



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

BUGLEY DE FARIAS RAMOS JUNIOR

Invariantes Dinâmicos em Mecânica Quântica PT Simétrica

João Pessoa - PB
2017

BUGLEY DE FARIAS RAMOS JUNIOR

Invariantes Dinâmicos em Mecânica Quântica PT Simétrica

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação do departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Inácio A. Pedrosa.

João Pessoa - PB

2017

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

R175i Ramos Junior, Bugley de Farias.
Invariantes dinâmicos em mecânica quântica PT simétrica
/ Bugley de Farias Ramos Junior. - João Pessoa, 2017.
76 f.

Orientação: Inácio A Pedrosa.
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Física. 2. Invariantes dinâmicos - Mecânica
quântica. 3. Mecânica quântica simétrica. I. Pedrosa,
Inácio A. II. Título.

UFPB/BC



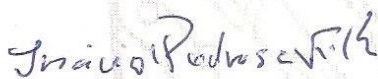
Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO DE TITULAÇÃO
Mestrado

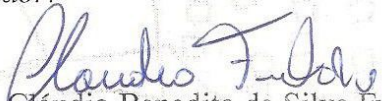
A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 27 de julho de 2017, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, APROVA **Bugley de Farias Ramos Júnior** na defesa de sua dissertação intitulada "*Invariantes dinâmicos em mecânica quântica PT simétrica*".

João Pessoa, 27 de julho de 2017.

Orientador:


Prof. Dr. Inácio de Almeida Pedrosa
(UFPB)

1º Examinador:


Prof. Dr. Cláudio Benedito da Silva Furtado
(UFPB)

2º Examinador:


Prof. Dr. Alexandre Manoel de Moraes
Carvalho
(UFAL)

Dedico essa dissertação à minha Tia Fátima Santiago,
pois sem a sua ajuda não teria chegado até aqui.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus pela minha saúde e pelo dom da apredizagem em busca da sabedoria e discernimento.

Quero agradecer demasiadamente a minha esposa Jéssica Vidal que me motiva e encoraja a buscar o meu melhor, e também, não menos importante, aos familiares e amigos pela ajuda e incentivo.

Em especial, quero agradecer ao meu orientador o Professor Dr. Inácio Pedrosa pela sua complacência e paciência comigo. E principalmente, pelo conhecimento transmitido e pelas discussões semanais, que foram fundamentais para o desenvolvimento dessa dissertação.

Agradeço também ao CNPq pelo apoio financeiro. E por fim agradeço à todos que contribuíram de forma direta ou indireta para minha formação.

RESUMO

Sistemas quânticos não hermitianos¹ têm sido utilizados em várias áreas da física nos últimos anos, isso releva a importância desses sistemas. Em 1998, em um seminal artigo, Bender mostrou que tais sistemas podem ser descritos por operadores hamiltonianos não hermitianos com invariância de paridade e reversão temporal. Desde então, o estudo de sistemas quânticos descritos por hamiltonianos não hermitianos com simetria PT tem atraído a atenção de muitos pesquisadores. O grande interesse nesse tema pode ser atestado pela grande quantidade de artigos publicados na literatura. Esses artigos dizem respeito principalmente a sistemas quânticos independentes do tempo. Por outro lado, sistemas quânticos não hermitianos dependentes do tempo não têm sido muito explorados. Diante disso, nos interessamos em investigar sistemas quânticos dependentes do tempo modulados por hamiltonianos não hermitiano com simetria PT. Assim, das formas de estudar sistemas quânticos não estacionários o nosso interesse é, em particular, a aplicação do método dos invariantes dinâmicos que depende explicitamente do tempo, proposto por Lewis e Riesenfeld, o qual tem obtido um grande sucesso para encontrar uma solução da equação de Schrödinger para sistemas não estacionários, obtendo solução analítica e exata. Nesta dissertação apresentamos uma extensão desse método para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo descrita por um hamiltoniano não hermitiano com simetria PT. Como uma aplicação, estudamos um problema não encontrado na literatura sobre o movimento quântico de uma partícula submetida a um potencial linear não hermitiano dependente do tempo com simetria PT. Assim, usamos um invariante linear não hermitiano com simetria PT e construímos uma solução tipo pacote gaussiano. Usando esta solução calculamos as flutuações da posição e momento e a correspondente relação de incerteza. Também mostramos que a densidade de probabilidade é conservada.

Palavras-chave: não hermitiano, simetria PT, sistemas não estacionários, invariantes dinâmicos.

¹O não como prefixo, antes grafado com hífen, mediante a nova reforma ortográfica passou a ser grafado sem hífen.

ABSTRACT

Non-Hermitian quantum systems have been used in many areas of the physics in last years, this show the importance these systems. In 1998, in a seminal paper, Bender has showed that such systems can be described by Hamiltonians non-Hermitians with parity and time reversal invariance. Since then the study of quantum systems described by Hamiltonians non-Hermitian have attracted the attention of many researchers. The great interest in this subject can be verified by the large quantity of publication in the literature. These papers mainly concerns to time-independent quantum systems. On the other hand, non-Hermitian time-dependent quantum systems don't have been explored yet. However, we are interested in investigating time-dependent quantum systems modulated by non-Hermitian Hamiltonians with PT symmetry. Among the ways of studying non-stationary systems our interest is, in particular, application of the dynamics invariant method that is explicitly time-dependent, proposed by Lewis and Riesenfeld, this method has been very successful in find a solution of the Schrödinger equation for non-stationary systems, obtaining exact and analytical solution. In this dissertation is discussed an extension of this method to solve the time-dependent Schrödinger equation described by non-Hermitian Hamiltonian with PT symmetry. As an application, we study the quantum motion of a particle subjected to a time-dependent non-Hermitian linear potential with PT symmetry. Thus, using a non-Hermitian linear invariant with PT symmetry we construct a solution type Gaussian package. Using this solution we calculate the position and momentum fluctuations and the corresponding uncertainty relation. We also show that the probability density is conserved.

Keywords: Non-Hermiticity, PT-Symmetry, Non-Stationary Systems, Invariants.

Índice

Introdução	1
1 Mecânica Quântica Hermitiana e não Hermitiana com Simetria PT	7
1.1 Mecânica Quântica Hermitiana	10
1.1.1 Autovalores e Autovetores	10
1.1.2 Completeza	10
1.1.3 Produto Interno e Ortonormalidade	11
1.1.4 Unitariedade	12
1.2 Mecânica Quântica PT Simétrica	13
1.2.1 Autovalores e Autovetores	15
1.2.2 Completeza	16
1.2.3 Produto Interno e Ortonormalidade	16
1.2.4 Unitariedade	18
2 Invariantes Dinâmicos Dependentes do Tempo	21
2.1 Invariantes Dinâmicos para Sistemas Hermitianos	21
2.2 Invariantes Dinâmicos para Sistemas não Hermitianos com Simetria PT . .	25
3 Partícula em um Potencial Linear Hermitiano Dependente do Tempo	31
4 Partícula em um Potencial Linear não Hermitiano Dependente do Tempo com simetria PT	37
5 Conclusões e Perspectivas	51
A Produto Interno e o Operador C	53
B Solução da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo	59
C Operadores de Paridade e Reversão Temporal	61
Referências Bibliográficas	64

Introdução

Desde que Max Planck apresentou suas ideias sobre níveis discretos de energia para os modos normais em uma cavidade térmica, assim, explicando a catástrofe do ultravioleta, característica de um corpo negro, isso deu origem a vários trabalhos usando essa concepção. Entre eles, a explicação do efeito fotoelétrico, efeito compton, quantização do momentum angular, para explicar as linhas espectrais do átomo de hidrogênio etc. Desde então, ficou estabelecido que as ondas eletromagnéticas também podiam ser tratadas como corpúsculos. Essa dualidade levou Louis de Broglie, em 1923, a postular que, assim como existe a dualidade onda-partícula para a luz, a matéria também deveria possuir essa dualidade, especialmente os elétrons. Isso de fato deveria acontecer em uma certa escala da matéria, isto é, da ordem de grandeza da massa do elétron.

As previsões de Louis de Broglie foram confirmadas com os experimentos da dupla fenda (interferência) e, principalmente, da difração de elétrons por uma estrutura cristalina, feito por C. J. Davisson e L. H. Germer, em 1927 e independentemente por G. P. Thomson, ainda no mesmo ano usando outro aparato. Porém, faltava uma formulação matemática consistente para explicar esses fenômenos. Foi então, que em 1924, Werner Heisenberg em conjunto com Max Born e Pascoal Jordan, formularam um modelo matemático que ficou conhecido como mecânica quântica matricial. No entanto, foi aproximadamente seis meses depois, em 1925, que Erwin Schrödinger obteve uma equação de onda que descrevia muito bem o elétron e os experimentos feitos até aquele momento.

Naquela época já se tinha conhecimento que as equações matriciais e diferenciais eram equivalente [1]. Mas, o que levou Schrödinger a formular a sua equação, foram as ideias de L. de Broglie e a analogia feita por W. R. Hamilton entre a ótica e a mecânica clássica [2]. A partir dessa formulação surgiu uma nova mecânica quântica, baseada na equação fundamental não relativística dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t), \quad (1)$$

onde $\Psi(x, t)$ é a função de onda que descreve o elétron, e H é um operador chamado de hamiltoniano, em analogia à função escalar hamiltoniana da mecânica clássica. Essa equação necessariamente deveria ser linear, visto que, ela deveria explicar os experimentos, ou seja, para que as soluções pudessem ser superpostas para produzir interferências e também permitir construir os pacotes de onda, conhecidos do trabalho de L. de Broglie.

Para isso o hamiltoniano deve ser um operador linear.

Mas, a solução dessa equação ainda não possuía um significado físico. A interpretação foi dada por Max Born, em 1925 [3], onde essa interpretação levou os físicos da época a ver que o espaço da mecânica quântica satisfazem a definição do espaço de Hilbert, $L^2(a, b)$, funções do quadrado-somável.

Posteriormente, Dirac formulou a mecânica quântica com uma estrutura vetorial axiomática [1], com uma notação que ficou conhecida pelos bras e kets. Em analogia com a palavra inglesa bracket (que significa, parêntese). A teoria de espaços vetoriais lineares já era bem conhecida pelos matemáticos na época, mas a forma como Dirac apresentou teve muitas vantagens, principalmente para os físicos.

A maior vantagem da formulação de Dirac, é que a notação para a mecânica quântica ficou mais compacta. Além disso, é fácil sair da formulação de Schrödinger para a formulação de Heisenberg, e vice-versa. O que atesta a equivalência entre as duas formulações. Mas, o enfoque aqui é na Eq. (1), especialmente, para o caso em que o hamiltoniano depende explicitamente do tempo. Soluções para essa situação, via de regra, não são fáceis. Sistemas físicos dependentes do tempo são especialmente relevantes, pois são mais realísticos e possuem uma dinâmica mais complexa. Tais sistemas também são ditos não estacionários. Do ponto de vista acadêmico geram boas discussões, uma vez que, as propriedades físicas de um sistema não estacionário possuem flutuações que se manifestam tanto fenomenologicamente quanto experimentalmente. Por exemplo, para um sistema dissipativo a entropia tende sempre a aumentar, pois a entropia é uma função positiva da energia, se caso ela assumisse valor negativo, implicaria em um sentido negativo para a flecha do tempo.

Do ponto de vista experimental sistemas dependentes do tempo são mais interessantes. Tanto clássico quanto quântico. Em particular, a ênfase desse trabalho está voltada para sistemas quânticos não estacionários, que vem sendo aplicado desde a cosmologia (formação do universo primitivo) à partículas elementares (oscilações de neutrinos). Existe um enorme crescimento de trabalhos publicados sobre fenômenos quânticos dependentes do tempo, tanto teórico quanto experimental, em ótica quântica, teoria da informação quântica e física da matéria condensada, na spintrônica. Tem também os fenômenos de transportes em nanoestruturas e tunelamento dependente do tempo. Efeitos quânticos dinâmicos também aparecem em sistemas nanoeletromecânicos, da próspera área chamada de QED (quantum electrodynamics) em circuitos.

Desde o surgimento da mecânica quântica que se estuda sistemas dinâmicos dependentes do tempo e até os dias de hoje eles têm atraído muita atenção. Alguns dos desenvolvimentos para estudar sistemas dinâmicos que mais se destacam são: o método de integrais de trajetória, desenvolvido por Richard Feynman na década de 1940; estados coerentes e comprimidos entre 1960 e 1970; o tunelamento quântico nos contatos de Josephson e SQUIDS em 1960; o método dos invariantes, em 1970; efeito Zeno 1970; a fase geométrica 1980; decoerência da superposição de estados microscópicos em 1980;

dinâmica de partículas em armadilhas e QED em cavidades entre 1980 e 1990 etc.

Os métodos padrões para resolver problemas quânticos com dependência temporal abordados nos livros textos, são: i) aproximação adiabática, quando a escala de variação do tempo nos termos dependentes do tempo é grande comparada com as características periódicas do sistema; ii) aproximação súbita, quando as mudanças externas são rápidas comparadas com as características periódicas pequenas; iii) perturbação dependente do tempo, quando o hamiltoniano é separado em uma parte independente do tempo e outra dependente do tempo. Esses são os métodos comuns encontrados nos livros textos de mecânica quântica [1, 4, 5]. Além das integrais de trajetória de Feynman, que é muito utilizada em física de partículas e teoria de campos.

Um método que vem sendo muito utilizado e com bons resultados, e que será utilizado nessa dissertação, é o método dos invariantes desenvolvido pela dupla H. R. Lewis e W. R. Riesenfeld, no final da década de 1960 [6, 7]. Em seus trabalhos pioneiros, utilizaram o método dos invariantes para resolver o oscilador harmônico dependente do tempo e o movimento de uma partícula carregada em um campo eletromagnético dependente do tempo. Nos últimos anos esse método tem sido utilizado desde a cosmologia [8, 9] à física de altas energias, como na teoria de campos [10, 11, 12].

Esse método consiste em encontrar a solução de equação de Schrödinger a partir dos autoestados de uma quantidade física conservada, e por isso recebe o nome de invariante. Esse método tem uma relação direta com os sistemas de Ermakov [13], os quais já haviam sido estudados há mais de um século por Ermakov [14]. Esses sistemas consistem de pares de equações acopladas dependentes do tempo, relacionadas pelo invariante de Ermakov, que é uma constante de movimento. Tais invariantes também são chamados de invariantes de Lewis-Ermakov [15]. A aplicação dos invariantes de Lewis-Ermakov são utilizados em várias áreas. A título de exemplo, a promissora ótica não linear [16, 17]. Uma outra aplicação interessante é a de um pêndulo gravitando com massa crescendo exponencialmente, feito por Choi [18]. Além disso, Hartley e Ray [19, 20, 21, 22], usaram esses sistemas para encontrar uma solução exata para a equação de Schrödinger de osciladores não lineares dependentes do tempo (sistemas de Ermakov). Eles transformaram a equação de autovalor do invariante em uma equação de Schrödinger independente do tempo. Essencialmente, eles mostraram que a equação de Schrödinger para um sistema de Ermakov pode ser reduzida para uma equação de Schrödinger independente do tempo para um operador invariante. Esses exemplos entre outros têm mostrado que o método de Lewis e Riesenfeld é uma bela e poderosa ferramenta matemática.

Shen, mostrou uma conexão entre o método dos invariantes com o método da matriz de densidade e a mecânica quântica supersimétrica [23]. E essas três formulações compartilham da mesma estrutura matemática, especificamente, satisfazem a equação de Liouville-Von Neumann e a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo é obtida em termos dos autoestados do invariante (da quantidade conservada).

Desde que o método dos invariantes de Lewis Riesenfeld foi proposto, ele tem sido

largamente utilizado para encontrar soluções exatas da equação de Schrödinger com diversos tipos de hamiltonianos dependentes do tempo [24, 25, 26, 27, 28]. Em particular, esse método também tem sido muito utilizado para resolver o problema de uma partícula em um potencial linear dependente do tempo [29, 30, 31, 32]. O referido problema é de crucial importância nesse trabalho, além de ter gerado boas discussões na literatura, como será visto no capítulo 3. Esse modelo tem sido usado experimentalmente para estudar o comportamento de um guia magnético miniaturizado para átomos neutros, bem como para investigar o movimento browniano de partículas em um região com um potencial linear. As soluções, do tipo funções de Airy, tem sido usadas numericamente para calcular os coeficientes de transições de ligas ternárias $Al_xGa_{1-x}N$ como uma função de concentração em (x) [29].

A proposta dessa dissertação é aplicar o método dos invariantes em uma nova perspectiva para a mecânica quântica dada por C. M. Bender e S. Boettcher [40]. Em mecânica quântica, um axioma fundamental é a exigência de que o hamiltoniano deve ser hermitiano, $H^\dagger = H$. Essa imposição matemática garante o resultado físico de que o espectro de autovalores seja real (pois, são as quantidades que podem ser medidas experimentalmente). Além disso, o produto interno entre os vetores do espaço de Hilbert deve ser uma quantidade positiva definida e que a evolução temporal seja unitária (a norma dos vetores deve ser preservada). Mas, essa é uma exigência matemática que garante os resultados físicos. No entanto, o que se tem encontrado é que não apenas hamiltonianos hermitianos possuem espectros reais. De fato, Bender tem mostrado que hamiltonianos não hermitianos também são operadores físicos, desde que, a invariância de simetria de paridade (P) e reversão temporal (T) não seja quebrada [40]. Nesse sentido, a realidade do espectro de energia é atribuída a simetria PT do hamiltoniano.

Por outro lado, a condição física de que o produto interno tenha uma evolução temporal unitária, leva a necessidade de postular um novo produto interno. Ademais, surge uma nova simetria para o hamiltoniano, dado pelo operador linear $\mathcal{C}$, chamado de operador de conjugação de estado (em comparação feita com operador de conjugação de carga da teoria quântica relativística). Com esse operador o novo produto interno tem evolução unitária e a norma dos autoestados fica positiva definida [41]. Assim, a condição de hermiticidade de Dirac é suficiente para garantir um espectro real mas não é necessária. Essa exigência pode ser substituída pela simetria de reflexão espaço-temporal $H^{PT} = H$, sem violar qualquer condição física dos axiomas da mecânica quântica. Quando o hamiltoniano satisfaz essa condição, é dito que H é PT simétrico.

Após a publicação desses resultados por Bender, sistemas quânticos independentes do tempo não hermitianos têm sido investigados ostensivamente [42, 43, 44, 45]. A aplicação de hamiltonianos não hermitianos PT simétrico têm sido utilizado para explicar vários sistemas quânticos, tais como: cristais complexos, supersimetria, braquistócrona quântica etc, como pode ser visto em Ref. [41]. Em teoria de campos, o modelo de Lee tem provado ser um excelente exemplo de um hamiltoniano PT simétrico, onde os

estados com norma negativa, também chamados de estados fantasmas, surgem a partir da renormalização do hamiltoniano, que deixa de ser hermitiano. A interpretação correta para os estados fantasmas do hamiltoniano não hermitiano do modelo de Lee é porquê ele é PT simétrico. Então, o operador $\mathcal{C}$ para o modelo de Lee é calculado de forma exata e fechada, de modo que, os estados fantasma com norma negativa se revelam ser estados físicos com norma positiva.

Por outro lado, sistemas com dependência temporal têm sido menos investigados [46, 47, 48, 50]. Portanto, a motivação dessa dissertação foi estudar sistemas quânticos não hermitianos dependentes do tempo com simetria de paridade e reversão temporal, usando o método dos invariantes de Lewis e Riesenfeld. Diante disso, será abordada quais as condições encontradas sobre os invariantes para que tenham significado físico, bem como, para os seus autoestados, e como os mesmo se relacionam com a solução da equação de Schrödinger com um hamiltoniano dependente do tempo com simetria PT. Mais especificamente, nesta dissertação esse método será estendido para invariantes não hermitianos com simetria PT.

