.

.

.

Kvantové evoluční rovnice Kleinova[1]- Gordonova[2] typu

Miloslav Znojil

ÚJF AV ČR, 250 68 Řež
znojil@ujf.cas.cz
http://gemma.ujf.cas.cz/∼znojil/

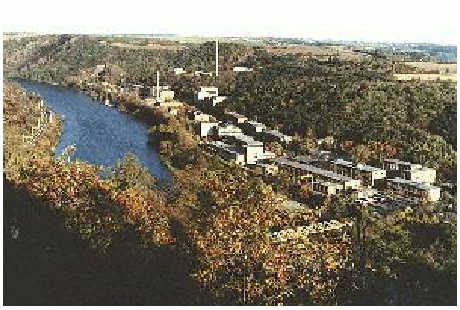
.

.

seminář současné matematiky
KM FJFI, 18. února 2022

[1]O. Klein, Zeit. f. Phys. 37 (1926) 895 - 906.
[2]W. Gordon, Zeit. f. Phys. 40 (1926) 117 - 133.

.



věda z ptačí perspektivy:

. náš ústav v Řeži,

. přijeďte se někdy podívat!

.
.
.
.
.

A. ÚVOD

.

z pohledu matematiky jde o rovnice, velmi často, diferenciální:

(a) nejjednodušší je *stacionární případ:*

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}+D\right)\psi^{(KG)}(\vec{x},t)=0\,,\qquad D=-\triangle+m^2$$

(fyzikální pozadí: relativistická QM; jednotky $\hbar=c=1$, skalární interakci lze zavést pomocí $m^2=m^2(\vec{x})$)

(b) kvůli kvantování, *Feshbach a Villars*[3] zaměnili proměnné,

$$\psi^{(KG)}(\vec{x},t)\quad\to\quad\langle\vec{x}|\psi^{(FV)}(t)\rangle=\left(\begin{array}{c}\mathrm{i}\partial_t\psi^{(KG)}(\vec{x},t)\\ \psi^{(KG)}(\vec{x},t)\end{array}\right)$$

(c) *a získali Schrödingerovu rovnici,* nicméně evoluce zůstala neunitární: $\boxed{\textit{hic salta!}}$

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi^{(FV)}(t)\rangle=H_{(FV)}\,|\psi^{(FV)}(t)\rangle\,,\qquad H_{(FV)}=\left(\begin{array}{cc}0&D\\ I&0\end{array}\right)\neq H^{\dagger}_{(FV)}$$

[3] H. Feshbach and F. Villars, Rev. Mod. Phys. 30, 24 (1958).

.
.
.
.
.

B. KVANTOVÁ MECHANIKA KG SYSTÉMŮ

.

I. připomeňme si stručně životaběh KG QM:

.

dávno: studium vlnových rovnic (fyzika: relativistická kinematika)

.

první (neúspěšný) pokus o kvantování: Erwin Rudolf Alexander Schödinger

.

později změna pohledu: Paul Adrien Maurice Dirac

.

jiným směrem vedoucí alternativa: Schwinger et al a kvantová teorie polí

.

jen částečně úspěšný byl i výšezmíněný pokus Feshbacha a Villarse (1958)

.

nedávno unitární KG QM konečně zformulována: Ali Mostafazadeh (2003)[4]

.

letos: KG QM se uchází o pozornost i na KM FJFI (vypsána bakalářka!)

---

[4] A. Mostafazadeh, Class. Quant. Grav. 20, 155 (2003).

.

.

II. sourozenci KG QM:

.

dávno: vlnové rovnice klasické, nekvantované (dynamika skalárních polí)

.

čtyřicátá léta: KG rovnice coby součást aparátu relativistické kvantové teorie polí

.

šedesátá léta: kanonické kvantování gravitace a Wheelerova-DeWittova (WDW) rovnice

.

před dvaceti lety: unitární interpretace stacionárních rovnic KG typu (Proca, etc)

.

nedávno: studium rovnic KG typu s nestacionárním hmotovým členem (MZ, 2017)[5]

.

v budoucnu, možná, $\boxed{\text{řešení}}$ některých souvisejících $\boxed{\text{otevřených problémů}}$.

[5] M. Z., "Non-Hermitian interaction representation and its use in relativistic quantum mechanics." Annals of Physics (NY) 385 (2017) pp. 162 - 179, doi: 10.1016/j.aop.2017.08.009 (arXiv:1702.08493v2).

