Alma Mater Studiorum \cdot Università di Bologna

Scuola di Scienze Dipartimento di Fisica e Astronomia Corso di Laurea in Fisica

Introduzione alle Hamiltoniane Quantistiche Non Hermitiane

Relatore: Prof. Pierbiagio Pieri Presentata da: Riccardo Bianconcini

Anno Accademico2022/2023

Abstract

La struttura della meccanica quantistica è stata delineata agli albori della teoria stessa e non è più stata modificata. In particolare, una delle assunzioni fondamentali riguarda gli operatori, che devono rispettare la condizione di Hermitianità. Di recente è stato mostrato tuttavia come una tale assunzione sia rimpiazzabile da una condizione di simmetria rispetto all'operatore di inversione spazio-temporale. Nel corso della tesi verranno esplorate le potenzialità e le criticità di questo nuovo approccio alla meccanica quantistica, nel tentativo di fornire una formulazione teorica completa e consistente di queste nuove teorie.

Indice

Abstract							
In	Indice Elenco delle Figure						
El							
In	trod	uzione	5				
1	Fon 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5	damenti Matematici per Hamiltoniane \mathcal{PT} - SimmetricheUn accenno alle funzioni polidrome e al concetto di continuazione analiticaSimmetrie e Operatori1.2.1Operatore di Parità \mathcal{P} 1.2.2Operatore di inversione temporale \mathcal{T} 1.2.3Operatore \mathcal{PT} e Hamiltoniana \mathcal{PT} -SimmetricaPunti EccezionaliPseudo-Hermitianità1.5.1Fenomeni di Stokes	7 9 10 11 12 13 14 15 18				
າ	For	nulazione Matriciale	າາ				
2	2.1 2.2 2.3 2.4	Matrici Non-HermitianeSecond Second Sec	22 25 25 25 25 26 27 27				
3	Har 3.1	niltoniane \mathcal{PT} - SimmetricheAutovalori di un'Hamiltoniana \mathcal{PT} - Simmetrica3.1.1Condizioni al contorno e Cunei di Stokes3.1.2Calcolo degli autovalori3.1.3Il Caso $\epsilon = 1$	30 30 31 35 38				

		$3.1.4 \\ 3.1.5$	Un approccio diverso: il potenziale quartico	$\begin{array}{c} 40\\ 43 \end{array}$		
4	Siste	emi qu	antistici \mathcal{PT} - Simmetrici	44		
	4.1	Teoria	Quantistica \mathcal{PT} -Simmetrica	46		
		4.1.1	Prodotto Interno $\mathcal{PT} \in \mathcal{CPT}$	47		
	4.2	Pseudo	-Hermitianità, Osservabili e il Problema dell'Unitarietà	49		
		4.2.1	Il Problema della Completezza e Relazione con $L^2(\mathbb{R})$ e l^2	49		
		4.2.2	Il Problema dell'Unitarietà	51		
		4.2.3	Osservabili	52		
		4.2.4	Differenze Tra Teorie Hermitiane e \mathcal{PT} -Simmetriche	54		
	4.3	Operat	fore ${\mathcal C}$	55		
		4.3.1	Calcolo Perturbativo di \mathcal{C}	57		
	4.4	Hamilt	oniana di un Sistema a Due Livelli	60		
	4.5	Applica	azioni delle Hamiltoniane \mathcal{PT} - simmetriche in meccanica quantistica	66		
		4.5.1	Ione intrappolato e classificazione sperimentale dei punti critici	67		
		4.5.2	Una proposta di esperimento	72		
Conclusioni						
Ringraziamenti						

Elenco delle figure

1.1	Approssimazione \mathcal{WKB} , regione classica, nonclassica e di confine	17
1.2	Linee di Stokes	19
1.3	Linee e antilinee di Stokes	21
3.1	Contorno di integrazione	32
3.2	Cunei di Stokes per diversi valori di ϵ	34
3.3	Livelli energetici numerici e \mathcal{WBK} , con confronto $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	36
3.4	Confronto autovalori	40
3.5	Cunei di Stokes per l'equazione associata all'Hamiltoniana (3.28)	41
4.1	Autovalori del sistema 2x2	61
4.2	Apparato Sperimentale	67
4.3	Dati	70
4.4	Floquet	72

Introduzione

La meccanica quantistica rappresenta uno dei pilastri della fisica moderna, grazie alla sua incredibile capacità predittiva e alla sua profonda originalità. Nonostante ne esistano numerose formulazioni, che differiscono per interpretazioni dei risultati e significato della teoria stessa, tutte quante forniscono le stesse previsioni e spiegano in maniera equivalente le medesime classi di fenomeni.

Tra i postulati della teoria quantistica, uno in particolare si distingue per via del suo contenuto matematico piuttosto che fisico; si tratta dell'Hermitianità degli osservabili della teoria, che riguarda quindi anche l'Hamiltoniana del sistema in considerazione. Questo postulato risponde a due esigenze di natura fisica: assicurare uno spettro energetico reale e garantire un'evoluzione temporale unitaria, in modo che la densità di probabilità sia conservata. L'Hermitianità è espressa dalla condizione:

$$H = H^{\dagger} \tag{1}$$

e nonostante sia di grande utilità per risolvere le problematiche sopracitate, non possiede alcun significato fisico.

Le Hamiltoniane non-Hermitiane sono state spesso impiegate nella descrizione di sistemi dissipativi, come il decadimento radioattivo. L'evoluzione temporale della funzione d'onda (nella meccanica quantistica ordinaria) è governata dall'equazione:

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}\psi(\vec{r}) \tag{2}$$

che comporta una probabilità di localizzazione della particella in un intorno di \vec{r} che rimane costante nel tempo. Tuttavia, per Hamiltoniane non-Hermitiane, il fattore esponenziale può essere espresso come:

$$e^{-i\frac{(\epsilon-\frac{i}{2}\Gamma)t}{\hbar}}\tag{3}$$

a cui è associata una probabilità:

$$|\psi(\vec{r},t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2 e^{-\frac{\Gamma t}{\hbar}}$$
(4)

dove Γ è interpretabile come un tasso di decadimento. Alla luce di queste proprietà risulta evidente che le teorie non-Hermitiane non possano essere considerate come *fondamentali*; una descrizione di un decadimento che implica la non conservazione delle probabilità non può che essere incompleta.

In un lavoro risalente al 2007, Carl Bender e i suoi collaboratori sono riusciti tuttavia a fornire una prima formulazione consistente della meccanica quantistica non basata sulla condizione di Hermitianità, dimostrando come quest'ultima non sia, in definitiva, necessaria [1]. Un'Hamiltoniana invariante rispetto alla parità spazio-temporale, sotto opportune condizioni, mostra uno spettro completamente reale e può pertanto sostituire la condizione di Hermitianità. La fisica delle interazioni fondamentali fa uso di condizioni di simmetria per costruire le teorie fisiche ormai da diversi decenni, pertanto questa nuova condizione si inserisce bene all'interno del quadro generale della fisica moderna. Gli operatori in questa nuova teoria non sono autoaggiunti rispetto al prodotto interno standard, ma lo sono rispetto ad un diverso prodotto interno, garantendo così anche l'unitarietà dell'operatore di evoluzione temporale.

Nell'arco di questa tesi l'attenzione verrà concentrata in gran parte su una classe di Hamiltoniane parametriche della forma:

$$H = p^2 + x^2 (ix)^{\epsilon}, \quad \epsilon \in \mathbb{R}$$
(5)

che può essere pensata come l'estensione complessa dell'oscillatore armonico. Alcuni valori di ϵ saranno esplorati nel dettaglio, ma il risultati ottenuti saranno applicabili a una buona parte delle (5).

In effetti, per poter ottenere uno spettro reale, è necessario estendere la teoria quantistica al dominio dei complessi, che fornisce alle condizioni al contorno un ruolo ancora più determinante. Inoltre, quando la variabile spaziale diventa complessa, capire ciò che l'operatore posizione \hat{x} rappresenta non è banale e ci costringe alla definizione di un'intera nuova classe di operatori.

Questa tesi è organizzata come segue: nel Capitolo 1 verranno forniti i metodi matematici necessari per poter comprendere come trattare le Hamiltoniane non-Hermitiane, in una formulazione continua della teoria. Nel Capitolo 2 verrà fornita una formulazione matriciale, quindi discreta, degli stessi concetti presentati nell'arco del primo capitolo. Questo perché, come apparirà più chiaro in seguito, il passaggio dal caso infinito a quello finito dimensionale, non è banale. Il Capitolo 3 sarà totalmente dedicato alla risoluzione del problema agli autovalori dell'equazione di Schrödinger associata ad Hamiltoniane \mathcal{PT} -Simmetriche. Per farlo, verranno studiate le condizioni al contorno e i principali metodi risolutivi di equazioni differenziali nel campo dei complessi. Nel Capitolo 4, verrà infine esposta una formulazione completa e coerente della meccanica quantistica \mathcal{PT} simmetrica, con particolare enfasi su come risolvere tutte le problematiche che sorgono dalla rimozione della condizione di Hermitianità.

Capitolo 1

Fondamenti Matematici per Hamiltoniane \mathcal{PT} - Simmetriche

1.1 Un accenno alle funzioni polidrome e al concetto di continuazione analitica

La maggior parte delle teorie fisiche analizzate all'interno di questa tesi sono ottenute estendendo il dominio di validità delle stesse dal campo dei reali a quello dei complessi. Per farlo, è necessario utilizzare una tecnica dell'analisi complessa nota come **continuazione analitica**, che permette di estendere il dominio di definizione di una data funzione. In maniera più rigorosa, è possibile dare una definizione come segue:

Definizione 1.1.1. Sia f una funzione analitica definita in un sottoinsieme non vuoto U del piano complesso \mathbb{C} . Se V è sottoinsieme aperto di \mathbb{C} tale che $U \subseteq V$ e F è una funzione analitica definita su V tale che

$$F(z) = f(z) \quad \forall z \in U \tag{1.1}$$

allora F(z) è definita continuazione analitica di f(z) ed equivale a dire che la restrizione di F al dominio U non è altro che la funzione di partenza f. Inoltre, se la continuazione analitica esiste, è unica.

L'unicità è una proprietà importantissima e abbastanza strabiliante, in quanto stabilisce che è sufficiente conoscere il valore di una funzione in un dominio ristretto del piano complesso per conoscerne il valore in qualsiasi altro punto. Può essere dimostrata grazie al seguente teorema:

Teorema 1.1.1. Siano f, g due funzioni analitiche all'interno di una regione connessa A. Se f = g in un sottoinsieme aperto di A allora f = g in tutto A.

La validità di questo teorema risiede nel fatto che gli zeri di una funzione analitica sono isolati (fa chiaramente eccezione la funzione identicamente nulla). Definendo h = f - g, questa è nulla in tutto il sottoinsieme di A e i suoi zeri non sono isolati, pertanto h è nulla in tutto A e f = g in tutto quel dominio.

L'estensione del dominio di una funzione al piano complesso non è tuttavia privo di rischi, in quanto possono insorgere complicazioni di natura topologica, come la presenza di singolarità o l'esistenza di più valori in corrispondenza di una singola funzione. In effetti, definire una funzione su un insieme $D \subseteq \mathbb{C}$ equivale a dare una legge che associa ad ogni elemento $z \in D$ (dove D prende il nome di dominio della funzione) un unico numero complesso w tale che:

$$f: D \to \mathbb{C}, \quad w = f(z)$$
 (1.2)

Secondo tale definizione una funzione risulta univoca o monodroma, esistono tuttavia funzioni a molti valori, denominate **polidrome**, le cui peculiarità sono velocemente mostrate tramite un esempio. Supponendo di voler calcolare la radice quadrata di un numero complesso z:

$$w^2 = z \tag{1.3}$$

ponendo $z = |z|e^{i\theta}, w = |w|e^{i\phi}$ otteniamo:

$$|w|^{2}e^{2i\phi} = |z|e^{i\theta}$$
$$|w| = \sqrt{|z|}, \quad \phi = \frac{\theta}{2} + k\pi$$
$$\sqrt{z} = \sqrt{|z|}e^{i(\frac{\theta}{2} + k\pi)} \quad k \in \mathbb{C}$$
(1.4)

Non esiste pertanto una soluzione unica del problema, e risulta definita una funzione a più valori in corrispondenza di uno stesso punto z (in questo specifico caso ci sono due valori possibili di w).

Se esistono dei punti del piano complesso per i quali, dopo aver fatto un giro completo attorno ad essi, una funzione f(z) non ritorna al valore iniziale, questi vengono detti **punti di diramazione** della funzione. Per la radice quadrata l'unico punto di diramazione è situato in z = 0. Tramite quella che si chiama una **linea di taglio**, ossia una curva continua congiungente i punti di diramazione, è possibile ridefinire il dominio della funzione eliminando tutti i punti attraversati dal taglio stesso ed ottenere una funzione monodroma. Nel caso della radice quadrata, questo può essere scelto sul semiasse reale positivo, definendo due funzioni:

$$z = \rho e^{i\theta} \quad 0 < \theta < 2\pi,$$

$$f_1(z) = \sqrt{\rho} e^i \frac{\theta}{2} = f_1(\rho, \theta)$$

$$f_2(z) = -\sqrt{\rho} e^i \frac{\theta}{2} = f_2(\rho, \theta).$$

(1.5)

Ogni funzione risulta discontinua lungo la linea di taglio, tuttavia:

$$\lim_{\theta \to 0^+} f_1(\rho, \theta) = \lim_{\theta \to 2\pi^-} f_2(\rho, \theta),$$

$$\lim_{\theta \to 2\pi^-} f_1(\rho, \theta) = \lim_{\theta \to 0^+} f_2(\rho, \theta)$$
(1.6)

Ne segue la possibilità di pensare il piano complesso come sovrapposizione di più piani, ognuno dei quali contenente un'unica soluzione della funzione polidroma, le quali vengono indicizzate tramite n (nel caso della radice n = 2). I diversi piani sono collegati lungo il taglio, in modo che il bordo superiore del taglio sul piano n è collegato al bordo inferiore del taglio sul piano n+1. Attraversare la linea di taglio equivale al passaggio da un piano all'altro, con i punti di diramazione che sono invece comuni a tutti i piani. La costruzione geometrica così ottenuta si chiama **superficie di Riemann** e ogni piano è detto **falda di Riemann**, grazie alla quale è possibile passare da funzioni a molti valori definite su insieme semplici a funzioni ad un solo valore definite su insiemi più complessi. Data la discontinuità della funziona polidroma lungo la linea di taglio, quando si dovranno definire le condizioni al contorno per l'equazione di Schrödinger e di conseguenza il percorso di integrazione, bisognerà assicurarsi che quest'ultimo non attraversi il taglio, dettaglio che risulterà di fondamentale importanza per la valutazione del dominio di validità dell'analisi WKB, studiata in un paragrafo successivo.

1.2 Simmetrie e Operatori

I fenomeni fisici possono dipendere in maniera assai complessa da diverse grandezze di natura cinematica, spaziale o intrinseca. Una tecnica molto efficace per definire le proprietà generali di un sistema consiste nello stabilire il loro comportamento rispetto ad alcune trasformazioni applicate alle grandezze da cui dipende. Di particolare interesse vi sono le **trasformazioni che lasciano invariate in forma le equazioni del moto**, che prendono il nome di *trasformazioni di simmetria* e che trovano nella teoria dei gruppi la loro formulazione matematica. Quando queste dipendono in modo continuo da uno o più parametri, si parla di **trasformazioni continue** e vengono descritte da gruppi di Lie, in caso contrario si parla di **trasformazioni discrete** e sono descritte tramite l'utilizzo di gruppi discreti. Le prime contengono la classe delle trasformazioni **spazio-temporali continue**, composta da traslazioni al sistema di un certo intervallo spaziale, temporale, la rotazione di un certo angolo e il cambiamento di velocità delle componenti del sistema. Di maggiore interesse ai fini della tesi vi sono queste ultime, che includono le trasformazioni **spazio-temporali discrete** ossia le trasformazioni di parità spaziale e temporale, che verranno analizzate nel dettaglio di seguito.

Prima di procedere, tuttavia, va sottolineato che le proprietà di simmetria di un sistema fisico sono tradotte in altrettante leggi di conservazione dal fondamentale teorema di Noether; in particolare si può mostrare che l'invarianza dell'azione (lagrangiana) rispetto ad una trasformazione è sempre accompagnata da una legge di conservazione. Tra le più importanti, vi sono le seguenti corrispondenze: simmetria per traslazioni spaziali \rightarrow conservazione quantità di moto, simmetria per traslazioni temporali \rightarrow conservazione dell'energia, simmetria per rotazioni \rightarrow conservazione momento angolare, simmetria per trasformazioni di parità (temporale) \rightarrow conservazione parità spaziale (temporale).

1.2.1 Operatore di Parità \mathcal{P}

La parità è una trasformazione a carico del sistema di riferimento che inverte l'orientazione degli assi e implementa dunque il concetto di inversione spaziale. Viene descritta tramite l'operatore \mathcal{P} e agisce sulla funzione d'onda nel modo seguente:

$$\mathcal{P}\psi(\vec{x}) = \psi'(\vec{x}) = \psi(-\vec{x}) \tag{1.7}$$

Chiaramente risulta essere l'inverso di sè stesso ed è elementare dimostrare che sia anche Hermitiano, da cui derivano le seguenti proprietà:

$$\mathcal{P}^2 = \hat{1}$$

$$\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P} = \mathcal{P}^{\dagger}$$
(1.8)

dove Î rappresenta l'operatore identità. In particolare, la prima equazione della (1.8) implica che gli unici autovalori possibili siano ± 1 e, pertanto, gli autovettori vengono classificati in due modi: **vettori veri** (corrispondenti all'autovalore -1) e **pseudovettori** (corrispondenti all'autovalore +1). Gli operatori posizione e quantità di moto sono gli esempi principali di vettori veri, ossia "dispari rispetto alla parità" e cambiano segno in seguito all'inversione delle coordinate:

$$\hat{x'} = \mathcal{P}^{\dagger} \hat{x} \mathcal{P} = \mathcal{P} \hat{x} \mathcal{P} = -\hat{x}, \qquad (1.9)$$

$$\hat{p'} = \mathcal{P}^{\dagger} \hat{p} \mathcal{P} = \mathcal{P} \hat{p} \mathcal{P} = -\hat{p} \tag{1.10}$$

mentre il momento della quantità di moto è un esempio di pseudovettore, infatti:

$$\hat{L}' = \mathcal{P}^{\dagger}\hat{L}\mathcal{P} = \mathcal{P}[\hat{x} \times \hat{p}]\mathcal{P} = (-\hat{x}) \times (-\hat{p}) = \hat{L}$$
(1.11)

Un fatto fondamentale, che giustifica questa distinzione, è che in nessuna equazione che governa l'evoluzione di un sistema dinamico compaiono uguaglianze tra quantità vere e quantità pseudo. Ciò comporta che i processi nel sistema di riferimento originale sono del tutto indistinguibili da quelli nel sistema di riferimento \mathcal{P} -trasformato e che le leggi meccaniche siano in generale invarianti per trasformazioni di parità (lo stesso si può dire delle leggi dell'elettromagnetismo).

L'operatore \mathcal{P} possiede inoltre l'importante proprietà di lasciare invariata la relazione di commutazione principale della meccanica quantistica:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar\hat{1} \tag{1.12}$$

Consideriamo l'Hamiltoniana H del tipo (5) sotto l'effetto della trasformazione di parità spaziale:

$$\mathcal{P}H\mathcal{P} = \mathcal{P}[p^{2} + x^{2}(ix)^{\epsilon}]\mathcal{P}$$

$$= (\mathcal{P}p\mathcal{P})(\mathcal{P}p\mathcal{P}) + (\mathcal{P}x\mathcal{P})(\mathcal{P}x\mathcal{P})(\mathcal{P}(ix)^{\epsilon}\mathcal{P})$$

$$= (-p)(-p) + (-x)(-x)(-ix)^{\epsilon}$$

$$= p^{2} + x^{2}(-ix)^{\epsilon} = H^{\dagger}$$
(1.13)

risultato che utilizzeremo spesso nel proseguio della tesi.

1.2.2 Operatore di inversione temporale \mathcal{T}

In meccanica classica, l'inversione temporale (indicata con il simbolo \mathcal{T}) è una riflessione definita come $\mathcal{T}x(t) = x(-t)$. La sua azione su un sistema fisico è più propriamente descritta come *inversione del moto*; supponendo infatti che una particella si muova in un qualche potenziale, invertendo il segno della quantità di moto la particella ripercorre la stessa traiettoria ma in verso opposto, ottenendo un effetto simile a quello dell'inversione temporale. Dalla definizione stessa si possono ottenere le trasformazioni di velocità e accelerazione sotto l'effetto di \mathcal{T} :

$$\mathcal{T}x'(t) = \frac{dx}{dt}(-t) = -\frac{dx}{d(-t)}(-t) = -x'(-t)$$

$$\mathcal{T}x''(t) = \mathcal{T}\frac{dx'}{dt}(t) = -\frac{dx'}{dt}(-t) = \frac{dx}{d(-t)}(-t) = x''(-t)$$

(1.14)

dunque, posizione e accelerazione sono invarianti rispetto a questa trasformazione, mentre la velocità cambia segno.

L'operatore \mathcal{T} è inoltre antiunitario, proprietà che consente di riscriverlo come prodotto di due termini $\mathcal{T} = \mathcal{K}\mathcal{U}$, con \mathcal{U} operatore unitario e \mathcal{K} che coniuga la quantità a cui è collegato. Risulta allora

$$\mathcal{T}i\mathcal{T} = -i \tag{1.15}$$

che sottolinea il carattere antilineare di \mathcal{T} . Gli effetti di \mathcal{T} su $\hat{x} \in \hat{p}$ sono dunque i seguenti:

$$\hat{x}' = \mathcal{T}^{\dagger} \hat{x} \mathcal{T} = \mathcal{T} \hat{x} \mathcal{T} = \hat{x}, \qquad (1.16)$$

$$\hat{p'} = \mathcal{T}^{\dagger} \hat{p} \mathcal{T} = P \hat{p} P = -\hat{p} \tag{1.17}$$

e, sempre per via della (1.15), la relazione di commutazione (1.12) viene invertita di segno sotto l'azione di questo operatore:

$$\mathcal{T}[\hat{x},\hat{p}]\mathcal{T} = -i\hbar\hat{1} \tag{1.18}$$

Data la sua natura di operatore di riflessione, analogamente a quanto detto per l'operatore \mathcal{P} , vale $\mathcal{T}^2 = \hat{1}$. Consideriamo l'Hamiltoniana H del tipo (5) sotto l'effetto della trasformazione di parità temporale:

$$\mathcal{T}H\mathcal{T} = \mathcal{T}[p^2 + x^2(ix)^{\epsilon}]\mathcal{T}$$

= $(\mathcal{T}p\mathcal{T})(\mathcal{T}p\mathcal{T}) + (\mathcal{T}x\mathcal{T})(\mathcal{T}x\mathcal{T})(\mathcal{T}(ix)^{\epsilon}\mathcal{T})$
= $(-p)(-p) + (x)(x)(-ix)^{\epsilon}$
= $p^2 + x^2(-ix)^{\epsilon} = H^{\dagger}$ (1.19)

1.2.3 Operatore \mathcal{PT} e Hamiltoniana \mathcal{PT} -Simmetrica

Ai fini di questa tesi è di fondamentale rilevanza la relazione di commutazione tra \mathcal{P} e \mathcal{T} , che verrà studiata tramite l'utilizzo di una "funzione pilota" $f(\hat{x}, \hat{p})$, come spesso è conveniente fare con gli operatori:

$$[\mathcal{P}, \mathcal{T}]f(\hat{x}, \hat{p}) = (\mathcal{P}\mathcal{T} - \mathcal{T}\mathcal{P})f(\hat{x}, \hat{p})$$

= $\mathcal{P}(\mathcal{T}f(\hat{x}, \hat{p})) - \mathcal{T}(\mathcal{P}f(\hat{x}, \hat{p}))$
= $\mathcal{P}f(\hat{x}, -\hat{p}) - \mathcal{T}f(-\hat{x}, -\hat{p})$
= $f(-\hat{x}, \hat{p}) - f(-\hat{x}, \hat{p}) = 0$ (1.20)

che dimostra che gli operatori commutano. Possiamo a questo punto definire, in termini degli operatori $\mathcal{P} \in \mathcal{T}$, un'Hamiltoniana \mathcal{PT} -simmetrica come un'Hamiltoniana invariante per inversione spazio-temporale.