O desenvolvimento dessa dissertação tem a seguinte sequência. No primeiro capítulo é apresentado um comparativo entre a mecânica quântica padrão (hermitiana) e a mecânica quântica PT simétrica (que pode ser chamada de não hermitiana). É destacada a diferença entre os principais axiomas das duas formulações e como elas são equivalentes. Especificamente, é apresentada quais as condições para que os autovalores sejam reais, como fica a relação de completeza, a definição do produto interno e o que acontece na evolução temporal (como a norma é preservada). E quais os novos conceitos advindos dessa nova concepção da mecânica quântica.

No segundo capítulo é apresentado como funciona o método de Lewis e Riesenfeld, do qual havia uma exigência de que o operador invariante fosse hermitiano. Em seguida, usando os axiomas da mecânica quântica com simetria PT, se verifica como é possível estender esse método para um invariante não hermitiano.

No terceiro capítulo é abordada a forma de obter a solução de Schrödinger para uma partícula sujeita a um potencial linear dependente do tempo hermitiano aplicando o método do invariante convencional, seguindo algumas referências e comparando os resultados com alguns dos resultados encontrados na literatura da física sobre o problema.

No quarto capítulo encontra-se a proposta principal dessa dissertação, aplicar o método do invariante no quadro da mecânica quântica PT simétrica. Para aplicar esse método estudamos o movimento quântico de uma partícula sujeita a um potencial linear dependente do tempo não hermitiano com simetria PT. Mostraremos como encontrar a solução da equação de Schrödinger correspondente a esse tipo de interação e como construir uma solução geral na forma de um pacote de onda gaussiano. Com essa solução geral, calculamos as flutuações quânticas da posição e momento bem como a relação de incerteza. Também mostramos que a densidade de probabilidade é preservada. Vale salientar que esse capítulo se trata de um trabalho inédito com resultados interessantes

dos quais poderemos submeter um artigo para publicação em alguma revista da literatura.

No capítulo final encontra-se uma discussão sobre os resultados obtidos. Também mencionamos a possibilidade de estudarmos outros sistemas quânticos não estacionários descritos por hamiltonianas não hermitianas com simetria PT utilizando o método dos invariantes dinâmicos proposto por Lewis e Riesenfeld. Para desenvolver essa dissertação investigamos uma quantidade considerável de artigos e livros na literatura da física sobre tema, e apesar dos nossos esforços alguns não foram possíveis de serem citados aqui.

Capítulo 1

Mecânica Quântica Hermitiana e não Hermitiana com Simetria PT

Em mecânica quântica, o hamiltoniano caracteriza os níveis de energia e fornece a dinâmica temporal do sistema, desde que esse operador atenda alguns axiomas físicos. Assim, para formular uma teoria quântica, física, é necessária uma estrutura matemática que atenda algumas exigências: i) possuir um espectro de energia limitado por baixo; ii) que os vetores do espaço de Hilbert, possuam um produto escalar com norma positiva definida e iii) ter uma evolução temporal unitária (a norma dos vetores deve ser preservada). O espaço vetorial da mecânica quântica é uma aplicação do espaço de Hilbert. Nesse espaço, as quantidades física posição e momento, são promovidas à operadores, que obedecem a seguinte álgebra de comutação (também chamada de condição canônica de quantização),

$$[x, p] = i\hbar, \quad (1.1)$$

onde esses operadores possuem um espectro de autovalores, que formam dois espaços equivalentes para tratar a mecânica quântica. Nesses espaços de Hilbert, têm-se os estados (vetores) denotados por $|\psi\rangle$, que vêm a ser as funções de onda, e os operadores $O(x, p)$, onde qualquer quantidade física pode ser escrita como função de x e p , e como esses são operadores, logo, as quantidades física serão operadores. As duas representações, são:

- No espaço de posição:

$$\langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x); \quad x = x \quad \text{e} \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (1.2)$$

- No espaço de momento:

$$\langle p|\alpha\rangle = \phi_\alpha(p); \quad x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad \text{e} \quad p = p, \quad (1.3)$$

onde $\psi_\alpha(x)$ é a função de onda no espaço de posição (coordenada) e $\phi_\alpha(p)$ representa o mesmo estado, sendo conhecida como função de onda no espaço de momento.

Essas duas representações são equivalentes, pois, uma função de onda é a transformada de Fourier da outra. Como a posição e o momento possuem um conjunto completo de autovetores, $|x\rangle$ e $|p\rangle$, isso significa que qualquer vetor pode ser escrito nessas bases,

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p|\alpha\rangle \quad \text{ou} \quad |\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x|\alpha\rangle, \quad (1.4)$$

que na forma de função de onda fica,

$$\psi_{\alpha}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx/\hbar} \phi_{\alpha}(p) \quad \text{ou} \quad \phi_{\alpha}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} \psi_{\alpha}(x), \quad (1.5)$$

onde

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}. \quad (1.6)$$

Todavia, por simplicidade o desenvolvimento deste trabalho será feito na representação da posição em uma dimensão. A equação fundamental na mecânica quântica é a equação de Schrödinger, isto é, toda a informação a respeito do problema dado está contida nessa equação. Portanto, o problema se resume a resolver

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.7)$$

onde o operador $H(t)$ é chamado de hamiltoniano, que identifica o problema e $|\psi(t)\rangle$ é um vetor do espaço de Hilbert que indica o estado da partícula. Assim, encontrando a função de onda, obtêm-se todas as informações do problema. Uma maneira formal de deduzir essa equação, é a partir do grupo de transformações contínuas. Sendo o hamiltoniano o gerador das transformações temporais, a evolução temporal do estado indo de t até $t + dt$ é feita fazendo

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t + dt)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} H dt\right) |\psi(t)\rangle, \quad (1.8)$$

onde $H = H(t)$ é também chamado de operador de evolução temporal. No entanto, essa mesma transformação pode ser feita por uma expansão em série de potências, sendo dt pequeno, e expandido até primeira ordem e desprezando termos de ordem superior, tem-se

$$|\psi(t + dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle dt. \quad (1.9)$$

Portanto, comparando (1.8) com essa expressão, obtém-se (1.7). No caso geral de um hamiltoniano dependente do tempo, a dinâmica temporal do estado indo de t_0 até $t > t_0$, é feita por meio do operador de evolução temporal, considerando uma evolução finita como sendo sucessivas evoluções infinitesimais (N vezes, e tomando N tendendo ao infinito),

ou seja,

$$\begin{aligned}
 |\psi(t_0)\rangle &\rightarrow |\psi(t)\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar}Hdt\right] \dots \left[1 - \frac{i}{\hbar}Hdt\right] |\psi(t_0)\rangle \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar}Hdt\right]^N |\psi(t_0)\rangle \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{N} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right)\right]^N |\psi(t_0)\rangle \\
 |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) |\psi(t_0)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.10)
 \end{aligned}$$

onde

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) \quad (1.11)$$

é chamado de operador de evolução temporal. Claramente, o caso anterior (1.8), é um caso particular. Assim, derivando (1.10) com relação ao tempo obtém-se (1.7).

Em mecânica quântica, os objetos centrais de estudo são os vetores e os operadores. Como a ênfase desse trabalho é a dinâmica temporal de um sistema quântico, é válido salientar que não só os vetores evoluem no tempo, mas também os operadores. Assim, o tratamento dinâmico pode ser feito em três representações equivalentes: a representação de Schrödinger, a representação de Heisenberg e a representação da Interação. Bem como na evolução temporal de um vetor, obtém-se a equação de Schrödinger, a evolução temporal de um operador determina uma equação de Heisenberg. A evolução é

$$O(t_0) \rightarrow O(t) = U^\dagger(t, t_0) O(t_0) U(t, t_0). \quad (1.12)$$

Portanto, derivando com relação ao tempo, encontra-se

$$\frac{dO(t)}{dt} = \frac{\partial O(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [O(t), H]. \quad (1.13)$$

Essa é a equação de Heisenberg, proposta em 1924. Essas representações são equivalentes pois os valores esperados das quantidades mesuráveis são os mesmos. Mas, quando (1.13) é igual a zero, é dito que a quantidade física representada pelo operador é conservada. Isso será usado mais adiante.

A mecânica quântica usual é caracterizada como sendo uma teoria hermitiana e como será brevemente visto a seguir a hermiticidade desempenha um papel muito importante nessa teoria. Porém, uma nova mecânica quântica propõe uma mudança nessa condição, tal que, é possível construir uma teoria em que os operadores podem ser não hermitianos. Diante disso, veja a seguir um comparativo entre essas duas formulações equivalentes da mecânica quântica, semelhante ao que foi feito na Ref. [51]. Nesse artigo, os autores mostram através do cálculo da Braquistócrona quântica que as duas formulações são equivalentes e fornecem o mesmo resultado.

1.1 Mecânica Quântica Hermitiana

Na mecânica quântica hermitiana, conhecida nos livros textos, o espaço de Hilbert é definido pelo produto interno usual, que consiste no produto interno entre um vetor com o outro na forma conjugada adjunta, resultando em um valor finito e real, com isso se define a norma dos vetores. Nesse espaço também têm-se que os operadores são hermitianos, logo, os vetores atendem a condição de completeza. Nessa seção, segue uma receita para trabalhar com a hermiticidade.

1.1.1 Autovalores e Autovetores

Quando o hamiltoniano H não depende do tempo t , a equação de Schrödinger independente do tempo resulta em uma equação de autovalor dada por

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (1.14)$$

onde E é a energia do sistema, assim como na mecânica clássica, essa quantidade se conserva. Neste caso, $|\psi\rangle$ é um autovetor de H com autovalor E . Como o hamiltoniano é um operador hermitiano ($H^\dagger = H$), essa hermiticidade garante que o espectro de autovalor seja real. Então, os autovetores forma uma conjunto completo de vetores.

Uma vez que o estado $|\psi\rangle$ está determinado em instante qualquer t_0 , para determinar o estado em um tempo futuro $t > t_0$ basta aplicar o operador de evolução temporal (1.11). A condição de hermiticidade dos operados é um axioma tomada para que as quantidades físicas (autovalores) sejam reais, pois são apenas esses que podem ser medida experimentalmente.

1.1.2 Completeza

Na equação de autovalor (1.14), o fato do hamiltoniano ser hermitiano garante que ele possua um conjunto completo de autovetores. Isso significa que esses autovetores são independentes, logo, formam uma base (ou seja, são linearmente independente). Como a Eq. (1.7) é linear, isso permite escrever a solução como uma combinação linear dos vetores dessa base, ou seja,

$$|\chi\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle, \quad (1.15)$$

onde n rotula o autovalor (isto é, o estado energético da partícula) e o somatório indica que o espectro é discreto. Entretanto, se o espectro for contínuo, tem-se

$$|\chi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda g(\lambda) |\psi_\lambda\rangle, \quad (1.16)$$

onde os coeficientes das expansões são determinados da seguinte maneira, $a_n = \langle \psi_n | \chi \rangle$ e $g(\lambda) = \langle \psi_\lambda | \chi \rangle$. Com isso, substituindo nas duas últimas expressões, se obtêm os seguintes

resultados,

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1, \quad (1.17)$$

e para autovalores contínuos, é

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\lambda |\psi_\lambda\rangle \langle \psi_\lambda| = 1, \quad (1.18)$$

sendo a soma feita sobre todos os autovalores. Essas expressões são chamadas de relações de completeza, e são muito relevantes na mecânica quântica, pois formam uma expressão simples para uma mudança de base [1]. A relação de completeza também pode ser expressa no espaço de posição, inserindo-a em $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$, a relação (1.17) torna-se

$$\begin{aligned} \sum_n \langle x|\psi_n\rangle \langle \psi_n|y\rangle &= \delta(x-y) \\ \sum_n \psi_n^*(y) \psi_n(x) &= \delta(x-y). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Essa expressão não é muito comum nos livros textos, mas é usada aqui para fazer uma comparação com a expressão usada na literatura para a mecânica quântica PT simétrica.

1.1.3 Produto Interno e Ortonormalidade

Em mecânica quântica, um assunto extremamente relevante é referente ao produto interno, uma vez que, o significado físico da solução da Eq. (1.7) é meramente probabilístico, o qual foi dado por Max Born, e estabelecido na convenção de Copenhague em 1927. Esse postulado passa agora a ser uma aplicação do produto interno do espaço de Hilbert, e é definido por

$$\langle \psi|\phi\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^\dagger(x) \phi(x) dx. \quad (1.20)$$

A rigor, isto é, $\langle \psi|\phi\rangle \equiv \text{escalar} \geq 0$, ou seja, o produto interno é positivo definido. De fato, para que o significado físico faça sentido, isso deve acontecer. Como a partícula deve ser encontrada em uma região finita do espaço, a probabilidade total deve ser

$$\langle \psi|\psi\rangle = 1. \quad (1.21)$$

Essa condição é então chamada de normalização, sendo os operadores lineares permite que os vetores possam ser multiplicados por uma constante de normalização. Logo, se ψ está associado ao estado da partícula com energia E ele deve ser normalizado. No caso das autofunções estarem normalizadas e pertencerem a estados distintos tem-se que o produto interno entre esses estados é $\langle \psi|\phi\rangle = 0$, isso significa que são independentes, isto

é, linearmente independentes. Doravante, essas condições serão sintetizadas como,

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}, \quad (1.22)$$

para o caso discreto, e para o caso do espectro contínuo como,

$$\langle \psi_{\lambda'} | \psi_{\lambda} \rangle = \delta(\lambda' - \lambda). \quad (1.23)$$

Esse resultado faz jus ao significado probabilístico das funções de onda da equação de Schrödinger. Agora, os autovetores são ditos ortonormais, e constituem uma base.

1.1.4 Unitariedade

A hermiticidade dos operadores geradores das transformações garante a unitariedade dos operadores de transformações, que, por sua vez, conserva a norma dos estados. Por exemplo, considere um estado genérico evoluído no tempo $|\chi(t)\rangle$, ou seja,

$$|\chi(t)\rangle = U(t, t_0) |\chi(t_0)\rangle. \quad (1.24)$$

Devido à forma como o produto interno é definido aqui e desde que o hamiltoniano seja hermitiano, o operador de evolução temporal $U(t, t_0)$ será sempre unitário,

$$\begin{aligned} U^\dagger(t, t_0) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H^\dagger(t') dt'\right) \\ &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) \\ &= U^{-1}(t, t_0). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Portanto,

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0)U(t, t_0) = 1. \quad (1.26)$$

A partir da definição (1.20), segue que

$$\langle \chi(t) | \chi(t) \rangle = \langle \chi(t_0) | U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) | \chi(t_0) \rangle = \langle \chi(t_0) | \chi(t_0) \rangle. \quad (1.27)$$

Diante disso, conclui-se que a norma do estado foi conservada frente a uma transformação unitária. Então, a unitariedade conserva a probabilidade.

Outra maneira de ver que a norma do vetor é preservada, é derivando a Eq. (1.21)

em relação ao tempo e usando a equação de Schrödinger, ou seja

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \psi \rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \right) | \psi \rangle + \langle \psi | \left(\frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle \right) \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ (\langle \psi | H^\dagger) | \psi \rangle - \langle \psi | (H | \psi) \right\} \\
 &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ (\langle \psi | H) | \psi \rangle - \langle \psi | (H | \psi) \right\} \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{1.28}$$

assim, é possível observar que em ambos os casos o fato do hamiltoniano ser hermitiano foi fundamental para que o produto interno definido por (1.20) fosse conservado. Portanto, o efeito dos hamiltonianos na mecânica quântica serem hermitianos desempenha dois papéis fundamentais, o espectro real e a conservação da probabilidade.

1.2 Mecânica Quântica PT Simétrica

Em analogia a mecânica quântica usual, a hermiticidade dos operadores pode ser substituída pela invariância de paridade e reversão temporal. Onde a operação de conjugação adjunta de Dirac ($\dagger$) é substituída pela seguinte transformação de similaridade,

$$H^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1} = H. \tag{1.29}$$

Isso é equivalente a dizer que o operador hamiltoniano comuta com o operador de paridade e reversão temporal,

$$[\mathcal{PT}, H] = 0. \tag{1.30}$$

Essa é uma condição suficiente para garantir que o espectro do hamiltoniano seja real. No entanto, essa não é a única condição para se ter uma teoria quântica fisicamente aceitável. Pois assumindo que o hamiltoniano não é hermitiano o produto interno precisa ser redefinido de tal forma que a probabilidade seja conservada.

Diante disso, vale lembrar o efeito das operações de paridade e reversão temporal, obtidas no apêndice C. O efeito do operador de paridade, representado por $\mathcal{P}$, sobre os operadores de posição e momento é definido da seguinte forma

$$\mathcal{P}x\mathcal{P} = -x \quad \text{e} \quad \mathcal{P}p\mathcal{P} = -p \tag{1.31}$$

Essa definição é independente da representação desses operadores. O operador de paridade $\mathcal{P}$ é linear e isso deixa a relação fundamental de comutação (1.1) invariante. Ou seja,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}(xp - px)\mathcal{P} &= \mathcal{P}i\hbar\mathcal{P} \\
 (-x)(-p) - (-p)(-x) &= \mathcal{P}i\hbar\mathcal{P}
 \end{aligned}$$

$$\therefore \quad \mathcal{P}i\mathcal{P} = i. \quad (1.32)$$

Já o operador de reversão temporal, representado por $\mathcal{T}$, tem o seguinte efeito,

$$\mathcal{T}x\mathcal{T} = x \quad \text{e} \quad \mathcal{T}p\mathcal{T} = -p \quad (1.33)$$

Assim como o operador de paridade, esse operador deve deixar a relação fundamental de comutação invariante, e isso requer uma mudança de sinal no símbolo complexo i . Para que a reversão temporal seja uma transformação especial de Lorentz com $t \rightarrow -t$, ela pode fazer isso através da conjugação. Caso contrário, para que a equação de Schrödinger fique invariante implicaria em uma inversão no espectro de energia, e isso é fisicamente inaceitável [55]. Logo,

$$\mathcal{T}i\mathcal{T} = -i \quad (1.34)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(xp - px)\mathcal{T} &= \mathcal{T}i\hbar\mathcal{T} \\ (x(-p) - (-p)x) &= \mathcal{T}i\mathcal{T}\hbar \\ -(xp - px) &= -i. \end{aligned} \quad (1.35)$$

Isso revela que o operador $\mathcal{T}$ é antilinear. Esses operadores são unitários e hermitianos $\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}$ e $\mathcal{T}^\dagger = \mathcal{T}^{-1} = \mathcal{T}$, ou $\mathcal{P}^2 = \mathcal{T}^2 = 1$ e comutam entre si $\mathcal{PT} - \mathcal{TP} = 0$. Em termo da ação conjunta de $\mathcal{P}$ e $\mathcal{T}$ o operador $\mathcal{PT}$ é antilinear e unitário.

Portanto, em mecânica quântica PT simétrica, o produto interno é definido como,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \phi \rangle_{\mathcal{PT}} &= \int_{-\infty}^{\infty} [\psi(x)]^{\mathcal{PT}} \phi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} [\mathcal{PT}\psi(x)] \phi(x) dx. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Na notação de Dirac, o correspondente dual dos estados (dos kets), os bras, ficam

$$|\psi\rangle_{\mathcal{PT}} \stackrel{\text{C.D.}}{\longleftrightarrow} \langle\psi| = (\mathcal{PT}|\psi\rangle)^t, \quad (1.37)$$

onde t denota a operação de transposição, e C.D. significa correspondente dual. Agora que o produto interno está definido, as medidas estatísticas podem ser definidas, isto é, os valores esperados dos operadores são calculados fazendo

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^{\mathcal{PT}}(x, t) O(x, p) \psi(x, t). \quad (1.38)$$

Isto é feito em analogia ao valor esperado de um operador em mecânica quântica hermitiana. Sendo um observável essencialmente PT simétrico (equivalente a ser hermitiano).