.

.

.

.

.

C. KLÍČ K ŘEŠENÍ: KRYPTO-HERMITOVSKÁ QM

.

I. širší rámec: konvenční QM

.

(a1) obvykle řešíme Schrödingerovu evoluční rovnici pro $|\psi(t)\succ \in \mathcal{H}^{(textbook)}$,

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\succ\, = \mathfrak{h}_{(SR)}\,|\psi(t)\succ$$

(a2) k predikci měření pak musíme spočítat maticové elementy pozorovatelných,

$$\prec\psi^{(SR)}(t_f)|\mathfrak{q}_{(SR)}(t_f)|\psi^{(SR)}(t_f)\succ$$

(a3) oba výpočty často usnadňuje iasospektrální (pre)diagonalizace Hamiltoniánu,

$$\mathfrak{h}_{(SR)}\ \to\ H_{(SR)} = \Omega^{-1}\,\mathfrak{h}_{(SR)}\,\Omega$$

(a4) unitarita vývoje je vždy[6] ekvivalentní samosdruženosti Hamiltoniánu,

$$\mathfrak{h}_{(SR)} = \mathfrak{h}^{\dagger}_{(SR)}$$

[6]Stone, M. H. On one-parameter unitary groups in Hilbert space. *Ann. Math.* **33**, 643 - 648 (1932).

II. Dysonova stařičká, pragmaticky motivovaná úprava rámce

(neunitární $\boxed{\text{stacionární}}$ transformace motivovaná potřebami mnohočásticové fyziky[7]*)*

(b1) "fermionový" $|\psi\succ \in \mathcal{H}^{(textbook)}$ je chápán jako obraz "bozonového" $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^{(easy)}$,

$$|\psi_n^{(textbook)}(t)\succ = \Omega_{(Dyson)}(n,t)|\psi_n^{(easy)}(t)\rangle\,,\quad n=0,1,\ldots$$

(b2) zobrazení $\Omega : \mathcal{H}^{(easy)} \to \mathcal{H}^{(textbook)}$ zvolíme univerzální, neunitární,

$$|\psi(t)\succ = \Omega\,|\psi(t)\rangle\,,\qquad \Omega^\dagger\Omega = \Theta \neq I$$

(b3) předpoklad použitelnosti: že v $\mathcal{H}^{(easy)}$ se popis stane mnohem jednodušším,

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle\,,\qquad H = \Omega^{-1}\,\mathfrak{h}_{(SR)}\,\Omega$$

(b4) Hermiticita nabude v $\mathcal{H}^{(easy)}$ skryté formy zvané kvazi-Hermiticita,

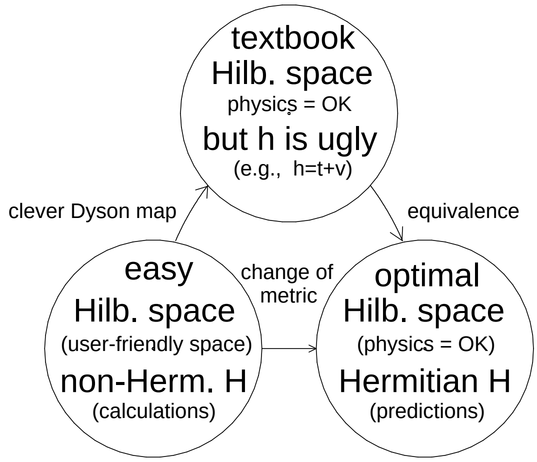
$$H^\dagger\,\Theta\, = \Theta\,H$$

(b5) podstatné: $\mathcal{H}^{(easy)}$ se liši od $\mathcal{H}^{(optimal)} \sim \mathcal{H}^{(textbook)}$ pouze vnitřním součinem,

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle^{(easy)} = \langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad\to\quad \langle\psi_1|\psi_2\rangle^{(optimal)} = \langle\psi_1|\Theta|\psi_2\rangle \equiv \prec\psi_1|\psi_2\succ^{(textbook)}$$

[7] F. J. Dyson, Phys Rev 102, 1217 (1956).

III. shrnutí: kvazihermitovská QM[8] je ekvivalentní standardní učebnicové QM



Obrázek 1: Dysonovská trojice relevantních Hilbertových prostorů.