Definizione 1.2.1. Se

$$H = H^{\mathcal{PT}} \tag{1.21}$$

dove

$$H^{\mathcal{PT}} \equiv (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}) \tag{1.22}$$

è chiamata Halmitoniana \mathcal{PT} riflessa, allora H si definisce \mathcal{PT} -simmetrica

Supponiamo di essere dunque in presenza di un'Hamiltoniana \mathcal{PT} simmetrica

$$H = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})$$
$$(\mathcal{PT})H = H(\mathcal{PT})$$
$$(\mathcal{PT})H - H(\mathcal{PT}) = 0$$
$$[\mathcal{PT}, H] = 0$$
(1.23)

dove si è fatto uso della proprietà $\mathcal{PT} = \mathcal{PT}^{-1}$. Nonostante la relazione di commutazione, la simmetria di parità spazio-temporale è sostanzialmente diversa da quella di sola parità spaziale, per via della non linearità dell'operatore \mathcal{PT} stesso, che rende sbagliato affermare in generale che H condivida con esso una base di autostati. Supponiamo infatti che ψ sia contemporaneamente autostato di $H \in \mathcal{PT}$, possiamo quindi scrivere

$$\mathcal{PT}\psi = \lambda\psi \tag{1.24}$$

moltiplicando entrambi i termini per PT e sfruttando la proprietà $(PT)^2 = \hat{1}$ otteniamo

$$\psi = (\mathcal{PT})(\lambda\psi) = (\mathcal{PT}\lambda)(\mathcal{PT}\psi)$$
(1.25)

e sfruttando la (1.15) e la (1.24)

$$\psi = \lambda^* \lambda \psi = |\lambda|^2 \psi \tag{1.26}$$

pertanto $|\lambda|^2 = 1$, il che ci permette di scrivere $\lambda = e^{i\theta}$, che risulta essere un semplice fattore di fase e parte del **gruppo circolare**, ossia il gruppo moltiplicativo di numeri complessi di modulo 1. Ricordando che ψ è autostato di H

$$H\psi = E\psi \tag{1.27}$$

moltiplicando nuovamente per (\mathcal{PT}) e procedendo in maniera analoga a prima, si ottiene

$$E\lambda\psi = E^*\lambda\psi \tag{1.28}$$

Essendo λ non nullo, ne consegue necessariamente che $E = E^*$, pertanto che gli autovalori dell'energia sono tutti reali. Come apparirà più chiaro in seguito, questa conclusione è falsa, in quanto la semplice simmetria \mathcal{PT} non basta a garantire autovalori reali dell'energia, a differenza della condizione di Hermitianità. Questo significa che nonostante l'Hamiltoniana possieda questa simmetria, non è detto che anche le soluzioni dell'equazione di Schrödinger la possiedano. Tuttavia, come dimostrato in [2], se ci si restringe all'insieme degli autovalori reali dell'Hamiltoniana, allora la conclusione ottenuta nell'eq. (1.28) è corretta. Se $H \in \mathcal{PT}$ condividono tutti gli autostati all'interno di un dominio ristretto, allora ci si trova in una regione di *simmetria inviolata*; in caso contrario, la simmetria incontra una *rottura*. I punti in cui avviene la transizione tra le due regioni vengono chiamati *punti eccezionali* e sono trattati nel paragrafo seguente.

1.3 Punti Eccezionali

Quando un sistema fisico è descritto in termini di un'Hamiltoniana $H = H_0 + \lambda H_1$, con λ parametro d'intensità, lo spettro $E_n(\lambda)$ e le autofunzioni $|\psi_n(\lambda)\rangle$ sono in generale funzioni analitiche di λ [3]. Quando il dominio di definizione del parametro λ viene esteso al piano complesso e due livelli energetici separati sono collegati da un punto di diramazione della radice quadrata, gli autovalori si fondono, originando un fenomeno ben diverso da quella della semplice degenerazione. Mentre ad un autovalore doppiamente degenere sono associati due autostati differenti che generano un autospazio di dimensione 2, in presenza di questi specifici punti di diramazione anche le autofunzioni si fondono, formando un autospazio monodimensionale. Di conseguenza, le note proprietà associate alla degenerazione dello spettro di operatori Hermitiani non sono più valide. Queste particolari singolarità sono note come *Punti Eccezionali (EP)*, termine coniato da Kato [4]. Se gli operatori H_0 e H_1 sono Hermitiani, i punti eccezionali si verificano solo per valori complessi di λ e l'Hamiltoniana Hermitiana viene "deformata" in maniera continua in una Non-Hermitiana. Se uno dei due operatori è invece Non-Hermitiano, è possibile riscontrare la presenza di EP anche per valori reali di λ . I sistemi ottici sono l'ambito in cui gli effetti degli *EPs* sono stati riscontrati più frequentemente, ma insorgono in maniera naturale in numerosi contesti, come studiato al termine del quarto capitolo.

1.4 Pseudo-Hermitianità

Le proprietà dell'operatore \mathcal{PT} dedotte sino ad ora si sono basate su semplici considerazioni di simmetria. In realtà, il concetto di simmetria \mathcal{PT} appartiene ad un più ampio quadro matematico noto come **Pseudo-Hermitianità**.

Definizione 1.4.1. Sia $A : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ operatore lineare, con \mathcal{H} spazio di Hilbert separabile. Se $\mathcal{D}(A)$ è un dominio denso in \mathcal{H} ed esiste un operatore lineare Hermitiano definito ovunque η tale che:

$$A^{\dagger} = \eta A \eta^{-1} \tag{1.29}$$

allora A è detto pseudo-hermitiano.

Uno spazio di Hilbert è separabile se ha una base ortonormale numerabile e ogni spazio di Hilbert separabile è isomorfo a L^2 , lo spazio delle funzioni a quadrato integrabile. La condizione (1.29) si riduce all'Hermitianità se $\eta = \hat{1}$. Richiamando le (1.13) opportunamente riscritta:

$$H = \mathcal{P}H^{\dagger}\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}H^{\dagger}\mathcal{P} \tag{1.30}$$

possiamo notare che, essendo \mathcal{P} Hermitiano ed invertibile, l'Hamiltoniana risulta \mathcal{P} -Pseudo-Hermitiana. Combinando questa equazione con la (1.19):

$$H = \mathcal{P}H^{\dagger}\mathcal{P}$$

= $\mathcal{P}(\mathcal{T}H\mathcal{T})\mathcal{P}$
= $(\mathcal{P}\mathcal{T})H(\mathcal{T}\mathcal{P})$
= $(\mathcal{P}\mathcal{T})H(\mathcal{P}\mathcal{T})$ (1.31)

da cui riotteniamo la definizione di Hamiltoniana \mathcal{PT} simmetrica, dimostrando così che il concetto di simmetria \mathcal{PT} è un particolare caso di Pseudo-Hermitianità. Ne consegue che studiare le proprietà di un'Hamiltoniana Pseudo-Hermitiana fornisce direttamente strumenti utilizzabili per costruire teorie \mathcal{PT} simmetriche.

In particolare, vale la pena anticipare alcuni teoremi, come fatto in [5], che risulteranno di fondamentale importanza nel corso del quarto capitolo, dove si cercherà di fornire una formulazione consistenze della meccanica quantistica \mathcal{PT} simmetrica.

Teorema 1.4.1. Il prodotto interno indefinito Hermitiano $\langle | \rangle_{\eta}$ definito da η :

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_\eta \equiv \langle \psi_1 | \eta | \psi_2 \rangle, \quad \forall | \psi_1 \rangle, | \psi_2 \rangle \in \mathcal{H}$$
 (1.32)

dove \mathcal{H} è un generico spazio di Hilbert, è invariante rispetto alla traslazione temporale generata dall'Hamiltoniana H se e solo H è η -Pseudo-Hermitiana.

Dimostrazione. Per prima cosa sottolineiamo che η -pseudo-Hermitianità è equivalente alla condizione:

$$H^{\dagger} = \eta H \eta^{-1} \tag{1.33}$$

Utilizzando l'equazione di Schrödinger e la sua aggiunta:

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

$$-i\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|H^{\dagger}$$

(1.34)

e ricordando la (1.32) si ottiene, per due generici vettori di stato $|\psi(t)_1\rangle \in |\psi(t)_2\rangle$:

$$i\frac{d}{dt}\langle\psi_1|\psi_2\rangle_{\eta} = \langle\psi_1(t)|(\eta H - H^{\dagger}\eta)|\psi_2\rangle = 0.$$
(1.35)

Pertanto $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle_{\eta}$ è costante se e solo se *H* è η -pseudo-Hermitiana.

Concludiamo enunciando un'ultima importante proprietà di un'Hamiltoniana η -Pseudo-Hermitiana (una trattazione completa ed esaustiva di questi argomenti può essere trovata nell'articolo sopracitato [5]). Utilizzando l'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniana $H|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle$ e la sua aggiunta, è facile mostrare che due qualsiasi autovettori $|E_i\rangle$ e $|E_j\rangle$ di H soddisfano:

$$(E_i^* - E_j)\langle E_i | E_j \rangle_{\eta} = 0.$$
(1.36)

da cui deriva direttamente il seguente teorema:

Teorema 1.4.2. Due qualsiasi autovettori dell'Hamiltoniana η -pseudo-Hermitiana sono η -ortogonali a meno che i rispettivi autovalori sono complessi coniugati:

$$E_i \neq E_j^* \quad implica \quad \langle E_i | E_j \rangle_\eta = 0.$$
 (1.37)

1.5 Approssimazione \mathcal{WKB}

Il metodo \mathcal{WKB} (Wentzel, Kramers, Brillouin) è una tecnica utilizzata per ottenere soluzioni approssimate ad equazioni differenziali, in cui la derivata di grado più alto è moltiplicata per un parametro piccolo. Viene ampiamente utilizzato in fisica, in quanto la derivata di secondo ordine dell'equazione di Schrödinger è moltiplicata per \hbar^2 . L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo può essere scritta come:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi\tag{1.38}$$

dove

$$p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$
 (1.39)

rappresenta il modulo della quantità di moto di una particella con energia totale E ed energia potenziale V(x). In generale, la funzione d'onda ψ può essere espressa in termini della sua *ampiezza*, A(x) e della sua *fase*, $\phi(x)$, entrambe funzioni reali

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} \tag{1.40}$$

Utilizzando la convenzione $f' = \frac{df}{dx}$, possiamo riscrivere l'equazione (1.38) nella maniera seguente

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A$$
(1.41)

Quest'equazione può essere divisa in due equazioni reali, risolvendo separatamente per la parte reale e per la parte immaginaria:

$$A'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \quad e \quad A'' = A[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}].$$
 (1.42)

La seconda si risolve facilmente:

$$A^2 \phi' = C^2 \quad \to \quad A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}}$$
 (1.43)

dove C è una costante reale. La prima equazione non possiede invece una soluzione generale, ed è qui che interviene l'approssimazione: assumiamo che $\frac{A''}{A}$ vari più lentamente di $(\phi')^2 e \frac{p^2}{\hbar^2}$. Da questo otteniamo che:

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad \to \quad \frac{d\phi}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar}$$
 (1.44)

da cui:

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) \, dx \tag{1.45}$$

A questo punto otteniamo facilmente un'espressione per ψ in funzione della quantità di moto (assumendo x = 0 come punto di inversione del moto)

$$\psi(x) \approx \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[Be^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') \, dx'} + Ce^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') \, dx'} \right] & x < 0\\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} De^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^x |p(x')| \, dx'} & x > 0 \end{cases}$$
(1.46)

È importante sottolineare che la probabilità di trovare una particella in un determinato punto diminuisce all'aumentare della sua quantità di moto, come ci si aspetta.



(a) Delineazione della regione classica. Classicamente, la particella è confinata nella regione dove $E \ge V(x)$, da cui il nome. Figura riprodotta da [6]



(b) Approssimazione del potenziale con un "potenziale linearizzato". Figura riprodotta da [6]

Figura 1.1: Approssimazione \mathcal{WKB} , regione classica, nonclassica e di confine

L'approssimazione \mathcal{WKB} risulta inoltre non valida in prossimità dei punti di inversione del moto, in quanto $p(x) \to 0 \in \psi \to \infty$. Nell'equazione di Schrödinger si verificano quando V(x) = E, che rappresenta il limite tra la "regione classica" (V(x) < E, ovvero p(x) > 0) (Fig. 1.1a) e la "regione non-classica" (V(x) > E, ovvero p(x) < 0). Questo tipo di problemi vengono studiati approssimando il potenziale con una linea retta $V(x) \approx E + V'(0)x$, che riduce l'equazione di Schrödinger all'**equazione di Airy** (Fig. 1.1b)

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}z^2} = z\psi(z) \tag{1.47}$$

le cui soluzioni sono le **funzioni di Airy**.

Vi sono tuttavia alcune importanti considerazioni da fare riguardo la correttezza delle

soluzioni ottenute tramite il metodo \mathcal{WKB} , in particolare riguardo al dominio di validità delle stesse, che deve essere analizzato all'interno del piano complesso. Estendendo i valori di x all'intero piano complesso ($x \in \mathbb{R} \to z \in \mathbb{C}$), la funzione d'onda può essere espressa nella seguente forma compatta:

$$\psi(z) \approx \frac{1}{\sqrt{p(z)}} \left[c_1 e^{\frac{i}{\hbar} \int_a^z p(z') \, dz'} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^z p(z') \, dz'} \right] \tag{1.48}$$

dove i valori di p(z) sono puramente immaginari ogni qualvolta V(z) > E. Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger devono essere a valore singolo e ben definite all'interno del dominio, prive di singolarità di p(z), mentre le soluzioni approssimate trovate dipendono dall'inverso di $\sqrt{p(z)}$, funzione polidroma. Questo implica chiaramente che le soluzioni siano valide solo all'interno di un dominio ristretto del piano complesso, la cui analisi viene eseguita nel seguente paragrafo.

1.5.1 Fenomeni di Stokes

I **Fenomeni di Stokes** sono un potente mezzo per eliminare la discrepanza sottolineata al termine del paragrafo precedente, le cui fondamenta verranno illustrate tramite un semplice esempio. Al fine di semplificare la notazione nelle soluzioni, possiamo scrivere:

$$\psi_{+} = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{a}^{z} p(z') \, dz'}$$

$$\psi_{-} = \frac{1}{\sqrt{p(z)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{a}^{z} p(z') \, dz'}$$
(1.49)

dove *a* è un punto nel piano complesso e il percorso di integrazione non attraversa linee di taglio. Le funzioni ψ_+ e ψ_- sono anch'esse funzioni polidrome e, muovendosi su un percorso chiuso intorno ai punti di diramazione di $\sqrt{p(z)}$, queste avranno un valore diverso dopo aver completato un giro.

Per l'equazione differenziale di secondo grado $\psi''(z) = \eta \psi(z)$ la soluzione ottenuta tramite l'approssimazione \mathcal{WKB} è

$$\psi(z) \approx c_1 e^{\eta z} + c_2 e^{-\eta z} = c_1 \psi_+ + c_2 \psi_- \tag{1.50}$$

dove z è una variabile complessa e, in questo caso, la soluzione coincide con quella esatta. Per $|z| \rightarrow \infty$ ci sono tre diversi tipi di casi che si possono distinguere:

- 1. se $Re(z) > 0 : \psi(z) \sim e^{\eta z}$;
- 2. se $Re(z) < 0 : \psi(z) \sim e^{-\eta z}$;
- 3. se Re(z) = 0: nessuna delle precedenti approssimazioni è valida e $\psi(z)$ mantiene la forma espressa nell'equazione (1.50);

Risulta evidente che per $-\frac{\pi}{2} < arg(z) < \frac{\pi}{2}$ (maniera equivalente per esprimere Re(z) > 0), il termine ψ_+ risulta dominante rispetto al termine ψ_- e pertanto vengono indicati come ψ_+^d e ψ_-^s (d = soluzione con carattere dominante, s = carattere sottodominante). Spostandosi nell'altra metà del piano complesso, ossia per $\frac{\pi}{2} < arg(z) < \frac{3}{2}\pi$, la situazione risulta capovolta rispetto a quella precedente, difatti il termine dominante risulta ψ_- e quello sottodominante è ψ_+ e all'interno di questa regione vengono indicati come ψ_-^d e ψ_+^s . In questo specifico caso, il ruolo di parte dominante viene invertito tra le due parti superando la retta Re(z) = 0 (l'asse immaginario) ma in generale le linee di confine possono essere calcolate risolvendo

$$\operatorname{Re}(\int_{a}^{z} p(z') \, dz') = 0 \tag{1.51}$$

Queste linee prendono il nome di *linee di Stokes* e attraversandole le proprietà di dominanza e sottodominanza delle soluzioni \mathcal{WKB} si invertono. Lungo queste linee, la soluzione generale risulta una combinazione lineare dei due termini, mentre man mano che ci si allontana da esse, il termine sottodominante può essere trascurato con precisione sempre maggiore.



Figura 1.2: Le semirette A, B, C rappresentano le linee di Stokes dell'equazione di Airy nel piano complesso. Lungo suddette linee, la soluzione dell'equazione differenziale ha carattere oscillatorio ed è esprimibile come combinazione lineare della parte dominante e quella sottodominante. La linea ondulata D rappresenta la linea di taglio dell'approssimazione WKB, parte dall'origine e può essere scelta con angolo arbitrario. I numeri rappresentano le diverse regioni separate dalle linee.

Chiarito il ruolo delle linee di Stokes, proseguiamo nel ragionamento studiando l'equazione (1.47), la cui soluzione può essere scritte come:

$$\psi(z) = c_1 A i(z) + c_2 B i(z) \tag{1.52}$$

dove Ai(z) e Bi(z) sono le funzioni di Airy, come accennato in precedenza. Calcolando le soluzioni dell'equazione di Airy con il metodo \mathcal{WKB} (equazione 1.48) si ottiene

$$\psi(z) = c_1 \psi_+ + c_2 \psi_- \tag{1.53}$$

dove

$$\psi_{+} = \frac{1}{z^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}}, \quad \psi_{-} = \frac{1}{z^{\frac{1}{4}}} e^{\frac{2}{3}z^{-\frac{3}{2}}}$$
(1.54)

Le linee di Stokes possono essere calcolate direttamente tramite l'equazione (1.51), che diventa $Re(z^{\frac{3}{2}}) = 0$, le cui soluzioni sono immediate: $arg(z) = \pm \frac{\pi}{3}, \pi$. La soluzione ψ_+ è dominante nella regione $-\frac{\pi}{3} < arg(z) < \frac{\pi}{3}$ e sottodominante in $\frac{\pi}{3} < arg(z) < \pi$ e $-\pi < arg(z) < -\frac{\pi}{3}$, mentre l'altra soluzione avrà carattere opposto all'interno di queste regioni.

La linea di taglio può essere inserita a z = 0 in una direzione arbitraria. ψ_+ e ψ_- si trovano su due falde diverse e attraversare la linea di taglio comporta l'aumento di 2π dell'argomento dei due termini (supponendo che si passi dalla falda inferiore a quella superiore), in particolare ($z = re^{i\delta}$):

$$\psi_{+}^{d} = (re^{i\delta+2\pi})^{-\frac{1}{4}}e^{\frac{2}{3}(re^{i\delta+2\pi})^{\frac{3}{2}}} = -ir^{-\frac{1}{4}}e^{-i\frac{\delta}{4}}e^{-\frac{2}{3}(re^{i\delta+2\pi})^{\frac{3}{2}}} = -i\psi_{-}^{d}$$
(1.55)

Ne consegue quindi che attraversare la linea di taglio comporta il seguente scambio:

$$\begin{aligned}
\psi_+ &\to -i\psi_-, \\
\psi_- &\to -i\psi_+
\end{aligned} (1.56)$$

con le proprietà di dominanza e sottodominanza preservate nel processo. Se si dovesse passare dalla falda superiore a quella inferiore le relazioni resterebbero comunque valide, tuttavia bisognerebbe sostituire -i con i.

Basandoci solamente sulle regole trovate fino ad ora non è possibile definire soluzioni approssimate per tutti i valori di arg(z), pertanto si introducono [7] le *anti-linee di* Stokes, definite da:

$$\operatorname{Im}(\int_{a}^{z} p(z') \, dz') = 0 \tag{1.57}$$



Figura 1.3: Completamento della figura 1.2. Le linee $E, F \in G$ tratteggiate rappresentano le antilinee di Stokes e causano un'ulteriore suddivisione del piano complesso. Lungo queste linee la parte immaginaria della soluzione dell'equazione di Airy tende a zero, pertanto la soluzione sottodominante decade con velocità massima lungo queste linee.

Le anti-linee di Stokes dell'equazione di Airy possono essere trovate dunque imponendo Im $z^{\frac{3}{2}} = 0$ che porta a linee con argomento $arg(z) = 0, \pm \frac{2}{3}\pi$, bisettrici dell'angolo formato da due linee di Stokes consecutive. Lungo le anti-linee di Stokes la parte immaginaria della soluzione \mathcal{WKB} si annulla, pertanto la componente dominante raggiunge la sua dominanza massima e quella sottodominante ha sottodominanza massima. Rimandando a [8] la discussione su come si possano determinare i coefficienti dei diversi termini e come questi varino, in modo da rispettare il carattere di dominanza e sottodominanza, si possono ora definire *cunei di Stokes (Stokes Wedges)* le regioni delimitate dalle linee e anti-linee di Stokes e le condizioni al contorno imposte sul problema determineranno quali cunei considerare e quali escludere.

Capitolo 2

Formulazione Matriciale

In tutto l'arco del primo capitolo è stato implicitamente assunto che si lavorasse in uno spazio di Hilbert infinito dimensionale, in quanto sono state studiate le azioni dei vari operatori solo sulla funzione d'onda e su altri operatori. Tuttavia, di altrettanta importanza è il caso in cui ci si trovi dinanzi a spazi finito dimensionali, in cui tutti gli operatori fino ad ora introdotti possono essere riscritti tramite l'azione di matrici. Ripercorrendo gli argomenti nello stesso ordine in cui sono stati trattati nel paragrafo precedente, forniremo il formalismo matriciale necessario per studiare le matrici non-Hermitiane $n \times n$ ad elementi complessi.

2.1 Matrici Non-Hermitiane

Elencando in maniera rapida alcuni concetti di algebra lineare che saranno di fondamentale importanza per la comprensione di questo capitolo, cominciamo da quelli di natura generale e validi per ogni tipo di matrice $M \in \mathbb{C}_{n \times n}$. Considerando l'azione di una matrice su un qualche vettore non nullo $v \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$:

$$M\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v} \quad \lambda \in \mathbb{C} \tag{2.1}$$

allora M si comporta esattamente come una semplice costante moltiplicativa. L'equazione (2.1) viene chiamata equazione agli autovalori e gli elementi (λ , **v**) sono noti rispettivamente come **autovalori** e **autovettori**.

Gli autovalori di una qualsiasi matrice possono essere trovati riscrivendo la (2.1)

$$(\lambda I - M)\mathbf{v} = \mathbf{0} \tag{2.2}$$

ossia richiedendo che $(\lambda I - M)\mathbf{v}$ sia non invertibile (I è la matrice identità). Da qui, tutti i possibili autovalori possono essere determinati da:

$$p_M(\lambda) \equiv \det(\lambda I - M) = 0 \tag{2.3}$$

dove $p_M(\lambda)$ è detto *polinomio caratteristico* che, per il teorema fondamentale dell'algebra, può essere decomposto in:

$$p_M(\lambda) = \prod_{j=1}^J (\lambda - \lambda_j)^{m_j^a}$$
(2.4)

dove $\lambda_j \neq \lambda_k \forall j \neq k \in m_j^a$ sono chiamate *molteplicità algebriche*, che sono quantità intere positive che soddisfano la relazione $\sum_{j=1}^{J} m_j^a = n$.