1.2.1 Autovalores e Autovetores

O operador hamiltoniano contém e determina as propriedades físicas de uma teoria quântica em três maneiras: determina os níveis de energia através da equação de autovalores (1.14); especifica a evolução temporal dos estados e operadores e carrega as simetrias da teoria. Encontrar os níveis de energia é resolver a equação de autovalor dada por um hamiltoniano em (1.14). Consequentemente, a condição de comutação (1.30) implica que os autovetores de H também são autovetores do operador $\mathcal{PT}$, ou seja,

$$\mathcal{PT}|\psi\rangle = s|\psi\rangle, \quad (1.39)$$

onde $s = \pm 1$, esses autovalores podem ser reescritos como uma fase $s = e^{i\theta}$. Logo, aplicando o operador $\mathcal{PT}$ na equação de autovalores (1.14), verifica-se

$$(\mathcal{PT})H|\psi\rangle = (\mathcal{PT})E|\psi\rangle = E^*(\mathcal{PT})|\psi\rangle = E^*s|\psi\rangle. \quad (1.40)$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1}(\mathcal{PT})|\psi\rangle &= H(\mathcal{PT})|\psi\rangle \\ (\mathcal{PT})H|\psi\rangle &= H(\mathcal{PT})|\psi\rangle = Hs|\psi\rangle = sH|\psi\rangle = sE|\psi\rangle \\ \therefore E^*s|\psi\rangle &= sE|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Portanto, desde que $s \neq 0$ o espectro de energia do hamiltoniano não hermitiano PT simétrico é real $E = E^*$. Ou seja, desde que invariância PT não seja quebrada, os autovalores de energia serão reais. Se os autovetores de H não forem autovetores de $\mathcal{PT}$ é dito que a invariância PT foi quebrada e o espectro pode deixar de ser real.

Além disso, os autovetores de $\mathcal{PT}$ podem ser escritos como sendo invariantes por transformação de paridade e reversão temporal. Pois $(\mathcal{PT})^2|\psi\rangle = |s|^2|\psi\rangle = |\psi\rangle$. No entanto, os vetores podem ser redefinidos por um fator de fase multiplicativo, de modo que sejam autovetores de $\mathcal{PT}$ com autovalor 1. Isso é feito por meio da seguinte substituição, $|\psi\rangle \rightarrow e^{-i\theta/2}|\psi\rangle$. De fato, se verifica

$$\begin{aligned} \mathcal{PT}(e^{-i\theta/2}|\psi\rangle) &= e^{i\theta/2}\mathcal{PT}|\psi\rangle = e^{i\theta/2}e^{i\theta}|\psi\rangle = (e^{i\theta})^2 e^{-i\theta/2}|\psi\rangle \\ \mathcal{PT}(e^{-i\theta/2}|\psi\rangle) &= e^{-i\theta/2}|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Por outro lado, essa fase pode ser absorvida no vetor, que resultará em,

$$\mathcal{PT}|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (1.43)$$

Ou,

$$\mathcal{PT}\psi(x) = \psi^*(-x) = \psi(x). \quad (1.44)$$

Portanto, os autovetores podem ser escolhidos como sendo invariantes por uma trans-

formação de paridade e reversão temporal.

1.2.2 Completeza

A relação de completeza na mecânica quântica PT simétrica possui uma distinção, e é escrita da seguinte forma,

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(y) = \delta(x - y). \quad (1.45)$$

Essa equação foi testada numericamente e analiticamente, por Bender [52]. Ela também pode escrita como

$$\sum_{n=0}^{\infty} [\mathcal{CPT} \psi_n(x)] \psi_n(y) = \delta(x - y), \quad (1.46)$$

onde $\mathcal{C}$ é chamado de operador de conjugação de estado. Alguns autores também o chamam de conjugação de carga, em analogia com a mecânica quântica relativística. Uma derivação formal dessa relação de completeza encontra-se no apêndice A, desenvolvida em Ref. [53]. Lá, também se discute sobre as características e propriedades do operador $\mathcal{C}$.

1.2.3 Produto Interno e Ortonormalidade

Com o produto interno definido em (1.36), verifica-se que os vetores são ortogonais usando a Eq. (1.47), ou seja,

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad \text{e} \quad \langle \psi_m | H^{PT} = \langle \psi_m | E_m, \quad (1.47)$$

tem-se que,

$$\begin{aligned} \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle &= \langle \psi_m | (H | \psi_n \rangle) = \langle \psi_m | E_n | \psi_n \rangle = E_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle_{PT} \\ &= (\langle \psi_m | H) | \psi_n \rangle = (\langle \psi_m | H^{PT}) | \psi_n \rangle = E_m \langle \psi_m | \psi_n \rangle_{PT}. \end{aligned} \quad (1.48)$$

Igualando esse resultado, e reescrevendo a equação na forma,

$$(E_n - E_m) \langle \psi_m | \psi_n \rangle_{PT} = 0, \quad (1.49)$$

conclui-se que para diferentes autovalores $\langle \psi_m | \psi_n \rangle_{PT} = 0$, e quando os autovalores são iguais $\langle \psi_n | \psi_n \rangle_{PT} \neq 0$, ou seja, os autovetores do hamiltoniano PT simétrico são linearmente independentes. Sendo, o produto interno definido por

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle_{PT} = \int [\psi_m(x)]^{PT} \psi_n(x) dx. \quad (1.50)$$

Do resultado (1.49) se observa claramente que estando os autovetores normalizados

eles possuem uma relação de ortonormalidade. Entretanto, com essa definição para o produto interno, existem alguns vetores que possuem norma negativa,

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle_{\mathcal{PT}} = \int \psi_m^*(-x) \psi_n(x) dx = (-1)^n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx. \quad (1.51)$$

Então, a condição de ortonormalidade fica definida como

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle_{\mathcal{PT}} = (-1)^n \delta_{mn}. \quad (1.52)$$

Porém, para que essa teoria tenha significado físico, o produto interno deve ser positivo definido. Assim, para não haver estados com norma negativa, ou seja, para que a probabilidade seja positiva definida, é necessário introduzir o operador de conjugação de estado no produto interno. Esse operador é dado por

$$\mathcal{C}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(y), \quad (1.53)$$

onde $\mathcal{C}(x, y) = \langle x | \mathcal{C} | y \rangle$ é a representação do operador no espaço de coordenadas. Uma propriedade desse operador é identificar a norma PT do estado, da seguinte forma

$$\mathcal{C} | \psi_n \rangle = (-1)^n | \psi_n \rangle. \quad (1.54)$$

Observe que os autovetores de H também são autovetores de $\mathcal{C}$, isso significa que eles comutam e que esse operador exibe uma nova simetria do hamiltoniano. Além disso, ele só aparece na mecânica quântica PT simétrica na definição de um novo produto interno com norma positiva. Doravante, o produto interno é redefinido de maneira que forneça uma interpretação probabilística. Então, para retirar a norma negativa, o novo produto interno é

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \psi_m \rangle_{\mathcal{CPT}} &= \int [\psi_n(x)]^{\mathcal{CPT}} \psi_m(x) dx \\ &= \int [\mathcal{CPT} \psi_n(x)] \psi_m(x) dx. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Que normalizando, resulta em,

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle_{\mathcal{CPT}} = \delta_{nm}. \quad (1.56)$$

Agora a norma é positiva definida. A invariância por paridade e reversão temporal fica $H^{\mathcal{CPT}} = H$, e isso é equivalente à (1.29), pois o operador $\mathcal{C}$ comuta com H . Na mecânica quântica padrão a hermiticidade de um operador se mantém com o tempo graças evolução temporal (1.12), que é gerada pelo hamiltoniano hermitiano. De maneira análoga isso acontece em mecânica quântica PT simétrica, isto é, a simetria PT dos operadores se

mantém pois a evolução é gerada por hamiltonianos PT simétricos.

No caso da mecânica quântica PT simétrica os operadores com espectros reais devem satisfazer a seguinte condição de transposição de O , i. e., $O^t = \mathcal{CPT}O\mathcal{CPT}$, essa condição se mantém para todo o tempo, pois se assume que H é simétrico. E o cálculo dos valores esperados é,

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^{\mathcal{CPT}}(x, t) O(x, p) \psi(x, t). \quad (1.57)$$

Neste caso, o hamiltoniano é um observável. Contudo, os operadores de posição e momento, x e p , não são observáveis. De fato, o valor esperado da posição é um número imaginário puro. Assim, não existe posição em mecânica quântica PT simétrica. Esse resultado é similar ao da teoria quântica de campos fermiônicos. Onde o campo fermiônico corresponde ao operador de posição x , e não possui limite clássico [41].

1.2.4 Unitariedade

Na mecânica quântica usual a hermiticidade garante a conservação da probabilidade pela própria equação de Schrödinger. O que está por trás disso é que os operadores de transformação são unitários. Então, para o caso da mecânica quântica PT simétrica o procedimento é análogo. Partindo de (1.7) e fazendo a transformação de paridade e reversão temporal, tal que

$$-i\hbar \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} = \langle \psi | H^{\mathcal{PT}}, \quad (1.58)$$

com $H^{\mathcal{PT}} = H$ e usando o produto interno definido em (1.36), se verifica que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \psi \rangle &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \right) | \psi \rangle + \langle \psi | \left(\frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ (\langle \psi | H^{\mathcal{PT}}) | \psi \rangle - \langle \psi | (H | \psi \rangle) \right\} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ (\langle \psi | H) | \psi \rangle - \langle \psi | (H | \psi \rangle) \right\} \\ &= 0. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Isso mostra que a norma dos estados é uma constante no tempo, isto é, a probabilidade é conservada. Verifica-se o mesmo resultado considerando o estado evoluído no tempo, através de uma transformação unitária com relação a definição do produto interno (1.36), pois, sendo o hamiltoniano (que é gerador da transformação) PT simétrico, a norma é preservada.

A mecânica quântica PT simétrica reformula a lei de conservação de probabilidade da mecânica quântica padrão [42]. Para verificar isso, considere uma partícula sujeita a ação de forças caracterizada por um potencial $V(x, t)$, tal que a equação Schrödinger é

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi(x, t), \quad (1.60)$$

onde o potencial dependente do tempo é complexo e PT simétrico. Aplicando a transformação de reflexão no espaço e reversão no temporal, resulta que

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(-x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*(-x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \Psi^*(-x, t), \quad (1.61)$$

onde $V^{\mathcal{PT}}(x, t) = V(x, t)$ e $\Psi^{\mathcal{PT}}(x, t) = \Psi^*(-x, t)$. Multiplicando a Eq. (1.60) por $\Psi^*(-x, t)$, e a Eq. (1.61) por $\Psi(x, t)$ e subtraindo uma da outra, tal que,

$$i\hbar \left(\Psi^*(-x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*(-x, t)}{\partial t} \Psi(x, t) \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\Psi^*(-x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \Psi(x, t) \frac{\partial^2 \Psi^*(-x, t)}{\partial x^2} \right), \quad (1.62)$$

que pode ser reescrita como,

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(-x, t) \Psi(x, t) - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^*(-x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(-x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) = 0, \quad (1.63)$$

portanto,

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (1.64)$$

onde a densidade de probabilidade em mecânica quântica PT simétrica é dada por

$$\rho(x, t) = \Psi^*(-x, t) \Psi(x, t), \quad (1.65)$$

e a densidade de corrente de probabilidade por

$$j(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^*(-x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(-x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right). \quad (1.66)$$

Portanto, desde que as funções de ondas satisfaçam as condições de contorno, de tender a zero no infinito, a probabilidade em simetria PT é uma quantidade conservada. Integrando a Eq. (1.64) sobre todo o espaço,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho(x, t) + \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (1.67)$$

onde

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial j(x, t)}{\partial x} = j(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^*(-x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(-x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (1.68)$$

Nessa última passagem tem-se que as funções de onda, bem como suas derivadas, satisfazem as condições de contorno de anularem no infinito. Ou seja, a corrente tende a zero

assintoticamente. Isso resulta em

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(-x, t) \Psi(x, t) = 0, \quad (1.69)$$

ou seja, a norma é uma constante no tempo. Esse resultado permite uma digressão aqui. No caso padrão, para um potencial complexo $V = V_R - iV_I$, onde $V_R = \text{Re}(V)$ é a parte real e $V_I = \text{Im}(V)$ é a parte imaginária, a probabilidade não se conserva,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = -\frac{2}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x, t) V_I \Psi(x, t). \quad (1.70)$$

Isto significa que a probabilidade de encontrar uma partícula em um sistema fechado está diminuindo, ou aumentando, dependendo do sinal da parte imaginária do potencial. Por exemplo, hamiltonianos não hermitianos são usados para descrever fenômenos de decaimento radioativo. Contudo, esses processos com hamiltonianos não hermitianos são apenas aproximações para descrições fenomenológicas de processos físicos, e não podem ser considerados como operadores fundamentais. Nesse caso, a probabilidade vai diminuindo. No caso do decaimento beta, um núcleo radioativo emite partículas e a taxa da probabilidade do núcleo vai diminuindo. O que acontece de fato, é que as partículas nucleares estão decaindo em outro tipo de partículas. De fato, as partículas não podem desaparecer. Logo, essa não hermiticidade é uma aproximação fenomenológica, e não é uma descrição fundamental [41].

Porém, o resultado da Eq. (1.69) só é válido quando a simetria de paridade e reversão temporal não é quebrada. A probabilidade de encontrar uma partícula em um região $x \in (a, b)$ em mecânica quântica com simetria PT é definida por

$$P_{\mathcal{PT}}(a \leq x \leq b) = \int_a^b dx \Psi^*(-x, t) \Psi(x, t). \quad (1.71)$$

O produto interno definido em mecânica quântica PT simétrica é uma constante no tempo, desde que o hamiltoniano, especificamente o potencial (que pode ser complexo e não hermitiano), não tenha a sua invariância de paridade e reversão temporal quebrada.

Capítulo 2

Invariantes Dinâmicos Dependentes do Tempo

Neste capítulo será apresentado o método do invariante dinâmico proposto por Lewis e Riesenfeld em 1969 para encontrar a solução da equação de Schrödinger para sistemas quânticos modulados por hamiltonianos explicitamente dependentes do tempo [6]. Esse método tem se mostrado ser um elegante e poderoso procedimento para encontrar soluções analíticas e exatas para diversos sistemas quânticos não estacionários e tem sido largamente utilizado na literatura. A maioria dos artigos publicados consiste no desenvolvimento de invariantes hermitianos, seguindo a proposta original dos autores. Nesse sentido será apresentado como esse método foi desenvolvido originalmente pelos autores na seção 2.1. Depois disso, usando os axiomas da mecânica quântica PT simétrica, verificamos uma extensão desse método para uma teoria não hermitiana na seção 2.2.

2.1 Invariantes Dinâmicos para Sistemas Hermitianos

Considere um sistema descrito por um hamiltoniano dependente do tempo $H(t)$, que é hermitiano. Assumindo a existência de um operador hermitiano $I^\dagger = I$, que satisfaça a seguinte equação

$$\frac{dI}{dt} \equiv \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0, \quad (2.1)$$

onde $I = I(t)$ também depende explicitamente do tempo. Essa equação indica que esse operador está associado a uma quantidade que se conserva, e por isso recebe o nome de invariante. Da equação de Schrödinger (1.7), sabe-se que $|\psi\rangle$ contém todas as informações do sistema e que é o objetivo central da mecânica quântica. Então, verifica-se a relação de I com esse vetor, multiplicando (2.1) por $|\psi\rangle$ à direita e usando (1.7). Fazendo isso, resulta que

$$\left(\frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] \right) |\psi\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\psi\rangle + I (H |\psi\rangle) - H (I |\psi\rangle) &= 0 \\
i\hbar \left(\frac{\partial I}{\partial t} |\psi\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \right) &= H (I |\psi\rangle) \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I |\psi\rangle) &= H (I |\psi\rangle). \tag{2.2}
\end{aligned}$$

Isso revela que a ação de I sobre um vetor (um estado) que satisfaz a equação de Schrödinger, permanece sendo um vetor que é solução dessa equação, ou seja, a atuação desse operador não altera a estrutura vetorial da solução (isso quer dizer que, sendo a solução um tipo de vetor, continua sendo o mesmo tipo de vetor sobre a atuação do operador invariante). O resultado (2.2), é válido mesmo que esse operador possua derivadas temporais.

Em certas condições os autovetores do invariante $I(t)$ podem satisfazer a equação de Schrödinger. Porém, assumindo que o invariante não possua dependência de derivadas temporais, os autovetores podem ser redefinidos multiplicando-os por uma fase dependente do tempo, que será determinada a partir da equação de Schrödinger. Ou seja, os autovetores de I vão diferir da solução da equação de Schrödinger por uma fase que depende explicitamente do tempo. Assumindo que I possui um conjunto completo de autovetores $\{|\lambda, \kappa\rangle\}$, tal que,

$$\begin{aligned}
I(t) |\lambda, \kappa\rangle &= \lambda |\lambda, \kappa\rangle \\
\langle \lambda', \kappa' | \lambda, \kappa \rangle &= \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\kappa'\kappa}, \tag{2.3}
\end{aligned}$$

onde λ são os autovalores de I . Pelo fato do mesmo ser hermitiano implica diretamente que ele possui um espectro real ($I^\dagger = I \Rightarrow \lambda^* = \lambda \in \mathbb{R}$), sendo κ os números quânticos. Diferenciando a equação de autovalor acima com respeito ao tempo, obtém-se

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle. \tag{2.4}$$

Daí, multiplicando (2.4) por $\langle \lambda', \kappa' |$ à esquerda, resulta em

$$\begin{aligned}
\langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + \lambda' \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle &= \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + \lambda \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle \\
\langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle &= \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\kappa'\kappa} + (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle. \tag{2.5}
\end{aligned}$$

Multiplicando (2.1) por $|\lambda, \kappa\rangle$ à direita,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + I (H |\lambda, \kappa\rangle) - H (I |\lambda, \kappa\rangle) &= 0 \\
i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + I H |\lambda, \kappa\rangle - \lambda H |\lambda, \kappa\rangle &= 0, \tag{2.6}
\end{aligned}$$

e multiplicando esse resultado por $\langle \lambda', \kappa' |$ à esquerda, encontra-se que

$$\begin{aligned} i\hbar \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle - (\lambda' - \lambda) \langle \lambda', \kappa' | H | \lambda, \kappa \rangle &= 0 \\ i\hbar \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle &= (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | H | \lambda, \kappa \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Assim, tomando $\lambda = \lambda'$, essa equação torna-se

$$\langle \lambda, \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = 0, \quad (2.8)$$

de modo que a Eq. (2.5) fica,

$$\langle \lambda, \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \delta_{\kappa' \kappa}. \quad (2.9)$$

Logo, para $\kappa' = \kappa$, resulta em

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0. \quad (2.10)$$

Com isso, conclui-se que os autovalores de I são independentes do tempo. Para verificar a conexão entre os autovetores de I e a solução da equação de Schrödinger, usando esse último resultado na Eq. (2.4) que fica da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle + I \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle &= \lambda \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle \\ \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle &= (\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Assim, multiplicando por $\langle \lambda', \kappa' |$ à esquerda, obtém-se

$$\langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle. \quad (2.12)$$

Agora, substituindo (2.12) em (2.7), encontra-se

$$i\hbar (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | H | \lambda, \kappa \rangle, \quad (2.13)$$

ou,

$$(\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right\} | \lambda, \kappa \rangle = 0. \quad (2.14)$$

