ alakúak, ahol $H_n(x)$ az n -edik Hermite-polinom. Ebben a bázisban a Hamilton-operátor mátrixa a következő alakú

$$M_{mn} = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{\pi 2^{m+n} m! n!}} e^{-x^2/2} H_m(x) i^{m+n} \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2}(\alpha + 2 - m - n)\right) |x|^\alpha e^{-x^2/2} H_n(x) \quad (2.16)$$

Ezekkel a módszerekkel is megkaptuk a valós sajátértékeket. A mátrixos módszerek hátránya viszont, hogy csak $1 < \alpha < 4$ esetén használhatóak, és a méretük növelésével csak lassan konvergálnak a sajátértékek az egzakt energiaszinthez.

2.2. A $H = p^2 - (ix)^\alpha$ Hamilton-operátor spektruma α függvényében

Ebben a részben elemezzük 2.2. ábrát. α függvényében négy tartományt különböztethetünk meg. Minden esetben összefüggés látszik a klasszikus pályák zártsága és a spektrum valósága között.

$\alpha \geq 2$ esetén a teljes spektrum diszkrét és valós, vagyis végtelen számú valós sajátérték van. A klasszikus pályák PT szimmetrikusak és zártak, ezért az energiaszintek szemiklasszikus közelítése jó eredményt ad. Ahogy α nő, az energiaszintek is nőnek, és $\alpha \rightarrow \infty$ esetén divergálnak.

$1 < \alpha < 2$ a legérdekesebb tartomány, aminek két része van. Ebben a tartományban az energiaszintek egy véges számú része valós, a többi része komplex. Ahogy az α paraméter kettőtől csökken az energiaszintek felülről párosával komplex konjugált párokban hagyják el a valós tengelyt. Körülbelül $\alpha < 1,42$ esetén már csak az alapállapot energiája valós. Az alapállapot energiája divergál, ha $\alpha \rightarrow 1^+$. A szemiklasszikus közelítés általában a magasabb energiaszintek esetén használható jól, de mivel itt a magasabb energiaszintektől kezdenek komplexsé válni a sajátértékek, a szemiklasszikus közelítés nem használható. A klasszikus pályák nyíltak és nem PT szimmetrikusak.

$\alpha < 1$ esetén a sajátérték probléma nem értelmezhető. A klasszikus pályák nyíltak, tehát nem kvantálható a rendszer. Nincsenek valós energiaszintek.

Ahogy a klasszikus pályáknál bevezettük, $\alpha = 2$ -nél egyfajta fázisátmenet következik be, vagyis az α paraméter függvényében megkülönböztethetünk egy sértetlen PT szimmetriájú és egy spontán szimmetriasértett fázist.

2.3. Skalárszorzat \mathcal{PT} szimmetrikus kvantumelméletben

A felfedezés, hogy egy nem-hermitikus Hamilton-operátornak a sajátértékei valóságosak és pozitívak, felveti a kérdést, hogy egy ilyen $H = p^2 - (ix)^\alpha$ alakú nem-hermitikus Hamilton-operátor fizikai rendszert ír-e le, vagy csak egy matematikai érdekesség. Egy fizikailag értelmezhető kvantummechanikai rendszernél az állapotvektorok Hilbert-teret alkotnak, amely Hilbert-térben létezik pozitív definit skalárszorzat. Ezenkívül az időfejlődésnek unitérnek kell lenni, hogy a norma időben állandó legyen.

Tehát definiálni kell a skalárszorzatot ehhez a nem-hermitikus Hamilton-operátorhoz. Egy ésszerű választása a skalárszorzatnak a következőképp néz ki [16].

$$(f, g) = \int [\mathcal{PT}f(x)]g(x)dx = \int f^*(-x)g(x)dx \quad (2.17)$$

Itt láthatjuk, hogy a \mathcal{PT} operátor hatása az állapotvektorra tükrözést és komplex konjugálást jelent. Az integrálási útvonalat a 2.1 részben leírt módon kell megválasztani. Ennek a skalárszorzat választásnak az előnye, hogy a vele definiált \mathcal{PT} norma (f, f) időben megmarad. Erre a skalárszorzatra nézve a H sajátfüggvényei ψ_n és ψ_m ortogonálisak, ha $n \neq m$. Azonban, amikor $n = m$ azt látjuk, hogy a sajátfüggvények \mathcal{PT} normája nem pozitív definit.

$$(\psi_n, \psi_m) = (-1)^m \delta_{nm} \quad (2.18)$$

Ezt az eredményt numerikusan is ellenőrizhetjük, és $\alpha \geq 2$ esetén α minden értékére igaznak bizonyul. Mivel a sajátfüggvények normájának előjele váltakozik, ezért a \mathcal{PT} skalárszorzathoz tartozó metrika indefinit. Ez az előjel váltakozás egy általános tulajdonsága a \mathcal{PT} skalárszorzatnak.