Per quanto riguarda gli autovalori associati ad un autovalore λ_j , definiamo *autospazio* associato a λ_j come:

$$V_M(\lambda_j) \equiv \operatorname{Ker}(M - \lambda_j I) \equiv \operatorname{span}\{\mathbf{v}_j : M\mathbf{v}_j = \lambda_j \mathbf{v}_j, \mathbf{v}_j \in \mathbb{C}^n\}$$
(2.5)

e la sua dimensione $m_j^g \equiv \dim V_M(\lambda_j)$ è nota come molteplicità geometrica e vale:

$$m_j^g \le m_j^a \tag{2.6}$$

siccome $V_M(\lambda_j)$ è un sottospazio invariante (se **v** appartiene al sottospazio, anche M**v** vi apparterrà). Un ultimo concetto di fondamentale rilevanza è la nozione di **forma di Jordan**, che può essere introdotta tramite il seguente teorema:

Teorema 2.1.1. Per ogni matrice quadrata $M \in \mathbb{C}_{n \times n}$, è possibile trovare una matrice invertibile $V \in \mathbb{C}_{n \times n}$ (non unica) tale che M è in relazione con una somma diretta di blocchi di Jordan attraverso la trasformazione di similitudine con V:

$$M = V[\bigoplus_{j} \bigoplus_{\alpha} J_{n_{j\alpha}}(\lambda_j)]V^{-1}$$
(2.7)

dove λ_j è l'autovalore j-esimo di M e $J_{n'}(\alpha)$ è il blocco di Jordan di dimensione n' con autovalore λ_j definito come:

$$J_{n'}(\alpha) \equiv \begin{bmatrix} \lambda_j & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_j & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_j & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_j & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_j \end{bmatrix}_{n' \times n'}$$
(2.8)

L'intero positivo $n_{j\alpha}$, che rappresenta la dimensione del blocco di Jordan α -esimo con autovalore λ_j , soddisfa la relazione:

$$\sum_{\alpha=1}^{m_j^g} n_{j\alpha} = m_j^a.$$
 (2.9)

Chiarite alcune proprietà fondamentale di generiche matrici quadrate ad elementi complessi, risulta evidente che, analogamente a quanto succede per gli operatori, la condizione di Hermitianità $(M = M^{\dagger})$ fornisce alcune interessanti proprietà. In primis, lo spettro di una matrice Hermitiana è interamente reale. Considerando infatti l'equazione (2.1) e moltiplicandola per la sua coniugata:

$$\mathbf{v}^{\dagger}M^{\dagger} = \lambda^* \mathbf{v}^{\dagger} \tag{2.10}$$

si ottiene

$$\lambda = \frac{\mathbf{v}^{\dagger} M \mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\dagger} \mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}^{\dagger} M^{\dagger} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^{\dagger} \mathbf{v}} = \lambda^{*}$$
(2.11)

che dimostra $\lambda \in \mathbb{R}$. Essa garantisce inoltre l'ortogonalità tra autovettori associati a diversi autovalori; infatti, utilizzando prima la definizione di autovettore e poi la proprietà di Hermitianità, si possono scrivere le due relazioni seguenti:

$$\mathbf{v}_{1}^{\dagger}M\mathbf{v}_{2} = \lambda_{2}\mathbf{v}_{1}^{\dagger}\mathbf{v}_{2}$$

$$\mathbf{v}_{1}^{\dagger}M\mathbf{v}_{2} = (M^{\dagger}\mathbf{v}_{1})^{\dagger}\mathbf{v}_{2} = (M\mathbf{v}_{1})^{\dagger}\mathbf{v}_{2} = \lambda_{1}\mathbf{v}_{1}^{\dagger}\mathbf{v}_{2}$$
(2.12)

uguagliandole:

$$\lambda_2 \mathbf{v}_1^{\dagger} \mathbf{v}_2 = \lambda_1 \mathbf{v}_1^{\dagger} \mathbf{v}_2 \iff (\lambda_1 - \lambda_2) \mathbf{v}_1^{\dagger} \mathbf{v}_2 = 0$$
(2.13)

si ottiene che $\mathbf{v}_1^{\dagger}\mathbf{v}_2 = 0$ ogni volta che $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Quanto detto sino ad ora chiarifica che si possano distinguere due tipi diversi di autovalori, quelli associati ad M e quelli associati a M^{\dagger} , in particolare:

$$M^{\dagger} \mathbf{v}_{1} = \lambda^{*} \mathbf{v}_{1}$$

$$\mathbf{v}_{1}^{\dagger} M = \lambda \mathbf{v}_{1}^{\dagger}$$

(2.14)

I vettori del tipo di \mathbf{v}_1^{\dagger} (descritti quindi dalla prima equazione della 2.14) sono chiamati autovettori sinistri, mentre gli autovettori convenzionali sono nominati autovettori destri. Per le matrici non Hermitiane l'unica relazione di ortogonalità esistente è tra autovettori di tipo sinistro e destro, chiamata **biortogonalità**, di fondamentale importanza quando si studiano i comportamenti singolari in prossimità dei punti eccezionali. In generale, è importante sottolineare che gli autovettori destri (o sinistri) non sono necessariamente ortogonali tra di loro, il che porta ad un certo numero di conseguenze fisiche non banali. Una trattazione esaustiva della biortogonalità può essere trovata in [9]; tuttavia la biortogonalità può essere pensata come una conseguenza della possibilità di decomporre una matrice M non Hermitiana in una parte diagonale e una parte antidiagonale come segue:

$$M = \sum_{j=1}^{J} \sum_{\alpha=1}^{m_j^g} (\sum_{p=1}^{n_{j\alpha}} \lambda_j \mathbf{r}_{j\alpha p} \mathbf{l}_{j\alpha p}^{\dagger} + \sum_{p=1}^{n_{j\alpha}-1} \mathbf{r}_{j\alpha, p+1} \mathbf{l}_{j\alpha p}^{\dagger})$$
(2.15)

dove $\mathbf{r}_{j\alpha p}$ e $\mathbf{l}_{j\alpha p}$ sono autovettori (rispettivamente di tipo destro e sinistro) che soddisfano la relazione di biortogonalità:

$$\mathbf{l}_{j\alpha p}^{\dagger} \mathbf{r}_{k\beta q} = \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta} \delta_{pq} \tag{2.16}$$

2.2 Formulazione matriciale degli Operatori

2.2.1 Formulazione matriciale di \mathcal{P}

In generale, procediamo alla costruzione dell'operatore \mathcal{P} costruendo una matrice diagonale \mathcal{P}_0 , in cui gli elementi non nulli corrispondono agli autovalori di \mathcal{P} e imponiamo la similitudine tramite matrice ortogonale di rotazione tra queste due matrici. In termini matematici:

$$\mathcal{P} = \mathcal{R}\mathcal{P}_0\mathcal{R}^{-1} \tag{2.17}$$

Esempio 2.2.1. Nel caso bidimensionale la matrice \mathcal{P}_0 è:

$$\mathcal{P}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.18}$$

mentre \mathcal{P} può essere ottenuta da:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}^{-1}$$
(2.19)

ricordando che una matrice si definisce ortogonale quando la sua inversa e la sua trasposta coincidono, \mathcal{R}^{-1} è facilmente calcolabile. Svolgendo i prodotti si ottiene:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}$$
(2.20)

Alcune considerazioni immediate che si possono fare è che \mathcal{P} è simmetrica e il det $\{\mathcal{P}\} = -1$ conferma che rappresenta di fatto una riflessione. Inoltre, utilizzando il valore $\theta = \frac{\pi}{4}$, rappresenta una riflessione rispetto alla retta x = y seguita da uno scambio tra i valori di x con quelli di y. Pertanto, la rappresentazione più semplice per \mathcal{P} in due dimensioni è data da:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.21}$$

che corrisponde alla **matrice** σ_x di **Pauli**. In effetti, esiste una relazione tra riflessione degli assi R e la trasformazione di parità \mathcal{P} : ritornando per un momento al caso tridimensionale, l'azione di \mathcal{P} può essere pensata come una riflessione rispetto al piano xy seguita da una rotazione attorno all'asse z di π .

2.2.2 Formulazione matriciale di \mathcal{T}

Nel corso del paragrafo del capitolo precedente dedicato a \mathcal{T} , ne è stato evidenziato il carattere antilineare, un'assunzione fatta da Weinberg per la prima volta [10] per motivi di consistenza con l'equazione di Schrödinger. Pertanto, lavorando in uno spazio di

Hilbert \mathcal{H} di dimensione N, in modo che la funzione d'onda non sia altro che un vettore colonna con N componenti, l'operatore di inversione temporale può essere pensato come:

$$\mathcal{T}\psi = L\psi^* \tag{2.22}$$

dove L è una matrice $N \times N$ lineare. L'antilinearità contiene una sottile ma sostanziale differenza rispetto alla linearità, infatti applicando un cambio di base $\psi' = V\psi$, nella nuova base \mathcal{T} assume la forma:

$$\mathcal{T}\psi' = L'\psi'^*$$

$$\mathcal{T}(V\psi) = L'(V\psi)^*$$

$$\mathcal{T}\psi = V^{-1}L'(V\psi)^*$$

(2.23)

da cui deriva che:

$$L' = V L V^{-1*} (2.24)$$

Se \mathcal{T} fosse stato lineare, nella nuova base $L' = VLV^{-1}$, il che comporta differenze sostanziali quando si lavora nell'ambito dei complessi.

Non è possibile fornire una formulazione generale di quest'operatore; tuttavia non è necessario. Infatti esiste sempre una base in cui \mathcal{T} corrisponde all'operatore di coniugazione complessa, ossia $\mathcal{T}\psi = \psi^*$, da cui riotteniamo $\mathcal{T}^2 = 1$.

2.2.3 Operatori $\mathcal{P} \in \mathcal{T}$ in relazione

Vista la linearità di \mathcal{P} , questo può essere rappresentato tramite una matrice S, pertanto $P\psi = S\psi$. Inoltre, data la commutatività (1.20) dei due operatori e che la parità applicata due volte coincide la trasformazione identità, ne consegue anche che $S^2 = \mathbb{I}$ e $S = S^*$. Come accennato al termine del paragrafo precedente, è sempre possibile trovare una base in cui \mathcal{T} corrisponde alla coniugazione complessa, ma non solo; in quella medesima base S diventa una matrice diagonale a valori reali. Possiamo comprenderne le motivazioni ragionando come segue. Partendo da una base in cui $\mathcal{T}\psi = \psi^*$, applicando un cambio di base $\psi' = U^{-1}\psi$, allora $T\psi' = U^{-1}U^*\psi'^*$. Inoltre, siccome \mathcal{P} è lineare e S è reale, $P\psi' = U^{-1}SU\psi'$. Se potessimo scegliere U tale che $S' = U^{-1}SU$ è diagonale è $U^{-1}U^* = \mathbb{I}$, avremmo ottenuto la base in cui la parità spaziale è diagonale e quella temporale è una semplice coniugazione complessa.

Costruiamo la matrice U utilizzando gli autovettori $\psi_1 \dots \psi_N$ della matrice S, reali poiché determinati da $S\psi = \lambda\psi$ con $\lambda = \pm 1$ e dunque sia S sia λ sono reali. La matrice U diagonalizza S nel seguente modo:

$$U^{-1}SU = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \dots & 0\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix}$$
(2.25)

dove $\lambda_1...\lambda_N$ sono gli autovalori di S. Dunque, possiamo sempre trovare una base in cui S può essere scritta come:

$$S = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0\\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$
(2.26)

dove I rappresenta la matrice identità di dimensione $\frac{N}{2}$ (abbiamo assunto che N sia pari e che S abbia traccia nulla per comodità).

2.3 Punti Eccezionali

La maggior parte dei problemi nella fisica non Hermitiana coinvolgono trasformazioni continue da un qualche spazio dei parametri allo spazio delle matrici. Inoltre, ogni matrice può essere trasformata nella forma di Jordan (eq. 2.7), pertanto risulta naturale domandarsi come cambi la forma di Jordan al variare dei parametri. All'interno di un contesto matriciale, i punti eccezionali possono essere definiti come punti nello spazio dei parametri in cui una matrice parametrica, diagonalizzabile quasi ovunque, diventa non diagonalizzabile. Questa definizione, a primo impatto, risulta assai diversa rispetto a quella fornita in precedenza; in realtà è possibile mostrare che questa definizione e quella data nel precedente capitolo in realtà coincidono. Decomponendo ogni blocco di Jordan dell'equazione (2.7) in una parte diagonale e una antidiagonale:

$$J_{n_{j\alpha}}(\lambda_j) = \lambda_j I_{n_{j\alpha}} + J_{n_{j\alpha}}, \qquad (2.27)$$

dove $[I_{n_{j\alpha}}]_{ab} = \delta_{ab}$ è la matrice identità e $[J_{n_{j\alpha}}]_{ab} = \delta_{a,b-1}(a,b1,2,\ldots,n_{j\alpha})$, otteniamo la decomposizione spettrale:

$$M = D + N,$$

$$D = \sum_{j=1}^{J} \sum_{\alpha=1}^{m_j^g} \lambda_j P_{j\alpha} \quad N = \sum_{j=1}^{J} \sum_{\alpha=1}^{m_j^g} N_{j\alpha} \qquad (2.28)$$

dove le $P_{j\alpha}$ sono proiettori ortogonali tra di loro e completi e $N_{j\alpha}$ sono matrici nilpotenti. La definizione data caratterizza i punti eccezionali come singolarità nello spazio dei parametri, in cui sia il proiettore sia il nilpotente nella forma di Jordan mostrano cambi discontinui. Da qui segue che lo spettro deve presentare singolarità algebriche che riconducono al fenomeno della degenerazione e della fusione degli autovettori.

2.4 Pseudo e Quasi Hermitianità

Nella formulazione matriciale del concetto di pseudo-hermitianità, assumiamo di essere in presenza di un operatore lineare M che agisce in uno spazio di Hilbert separabile

esattamente come fatto nel (1.4), aggiungendo che M possieda una base biortonormale e uno spettro discreto:

$$M = \sum_{j} \lambda_{j} |r_{j}\rangle \langle l_{j}|, \quad \langle l_{j} | r_{k} \rangle = \delta_{jk}, \quad \sum_{j} |r_{j}\rangle \langle l_{j}| = 1$$
(2.29)

La definizione di Pseudo-Hermitianità rimane la medesima, infatti si richiede l'esistenza di una matrice Hermitiana invertibile η tale che:

$$M^{\dagger} = \eta M \eta^{-1}. \tag{2.30}$$

Quindi fondamentalmente M è pseudo-Hermitiana se è simile alla sua aggiunta attraverso un operatore Hermitiano invertibile (si dice a volte che M è η -pseudo-Hermitiano). Il teorema seguente delinea le condizioni necessarie e sufficiente per la pseudo-Hermitianità:

Teorema 2.4.1. Un operatore lineare M che agisce in uno spazio di Hilbert con una base biortonormale completa e uno spettro discreto è pseudo-Hermitiana se e solo se una delle seguenti condizioni è valida:

- Lo spettro di M è interamente reale
- Gli autovalori compaiono in coppie di complessi coniugati con la stessa degenerazione.

Nonostante la pseudo-Hermitianità offra la possibilità di ottenere uno spettro interamente reale, non rappresenta in sè una condizione nè necessaria nè sufficiente. Il seguente teorema fornisce un'ulteriore condizione in grado di garantire uno spettro reale per un operatore pseudo-Hermitiano:

Teorema 2.4.2. Un operatore lineare M che agisce in uno spazio di Hilbert con una base biortonormale completa e uno spettro discreto ha spettro completamente reale se e solo se esiste un operatore lineare invertibile O tale che $M \\ e \\ OO^{\dagger}$ -pseudo-Hermitiano.

Senza procedere nel fare una dimostrazione rigorosa, il significato del teorema può essere compreso ragionando come segue: costruiamo un operatore h che sia relazionato a M attraverso la trasformazione di similitudine con O:

$$h = O^{-1}MO, \quad \text{con} \quad M = (OO^{\dagger})M^{\dagger}(OO^{\dagger})^{-1}$$

$$h = O^{-1}(OO^{\dagger})M^{\dagger}(OO^{\dagger})^{-1}O$$

$$= (O^{-1}O)O^{\dagger}M^{\dagger}(O^{\dagger})^{-1}(O^{-1}O)$$

$$= O^{\dagger}M^{\dagger}(O^{\dagger})^{-1}$$
(2.31)

che dimostra che $h = h^{\dagger}$, pertanto è Hermitiano. Due matrici simili condividono lo stesso spettro, dunque una matrice M con le caratteristiche enunciate nel teorema (2.4.2) ha spettro completamente reale essendo simile ad una matrice Hermitiana. Nonostante ciò, gli autovettori possono essere molto diversi, specialmente se si considera che gli autovettori di h associati a diversi autovalori sono ortogonali; fatto assolutamente non riscontrabile negli autovettori di M.

Il concetto di pseudo-Hermitianità è spesso affiancato al concetto di quasi-Hermitianità, definito nel seguente modo: un operatore M è detto quasi-Hermitiano se esiste un operatore hermitiano e definito positivo tale che $\xi M = M^{\dagger}\xi$. Nonostante l'apparente somiglianza, tra le due nozioni sussistono due sostanziali differenze. Nel caso della Quasi-Hermitianità non è richiesto che ξ sia invertibile (ξ^{-1} potrebbe essere illimitato) ma è imposta la condizione aggiuntiva che sia definito positivo, non richiesto per la Pseudo-Hermitianità. Nel caso di operatori quasi-Hermitiani è stato dimostrato [11] che lo spettro è sempre reale.

Capitolo 3

Hamiltoniane \mathcal{PT} - Simmetriche

3.1 Autovalori di un'Hamiltoniana \mathcal{PT} - Simmetrica

In generale, l'operatore Hamiltoniano determina le proprietà di una teoria quantistica in tre modi differenti:

(i) L'Hamiltoniana determina i livelli energetici della teoria quantistica. Per trovarli, bisogna risolvere l'equazione agli autovalori di Schrödinger indipendente dal tempo

$$H\psi = E\psi \tag{3.1}$$

Solitamente assume la forma di un'equazione differenziale e, grazie alle condizioni al contorno a cui è soggetta la funzione d'onda ψ , risulta possibile calcolare i livelli energetici del sistema. Per un'Hamiltoniana non Hermitiana \mathcal{PT} - Simmetrica le condizioni al contorno assumono un ruolo ancora più importante, in quanto non è più garantito che gli autovalori dell'energia siano reali e limitati inferiormente, condizioni necessarie per rendere una teoria quantistica fisicamente accettabile.

(ii) L'Hamiltoniana specifica l'evoluzione temporale degli stati della teoria quantistica. Per determinare l'evoluzione degli stati $\psi(t)$ di un sistema quantistico è necessario risolvere l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t) \tag{3.2}$$

la cui soluzione è immediata se H viene supposto indipendente dal tempo e $\psi(t)$ assume la seguente forma:

$$\psi(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}\psi(0) \tag{3.3}$$

 $e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ prende il nome di operatore di evoluzione temporale, e l'unitarietà garantita dall'Hermitianità di H. Ne segue che il prodotto interno è conservato e che la probabilità di trovare il sistema in un particolare stato rimane costante nel tempo,

rispettando così il principio di conservazione della probabilità. Risulterà dunque importante studiare le condizioni per cui questo principio rimanga inviolato anche per Hamiltoniane \mathcal{PT} - Simmetriche.

(iii) L'Hamiltoniana racchiude le simmetrie del sistema. Se il commutatore tra l'operatore Hamiltoniano e un operatore Q, che descrive una data simmetria, ha valore nullo ([H, Q] = 0), allora il sistema possiede quella simmetria, dal quale derivano importanti leggi di conservazione. Se Q risulta essere inoltre un operatore lineare, allora esiste una base di autostati condivisa dai due operatori.

Come già accennato, in questo capitolo e in gran parte della tesi l'attenzione verrà concentrata su una classe di Hamiltoniane (5). Nel 1998 è stato dimostrato che [2] per $\epsilon \geq 0$ gli autovalori della classe di Hamiltoniana sono interamente positivi (di conseguenza reali, in quanto il concetto di relazione d'ordine nei complessi risulta ambiguo) e pertanto costituisce una regione parametrica con Simmetria \mathcal{PT} inviolata. Evidentemente, per $\epsilon < 0$ si presentano anche autovalori complessi, definendo una regione di rottura della Simmetria \mathcal{PT} . Si può pensare la (5) come un'estensione ai complessi dell'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico $H = p^2 + x^2$, che fornisce il migliore esempio per comprendere la connessione tra simmetria \mathcal{PT} e positività dello spettro. Per esempio, aggiungere un termine ix all'Hamiltoniana dell'oscillatore non rompe la simmetria e lo spettro rimane definito positivo: $E_n = 2n + \frac{5}{4}$. Al contrario, aggiungere un termine nella forma ix - x rompe la simmetria, infatti lo spettro diventa complesso: $E_n = 2n + \frac{1}{2}$.

3.1.1 Condizioni al contorno e Cunei di Stokes

Ci si pone il problema di voler ora definire le condizioni al contorno necessarie per risolvere il problema di Schrödinger agli autovalori utilizzando l'Hamiltoniana (5), tenendo conto delle criticità espresse ad inizio capitolo. Estendendo la variabile x al campo dei complessi $(x \in \mathbb{R} \to z \in \mathbb{C})$, l'equazione di Schrödinger nello spazio delle coordinate diventa:

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi(\mathbf{z})}{\mathrm{d}z^2} + z^2(iz)^{\epsilon}\psi(z) = E\psi(z) \tag{3.4}$$

Nonostante quest'equazione non possa essere risolta in maniera esatta per valori di ϵ arbitrari, utilizzando il metodo WKB è relativamente semplice trovare il comportamento asintotico delle soluzioni. Come illustrato nel paragrafo (1.5) per $|z| \to \infty$ il comportamento asintotico della funzione d'onda ha la forma

$$\psi(z) \sim \exp\left[\pm \int^z \sqrt{V(s)} \, ds\right]$$
 (3.5)

dove $V(z) = z^2 (iz)^{\epsilon} - E$.



(a) Cunei di Stokes per $\epsilon = 2.2$

utilizzabile. Figura riprodotta da [1].

Figura 3.1: Il cammino riportato in (b) rappresenta uno dei possibili percorsi d'integrazione per l'equazione di Schrödinger con le condizioni al contorno (a). In realtà, qualsiasi percorso i cui estremi di integrazione sono accettabili, in particolar modo se hanno comportamento asintotico rispetto alle linee centrali dei cunei.

Per identificare le opportune condizioni al contorno, consideriamo in un primo momento il caso Hermitiano $\epsilon = 0$ (oscillatore armonico). In questo caso le soluzioni fornite dall'approssimazione \mathcal{WKB} sono $\psi(z) \sim \exp(\pm \frac{1}{2}z^2)$, in cui quella con il segno positivo va esclusa per via del comportamento asintotico per $|z| \to \infty$. Questa condizione deve mantenere la sua validità anche nell'estensione al dominio complesso, pertanto si richiede una soluzione che abbia parte reale che si annulla per grandi valori di |z|, ossia valida negli Stokes Wedges di apertura $\frac{\pi}{2}$ centrati rispettivamente nel semiasse reale positivo e negativo (Fig. 3.2(b)). Qualsiasi percorso i cui estremi siano contenuti all'interno di queste regioni risulta accettabile per integrare l'equazione differenziale. Non appena ϵ si scosta dallo 0, compare un punto di diramazione logaritmico situato in z = 0 e, senza perdita di generalità, possiamo applicare la linea di taglio lungo il semiasse immaginario positivo ($y \equiv \text{Im}(z) = 0 \rightarrow y = \infty$), come fatto in Fig. 3.1, in modo tale che le soluzioni risultino monodrome. Tuttavia, avendo scostato il valore di ϵ dallo 0, il dominio definito dai Cunei di Stokes trovati in precedenza non risulta più appropriato, fortunatamente l'analisi \mathcal{WKB} fornisce metodi precisi per calcolare le linee di Stokes in funzione di ϵ . Utilizzando l'equazione nella forma (1.48) con $p(z) = \sqrt{i^{\epsilon} x^{2+\epsilon}}$ si ottiene:

$$\sqrt{i^{\epsilon}} \int \sqrt{x^{2+\epsilon}} dx = \sqrt{i^{\epsilon}} \int x^{1+\frac{\epsilon}{2}} dx \sim i^{\frac{\epsilon}{2}} \frac{2}{n+4} x^{2+\frac{\epsilon}{2}}$$
(3.6)

Ponendo $i = e^{\frac{\pi}{2}}$, la soluzione assume la forma:

$$\psi(z) = e^{\pm z^{2+\frac{\epsilon}{2}}e^{i\pi\frac{\epsilon}{4}}} \tag{3.7}$$

Utilizziamo la soluzione con esponente negativo per mantenere la funzione a quadrato integrabile anche nel limite in cui $|x| \to \infty$. Se $\epsilon = 0$ riotteniamo la soluzione (3.5). Scrivendo $z = re^{i\theta}$ nel limite in cui $r \to \infty$:

$$(re^{i\theta})^{2+\frac{\epsilon}{2}} = e^{2i\theta}r^2(re^{i\theta})^{\frac{\epsilon}{2}}$$

$$\rightarrow r^{2+\frac{\epsilon}{2}}\exp\left[i\theta(2+\frac{\epsilon}{2}) + i\pi\frac{\epsilon}{4}\right]$$

$$\rightarrow \psi(r) \sim \exp\left[-\frac{2}{4+\epsilon}r^{2+\frac{\epsilon}{2}}\exp\left[i\theta(2+\frac{\epsilon}{2}) + i\pi\frac{\epsilon}{4}\right]\right]$$
(3.8)

dove $\theta(2 + \frac{\epsilon}{2}) + \pi \frac{\epsilon}{4}$ non rappresenta altro che un fattore di fase. L'equazione (3.8) rappresenta la soluzione \mathcal{WKB} per $\epsilon \neq 0$, ma siccome $\psi(r)$ tende a 0 per r che tende all'infinito, il comportamento oscillatorio della fase si deve annullare. Imporre quindi l'annullamento della fase fornisce la coordinata angolare del centro del cuneo destro. Formalmente:

$$\theta_R(2 + \frac{\epsilon}{2}) + \pi \frac{\epsilon}{4} = 0$$

$$\theta_R(2 + \frac{\epsilon}{2}) = -\pi \frac{\epsilon}{4}$$

$$\theta_R = -\pi \frac{\epsilon}{4} \frac{2}{\epsilon + 4}$$

$$\theta_R = -\frac{2\pi\epsilon}{4(4 + \epsilon)} = -\frac{\pi\epsilon}{8 + 2\epsilon}$$

(3.9)

Il centro del cuneo sinistro può essere trovato usando la simmetria rispetto all'asse immaginario:

$$\theta_L = -\pi + \frac{\pi\epsilon}{8+2\epsilon} \tag{3.10}$$

Con procedimenti analoghi possono essere calcolate le posizioni angolari delle linee e anti-linee di Stokes, che vanno a definire quelle che sono le linee superiori ed inferiori che delimitano i cunei di Stokes. Di seguo vengono riportati le espressioni di θ in funzione di ϵ per le varie linee. Per quella superiore:

$$\theta_{right,upper} = \frac{2-\epsilon}{8+2\epsilon}\pi$$

$$\theta_{left,upper} = -\pi - \frac{2-\epsilon}{8+2\epsilon}\pi$$
(3.11)

mentre per la linea inferiore:

$$\theta_{right,lower} = -\frac{2+\epsilon}{8+2\epsilon}\pi$$

$$\theta_{left,lower} = -\pi + \frac{2+\epsilon}{8+2\epsilon}\pi$$
(3.12)
e l'angolo di apertura di ogni cuneo è definito da $\delta = \frac{2\pi}{\epsilon+4}$.