Portanto, para $\lambda \neq \lambda'$ resulta em,

$$i\hbar \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = \langle \lambda', \kappa' | H | \lambda, \kappa \rangle. \quad (2.15)$$

Porem, observe que esse resultado não é válido para o caso em que $\lambda = \lambda'$, isto é,

$$i\hbar \langle \lambda, \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, \kappa \rangle = \langle \lambda, \kappa' | H | \lambda, \kappa \rangle. \quad (2.16)$$

No entanto, se a Eq. (2.15) for válida tanto para $\lambda \neq \lambda'$ quanto para $\lambda = \lambda'$, conclui-se que $|\lambda, \kappa\rangle$ é uma solução (um caso) especial de $|\psi\rangle$, para a equação de Schrödinger. Logo,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle = H |\lambda, \kappa\rangle. \quad (2.17)$$

Finalmente, assumindo que o operador invariante não depende de derivadas temporais, o seu conjunto de autovetores pode ser redefinido, por um fator de fase multiplicativo, que seja arbitrário e dependente do tempo, ou seja,

$$|\lambda, \kappa\rangle \rightarrow e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} |\lambda, \kappa\rangle, \quad (2.18)$$

onde $\mu_{\lambda\kappa}(t)$ é uma função arbitrária do tempo e real. Esse novo vetor não altera nada nas equações anteriores. No entanto, para a Eq. (2.15), tem-se,

$$i\hbar \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_\mu = \langle \lambda', \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle_\mu, \quad (2.19)$$

onde

$$\frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_\mu = ie^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} |\lambda, \kappa\rangle + e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle. \quad (2.20)$$

Logo, substituindo o novo autovetor em (2.16), produz

$$\langle \lambda', \kappa' | e^{i\mu_{\lambda'\kappa'}(t)} e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} \left\{ -\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} |\lambda, \kappa\rangle + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right\} |\lambda, \kappa\rangle = \quad (2.21)$$

$$\langle \lambda', \kappa' | e^{i\mu_{\lambda'\kappa'}(t)} H (e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} |\lambda, \kappa\rangle). \quad (2.22)$$

Então, cancelando as exponenciais, obtém-se

$$\begin{aligned} -\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\kappa'\kappa} + \langle \lambda', \kappa' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle &= \langle \lambda', \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle \\ \hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\kappa'\kappa} &= \langle \lambda', \kappa' | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\lambda, \kappa\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

No entanto, a Eq. (2.15) só é válida para $\lambda \neq \lambda'$. Todavia, a escolha da fase é tal que, esse resultado se mantenha para $\lambda = \lambda'$ na Eq. (2.16). Desse modo, para o novo autovetor de $I(t)$, tem-se que

$$i\hbar \langle \lambda, \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_\mu = \langle \lambda, \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle_\mu, \quad (2.24)$$

que resultará em,

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \delta_{\kappa'\kappa} = \langle \lambda, \kappa' | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\lambda, \kappa\rangle. \quad (2.25)$$

Para que essa equação seja satisfeita, $|\lambda, \kappa\rangle$ deve ser escolhido de tal maneira que o lado direito seja nulo para $\kappa \neq \kappa'$. Portanto, a fase arbitrária é determinada através da simples

equação,

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} = \langle \lambda, \kappa | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \lambda, \kappa \rangle. \quad (2.26)$$

Essa diagonalização é possível uma vez que $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H$ é hermitiano, logo, possui um conjunto completo. Desde que cada novo autovetor $|\lambda, \kappa\rangle_\mu$ de $I(t)$ satisfaça a equação de Schrödinger, a solução $|\psi\rangle_\mu$ pode ser expandida nessa nova base, isto é

$$|t\rangle = \sum_{\lambda, \kappa}^{\infty} c_{\lambda\kappa} |\lambda, \kappa\rangle_\mu$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\lambda, \kappa}^{\infty} c_{\lambda\kappa} e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} |\lambda, \kappa; t\rangle, \quad (2.27)$$

onde $c_{\lambda\kappa}$ são os coeficientes da expansão e independentes do tempo. Os autovetores do operador invariante $I(t)$ são dependentes do tempo $|\lambda, \kappa\rangle = |\lambda, \kappa; t\rangle$. Essa omissão foi feita para não carregar a notação.

2.2 Invariantes Dinâmicos para Sistemas não Hermitianos com Simetria PT

De acordo com o que foi abordado na seção 1.2 uma condição suficiente para que um operador tenha um espectro de autovalores reais é que ele precisa ser invariante sobre a operação de paridade e reversão temporal. Munido dessa condição, é possível construir um operador invariante não hermitiano PT simétrico tal que a condição (2.1) seja satisfeita, com o hamiltoniano sendo também PT simétrico. Então, para derivar o método de Lewis e Riesenfeld nessa perspectiva, é necessário que

$$I^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})I(\mathcal{PT})^{-1} = I. \quad (2.28)$$

Com essa condição, o invariante comuta com o operador $\mathcal{PT}$, isso quer dizer que os seus autovetores também são autovetores do operador de paridade e reversão temporal, $\mathcal{PT}|\lambda, \kappa\rangle = s|\lambda, \kappa\rangle$, onde esse autovalor pode ser escrito como uma fase $s = e^{i\theta}$. Sem perda de generalidade (como já foi visto anteriormente), esses autovetores podem ser redefinidos como $|\lambda, \kappa\rangle \rightarrow e^{-i\theta/2} |\lambda, \kappa\rangle$, resultando em

$$\mathcal{PT}|\lambda, \kappa\rangle = |\lambda, \kappa\rangle, \quad (2.29)$$

ou seja, resolvendo a equação de autovalor para o invariante PT simétrico, depois de encontrar seus autovetores é possível absolver a fase $e^{-i\theta/2}$, de forma que (2.29) seja satisfeita. Isso é idêntico ao que foi feito anteriormente na seção 1.2 para o hamiltoniano. Perceba que ambos os operadores, invariante e hamiltoniano, comutam com o operador

$\mathcal{PT}$, mas isso não significa que I e H comutem.

Do mesmo modo do caso anterior, assumindo que o invariante PT simétrico possua um conjunto completo de autovetores, tal que

$$I(t) |\lambda, \kappa\rangle = \lambda |\lambda, \kappa\rangle. \quad (2.30)$$

Então, fazendo uma transformação de paridade e reversão temporal na equação de autovalor, se obtém

$$\begin{aligned} (\mathcal{PT})I(t)(\mathcal{PT})^{-1}(\mathcal{PT}) |\lambda, \kappa\rangle &= (\mathcal{PT}) (\lambda |\lambda, \kappa\rangle) \\ I(t)^{\mathcal{PT}} (\mathcal{PT} |\lambda, \kappa\rangle) &= \lambda^* (\mathcal{PT} |\lambda, \kappa\rangle). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Portanto, se $I(t)$ obedece a condição (2.28), podemos usar a Eq. (2.29), para obter

$$I(t)^{\mathcal{PT}} |\lambda, \kappa\rangle = I(t) |\lambda, \kappa\rangle = \lambda |\lambda, \kappa\rangle = \lambda^* |\lambda, \kappa\rangle, \quad (2.32)$$

ou seja,

$$I(t)^{\mathcal{PT}} = I(t) \quad \Rightarrow \quad \lambda = \lambda^* \in \mathbb{R}. \quad (2.33)$$

Isso generaliza o resultado (1.49) obtido para o hamiltoniano PT simétrico na seção 1.2 para qualquer operador que possuam essa simetria. Em particular, para o invariante, temos $(\lambda' - \lambda) \langle \lambda' | \lambda \rangle_{\mathcal{PT}} = 0$. Conclui-se que os seus autovetores são linearmente independentes. Esse é um fato importante sobre o invariante, pois o espaço gerado pelos seus autovetores atende a relação de completeza, que remanesce nas soluções especiais acarretando em uma expansão nesse espaço para a solução geral da equação de Schrödinger. Isso também abrange a condição anterior de hermiticidade.

Agora, para desenvolver o método de Lewis e Riesenfeld aqui, é necessário substituir o produto interno usual pela definição (1.55) para os autovetores do invariante. Bem como no caso hermitiano, os autovetores do invariante PT simétrico formam uma base ortonormal no espaço de Hilbert da mecânica quântica PT simétrica, isto é,

$$\langle \lambda', \kappa' | \lambda, \kappa \rangle_{\mathcal{PT}} = \sigma_\lambda \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{\kappa' \kappa}, \quad (2.34)$$

onde $\sigma_\lambda = \pm 1$ identifica a norma do vetor. Note que ainda não foi incluído o operador $\mathcal{C}$, pois a intenção aqui é verificar a diferença dos resultados obtidos, comparados com o caso hermitiano.

Para a equação de Schrödinger dependente do tempo (1.7) com um hamiltoniano não hermitiano, é possível construir um operador invariante, isto é, um operador que satisfaz (2.1), tal que, a Eq. (2.2) seja satisfeita. Assim, o invariante tem as mesmas propriedades físicas do caso hermitiano. Além disso, a realidade do espectro desse operador e a condição (2.1) garante que seus autovalores sejam constante no tempo. Para verificar isso, deriva-se a equação de autovalor do com relação ao tempo e tomando o produto interno, resultando

em

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle. \quad (2.35)$$

$$\langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} = \frac{\partial \lambda}{\partial t} \sigma_\lambda \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{\kappa'\kappa} + (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.36)$$

Agora, fazendo o mesmo sanduíche em (2.1) e sendo os operadores PT simétricos, encontra-se

$$\begin{aligned} \langle \lambda', \kappa' | \left(\frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] \right) |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} &= 0 \\ \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} &= \frac{1}{i\hbar} (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} = 0. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Perceba que tomando $\lambda = \lambda'$ resulta em $\langle \lambda', \kappa' | \partial I / \partial t |\lambda, \kappa\rangle = 0$. Logo, substituindo esse resultado na Eq. (2.36) e considerando também que $\kappa = \kappa'$, leva ao resultado desejado, isto é,

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0. \quad (2.38)$$

Sabendo que o autovalor do invariante é constante, a Eq. (2.36), fica

$$\langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.39)$$

Agora, combinando com (2.37), obtém-se

$$i\hbar (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.40)$$

Para $\lambda \neq \lambda'$, isso resulta em

$$i\hbar \langle \lambda', \kappa' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}} = \langle \lambda', \kappa' | H |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.41)$$

Supondo que esse resultado seja válido para $\lambda = \lambda'$, significa que os autoestados do invariante PT simétrico satisfazem a equação de Schrödinger com um hamiltoniano PT simétrico. Então, assumindo que o invariante não tenha dependência de derivadas temporais é possível fazer a substituição $|\lambda, \kappa\rangle \rightarrow |\lambda, \kappa\rangle_\mu = e^{i\mu_{\lambda\kappa}(t)} |\lambda, \kappa\rangle$. Com isso, $|\lambda, \kappa\rangle_\mu$ é uma solução particular que difere dos autovetores de I por uma fase dependente do tempo.

Portanto, podemos ajustar o novo vetor de modo que a Eq. (2.41) se mantenha para $\lambda = \lambda'$. Isso conduz a

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \sigma_\lambda \delta_{\kappa'\kappa} = \langle \lambda, \kappa' | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) |\lambda, \kappa\rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.42)$$

Esse resultado é obtido de maneira análoga ao caso anterior. Basta substituir o novo vetor $|\lambda, \kappa\rangle_\mu$ em (2.41), tomando $\lambda = \lambda'$. Supondo que o novo vetor deixe o lado direito

da equação acima nulo para $\kappa \neq \kappa'$, a fase fica determinada por

$$\hbar \frac{d\alpha_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \sigma_\lambda = \langle \lambda, \kappa | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \lambda, \kappa \rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (2.43)$$

Em termos de funções de onda fica,

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} \sigma_\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{\lambda,\kappa}^{\mathcal{PT}}(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \varphi_{\lambda,\kappa}(x) dx, \quad (2.44)$$

onde a constante σ_λ do lado esquerdo se cancelará com a que surge no lado direito. Isso ficará mais evidente no capítulo 4, onde essa discussão será aplicada. Aqui, uma pergunta pertinente seria, o que aconteceria se o operador $\mathcal{C}$ tivesse sido incluso nessa discussão? Nada mudaria esteticamente, pois como foi visto, a necessidade desse operador é para definir uma norma positiva-definida, ou seja, a constante σ_λ não apareceria nesses cálculos. Além disso, a equação que determina a fase ficaria

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} = \langle \lambda, \kappa | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \lambda, \kappa \rangle_{\mathcal{CPT}}, \quad (2.45)$$

que explicitamente fica,

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda\kappa}(t)}{dt} = \int \varphi_{\lambda,\kappa}^{\mathcal{CPT}}(x) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \varphi_{\lambda,\kappa}(x) dx. \quad (2.46)$$

que é muito similar ao caso hermitiano.

Então, a solução da equação de Schrödinger com um hamiltoniano PT simétrico pode ser expandida em

$$|\Psi(t)\rangle_{\mathcal{PT}} = \sum_{\lambda,\kappa}^{\infty} c_{\lambda\kappa} e^{i(\mu_{\lambda\kappa}(t) - \theta/2)} |\lambda, \kappa; t\rangle_{\mathcal{PT}}, \quad (2.47)$$

onde $c_{\lambda\kappa}$ são os coeficientes da expansão e independentes do tempo. O subscript $\mathcal{PT}$ é para fazer uma distinção do caso anterior, mas não será utilizado no futuro para não carregar a notação.

Para que os autovetores do invariante não tenham norma negativa, é necessário introduzir o operador $\mathcal{C}$. Assim, o produto interno entre eles fica positivo definido. Em analogia ao que foi feito no apêndice A, o operador de conjugação pode ser visto como uma “métrica” que conecta os autovetores de I com os autovetores do seu adjunto $I^\dagger$. Chamando $|\lambda, \kappa\rangle = |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle$, tal que

$$I |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle = \lambda |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle \quad \text{e} \quad I^\dagger |\tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}\rangle = \lambda' |\tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}\rangle, \quad (2.48)$$

onde $|\tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}\rangle$ são os autovetores de $I^\dagger$. Entretanto, esses dois conjuntos de autovetores

formam uma base biortogonal, onde $\lambda' = \lambda^* = \lambda$. A função do operador é

$$|\tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}\rangle = \sigma_\lambda \mathcal{P} |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle = \mathcal{P} \mathcal{C} |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle. \quad (2.49)$$

Isto é, desde que o operador seja invariante por transformação de paridade e reversão temporal, existe um tipo de métrica (um link) que conecta os autovetores do operador com os do seu adjunto.

Portanto, a relação de completeza e ortonormalidade da base dual é,

$$\sum_{\lambda,\kappa} |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle \langle \tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}| = \sum_{\lambda,\kappa} |\tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}\rangle \langle \varphi_{\lambda,\kappa}| = 1, \quad (2.50)$$

e

$$\langle \tilde{\varphi}_{\lambda',\kappa'} | \varphi_{\lambda,\kappa} \rangle = \langle \varphi_{\lambda',\kappa'} | \tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa} \rangle = \delta_{\lambda',\lambda} \delta_{\kappa',\kappa}. \quad (2.51)$$

Assim, usando a Eq. (2.49) para escrever essas equações na representação de coordenadas, obtemos

$$\sum_{\lambda,\kappa} \mathcal{C} \mathcal{P} \mathcal{T} \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) \varphi_{\lambda,\kappa}(y, t) = \delta(x - y), \quad (2.52)$$

que usando a Eq. (2.29) e a propriedade do operador de conjugação $\mathcal{C} \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) = \sigma_\lambda \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t)$, fica

$$\sum_{\lambda,\kappa} \sigma_\lambda \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) \varphi_{\lambda,\kappa}(y, t) = \delta(x - y), \quad (2.53)$$

e a ortonormalidade positiva definida torna-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{C} \mathcal{P} \mathcal{T} \varphi_{\lambda',\kappa'}(x, t) \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) dx = \delta_{\lambda',\lambda} \delta_{\kappa',\kappa}. \quad (2.54)$$

Portanto, o operador de conjugação de estado do invariante é

$$\mathcal{C} = \sum_{\lambda,\kappa} \sigma_\lambda |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle \langle \tilde{\varphi}_{\lambda,\kappa}|. \quad (2.55)$$

Então, usando (2.49),

$$\mathcal{C} = \sum_{\lambda,\kappa} |\varphi_{\lambda,\kappa}\rangle \langle \varphi_{\lambda,\kappa}| \mathcal{P}, \quad (2.56)$$

que na representação de coordenadas fica

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(x, y) &= \sum_{\lambda,\kappa} \langle x | \varphi_{\lambda,\kappa} \rangle \langle \varphi_{\lambda,\kappa} | \mathcal{P} | y \rangle = \sum_{\lambda,\kappa} \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) \varphi_{\lambda,\kappa}^*(-y, t) \\ \mathcal{C}(x, y) &= \sum_{\lambda,\kappa} \varphi_{\lambda,\kappa}(x, t) \varphi_{\lambda,\kappa}(y, t). \end{aligned} \quad (2.57)$$

Esse operador também pode ser escrito em termos das soluções particulares da equação de Schrödinger. Chamando $|\lambda, \kappa\rangle_\mu = |\psi_{\lambda, \kappa}\rangle$, tal que

$$|\psi_{\lambda, \kappa}\rangle \langle\psi_{\lambda, \kappa}| = e^{i\mu_{\lambda, \kappa}(t)} |\varphi_{\lambda, \kappa}\rangle \langle\varphi_{\lambda, \kappa}| e^{-i\mu_{\lambda, \kappa}(t)} = |\varphi_{\lambda, \kappa}\rangle \langle\varphi_{\lambda, \kappa}|, \quad (2.58)$$

ou seja, o operador de conjugação pode ser usado para que a solução geral (2.47) tenha norma positiva definida. Portanto, desde que o operador invariante seja linear esse método é perfeitamente aplicável para construir uma solução geral para equação de Schrödinger dependente do tempo para H não hermitiano com simetria de paridade e reversão temporal.

Capítulo 3

Partícula em um Potencial Linear Hermitiano Dependente do Tempo

Um modelo muito conhecido e bem resolvido, é o oscilador harmônico, tanto independente do tempo quanto dependente do tempo. Pois esse problema é muito aplicado em diversas áreas, como física atômica e molecular, química quântica, óptica quântica, física do estado sólido, teoria de campos, entres outras. Pro outro lado, um modelo que vem sendo largamente empregado é o potencial linear. Usando esse modelo, R. Colella em 1975, observou experimentalmente a interferência quântica induzida pela gravidade e mostrou que o potencial gravitacional entra na equação de Schrödinger [33]. O mesmo modelo linear, também pode ser usado para dá um tratamento teórico no estudo do espectro de energia de um sistema ligado quark-antiquark, chamado de quarkonium. Esses exemplos são de um potencial independente do tempo. Para esse potencial, a equação de Schrödinger torna-se a equação de Airy fazendo uma mudança de escala adimensional, cujas soluções são as funções de Airy [1].

Por outro lado, quando o potencial é dependente do tempo, a solução da equação de Schrödinger não é trivial. Usando um método geral, baseado na simples álgebra de um operador de transformação para construir uma evolução temporal sobre um estado inicial que satisfaz certas condições iniciais, Rau encontrou a solução da equação de Schrödinger de forma exata em Ref. [34]. Nesse problema ele considerou o elétron sobre uma interação de dipolo elétrico, descrito por um potencial linear produzido por um campo elétrico dependente do tempo. Considerando o mesmo problema, I. Guedes obteve também uma solução, porém, usando o método do invariante de Lewis e Riesenfeld [29].