A nem-pozitív skalárszorzat ellenére is el lehet kezdeni a hagyományos $H\psi_n = E_n\psi_n$ Schrödinger-egyenlet vizsgálatát. A sajátfüggvények teljes rendszert alkotnak

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x)\psi_n(y) = \delta(x - y). \quad (2.19)$$

Megmutatható, hogy a (2.19) formula az egységoperátor reprezentációja. A teljességet felhasználhatjuk a \mathcal{P} operátor megkonstruálására, mivel sértetlen \mathcal{PT} szimmetria esetén a H sajátfüggvényei \mathcal{PT} -nek is sajátfüggvényei. A paritás operátora

koordináta reprezentációban a következő

$$\mathcal{P}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(-y) = \delta(x + y). \quad (2.20)$$

Az előzőek felhasználásával megkapható, hogy a paritás operátor négyzete tényleg az egységoperátor $\mathcal{P}^2 = 1$. A H operátort is kifejezhetjük koordináta reprezentációban

$$H(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n E_n \psi_n(x) \psi_n(y). \quad (2.21)$$

Az előző formulák alapján belátható, hogy a Hamilton-operátor kielégíti az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet: $H\psi_n = E_n\psi_n$.

Most feltehetjük a kérdést, hogy a \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátor fizikailag értelmezhető kvantummechanikát ír-e le. A probléma a váltakozó előjelű normával van a norma valószínűségi interpretációja miatt. Tehát az indefinit metrika nem elfogadható.

A probléma megoldása, hogy bevezetünk egy új \mathcal{C} szimmetria operátort, ami azzal a szimmetriával hozható összefüggésbe, hogy a sajátállapotok felének normája -1 és a másik felének $+1$. Minden sértetlen \mathcal{PT} szimmetriájú Hamilton-operátor esetén bevezethető ez a \mathcal{C} lineáris operátor, ami kommutál H -val és \mathcal{PT} -vel is. Ezzel a skalárszorzat kifejezését módosíthatjuk

$$\langle \varphi | \chi \rangle = \int dx \mathcal{CPT} \varphi(x) \chi(x). \quad (2.22)$$

Koordináta reprezentációban a \mathcal{C} operátor egyszerűen a sajátállapotok összegéből állítható elő

$$\mathcal{C}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(y). \quad (2.23)$$

Innen belátható, hogy a $\mathcal{C}^2 = 1$ és a \mathcal{C} sajátértékei ± 1 . Mivel \mathcal{C} kommutál a H -val, az energia sajátállapotokra mindig határozott értéke van a \mathcal{C} operátornak. Speciálisan, ha a sajátállapotokra igaz (2.18), akkor a \mathcal{C} operátor a \mathcal{PT} norma előjelével van szoros összefüggésben:

$$\mathcal{C}\psi_n(x) = \int dy \mathcal{C}(x, y) \psi_n(y) = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m(x) \int dy \psi_m(y) \psi_n(y) = (-1)^n \psi_n(x) \quad (2.24)$$

A (2.22)-ben definiált új skalárszorzathoz pozitív definit norma tartozik, ami időben megmarad, hiszen az időfejllesztő operátor e^{-iHt} , mint a szokásos kvantummechanikában. A teljesség kifejezése a \mathcal{CPT} skalárszorzattal a következőképp néz

ki

$$\sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{CPT}\psi_n(x)] \psi_n(y) = \delta(x - y). \quad (2.25)$$

Egy fontos különbség a szokásos kvantummechanikához képest, hogy egy \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátorral definiált kvantumelméletben a skalárszorzat függ a Hamilton-operátortól magától, így dinamikusan van meghatározva. Ez azt jelenti, hogy először meg kell határoznunk a sajátállapotokat, és csak ezután tudjuk a hozzájuk tartozó Hilbert-teret és skalárszorzatot megtalálni. Ennek megtalálása, vagyis a \mathcal{C} operátor megalkotása minden elmélet esetén külön feladat [17].