Figura 3.2: Cunei di Stokes per diversi valori di ϵ . Come appare chiaro nella quarta immagine, per $\epsilon > 2$ i cunei ruotano al di sotto dell'asse reale e non lo contengono più. All'aumentare di ϵ l'angolo di apertura dei cunei si riduce, fino ad annullarsi all'infinito.

I Cunei di Stokes, mostrati in Fig. 3.2 contengono l'asse reale per $-1 < \epsilon < 2$ e l'aumento di ϵ causa una rotazione verso il basso nel piano complesso, nonché un riduzione del loro angolo di apertura, che si annulla per $\epsilon \to \infty$.

Vale la pena ritornare ad una questione che abbiamo solamente accennato ad inizio capitolo: la connessione tra simmetria \mathcal{PT} e positività dello spettro. Infatti, i Cunei rappresentati in entrambe le Fig. 3.1 e 3.2 sono immagini speculari se riflesse rispetto all'asse immaginario. Questa simmetria "sinistra-destra" non è altro che la realizzazione della simmetria \mathcal{PT} . L'azione dell'operatore \mathcal{P} è quella dell'inversione degli assi $z \to -z$, a cui seguite l'azione dell'operatore \mathcal{T} , che cambia il segno alla variabile $i = \sqrt{-1}$, pertanto $-z \to -z^*$. Complessivamente $z \to -z^*$ dunque, nello spazio delle coordinate, la simmetria sinistra-destra (rispetto all'asse immaginario) non è altro che la la simmetria \mathcal{PT} e Cunei di Stokes che non la possiedono rappresentano necessariamente zone di rottura della simmetria \mathcal{PT} .

Tramite il seguente esempio verrà infine illustrato un sottile dettaglio riguardante l'importanza delle condizioni al contorno e come siano esse stesse a determinare la presenza o meno della simmetria. Seguendo il ragionamento di Bender [1] e considerando l'Hamiltoniana

$$H = p^2 - x^4, (3.13)$$

questa risulta non limitata inferiormente. Il limite inferiore in un'Hamiltoniana garantisce l'esistenza dello **stato fondamentale** e la sua assenza rende una teoria fisica del tutto inaccettabile. In effetti, finché le condizioni al contorno non vengono specificate, lo spettro dell'Hamiltoniana rimane ambiguo, tanto quanto è ambiguo il significato di "limitato inferiormente" applicato ad un potenziale complesso, in quanto non è definita una relazione d'ordine per i numeri complessi. Appare chiaro a questo punto il ruolo delle condizioni al contorno \mathcal{PT} - simmetriche che, se propriamente imposte, impediscono l'insorgere di autovalori negativi o complessi. Ci sono due modi differenti di ottenere H in (3.13): Il primo è sostituire $g = |g|e^{i\theta}$ nell'Hamiltoniana $H = p^2 + gx^4$ e applicare una rotazione di π in senso antiorario; in questo modo lo stato fondamentale $E_0(g)$ è complesso (chiaramente è reale quando g > 0 e complesso per g < 0). Il secondo è ottenere H partendo dalla (5) nel limite in cui $\epsilon \rightarrow 2$, che scaturisce in uno spettro reale, positivo e discreto.

L'origine di due comportamenti così differenti è da cercarsi proprio nelle condizioni al contorno a cui è sottoposta $\psi(z)$, infatti se l'Hamiltoniana (3.13) è ottenuta con la prima modalità, $\psi(z)$ si annulla per $|z| \to \infty$ in Cunei che non presentano la simmetria sinistra-destra, pertanto nemmeno la simmetria \mathcal{PT} , mentre nel secondo caso i Cunei di Stokes sono simmetrici rispetto all'asse immaginario, garantendo così una regione di simmetria inviolata. Pertanto, se le condizioni al contorno vengono imposte in modo da non violare la simmetria \mathcal{PT} , l'Hamiltoniana presenterà lo stato fondamentale e, ritornando all'esempio appena discusso, l'Hamiltoniana (3.13) sarà accettabile in una teoria fisica solo se ottenuta partendo dalla (5) nel limite in cui $\epsilon \to 2$, per via del collegamento intrinseco con la simmetria \mathcal{PT} che questo approccio possiede.

3.1.2 Calcolo degli autovalori

Una volta delineate le condizioni che garantiscono la simmetria \mathcal{PT} del sistema e il conseguente spettro reale dell'Hamiltoniana, vi sono diversi modi per risolvere l'equazione (3.4). Come già accennato, una soluzione analitica esatta non è possibile, se non nei due casi limite in cui $\epsilon \to 0$ (oscillatore armonico) oppure $\epsilon \to \infty$ (la versione PT - Simmetrica della barriera di potenziale infinita). Fortunatamente, per poter definire le regioni in cui la funzione d'onda $\psi(z)$ converge non serve una soluzione esatta, ma basta studiare l'ultima delle due approssimazioni.

Il più semplice approccio analitico è fornito dalla teoria \mathcal{WKB} (paragrafo 1.5), valido però solamente per $\epsilon > 0$ (il motivo di questa condizione apparirà evidente a breve), che



(a) Autovalori energetici ottenuti con metodi numerici dell'Hamiltoniana(5). Figura riprodotta da [1].



(b) Autovalori energetici dell'Hamiltoniana (5) ottenuti con l'approssimazione \mathcal{WKB} .



(c) Autovalori energetici dell'Hamiltoniana (5) ottenuti con l'approssimazione \mathcal{WKB} , con il terzo asse contenente i valori di n.

Figura 3.3: (a) riporta i valori esatti dei livelli energetici dell'Hamiltoniana (5). I calcoli e il grafico sono merito di Bender e i suoi collaboratori. (b) è stato ottenuto graficando l'equazione (3.20) per diversi valori di n. (c) riporta gli stessi dati di (b), con l'unica differenza che n è stato promosso a nuova dimensione, occupando un nuovo asse cartesiano. Questo per mettere in ulteriore risalto l'inadeguatezza dell'approssimazione WKBper valori negativi di ϵ . permette di calcolare gli autovalori tramite la condizione di quantizzazione \mathcal{WKB} [12]

$$\int_{z_{-}}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - z^{2}(iz^{\epsilon})} = (n + \frac{1}{2})\pi$$
(3.14)

dove z_{-} e z_{+} sono i punti di inversione del moto, che possono essere molteplici nel piano complesso. Per il momento è sufficiente considerare i punti di inversione contenuti all'interno dei cunei di Stokes mostrati in Fig. 3.1, situati in:

$$z_{-} = E^{\frac{1}{\epsilon+2}} e^{i\pi(\frac{3}{2} - \frac{1}{\epsilon+2})}, \quad z_{+} = E^{\frac{1}{\epsilon+2}} e^{-i\pi(\frac{3}{2} - \frac{1}{\epsilon+2})}$$
(3.15)

Questi due punti di inversione sono le radici di $E - z^2 (iz)^{\epsilon}$ e si trovano nella metà inferiore (superiore) del piano complesso per $\epsilon > 0$ ($\epsilon < 0$).

La distanza tra questi due punti è definita come la lunghezza della corda tra di loro, $z_+ - z_- = crd(\theta) = \sqrt{(1 - \cos(\theta))^2 + \sin(\theta)^2} = \sqrt{2 - 2\cos(\theta)} = 2\sin(\frac{\theta}{2})$, moltiplicata per un fattore $E^{\frac{1}{\epsilon+2}}$. Il percorso di integrazione per l'approssimazione \mathcal{WKB} di ordine superiore è situato interamente nel semipiano inferiore finché $\epsilon > 0$ e coincide con l'asse reale per $\epsilon = 0$. Tuttavia, considerando valori negativi di ϵ , il percorso risulta situato nel semipiano superiore e attraversa inevitabilmente la linea di taglio applicata al semiasse immaginario positivo. In questo caso, non esiste una linea continua congiungente i punti di inversione, pertanto l'approssimazione \mathcal{WKB} non è valida in questa regione del piano (o equivalentemente per valori negativi di ϵ). Questo fatto può essere apprezzato soffermandosi sulla Fig. (3.3), in cui vengono messi a confronto gli andamenti dei valori energetici ottenuti con metodi numerici (parte (a) della figura) e quelli ottenuti tramite approssimazione \mathcal{WKB} (parte (b) della figura). Man mano che ϵ raggiunge valori negativi, l'andamento approssimato si discosta sempre di più da quello "vero", fino ad avere un andamento asintotico in $\epsilon = -1$ per ogni valore di n. Nella zona di positività di ϵ vi è invece buon accordo.

Per $\epsilon \ge 0$, approximiamo il percorso di integrazione con una linea retta congiungente $z_{-} \in 0$ e un'altra congiungente 0 e z_{+} , in modo da riscrivere la (3.14):

$$\int_{z_{-}}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - z^{2}(iz^{\epsilon})} = \int_{z_{-}}^{0} dz \sqrt{E_{n} - z^{2}(iz^{\epsilon})} + \int_{0}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - z^{2}(iz^{\epsilon})}$$
(3.16)

Applicando il cambio di variabile $z = sz_{-}$ nel primo integrale e $z = sz_{+}$ nel secondo otteniamo:

$$\int_{z_{-}}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - z^{2}(iz^{\epsilon})} = \sqrt{E}(z_{+} - z_{-}) \int_{0}^{1} ds \sqrt{1 - s^{2 + \epsilon}} = (n + \frac{1}{2})\pi$$

$$\rightarrow 2\sin\left(\frac{\pi}{2 + \epsilon}\right) E^{\frac{1}{\epsilon + 2} + \frac{1}{2}} \int_{0}^{1} ds \sqrt{1 - s^{2 + \epsilon}} = (n + \frac{1}{2})\pi$$
(3.17)

L'integrale appena ottenuto possiede la seguente soluzione generale:

$$\int_0^1 dx \sqrt{1-z^n} = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(1+\frac{1}{n})}{2\Gamma(\frac{3}{2}+\frac{1}{n})} \quad \text{per} \quad \text{Re}(n) > 0 \quad \text{e} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
(3.18)

dove $\Gamma(z)$ è la nota funzione gamma. Allora (3.17) si può riscrivere come:

$$2\sin\left(\frac{\pi}{2+\epsilon}\right)E^{\frac{1}{\epsilon+2}+\frac{1}{2}}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(1+\frac{1}{\epsilon+2})}{2\Gamma(\frac{3}{2}+\frac{1}{\epsilon+2})} = (n+\frac{1}{2})\pi$$
(3.19)

A questo punto, risolvendo per E, otteniamo i valori approssimati degli autovalori dell'equazione (3.14), che saranno dati da:

$$E_n \sim \left[\frac{\Gamma(\frac{3}{2} + \frac{1}{\epsilon+2})\sqrt{\pi}(n+\frac{1}{2})}{\sin(\frac{\pi}{\epsilon+2})\Gamma(1+\frac{1}{\epsilon+2})} \right]^{\frac{2\epsilon+4}{\epsilon+4}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
(3.20)

Abbiamo ottenuto un'ottima approssimazione per gli autovalori dell'energia, che risultano reali per $\epsilon > 0$, come atteso. A titolo di esempio eseguiamo il calcolo dello stato fondamentale (n = 0) per $\epsilon = 0$:

$$E_{0} \sim \left[\frac{\Gamma(\frac{3}{2} + \frac{1}{2})\frac{\sqrt{\pi}}{2}}{\sin(\frac{\pi}{2})\Gamma(1 + \frac{1}{2})}\right]^{\frac{4}{4}}$$

$$E_{0} \sim \frac{\Gamma(2)\frac{\sqrt{\pi}}{2}}{\sin(\frac{\pi}{2})\Gamma(\frac{3}{2})} \quad \text{con} \quad \Gamma(2) = 1, \quad \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$$

$$E_{0} \sim \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\frac{3}{2}} \quad \text{ma} \quad \Gamma(\frac{3}{2}) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$da \text{ cui}$$

$$E_{0} \sim 1.$$
(3.21)

Il risultato appena ottenuto conferma quanto detto sino ad ora: se il percorso di integrazione è opportunamente scelto e le condizioni al contorno vengono imposte correttamente, allora lo stato fondamentale dell'Hamiltoniana esiste, è reale e positivo.

3.1.3 Il Caso $\epsilon = 1$

Ponendo $\epsilon = 1$ in (5), si ottiene la seguente Hamiltoniana:

$$H = p^2 + ix^3 \tag{3.22}$$

e il problema di Schrödinger agli autovalori diventa:

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi(\mathbf{z})}{\mathrm{d}z^2} + iz^3\psi(z) = E\psi(z) \tag{3.23}$$

In accordo con il metodo \mathcal{WKB} , gli autovalori associati all'ultima Hamiltoniana possono essere trovati tramite la (3.5) che diventa:

$$\int_{z_{-}}^{z_{+}} dz \sqrt{E - iz^{3}} = (n + \frac{1}{2})\pi$$
(3.24)

I punti di inversione del modo sono dati da $E - ix^3 = 0$, ossia:

$$x_{-} = E^{\frac{1}{3}} e^{i\frac{3\pi}{2}}$$
 e $x_{+} = E^{\frac{1}{3}} e^{i\frac{\pi}{2}}$. (3.25)

La distanza tra i due punti è nuovamente calcolata utilizzando la corda di circonferenza $z_+ - z_- = 2\sin(\frac{\theta}{2}) = 2\sin(\frac{\pi}{6})$. Con un ragionamento analogo a quello utilizzato in precedenza, l'integrale (3.24) può essere riscritto come:

$$\int_{z_{-}}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - iz^{3}} = \int_{z_{-}}^{0} dz \sqrt{E_{n} - iz^{3}} + \int_{0}^{z_{+}} dz \sqrt{E_{n} - iz^{3}}$$
(3.26)

dove è stato semplicemente posto $\epsilon = 1$ in (3.16). Procedendo analogamente a quanto fatto nel caso generale discusso nel paragrafo precedente:

$$\sqrt{E}E^{\frac{1}{3}}(z_{+}-z_{-})\int_{0}^{1}ds\sqrt{1-s^{3}} = (n+\frac{1}{2})\pi$$

che ha come soluzione (3.20) con $\epsilon = 1$

$$E_n \sim \left[\frac{\Gamma(\frac{11}{6})\sqrt{\pi}(n+\frac{1}{2})}{\sin(\frac{\pi}{3})\Gamma(\frac{4}{3})}\right]^{\frac{6}{5}}$$
(3.27)

ponendo n = 0 in modo da trovare il ground state :

$$E_0 \sim \left[\frac{\Gamma(\frac{11}{6})\frac{\sqrt{\pi}}{2}}{\sin(\frac{\pi}{3})\Gamma(\frac{4}{3})}\right]^{\frac{6}{5}} \approx 1.09427$$

n	$(\in$ = 1) E_n	E_{exact}	$(\in = 2) \ E_n$	E_{exact}
0	1.09427	1.15627	1.37651	1.47715
1	4.0895	4.10923	5.9558	6.00339
2	7.54898	7.56227	11.769	11.8024
3	11.3043	11.3144	18.4321	18.4588
4	15.2832	15.2916	25.7693	25.7918
5	19.4444	19.4515	33.6746	33.6943
6	23.7605	23.7667	42.0762	42.0938
7	28.212	28.2175	50.9214	50.9373
8	32.7841	32.7891	60.1696	60.1858
9	37.4652	37.4698	69.7884	69.7957

Figura 3.4: Paragone tra gli autovalori esatti, trovati con il metodo Runge-Kutta [1] e i valori ottenuti tramite la (3.20). Tra i due set di dati vi è un ottimo accordo, che migliora all'aumentare di n, come può essere apprezzato dalla tabella stessa

3.1.4 Un approccio diverso: il potenziale quartico

Nonostante anche questo caso sia ottinibile in maniera analoga ai due appena analizzati, l'Hamiltoniana PT-Simmetrica $-z^4$ considerata in (3.13), ottenuta ponendo $\epsilon = 2$ nella (5) è di particolare interesse poiché è possibile ottenere il suo spettro energetico utilizzando solamente l'analisi reale. Un possibile modo per farlo sarebbe quello di modificare il percorso di integrazione in modo che coincida con l'asse reale. Se fatto in maniera attenta, è possibile risolvere in maniera esatta l'equazione di Schrödinger (3.4), ammettendo che il potenziale sia privo di riflessione o, equivalentemente, che un'onda incidente produca un'onda trasmessa ma nessuna onda riflessa. Questa alternativa è presentata in [13] ma non verrà esposta in questa tesi.

Un secondo modo di procedere, con rilevanza fisica di portata assai superiore, consiste nel mostrare che gli autovalori dell'Hamiltoniana non Hermitiana $-z^4$ coincidono con gli autovalori dell'Hamiltoniana Hermitiana con un potenziale positivo $+z^4$.

Teorema 3.1.1. L'Hamiltoniana \mathcal{PT} -Simmetrica non Hermitiana

$$H = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 - g\hat{z}^4 \quad (g > 0) \tag{3.28}$$

ha spettro identico a quello dell'Hamiltoniana Hermitiana

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + 4g\hat{z}^4 - \hbar\sqrt{\frac{2g}{m}}\hat{z} \quad (g > 0)$$
(3.29)

dove, per evidenziare meglio il significato fisico dell'uguaglianza delle due Hamiltoniane, la massa non è stata posta uguale a 1; g rappresenta un semplice parametro positivo.



Figura 3.5: Cunei di Stokes per l'equazione di Schrödinger associata all'Hamiltoniana (3.28). Le autofunzioni associate all'Hamiltoniana si annullano rapidamente per $|z| \rightarrow \infty$ all'interno di questi cunei. La curva C rappresenta il contorno (3.33), in cui è stato posto L = 1.

Tramite l'approssimazione WKB possiamo calcolare l'andamento della (3.28) asintotico delle autofunzioni per $|z| \rightarrow \infty$:

$$\psi_n(x) \sim e^{\pm i\sqrt{2mg}\frac{x^3}{3}}$$
 (3.30)

Il risultato dimostra che il dominio della funzione è composto da Cunei di Stokes di apertura di $\frac{\pi}{3}$ delimitati superiormente dall'asse reale, pertanto si richiede l'annullamento della funzione d'onda ($|z| \rightarrow \infty$) nelle regioni $-\frac{\pi}{3} < \arg(z) < 0$ e $-\pi < \arg(z) < -\frac{2}{3}\pi$. Queste condizioni al contorno non includono l'asse reale e richiedono che l'equazione differenziale sia integrata su un percorso i cui estremi siano contenuti nei cunei mostrati in Fig. 3.5. Una volta rispettate queste condizioni, il problema risulta ben posto e si può procedere alla dimostrazione del precedente teorema.

Dimostrazione. Per mostrare l'equivalenza, analizziamo le corrispondenti equazioni di Schrödinger agli autovalori, che assumono rispettivamente la seguente forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(z) - gz^4\psi(z) = E\psi(z)$$
(3.31)

е

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(z) + (4gz^4 - \hbar\sqrt{\frac{2g}{m}}z)\phi(z) = E\phi(z)$$
(3.32)

introducendo la scala di lunghezza $L = \lambda \left[\frac{\hbar^2}{mg}\right]^{\frac{1}{6}}$ e operando il cambio di variabile

$$z = -2iL\sqrt{1 + \frac{iy}{L}} \tag{3.33}$$

possiamo riscrivere la (3.31) nel seguente modo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(1+\frac{iy}{L})\phi''(y) - \frac{i\hbar^2}{4Lm}\phi'(y) - 16gL^4(1+\frac{iy}{L})^2\phi(y) = E\phi(y)$$
(3.34)

Ricordando la definizione di Trasformata di Fourier:

$$\tilde{f}(p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{iyp}{\hbar}} f(y)$$
(3.35)

la derivata possiede due ben note proprietà:

$$f'(y) \to \frac{ip}{\hbar}\tilde{f}(p) \qquad yf(y) \to i\hbar\tilde{f}'(p)$$
 (3.36)

La versione trasformata della (3.34) diviene quindi:

$$\frac{1}{2m}\left(1-\frac{\hbar}{L}\frac{d}{dp}\right)p^{2}\tilde{\phi}(p) + \frac{\hbar}{4Lm}p\tilde{\phi}(p) - 16gL^{4}\left(1-\frac{\hbar}{L}\frac{d}{dp}\right)^{2}\tilde{\phi}(p) = E\tilde{\phi}(p)$$
(3.37)

che possiamo espandere e semplificare per ottenere:

$$-16gL^{2}\hbar^{2}\tilde{\phi}''(p) + \left(-\frac{\hbar p^{2}}{2mL} + 32gL^{3}\hbar\right)\tilde{\phi}'(p) + \left(\frac{p^{2}}{2m} - \frac{3p\hbar}{4mL} - 16gL^{4}\right)\tilde{\phi}(p) = E\tilde{\phi}(p) \quad (3.38)$$

L'equazione (3.32) presenza un coefficiente nullo al termine derivato al primo grado. Per eliminare il termine di primo grado nella (3.38) basta procedere con la sostituzione

$$\tilde{\phi}(p) = e^{F(p)}\phi(p) \tag{3.39}$$

dove

$$F(p) = \frac{L}{\hbar}p - \frac{1}{192gm\hbar L^3}p^3$$
(3.40)

L'equazione risultante prende, in definitiva, la forma:

$$-16gL^{2}\hbar^{2}\phi''(p) + \left(\frac{p^{4}}{256gm^{2}L^{4}} - \frac{\hbar p}{4mL}\right)\phi(p) = E\phi(p)$$
(3.41)

Applicando un semplice riscalamento $p = zL\sqrt{32mg}$ si ottiene l'equazione (3.32), completando così la dimostrazione e verificando che le due Hamiltoniane posseggono spettri identici. Non sono state fatte alcun tipo di approssimazioni, giungendo pertanto ad un risultato **esatto**.

3.1.5 Anomalia di parità e conseguenze fisiche

L'equivalenza tra la (3.28) e la (3.29) aiuta a chiarire il significato fisico dell'Hamiltoniana non Hermitiana \mathcal{PT} -Simmetrica, il cui risultato può essere interpretato come un'anomalia di parità che coincide con il termine lineare della (3.32). In generale un'anomalia è un fenomeno puramente quantistico che sparisce nel limite in cui $\hbar \to 0$ e non ha corrispettivo classico. Questa, in particolare, è stata denominata di parità poiché l'Hamiltoniana (3.28) non rispetta la simmetria di parità. La violazione di parità è intrinsecamente contenuta nelle condizioni al contorno, che sono date tuttavia nel limite in cui $|z| \to \infty$ e non risulta pertanto riscontrabile in nessun dominio finito del piano complesso. Di conseguenza, una particella classica che si muove sotto l'influenza di questa Hamiltoniana si comporta come se agissero solo forze simmetriche rispetto alla parità; mentre una particella quantistica, descritta da una funzione d'onda "non locale" in quanto definita da condizioni imposte all'infinito, risente della violazione di parità. In H (3.32) appare sotto forma di termine lineare per via della Trasformazione di Fourier, che mappa $z = \infty$ in p = 0 e che rende la violazione un effetto locale visibile direttamente proporzionale ad \hbar . H è Hermitiana nel senso di Dirac, limitata inferiormente e \mathcal{PT} -Simmetrica, in quanto la simmetria viene preservata in ogni passaggio della dimostrazione. Nonostante $z \in p$ siano operatori canonici che rispettano la relazione di commutazione [z, p] = i, la nuova variabile z presente nella (3.29) si comporta come un momento piuttosto che come una variabile spaziale, per via del cambio di segno sotto la trasformazione di parità temporale.

Capitolo 4 Sistemi quantistici \mathcal{PT} - Simmetrici

Dopo aver stabilito la possibilità di ottenere uno spettro reale e positivo anche da Hamiltoniane \mathcal{PT} -Simmetriche, bisogna discutere se sia possibile derivare da Hamiltoniane come la (5) teorie della meccanica quantistica fisicamente accettabili o se si tratti di puri artefici matematici. Vi sono diverse formulazioni della meccanica quantistica, che differiscono sia per fondamenti sia per le interpretazioni che vengono date alla realtà stessa; tra le più famose vi sono l'interpretazione realista, agnostica, a molti mondi e quella più diffusa e accettata da tutta la comunità dei fisici: l'ortodossa. Nonostante questa grande varietà, tutte le formulazioni danno luogo alle stesse previsioni e spiegano in maniera equivalentemente soddisfacente gli stessi fenomeni fisici. Il formalismo della teoria della meccanica quantistica può essere descritto come segue:

(i) Ad ogni sistema fisico è associato uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , all'interno del quale ogni stato del sistema è rappresentato da un vettore ψ .

Lo spazio di Hilbert \mathcal{H} è dotato di un **prodotto interno**, che nel caso di funzioni a quadrato integrabile ($\in L^2(\mathbb{R})$), continue e derivabili è definito nel seguente modo:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi(x)^* \psi(x) dx$$
 (4.1)

Operando il prodotto interno di ψ con sè stessa, si ottiene:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int |\psi(x)|^2 dx = \|\psi\|^2 \tag{4.2}$$

che corrisponde al quadrato della norma della funzione d'onda, reale, non negativo e nullo solo per $\psi = 0$. Una funzione è normalizzata se il prodotto interno con sè stessa è uguale a 1; due funzioni sono invece ortogonali se il loro prodotto interno è nullo. Un insieme di funzioni $\{f_n\}_{n\in\mathcal{A}}$ (con \mathcal{A} insieme numerabile di indici) di uno spazio di Hilbert è detto base ortonormale se valgono le seguenti proprietà:

$$\langle f_n | f_m \rangle = \delta_{nm}$$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x)$$
(4.3)

La prima condizione esprime l'ortogonalità di ogni funzione della base con tutte le altre contemporaneamente al valore unitario della loro norma, proprietà nota come ortonormalità. La seconda condizione esprime la possibilità di scrivere ogni elemento di \mathcal{H} come combinazione lineare di elementi della base, proprietà nota come completezza. I coefficienti c_n possono essere espressi come:

$$c_n = \langle f_n | \psi \rangle \tag{4.4}$$

per via dell'ortonormalità delle f_n .