[8] M. Znojil, Three-Hilbert-space formulation of Quantum Mechanics, SIGMA 5 (2009), 001

.
.
.
.
.

D. APLIKACE STACIONÁRNÍ KG QM

.

I. potřebujeme postupovat v opačném směru[9], od $\mathcal{H}^{(easy)}$ k $\mathcal{H}^{(textbook)}$

.

(c1) v $\mathcal{H}^{(easy)}$ nechť je předem zadán nehermitovský Hamiltonián H a evoluční rovnice

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = H\,|\psi(t)\rangle$$

(c2) podmínka kvazi-Hermiticity se stane rovnicí: hledáme metriku $\Theta = \Theta(H)$,

$$H^\dagger\,\Theta(H)\;=\Theta(H)\,H$$

(c3) znalost metriky pak umožní i definici Dysonova zobrazení $\Omega = \Omega(H)$,

$$\Theta(H) = \Omega^\dagger(H)\Omega(H)$$

(c4) konstrukce je formálně aplikovatelná na všechny Hamiltoniány KG typu.

[9]Scholtz, F. G., Geyer, H. B. & Hahne, F. J. W.
Quasi-Hermitian operators in quantum mechanics and the variational principle.
Ann. Phys. (NY) **213**, 74 - 101 (1992).

.

II. specifické rysy standardních KG modelů[10]

.

= máme $H \neq H^\dagger$, takže Hilbertův prostor $\mathcal{H}^{(easy)}$ je nefyzikální

.

= *tentýž* prostor $\mathcal{H}^{(easy)}$ nabízí ovšem *matematicky optimální* representaci stavů

.

= výhoda: v této representaci zůstátá použitelné i Diracovo bra-ketové značení

.

= libovolná pozorovatelná Λ (včetně $\Lambda_0 = H$) musí být $\Theta-$kvazi-hermitovská,

$$\Lambda^\dagger \Theta \ = \Theta \Lambda$$

= fyzikální predikce učiněné v $\mathcal{H}^{(textbook)}$ a v $\mathcal{H}^{(optimal)}$ jsou nerozlišitelné,

$$\prec \psi_a|\lambda|\psi_b\succ = \langle \psi_a|\Theta\Lambda|\psi_b\rangle$$

= $\boxed{\text{konstrukce}}$ $\Theta = \Theta(H)$ zaručující unitaritu vývoje v $\mathcal{H}^{(optimal)}$ $\boxed{\text{není jednoznačná}}$

---

[10] I. Semorádová, Acta Polytechnica 57 (2017) 462 - 466.

.

III. vzorek otevřených otázek a trendů aktuálního bádání

.... = matematické aspekty nejednoznačnosti metriky[11]

= fyzikální předpoklady odstranění nejednoznačnosti metriky[12]

= poruchová teorie a stabilita a fázové přechody v rámci KG QM

= techniky diskretizace KG rovnice a manipulačního $\mathcal{H}^{(easy)} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \bigoplus \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$

= souvislosti se supersymetrií[13] a s teorií pole

= možnosti inovace Pauliho a Weisskopfova[14] přístupu s indefinitní metrikou[15],

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad \to \quad (\psi_1,\psi_2)_{(Krein\text{–}space)} = \langle\psi_1|\mathcal{P}_{(PW)}|\psi_2\rangle$$

---

[11] D. Krejčiřík, V. Lotoreichik and M. Znojil,
The minimally anisotropic metric operator in quasi-Hermitian quantum mechanics.
Proc. Roy. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci. 474, 20180264 (2018).

[12] M. Znojil, I. Semorádová, F. Ruzicka, H. Moulla a I. Leghrib,
Problem of the coexistence of several non-Hermitian observables in PT-symmetric quantum mechanics.
Phys. Rev. A 95, 042122 (2017) (arXiv:1610.09396v2).

[13] M. Znojil, Relativistic supersymmetric quantum mechanics based on Klein-Gordon equation.
J Phys A: Math Gen 37 (2004) 9557 - 9571.

[14] W. Pauli and V. Weisskopf, Helv. Phys. Acta 7, 709 (1934).

[15] J. Feinberg and M. Znojil, Which metrics are consistent with a given pseudo-hermitian matrix?
J. Math. Phys. 63 (2022) 013505 (arXiv:2111.04216).

.

.

.

.

.

E. OBECNĚJŠÍ, NESTACIONÁRNÍ SYSTÉMY KG TYPU

.