A \mathcal{C} operátort nem kell bevezetni a szokásos hermitikus kvantummechanikában. Ha a vizsgált rendszerünkél α paraméterrel tartunk 2-höz (harmonikus oszcillátor), akkor a \mathcal{C} operátor a paritás operátorral válik egyenlővé, vagyis a \mathcal{CPT} hatása átmegegy a \mathcal{T} hatásába, ami egyszerűen komplex konjugálás. Tehát a \mathcal{CPT} skalárszorzat a megszokott skalárszorzatba megy át hermitikus Hamilton-operátorok esetén.

A teljességhez hozzátartozik, hogy a megfigyelhető mennyiségek operátorainak hermiticitását milyen feltételre cseréljük a \mathcal{PT} szimmetrikus kvantummechanikában. A skalárszorzatnál a komplex konjugálást a \mathcal{CPT} operátorra cseréltük, ennek megfelelően a megfigyelhető mennyiségekre a következő feltételt rójuk ki:

$$A^T = \mathcal{CPT} A \mathcal{CPT} \quad (2.26)$$

amiről megmutatható, hogy az időfejlődés alatt invariáns [7]. A koordináta és az impulzus általában nem megfigyelhető mennyiség; például a $H = p^2 + ix^3$ rendszerben a koordináta esetén ez abból is látható, hogy a várható értéke imaginárius (1.2. ábra). Ezért ezeket a rendszereket általában nem lehet értelmezni valamilyen térben lokalizált pontszerű részecske leírásaként.

Felmerül a kérdés, hogy ha találtunk megfelelő pozitív definit skalárszorzatot, akkor nem található-e egy hermitikus Hamilton-operátor, mely ekvivalens a \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátorunkkal. A válasz, hogy bizonyos esetekben található ekvivalens Hamilton-operátor [18], de a kettő közötti transzformáció nem lokális [7], tehát a \mathcal{PT} szimmetrikus kvantumelmélettel kiterjesztettük a szokásos hermitikus kvantumelméletet. Találtak olyan \mathcal{PT} szimmetrikus Hamilton-operátort is, aminek egyáltalán nem létezik hermitikus párja [19].

3. fejezet

Összetett potenciál

Az előző két fejezetben áttekintettük mindazt, amire a következő alakú Hamilton-operátor perturbatív vizsgálatához szükséges.

$$H = p^2 - (ix)^\alpha - \lambda(ix)^\beta \quad (3.1)$$

Minden esetben feltesszük, hogy $\alpha \geq 2$ tehát, ha csak a potenciál első tagja lenne jelen, akkor a \mathcal{PT} szimmetria sértetlen maradna. Így $\lambda = 0$ esetén a H sajátértékeit és sajátfüggvényeit ismertnek tekintjük. Ha $\lambda \neq 0$, akkor vizsgálhatjuk klasszikusan és kvantumosan is azt a két esetet, amikor a β kitevős tag miatt sérül illetve nem sérül a \mathcal{PT} szimmetria.

A klasszikus pályák esetén a szimmetriasértés vizsgálatához elegendő a kezdeti feltételek egyenletét vizsgálni, mivel csak valós energiákat tekintünk

$$p_0^2 - (ix_0)^\alpha - \lambda(ix_0)^\beta = E. \quad (3.2)$$

Ha a kezdeti koordinátát az imaginárius tengelyen választjuk, akkor a \mathcal{PT} szimmetria miatt a kezdeti sebességnek (impulzusnak) valósnak kell lenni. Tehát azt kell megvizsgálnunk, mikor válik komplexszé a kezdeti sebesség λ és β függvényében.

Vizsgáljuk perturbatív a (3.2) egyenletet, vagyis keressük a kezdeti koordinátát $x_0 = x_1 + \lambda x_2$, a kezdeti impulzust $p_0 = p_1 + \lambda p_2$ alakban, és fejtsünk sorba λ szerint.

$$[p_1^2 - (ix_1)^\alpha] + [2p_1p_2 - (ix_1)^\beta - i\alpha(ix_1)^{-1+\alpha}x_2] \lambda + \mathcal{O}(\lambda^2) = E \quad (3.3)$$

Használjuk ki, hogy x_1 és p_1 a perturbálatlan egyenletet elégítik ki, vagyis $p_1^2 - (ix_1)^\alpha = E$. Ekkor a λ együtthatójaként szereplő kifejezés egyenlő nullával, amit megoldunk p_2 -re.

$$p_2 = \frac{(ix_1)^\beta + \alpha(ix_1)^{-1+\alpha}x_2}{2p_1} \quad (3.4)$$

Arra jutunk, hogy a kezdeti sebesség mindig valós, ha a kezdeti hely tisztán képzetes. Ez alapján úgy tűnik, hogy a \mathcal{PT} szimmetria sérülése nem lép fel, ha perturbatív vizsgáljuk a problémát.