(ii) Ad ogni osservabile fisico A è associato un operatore Hermitiano Â. Lo spettro di costituisce l'insieme dei possibili risultati di una misura alla grandezza A. La descrizione matematica di un sistema quantistico richiede, come già accennato, l'introduzione di uno spazio di Hilbert, i cui vettori rappresentano gli stati del sistema e di operatori per descrivere gli osservabili. La peculiarità di questa descrizione risiede nel fatto che nè uno stato fisico nè un osservabile corrispondono a quantità direttamente misurabili, almeno non separatamente gli uni dagli altri. Un osservabile può essere misurato solo su un sistema fisico preparato in un determinato stato e le quantità fisiche non sono altro che la frequenza di occorrenza di diversi risultati ottenibili tramite un medesimo esperimento, come stabilito dall' **Interpretazione Statistica Generalizzata**. Per calcolare il valore di aspettazione di un osservabile \mathcal{O}_A , a cui è associato l'operatore \hat{A} , in un determinato stato fisico si usa la ben nota relazione:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi, \hat{A}\psi \rangle$$
 (4.5)

dove <, > indica il prodotto interno Hermitiano. Per assicurarsi poi di ottenere solo valori reali dalle misure di osservabili (un valore complesso dell'energia, ad esempio, non avrebbe alcun significato fisico), si richiede che gli osservabili siano descritti da operatori Hermitiani, ossia che coincidono con il loro aggiunto, così definito:

$$\langle x, Ay \rangle = \langle A^{\dagger}x, y \rangle \tag{4.6}$$

Imporre la condizione di Hermitianità significa quindi:

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger} \quad \text{in modo che}
< \phi, \hat{A}\psi > = < \hat{A}\phi, \psi >,$$
(4.7)

per ogni coppia arbitraria di vettori $\phi \in \psi$. A questo punto è facile intuire che, per questo tipo di operatori, gli autovalori associati alle autofunzioni sono reali:

Sia
$$\hat{Q}f = qf \quad f(x) \neq 0 \quad \operatorname{con} \hat{Q} = \hat{Q}^{\dagger}.$$

 $\langle f|\hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}^{\dagger}f|f \rangle = \langle \hat{Q}f|f \rangle$
 $q\langle f|f \rangle = q^{*}\langle f|f \rangle$
da cui
 $q = q^{*} \quad \rightarrow q \in \mathbb{R}$

$$(4.8)$$

Segue inoltre che le autofunzioni associate a diversi autovalori siano ortogonali (per spettri continui, ortogonali nel senso di Dirac). Limitandoci al caso discreto, per ogni operatore autoaggiunto \hat{Q} vale:

$$\hat{Q}f = qf, \quad \hat{Q}g = q'g, \quad q \neq q',
\langle f|\hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f|g \rangle
q \langle f|g \rangle = q' \langle f|g \rangle
da cui \quad \langle f|g \rangle = 0$$
(4.9)

che dimostra l'ortogonalità degli autofunzioni associati ad autovalori diversi. Anche nel caso in cui ve ne sia più di uno associato allo stesso autovalore (fenomeno noto come *degenerazione*), è possibile costruire una base ortonormale dell'autospazio generato dalle autofunzioni, tramite il metodo di Gram-Schmidt.

 (iii) L'evoluzione degli stati di un sistema fisico è governata dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(\vec{r}, t)\rangle = \hat{H} |\psi(\vec{r}, t)\rangle \tag{4.10}$$

Il fatto che l'unitarietà sia una condizione necessaria che l'operatore di evoluzione temporale deve possedere può essere spiegato come segue. L'unitarietà, conservando il prodotto scalare e, di conseguenza, la norma, garantisce la validità del principio di conservazione della probabilità. L'evoluzione descritta da U(t) deve essere inoltre continua e invariante per traslazioni temporali. Matematicamente queste condizioni possono essere espresse come:

$$\lim_{t \to 0} U(t) = \hat{1}$$

$$U(t + t_0) = U(t)U(t_0)$$
(4.11)

Il fatto che l'operatore di evoluzione temporale sia:

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \tag{4.12}$$

trova le sue motivazioni nel teorema di Stone.

Lo scopo di questi primi paragrafi sarà quindi di mostrare come la richiesta di un'Hamiltoniana H con simmetria \mathcal{PT} inviolata possa sostituire quella di Hermitianità e soddisfare tutti i requisiti che definiscono una teoria quantistica.

4.1 Teoria Quantistica \mathcal{PT} -Simmetrica

In questa sezione si assume che l'Hamiltoniana non Hermitiana abbia la forma (5). Per quanto riguarda l'esistenza di autovalori e autovettori, nel secondo capitolo sono state discusse diverse metodologie per il loro calcolo nello spazio delle coordinate. Si assume di aver già trovato gli autovalori E_n e che siano tutti reali, il che deriva direttamente dalla condizione di simmetria inviolata.

4.1.1 Prodotto Interno $\mathcal{PT} \in \mathcal{CPT}$

Per ricostruire le proprietà sopraelencate senza utilizzare la condizione di Hermitianità, bisogna considerare che la definizione di prodotto interno non è nota *a priori*, pertanto non è possibile dare per scontato che si operi nel contesto della (4.1). Il prodotto interno adatto è definito da H stessa, pertanto è l'Hamiltoniana a definire lo spazio di Hilbert in cui la teoria quantistica "vive" e si dice che è **determinato dinamicamente**. Nel paragrafo (2.2.3) abbiamo dimostrato che, scegliendo opportunamente la base (ed è sempre possibile farlo), la combinazione degli operatori $\mathcal{P} \in \mathcal{T}$ svolge un ruolo analogo alla coniugazione Hermitiana, pertanto un modo naturale di definire il prodotto interno \mathcal{PT} è il seguente:

$$\langle \phi | \psi \rangle_{PT} \equiv \int_C dx [\phi(x)]^{PT} \psi(x) = \int_C dx [\phi(-x)]^* \psi(x) \tag{4.13}$$

dove C è un percorso all'interno dei Cunei di Stokes mostrati in Fig. 3.1. Utilizzando la formulazione matriciale, si può dare la seguente definizione equivalente:

$$\langle \phi | \psi \rangle_{PT} = (PT\phi)^T \psi = \phi^{\dagger} S \psi \tag{4.14}$$

con S definita come in (2.26). L'equivalenza tra le due definizioni è banale e tramite entrambe è possibile dimostrare che autofunzioni associate ad autovalori diversi sono ortogonali. Tuttavia, questo prodotto interno non è utilizzabile in una teoria fisica accettabile, per via della norma norma negativa associata ad alcuni stati, come mostrato nel seguente esempio:

Esempio 4.1.1. Si consideri un vettore colonna N dimensionale χ che, per comodità, viene diviso in due "segmenti" $\frac{N}{2}$ dimensionali:

$$\chi \to \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \tag{4.15}$$

La norma di χ rispetto al prodotto interno PT è:

$$\langle \chi | \chi \rangle_{PT} = \phi^{\dagger} S \psi = (\chi_1^*, \chi_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$$

$$= |\chi_1|^2 - |\chi_2|^2$$

$$(4.16)$$

che risulta negativo ogni qualvolta $|\chi_1|^2 < |\chi_2|^2$.

Prima di concentrarci su come riottenere la positività della norma, vale la pena fare alcune ulteriori considerazioni sul prodotto interno \mathcal{PT} . Nel capitolo introduttivo è stato mostrato che (vedi 1.26), data una regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata, le autofunzioni $\psi_n(x)$ dell'operatore H risultano essere anche autofunzioni dell'operatore \mathcal{PT} , con autovalore $\lambda = e^{i\theta}$, dove sia λ sia θ dipendono da n. Si possono dunque costruire le autofunzioni \mathcal{PT} -normalizzate $\phi_n(x)$:

$$\phi_n(x) \equiv e^{-i\frac{\theta}{2}}\psi_n(x) \tag{4.17}$$

In base a questa costruzione, $\phi_n(x)$ è ancora un autovettore. Si può inoltre dimostrare che la norma di $\phi_n(x)$ in (4.13) equivale a $(-1)^n$ per $\epsilon > 0$. Pertanto, le autofunzioni vengono definite in modo che la loro norma sia $(-1)^n$:

$$\|\phi_n(x)\|_{\mathcal{PT}}^2 = \langle \phi | \phi \rangle_{\mathcal{PT}} \equiv \int_C dx [\phi(x)]^{\mathcal{PT}} \phi(x) = \int_C dx [\phi(-x)]^* \phi(x) = (-1)^n \qquad (4.18)$$

In virtù del teorema (1.4.2) le autofunzioni sono ortogonali tra loro (a meno che non siano associate ad autovalori complessi coniugati); caratteristica che ci permette di fornire uno strano enunciato di completezza:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \phi_n(x) \phi_n(y) = \delta(x-y)$$
(4.19)

che è stato verificato sia numericamente sia analiticamente per ogni $\epsilon > 0$ e di cui è stata infine fornita anche una dimostrazione matematica [14].

Alla luce di queste ultime considerazioni, si è delineata una situazione in cui metà degli stati ha norma positiva (per ogni valore pari di n) e metà ha norma negativa (valori dispari di n). Questa problematica è analoga a quella che ha incontrato Dirac nella formulazione dell'equazione d'onda relativistica per gli spinori [15]. Seguendo la sua linea di ragionamento, piuttosto che etichettare la teoria come inconsistente, bisogna cercare di attribuire un significato fisico agli stati con norma negativa. In realtà, è l'uguaglianza nel numero di stati a norma negativa con quelli a positiva ad avere un significato fisico assai profondo, che viene interpretato come un'ulteriore simmetria di ogni Hamiltoniana H in una regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata. Questa nuova simmetria è racchiusa nell'operatore C, che commuta sia con H sia con \mathcal{PT} ed è rappresentata nello spazio delle coordinate dalla somma delle autofunzioni \mathcal{PT} normalizzate:

$$\mathcal{C}(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y).$$
(4.20)

Si può pensare a C in maniera equivalente ragionando come segue. Siano ψ_i gli autovettori di H e s_i il segno della norma \mathcal{PT} dell'autovettore i-esimo. C è definito dalla sua azione su ψ_i :

$$\mathcal{C}\psi_i = s_i\psi_i \tag{4.21}$$

poiché $s_i = \pm 1$ dunque $s_i^2 = 1$. Siccome è un operatore lineare può essere rappresentato da una qualche matrice K nella base standard:

$$C\psi = K\psi \tag{4.22}$$

e per via della commutatività con \mathcal{PT} si ha $KS = SK^*$. Inoltre $\mathcal{C}^2 = \hat{1}$. Il nuovo prodotto interno viene così definito:

$$\langle \phi | \psi \rangle_{\mathcal{CPT}} \equiv \int_C dx \phi(x)^{\mathcal{CPT}} \psi(x) \quad con \quad \phi(x)^{\mathcal{CPT}} \equiv \int dy \mathcal{C}(x, y) \phi^*(-y) \tag{4.23}$$

oppure, in notazione matriciale:

$$\langle \phi | \psi \rangle_{CPT} \equiv (CPT\phi)^T \psi = \phi^{\dagger} K^T S \psi \tag{4.24}$$

Questo nuovo operatore ha una netta somiglianza con l'operatore di coniugazione di carica, da cui lo stesso simbolo. La condizione di completezza si riscrive, in termini del coniugato CPT (sostitutivo del coniugato Hermitiano nel caso del prodotto interno Hermitiano):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x) [\phi_n(y)]^{CPT} = \delta(x-y)$$
(4.25)

4.2 Pseudo-Hermitianità, Osservabili e il Problema dell'Unitarietà

Una volta terminate le considerazioni necessarie ad assicurarci che i capisaldi della teoria siano in qualche modo riottenibili anche senza l'utilizzo della condizione di Hermitianità, ci chiediamo se tutti i teoremi della meccanica quantistica ordinaria siano validi anche in questo regime o se bisogni cercare una formulazione teorica nuova. Per farlo, passiamo dal concetto di \mathcal{PT} come simmetria a quello di \mathcal{PT} come sotto-categoria della pseudo-Hermitianità. Alcuni importanti teoremi riguardanti questo tipo di operatori sono già stati anticipati (vedi paragrafo (1.4)). Contestualizzandoli, vedremo l'insorgere di alcune strabilianti proprietà, che comporteranno risultati di fondamentale rilevanza.

4.2.1 Il Problema della Completezza e Relazione con $L^2(\mathbb{R})$ e l^2

Prima di addentrarci nelle conseguenze e applicazioni della pseudo-Hermitianità, bisogna accennare ad un problema assai sottile. Tutti i ragionamenti fatti fin'ora si basano difatti sull'assunzione implicita che lo spazio definito dalla teoria CPT sia uno spazio di Hilbert, come sottolineato da Mostafazadeh in [16]. Questo poiché ogni spazio di Hilbert \mathcal{H} risulta **completo**, ossia ogni successione di Cauchy ammette limite in \mathcal{H} . Dunque, chiamato \mathcal{V} lo spazio vettoriale complesso dotato di prodotto interno generato dalle autofunzioni \mathcal{PT} normalizzate, dobbiamo completare \mathcal{V} ad uno spazio di Hilbert \mathcal{H} . Se ciò non fosse possibile, non sarebbe nemmeno possibile affermare che un vettore di stato ψ sia in sovrapposizione (quindi esprimibile come combinazione lineare) delle autofunzioni dell'energia ϕ_n .

Definiamo $\mathcal{B} \equiv \{\phi_n\}$ la base delle autofunzioni \mathcal{PT} normalizzate e ricordiamo che esiste un processo ben definito che permette di trovare uno spazio di Hilbert tale che \mathcal{V} è denso in \mathcal{H} , che viene chiamato **completamento** di \mathcal{V} . Questo processo è possibile solamente per gli spazi pre-hilbertiani, ossia dotati di prodotto interno e deriva dalla possibilità di trovare il completamento di uno spazio metrico, unico a meno di isometrie. A questo punto abbiamo che \mathcal{V} è generato da \mathcal{B} , che risulta un insieme numerabile, ed è denso in \mathcal{H} per costruzione, quindi abbiamo fondamentalmente dimostrato che \mathcal{H} è separabile, pertanto \mathcal{B} viene promossa a base ortonormale.

Prima di procedere oltre con il ragionamento, bisogna introdurre una definizione e un teorema che saranno il fulcro argomentativo dei ragionamenti che seguiranno:

Definizione 4.2.1. Due spazi di Hilbert $\mathcal{H}_1 \in \mathcal{H}_2$ si dicono in relazione di **equivalenza** unitaria se esiste un operatore unitario \mathcal{K} tale che $\mathcal{K} : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$. In questo caso, un operatore lineare $U_1 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1$ è Hermitiano se e solo se $U_2 = \mathcal{K}U_1\mathcal{K}^{-1}$ è un operatore Hermitiano che agisce in \mathcal{H}_2

Teorema 4.2.1. L'ortonormalità di una data base \mathcal{B} di uno spazio di Hilbert separabile \mathcal{H} fissa in maniera unica il prodotto interno in \mathcal{H} . Da questo, unito al fatto che ogni spazio di Hilbert separabile ammetta una base ortonormale, si ricava che due spazi di Hilbert separabili siano in relazione tramite un operatore unitario.

Fatte queste premesse e ricordando quanto detto fino ad ora, \mathcal{H} risulta unitariamente equivalente sia a $L^2(\mathbb{R})$ sia a l^2 . A titolo di esempio, proviamo a stabilire l'equivalenza unitaria tra \mathcal{H} e l^2 utilizzando la base \mathcal{B} . Sia $U : \mathcal{H} \to l^2$ definito nel seguente modo: $(U\psi)(n) = \langle \phi_n | \psi \rangle_{CPT}, \forall n \in \mathbb{N}$. Se riuscissimo a dimostrare che $(U\psi, U\phi) = \langle \psi | \phi \rangle_{CPT}$ e che sia suriettivo, avremmo ottenuto la conservazione del prodotto interno (o della norma) e pertanto avremmo dimostrato l'unitarietà di U. Procediamo:

$$(U\psi, U\phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | \psi \rangle_{\mathcal{CPT}}^* \langle \phi_n | \phi \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

utilizzando la **relazione di completezza** che afferma che: $\sum_{\alpha} \langle x | x_{\alpha} \rangle \langle x_{\alpha} | y \rangle = \langle x | y \rangle$

$$(U\psi, U\phi) = \langle \psi | \phi \rangle_{CPT} \quad Q.e.d.$$

che dimostra l'unitarietà di U. Definendo $e_n \equiv U\phi_n$, allora $e_n(m) = \langle \phi_m | \phi_n \rangle_{C\mathcal{PT}}$ mostra che U mappa la base \mathcal{B} nella base ortonormale standard $\{e_n\}$ di l^2 , che ne dimostra la suriettività. U risulta pertanto unitario. Inoltre, U mappa l'Hamiltoniana H nell'operatore UHU^{-1} che agisce in l^2 e che coincide con la rappresentazione matriciale di H nella base \mathcal{B} , $UHU^{-1} = H^{(\mathcal{B})}$, con elementi di matrice dati da $H_{m,n}^{(\mathcal{B})} = \langle \phi_m | H\phi_n \rangle = E_n \delta_{m,n}$. Siccome $E_n \in \mathbb{R}$, $H^{(\mathcal{B})}$ risulta Hermitiano e quindi chiariti i motivi per cui rappresenta effettivamente un osservabile. In realtà, l'operatore unitario U può essere utilizzato per costruire tutti gli osservabili della teoria \mathcal{PT} simmetrica. Infatti quello che abbiamo mostrato fino ad ora consiste nella possibilità di mappare lo spazio \mathcal{V} nello spazio in cui la meccanica quantistica ordinaria opera, ossia $L^2(\mathbb{R})$. Il fatto che H non sia un operatore Hermitiano, non significa che il sistema fisico \mathcal{PT} simmetrico non possa essere studiato usando la meccanica quantistica tradizionale basata sullo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R})$.

Analogamente a quanto fatto in precedenza per l^2 , definiamo $\mathcal{U} : \mathcal{H} \to L^2(\mathbb{R})$ la funzione tale che $\mathcal{U}\psi \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \langle \phi_n | \phi \rangle_{\mathcal{CPT}} \Phi_n$ dove $\mathcal{F} \equiv \{\Phi_n\}$ è una base ortonormale di $L^2(\mathbb{R})$.

Usando un ragionamento analogo al (4.26) si può mostrare che \mathcal{U} è unitario e la sua azione su H risulta essere:

$$h \equiv \mathcal{U}H\mathcal{U}^{-1} = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|, \qquad (4.27)$$

dov'è stata usata la notazione bra-ket introdotta da Dirac. h risulta evidentemente Hermitiano e agisce in $L^2(\mathbb{R})$. Similmente, ogni osservabile O è in relazione con un operatore Hermitiano o tramite la relazione:

$$O = \mathcal{U}^{-1} o \mathcal{U}. \tag{4.28}$$

Da questo si può vedere immediatamente che l'elemento di matrice $O_{mn} = \langle \phi_m | O \phi_n \rangle_{CPT} = \langle \Phi_m | o | \Phi_n \rangle$ e in generale il valore di aspettazione di *O* calcolato nello spazio \mathcal{V} con il prodotto interno CPT è equivalente al suo valore di aspettazione nella meccanica quantistica tradizionale.

4.2.2 Il Problema dell'Unitarietà

La condizione (4.28) mostra una netta somiglianza con la (2.31). Infatti, in entrambi i casi, l'operatore pseudo-Hermitiano viene messo in relazione tramite similitudine con un operatore Hermitiano. Sulla base di queste proprietà possiamo costruire un operatore che rispetti le (4.11). Richiamando il teorema (1.4.1), sappiamo che il prodotto interno CPT è invariante per traslazione temporale se e solo se H è CPT-pseudo-Hermitiana. Quest'ultima condizione si può scrivere:

$$H^{\dagger} = \mathcal{CPT}H\mathcal{CPT}^{-1} \tag{4.29}$$

Inoltre, dalla (2.31) sappiamo che lo spettro di H è interamente reale solo se l'operatore CPT può essere espresso come $\rho\rho^{\dagger}$, con ρ operatore lineare invertibile, pertanto deve necessariamente essere $CPT = \rho\rho^{\dagger}$. La dimostrazione di questa ultima proprietà si fonda sul dimostrare che H è simile ad una matrice Hermitiana h tramite l'operatore ρ . Ricordandola (4.27), l'operatore di evoluzione temporale si trasformerà pertanto:

$$e^{-iHt} = \rho^{-1} e^{-iht} \rho \tag{4.30}$$

ed è immediato dimostrare che l'evoluzione temporale è unitaria rispetto allo spazio di Hilbert della teoria CPT:

$$<\phi(t)|\psi(t)>_{CPT} = <\phi(t)|CPT|\psi(t)> = <\phi(0)|(e^{-iHt})^{\dagger}CPTe^{-iHt}|\psi(0)> = <\phi(0)|\rho^{\dagger}e^{iht}(\rho^{-1})^{\dagger}\rho^{\dagger}\rho\rho^{-1}e^{-iht}\rho|\psi(0)>$$

$$\cos \rho\rho^{-1} = \hat{1}, \quad (\rho^{-1})^{\dagger}\rho^{\dagger} = (\rho\rho^{-1})^{\dagger} = \hat{1}, \quad e^{-iht}e^{iht} = 1 = <\phi(0)|\rho^{\dagger}\rho|\psi(0)> = <\phi(0)|\psi(0)>_{CPT}$$

$$(4.31)$$

che dimostra la conservazione del prodotto interno CPT nel tempo. In questa formulazione, l'operatore di evoluzione temporale possiede la medesima forma che in quella ordinaria, pertanto tutte le proprietà legate ad esso note dalla meccanica quantistica saranno valide anche in questi ambiti.

4.2.3 Osservabili

Dopo aver capito che il concetto di autoaggiunzione è profondamente legato alla specifica definizione di prodotto interno, definiamo l'aggiunto $C\mathcal{PT}$ \hat{A}^{\dagger} di un operatore \hat{A} imponendo che soddisfi $\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle_{C\mathcal{PT}} = \langle \hat{A}^{\dagger} \phi | \psi \rangle_{C\mathcal{PT}}$ e poi richiediamo che gli operatori siano autoaggiunti rispetto al prodotto interno $C\mathcal{PT}$. Per via di quanto esplicitato nel paragrafo (4.2.1), un osservabile A della teoria \mathcal{PT} , che ricordiamo per Hamiltoniane del tipo (5) essere un caso particolare di Pseudo-Hermitianità, può essere rappresentato da un operatore Hermitiano a, con la relazione $a = \rho A \rho^{-1}$, dove $\rho^{\dagger} \rho = C\mathcal{PT}$. Il valore di aspettazione di A, misurato in un sistema in uno stato $|\psi'\rangle$ allora può essere calcolato nel modo seguente:

$$\langle A \rangle = \langle \psi', A\psi' \rangle_{CPT} = \langle \psi' | CPTA | \psi' \rangle$$

$$= \langle \psi' | \rho^{\dagger} \rho (\rho^{-1} a \rho) | \psi' \rangle$$

$$= \langle \psi' | \rho^{\dagger} a \rho | \psi' \rangle$$

$$= \langle \psi | a | \psi \rangle$$

$$(4.32)$$

dove abbiamo definito $\psi \rangle = \rho |\psi'\rangle$. Questo cambio di variabile ci permette inoltre di conservare la normalizzazione, se $\langle \psi' | \psi' \rangle_{CPT} = 1$ allora lo sarà anche $\langle \psi | \psi \rangle$. Inoltre, se $|a_i\rangle$ è un autoket di *a* con autovalore a_i , allora $|a'_i\rangle = \rho^{-1} |a_i\rangle$ è un autoket di *A* con lo stesso autovalore, infatti:

$$A|a'_{i}\rangle = \rho^{-1}a\rho|a'_{i}\rangle \quad \text{con} \quad |a_{i}\rangle = \rho|a'_{i}\rangle$$

$$= \rho^{-1}a|a_{i}\rangle \quad \text{ricordando che} \quad a|a_{i}\rangle = a_{i}|a_{i}\rangle$$

$$= \rho^{-1}a_{i}|a_{i}\rangle = a_{i}\rho^{-1}|a_{i}\rangle$$

$$= a_{i}|a'_{i}\rangle.$$
(4.33)

Ne consegue che $a \in A$ descrivono in effetti lo stesso osservabile fisico. Inoltre, per via della mappatura uno a uno che esiste tra lo spazio di Hilbert \mathcal{H} delle la teoria \mathcal{CPT} e $L^2(\mathbb{R})$, la teoria Hermitiana e la teoria \mathcal{CPT} descrivono di fatti lo stesso sistema fisico e gli stessi osservabili, anche se in forma questi ultimi possono risultare assai differenti, come meglio visualizzato a termine paragrafo.