(hlavní fyzikální motivace: kvantování gravitace pomocí Wheelerovy-DeWittovy rovnice)

I. studium nestacionárních systémů je mimořádně zajímavé:

(a) odráží potřebu obecné skalární KG interakce s nestacionárním $m^2 = m^2(\vec{x}, t)$

(b) vyžaduje popis evoluce vektorů v nehermitovské interakční representaci,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + D(t) \right) \psi^{(KG)}(\vec{x}, t) = 0\,, \qquad D(t) = -\triangle + m^2(\vec{x}, t)\,.$$

tj. FV ansatz

$$\langle \vec{x} | \psi^{(NIR)}(t) \rangle = \left(\begin{array}{c} \mathrm{i}\partial_t \psi^{(KG)}(\vec{x}, t) \\ \psi^{(KG)}(\vec{x}, t) \end{array} \right)$$

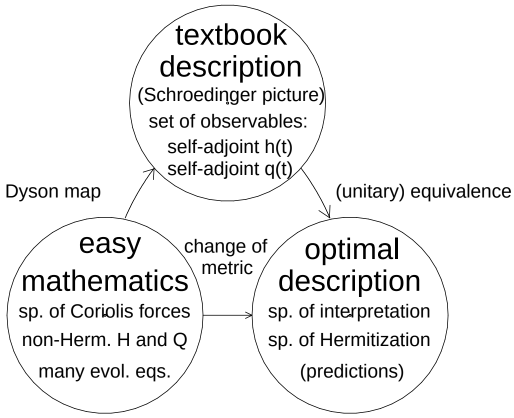
a evoluční rovnici s nekvazihermitovským generátorem $G(t)$**,**

$$\langle \vec{x} | \psi^{(NIR)}(t) \rangle = \left(\begin{array}{c} \mathrm{i}\partial_t \psi^{(KG)}(\vec{x}, t) \\ \psi^{(KG)}(\vec{x}, t) \end{array} \right)\,, \qquad \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} | \psi^{(NIR)}(t) \rangle = \left(\begin{array}{cc} 0 & D(t) \\ I & 0 \end{array} \right) | \psi^{(NIR)}(t) \rangle$$

(c) umožňuje konstrukci $\mathcal{H}^{(optimal)}$ **prostřednictvím sdružené rovnice,**

$$| \psi^{(NIR)}_\Theta \rangle = \Theta(t)\, | \psi^{(NIR)} \rangle\,, \qquad \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t} | \psi^{(NIR)}_\Theta(t) \rangle = \left(\begin{array}{cc} 0 & I \\ D^*(t) & 0 \end{array} \right) | \psi^{(NIR)}_\Theta(t) \rangle\,.$$

(d) teorie[16] umožňuje zaručit unitaritu časového vývoje



Obrázek 2: Nehermitovská dynamika v nestacionární teorii.

[16] M. Znojil, Time-dependent version of cryptohermitian quantum theory. Phys. Rev. D 78 (2008) 085003 (arXiv:0809.2874v1)

.

II. $\boxed{\text{matematika}}$ **pro modely s časově závislou Dysonovou transformací**

.

(1) především máme dedikovanou evoluční rovnici

$$
\begin{gathered}
\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,\Omega^{(NIR)}(t)\rangle = \Omega^{(NIR)}(t)\,\Sigma^{(NIR)}(t)\,,\\
\Sigma^{(NIR)}(t) = H^{(NIR)}(t) - G^{(NIR)}(t)
\end{gathered}
$$

kde $\Sigma^{(NIR)}(t)$ **je coriolisovský generátor vývoje operátorových pozorovatelných**

$$
\begin{gathered}
\mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Lambda^{(NIR)}(t) = \Lambda^{(NIR)}(t)\Sigma^{(NIR)}(t) - \Sigma^{(NIR)}(t)\Lambda^{(NIR)}(t) + K^{(NIR)}(t)\\
K^{(NIR)}(t) = \Omega^{(-1)}(t)\mathrm{i}\,\dot{\mathfrak{h}}_{(SR)}(t)\Omega(t)\,.
\end{gathered}
$$

a kde pro $\Lambda_0 = H$ **máme rovněž, rovnocenně,**

$$
\mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,H^{(NIR)}(t) = G^{(NIR)}(t)H^{(NIR)}(t) - H^{(NIR)}(t)G^{(NIR)}(t) + K^{(NIR)}(t)
$$