A kvantummechanikai vizsgálat során a (3.1)-ben szereplő H -t két részre bontjuk. Az egyik tag az ismert $H_0 = p^2 - (ix)^\alpha$ ($\alpha \geq 2$) operátor, melynek sajátérték problémáját az előzőekben már megoldottuk: $H_0\psi_n = E_n\psi_n$, ahol a ψ_n sajátfüggvényekre is igaz a \mathcal{PT} szimmetria, vagyis $\psi_n(x) = \mathcal{PT}\psi_n(x) = \psi_n^*(-x)$. A másik tag a $V = -(ix)^\beta$ ($1 < \beta < 2$) potenciál, mely ugyancsak \mathcal{PT} szimmetrikus, de a vele számolt energia sajátértékek nem valósak. A kvantummechanikai időfüggetlen perturbációszámításhoz a V potenciál mátrixelemeit kell kiszámolni a ψ_n sajátállapotok között, ha a λ együttható kicsi.

$$V_{nm} = \langle \psi_n | V \psi_m \rangle = \int dx [\mathcal{PT}\psi_n(x)] [V(x)\psi_m(x)] \quad (3.5)$$

Belátható, hogy a V mátrix hermitikus $V_{nm} = V_{mn}^*$, tehát minden sajátértéke valós. Ez abból következik, hogy potenciál \mathcal{PT} szimmetrikus:

$$V_{mn}^* = \left[\int dx \psi_m^*(-x) V(x) \psi_n(x) \right]^* = \int dx \psi_m(-x) V^*(x) \psi_n^*(x) \quad (3.6)$$

Ha x helyére $-x$ -et helyettesítünk, és felcseréljük az integrálási határokat, akkor kihasználva, hogy V \mathcal{PT} szimmetrikus, belátható a hermitikusság:

$$V_{mn}^* = \int dx \psi_m(x) V^*(-x) \psi_n^*(-x) = \int dx \psi_n^*(-x) V(x) \psi_m(x) = V_{nm} \quad (3.7)$$

Abból, hogy a V mátrix hermitikus következik, hogy a perturbációszámítás minden rendjében valós energiakorrekciókat kapunk a H_0 valós energiaszintjeihez. Ez alapján azt mondhatjuk, hogy a \mathcal{PT} szimmetria sérülése nem lép fel perturbatív.

A klasszikus és a kvantumos perturbációszámítás során is arra jutottunk, hogy a \mathcal{PT} szimmetria nem sérül $\beta < 2$ esetén, ahogy azt várnánk. Tehát két tagból álló \mathcal{PT} szimmetrikus potenciál esetén nem perturbatív módszert kell kidolgoznunk a spontán szimmetriasértés vizsgálatára.

Numerikus számításokkal megmutatható, hogy adott α , β , λ esetén a kvantummechanikai energiaszintek komplexszé válnak egy kritikus energia fölött, illetve a klasszikus pályák \mathcal{PT} szimmetriája sérül bizonyos esetekben. A következőkben azt próbáljuk bemutatni, hogy a klasszikus pályák analízisével, hogyan lehetne a spontán szimmetriasértést vizsgálni, vagyis hogy hol válnak komplexszé az energiaszintek.

A kvantummechanikai energiaszintek változását a hozzáadott potenciál hatására a 3.1. táblázatban szemléltetjük adott $\alpha = 3$ és $\lambda = 0.1$ esetén néhány $\beta < 2$ érték

mellett.

n	$\lambda = 0$	$\lambda = 0.1$			
		$\beta = 1.2$	$\beta = 1.4$	$\beta = 1.6$	$\beta = 1.8$
0	1.156	1.110	1.122	1.134	1.146
1	4.109	4.023	4.040	4.060	4.085
2	7.562	7.452	7.469	7.493	7.526
3	11.31	11.19	11.20	11.23	11.27
4	15.29	15.15	15.16	15.19	15.23
5	19.45	19.29	19.31	19.34	19.39
6	23.77	23.59	23.61	23.64	23.69
7	28.22	28.03	28.04	28.08	28.13
8	32.79	32.59	32.60	32.64	32.70
9	37.47	37.32	37.31	37.34	37.40
10	43.25	$42.922 \pm 0.295i$	$42.916 \pm 0.001i$	$42.857 \pm 0.094i$	$42.708 \pm 0.701i$