Per quanto riguarda le relazioni di indeterminazione degli osservabili, questa rimane valida anche nel caso non-Hermitiano e la dimostrazione (esattamente come nel caso Hermitiano) si basa sulla disuguaglianza di Schwartz:

$$|\langle \alpha | \beta \rangle| \le \|\alpha\| \|\beta\| \tag{4.34}$$

per ogni coppia di vettori (α, β) in uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , ossia dotato di prodotto interno definito positivo. Essendo in possesso un tale prodotto (eq. 4.23) è possibile procedere in maniera del tutto equivalente a quello che viene fatto nel caso Hermitiano. Si assuma ci siano 2 operatori $C\mathcal{PT}$ autoaggiunti $A \in B$ tali che:

$$\sigma_A^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \psi \rangle_{\mathcal{CPT}} = \sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \psi \rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle f | f \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

$$\sigma_B^2 = \langle \psi | (\hat{B} - \langle B \rangle)^2 \psi \rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle (\hat{B} - \langle B \rangle) \psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \psi \rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle g | g \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

(4.35)

dove $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle_{CPT}$ è il valore di aspettazione di \hat{A} (si ragiona analogamente per B) e come tali, sono numeri reali. σ_A è la deviazione standard, calcolata partendo direttamente dalla sua definizione $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$. Utilizzando la disuguaglianza di Schwartz:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle_{\mathcal{CPT}} \langle g | g \rangle_{\mathcal{CPT}} \ge |\langle f | g \rangle_{\mathcal{CPT}}|^2 \tag{4.36}$$

e utilizzando la proprietà dei numeri complessi:

$$|z|^{2} = \operatorname{Re}\{z\}^{2} + \operatorname{Im}\{z\}^{2} \ge \operatorname{Im}\{z\}^{2} = \left[\frac{1}{2i}(z-z^{*})\right]^{2}$$
(4.37)

da cui, ponendo $z = \langle f | g \rangle_{CPT}$,

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \ge |[\frac{1}{2i} (\langle f | g \rangle_{CPT} - \langle g | f \rangle_{CPT})]|^2$$
(4.38)

dove abbiamo usato la proprietà del prodotto interno per cui $\langle f|g\rangle^*_{CPT} = \langle g|f\rangle_{CPT}$. Sviluppando $\langle f|g\rangle_{CPT}$ in modo da esplicitare la dipendenza dagli operatori \hat{A} e \hat{B} :

$$\langle f|g \rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)\psi | (\hat{B} - \langle B \rangle)\psi \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

$$= \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)(\hat{B} - \langle B \rangle)\psi \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

$$= \langle \psi | (\hat{A}\hat{B} - \hat{A} \langle B \rangle - \hat{B} \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle)\psi \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

$$= \langle \psi | \hat{A}\hat{B}\psi \rangle_{\mathcal{CPT}} - \langle B \rangle \langle \psi | \hat{A}\psi \rangle_{\mathcal{CPT}} - \langle A \rangle \langle \psi | \hat{B}\psi \rangle_{\mathcal{CPT}} + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \psi | \psi \rangle_{\mathcal{CPT}}$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

$$= \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

(4.39)

Similmente:

$$\langle g|f\rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \tag{4.40}$$

da cui:

$$\langle f|g\rangle_{\mathcal{CPT}} - \langle g|f\rangle_{\mathcal{CPT}} = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{B}\hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle$$
(4.41)

dove

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{4.42}$$

In conclusione:

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \ge (\frac{1}{2i} < [\hat{A}, \hat{B}] >)^2 \tag{4.43}$$

Quindi il principio di indeterminazione è preservato anche nella meccanica quantistica \mathcal{PT} . La dimostrazione dipende unicamente sul fatto che il prodotto interno sia definito positivo e che i valori di aspettazione siano reali, pertanto può essere applicato in maniera abbastanza generale alle estensioni non Hermitiane.

Ritorniamo un attimo su un discorso accennato in precedenza. Il fatto che ogni operatore del caso Hermitiano abbia un corrispettivo nel caso \mathcal{PT} non implica che quelli che sono osservabili in meccanica quantistica lo siano anche in questa formulazione. L'operatore \mathcal{C} , ad esempio, soddisfa quella condizione, pertanto rappresenta un osservabile, esattamente come l'Hamiltoniana H. Tuttavia, $\hat{x} \in \hat{p}$ non lo sono. Infatti, il valore di aspettazione di \hat{x} nello stato fondamentale è un numero immaginario negativo, pertanto non esiste l'operatore posizione nella meccanica quantistica \mathcal{PT} . La corretta interpretazione di questo fenomeno potrebbe essere che la meccanica quantistica \mathcal{PT} simmetrica rappresenti interazioni di oggetti estesi, piuttosto che puntiformi. Questo non significa, tuttavia, che l'operatore posizione non esista in assoluto. Nel paragrafo (4.2.1) e in questo, è stata mostrata la possibilità di mappare un operatore associato allo spazio di Hilbert della teoria \mathcal{PT} , quindi intrinsecamente associato anche all'Hamiltoniana, in un operatore appartenente ad $L^2(\mathbb{R})$ associato alla stessa Hamiltoniana però trasformata secondo la (4.27). Esistono infatti i corrispettivi di posizione e quantità di moto anche nella formulazione \mathcal{PT} , solo possono risultare assai diversi da quelli incontrati nella meccanica quantistica convenzionale, come diversa è l'Hamiltoniana che definisce il medesimo problema fisico. Questo completa la formulazione della meccanica quantistica \mathcal{PT} -simmetrica: lo spazio di Hilbert, l'Hamiltoniana e gli osservabili sono ben determinati; l'interpretazione fisica è fornita dalla teoria della misura standard, preservando ad esempio il concetto di collasso della funzione d'onda.

4.2.4 Differenze Tra Teorie Hermitiane e \mathcal{PT} -Simmetriche

Una volta studiata la relazione tra la formulazione canonica e quella spazio-temporale simmetrica, vale la pena sottolinearne anche le differenze. Come già evidenziato, le due teorie differiscono principalmente nell'esistenza di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} definito a priori o meno. Questa è un pura conseguenza matematica dettata dagli assiomi della teoria quantistica ma non ha nessun significato fisico e non influenza in alcun modo la dinamica del sistema. Questa sorta di arbitrarietà nella scelta dello spazio (e quindi del prodotto interno) non è nuova, infatti una stessa teoria fisica può essere descritta da Hamiltoniane diverse definite in diversi spazi di Hilbert. Nel contesto \mathcal{PT} simmetrico, bisogna trovare gli autostati di \mathcal{H} prima di conoscere a quale spazio di Hilbert appartengono o come sia definito il prodotto interno, poiché l'operatore \mathcal{C} è peculiare della teoria \mathcal{PT} simmetrica, ma non ha riscontri nella meccanica quantistica ordinaria. Tuttavia, considerando un sistema quantistico immerso in un potenziale $V(z) = z^2(iz)^{\epsilon}$ e lavorando nel limite in cui $\epsilon = 0$, l'operatore C e l'operatore \mathcal{P} coincidono. Dunque, essendo $C^2 = \mathcal{P}^2 = \hat{1}$, l'operatore \mathcal{CPT} coincide con \mathcal{T} , segnando il passaggio dalla simmetria \mathcal{CPT} alla classica Hermitianità, in quanto l'azione dell'operatore di inversione temporale coincide con la coniugazione complessa. Il prodotto interno a sua volta si riduce a quello Hermitiano, riottenendo la solita nozione di completezza $\sum_n \phi_n(x)\phi_n^*(y) = \delta(x-y)$.

Il prodotto interno CPT è indipendente dal percorso di integrazione C scelto, finché questo rimane interno ai cunei di Stokes associati alle condizioni al contorno. La caratteristica più peculiare delle nuove teorie quantistiche associate alla non Hermitianità sta nel poter costruire un prodotto interno che delinei norme definite positive mantenendo l'indipendenza dal percorso, proprietà non riscontrabile nella meccanica quantistica ordinaria. Infatti, il prodotto interno Hermitiano ha la forma (4.1) e il cammino di integrazione deve essere scelto lungo l'asse reale, senza poter essere deformato nel piano complesso, per via della non analiticità della funzione integranda.

4.3 Operatore C

Come già commentato, la peculiarità maggiore della meccanica quantistica \mathcal{PT} simmetrica sta nell'operatore \mathcal{C} , che risulta distinto da \mathcal{P} solamente se si lavora con Hamiltoniane non Hermitiane. Tuttavia, è formalmente definito come una serie infinita (4.20) e richiede la conoscenza di tutte le autofunzioni $\phi_n(x)$ di H, pertanto può essere piuttosto complicato da calcolare.

Il primo tentativo di risoluzione di questo problema è stato un approccio perturbativo [17]. In tale articolo è stata considerata l'Hamiltoniana \mathcal{PT} simmetrica:

$$H = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\hat{x}^2 + i\lambda\hat{x}^3 \tag{4.44}$$

dove λ è un parametro reale sufficientemente piccolo da rendere il terzo termine trattabile com una correzione perturbativa dell'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico, le cui autofunzioni possono essere calcolate esattamente. Vista la possibilità di esprimere le autofunzioni di H come serie perturbative di λ , per ognuna di essere sono stati calcolati i primi termini e poi sostituiti nella (4.20). Nonostante i calcoli fossero tediosi e la soluzione complicata, è stato notato che esprimendo C nella forma $C = e^{\mathcal{Q}}\mathcal{P}$, la soluzione nello spazio delle coordinate si semplifica drasticamente. Osservando che $\langle x | \mathcal{P} | y \rangle = \delta(x + y)$:

$$\langle x|\mathcal{C}|y\rangle = \exp\left[\mathcal{Q}(x, -i\frac{d}{dx})\right]\delta(x+y)$$
(4.45)

che risulta una semplificazione poiché Q è una serie delle sole potenze dispari di λ e nel limite in cui $\lambda \to 0$ si riottiene l'uguaglianza $C = \mathcal{P}$. Chiaramente, la sostituzione non è da intendersi valida solo nello spazio delle coordinate, infatti in generale si può scrivere:

$$\mathcal{C} = e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}\mathcal{P} \tag{4.46}$$

Mostriamo dunque come calcolare C per l'Hamiltoniana (4.44), utilizzando le sue tre proprietà algebriche più importanti, che sono già state introdotte nel corso di questo capitolo:

• \mathcal{C} commuta con l'operatore di inversione spazio-temporale:

$$[\mathcal{C}, \mathcal{PT}] = 0 \tag{4.47}$$

nonostante in generale non lo faccia con \mathcal{T} o \mathcal{P} separatamente. Da questa prima condizione, considerando \mathcal{C} nella forma (4.46) e ricordando che la commutazione implica l'invarianza rispetto alla trasformazione con cui \mathcal{C} commuta:

$$e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})} = \mathcal{PT}e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}\mathcal{PT} = e^{\mathcal{Q}(-\hat{x},\hat{p})}$$
(4.48)

dalla quale otteniamo che \mathcal{Q} è una funzione pari in \hat{x} .

• Il quadrato di \mathcal{C} corrisponde all'identità:

$$\mathcal{C}^2 = \hat{1} \tag{4.49}$$

che ci permette di interpretarlo come un operatore di riflessione. Sostituendo si ottiene:

$$e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}\mathcal{P}e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}\mathcal{P} = e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}e^{\mathcal{Q}(-\hat{x},-\hat{p})} = 1$$

$$(4.50)$$

dalla quale concludiamo che $\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p}) = -\mathcal{Q}(-\hat{x}, -\hat{p})$. Siccome la proprietà precedente ha illustrato che \mathcal{Q} è una funzione pari in \hat{x} , allora dovrà essere dispari in \hat{p} .

• \mathcal{C} commuta con l'Hamiltoniana:

$$[\mathcal{C}, H] = 0 \tag{4.51}$$

Mentre le prime due condizioni sono di natura *cinematica*, imposte su Q e sono in generale vere per ogni Hamiltoniana, è la terza condizione a definire in maniera specifica C. Ad inizio capitolo abbiamo discusso come lo spazio di Hilbert in cui la teoria è definita dipenda dall'Hamiltoniana del sistema, proprietà che abbiamo nominato **determinazione dinamica**. Questa condizione risulta quindi quella che caratterizza le proprietà dello spazio di Hilbert (e quindi del prodotto interno) in funzione dell'Hamiltoniana. Sostituendo si ottiene:

$$e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})}[\mathcal{P},H] + [e^{\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p})},H]\mathcal{P} = 0$$

$$(4.52)$$

dove abbiamo utilizzato la proprietà di antisimmetria delle parentesi di Lie. Quest'equazione è in generale difficile da risolvere, ed è qui che entrano in gioco i metodi perturbativi a cui abbiamo accennato in precedenza, che verranno studiati nel prossimo paragrafo.

4.3.1 Calcolo Perturbativo di C

Per risolvere la (4.52) per l'Hamiltoniana (4.44), esprimiamo quest'ultima nella forma: $H = H_0 + \lambda H'$. H_0 non è altro che l'Hamiltoniana dell'oscillatore armonico $H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2}$, che commuta con \mathcal{P} ; $H' = ix^3$ anticommuta con \mathcal{P} . La condizione (4.52) diventa:

$$\{\mathcal{P}, H'\} = 0 \rightarrow H'\mathcal{P} = -\mathcal{P}H'$$

$$[\mathcal{P}, H'] = -2H'\mathcal{P}$$
che fornisce
$$e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}[\mathcal{P}, H_0 + \lambda H'] + [e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}, H]\mathcal{P} = 0$$

$$\lambda e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}[\mathcal{P}, H'] + [e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}, H]\mathcal{P} = 0$$

$$2\lambda e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}H' = [e^{\mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})}, H].$$
(4.53)

A questo punto possiamo espandere \mathcal{Q} come serie perturbativa di potenze dispari di λ :

$$\mathcal{Q}(\hat{x},\hat{p}) = \lambda \mathcal{Q}_1(\hat{x},\hat{p}) + \lambda^3 \mathcal{Q}_3(\hat{x},\hat{p}) + \lambda^5 \mathcal{Q}_5(\hat{x},\hat{p}) + \dots$$
(4.54)

dove le $Q_n(\hat{x}, \hat{p})$ (n = 1, 3, 5, ...) sono soggette ai vincoli (4.47) e (4.48). Sostituendo quest'espansione al posto dell'esponenziale, dopo alcuni passaggi algebrici, si ottiene un sistema di equazioni con $Q_n(\hat{x}, \hat{p})$ come variabili. Per i primi tre valori di n si ottengono i seguenti risultati:

$$[H_0, Q_1] = -2H',$$

$$[H_0, Q_3] = -\frac{1}{6}[Q_1, [Q_1, H']],$$

$$[H_0, Q_5] = \frac{1}{360}[Q_1, [Q_1, [Q_1, [Q_1, H']]]] - \frac{1}{6}[Q_1, [Q_3, H']] + \frac{1}{6}[Q_3, [Q_1, H']].$$
(4.55)

Cerchiamo ora di risolvere le (4.55) per l'Hamiltoniana in considerazione (4.44). La procedura utilizzata consiste nel sostituire il termine Q_n con la forma polinomiale più generale possibile, utilizzando coefficienti arbitrari e risolvendo le equazioni in modo da determinarli. Per esempio, per risolvere $[H_0, Q_1] = -2i\hat{x}^3$, prendiamo la forma più generale che Q_1 possa assumere, soggetta ai vincoli di parità rispetto a \hat{x} e disparità rispetto a \hat{p} . Pertanto assumiamo come ansatz per Q_1 il polinomio Hermitiano di terzo grado più generale possibile ma che rispetti i suddetti vincoli:

$$\mathcal{Q}_1(\hat{x}, \hat{p}) = M\hat{p}^3 + N\hat{x}\hat{p}\hat{x}, \qquad (4.56)$$

dove $M \in N$ sono i coefficienti da determinare. La prima delle (4.55) è soddisfatta se $M = -\frac{4}{3} \in N = -2$. Questo procedimento può essere iterato per tutti i valori dell'indice n. Per presentare la soluzione per un generico termine $Q_n(n > 1)$, si introduce la seguente notazione: vengono definite le $S_{m,n}$ che corrispondono a somme simmetrizzate in cui gli

indici m ed n indicano rispettivamente il grado del polinomio in $\hat{p} \in \hat{x}$. Ad esempio:

$$S_{0,0} = 1 \text{ poiché sia } \hat{p} \text{ sia } \hat{x} \text{ sono polinomi di grado } 0$$

$$S_{1,1} = \frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$$

$$S_{1,2} = \frac{1}{3}(\hat{x}^{2}\hat{p} + \hat{x}\hat{p}\hat{x} + \hat{p}\hat{x}^{2})$$
(4.57)

e così via. Vale la pena spendere due parole in più su $S_{1,2}$, infatti la possiamo riscrivere come:

$$\begin{split} S_{1,2} &= \frac{1}{3} (\hat{x} \hat{p} \hat{x} + \{ \hat{x}^2, \hat{p} \}) \\ \text{dove} \quad \{A, B\} = AB + BA \quad \text{è noto come anticommutatore} \\ \text{studiando nello specifico} \quad \{ \hat{x}^2, \hat{p} \} \\ \{ \hat{x}^2, \hat{p} \} &= \hat{x} \hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x} \hat{x} \\ \text{ricordando che} \quad \hat{x} \hat{p} = \hat{p} \hat{x} + i\hbar \\ &= \hat{p} \hat{x} \hat{x} + (\hat{p} \hat{x} + i\hbar) \hat{x} \\ &= \hat{p} \hat{x} \hat{x} + \hat{x} \hat{p} \hat{x} + i\hbar \hat{x} \\ &= (\hat{p} \hat{x} + i\hbar) \hat{x} + \hat{x} \hat{p} \hat{x} \\ &= 2 \hat{x} \hat{p} \hat{x} \end{split}$$
(4.58)

Data questa espressione è immediato riconoscere che Q_1 possa essere scritto in termini di $S_{1,2}$. In generale è possibile scrivere tutti i termini Q_n in funzione delle somme simmetrizzate, motivo per cui queste ultime risultano assai comode. Ad esempio, i primi tre termini dell'espansione perturbativa di Q sono:

$$\mathcal{Q}_{1} = -\frac{4}{3}\hat{p}^{3} - 2S_{1,2},
\mathcal{Q}_{3} = \frac{128}{15}\hat{p}^{5} + \frac{40}{3}S_{3,2} + 8S_{1,4} - 12\hat{p}
\mathcal{Q}_{5} = -\frac{320}{3}\hat{p}^{7} - \frac{544}{3}S_{5,2} - \frac{512}{3}S_{3,4} - 64S_{1,6} + \frac{24736}{45}\hat{p}^{3} + \frac{6368}{15}S_{1,2}$$
(4.59)

che completa la trattazione perturbativa di C per l'Hamiltoniana (4.44).

Ricapitolando, semplicemente utilizzando l'ansatz (4.46), è possibile calcolare C utilizzando la teoria perturbativa. Questo sistema risulta assai vantaggioso perchè non prevede la conoscenza delle autofunzioni \mathcal{PT} normalizzate, le cui espressioni analitiche non sono sempre calcolabili. Inoltre, anche qualora lo fossero, non dover utilizzare la definizione in (4.20) è molto vantaggioso in termini pratici. Metodi su come calcolare C per altri tipi di Hamiltoniane possono essere trovati in [1]. Concludiamo la formulazione teorica riprendendo quanto essenzialmente già detto nel paragrafo (4.2.1) mostrando come l'espressione esponenziale di C possa essere usata per costruire la relazione tra $H \mathcal{PT}$ -simmetrica e un'Hamiltoniana h Hermitiana. Usando infatti la relazione (4.27):

$$h = e^{-\frac{Q}{2}} H e^{\frac{Q}{2}} \tag{4.60}$$

con le due Hamiltoniane che condividono gli stessi autovalori. Per comprenderne a pieno il significato, seguiamo il seguente ragionamento [1]: l'operatore $\mathcal{Q} = \mathcal{Q}(\hat{x}, \hat{p})$ è una funzione Hermitiana delle variabili dinamiche fondamentali della meccanica quantistica. Moltiplicando l'espressione esponenziale di \mathcal{C} per \mathcal{P} si ottiene:

$$\mathcal{CP} = e^{\mathcal{Q}}\mathcal{P}^2 = e^{\mathcal{Q}} \tag{4.61}$$

dove abbiamo usato la nota proprietà $\mathcal{P}^2 = \hat{1}$. Questa relazione dimostra che \mathcal{CP} è un operatore positivo e invertibile.

Procediamo dunque a dimostrare che h è effettivamente Hermitiana, partendo dal coniugato Hermitiano delle (4.60):

$$\begin{split} h^{\dagger} &= e^{\frac{Q}{2}} H^{\dagger} e^{-\frac{Q}{2}} \\ \text{che può essere riscritta come:} \\ h^{\dagger} &= e^{-\frac{Q}{2}} e^{Q} H^{\dagger} e^{-Q} e^{\frac{Q}{2}} \\ \text{sostituendo} \quad e^{Q} &= \mathcal{CP}, \quad e^{-Q} = \mathcal{PC} \\ h^{\dagger} &= e^{-\frac{Q}{2}} \mathcal{CP} H^{\dagger} \mathcal{PC} e^{\frac{Q}{2}} \\ \text{e ricordando che } H \neq \mathcal{P}\text{-pseudo Hermitiana} (H^{\dagger} = \mathcal{PHP}) \\ h^{\dagger} &= e^{-\frac{Q}{2}} \mathcal{CPP} H \mathcal{PPC} e^{\frac{Q}{2}} \\ h^{\dagger} &= e^{-\frac{Q}{2}} \mathcal{CP}^{2} H \mathcal{P}^{2} \mathcal{C} e^{\frac{Q}{2}} = e^{-\frac{Q}{2}} \mathcal{CHC} e^{\frac{Q}{2}} \\ \text{Tuttavia } [H, \mathcal{C}] &= 0 \text{ e dopo averli scambiati, usando } \mathcal{C}^{2} = \hat{1} \\ h^{\dagger} &= e^{-\frac{Q}{2}} H e^{\frac{Q}{2}} = h \quad Q.e.d. \end{split}$$

Tale corrispondenza causa l'insorgere della seguente domanda: c'è differenza fisica tra le Hamiltoniane \mathcal{PT} -simmetriche e quelle ordinarie Hermitiane o descrivono esattamente gli stessi fenomeni fisici? Per rispondere, dobbiamo considerare che la costruzione di hpuò risultare assai difficile nella pratica e talvolta non risulta nemmeno possibile farlo, se non perturbativamente. Inoltre, nello specifico caso della (4.60), H e h sono collegate da una similitudine, non una trasformazione unitaria, pertanto il prodotto interno può non essere conservato. Visto questo stato di cose, in principio è possibile riscontrare differenze tra le due Hamiltoniane semplicemente studiando autovettori che sono ortogonali sono in uno dei due casi.

4.4 Hamiltoniana di un Sistema a Due Livelli

In questa sezione studiamo l'Hamiltoniana di un sistema a due livelli in modo da poter mostrare le caratteristiche più importanti di un'Hamiltoniana \mathcal{PT} simmetrica e illustrare come applicare tutte le tecniche fino ad ora introdotte. Il sistema è costruito seguendo le linee guida delineate in [18] e in [19].

La trasformazione di parità spaziale è descritta dalla (2.21) che richiamiamo:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{4.63}$$

In questo specifico caso, \mathcal{P} agisce scambiando i due stati del sistema. L'Hamiltoniana 2x2, che chiamiamo H, viene costruita imponendo che rispetti la (1.13) e, per farlo, è necessario che contenga 4 parametri reali r > 0, $0 < \theta < \pi$, $k_1 \in k_2$. Richiedendo per semplicità che $k_1 = k_2 = k$, possiamo scrivere H come:

$$H = \begin{pmatrix} re^{i\theta} & k\\ k & re^{-i\theta} \end{pmatrix}$$
(4.64)

L'Hamiltoniana appena costruita non è Hermitiana $(H \neq H^{\dagger})$, ma è semplice mostrare che è \mathcal{PT} simmetrica, dove l'operatore parità corrisponde alla matrice σ_x di Pauli, come mostrato nell'esemplo (2.2.1). \mathcal{T} corrisponde all'operatore di coniugazione complessa. Per calcolarne gli autovalori utilizziamo l'eq. (2.1), che risolta fornisce i due autovalori dell'energia:

$$E_{\pm} = r\cos(\theta) \pm \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)} \tag{4.65}$$

Da queste soluzioni è facile osservare che quando $k^2 > r^2 \sin(\theta)$ allora gli autovalori sono reali e la simmetria è inviolata. Nell'altro caso, gli autovalori sono complessi e la simmetria incontra una regione di rottura. I punti in cui $k = r \sin(\theta)$ sono i punti di transizione tra una regione e l'altra, che abbiamo definito come punti eccezionali del sistema, in cui i due autovalori coincidono $E_+ = E_- = r \cos(\theta)$.)