(2) dále máme Schrödingerovu rovnici pro kety v $\mathcal{H}^{(E)}$,

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = G(t)\,|\psi(t)\rangle\,, \qquad |\psi(t)\succ = \Omega(t)|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}^{(T)}\,, \qquad |\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}^{(E)}$$

(3) a máme Schrödingerovu rovnici pro bra-vektory v $\mathcal{H}^{(E)}$,

duální koncept: $\Theta(t)|\psi(t)\rangle \;\equiv\; |\psi_\Theta(t)\rangle$

$$|\psi(t)\succ = \left[\Omega^\dagger(t)\right]^{-1}|\psi_\Theta(t)\rangle \in \mathcal{H}^{(T)}\,, \qquad |\psi_\Theta(t)\rangle \;\equiv\; \Theta(t)|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}^{(E)}\,.$$

a komplementární rovnici

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_\Theta(t)\rangle = G^\dagger(t)\,|\psi_\Theta(t)\rangle$$

(4) a máme taky značný notační chaos v literatuře[17]

......(a) “transformovaný Hamiltonián” $H(t) = \Omega^{(-1)}(t)\mathfrak{h}_{(SR)}(t)\Omega(t)$ zůstává bezejmenný

(b) pozorovatelný přitom není “schrödingerovský Hamiltonián” $G(t)$ (pro nás “generátor”)

(c) ani obvykle bezejmenný “heisenbergovský Hamiltonián” $\Sigma(t)$ (pro nás “Coriolis”)

(d) mezi těmito třemi “Hamiltoniány” platí vztah $H(t) - G(t) = \Sigma(t) = \mathrm{i}\Omega^{-1}(t)\dot{\Omega}(t)$

[17] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermitian repres. of QM, Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys. 7, 1191 (2010).

Tabulka 1: vzorek docela nepříjemných rozdílů ve značení.

symbol	meaning	Ref. [1]	Ref. [2]	Ref. [3]
Ω	Dyson's map	ρ	η	S
Θ	$= \Omega^\dagger\Omega$, the metric	η_+	ρ	$\widetilde{T}$
$\|\psi\rangle$	state vector	$\|\psi\rangle$	Ψ	$\|\Psi\rangle$
G	the generator of kets	–	H	–
$\mathfrak{h}$	textbook Hamiltonian	h	h	–
Σ	Coriolis Hamiltonian	–	unabbr.	–
H	observable Hamiltonian	H	$\widetilde{H}$	H
$\|\psi_\Theta\rangle$	dual state vector	$\|\phi\rangle$	$\rho\Psi$	$\widetilde{T}\|\Psi\rangle$

Reference

[1] A. Mostafazadeh, Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys. 7, 1191 (2010).

[2] A. Fring and M. H. Y. Moussa, Phys. Rev. A 93, 042114 (2016);

[3] F. G. Scholtz, H. B. Geyer and F. J. W. Hahne, Ann. Phys. (NY) 213, 74 (1992).

čili máme QM v nehermitovské interakční representaci (NIR):

(5) evoluce pozorovatelné $Q(t)$ je dána Heisenbergovou rovnicí

$$\mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,Q(t) = Q(t)\Sigma(t) - \Sigma(t)Q(t) + K(t)\,, \qquad K(t) = \Omega^{(-1)}(t)\mathrm{i}\,\dot{\mathfrak{q}}_{(SR)}(t)\Omega(t)\,.$$

(6) stav je formálně representován projektorem

$$\pi_{\psi,\Theta}(t) = |\psi(t)\rangle\,\frac{1}{\langle\psi_\Theta(t)|\psi(t)\rangle}\,\langle\psi_\Theta(t)|$$

nebo maticí hustoty

$$\widehat{\varrho}(t) = \sum_k |\psi^{(k)}(t)\rangle\,\frac{p_k}{\langle\psi_\Theta^{(k)}(t)|\psi^{(k)}(t)\rangle}\,\langle\psi_\Theta^{(k)}(t)|\,, \qquad \sum_k p_k = 1$$

(7) jestliže $p_k \neq p_k(t)$, evoluční rovnice kvantové statistické mechaniky má tvar

$$\mathrm{i}\,\partial_t\,\widehat{\varrho}(t) = G(t)\widehat{\varrho}(t) - \widehat{\varrho}(t)\,G(t)$$