No artigo de Guedes ele considerou o invariante na forma linear. No entanto, ele não resolveu a equação de autovalor para $I(t)$, e propôs a solução da equação de Schrödinger como sendo $\psi = N \exp\{\eta(t)x + \mu(t)\}$, porém, essa solução era apenas uma solução particular de $I\varphi = \lambda\varphi$. Para o caso em que o autovalor é nulo. Outra consideração com perdas de generalidade, foi $B(t) = 0$ para a equação (10b) em seu artigo. A forma correta de aplicar o método veio com H Bekkar, F. Benamira e M. Maamache, que encontraram as autofunções do invariante linear para um autovalor qualquer [35]. Esses autores,

construíram a solução geral de Schrödinger como um pacote de onda, considerando uma amplitude do tipo $g(\lambda) = e^{i\lambda^3/3}$ e obtendo uma solução em termos das funções de Airy.

O que levou esses últimos autores a encontrar o pacote de onda em termos das funções de Airy, foi o trabalho de Mang Feng [36], que obteve uma solução completamente analítica para o problema, usando uma simples álgebra chamada de método de transformação espaço-temporal. O problema de uma partícula carregada interagindo com um campo eletromagnético tem solução exata conhecida, que são as funções de onda de Volkov ou Gordon-Volkov [37]. Usando essas soluções, Bauer também mostrou que a solução de I. Guedes é uma solução particular das funções de onda de Volkov.

Esse modelo do potencial linear, realmente vem sendo muito empregado [30, 31, 32, 37, 38, 39]. Particularmente, no que se refere ao tratamento feito com aplicação do método dos invariantes. Neste capítulo, será apresentado de maneira formal a aplicação do método de Lewis e Riesenfeld, para encontrar a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para esse potencial. Especificamente, vamos considerar uma partícula com massa dependente do tempo $m = m(t)$ sujeita a um potencial linear dependente do tempo, da forma $V(x, t) = f(t)x$. Neste caso, o hamiltoniano que descreve o sistema é dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + f(t)x, \quad (3.1)$$

onde $H^\dagger(t) = H(t)$ e $f(t)$ é uma função real qualquer que depende do tempo. Com esse hamiltoniano, as equações de movimento obtidas são,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x, H] = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ p &= m\dot{x}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p, H] = -\frac{\partial H}{\partial x} = -f(t) \\ \dot{p} &= -f(t). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Combinando essas equações, resulta

$$\dot{p} = \dot{m}\dot{x} + m\ddot{x} = -f(t) \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + rx + \frac{f(t)}{m} = 0, \quad (3.4)$$

onde

$$r = \frac{d}{dt} \ln[m(t)]. \quad (3.5)$$

Então, para esse potencial a equação de Schrödinger correspondente, fica da seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + f(t)x\psi(x, t). \quad (3.6)$$

Assim, para encontrar a solução dessa equação utilizando o método de Lewis e Riesenfeld,

considere um invariante não trivial que satisfaça a Eq. (2.1), onde $I = I(t)$ é hermitiano. Assumindo que o invariante tenha uma forma linear, dado por

$$I(t) = \alpha(t)x + \beta(t)p + \gamma(t) \quad (3.7)$$

Dessa maneira, para que (2.1) seja satisfeita, tem-se que

$$\left(\dot{\beta} + \frac{\alpha}{m}\right)p + \dot{\alpha}x + (\dot{\gamma} - \beta f(t)) = 0, \quad (3.8)$$

que resulta em

$$\dot{\beta} = -\frac{\alpha}{m}, \quad \dot{\alpha} = 0 \quad e \quad \dot{\gamma} = f(t)\beta, \quad (3.9)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha_0 \\ \beta(t) &= -\alpha_0 \int_0^t \frac{d\tau}{m(\tau)} \\ \gamma(t) &= \int_0^t f(\tau)\beta(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Sendo o invariante um operador hermitiano, implica em $\alpha(t), \beta(t), \gamma(t) \in \mathbb{R}$. Agora, a equação de autovalor para o invariante linear, conduz à

$$\begin{aligned} I(t)\varphi_\lambda(x, t) &= \lambda\varphi_\lambda(x, t) \\ \left(\alpha_0 x - i\hbar\beta(t)\frac{\partial}{\partial x} + \gamma(t)\right)\varphi_\lambda(x, t) &= \lambda\varphi_\lambda(x, t) \\ \frac{\partial\varphi_\lambda(x, t)}{\partial x} &= \frac{i}{\hbar\beta(t)}\left[(\lambda - \gamma(t)) - \alpha_0 x\right]\varphi_\lambda(x, t). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Essa é uma equação diferencial de primeira ordem simples de resolver. Por separação de variáveis, encontra-se

$$\varphi_\lambda(x, t) = N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}. \quad (3.12)$$

Porém, essas soluções formam uma base ortonormal $\langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_\lambda \rangle = \delta(\lambda' - \lambda)$. Nesta caso, obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_\lambda \rangle &= \int dx \varphi_{\lambda'}^*(x, t) \varphi_\lambda(x, t) = \delta(\lambda' - \lambda) \\ |N|^2 (2\pi\hbar\beta(t)) \delta(\lambda' - \lambda) &= \delta(\lambda' - \lambda) \\ N &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\beta(t)}}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

que é a constante de normalização. Finalmente, as autofunções do invariante linear en-

contradas, são

$$\varphi_\lambda(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\beta(t)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}. \quad (3.14)$$

Essas são as autofunções do invariante linear hermitiano devidamente normalizadas, que por sua vez formam um base ortonormal no espaço de Hilbert. Porém, como o invariante (3.7) não depende de derivadas temporais, permite reescrever as autofunções com uma fase temporal multiplicativa. Então, essas novas autofunções são soluções particulares (no sentido de que é uma solução com um determinado autovalor λ de I) da equação de Schrödinger, onde

$$\psi_\lambda(x, t) = \exp [i\mu_\lambda(t)] \varphi_\lambda(x, t). \quad (3.15)$$

Como foi visto na seção 2.1 a fase é determinada pela seguinte equação

$$\hbar \frac{d\mu_\lambda(t)}{dt} = \langle \varphi_\lambda | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \varphi_\lambda \rangle. \quad (3.16)$$

Derivando a autofunção (3.14) com relação ao tempo

$$\frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\dot{\beta}}{2\beta} - \frac{i\dot{\beta}}{\hbar\beta} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] - \frac{i\dot{\gamma}}{\hbar\beta}x \right\} \varphi_\lambda(x, t),$$

usando (3.9) e multiplicando o resultado por $i\hbar$, obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] + f(t)x \right\} \varphi_\lambda(x, t). \quad (3.17)$$

Em seguida, para encontrar o termo de derivada segunda basta derivar (3.11) com relação a posição, resultando em

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} &= \left\{ -\frac{i\alpha_0}{\hbar\beta} + \left[\frac{i}{\hbar\beta} [(\lambda - \gamma) - \alpha_0 x] \right]^2 \right\} \varphi_\lambda(x, t) \\ \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} &= \left\{ -\frac{i\alpha_0}{\hbar\beta} - \frac{1}{\hbar^2\beta^2} [(\lambda - \gamma)^2 - 2(\lambda - \gamma)\alpha_0 x + \alpha_0^2 x^2] \right\} \varphi_\lambda(x, t). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Então,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} + \frac{(\lambda - \gamma)^2}{2m\beta^2} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\} \varphi_\lambda(x, t). \quad (3.19)$$

Usando (3.17) e (3.19) para obter o resultado do lado direito de (3.16), encontramos que

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \varphi_\lambda(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{m(t)\beta^2(t)} \varphi_\lambda(x, t). \quad (3.20)$$

Desse modo,

$$\begin{aligned}\langle \varphi_\lambda | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \varphi_\lambda \rangle &= \int \varphi_\lambda^*(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \varphi_\lambda(x, t) dx \\ &= -\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{m(t)\beta^2(t)} \langle \varphi_\lambda | \varphi_\lambda \rangle.\end{aligned}\quad (3.21)$$

Assim, a Eq. (4.37), fica

$$\hbar \frac{d\mu_\lambda(t)}{dt} = -\frac{1}{2} \frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{m(t)\beta^2(t)}.\quad (3.22)$$

Então, a fase encontrada é escrita da seguinte forma

$$\mu_\lambda(t) = -\frac{1}{2\hbar} \int_0^t \frac{(\lambda - \gamma(\tau))^2}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau.\quad (3.23)$$

Portanto, a solução para Eq. de Schrödinger com um potencial linear dependente do tempo é

$$\psi_\lambda(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\beta(t)}} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \int_0^t \frac{(\lambda - \gamma(\tau))^2}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau + \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}.\quad (3.24)$$

Onde os coeficientes $\alpha(t)$, $\beta(t)$ e $\gamma(t)$ do operador invariante linear para o potencial linear são dados por (3.10). No apêndice C, se verifica que, de fato essa função de onda é uma solução da equação de Schrödinger com um potencial linear dependente do tempo.

Contudo, uma solução geral para a equação de Schrödinger é obtida fazendo uma expansão dessas soluções particulares. Neste caso, como as autofunções que constituem a base são determinadas por um espectro de autovalor contínuo do invariante, logo, a expansão é

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\lambda) \psi_\lambda(x, t) d\lambda.\quad (3.25)$$

Onde $g(\lambda)$ é o coeficiente da expansão, também chamado de amplitude do pacote de onda. O que acontece é que o invariante linear possui um espectro contínuo, assim, a solução acima pode ser interpretada como um pacote de onda.

Portanto, é cabível fazer um comentário entre esses resultados obtidos aqui e os da literatura usando o mesmo procedimento. Em [29] o autor tomou o resultado de (3.10) equivalente a $\alpha_0 = 0$. Em [35] obteve uma expressão diferente para (3.22) em consequência de não ter normalizado as autofunções do invariante (3.14). Então, para que a solução de Schrödinger fosse fisicamente aceitável ele impôs o resultado de Guedes $B_0 = \alpha_0 = 0$ e a solução obtida ficou parecida com (3.24). Todavia, como se percebe aqui isso não é necessário, e as autofunções do invariante linear são dadas por (3.14) que fornecem as soluções particulares $\psi_\lambda(x, t)$. Em [31] os autores obtiveram a solução sem descartar nenhum termo, mas consideraram um invariante linear não hermitiano e obtiveram uma

solução fisicamente aceitável na forma de um pacote de onda gaussiano. Depois disso [39] corrigiu a solução de [35] de forma exata com invariante linear hermitiano. Ele não normalizou as autofunções do invariante, mas na sua expressão para a fase (3.23) surge um termo logarítmico que cai na solução vindo a ser a própria constante de normalização. Em seguida, ele constrói uma solução geral usando um $g(\lambda)$ que resulta em um pacote de onda gaussiano.

Observe que a forma obtida para o coeficiente $\beta(t)$ dada pela segunda Eq. de (3.10) apresenta uma divergência para $t = 0$. Porém, essa divergência é simples de ser removida e pode ser encontrada na Ref. [54]. Em resumo, considerando que a divergência ocorra em um instante de tempo $t = t'$, define-se uma quantidade finita para todo tempo t dada por $f_\lambda(t) = \mu_\lambda(t)\beta(t)$, então, é possível mostrar que em $t = t'$ obtém-se $f_\lambda(t') = (\lambda - \gamma(t'))^2/2\hbar m(t')\beta(t')$.

Capítulo 4

Partícula em um Potencial Linear não Hermitiano Dependente do Tempo com simetria PT

Para verificar a validade do método do invariante em mecânica quântica PT simétrica, neste capítulo será feito a seguinte substituição $f(t) \rightarrow i\eta(t)$ no potencial do capítulo anterior, tornando o hamiltoniano do problema não hermitiano. Assim, o hamiltoniano que descreve uma partícula com massa dependente do tempo sujeita a um potencial linear não hermitiano é dado por

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + i\eta(t)x, \quad (4.1)$$

onde $m = m(t)$ e $\eta(t)$ são funções reais. Como o termo cinético é sempre hermitiano, note que a não hermiticidade deve vir do potencial ($V(x, t) \neq V^\dagger(x, t)$), em outras palavras, o hamiltoniano não é hermitiano devido o potencial. No entanto, esse hamiltoniano é fisicamente aceitável, pois sua simetria de paridade e reversão temporal não é quebrada,

$$H^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}) = \frac{p^2}{2m} + (-i)\eta(t)(-x) = H \quad (4.2)$$

Para esse hamiltoniano, as equações de movimento são

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x, H] = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ p &= m\dot{x}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p, H] = -\frac{\partial H}{\partial x} = -i\eta(t) \\ \dot{p} &= -i\eta(t), \end{aligned} \quad (4.4)$$

que combinadas resulta na seguinte equação de movimento,

$$\ddot{x} + rx + \frac{i\eta(t)}{m} = 0, \quad (4.5)$$

onde

$$r = \frac{d}{dt} \ln[m(t)]. \quad (4.6)$$

Então, a equação de Schrödinger dependente do tempo correspondente a esse potencial fica escrita da seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + i\eta(t)x\psi(x, t). \quad (4.7)$$

Para encontrar a solução dessa equação utilizando o método de Lewis e Riesenfeld, suponha novamente um invariante na forma linear dado por,

$$I(t) = \alpha(t)x + \beta(t)p + \gamma(t). \quad (4.8)$$

Com isso, para que a Eq. (2.1) seja satisfeita, temos que

$$\left(\dot{\beta} + \frac{\alpha}{m}\right)p + \dot{\alpha}x + (\dot{\gamma} - i\beta\eta(t)) = 0. \quad (4.9)$$

De forma análoga ao caso anterior, encontramos que

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha_0 \\ \beta(t) &= -\alpha_0 \int_0^t \frac{d\tau}{m(\tau)} \\ \gamma(t) &= i \int_0^t \eta(\tau)\beta(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Como o invariante é não hermitiano, implica que, a priori, $\alpha(t)$, $\beta(t)$ e $\gamma(t)$ são funções complexas. Assumindo que esse invariante possui simetria de paridade e reversão temporal podemos identificar a verdadeira forma desses coeficientes. Para não carregar as equações, considere

$$\nu_1(t) = \int_0^t \frac{d\tau}{m(\tau)} \quad e \quad \nu_2(t) = \int_0^t \eta(\tau)\nu_1(\tau) d\tau. \quad (4.11)$$

Aqui lembremos que a integral de uma função par é uma função ímpar, e vice-versa. Assim, se $m(t)$ for uma função simétrica (par) a função $\nu_1(t)$ será antissimétrica (ímpar). Consequentemente, se $\eta(t)$ for uma função simétrica a função $\nu_2(t)$ será simétrica, pois o produto com $\nu_1(t)$ será antissimétrica. Usando essas funções, os coeficientes (4.10) ficam da seguinte forma

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \alpha_0 \\ \beta(t) &= -\alpha_0 \nu_1(t) \end{aligned}$$

$$\gamma(t) = -i\alpha_0\nu_2(t). \quad (4.12)$$

Então, para que o operador (4.8) seja fisicamente aceitável ele deve ser PT simétrico (2.28),

$$\begin{aligned} I^{\mathcal{PT}} &= (\mathcal{PT})I(\mathcal{PT})^{-1} = I \\ &= (\mathcal{PT})\alpha(t)x(\mathcal{PT})^{-1} + (\mathcal{PT})\beta(t)p(\mathcal{PT})^{-1} + (\mathcal{PT})\gamma(t)(\mathcal{PT})^{-1} \\ &= \alpha(t)x + \beta(t)p + \gamma(t) \end{aligned} \quad (4.13)$$

Para que isso aconteça, o coeficiente do primeiro termo do operador, que está multiplicando o operador de posição x deve ser um imaginário puro. Pois, do primeiro termo tem-se

$$(\mathcal{PT})\alpha_0x(\mathcal{PT})^{-1} = \alpha_0^*(-x) = -\alpha_0^*x, \quad (4.14)$$

onde

$$(\mathcal{PT})\alpha_0x(\mathcal{PT})^{-1} = \alpha_0x, \quad (4.15)$$

Portanto,

$$\alpha_0 = -\alpha_0^*. \quad (4.16)$$

E conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \beta^*(t) &= -\beta(t) \\ \gamma^*(t) &= \gamma(t). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Assim, chamando $\alpha_0 = ia_0$ (onde a_0 é uma constante real diferente de zero), verificamos que o invariante não muda com a transformação de paridade e reverção temporal, ou seja, ele é PT simétrico. Diante disso, as Eqs. (4.18) ficam

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= ia_0 \\ \beta(t) &= -ia_0\nu_1(t) \\ \gamma(t) &= a_0\nu_2(t). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Desse modo, o invariante na representação do espaço de coordenadas é dado por

$$\begin{aligned} I(t) &= ia_0x - ia_0\nu_1(t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + a_0\nu_2(t) \\ I(t) &= a_0 \left[ix - \hbar\nu_1(t) \frac{\partial}{\partial x} + \nu_2(t) \right]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Perceba que o termo do meio é muito sutil com respeito a transformação de paridade e reverção temporal. Como essa é uma transformação de Lorentz própria não ortocrona

(reflexão do espaço e inversão do tempo) [55], a transformação do invariante (4.19) é

$$I^{\mathcal{PT}}(t) = a_0 \left[(-i)(-x) - \hbar \nu_1(-t) \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right) + \nu_2(-t) \right]$$

$$I^{\mathcal{PT}}(t) = a_0 \left[ix + \hbar(-\nu_1(t)) \frac{\partial}{\partial x} + \nu_2(t) \right] = I(t). \quad (4.20)$$

Lembrando que as funções $\nu_1(t)$ e $\nu_2(t)$ são antissimétrica e simétrica, respectivamente (observe que para uma massa constante $m(t) = m_0$ resulta em $\nu_1(t) = t/m_0$). Como essas funções são reais, a reversão temporal não pode ser feita de acordo com a propriedade de conjugação de $\mathcal{T}$, lembrando que o ato de conjugar é equivalente a fazer $t \rightarrow -t$.