(a) E_{\pm} in regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata



(b) E_{\pm} in entrambe le regioni, stessi valori di $r \in \theta$



(c) E_{\pm} in regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata

(d) E_{\pm} in entrambe le regioni, stessi valori di $r \in \theta$

Figura 4.1: (a) Andamento degli autovalori per r = 1 e $\theta = \frac{\pi}{4}$ in regione di simmetria inviolata. (b)Andamento degli autovalori per r = $1 e \theta = \frac{\pi}{4}$ in entrambe le regioni. Per $k^2 > r^2 \sin^2(\theta)$ gli autovalori hanno solo componente reale, come atteso dalla teoria, mentre per $k^2 >$ $r^2 \sin^2(\theta)$ hanno solo componente immaginaria. In $k^2 = r^2 \sin^2(\theta)$ i due autovalori coincidono, pertanto quel punto è un Punto Eccezionale. Ragionamenti analoghi possono essere fatti su (c) e (d), in cui è stato variato unicamente l'angolo e posto a $\frac{\pi}{2}$

Prima di poter definire il prodotto interno, è necessario trovare gli autostati associati agli autovalori utilizzando la (2.5). Cominciando da E_+ :

$$\begin{pmatrix} re^{i\theta} - E_+ & k\\ k & re^{-i\theta} - E_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix},$$
(4.66)

sostituendo

$$\begin{pmatrix} re^{i\theta} - (r\cos(\theta) + \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}) & k\\ k & re^{-i\theta} - (r\cos(\theta) + \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix},$$
(4.67)

dove l'elemento (1, 1) può essere calcolato utilizzando l'identità di Eulero $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$:

$$r(\cos(\theta) + i\sin(\theta)) - (r\cos(\theta) + \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}) =$$

= $ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}$ (4.68)

e l'elemento (2,2) invece risulta:

$$r(\cos(\theta) - i\sin(\theta)) - (r\cos(\theta) + \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}) =$$

= $-ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}$ (4.69)

 ${\cal H}$ può essere dunque riscritta come:

$$\begin{pmatrix} ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)} & k\\ k & -ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{k} [ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}] & 1\\ 1 & \frac{1}{k} [-ir\sin(\theta) - \sqrt{k^2 - r^2\sin^2(\theta)}] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{ir}{k}\sin(\theta) - \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)} & 1\\ 1 & -\frac{ir}{k}\sin(\theta) - \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(4.70)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{ir}{k}\sin(\theta) - \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)} \\ \frac{ir}{k}\sin(\theta) - \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{ir}{k}\sin(\theta) - \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -e^{i\alpha} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

dove sono stati usati l'algoritmo di Gauss, la formula di Eulero e l'equazione trigonometrica $\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1$, in modo da definire $\cos(\alpha) = \frac{r}{k}\cos(\theta) = \sqrt{1 - \frac{r^2}{k^2}\sin^2(\theta)}$. L'autostato è dunque dato da:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1\\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \tag{4.71}$$

Applicando un procedimento del tutto analogo a quello appena mostrato per il secondo autovalore, E-, otteniamo il secondo autostato:

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} 1\\ -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \tag{4.72}$$

Bisogna a questo punto sottolineare come quanto detto sui punti eccezionali sia pienamente confermato da questo esempio. Gli autovettori in questo punto infatti si fondono in un unico autostato:

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} 1\\-i \end{pmatrix} \tag{4.73}$$

che genera un autospazio monodimensionale e che corrisponde al caso in cui $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Dopo aver ottenuto gli autostati:

$$|\pm\rangle = \begin{pmatrix} 1\\ \pm e^{\mp i\alpha} \end{pmatrix} \tag{4.74}$$

procediamo a normalizzarli mediante la (4.17)

$$\phi_n(x) = e^{\pm i\frac{\alpha}{2}}\psi_n(x) \tag{4.75}$$

in modo da ottenere una base ortonormale che risulta:

$$|\epsilon_{+}\rangle = e^{i\frac{\alpha}{2}} \begin{pmatrix} 1\\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2\cos(\alpha)}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}}\\ e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$
$$|\epsilon_{-}\rangle = e^{-i\frac{\alpha}{2}} \begin{pmatrix} 1\\ -e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2\cos(\alpha)}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}}\\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}.$$
(4.76)

La costante di normalizzazione è ottenuta tramite la relazione (2.16) tra gli autovettori sinistri e destri. Infatti:

$$A^{2} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 1$$

$$\rightarrow A^{2}(c) = 1$$

$$2A^{2} \cos(\alpha) = 1$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\cos(\alpha)}}$$

(4.77)

A questo punto abbiamo ottenuto tutti gli elementi necessari per costruire il prodotto interno \mathcal{PT} , che costruiamo richiedendo che:

$$\langle \epsilon_+ | \epsilon_- \rangle = \langle \mathcal{PT} \epsilon_+ | \epsilon_- \rangle \tag{4.78}$$

Come già mostrato nell'arco della discussione sull'accettabilità del prodotto interno \mathcal{PT} , questo non risulta definito positivo; risulta tuttavia istruttivo mostrare che anche questo caso presenta la stessa problematica.

$$\langle \epsilon_{-} | \epsilon_{-} \rangle = \langle \mathcal{PT} \epsilon_{-} | \epsilon_{-} \rangle =$$

$$= \left(\frac{1}{\sqrt{2\cos(\alpha)}} \right)^{2} \left(-i * i \right) \left(-e^{-i\frac{\alpha}{2}} e^{i\frac{\alpha}{2}} \right) \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} =$$

$$= -\frac{1}{2\cos(\alpha)} \left(e^{-i\alpha} + e^{i\alpha} \right) = -1$$

$$(4.79)$$

La norma di ϵ_+ è invece positiva $\langle \mathcal{PT}\epsilon_+|\epsilon_+\rangle = 1$, come si può mostrare utilizzando un procedimento analogo a quello usato per la norma di ϵ_- . Infine, questo prodotto garantisce l'ortogonalità tra i due stati, infatti $\langle \mathcal{PT}\epsilon_+|\epsilon_-\rangle = 0$.

Come predetto dalla teoria, la positività della norma non è in generale garantita, pertanto risulta necessario costruire l'operatore C. Una discussione generale sulle ragioni per cui C viene introdotto e sulle sue proprietà è già stata affrontata nel paragrafo (4.1.1); una discussione ulteriore sui metodi generali con cui viene costruito sarà invece affrontata in seguito. Tuttavia, in questo specifico caso, non è difficile costruirlo e può essere fatto partendo dalla definizione dell'operatore stesso:

$$\mathcal{C}(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y)$$
(4.80)

Nel caso specifico del sistema a due livelli si ha:

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \frac{1}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} \\ e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} \\ e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} + \frac{i^2}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 1 \\ 1 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} + \frac{1}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha} & 1 \\ 1 & -e^{i\alpha} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} & 2 \\ 2 & e^{-i\alpha} - e^{i\alpha} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} 2i\sin(\alpha) & 2 \\ 2 & -2i\sin(\alpha) \end{pmatrix} \end{aligned}$$
(4.81)
$$\mathcal{C} &= \frac{1}{\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} i\sin(\alpha) & 1 \\ 1 & -i\sin(\alpha) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Tramite calcolo diretto si può mostrare che C corrisponde a:

$$\mathcal{C} = |\epsilon_+\rangle \langle \epsilon_+| - |\epsilon_-\rangle \langle \epsilon_-| \tag{4.82}$$

che rappresenta il caso a due stati della (4.20).

Una volta terminata la costruzione di questo operatore, non rimane che mostrare le sue due più importanti proprietà: $C^2 = \hat{1}$ e la positività della norma rispetto al prodotto CPT. Procedendo in ordine:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^2 &= \frac{1}{\cos(\alpha)^2} \begin{pmatrix} i\sin(\alpha) & 1\\ 1 & -i\sin(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\sin(\alpha) & 1\\ 1 & -i\sin(\alpha) \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\cos(\alpha)^2} \begin{pmatrix} i^2\sin(\alpha)^2 + 1 & i\sin(\alpha) - i\sin(\alpha)\\ i\sin(\alpha) - i\sin(\alpha) & i^2\sin(\alpha)^2 + 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\cos(\alpha)^2} \begin{pmatrix} -\sin(\alpha)^2 + 1 & 0\\ 0 & -\sin(\alpha)^2 + 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\cos(\alpha)^2} \begin{pmatrix} \cos(\alpha)^2 & 0\\ 0 & \cos(\alpha)^2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$
(4.83)

e la prima delle due proprietà risulta dimostrata. Inoltre, da questo si ricava immediatamente che:

$$\mathcal{C}|\epsilon_{\pm}\rangle = \pm|\epsilon_{\pm}\rangle.\tag{4.84}$$

che fornisce un'ulteriore conferma della correttezza dell'espressione di C. Per quanto riguarda la seconda affermazione, bisogna sottolineare il fatto che la positività della norma \mathcal{PT} garantisce anche la positività della norma \mathcal{CPT} per via della (4.21). Pertanto non è necessario ricalcolare $\langle \epsilon_+ | \epsilon_+ \rangle_{C\mathcal{PT}}$, che sappiamo già essere uguale ad 1. Di maggiore interessa risulta invece dimostrare che l'operatore appena costruito faccia in modo che la norma di ϵ_- cambi di segno, ossia $\langle \epsilon_- | \epsilon_- \rangle_{C\mathcal{PT}} = -\langle \epsilon_- | \epsilon_- \rangle_{\mathcal{PT}} = 1$. Procedendo con i calcoli:

$$\langle \mathcal{CPT}\epsilon_{-}| = \frac{1}{\cos(\alpha)} \frac{1}{\sqrt{2\cos(\alpha)}} \begin{pmatrix} i\sin(\alpha) & 1\\ 1 & -i\sin(\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{\alpha}{2}}\\ e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$
$$= \frac{1}{\cos(\alpha)} \frac{1}{\sqrt{2\cos(\alpha)}} \left(-i\sin(\alpha)e^{-i\frac{\alpha}{2}} + e^{i\frac{\alpha}{2}} & -e^{-i\frac{\alpha}{2}} - i\sin(\alpha)e^{i\frac{\alpha}{2}} \right)$$
$$\langle \mathcal{CPT}\epsilon_{-}|\epsilon_{-}\rangle = \frac{\sec(\alpha)^{2}}{2} \left(-i\sin(\alpha)e^{-i\frac{\alpha}{2}} + e^{i\frac{\alpha}{2}}, \quad -e^{-i\frac{\alpha}{2}} - i\sin(\alpha)e^{i\frac{\alpha}{2}} \right) \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}}\\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$
$$= \frac{\sec(\alpha)^{2}}{2} \left(-i\sin(\alpha)e^{-i\alpha} + 1 + 1 - i\sin(\alpha)e^{i\alpha} \right)$$
$$= \frac{\sec(\alpha)^{2}}{2} \left(-i\sin(\alpha)(e^{-i\alpha} - e^{i\alpha}) + 2 \right)$$
$$= \frac{\sec(\alpha)^{2}}{2} \left(2 - 2\sin(\alpha)^{2} \right) = \frac{\sec(\alpha)^{2}}{2} 2\cos(\alpha)^{2} = 1$$

che dimostra la positività anche della norma di ϵ_- . L'ortogonalità tra i due stati non è stata alterata in nessun passaggio, perciò $\langle CPT \epsilon_+ | \epsilon_- \rangle = 0$.

4.5 Applicazioni delle Hamiltoniane \mathcal{PT} - simmetriche in meccanica quantistica

Nonostante le proprietà delle Hamiltoniane non-Hermitiane \mathcal{PT} simmetriche siano già state riconosciute da diversi autori, non è del tutto chiaro se possano descrivere fenomeni osservabili sperimentalmente. Questo per via della relazione intrinseca delle due teorie che, come abbiamo ampiamente discusso, fa sì che le quantità misurabili siano le stesse e rende le teorie fisiche indistinguibili da misure fisiche. Di recente l'attenzione si è rivolta verso interazioni di sistemi governati sia da Hamiltoniane Hermitiane sia non-Hermitiane, con studi di scattering da potenziali \mathcal{PT} -simmetrici [20], accoppiamento tra i due tipi di Hamiltoniane [21] ed proposte di esperimenti [22]. Il comportamento singolare dei punti eccezionali nello spazio dei parametri ha suscitato anch'esso particolare interesse per via degli effetti significativi riscontrabili in numerosi ambiti della fisica come l'ottica, la fisica atomica e molecolare. Nello specifico, la caratteristica più sorprendente dei punti eccezionali risiede nella possibilità di migliorare la sensibilità di determinati sensori al variare dei parametri. Più esplicitamente, nelle vicinanze di un punto eccezionale, la derivata della differenza dei due autovalori rispetto al parametro d'intensità tende

all'infinito, implicando una variazione assai rapida di una certa quantità fisica, da cui un'altissima sensibilità nei pressi degli EPs. È su questa possibilità che si fondano le premesse per l'articolo che analizziamo di seguito.

4.5.1 Ione intrappolato e classificazione sperimentale dei punti critici

In questa sezione esponiamo i risultati ottenuti in [23]. Tale lavoro si prefigge lo scopo di determinare sperimentalmente la posizione dei punti eccezionali, a cui ci riferiremo anche come EPs, e fornire un metodo unificato per estrarre gli autovalori, in maniera indipendentemente dalla regione che si sta studiando. Ricordiamo infatti che questi sono punti in cui avviene una "strana" transizione di fase, ossia da una regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata a una invece in cui la simmetria è "rotta" (o viceversa).

Come sottolineato dagli autori stessi, gli EPs potrebbero avere la capacità di migliorare drasticamente la metrologia e rilevamento quantistici (dall'inglese quantum metrology/sensing), e avere un metodo unificato per la loro individuazione fornirebbe uno strumento utile per la realizzazione di apparati di precisione. In particolare, il quantum sensing è una branca della fisica che si occupa della misura di una determinata quantità mediante l'uso di un sistema o fenomeni quantistici. Per realizzare la classe di Hamiltoniane non-Hermitiane \mathcal{PT} -simmetriche vengono utilizzati 4 livelli di Zeeman di un singolo ione intrappolato Yb^{+1} tramite processi dissipativi.



Figura 4.2: Apparato sperimentale e livelli energetici dello ione Yb⁺. Figura riprodotta da [23].

Apparato sperimentale: Per la realizzazione di tale esperimento viene utilizzato

¹Una particella carica, come uno ione, risente di una forza dovuta all'interazione con il campo elettrostatico; pertanto, per via del teorema di Earnshaw, non è possibile confinare uno ione in un campo elettrostatico. La **trappola ionica** [24] è una combinazione di campi elettrici e magnetici che permette di ovviare a questo problema, tramite l'utilizzo di combinazioni di campi elettrici e magnetici (come la trappola di Penning) oppure campi elettrici oscillanti (come la trappola di Paul).

un qubit ² descritto da un'Hamiltoniana non-Hermitiana \mathcal{PT} -simmetrica :

$$\hat{H}_{\mathcal{PT}} = J\hat{\sigma}_x + i\Gamma\hat{\sigma}_z$$

$$\hat{\sigma}_x \equiv |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow|, \quad \hat{\sigma}_z \equiv |\downarrow\rangle\langle\downarrow| - |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$$
(4.86)

sono gli operatori di Pauli e il termine "non-Hermitiano" è associato a processi dissipativi. L'evoluzione temporale di un generico vettore di stato $|\psi(t)\rangle$ soddisfa l'equazione di Schrödinger:

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_{\mathcal{PT}}|\psi(t)\rangle \tag{4.87}$$

Lo stato $|\psi(t)\rangle$ può essere mappato in $|\Psi(t)\rangle = e^{-\Gamma t}|\psi(t)\rangle$ e, affinché la nuova funzione di stato obbedisca all'equazione di Schrödinger, l'Hamiltoniana $\hat{H}_{\mathcal{PT}}$ viene mappata in un'altra Hamiltoniana $\hat{H}'_{\mathcal{PT}}$ tramite

$$\hat{H}'_{\mathcal{P}\mathcal{T}} = \hat{H}_{\mathcal{P}\mathcal{T}} - i\Gamma\hat{1} \tag{4.88}$$

dove $\hat{1} \equiv |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$ è l'operatore identità. Questa trasformazione è di particolare interesse perché è possibile studiare la prima Hamiltoniana tramite la seconda eseguendo un semplice riscalamento per un fattore $e^{-\Gamma t}$. Inoltre $\hat{H}'_{\mathcal{PT}}$, come verrà illustrato a breve, è relativamente semplice da realizzare sperimentalmente.

Una trattazione completa dell'apparato sperimentale, così come una formulazione teorica più dettagliata dei processi in gioco, possono essere trovate nel materiale supplementare dell'articolo stesso. Illustrando a grandi linee i concetti necessari a comprendere l'importanza del lavoro svolto, cominciamo comprendendo che $\hat{H}'_{\mathcal{PT}}$ è realizzata tramite un sistema dissipativo a singolo qubit, dove gli stati $|\downarrow\rangle e |\uparrow\rangle$ corrispondono rispettivamente agli stati iperfini ³ $|F = 0, m = 0\rangle$ e $|F = 1, m = 0\rangle$ nello stato fondamentale ²S_{1/2} del ¹⁷¹Yb⁺, con uno splitting iperfine pari a $\omega_{HF} = 12.6 \ GHz$ (Fig. 4.2). Tramite l'utilizzo

²Un **qubit** o **quantum bit** [25] è la versione quantistica di un classico bit, realizzato da un sistema a due stati. Esempi includono lo spin dell'elettrone, nel quali i due stati vengono rappresentati dallo spin up (generalmente indicato come $|\uparrow\rangle$) e dallo spin down ($|\downarrow\rangle$); oppure la polarizzazione di un singolo fotone in cui i due stati sono rappresentati rispettivamente dalla polarizzazione verticale e orizzontale. La differenza principale tra un qubit e un bit è data dal principio di sovrapposizione. Un bit può trovarsi unicamente nello stato 0 o nello stato 1; mentre il qubit deve essere descritto come combinazione lineare dei suoi due stati, in accordo con i postulati della meccanica quantistica.

³Esperimenti di alta precisione nella fisica atomica mostrano l'esistenza di piccoli effetti sui livelli energetici degli elettroni che non possono essere spiegati se si assume il nucleo come una carica puntiforme infinitamente massiva (approssimazione ampiamente utilizzata nell'ambito di atomi e molecole) [26]. Tali effetti vengono chiamati **effetti iperfini** e sono classificabili in due diverse categorie. Della prima fanno parte gli effetti che causano uno splitting nei livelli energetici degli elettroni, chiamati **effetti di struttura iperfine**; mentre alla seconda appartengono gli *slittamenti degli isotopi*, ossia piccole traslazioni nei livelli energetici, senza però causare splitting. Questi effetti sono causati dai *momenti di multipolo elettromagnetici* (di ordine superiore al monopolo elettrico) del nucleo che possono interagire con il campo elettromagnetico prodotto. Utilizzando considerazioni generali di simmetria può essere mostrato che il numeri di multipoli nucleari è piuttosto ridotto. Infatti, gli unici con un contributo non nullo risultano essere il momento di dipolo magnetico e di quadripolo elettrico.

di microonde questi due stati vengono accoppiati. Un fascio debole, contenente solo componenti π -polarizzate (per assicurarsi che le regole di selezione impediscano eccitazioni dagli stati $|F = 1, m = \pm 1\rangle$), viene inviato sullo ione in modo da eccitare lo ione dallo stato $|\uparrow\rangle$ a ${}^{2}P_{1/2}$. Tale stato eccitato può puoi decadere in tutti gli stati di Zeeman del livello ${}^{2}S_{1/2}$ emettendo fotoni polarizzati π o σ_{\pm} , causando la perdita di uno stato $|\uparrow\rangle$ con un rateo di 4Γ .

Inviando il solo fascio debole viene misurato il tasso di dissipazione Γ (un tipico set di dati può essere trovato in [23]). Applicando invece contemporaneamente il fascio dissipativo e l'accoppiamento ω_{HF} si realizza l'Hamiltoniana $\hat{H}'_{\mathcal{PT}}$, che viene studiata al posto di $\hat{H}_{\mathcal{PT}}$.

Transizione di fase: L'evoluzione di un singolo qubit può sempre essere espressa come una rotazione su una sfera di Bloch ⁴, dove gli autovalori dell'Hamiltoniana sono interpretabili come gli assi di rotazione e gli autovalori come le velocità di rotazione. In realtà, questa analogia è valida solo finché ci si trova in una regione di simmetria \mathcal{PT} inviolata. Infatti, qualora avvenisse la transizione nell'altra regione, gli autovalori avrebbero componente complessa e non sarebbero più interpretabili come velocità di rotazione. A differenza di precedenti esperimenti, in cui le due diverse regioni venivano trattate con metodologie differenti, nell'esperimento [23] vengono applicate metodologie basate sulla tomografia quantistica ⁵. Tramite tale processo è possibile misurare gli autovalori anche

⁴Data una base ortonormale, ogni stato $|\psi\rangle$ può essere espresso nella forma

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{4.89}$$

dove α, β sono numeri complessi e sono ampiezze di probabilità, in accordo con l'interpretazione di Born. Sembrerebbe pertanto che vi siano 4 gradi di libertà (4 numeri reali servono a descriverne 2 complessi). Tuttavia, solo la fase relativa tra i coefficienti ha significato fisico, in quanto la fase di un sistema quantistico non è direttamente misurabile; c'è dunque una ridondanza nella descrizione del sistema. Possiamo assumere $\beta \in \mathbb{R}^+$, in modo da ridurre di uno i gradi di libertà del sistema. Inoltre, In accordo con il secondo assioma della probabilità, la somma delle probabilità di tutti i possibili risultati deve essere uguale a 1. Possiamo dunque scrivere:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{4.90}$$

In seguito a queste assunzioni e dopo opportuni cambi di variabile, $|\psi\rangle$ può essere espressa nella forma:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \quad \text{dove} \quad 0 \le \theta \le \pi, \quad 0 \le \phi \le 2\pi \tag{4.91}$$

I parametri $\theta \in \phi$ sono facilmente interpretabili come la latitudine rispetto all'asse-x e la colatitudine rispetto all'asse z, da cui il motivo per cui il sistema a due stati può essere descritto in maniera ottimale da una sfera in \mathbb{R}^3 , chiamata **sfera di Bloch** [27], i cui poli sono $|0\rangle \in |1\rangle$.

⁵Con tomografia quantistica [28] si intende il processo grazie al quale uno stato quantistico viene ricostruito utilizzato misure su un insieme di sistemi quantistici identici. Viene di solito applicata per determinare lo stato quantistico dell'output di un sistema sorgente. A differenza di una misura su un singolo sistema, che può solo determinare lo stato del sistema a seguito della misurazione (quindi a seguito del collasso della funzione d'onda), la tomografia quantistica serve a determinare lo stato precedente alle misurazioni. Chiaramente affinché questo processo sia possibile, è necessario che gli
attraverso la transizione \mathcal{PT} , utilizzando un metodo unico per le due regioni. Per farlo vengono definite due quantità:

$$P_{J}(t) = |\langle \uparrow | \exp\left(-i\hat{H}_{\mathcal{PT}}^{\prime}t\right)| \downarrow \rangle|^{2} = \frac{J^{2}}{J^{2} - \Gamma^{2}}\sin^{2}(t\sqrt{J^{2} - \Gamma^{2}})$$

$$P_{\Gamma}(t) = |\frac{\langle \uparrow | - \langle \downarrow |}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\hat{H}_{\mathcal{PT}}^{\prime}t\right)\frac{\langle \uparrow | + \langle \downarrow |}{\sqrt{2}}|^{2} = \frac{\Gamma^{2}}{J^{2} - \Gamma^{2}}\sin^{2}(t\sqrt{J^{2} - \Gamma^{2}})$$

$$(4.92)$$

che possono essere ottenute tramite misurazioni dirette della popolazione dei due stati. Il segno della differenza dei due stati fornisce informazioni sulla regione che si sta esplorando (Fig. 4.3), infatti $P_J(t) - P_{\Gamma}(t)$ è positivo (negativo) nella regione di simmetria inviolata (violata).



Figura 4.3: (a) Determinazione dei Punti Eccezionali tramite l'intersezione di $P_J(t)$ (in nero) e di $P_{\Gamma}(t)$ (in grigio). (b) Calcolo dell'arcoseno del modulo della differenza $P_J(t) - P_{\Gamma}(t)$ in una regione di rottura della simmetria. La differenza è indicata in nero, l'arcoseno in grigio. Da quest'ultimo è evidente una corrispondenza lineare rispetto al tempo, in cui il gradiente non è altro che un autovalore. Figura adattata da [23].

Procediamo a mostrare i risultati ottenuti, ricordando ulteriormente che gli eventuali grafici e risultati si trovano nell'articolo originale dell'esperimento [23]. Gli autovalori valgono $E = \pm \sqrt{J^2 - \Gamma^2}$ quindi, teoricamente, gli EPs dovrebbero essere situati a $J = \Gamma$. Sperimentalmente, il sistema viene preparato in modo da esplorare diversi valori del rapporto relativo tra accoppiamento e dissipamento $\frac{J}{\Gamma}$ (Fig. 4.3), mentre il tempo di evoluzione è fissato a $t = \frac{1}{J}$. La posizione degli EPs è stata trovata calcolando l'intersezione di due curve di interpolazione ed è in ottimo accordo con le previsioni teoriche, esattamente come lo sono gli autovalori.

Passando allo studio della dinamica di tale sistema quantistico, si presta particolare attenzione alle informazioni sulla transizione di fase, definendo la matrice di densità : $\rho = |\psi_0(t)\rangle\langle\psi_0(t)|$, dove $|\psi_0(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_{\mathcal{P}\mathcal{T}}t}|\downarrow\rangle$. L'elemento di matrice è definito come:

operatori formino una base nello spazio di Hilbert in cui il sistema opera, in modo da fornire tutte le informazioni necessarie.