(8) v jazyce superoperátorů lze mluvit o generátoru evoluce $\mathcal{G}(t)$
zvaném nehermitovský Liouvillean.

shrnutí: máme

tři generátory časového vývoje

......$G(t)$ (pro kety), $G^\dagger(t)$ (h.c. v $\mathcal{H}^{(easy)}$), a
$\Sigma(t)$ (heisenbergovský Coriolis pro pozorovatelné).

při volbě $G(t) = 0$ (tj. $\Sigma(t) = H(t)$) dostaneme
. nehermitovskou verzi Heisenbergovy representace

při řešení rovnic je třeba "dobře" zvolit počáteční hodnoty

predikce měření bude dána výpočtem maticových elementů

$$\langle \psi_\Theta(t_f) | Q(t_f) | \psi(t_f) \rangle$$

při práci lze odvodit a použít rozličné užitečné vztahy

$$\mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Theta(t) = \Theta(t)\Sigma(t) - \Sigma^\dagger(t)\Theta(t)\,.$$

$$\mathrm{i}\,\frac{\partial}{\partial t}\,\Theta(t) = G^\dagger(t)\Theta(t) - \Theta(t)G(t)\,.$$

.

.

.

.

.

F. SYSTEMATICKÉ KONSTRUKCE KONKRÉTNÍCH MODELŮ

I. příklad: jak si počínat, máme-li zadánu matici $G(t)$

(1) zvolíme počáteční stav, tj. dvě $N-$tice vektorů

$$|\psi_1(0)\rangle\,, |\psi_2(0)\rangle\,, \ldots\,, |\psi_N(0)\rangle$$

$$|\psi_{1,\Theta}(0)\rangle\,, |\psi_{2,\Theta}(0)\rangle\,, \ldots\,, |\psi_{N,\Theta}(0)\rangle$$

(2) ověříme jejich úplnost a bi-orthonormalitu,

$$\sum_{n=1}^{N} |\psi_n(0)\rangle\langle\psi_{n,\Theta}(0)| = I$$

$$\langle\psi_{m,\Theta}(0)|\psi_n(0)\rangle = \delta_{m,n}\,, \quad m, n = 1, 2, \ldots, N$$

(3) vygenerujeme stavové vektory pro všechna t,

$$|\psi_1(t)\rangle\,, |\psi_2(t)\rangle\,, \ldots\,, |\psi_N(t)\rangle$$

$$|\psi_{1,\Theta}(t)\rangle\,, |\psi_{2,\Theta}(t)\rangle\,, \ldots\,, |\psi_{N,\Theta}(t)\rangle$$

(4) ověříme jejich úplnost a bi-orthonormalitu (měly by přežít: je to test kvality řešení),

$$\sum_{n=1}^{N} |\psi_n(t)\rangle\langle\psi_{n,\Theta}(t)| = I\,, \qquad \langle\psi_{1,\Theta}(t)|\psi_n(t)\rangle = \delta_{m,n}\,, \quad m, n = 1, 2, \ldots, N\,.$$

.

(5) zrekonstruujeme metriku

.

Theorem 1 *... the metric operator $\Theta(t)$ has the following formal representation in $\mathcal{H}^{(E)}$,*

$$\Theta(t) = \sum_{n=1}^{N} |\psi_{n,\Theta}(t)\rangle\, \langle\psi_{n,\Theta}(t)|$$

(6) doplníme dynamiku, tj. definici Hamiltoniánu

$$H(t) = \sum_{n=1}^{N} |\psi_n(t)\rangle E_n(t) \langle\psi_{n,\Theta}(t)|$$

(a vyhneme se problémům volivše $E_n(t) = E_n(0) = E_n$)

(7) zdiagonalizujeme $\Theta(t) = \mathcal{U}^\dagger(t)\theta^2(t)\mathcal{U}(t)$ a zrekonstruujeme Dysonův operátor,

$$\Omega(t) = \mathcal{V}^\dagger(t)\theta(t)\mathcal{U}(t)\,.$$

.

II. jak si počínat, je-li $N = \infty$

(situace typická pro diferenciální rovnice)

.

(a) volíme, lze-li, vhodné specifické řešitelné modely a modely se symetriemi

(b) nelze-li, zkusíme pracovat poruchovými metodami

(c) nelze-li ani to, použijeme dikretizační techniky

(d) a teprve nelze-li ani to, začneme pracovat metodami numerickými

.