Portanto, o operador invariante linear definido aqui é fisicamente aceitável, de acordo com a mecânica quântica PT simétrica. Isto é, ele tem um espectro de autovalores reais, e seus autovetores formam uma base, atendendo a condição de ortonormalidade e consequentemente de completeza. Então, resolvendo a equação de autovalor do invariante (4.8), dada por

$$\left(\alpha_0 x - i\hbar\beta(t) \frac{\partial}{\partial x} + \gamma(t) \right) \varphi_\lambda(x, t) = \lambda \varphi_\lambda(x, t), \quad (4.21)$$

obtemos

$$\varphi_\lambda(x, t) = N \exp \left\{ \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}. \quad (4.22)$$

Esse cálculo não difere em nada ao do caso anterior, em que o invariante era hermitiano. Neste caso, essas autofunções também são autofunções do operador $\mathcal{PT}$, visto que esses operadores comutam $[\mathcal{PT}, I] = 0$. Então, para que essas autofunções sejam invariantes pela operação de paridade e reversão temporal, será feito a seguinte substituição

$$\varphi_\lambda(x, t) \rightarrow \phi_\lambda(x, t) = e^{-i\theta_\lambda/2} \varphi_\lambda(x, t), \quad (4.23)$$

ou seja, são autofunções de $\mathcal{PT}$ com autovalor $+1$,

$$\mathcal{PT}\phi_\lambda(x, t) = \phi_\lambda(x, t). \quad (4.24)$$

Sabendo que essas soluções formam uma base ortonormal com respeito ao novo produto interno $\langle \varphi_{\lambda'} | \varphi_\lambda \rangle_{\mathcal{PT}} = \sigma_\lambda \delta(\lambda' - \lambda)$, onde $\sigma_\lambda = \pm 1$. A fase $e^{-i\theta_\lambda/2}$ é uma constante que depende de λ , mas a normalização é feita para o caso em que $\lambda' = \lambda$. Então a normalização de $\varphi_\lambda(x, t)$ é equivalente a $\phi_\lambda(x, t)$, assim, a normalização será feito por meio de

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_{\lambda'}^{\mathcal{PT}}(x, t) \varphi_\lambda(x, t) = \sigma_\lambda \delta(\lambda' - \lambda), \quad (4.25)$$

onde, $\varphi_{\lambda'}^{\mathcal{PT}}(x, t) = \varphi_{\lambda'}^*(-x, t)$. Logo

$$\begin{aligned}\varphi_{\lambda'}^{\mathcal{PT}}(x, t) &= N^* \exp \left\{ \frac{(-i)}{\hbar\beta^*(t)} \left[(\lambda' - \gamma(t))(-x) - \frac{\alpha_0^*}{2} x^2 \right] \right\} \\ &= N^* \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar(-\beta(t))} \left[(\lambda' - \gamma(t))(-x) + \frac{\alpha_0}{2} x^2 \right] \right\} \\ &= N^* \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda' - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2} x^2 \right] \right\},\end{aligned}\quad (4.26)$$

de modo que

$$\varphi_{\lambda'}^{\mathcal{PT}}(x, t)\varphi_{\lambda}(x, t) = N^*N \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda' - \lambda)x \right] \right\}. \quad (4.27)$$

Usando esse resultado na condição de normalização, e lembrando de uma das definições da função delta, encontramos

$$\begin{aligned}|N|^2(2\pi\hbar\beta(t))\delta(\lambda' - \lambda) &= \sigma_{\lambda}\delta(\lambda' - \lambda) \\ N &= \sqrt{\frac{\sigma_{\lambda}}{2\pi\hbar\beta(t)}}.\end{aligned}\quad (4.28)$$

Que é intuitivamente similar a constante de normalização do caso anterior. Porém, aqui existe estados de norma negativa com relação ao produto interno (1.36). Finalmente,

$$\phi_{\lambda}(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma_{\lambda}}{2\pi\hbar\beta(t)}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2} x^2 \right] - \frac{i\theta}{2} \right\}. \quad (4.29)$$

Aqui lembremos que os estados de norma negativa são removidos com o uso do operador $\mathcal{C}$, do qual não fizemos uso. Então, a solução da equação de Schrödinger (4.7) é

$$\psi_{\lambda}(x, t) = e^{i\mu_{\lambda}(t)}\phi_{\lambda}(x, t). \quad (4.30)$$

Onde a fase é determinada por

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda}(t)}{dt} \sigma_{\lambda} = \langle \phi_{\lambda} | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \phi_{\lambda} \rangle_{\mathcal{PT}}. \quad (4.31)$$

Lembrando que no lado direito dessa equação a constante σ_{λ} aparece devido a normalização dada por (4.25). No entanto, ela não aparece na fase, pois se cancelará com o que aparecerá no lado direito da equação. Para evitar isso, a fase pode ser calculada usando o produto interno definido com a normalização $\mathcal{CPT}$, ou seja,

$$\hbar \frac{d\mu_{\lambda}(t)}{dt} = \langle \phi_{\lambda} | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \phi_{\lambda} \rangle_{\mathcal{CPT}}. \quad (4.32)$$

Porém, estamos interessados na natureza mais qualitativa do problema, para identificar as distinções do caso hermitiano feito no capítulo anterior. Para determinar a fase, como

no caso anterior, é necessário encontrar as derivadas primeira com relação ao tempo e segunda com relação a posição das autofunções do invariante, dada por (4.29). No entanto, sem perda de generalidade, e tomando os devidos cuidados, é possível usar os resultados do capítulo anterior. Pois, o que difere da autofunção encontrada aqui são duas constantes multiplicativas, σ_λ e $e^{-i\theta_\lambda/2}$. Sendo assim, usando a Eq. (3.17), com $f(t) \rightarrow i\eta(t)$ obtemos que

$$i\hbar \frac{\partial \phi_\lambda(x, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] + i\eta(t)x \right\} \phi_\lambda(x, t). \quad (4.33)$$

Também usando a Eq. (3.19), resulta em

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} + \frac{(\lambda - \gamma)^2}{2m\beta^2} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\} \phi_\lambda(x, t). \quad (4.34)$$

Assim, a operação do lado direito de (4.31), produz

$$\begin{aligned} \langle \phi_\lambda | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \phi_\lambda \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\lambda^{\mathcal{PT}}(x, t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \phi_\lambda(x, t) dx \\ &= -\frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{2m(t)\beta^2(t)} \langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Como $\langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle = \sigma_\lambda$, e utilizando esse resultado em (4.31), resulta em

$$\dot{\mu}_\lambda(t) = -\frac{1}{2\hbar} \frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{m(t)\beta^2(t)}. \quad (4.36)$$

Então, a fase fica similar a forma do caso anterior

$$\mu_\lambda(t) = -\frac{1}{2\hbar} \int_0^t \frac{(\lambda - \gamma(\tau))^2}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau. \quad (4.37)$$

Portanto, a solução da equação de Schrödinger fica

$$\begin{aligned} \psi_\lambda(x, t) = \sqrt{\frac{\sigma_\lambda}{2\pi\hbar\beta(t)}} \exp \left\{ -\frac{i}{2\hbar} \int_0^t \frac{(\lambda - \gamma(\tau))^2}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau - \frac{i\theta_\lambda}{2} + \right. \\ \left. \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Assim, como o espectro do invariante PT simétrico é contínuo, a solução geral para a equação de Schrödinger pode ser expandida da seguinte forma,

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\lambda) \psi_\lambda(x, t) d\lambda. \quad (4.39)$$

Portanto, dada a forma da amplitude $g(\lambda)$ é possível obter uma expressão geral

para a solução da equação de Schrödinger, correspondente a um hamiltoniano com um potencial linear dependente do tempo não hermitiano. Afim de construir um pacote de onda gaussiano, considere a amplitude da seguinte forma,

$$g(\lambda) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{1/4}} \exp\left(-\frac{a^2}{4}\lambda^2\right). \quad (4.40)$$

Em seguida, reescrevemos a fase (4.37), como

$$\mu_\lambda(t) = -\frac{1}{2\hbar} [\lambda^2 f_1(t) - 2\lambda f_2(t) + f_3(t)], \quad (4.41)$$

onde

$$f_1(t) = \int_0^t \frac{1}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau, \quad (4.42)$$

$$f_2(t) = \int_0^t \frac{\gamma(\tau)}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau, \quad (4.43)$$

$$f_3(t) = \int_0^t \frac{\gamma^2(\tau)}{m(\tau)\beta^2(\tau)} d\tau. \quad (4.44)$$

Assim, fazendo as devidas substituições a solução geral fica,

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{a\sigma}{2\pi\hbar\beta(t)}} \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\frac{a^2}{4}\lambda^2 - \frac{i}{2\hbar} [\lambda^2 f_1(t) - 2\lambda f_2(t) + f_3(t)] - \frac{i\theta}{2} + \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[(\lambda - \gamma(t))x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] \right\}, \quad (4.45)$$

ou,

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{a\sigma}{2\pi\hbar\beta(t)}} \frac{1}{(2\pi)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp \left\{ -\left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right) \lambda^2 + \frac{i}{\hbar\beta(t)} (x + \beta(t)f_2(t))\lambda - \frac{i}{\hbar\beta(t)} \left[\gamma(t)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2 + \frac{\beta(t)f_3(t)}{2} + \frac{\theta\beta(t)}{2} \right] \right\}. \quad (4.46)$$

Com essa forma para a integral, fica simples fazer uma substituição de variável e resolve-la. Fazendo

$$u = \left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right) \lambda, \quad (4.47)$$

temos que $d\lambda = A(t)du$, onde

$$A(t) = \left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1/2}, \quad (4.48)$$

também chamando

$$b = \frac{i}{\hbar\beta(t)} (x + \beta(t)f_2(t)) \left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1/2}, \quad (4.49)$$

e

$$c = -\frac{i}{2\hbar\beta(t)} \left[2\gamma(t)x + \alpha_0 x^2 + \beta(t)f_3(t) + \hbar\theta\beta(t) \right], \quad (4.50)$$

a integral em (4.46) fica com a forma de uma gaussiana, usando o seguinte resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \exp(-u^2 + bu + c) = \sqrt{\pi} \exp\left(\frac{b^2}{4} + c\right), \quad (4.51)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = \sqrt{\frac{a\sigma}{2\hbar\beta(t)}} \frac{A(t)}{(2\pi)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{(x + \beta(t)f_2(t))^2}{4\hbar^2\beta^2(t)} \left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1} - \right. \\ \left. \frac{i}{2\hbar\beta(t)} \left[\alpha_0 x^2 + 2\gamma(t)x + \beta(t)f_3(t) + \hbar\theta\beta(t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Para simplificar um pouco essa expressão, note que

$$\left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1} = \frac{4}{a^2} \left(1 + \frac{4f_1^2(t)}{\hbar^2 a^4} \right)^{-1} \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right). \quad (4.53)$$

Definindo

$$B(t) = \frac{1}{a^2\hbar^2\beta^2(t)} \left(1 + \frac{4f_1^2(t)}{\hbar^2 a^4} \right)^{-1}, \quad (4.54)$$

segue que

$$\left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1} = 4\hbar^2\beta^2(t)B(t) \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right). \quad (4.55)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = \sqrt{\frac{a\sigma}{2\hbar\beta(t)}} \frac{A(t)}{(2\pi)^{1/4}} \exp \left\{ -B(t) (x + \beta(t)f_2(t))^2 \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right) - \right. \\ \left. \frac{i}{2\hbar\beta(t)} \left[\alpha_0 x^2 + 2\gamma(t)x + \beta(t)f_3(t) + \hbar\theta\beta(t) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Entretanto, observe que

$$\begin{aligned} |A(t)|^2 &= \left(\frac{a^2}{4} + \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1/2} \left(\frac{a^2}{4} - \frac{if_1(t)}{2\hbar} \right)^{-1/2} = \frac{4}{a^2} (a^2\hbar^2\beta^2B(t))^{1/2} \\ &= \frac{4\hbar\beta}{a} \sqrt{B(t)}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Com esse resultado é possível simplificar o pacote de onda (4.56), pois $|A(t)| = (4\hbar\beta/a\sqrt{B(t)})^{1/2}$. Da forma polar de um número complexo, implica que, $A(t) = |A(t)|e^{i\delta_0}$, e sem perda de generalidade essa fase pode ser descartada, essa escolha é sempre possível para a função de onda total, desde que seja uma fase global [3]. Portanto, o pacote de

onda fica

$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2B(t)}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{\sigma} \exp \left\{ -B(t) (x + \beta(t)f_2(t))^2 \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right) - \frac{i}{2\hbar\beta(t)} \left[\alpha_0 x^2 + 2\gamma(t)x + \beta(t)f_3(t) + \hbar\theta\beta(t) \right] \right\}. \quad (4.58)$$

Com esse resultado, e com a definição do produto interno em mecânica quântica PT simétrica (1.36), definido na seção 1.2, a densidade de probabilidade é definida como

$$\rho(x, t) = \Psi^{\mathcal{PT}}(x, t)\Psi(x, t), \quad (4.59)$$

onde $\Psi^{\mathcal{PT}}(x, t) = \Psi^*(-x, t)$. Sendo as funções $f_1(t)$, $f_2(t)$ e $f_3(t)$ reais e $\beta^*(t) = -\beta(t)$ imaginário puro, obtemos que

$$\Psi^{\mathcal{PT}}(x, t) = \left(\frac{2B(t)}{\pi} \right)^{1/4} \sqrt{\sigma} \exp \left\{ -B(t) (x + \beta(t)f_2(t))^2 \left(1 + \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right) + \frac{i}{2\hbar\beta(t)} \left[\alpha_0 x^2 + 2\gamma(t)x + \beta(t)f_3(t) + \hbar\theta\beta(t) \right] \right\}, \quad (4.60)$$

onde $B(t)$ também é real (4.54). Portanto,

$$\rho(x, t) = \left(\frac{2B(t)}{\pi} \right)^{1/2} \sigma \exp \left\{ -2B(t) (x + \beta(t)f_2(t))^2 \right\}. \quad (4.61)$$

Observe que, de fato, a escolha da amplitude $g(\lambda)$ resultou em uma distribuição de probabilidade gaussiana em mecânica quântica PT simétrica. Onde a distribuição gaussiana tem a seguinte forma

$$G(x) = \frac{1}{(2\pi\Delta x^2)^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\Delta x^2} \right\}, \quad (4.62)$$

com largura Δx (que é o desvio padrão) centrada em $\langle x \rangle$ (que é a média da posição). Fazendo uma comparação entre (4.62) e (4.61) de imediato tem-se $\Delta x = (4B(t))^{-1/2}$ e $\langle x \rangle = -\beta(t)f_2(t)$. Diante disso, da normalização da distribuição (4.61) temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = \left(\frac{2B(t)}{\pi} \right)^{1/2} \sigma \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -2B(t) (x + \beta(t)f_2(t))^2 \right\} dx, \quad (4.63)$$

e usando um resultado conhecido de uma distribuição gaussiana, dado por

$$\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-\varepsilon u^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}}, \quad (4.64)$$

chamando $u = x + \beta(t)f_2(t)$ resulta em

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = \sigma, \quad (4.65)$$

portanto, o pacote de onda gaussiano possui norma positiva e negativa, uma vez que são autovetores de $\mathcal{PT}$. Por outro lado, percebe-se que se tivéssemos usado o operador de conjugação de estado $\mathcal{C}$ desde o início não cairíamos nessa inconsistência, e obteríamos esse resultado com $\sigma = 1$. Doravante, para fazer os cálculos que se segue tomamos a constante do sinal de normalização igual a um.

Uma vez que a solução da equação de Schrödinger é conhecida, todas as informações sobre o sistema podem ser extraídas. Assim, para fazer uso desse resultado, é interessante verificar a relação de incerteza da posição e momento. Lembrando que, o valor esperado de um operador é calculado fazendo,

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^{PT}(x, t) O(x, p) \Psi(x, t). \quad (4.66)$$

Então, para calcular as flutuações de medida da posição, começamos por

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^{PT}(x, t) x \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx x \rho(x, t), \quad (4.67)$$

Assim, usando (4.61), encontramos que

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-2B(x+\beta f_2)^2} \\ \langle x \rangle &= \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{1/2} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx (x + \beta f_2) e^{-2B(x+\beta f_2)^2} - \beta f_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-2B(x+\beta f_2)^2} \right\} \end{aligned}$$

Para resolver essas integrais, basta fazer uma substituição de variáveis, chamando $u = x + \beta f_2$, logo, a primeira integral é de uma função ímpar em um intervalo simétrico, cujo resultado é zero. A segunda é uma típica integral de uma gaussiana (4.64) que resulta em $(\pi/2B)^{1/2}$. Portanto, o resultado final fica

$$\langle x \rangle = -\beta(t)f_2(t). \quad (4.68)$$

Esse resultado é intuitivamente o que esperávamos, o qual será discutido no final desse capítulo. Por outro lado, para encontrar a relação de incerteza também calculamos

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 \rho(x, t) = \left(\frac{1}{4B(t)} + \beta^2(t)f_2^2(t) \right). \quad (4.69)$$

Para resolver a integral, basta fazer a mesma substituição de variável e usar um

artifício matemático

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-2B(x+\beta f_2)^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} du (u - \beta f_2)^2 e^{-2Bu^2} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} du \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial B} - 2\beta f_2 u - \beta^2 f_2^2 \right\} e^{-2Bu^2} \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial B} \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-2Bu^2} - \beta^2 f_2^2 \int_{-\infty}^{\infty} du e^{-2Bu^2} \\
 &= \left(\frac{\pi}{2B} \right)^{1/2} \left(\frac{1}{4B} + \beta^2 f_2^2 \right).
 \end{aligned}$$

Portanto, a incerteza da posição é

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \left(\frac{1}{4B(t)} \right)^{1/2}. \quad (4.70)$$

Para o momento se segue os mesmos passos, ou seja

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^{PT}(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x, t). \quad (4.71)$$

Atuando o operador momento no pacote de onda, resulta

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \left\{ 2i\hbar B \left(1 - \frac{2if_1}{\hbar a^2} \right) (x + \beta f_2) - \frac{\alpha_0}{\beta} x - \frac{\gamma}{\beta} \right\} \Psi. \quad (4.72)$$

Assim, substituindo na expressão do valor esperado do momento (4.71), resulta em

$$\langle p \rangle = \left\{ 2i\hbar B \left(1 - \frac{2if_1}{\hbar a^2} \right) (\langle x \rangle + \beta f_2) - \frac{\alpha_0}{\beta} \langle x \rangle - \frac{\gamma}{\beta} \right\}. \quad (4.73)$$

Como a integração é feita no espaço de posição, os fatores que não dependem da posição saem da integral, logo, os termos que estão multiplicando x geram a expressão do valor esperado da posição. Então, usando o resultado (4.68), o valor esperado do momento é

$$\langle p \rangle = \alpha_0 f_2(t) - \frac{\gamma(t)}{\beta(t)}. \quad (4.74)$$

Para conhecer a incerteza do momento, também é necessário encontrar

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^{PT}(x, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \Psi(x, t) \quad (4.75)$$

Então, atuando o operador momento em (4.72),

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\hbar^2 \left\{ -2B \left(1 - \frac{2if_1}{\hbar a^2} \right) - \frac{i\alpha_0}{\hbar\beta} + \left[-2B \left(1 - \frac{2if_1}{\hbar a^2} \right) (x + \beta f_2) - \frac{i}{\hbar\beta} (\alpha_0 x + \gamma) \right]^2 \right\} \Psi. \quad (4.76)$$

Definindo as quantidades

$$C(t) = 2B(t) \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right), \quad (4.77)$$

$$D(t) = C(t) + \frac{i\alpha_0}{\hbar\beta(t)}, \quad (4.78)$$

e fazendo alguns procedimentos algébricos, encontramos que

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\hbar^2 \left\{ -D + D^2 x^2 + 2D \left(C\beta f_2 + \frac{i\gamma}{\hbar\beta} \right) x + C^2 \beta^2 f_2^2 + \frac{2iCf_2\gamma}{\hbar} - \frac{\gamma^2}{\hbar^2 \beta^2} \right\} \Psi. \quad (4.79)$$

Logo,

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left\{ -D + D^2 \langle x^2 \rangle + 2D \left(C\beta f_2 + \frac{i\gamma}{\hbar\beta} \right) \langle x \rangle + C^2 \beta^2 f_2^2 + \frac{2iCf_2\gamma}{\hbar} - \frac{\gamma^2}{\hbar^2 \beta^2} \right\}. \quad (4.80)$$

Usando os resultados obtidos para o cálculo da incerteza da posição, e fazendo mais algumas manipulações algébricas, obtemos

$$\langle p^2 \rangle = \hbar^2 D(t) \left(1 - \frac{D(t)}{4B(t)} \right) + \left(\alpha_0 f_2(t) - \frac{\gamma(t)}{\beta(t)} \right)^2. \quad (4.81)$$

Portanto, a incerteza do momento, é

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \hbar \left[D(t) \left(1 - \frac{D(t)}{4B(t)} \right) \right]^{1/2}. \quad (4.82)$$

Finalmente, utilizando os resultados obtidos em (4.70) e (4.82), encontramos a relação de incerteza da posição e do momento, dada por

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \left[\frac{D(t)}{B(t)} \left(1 - \frac{D(t)}{4B(t)} \right) \right]^{1/2}. \quad (4.83)$$

Por outro lado, desejamos que o pacote de onda gaussiano forneça a mínima incerteza, ou seja,