 $\rho_{m,n} = \langle m | \rho | n \rangle$. Gli elementi diagonali rappresentano la popolazione dello stato, mentre gli elementi antidiagonali rappresentano la coerenza quantistica. Chiaramente, nella regione \mathcal{PT} -simmetrica gli autovalori sono reali e gli elementi diagonali e antidiagonali presentano oscillazioni limitate. Man mano che ci avvicina ai punti eccezionali (autovalori $\rightarrow 0$) si osserva la fusione degli autovettori e il sistema transita in una regione di simmetria violata, in cui gli elementi diagonali e antidiagonali presentano una crescita esponenziale rispetto al tempo. Utilizzando le tecniche della tomografia quantistica vengono misurati le matrici di densità per due valori di $\frac{J}{\Gamma}$, che sono in ottimo accordo con i calcoli teorici, a prova della correttezza delle tecniche sperimentali usate.

Sistema di Floquet: Per saggiare ulteriormente la bontà dell'apparato sperimentale, invece che utilizzare un accoppiamento costante ω_{HF} , ne viene utilizzato uno che varia in maniera cosinusoidale tra $0 e 2\Gamma$ ad una frequenza ω . L'Hamiltoniana istantanea associata a questo nuovo sistema diventa:

$$\hat{H}_{\mathcal{PT}} = J[1 + \cos(\omega t)]\hat{\sigma}_x + i\Gamma\hat{\sigma}_z.$$
(4.93)

Utilizzando il metodo di Floquet è possibile definire un'Hamiltoniana effettiva:

$$\hat{H}_{eff} = \frac{i}{T} \log \left(\mathcal{T} e^{-i \int_0^T \hat{H}_{\mathcal{P}\mathcal{T}} dt} \right)$$
(4.94)

dove T rappresenta un periodo di oscillazione. Come dimostrato nei supplementi all'articolo, un'Hamiltoniana con parità temporale positiva, all'interno di un dato intervallo, ha un'Hamiltoniana effettiva associata che è \mathcal{PT} -simmetrica ed esprimibile come $\hat{H}_{eff} = J_{eff}\hat{\sigma}_x + i\Gamma_{eff}\hat{\sigma}_z$, dove i parametri J_{eff} e Γ_{eff} dipendono dalla frequenza ω . Lavorando nella regione in cui $\frac{J_{eff}}{\Gamma_{eff}} > 1$, ci si assicura che l'Hamiltoniana rimanga in fase \mathcal{PT} -simmetrica per la maggior parte del tempo, all'interno di un certo periodo di oscillazione. Aumentando ω oltre una certa soglia critica, il sistema esperisce la transizione di fase \mathcal{PT} , mostrando una differenza nel comportamento assai meno drastica rispetto al caso statico (vedi Fig. 4.4). Come sottolineato e dimostrato dagli autori, il metodo da loro sviluppato può essere applicato a casi con dipendenze temporali del tutto generali, ad esempio introducendo una dipendenza temporale anche nel termine dissipativo. Tramite grafici che rappresentano le diverse regioni della simmetria \mathcal{PT} si può ottenere la posizione dei punti eccezionali e stabilire che, nel limite in cui $\Gamma \to 0$, i punti di rottura della simmetria siano spiegabili tramite i processi di risonanza dei multifotoni.



Figura 4.4: (a) Evoluzione temporale della popolazione dello stato $|\downarrow\rangle$ (in nero) $e |\uparrow\rangle$ (in grigio) determinata dall'Hamiltoniana (4.93) per un valore di $\frac{J}{\Gamma} = 11.11$ e $\frac{\omega}{J} = 0.84$. Per questi specifici valori il sistema si trova in una regione di simmetria inviolata. (b) Evoluzione delle due popolazioni in una regione di simmetria violata, con i valori $\frac{J}{\Gamma} = 6.25$ e $\frac{\omega}{J} = 1$. È possibile notare come la differenza tra i due scenari non sia drastica quanto nel caso dell'Hamiltoniana statica. Figura adattata da [23].

Conclusioni Nell'esperimento appena descritto è stato preso in considerazione uno ione intrappolato descritto da un'Hamiltoniana 2x2, pertanto i punti eccezionali non possono che essere in corrispondenza della fusione di due soli autovettori. Ragionamenti analoghi possono essere fatti per matrici di dimensione maggiore, i cui punti eccezionali hanno proprietà di miglioramento della sensibilità assai più marcate. Tuttavia, per Hamiltoniane descritte da matrici di dimensione alta, le regioni di simmetria \mathcal{PT} violata diventano assai sottili, rendendo i limiti delle regioni di fase molto più suscettibili ad errori sperimentali.

Gli autori sono riusciti a sviluppare un metodo per determinare la posizione degli EPs senza utilizzare tecniche di fitting; e ad estrarre gli autovalori di qualsiasi regione di fase tramite un'unica matrice di densità, in regime sia statico sia oscillatorio.

4.5.2 Una proposta di esperimento

In questa sezione discutiamo un esperimento proposto in [22] riguardante la possibilità di combinare efficacemente Hamiltoniane Hermitiane e non. Chiaramente un sistema composto di questo tipo sarà caratterizzato dalla presenza di una regione definita dall'Hamiltoniana Hermitiana e una regione \mathcal{PT} -simmetrica. In particolare, una questione ancora aperta riguarda il comportamento lungo i bordi in cui le due regioni si incontrano e su quale sia la probabilità di successo di una tale transizione. In accordo con gli autori dell'articolo sopracitato e con quanto detto sino ad ora, ci sono solo tre diversi scenari che si possono presentare. Chiamando H l'Hamiltoniana non-Hermitiana:

1. Lo spazio di Hilbert nelle due regioni è il medesimo. Non c'è cambio nel prodotto interno, pertanto l'evoluzione definita da H non è unitaria.

- 2. Il prodotto interno cambia sul bordo e le due regioni sono descritte da due spazi di Hilbert differenti. Gli osservabili e il sistema fisico sono gli stessi. La trasformazione è passiva (la posizione del sistema rimane invariata, il cambio avviene nel sistema di coordinate).
- 3. C'è un cambio nello spazio di Hilbert sul bordo. Gli osservabili e il sistema fisico sono gli stessi. La trasformazione è attiva (è il sistema stesso in questo caso a subire la trasformazione, il sistema di riferimento rimane invariato).

Notiamo che ogni opzione corrisponde a uno scenario fisico differente e assumiamo, come fatto in [22], che queste opzioni siano complete, ossia rappresentino tutti i casi che si possono presentare.

Nel primo dei tre casi, un'implementazione sperimentale richiede un delicato bilancio di perdita e guadagno; un sistema che non evolve in maniera unitaria deve essere un sistema aperto, indi avere un certo flusso di informazione con l'ambiente. Negli altri due casi invece il sistema è chiuso per via dell'evoluzione unitaria.

In tutti i casi consideriamo come sistema fisico un generico sistema a due livelli, quindi faremo spesso riferimento ai risultati ottenuti nel paragrafo (4.4). Supponiamo inoltre che al tempo t < 0 il sistema sia descrivibile in termini di uno stato $|\psi\rangle$ appartenente ad uno spazio di Hilbert \mathcal{H} , dotato del prodotto interno Hermitiano. Al tempo t = 0 il sistema entra nella regione \mathcal{PT} -simmetrica, in cui l'evoluzione è determinata dall'Hamiltoniana H, e vi rimane per un tempo t_0 . Le misure sul sistema vengono effettuate in un tempo t > t_0 , momento in cui il sistema è già tornato in un qualche stato in \mathcal{H} e le probabilità sono calcolate nella maniera standard, in accordo con i principi della meccanica quantistica. La domanda fondamentale è dunque come possiamo descrivere l'evoluzione del sistema attraverso questa sequenza e come determinare le probabilità degli esisti della misura. Richiamando l'espressione di \mathcal{C} :

$$C = \frac{1}{\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} i\sin(\alpha) & 1\\ 1 & -i\sin(\alpha) \end{pmatrix}$$
(4.95)

e ricordando che l'operatore di metrica η corrisponde a CPT, possiamo facilmente calcolarlo richiamando l'espressione di P in un sistema 2x2 (2.2.1) e utilizzando la proprietà per cui T agisce come trasposizione e coniugazione. Esplicitamente:

$$\eta = \mathcal{CPT} = \frac{1}{\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} \overline{i\sin(\alpha)} & \frac{1}{-i\sin(\alpha)} \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\cos(\alpha)} \begin{pmatrix} 1 & -i\sin(\alpha)\\ i\sin(\alpha) & 1 \end{pmatrix}.$$
(4.96)

Per $\rho = \eta^{\frac{1}{2}}$ possiamo calcolare l'Hamiltoniana *h* corrispondente:

$$h = \rho H \rho^{-1} = \cos(\alpha) \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$
(4.97)

Analizziamo ora i tre casi nel dettaglio.

Caso 1: un unico spazio di Hilbert

In questo caso specifico, lo spazio di Hilbert usato per descrivere il sistema è unico; nulla di speciale succede al confine. I problemi insorgono per via dell'evoluzione non unitaria, per motivi che vengono meglio compresi procedendo con i calcoli. Consideriamo l'evoluzione di uno stato normalizzato $|\psi\rangle$ in un intervallo di tempo infinitesimale δt :

$$|\psi\rangle \to (I - i\delta tH)|\psi\rangle.$$
 (4.98)

Per via della non unitarietà, la norma non è preservata. Otteniamo infatti:

$$\langle \psi(\delta t) | \psi(\delta t) \rangle = \langle \psi | (I + i\delta t H^{\dagger}) (I - i\delta t H) | \psi \rangle$$

= $I + i\delta t \langle \psi | (H^{\dagger} - H) | \psi \rangle + O(\delta t^2)$ (4.99)

L'operatore $i(H^{\dagger} - H)$ è Hermitiano, in quanto:

$$i(H^{\dagger} - H) = 2\sin\alpha\sigma_z \tag{4.100}$$

dove σ_z è la terza matrice di Pauli. Se consideriamo lo stato $|0\rangle = (1 \ 0)^T$ è immediato verificare che la sua norma, approssimata al primo ordine, dopo l'intervallo δt è più grande di 1. Per questo tipo di stati (lo stato $|0\rangle$ è solo un esempio, non è l'unico) l'interpretazione probabilistica della norma perde di significato, esattamente come il concetto di evoluzione temporale. Notiamo che questo discorso è valido solo per norme che aumentano di valore, se questo diminuisse sarebbe invece perfettamente accettabile. Per risolvere il problema introduciamo l'Hamiltoniana \tilde{H} :

$$\tilde{H} = H - i\sin\alpha I = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & -2i\sin\alpha \end{pmatrix}$$
(4.101)

L'evoluzione generata da \tilde{H} ha una chiara interpretazione fisica: funge da accoppiamento tra gli stato $|0\rangle \in |1\rangle$ assieme ad una perdita dallo stato $|1\rangle$. Dopo un certo tempo t ci sarà una probabilità dipendente dallo stato del sistema che il sistema intero si sia dissipato. Fisicamente, questo sistema può essere realizzato tramite un singolo fotone in una di due guide d'onda, una delle quale è dissipativa. Se il fotone non è assorbito da questa guida d'onda sarà allora soggetto all'evoluzione non unitaria generata da \tilde{H} .

Caso 2: spazi di Hilbert diversi

Il cambio di prodotto interno da una regione ad un'altra corrisponde ad un cambio di sistema di riferimento. In particolare, si passa da una regione in cui gli stati sono descritti da vettori ψ tali che possono essere normalizzati rispetto al prodotto interno hermitiano, ad una regione in cui gli stati sono descritti da vettori $|\psi'\rangle_{\eta}$ e sono normalizzati tramite:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle_{\eta} = \langle \psi' | \eta | \psi' \rangle. \tag{4.102}$$

Il cambio di sistema di riferimento può essere passivo o attivo e analizzeremo i due casi separatamente.

Trasformazione passiva

Cominciamo dal caso passivo introducendo una base ortonormale $\{|a_i\rangle\}$ tale che ogni stato $|\psi\rangle$ possa essere scritto come:

$$|\psi\rangle = \sum_{i} c_i |a_i\rangle, \quad c_i \in \mathbb{C}$$
 (4.103)

Nel passaggio da una regione all'altra non possiamo dare per scontato che $|\psi\rangle$ sia continua, anche perché $\{|a_i\rangle\}$ non sono più ortonormali in \mathcal{H}' . È invece ragionevole richiedere che lo stato fisico sia inalterato, in quanto stiamo considerando una trasformazione passiva. In \mathcal{H}' lo stesso stato fisico è rappresentato da $|\psi'\rangle_{\eta}$ e può essere scritto come:

$$|\psi'\rangle_{\eta} = \sum_{i} c_{i} |a'_{i}\rangle_{\eta} \tag{4.104}$$

dove i coefficienti sono i medesimi per via della loro continuità attraverso il bordo. Come accennato nel paragrafo sugli osservabili, i vettori della base si modificano secondo la $|a'_i\rangle = \rho |a_i\rangle$ (in \mathcal{H}). Quindi:

$$|\psi'\rangle = \sum_{i} c_i \rho^{-1} |a_i\rangle = \rho^{-1} |\psi\rangle.$$
(4.105)

Questa trasformazione è conseguenze della semplice assunzione che lo stato fisico non venga variato nel passaggio da una regione all'altra; l'assunzione contraria comporta solo l'implementazione di condizioni al contorno differenti e che non hanno nulla a che vedere con la simmetria \mathcal{PT} .

Ritornando alla struttura dell'esperimento mentale, lo stato inizia in $|\psi\rangle$, lo stato viene modificato secondo la (4.105) per via della transizione, si evolve sotto H, effettua nuovamente il passaggio attraverso il confine e viene misurato. Questa sequenza di eventi può essere schematizza come segue:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \to |\psi'\rangle &= \rho^{-1} \;\psi\rangle \quad \text{prima transizione} \\ \to e^{-iHt} |\psi'\rangle &= (\rho^{-1} e^{-iht} \rho) \rho^{-1} |\psi\rangle \quad \text{evoluzione in } \mathcal{H}' \\ \to \rho e^{-iHt} |\psi'\rangle &= e^{-iht} |\psi\rangle \quad \text{seconda transizione.} \end{aligned}$$
(4.106)

Pertanto l'interno esperimento può essere simulato semplicemente utilizzando un sistema che si evolve secondo h, che è Hermitiana, e può essere descritto utilizzando i metodi della meccanica quantistica ordinaria e non presenta alcuna caratteristica peculiare misurabile sperimentalmente.

Trasformazione attiva

In alternativa al caso passivo, vogliamo studiare il caso in cui $|\psi\rangle$, piuttosto che essere semplicemente rinominato in $|\psi'\rangle$, subisce una trasformazione effettiva, che chiamiamo ρ . Siccome questa coinvolge un cambio di prodotto interno, l'operatore ρ deve essere

pensato come una trasformazione attiva non-unitaria e può, in generale, essere applicato con una certa probabilità (come discusso in [22]). Lo stato viene modificato:

$$|\psi\rangle \to \frac{\rho|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\rho^{\dagger}\rho|\psi\rangle}} = \rho|\psi'\rangle \quad \text{dove abbiano definito} \quad |\psi'\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\eta|\psi\rangle}} \tag{4.107}$$

e lo interpretiamo come lo stato iniziale in \mathcal{H}' . Il motivo per cui il prodotto interno è stato indicato come quello hermitiano è che stiamo effettivamente lavorando in \mathcal{H} , simulando l'evoluzione in \mathcal{H}' .

A questo punto procediamo evolvendo il sistema sotto h. Per farlo però, dobbiamo dimostrare che la nostra descrizione è identica a quella che si otterrebbe lavorando in \mathcal{H}' su $|\psi'\rangle$. Supponiamo di fare una misura al tempo t nella base $|a_i\rangle$ di \mathcal{H} . La probabilità di ottenere l'i-esimo valore è data da:

$$P(i) = |\langle a_i | \psi(t) \rangle|^2$$

$$= \frac{|\langle a_i | e^{-iht} \rho | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \eta | \psi \rangle}$$

$$= |\langle a_i | e^{-iht} \rho | \psi' \rangle|^2 \quad \text{moltiplicando per} \quad \hat{1} = (\rho \rho^{-1})^{\dagger} \rho \rho^{-1} \qquad (4.108)$$

$$= |\langle a_i | (\rho^{-1})^{\dagger} \rho^{\dagger} \rho \rho^{-1} e^{-iht} \rho | \psi' \rangle|^2$$

$$= |\langle a_i | \eta e^{-iHt} | \psi' \rangle|^2$$

$$= |\langle a_i | \psi(t) \rangle_{\eta}|^2$$

Siccome le $|a'_i\rangle$ definiscono una base ortonormale in \mathcal{H}' rappresentano anche una base in grado di riprodurre le occorrenze delle misure rispetto alla base originale.

 ρ può essere pensata come una mappa unitaria da \mathcal{H} a \mathcal{H}' , se pensato come operatore che agisce in \mathcal{H} non è unitario. Come può essere implementato sperimentalmente questo fenomeno? A seguito di alcune considerazioni che non riportiamo poiché esulano dallo scopo di questa tesi, ma che possono essere trovate nell'articolo originale, un'implementazione dell'intera procedure può essere implementata su un sistema a spin $\frac{1}{2}$ come segue: Lo stato iniziale viene inviato in un dispositivo di Stern-Gerlach con un campo magnetico disomogeneo lungo l'asse y in modo da separare gli autostati $|y_{\pm}\rangle$. La componente $|y_{-}\rangle$ passa attraverso una regione assorbente, in cui ogni sistema dato viene assorbito con una data probabilità. I fasci $|y_{\pm}\rangle$ vengono poi ricombinati attraverso l'uso di un campo magnetico disomogeneo uguale e opposto al primo. Infine, l'Hamiltoniana $h = \rho H \rho^{-1}$ può essere implementata applicando un campo magnetico omogeneo nella direzione x.

Abbiamo concluso la discussione riguardante l'implementazione di un sistema composto da una regione Hermitiana e una \mathcal{PT} simmetrica, esplorando tutti i casi e valutando alcune possibili applicazioni sperimentali, chiarendo inoltre come trattare il problema della transizione da una ragione all'altra.

Conclusioni

Durante lo sviluppo di questa tesi, è stata presentata un'introduzione alle Hamiltoniane quantistiche non-Hermitiane, con particolare enfasi su quelle che presentano la simmetria \mathcal{PT} . Partendo dai fondamenti matematici necessari per una comprensione approfondita di tali argomenti, sono stati esaminati alcuni elementi chiave dell'analisi complessa e delle simmetrie \mathcal{P} e \mathcal{T} , concentrandoci sull'effetto di tali simmetrie sulle Hamiltoniane non-Hermitiane.

Successivamente, abbiamo esplorato vari aspetti della formulazione matriciale di questi concetti. Questo approccio si è rivelato particolarmente rilevante, soprattutto per via della non banalità dello studio dei casi a dimensione finita. Si pensi, ad esempio, all'Hamiltoniana di un sistema a due livelli, che è stata analizzata in dettaglio data l'importanza significativa ai fini della tesi.

Un intero capitolo è stato dedicato a dimostrare la possibilità di ottenere spettri completamente reali da questo "nuovo" tipo di Hamiltoniane. Abbiamo esaminato approfonditamente l'estensione del problema di Schrödinger al dominio dei numeri complessi e studiato diverse Hamiltoniane, tramite l'utilizzo dei metodi di approssimazione \mathcal{WKB} . Inoltre, abbiamo sottolineato l'importanza delle condizioni al contorno nel contesto di tali metodi di approssimazione e come queste siano intrinsecamente collegate alla simmetria \mathcal{PT} .

L'ultimo capitolo è stato completamente dedicato all'utilizzo delle Hamiltoniane non-Hermitiane in meccanica quantistica per la costruzione di teorie fisiche accettabili. Nonostante le sostanziali differenze che intercorrono tra le due teorie, tra cui la determinazione dinamica dello spazio di Hilbert in cui la teoria è definita, la maggior parte dei teoremi e dei risultati della teoria quantistica convenzionale rimangono validi anche in dominio \mathcal{PT} simmetrico. Questo ha permesso di considerare i sistemi \mathcal{PT} simmetrici come una naturale estensione di quelli Hermitiani.

Infine, abbiamo esaminato alcuni degli esperimenti più promettenti svolti nell'ambito della teoria delle simmetrie \mathcal{PT} , seguiti da proposte di esperimenti in grado di evidenziare l'importanza di queste nuove teorie. Nonostante il lavoro teorico e pratico ancora necessario per sviluppare una teoria più completa, le prospettive sono altamente promettenti.

Bibliografia

- C. Bender, "Making Sense of non Hermitian Hamiltonians", Rep. Prog. Phys. 70, 947 (2007).
- P. Dorey, C. Dunning, and R. Tateo, "Spectral equivalences, Bethe ansatz equations, and reality properties in Script PT quantum mechanics", J. Phys. A: Math. Gen. 34, 5679 (2001).
- [3] W.D. Heiss, "Exceptional Points of Non-Hermitian Operator", J. Phys. A: Math. Gen. 37, 2455-64(2004).
- [4] T. Kato, "Perturbation theory of linear operators", Springer, (1966).
- [5] A. Mostafazadeh, "Pseudo-Hermiticity versus PT-symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian," J. Math. Phys. 43, 205-214 (2002).
- [6] D. J. Griffiths, "Introduction to Quantum Mechanics, 2nd edition", Reed College, Oregon, (2004).
- [7] J. Heading, "An introduction to phase-integral methods", *Courier Corporation* (2013).
- [8] N. Hassanpour, "Topics in PT-symmetric Quantum Mechanics and Classical systems", Arts and Sciences Electronic Theses and Dissertations 1625 (2018).
- Y. Ashida, Z. Gong, and M. Ueda, "Non Hermitian Physics", Advances in Physics, 69, 249-435 (2020).
- [10] Weinberg, "The Quantum Theory of Fields", Cambridge University Press (1996).
- [11] J.P. Williams, "The Quantum Theory of Fields", Proc. Am. Math. Soc.", 20, 121 (1996).
- [12] G. Wentzel, "Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen fur die zwecke der wellenmechanik", Zeitschrift fur Physik, 38, pp. 518–529 (1926).

- [13] Z. Ahmed, C. Bender, and M. Berry, "Reflectionless potential and *PT* symmetry", *Phys. Lett. A*, **259**, 224 (2005).
- [14] C. Bender, D. Brody, and H. Jones, "Complex extension of quantum mechanics", *Phys. Rev. Lett.*, 89, 270401 (2002).
- [15] P. Dirac, "The physical interpretation of quantum mechanics", Proc. R. Soc. Lond., 180, 1 (1942).
- [16] A. Mostafazadeh, "PT-Symmetric Quantum Mechanics: A Precise and Consistent Formulation", Czechoslovak Journal of Physics, 54, 1125-1132 (2004).
- [17] C. Bender, P. Meisinger, and Q. Wang, "Complex correspondence principle", J. Phys. A: Math.Gen., 36, (1973).
- [18] C. Bender, Berntson, B. Parker, and D. Samuel, "Generalized *PT* symmetry and real spectra", J. Phys. A: Math. Gen., 37, L2467L471 (2002).
- [19] G. Duarte, "Quantum Mechanics for Non-Hermitian Hamiltonians with *PT*-Symmetries", Montclair State University Theses, Dissertations and Culminating Projects, 5, (2017).
- [20] H. F. Jones, "Scattering from localized non-Hermitian potentials", Phys. Rev. D 76, 125003 (2007).
- [21] C. M. Bender and H. F. Jones, "Interactions of Hermitian and non-Hermitian Hamiltonians", J. Phys. A: Math. Theor., 41, 244006 (2008).
- [22] S. Croke, "PT -symmetric Hamiltonians and their application in quantum information", *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 052113 (2015).
- [23] L. Dong, K. Shi, Q. Zhang, D. Shen, X. Zhang, and W. Zhang, "Experimental Determination of PT-Symmetric Exceptional Points in a Single Trapped Ion", *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 083604 (2021).
- [24] H. Häffner, C. F. Roos, and R. Blatt, "Quantum computing with trapped ions", *Physics Reports* 469, 155–203 (2008).
- [25] R. Horodecki, P. Ryszard, M. Horodecki and K. Horodecki, "Quantum entanglement". *Reviews of Modern Physics* 81, 865–942 (2009).
- [26] B. H. Bransden and C. J. Joachain "Physics of atoms and molecules", Longman Scientific and Technical, (1983).
- [27] M. A. Nielsen, and I. L. Chuang, "Quantum Computation and Quantum Information" *Cambridge University Press.*, (2004).

[28] G. M. D'Ariano, G. Mauro, M. Laurentis, M. De Paris, A. Porzio, S. Solimeno. "Quantum tomography as a tool for the characterization of optical devices". *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics.*, 4, S127–S132 (2002).

Ringraziamenti

Ringrazio il Prof. Pierbiagio Pieri per l'opportunità di tesi e per avermi sempre aiutato e guidato nel lavoro, permettendomi di esplorare un argomento di frontiera della fisica. Ringrazio i miei genitori per avermi supportato e aver reso possibile il raggiungimento di questo traguardo e ringrazio mio fratello per essere stato sempre al mio fianco. Ringrazio infine i miei amici più cari, per non avermi fatto scordare delle cose importanti della vita.