3.1. táblázat. Az energiaszintek $\alpha = 3$ esetén eredetileg és hozzáadott β kitevőjű, λ együtthatójú potenciállal

A táblázat alapján azt mondhatjuk, hogy a kis kitevővel hozzáadott potenciál hatása az alacsonyabb energiaszintekre kicsi. Ettől függetlenül egy bizonyos szint fölött komplexsé válnak az energiaszintek, vagyis a sajátállapotai nem \mathcal{PT} szimmetrikusak. Ezt a szimmetriasértést nem lehet perturbatív módszerekkel megmutatni, mert a (3.7) formulánál megmutattuk, hogy a perturbációszámítás minden rendjében valóságos az energiakorrekciók. Az energiaszintek komplexsé válásának meghatározásánál a numerikus stabilitás sajnos nem egyértelmű, úgyhogy a pontos numerikus számítások elvégzése még további feladat.

Az egy tagból álló potenciál esetén a klasszikus pályák vizsgálatánál az energiafüggést kitranszformáltuk. Hasonlóan a kéttagú potenciál skálafüggését is meg lehet vizsgálni. Bevezetjük a következő skálázásokat:

$$x \rightarrow ax, t \rightarrow bt, \lambda \rightarrow c\lambda \text{ és } E \rightarrow dE \quad (3.8)$$

Ha kirójuk, hogy a (3.1) Hamilton-operátor minden tagjának ugyanúgy kell skáláznia, az a, b, c, d skálafaktorok között összefüggések írhatók fel:

$$b = a^{\frac{2-\alpha}{2}}, c = a^{\alpha-\beta}, d = a^\alpha \quad (3.9)$$

Ez alapján látható, hogy egy ismeretlen marad, tehát átskálázható a koordináta a -val, és (3.9)-nek megfelelően átskálázva a tagokat a Hamilton-operátor, és így a klasszikus pályák alakja nem változik. Tehát a klasszikus pályák adott α és β esetén a három (x_0, λ, E) paraméter helyett csak kettőtől függenek. Teljes analízis

elvégzéséhez ennek a két paraméternek a terében kell a klasszikus pályák tulajdonságait feltérképezni, de ezek már egy tagú potenciál esetén is érzékenyen függték a kezdeti feltétel megválasztásától.

Mivel a szimmetriasértés a magasabb kvantummechanikai energiaszinteknél következik be, azt várjuk, hogy szemiklasszikus analízissel meg lehet mutatni. Tehát a klasszikus pályák szimmetriájának vizsgálata fontos feladat, de ez sem feltétlenül egyszerű, mivel a szimmetriasértés kicsi, és nem minden esetben tudjuk megkülönböztetni a numerikus hibáktól.

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy a jövő feladata a szimmetriasértés vizsgálatára egy stabil nem perturbatív módszer kidolgozása, amire valószínűleg a szemiklasszikus analízis lehet egy jó megoldás.

Összefoglalás

Ebben a három rövid fejezetben megmutattuk, hogy a komplex $-(ix)^\alpha$ alakú potenciálok, milyen érdekes tulajdonságokat mutatnak klasszikus és kvantummechanikai szempontból is. A legérdekesebb, hogy az ezzel a potenciállal felírt Hamilton-operátor nem hermitikus, mégis valós és pozitív a spektruma $\alpha \geq 2$ esetén. Ez azzal magyarázható, hogy a Hamilton-operátor \mathcal{PT} szimmetrikus, vagyis invariáns a kombinált tér- és időtükrözés hatására, és ez a szimmetria sértetlen, vagyis a sajátfüggvényekre is igaz.

Megmutattuk a klasszikus és kvantumos vizsgálat során is, hogy $\alpha = 2$ -nél a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérül. Ezt a szimmetriasértést vizsgáltuk két \mathcal{PT} szimmetrikus potenciál összege esetén, és az derült ki, hogy perturbatív vizsgálatokkal nem mutatható meg a \mathcal{PT} szimmetria spontán sérülése. A szimmetriasértés vizsgálatára a klasszikus pályák részletes vizsgálatát találtuk használhatónak, de ez még további felderítést igényel.