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (4.84)$$

Para que isso ocorra devemos ter a seguinte condição,

$$\frac{D(t)}{B(t)} \left(1 - \frac{D(t)}{4B(t)} \right) = 1. \quad (4.85)$$

Assim, chamando $y = D/B$ e organizando essa equação, obtem-se uma equação de segundo grau para y , ou seja, $y^2 - 4y + 4 = 0$ com solução única $y = 2$. Portanto, $D(t) = 2B(t)$, usando (4.77) e (4.78) conduz à

$$\begin{aligned} D(t) &= 2B(t) \left(1 - \frac{2if_1(t)}{\hbar a^2} \right) + \frac{i\alpha_0}{\hbar\beta(t)} = 2B(t) \\ \frac{4f_1(t)B(t)}{a^2} &= \frac{\alpha_0}{\beta(t)} \\ \alpha_0\beta(t) &= \frac{4f_1(t)}{\hbar^2 a^4 + 4f_1^2(t)}, \end{aligned} \quad (4.86)$$

No entanto, substituindo $\beta(t) = -\alpha_0\nu_1(t)$ nessa condição, encontramos

$$\alpha_0^2 = -\frac{4f_1(t)}{\nu_1(t) (\hbar^2 a^4 + 4f_1^2(t))}, \quad (4.87)$$

Portanto, a condição para incerteza mínima, dada por (4.85), permite encontrar o coeficiente α_0 . Porém, α_0 é uma constante no tempo, como foi visto anteriormente. Isso sugere que esse resultado deve se manter para todo o tempo t , em particular, isso deve ser válido para $t = 0$. Mas, por definição $f_1(0) = 0$ e $\nu_1(0) = 0$, e tomando o limite de t tendendo a zero na expressão acima, resulta em uma indeterminação,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \alpha_0^2 = \frac{0}{0}. \quad (4.88)$$

Por outro lado, essa indeterminação permite usar a regra de L'Hospital, que resulta em

$$\begin{aligned} \alpha_0^2 \Big|_{t=0} &= -4 \frac{\dot{f}_1(t)}{\dot{\nu}_1(t) (\hbar^2 a^4 + 4f_1^2(t)) + \nu_1(t) (8f_1(t)\dot{f}_1(t))} \Big|_{t=0}, \\ &= -\frac{4}{\hbar^2 a^4 \beta^2(0)}, \end{aligned}$$

onde

$$\dot{f}_1(t) = \frac{1}{m(t)\beta^2(t)} \quad \text{e} \quad \dot{\nu}_1(t) = \frac{1}{m(t)}. \quad (4.89)$$

Portanto, encontramos

$$\alpha_0 = \frac{2i}{\hbar a^2 \beta(0)}. \quad (4.90)$$

Consequentemente,

$$\beta(t) = -\frac{2i}{\hbar a^2 \beta(0)} \int_0^t \frac{1}{m(\tau)} d\tau. \quad (4.91)$$

Observe que α_0 e $\beta(t)$ são imaginários puros, como havia sido pressuposto anteriormente, logo, $\gamma(t)$ é real, com isso nosso operador invariante fica de fato PT simétrico. Note também que os valores esperados de posição e momento são imaginários puro (4.68) e (4.74). Isso concorda com as previsões da mecânica quântica PT simétrica, uma vez que esses operadores não são observáveis físicos nessa teoria [41]. Além disso, na análise feita por Bender nesse artigo, mostra que o valor esperado da posição é um imaginário puro negativo, que corresponde a uma trajetória clássica sobre a parte inferior do plano complexo.

Finalmente, gostaríamos de enfatizar que a discussão feita nesse capítulo não foi encontrada na literatura da física até o momento e pode vir a ser rediscutida em um artigo, ou melhor, propomos publicar esse discussão na forma de um artigo de revista da física conforme está sendo sugerido na referência [56].

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Extendemos o método do invariante para a mecânica quântica PT simétrica e vimos que é perfeitamente possível aplicar o método de acordo com seus axiomas. Também notamos que é possível encontrar o operador de conjugação de estado, inerente dessa teoria, a partir dos autovetores do invariante e obter uma solução com norma positiva definida para a equação de Schrödinger dependente do tempo modulada por um hamiltoniano não hermitiano.

Procuramos então aplicar o método para estudar o movimento quântico de uma partícula sujeita a uma interação descrita por potencial linear dependente do tempo. Em particular, construímos um invariante dinâmico linear hermitiano e obtemos as suas autofunções formalmente normalizadas, depois disso, encontramos a solução da equação de Schrödinger para o problema e mencionamos como construir uma solução geral.

Finalmente, aplicamos o método do invariante estendido para a mecânica quântica PT simétrica para estudar o movimento quântico de uma partícula sujeita a um potencial linear não hermitiano. Então, construímos um invariante linear não hermitiano com simetria de paridade e reversão temporal e encontramos suas autofunções devidamente normalizadas de acordo com os axiomas da mecânica quântica PT simétrica. Depois disso, encontramos a solução da equação de Schrödinger correspondente a esse potencial. Usando esse conjunto de funções de onda, construímos uma solução geral do tipo pacote de onda gaussiano e calculamos as flutuações quânticas para a posição e momento da partícula, em seguida, encontramos a relação de incerteza. Além disso, verificamos que a ocorrência da incerteza mínima permitiu encontrar uma expressão explícita dos coeficientes do invariante linear, que por sua vez concordaram com os resultados esperados. Esses também forneceram resultados atestados da mecânica quântica PT simétrica para os valores esperados da posição e momento. Esses resultados encontrados no capítulo 4 serão submetidos à publicação na forma de um artigo [56].

Os resultados encontrados nessa dissertação nos motivam a investigar outros sistemas quânticos não estacionários utilizando hamiltonianas não hermitianas com simetria PT. A partir disso, usando o método de Lewis e Riesenfeld pretendemos, em trabalhos futuros, analisar o comportamento quântico dos seguintes sistemas: (a) oscilador harmônico

na presença de um potencial linear não hermitiano dependente do tempo com simetria PT, (b) oscilador generalizado não hermitiano com simetria PT (com o termo do tipo $(xp + px)i(y(t)/2)x$), (c) oscilador invertido generalizado, (d) circuito LC na presença de uma fonte complexa com simetria PT e (e) circuito RLC generalizado dependente do tempo modulado por uma hamiltoniana não hermitiana com simetria PT.

Apêndice A

Produto Interno e o Operador C

O não convencional produto interno entre estados é positivo definido, apenas com a introdução do operador de conjugação $\mathcal{C}$. A invariância de paridade e reversão temporal revela um link direto entre os vetores de um operador e os vetores de seu adjunto, que formam uma base dual. O operador de conjugação surge naturalmente através das propriedades das bases duais em termos de uma única base, mostrando ser uma função do hamiltoniano [53].

No geral, o espectro dos autovalores dos operadores são complexos. No entanto, sempre que o operador é hermitiano o seu espectro é real. Mas, o operador pode ser não hermitiano e possuir um espectro real. Uma condição suficiente para que isso aconteça é que o operador seja invariante por uma ação conjunta de paridade e reverção temporal. Isto implica em,

$$H^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1} = H, \quad (\text{A.1})$$

ou,

$$[H, \mathcal{PT}] = 0. \quad (\text{A.2})$$

E se os autovetores também forem invariantes sobre a operação $\mathcal{PT}$. Os operadores são ditos pseudo-hermitianos, quando satisfazem

$$\mathcal{S}H\mathcal{S}^{-1} = H^\dagger, \quad (\text{A.3})$$

onde $\mathcal{S}$ é a matrix de transformação. Em mecânica quântica com simetria PT, tem-se $\mathcal{S} = \mathcal{P}$. A partir de (A.1), verifica-se

$$(\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1} = \mathcal{P}H^*\mathcal{P}^{-1} = \mathcal{P}H^\dagger\mathcal{P}^{-1} = H$$

$$\mathcal{P}H\mathcal{P}^{-1} = H^\dagger. \quad (\text{A.4})$$

Então, para provar as expressões (1.53) e (1.55). Considere um hamiltoniano diagonalizável e não hermitiano com um espectro discreto. Com o seguinte par de equações de

autovalores,

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad \text{e} \quad H^\dagger |\psi^n\rangle = E_n^* |\psi^n\rangle, \quad (\text{A.5})$$

com $n = 1, 2, \dots$ e que essas equações possuem um par completo de autovetores, que em geral os autovalores são complexos $E_n = E_n^*$. Esses vetores constituem uma base biortogonal no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, de modo que

$$\sum_n |\psi^n\rangle \langle \psi_n| = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = 1, \quad (\text{A.6})$$

e

$$\langle \psi_n | \psi^n \rangle = \langle \psi^n | \psi_n \rangle = \delta_{nm}. \quad (\text{A.7})$$

Agora, considere que o hamiltoniano de (A.5) é PT simétrico, Eq. (A.1), com autovalores não degenerados. Da primeira Eq. (A.5) aplicando o operador $\mathcal{PT}$ à esquerda, resulta

$$\begin{aligned} (\mathcal{PT})H |\psi_n\rangle &= (\mathcal{PT})E_n |\psi_n\rangle \\ (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1}(\mathcal{PT}) |\psi_n\rangle &= E_n^*(\mathcal{PT}) |\psi_n\rangle \\ H(\mathcal{PT} |\psi_n\rangle) &= E_n^*(\mathcal{PT} |\psi_n\rangle). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Entretanto, sabe-se que

$$\begin{aligned} (\mathcal{PT})^2 |\psi_n\rangle &= |d_n|^2 |\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad d_n = \pm 1 = e^{i\theta_n} \\ |\psi_n\rangle &\rightarrow e^{-i\theta_n/2} |\psi_n\rangle \\ \mathcal{PT} |\psi_n\rangle &= |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

De fato, isso se verifica fazendo

$$\begin{aligned} \mathcal{PT}(e^{-i\theta_n/2} |\psi_n\rangle) &= e^{i\theta_n/2} \mathcal{PT} |\psi_n\rangle = e^{i\theta_n/2} e^{i\theta_n} |\psi_n\rangle = (e^{i\theta_n})^2 e^{-i\theta_n/2} |\psi_n\rangle \\ \mathcal{PT}(e^{-i\theta_n/2} |\psi_n\rangle) &= e^{-i\theta_n/2} |\psi_n\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Isso significa que (A.8) é igual a primeira equação em (A.5). Por outro lado, tomando a forma adjunta das equações (A.5),

$$\langle \psi_n | H^\dagger = \langle \psi_n | E_n^* \quad \text{e} \quad \langle \psi^n | H = \langle \psi^n | (E^n)^*, \quad (\text{A.11})$$

e usando (A.7), mostra-se que

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | H^\dagger | \psi^n \rangle &= E_n^* \langle \psi_n | \psi^n \rangle \quad \Rightarrow \quad E^n \langle \psi_n | \psi^n \rangle = E_n^* \langle \psi_n | \psi^n \rangle \\ \langle \psi^n | H | \psi_n \rangle &= (E^n)^* \langle \psi^n | \psi_n \rangle \quad \Rightarrow \quad E_n \langle \psi^n | \psi_n \rangle = (E^n)^* \langle \psi^n | \psi_n \rangle, \end{aligned}$$

ou seja, $E^n = E_n^*$ e vice-versa. Assim, multiplicando (A.8) por $\langle \psi^m |$ à esquerda e usando a Eq. (A.11) com $E^n \equiv E_n$, resulta em

$$\begin{aligned}\langle \psi^m | H(\mathcal{PT}|\psi_n\rangle) &= \langle \psi^m | E_n^*(\mathcal{PT}|\psi_n\rangle) \\ E^m \langle \psi^m | (\mathcal{PT}|\psi_n\rangle) - E_n^* \langle \psi^m | (\mathcal{PT}|\psi_n\rangle) &= 0 \\ (E_m - E_n) \langle \psi^m | (\mathcal{PT}|\psi_n\rangle) &= 0 \\ (E_m - E_n) \langle \psi^m | \psi_n\rangle &= 0\end{aligned}\tag{A.12}$$

Agora, para verificar a ligação entre o hamiltoniano H e seu adjunto $H^\dagger$. Aplica-se o operador de paridade em ambos os lados de $H^\dagger$ e utilizando a segunda equação de (A.5), tem-se

$$\begin{aligned}\mathcal{P}H^\dagger\mathcal{P}^{-1} &= H \\ H^\dagger|\psi^n\rangle = E^n|\psi^n\rangle &\Rightarrow \mathcal{P}H^\dagger\mathcal{P}^{-1}\mathcal{P}|\psi^n\rangle = E^n\mathcal{P}|\psi^n\rangle \\ H(\mathcal{P}|\psi^n\rangle) &= E^n(\mathcal{P}|\psi^n\rangle).\end{aligned}\tag{A.13}$$

Comparando (A.13) com (A.5), nota-se que $\mathcal{P}|\psi^n\rangle$ e $|\psi_n\rangle$ são autoestados de H com o mesmo autovalor não degenerado E_n . Dessa proporcionalidade, resulta,

$$|\psi^n\rangle = c_n\mathcal{P}|\psi_n\rangle, \quad c_n \in \mathbb{C}.\tag{A.14}$$

Multiplicando (A.13) por $\langle \psi^m |$ à esquerda e usando A.11,

$$\begin{aligned}\langle \psi^m | H(\mathcal{P}|\psi^n\rangle) &= \langle \psi^m | E^n(\mathcal{P}|\psi^n\rangle) \\ (E^m - E^n) \langle \psi^m | (\mathcal{P}|\psi^n\rangle) &= 0 \\ (E_m - E_n) \langle \psi^m | (\mathcal{P}|\psi^n\rangle) &= 0\end{aligned}\tag{A.15}$$

Sendo $\mathcal{P}^2 = 1$, da Eq. (A.14), para que $|\psi_n\rangle$ e $|\psi^n\rangle$ sejam normalizados c_n deve ser real, isto é,

$$\begin{aligned}1 = \langle \psi^n | \psi_n\rangle &= \langle \psi^n | \mathcal{P}^2|\psi_n\rangle = \langle \psi^n | c_n^*c_n^{-1}|\psi_n\rangle = c_n^*c_n^{-1} \langle \psi^n | \psi_n\rangle = c_n^*c_n^{-1} \\ c_n^* &= c_n\end{aligned}\tag{A.16}$$

Portanto, as bases duais podem ser escolhidas tal que c_n deve ser ± 1 . Da Eq. (A.14), obtem-se

$$\begin{aligned}\langle \psi^n | &= c_n\mathcal{P}^{-1} \langle \psi_n | \\ \langle \psi^n | \psi^n\rangle &= c_n^2 \langle \psi_n | \psi_n\rangle\end{aligned}$$

$$c_n = s_n \left(\frac{\langle \psi^n | \psi^n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \right)^{1/2}, \quad s_n = \pm 1. \quad (\text{A.17})$$

Fazendo uma mudança de escala nos autovetores de H e $H^\dagger$,

$$|\psi_n\rangle \rightarrow \varepsilon_n |\psi_n\rangle \quad \text{e} \quad |\psi^n\rangle \rightarrow \varepsilon_n^{-1} |\psi^n\rangle, \quad 0 \leq \varepsilon_n \leq \infty. \quad (\text{A.18})$$

de forma que $\langle \psi_n | \psi^n \rangle$ permaneça invariante. Substituindo em (A.17),

$$c_n = s_n \left(\frac{1}{\varepsilon_n^4} \frac{\langle \psi^n | \psi^n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \right)^{1/2} \equiv s_n. \quad (\text{A.19})$$

Com a seguinte escolha,

$$\varepsilon_n = \left(\frac{\langle \psi^n | \psi^n \rangle}{\langle \psi_n | \psi_n \rangle} \right)^{1/4}.$$

Assim, para determinar o valor de s_n , substituindo (A.19) em (A.14)

$$|\psi^n\rangle = s_n \mathcal{P} |\psi^n\rangle, \quad s_n = \pm 1, \quad (\text{A.20})$$

e multiplicando por $\langle \psi_n |$, com $s_n^{-1} = s_n$ encontra-se

$$\langle \psi_n | \psi^n \rangle = s_n \langle \psi_n | \mathcal{P} |\psi_n \rangle = 1$$

$$s_n \equiv \langle \psi_n | \mathcal{P} |\psi_n \rangle, \quad (\text{A.21})$$

onde a assinatura $s_n = (s_1, s_2, \dots)$ depende da dimensão finita do espectro do hamiltoniano.

Um comentário pertinente aqui é que esse resultado é o produto interno definido em (1.52).

Agora, utilizando a equação (A.20) encontra-se a relação de completeza, ou seja,

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = 1$$

$$\sum_n s_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \mathcal{P} = 1. \quad (\text{A.22})$$

Todavia, na representação do espaço de posição, tem-se $\langle x | y \rangle = \delta(x - y)$. Assim, inserindo (A.22), resulta em

$$\sum_n s_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathcal{P} | y \rangle = \delta(x - y). \quad (\text{A.23})$$

Lembrando que as funções de ondas são as projeções do estado no espaço de posição (ou, momento), onde $\psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle$, então,

$$\sum_n s_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | -y \rangle = \delta(x - y)$$

$$\begin{aligned}
 \sum_n s_n \psi_n(x) \psi_n^*(-y) &= \delta(x - y) \\
 \sum_n s_n \psi_n(x) \mathcal{PT} \psi_n(y) &= \delta(x - y) \\
 \sum_n s_n \psi_n(x) \psi_n(y) &= \delta(x - y).
 \end{aligned} \tag{A.24}$$

Na última passagem, usou-se a invariância sobre a transformação $\mathcal{PT}$ dos autovetores do hamiltoniano, se $s_n = (-1)^n$ obtem-se a relação (1.45). De maneira similar, deriva-se a relação de completeza para os estados de $H^\dagger$, dada por,

$$\sum_n s_n \psi^n(x) \psi^n(y) = \delta(x - y), \tag{A.25}$$

onde $\psi^n(x) = \langle x | \psi^n \rangle$ é a função de onda, projeção do estado no espaço de posição, do operador adjunto do hamiltoniano.

Para encontrar um operador consistente com (A.20), isto é, um operador que fará uma ligação entre os estados de H e $H^\dagger$, defini-se

$$\mathcal{C}_s = \sum_n s_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n|. \tag{A.26}$$

Dessa forma, atuando esse operador em um autovetor de H , resulta em

$$\begin{aligned}
 \mathcal{C}_s |\psi_n\rangle &= \sum_k s_k |\psi_k\rangle \langle \psi^k | \psi_n \rangle = \sum_k s_k |\psi_k\rangle \delta_{kn} \\
 &= s_n |\psi_n\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.27}$$

Portanto, esses também são autovetores desse operador, cujo autovalores coincidem com o sinal da “norma PT”. Neste caso, (A.20) pode ser reescrita como,

$$|\psi^n\rangle = \mathcal{PC}_s |\psi^n\rangle. \tag{A.28}$$

Então, o produto escalar dos vetores duais, fica

$$\begin{aligned}
 \langle \psi^n | \psi_n \rangle &= \langle \psi_n | \mathcal{C}_s \mathcal{P} | \psi_n \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle \psi_n | \mathcal{C}_s \mathcal{P} | x \rangle \langle x | \psi_n \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle -x | \mathcal{C}_s | \psi_n \rangle^* \langle x | \psi_n \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{C}_s \psi_n^*(-x) \psi_n(x) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{C}_s \mathcal{PT} \psi_n(x) \psi_n(x),
 \end{aligned} \tag{A.29}$$

ou, como $\langle \psi^n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$, obtem-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{C}_s \mathcal{PT} \psi_n(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}. \quad (\text{A.30})$$

Definindo $\mathcal{C}_s = \mathcal{C}$ e chamando $s_n = (-1)^n$ essas equações provam as indentidades do capítulo 1. Onde a relação de completeza no espaço de posição é

$$\begin{aligned} \langle x | y \rangle &= \sum_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi^n | y \rangle \\ &= \sum_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathcal{C}_s \mathcal{P} | y \rangle \\ \delta(x - y) &= \sum_n \mathcal{C}_s \mathcal{PT} \psi_n(y) \psi_n(x). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Ainda no espaço de posição, usando (A.26), encontra-se

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_s(x, y) &= \langle x | \mathcal{C}_s | y \rangle \\ &= \sum_n s_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi^n | y \rangle \\ &= \sum_n \langle x | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathcal{P} | y \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(x) \mathcal{PT} \psi_n(y) \\ &= \sum_n \psi_n(x) \psi_n(y). \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Para identificar quem é $\mathcal{C}_s$, note que o hamiltoniano na base dual é,

$$H = H \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = \sum_n H |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = \sum_n E_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n|. \quad (\text{A.33})$$

Chamando

$$f(E_n) = s_n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{A.34})$$

Da definição (A.26), observa-se

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_s &= \sum_n f(E_n) |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = \sum_n f(H) |\psi_n\rangle \langle \psi^n| = f(H) \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi^n| \\ &= f(H). \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Portanto, $[\mathcal{C}_s, H] = 0$, onde $H \neq H^\dagger$. Essa estrutura matemática pode ser derivada para qualquer hamiltiniano pseudo-hermitiano. Mais além, para qualquer operador com as características do hamiltoniano considerado aqui, em particular para o invariante da seção 2.2.