.

.

.

.

G. UKÁZKY ZAJÍMAVÝCH VÝSLEDKŮ

.

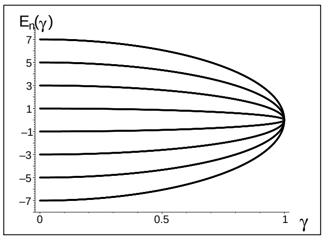
(a) příkladem řešitelného modelu se symetriemi

.

je bosonový Hubbardův Hamiltonián[18]

$$\widehat{H}(\gamma) = \left(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1\right) - \mathrm{i}\gamma \left(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\right) , \qquad \gamma \in (0,1)$$

jehož spektrum $E_n(\gamma) = n\sqrt{1-\gamma^2}\,,\ n \in \{1-N, 3-N, \ldots, N-3, N-1\}\,,\ N = N_B + 1$ vykazuje 'exceptional point' chování při $\gamma^{(EP)} = 1$



Obrázek 3: simulace Boseho - Einsteinovy kondenzace při $N = 8$ a $\gamma = 1$.

[18]Znojil, M. Quantum Rep. 2021, 3, 517–533

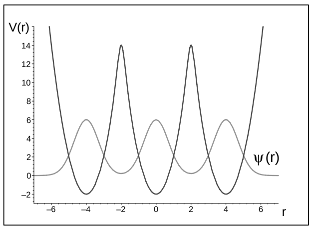
.

(b) (přibližnou) degeneraci hladin v EP okolí

.

vykazuje[19], při $N = \infty$, i lokální QES potenciál $V(r) = 4\,b^2 + 4r^2 + A/B$,

$$A = -16\,br\sinh(2\,br)\,e^{-b^2} - 4\,b^2\,, \qquad B = 2\,\cosh(2\,br)\,e^{-b^2} + 1\,.$$



Obrázek 4: Při volbě $b = 4$ jsou již obě bariéry mezi třemi lokálními minimy potenciálu $V(r)$ natolik vysoké, že QES vlnová funkce $\psi(r)$ základního stavu již nevykazuje prakticky žádné měřitelné projevy tunelového efektu. Tento stav je samozřejmě vysoce nestabilní vůči malým poruchám. V EP okolí se tímto způsobem realizuje jev zvaný kvantová katastrofa.

[19] M. Znojil, Avoided level crossings in quasi-exact approach. Nucl. Phys. B 967 (2021) 115431.

.

(c) typickým příkladem uplatnění diskretizace souřadnic

.

je[20] dvouparametrický Hamiltonián

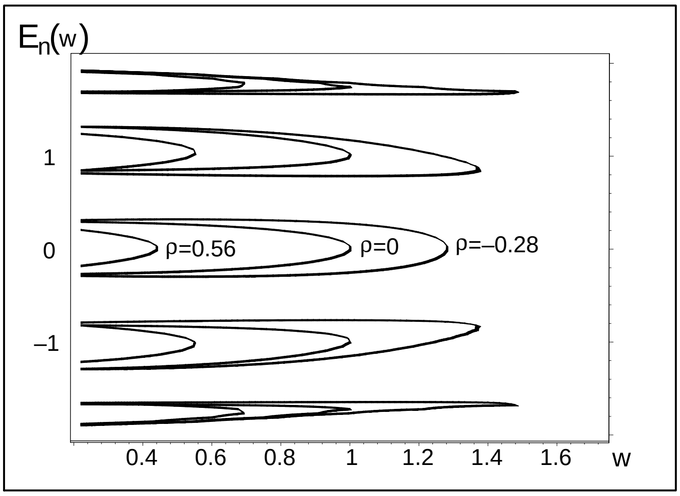
$$
H^{(N)}(\varrho,w) = \left[\begin{array}{ccccc|ccccc}
-i\varrho & -1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & & \ldots & 0 \\
-1 & 0 & -1 & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \vdots \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & & & & \\
\vdots & \ddots & -1 & 0 & -1 & 0 & & & \ddots & \vdots \\
0 & \ldots & 0 & -1 & -\mathrm{i}\,w & -1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\
\hline
0 & \ldots & \ldots & 0 & -1 & \mathrm{i}\,w & -1 & 0 & \ldots & 0 \\
\vdots & \ddots & & & 0 & -1 & 0 & -1 & \ddots & \vdots \\
 & & & & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
\vdots & & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & -1 & 0 & -1 \\
0 & \ldots & & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 & -1 & \mathrm{i}\varrho
\end{array} \right] .
$$

[20] M. Znojil, Confluences of exceptional points and a systematic classification of quantum catastrophes. Sci. Rep., in print (arXiv:2202.02554).