Ez a dolgozat csak egy rövid betekintést nyújthat a \mathcal{PT} szimmetrikus kvantumelmélet tárgykörébe. Megmutattuk, hogy hogyan lehet a fizikai elméleteket a komplex világba kiterjeszteni ezzel az egyszerű fizikailag megalapozott feltevéssel, hogy a Hamilton-operátor legyen invariáns a kombinált tér- és időtükrözésre. A komplex világ óriási a valóshoz képest, így sok új elmélet érdekes tulajdonságai várnak felderítésre. Demonstráltuk, hogy sértetlen \mathcal{PT} szimmetria mellett a komplex kiterjesztéssel létrehozott elméletnek is létezik konzisztens valószínűségi értelmezése. Így a kvantumelmélet komplex kiterjesztése révén rengeteg új modellt alkothatunk, amelyek megoldhatják a mai elméleti fizika néhány problémáját.

Irodalomjegyzék

- [1] T. Hollowood: Solitons in affine Toda field theories, *Nucl. Phys. B* **384**: 523-540, 1992.
- [2] N. Hatano and D. R. Nelson: Localization Transitions in Non-Hermitian Quantum Mechanics, *Phys. Rev. Lett.* **77**: 570-573, 1996.
- [3] F. G. Scholtz, H. B. Geyer, and F. J. H. Hahne: Quasi-Hermitian operators in quantum mechanics and the variational principle, *Ann. Phys.* **213**: 74-101, 1992.
- [4] C. M. Bender and S. Boettcher: Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **80**: 5243-5246, 1998.
- [5] C. M. Bender, P. N. Meisinger, Q. Wang: All Hermitian Hamiltonians Have Parity, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**: 1029-1030, 2003.
- [6] Q. Wang, S. Chia, J. Zhang: PT Symmetry as a Generalization of Hermiticity, 2010 [arXiv: 1002.2676v1]
- [7] C. M. Bender: Making sense of non-Hermitian Hamiltonians, *Rept. Prog. Phys.* **70**: 947, 2007.
- [8] C. M. Bender, K. A. Milton, V. M. Savage: Solution of Schwinger-Dyson Equations for PT-Symmetric Quantum Field Theory, *Phys. Rev. D* **62**: 85001, 2000.
- [9] C. M. Bender, K. A. Milton: A Nonunitary Version of Massless Quantum Electrodynamics Possessing a Critical Point, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**: L87-L92, 1999.
- [10] C. M. Bender, J. Chen, D. W. Darg, K. A. Milton: Classical Trajectories for Complex Hamiltonians, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**: 4219-4238, 2006.
- [11] C. M. Bender, S. Boettcher, P. Meisinger: PT-Symmetric Quantum Mechanics, *J. Math. Phys.* **40**: 2201-2229, 1999.

- [12] C. M. Bender and S. A. Orszag: *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers*, *McGraw-Hill, New York*, 1978.
- [13] J. L. M. Quiroz González, D. Thompson: Getting started with Numerov's method, *Computers in Physics* **11**: 514-515, 1997.
- [14] C. M. Bender, A. Turbinger: Analytic continuation of eigenvalue problems, *Phys. Lett. A* **173**: 442-446, 1993.
- [15] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery: *Numerical Recipes*, Third Edition, *Cambridge University Press*, 2007.
- [16] C. M. Bender: Introduction to PT-Symmetric Quantum Theory, *Contemp. Phys.* **46**: 277-292, 2005.
- [17] C. M. Bender, J. Brod, A. Refig, M. E. Reuter: The C Operator in PT-Symmetric Quantum Theories, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**: 10139-10165, 2004.
- [18] C. M. Bender, D. C. Brody, J. Chen, H. F. Jones, K. A. Milton, M. C. Ogilvie: Equivalence of a complex PT-symmetric quartic Hamiltonian and a Hermitian quartic Hamiltonian with an anomaly, *Phys. Rev. D* **74**: 025016, 2006.
- [19] C. M. Bender, P. D. Mannheim: Exactly solvable PT-symmetric Hamiltonian having no Hermitian counterpart, *Physical Review D* **78**: 025022, 2008.

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm témavezetőmnek *Takács Gábornak* az érdekes témafelvetést és a rengeteg biztatást és segítséget, amit a dolgozat elkészítése során nyújtott. Valamint szeretném megköszönni *Patkós András*, *Veres Gábor* és a *Fizika Intézet* többi dolgozójának támogatását.