Apêndice B

Solução da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo

Verifica-se que a função de onda encontrada no capítulo 3 é de fato solução da equação de Schrödinger para um potencial linear dependente do tempo, fazendo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\lambda(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + f(t)x \right) \psi_\lambda(x, t), \quad (\text{B.1})$$

onde $\psi_\lambda(x, t) = e^{i\mu_\lambda(x, t)} \varphi_\lambda(x, t)$ é a solução particular obtida através do método do invariante e $\varphi_\lambda(x, t)$ são as autofunções do invariante linear. Então, do lado esquerdo tem-se

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\lambda(x, t)}{\partial t} = -\hbar \frac{d\mu_\lambda(t)}{dt} e^{i\mu_\lambda(t)} \varphi_\lambda(x, t) + i\hbar e^{i\mu_\lambda(t)} \frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial t}. \quad (\text{B.2})$$

Assim, usando (3.9),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial t} &= \left\{ -\frac{\dot{\beta}}{2\beta} - \frac{i\dot{\beta}}{\hbar\beta} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] - \frac{i\dot{\gamma}}{\hbar\beta}x \right\} \varphi_\lambda(x, t) \\ i\hbar \frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial t} &= \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] + f(t)x \right\} \varphi_\lambda(x, t). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Então,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi_\lambda(x, t)}{\partial t} &= \left\{ -\hbar \frac{d\mu_\lambda(t)}{dt} + \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} \left[(\lambda - \gamma)x - \frac{\alpha_0}{2}x^2 \right] + \right. \\ &\quad \left. f(t)x \right\} e^{i\mu_\lambda(t)} \varphi_\lambda(x, t). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

No lado direito da Eq. (B.1), tem-se

$$H(t)\psi_\lambda(x, t) = e^{i\mu_\lambda(t)} H(t)\varphi_\lambda(x, t) = e^{i\mu_\lambda(t)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} + f(t)x\varphi_\lambda(x, t) \right), \quad (\text{B.5})$$

onde,

$$\frac{\partial \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x} = \frac{i}{\hbar\beta} [(\lambda - \gamma) - \alpha_0 x] \varphi_\lambda(x, t),$$

daí,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} &= \left\{ -\frac{i\alpha_0}{\hbar\beta} + \left[\frac{i}{\hbar\beta} [(\lambda - \gamma) - \alpha_0 x] \right]^2 \right\} \varphi_\lambda(x, t) \\ &= \left\{ -\frac{i\alpha_0}{\hbar\beta} - \frac{1}{\hbar^2\beta^2} [(\lambda - \gamma)^2 - 2(\lambda - \gamma)\alpha_0 x + \alpha_0^2 x^2] \right\} \varphi_\lambda(x, t). \end{aligned}$$

Assim,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_\lambda(x, t)}{\partial x^2} = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} + \frac{(\lambda - \gamma)^2}{2m\beta^2} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} [(\lambda - \gamma)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2] \right\} \varphi_\lambda(x, t), \quad (\text{B.6})$$

De modo que,

$$H(t)\varphi_\lambda(x, t) = \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} + \frac{(\lambda - \gamma)^2}{2m\beta^2} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} [(\lambda - \gamma)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2] + f(t)x \right\} \varphi_\lambda(x, t). \quad (\text{B.7})$$

Então,

$$\begin{aligned} H(t)\psi_\lambda(x, t) &= \left\{ \frac{i\hbar\alpha_0}{2m\beta} + \frac{(\lambda - \gamma)^2}{2m\beta^2} - \frac{\alpha_0}{m\beta^2} [(\lambda - \gamma)x + \frac{\alpha_0}{2}x^2] + \right. \\ &\quad \left. f(t)x \right\} e^{i\mu_\lambda(t)} \varphi_\lambda(x, t). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Portanto, substituindo (B.4) e (B.8) na Eq. (B.1), resulta em

$$-\hbar\dot{\mu}_\lambda(t)\psi_\lambda(x, t) = \frac{1}{2} \frac{(\lambda - \gamma(t))^2}{m(t)\beta^2(t)} \psi_\lambda(x, t). \quad (\text{B.9})$$

Então, substituindo a fase dada pela Eq. (3.22) nesse resultado, conclui-se que, de fato, a solução encontrada satisfaz a equação de Schrödinger. O mesmo acontece para o caso da solução encontrada no capítulo 4 para um potencial não hermitiano, com a única deferença em que $f(t) \rightarrow i\eta(t)$.

Apêndice C

Operadores de Paridade e Reversão Temporal

A definição clássica do operador de inversão espacial é que ele leva x em $-x$, ou seja, reflete o estado (a posição) em torno da origem, ou seja, $x_{inv}(t) = -x(t)$. Outro efeito, é que o momento também é invertido nesse processo, consequentemente. Do ponto de vista quântico, os vetores da base de posição ficam

$$\mathcal{P} |x\rangle = |-x\rangle. \quad (\text{C.1})$$

Assim, atuando $\mathcal{P}$ em um estado qualquer

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \quad \rightarrow \quad \mathcal{P} |\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{P} |x\rangle \langle x | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx |-x\rangle \psi(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(-x) |x\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

logo,

$$\mathcal{P}\psi(x) \equiv \langle x | (\mathcal{P} |\psi\rangle) = \psi(-x) \quad (\text{C.3})$$

Portanto, o operador de paridade é linear,

$$\mathcal{P}(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle) = a_1 \mathcal{P} |\psi_1\rangle + a_2 \mathcal{P} |\psi_2\rangle \quad (\text{C.4})$$

Com a definição clássica de que o operador $\mathcal{T}$ reverte o momento $p_{rev}(t) = -p(t)$ [5]. A reversão temporal foi introduzida por Eugene Wigner em 1932. A melhor forma de entender essa operação é imaginar a dinâmica feita por um filme de trás para frente [55].

A definição quântica pode ser expressa como

$$\mathcal{T} |p\rangle = |-p\rangle. \quad (\text{C.5})$$

Ou seja, os vetores da base do momento são invertidos. No caso da base de posição tem-se

$$\mathcal{T} |x\rangle = e^{i\delta} |x\rangle, \quad (\text{C.6})$$

onde a fase pode ser escolhida como sendo igual a 1, isto é, a operação de $\mathcal{T}$ não muda os vetores da base de x . Fazendo uma expansão na base de posição os vetores de p ficam,

$$|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x|p\rangle, \quad (\text{C.7})$$

e substituindo em (C.5), resulta em

$$\begin{aligned} \mathcal{T} |p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \mathcal{T} e^{ipx/\hbar} \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} |x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx/\hbar} |x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i(-p)x/\hbar} |x\rangle = |-p\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Isso significa que $\mathcal{T}$ reverte o movimento fazendo uma conjugação, ou seja, $\mathcal{T}$ pode ser definido como um operador de conjugação. Da equação de autovalor para p , conclui-se

$$\begin{aligned} \hat{p}(\mathcal{T} |p\rangle) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{p} e^{-ipx/\hbar} |x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-ipx/\hbar} |x\rangle \\ &= -p(\mathcal{T} |p\rangle). \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

De fato, $\mathcal{T} |p\rangle = |-p\rangle$. Portanto, para um estado qualquer,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \rightarrow \mathcal{T} |\psi\rangle &= \mathcal{T} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) |x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) \mathcal{T} |x\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x) |x\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Então, a função de onda de um estado revertido é

$$\mathcal{T} \psi(x) \equiv \langle x | (\mathcal{T} |\psi\rangle) = \psi^*(x) \quad (\text{C.11})$$

Para um estado evoluído no tempo, $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, fica

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &\rightarrow \mathcal{T} |\psi(t)\rangle = \mathcal{T} U(t, t_0) \mathcal{T}^{-1} \mathcal{T} |\psi(t_0)\rangle \\ &= U^*(t, t_0) \mathcal{T} |\psi(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{T} U(t, t_0) \mathcal{T}^{-1} &= \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right) \mathcal{T}^{-1} \\ &= \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H^*(t') dt' \right) \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

logo

$$\mathcal{T} \psi(x) = \langle x | (\mathcal{T} |\psi(t)\rangle) = \psi^*(x, t). \quad (\text{C.14})$$

Portanto, o operador de reversão temporal é antilinear,

$$\mathcal{T}(a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle) = a_1^* \mathcal{T} |\psi_1\rangle + a_2^* \mathcal{T} |\psi_2\rangle \quad (\text{C.15})$$

Formalmente, o operador de reversão temporal é escrito como $\mathcal{T} = T_0 K$, onde K é o operador de conjugação e T_0 depende do problema. Ou seja, em geral o operador de reversão temporal depende da representação. No caso de uma teoria escalar $T_0 = 1$, logo, a reversão temporal é equivalente a conjugar $\mathcal{T} = K$ e para uma teoria com spin T_0 depende das marizes de Dirac (ou Pauli) [1, 55].

Referências Bibliográficas

- [1] SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Mecânica Quântica Moderna**. Tradução Técnica: Sílvio Renato Dahmen. 2^a. ed. Porto Alegre, RS: Bookman, 2013. 547 p. v. único.
- [2] CARUSO, F.; OGURI, V. **Física Moderna: origens clássicas e fundamentos quânticos**. 1^a ed. Rio de Janeiro, RJ: Campus, 2006.
- [3] GASIOROWICZ, Stephen. **Quantum Physics**. 3^a. ed. Jhon Wiley & Sons, New Jersey, INC, 2003. v. único.
- [4] MESSIAH, Albert. **Quantum Mechanics: Two Volumes Bound as One**. 1^a. ed. Mineola, New York: Dover Publications, INC, 1999. 1136 p. v. único.
- [5] SHANKAR, Ramamurti. **Principles of Quantum Mechanics**. 2^a ed. Springer. 1994.
- [6] LEWIS, H. R. JR. **Class of exact invariants for classical and quantum time-dependent harmonic oscillators**. J. Math. Phys. 9, 1968. 1976-1986 p.
- [7] LEWIS, H. R. Jr.; RIESENFELD, W. B. **An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent eletromagnetic field**. J. Math. Phys. 10, 1969. 1458-1473 p.
- [8] PEDROSA, I. A.; BEZERRA, V. B. **On the existence of squeezed states in an anisotropic universe**. Mod. Phys. Lett. A 12, 1997, p.1111-1118.
- [9] CHOI, J. R. **An approach to dark energy problem through linear invariant**. Chinese Physics C, 35(3), 2011, p.233-242.
- [10] GAO, X. C.; FU, J.; XU, J.; ZOU, X. **Invariant theory and exact solutions for the quantum Dirac field in a time-dependent spatially homogeneous electric field**. Phys. Rev. A 59, 1999, p.55-63.
- [11] GAO, X. C.; FU, J.; LI, H.; GAO, J. **Invariant formulation and exact solutions for the relativistic charged Klein-Gordon field in a time-dependent spatially homogeneous electric field**. Phys. Rev. A 57, 1998, p.753-761.

- [12] BERTONI, C.; FINELLI, F.; VENTURI, G. **Adiabatic invariants and scalar fields in a de Sitter space-time**. Phys. Lett. A 237, 1998, p.331-336.
- [13] ROGERS, C.; SCHIEF, W. K. **Multi-component Ermakov systems: structure and linearization**. J. Math. Anal. Appl. 198, 1996, p.194-220.
- [14] ERMAKOV, V. P. Univ. Izv. Kiev 20,(9),1 (1880).
- [15] PEDROSA, I. A. **Canonical transformations and exact invariants for dissipative systems**. J. Math. Phys. 28, 1987, p.2662.
- [16] CONCHARENKO, A. M. *et al* **Ermakov hamiltonians systems in nonlinear optics of elliptic Gaussian beams**. Phys. Lett. A 160, 1991, p.138-142
- [17] ROGERS, C. *et al* **Ermakov–Ray–Reid systems in nonlinear optics**. J. Phys. A, 2010.
- [18] CHOI, J. R. **Quantum state of pendulum under exponentially increasing gravitation**. Physics A 310, 2002, p.109-120.
- [19] HARTLEY, J. G; RAY, J. R. **Ermakov systems and quantum-mechanical superposition laws**. Phys. Rev. A 24, 1981, p.2873-2876.
- [20] HARTLEY, J. G; RAY, J. R. **Solutions to the time-dependent Schrödinger equation**. Phys. Rev. A 25, 1982, p.2388-2390.
- [21] HARTLEY, J. G; RAY, J. R. **Coherent states for the time-dependent harmonic oscillator**. Phys. Rev. D 25, 1982, p.382-386.
- [22] RAY, J. R. **Minimum-uncertainty coherent states for certain time dependent systems**. Phys. Rev. D 25, 1982, p.3417-3419.
- [23] SHEN. J. Q. **The Connection Between Density Matrix Method, Supersymmetric Quantum Mechanics and Lewis-Riesenfeld Invariant Theory**, 2003 (Arxiv)
- [24] PEDROSA, I. A. **Coherent states for certain time-dependent systems**. Rev. Bras. Fís. 19, 1989, p.502-515.
- [25] PEDROSA, I. A. **Exact wave functions of a harmonic oscillator with time dependent mass and frequency**. Phys. Rev. A 55, 1997, p.3219-3221.
- [26] LIMA, A. L.; ROSAS, A.; PEDROSA, I. A. **On the quantum motion of a generalized time-dependent forced harmonic oscillator**. Annals of Physics 323, 2008, p.2253-2264.

- [27] PEDROSA, I. A. **Complete exact quantum states of the generalized time-dependent harmonic oscillator**. Mod. Phys. Lett. B 18, 2004, p.1267-1274.
- [28] PEDROSA, I. A.; ROSAS, A. **Electromagnetic Field Quantization in Time-Dependent Linear Media**. Phys. Rev. Lett. 103, 2009, 010402.
- [29] GUEDES, I. **Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potencial**. Phys. Rev. A 63, 2001, art. 034102.
- [30] SHEN, J. Q. **Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potencial**. Arxiv, 2003.
- [31] LUAN, P. G; TANG, C. S. **Lewis-Riesenfeld approach to the solutions of the Schrödinger equation in the presence of a time-dependent linear potencial**. Phys. Rev. A 71, 2005, art.014101.
- [32] BARREHAIL, M.; BENAMIRA, F. **Class of invariants for a time dependent linear potencial**. Indian J. Phys. 2013, 87, 1023-1027 p.
- [33] COLELLA, R.; OVERHAUSER, A. W.; WERNER, S. A. **Observation of Gravitationally Induced Quantum Interference** Phys. Rev. Lett. 34, 1472 p. (1975).
- [34] RAU, A. R. P.; UNNIKRIISHNAN, K. **Evolution operators and wave functions in a time-dependent electric field**. Phys. Lett. A 222, 304-308 (1996).
- [35] BEKKAR, H.; BENAMIRA, F.; MAAMACHE, M. **Comment on "Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potencial"**. Phys. Lett. A 68, 016101 (2003).
- [36] FENG, M. **Complete solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potencial**. Phys. Rev. A 63, 2001, art. 034101.
- [37] BAUER, J. **Comment on "Solution of the Schrödinger equation for the time-dependent linear potencial"**. Phys. Rev. A 65, 2002, art. 036101.
- [38] LIANG, M. L.; ZHANG, Z. G.; ZHONG, K. S. **General Solution and Quantum Phases of the Time-Dependent Linear Potencial**. Physica Scripta. Vol 70, 98-100, 2004.
- [39] MAAMACHE, M.; SAADI, Y. **Gaussian wave packet solution of the Schrödinger equação in the presence of a time-dependent linear potencial**. Arxiv (2008).
- [40] BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. **Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry**. Phys. Rev. Lett. 80, 5243 (1998).

- [41] BENDER, C. M. **Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonian**. Rep. Prog. Phys. 70, 947 (2007).
- [42] BAGCHI, B.; QUESNE, C.; ZNOJIL, M. **Generalized Continuity Equation and Modified Normalization in PT-Symmetric Quantum Mechanics**. Mod. Phys. Lett. A 16, 2047 (2001).
- [43] MOSTAFAZADEH, A. **On the pseudo-Hermiticity of general PT-symmetric standard Hamiltonians in one-dimension**. Mod. Phys. Lett. A 17, 1973 (2002).
- [44] MOSTAFAZADEH, A. **Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian**. Journal of Mathematical Physics 43, 205 (2002).
- [45] MOSTAFAZADEH, A. **Exact PT-symmetry is equivalent to Hermiticity**. J. Phys. A: Math. Gen 36, 7081 (2003).
- [46] YUCE, C. **Time-dependent PT symmetric problems**. Phys. Lett. A 336, 290 (2005).
- [47] DUTRA, A. S.; HOTT, M. B. and DOS SANTOS, V. G. C. S. **Time-dependent non-Hermitian Hamiltonians with real energies**. Europhysics Lett. 71, 166 (2005).
- [48] MOSTAFAZADEH, A. **Time-dependent pseudo-Hermitian Hamiltonians defining a unitary quantum system and uniqueness of the metric operator**. Phys. Lett. B 650, 208 (2007).
- [49] MOSTAFAZADEH, A. **Pseudo-Hermitian Representation of Quantum Mechanics**. Int. J. Geom. Methods Mod. Phys., 07, 1191 (2010).
- [50] KHANTOUL, B.; BOUNAMES, A.; MAAMACHE, M. **On the invariant method for the time-dependent non-Hermitian Hamiltonians**. Euro. phys. Lett.(2016)
- [51] GIRARDELLI, D.; ZAVANIN, E. M.; GUZZO, M. M. **Equivalência entre Mecânica Quântica e a Mecânica Quântica PT-simétrica**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 37, n. 1, 1304 (2015).
- [52] BENDER, C. M.; WANG Q. **Comment on a recent paper by Mezincescu J**. Phys. A: Math. Gen. 34 3325 (2001).
- [53] WEIGART, S. **Completeness and orthonormality in PT-symmetric quantum systems**. Phys. Rev. A 68, 062111 (2003).

- [54] VAIDYANATHAN, R. **Linear Invariants of a time-dependent quantal oscillator**. J. Math. Phys. 23, 1346 (1982).
- [55] GREINER, W. **Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations**. 3^a ed. Spring, 1990.
- [56] RAMOS, B. F.; DE LIMA, A. L.; PEDROSA, I. A. **Dynamic invariants and quantum motion of a particle in the presence of a non-hermitian time-dependent linear potencial with PT symmetry** (a ser submetido à publicação).