.

(c1) chování spektra pro $N = 10$ a při $\varrho = -0.28$, $\varrho = 0$ nebo $\varrho = 0.56$

.

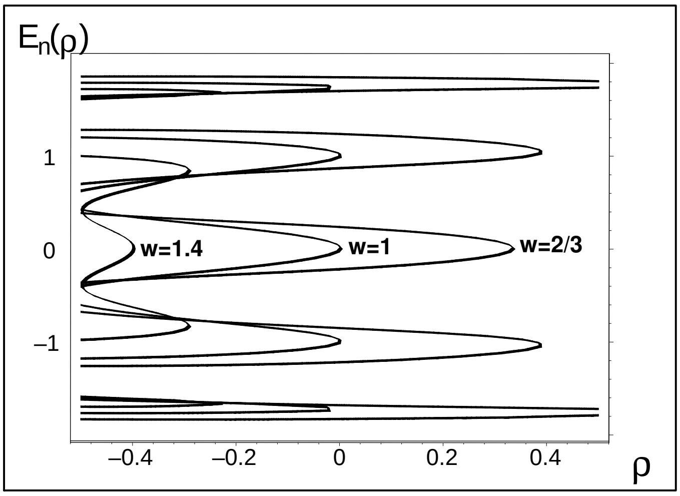


Obrázek 5: Spontánní narušení $\mathcal{PT}-$symetrie nastává buď při $E = 0$ (pro $w \neq 1$) nebo pro všechny hladiny najednou (při $w = 1$; jedná se zde pak o kvantový fázový přechod).

.

(c2) chování téhož spektra pro $w = 1.4$, $w = 1$ a $w = 2/3$

.



Obrázek 6: Spontánní narušení $\mathcal{PT}-$symetrie nastává buď při $E = 0$ (pro $\varrho \neq 0$) nebo pro všechny hladiny najednou (při $\varrho = 0$; jedná se rovněž o kvantový fázový přechod.

(d) ani počítačové konstrukce nemusejí být bez zajímavosti;

například pro čtyřparametrickou matici

$$H^{(5)} = \begin{bmatrix} -10 & \sqrt{A} & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{A} & -8 & \sqrt{B} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{B} & -3 & \sqrt{C} & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{C} & 5 & \sqrt{D} \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{D} & 16 \end{bmatrix}$$

vyžaduje lokalizace EP5 singularity[21] konstrukci Gröbnerovy báze vedoucí k implicitní identifikaci $B^{(EP5)}$ s kořenem polynomu

$$41405\,B^4 + 42197064\,B^3 - 35083975824\,B^2 - 23755497730560\,B + 1288938668811264 = 0$$

numericky pak vyjdou čtyři hodnoty $-1318.1571 \ \ -569.5091\,,\ 50.7046\,,\ 817.8319$ z nichž nakonec jen a právě jeden vede k přijatelnému řešení

$$A^{(EP5)} = 18.6720\,, \quad B^{(EP5)} = 50.7046\,, \quad C^{(EP5)} = 80.1181\,, \quad D^{(EP5)} = 77.5053\,.$$

[21] M. Znojil, Exceptional points and domains of unitarity for a class of strongly non-Hermitian real-matrix Hamiltonians. J. Math. Phys. 62 (2021) 052103

.

H. ZÁVĚREČNÉ SHRNUTÍ HLAVNÍCH BODŮ

.

- horkou novinkou v oboru jsou počítačové manipulace
- obzvláště slibné je studium modelů s diskrétními souřadnicemi
- objevuje se i celá řada nových modelů přesně řešitelných
- paradox zdánlivé nehermitovosti KG modelů lze považovat za vyjasněný
- otevírají se tím dnes mnohé nové fenomenologické a fyzikální obzory
- matematické komplikace spojené s nestacionaritami nejsou ovšem malé

.

✓ pro aplikace modelů KG typu lze proto zodpovězení současných otevřených otázek považovat za jeden z nejdůležitějších úkolů současné matematické a teoretické fyziky