PT 对称的非厄米体系的能谱性质

占国慧，于殿强，王郅臻，张莲莲，公卫江

(东北大学 理学院 物理系，辽宁 沈阳 110819)

摘要：选取一维量子体系，讨论了体系两端 PT 对称的复势能对其能谱的影响，发现该势能在改变体系能谱方面有特殊作用.并且，如果势能强度足够大，它能够引起能谱的简并.利用微扰理论计算了势能较弱时的体系能谱，以便于理解 PT 对称的非厄米体系的能谱性质.相信本文有助于加深对量子力学中基础和前沿知识的融合与理解.

关键词：PT 对称；非厄米体系；能谱

中图分类号：O 413.1 文献标识码：A 文章编号：1000-0712(2018)03-0078-04

【DOI】10.16854/j.cnki.1000-0712.170155

量子力学的中心任务是通过求解力学量算符的本征值和本征态，描述力学量(如：哈密顿量)的性质.为此，量子力学中提出假设：经典力学中的力学量在量子力学中都有算符与之对应；力学量算符都是厄米算符，其本征值都是实数，并且对应力学量的测量值.然而，近年来有诸多报道指出，某些特殊体系的哈密顿量表现出非厄米的特点，如光晶格[1]，光波导[2,3]、耦合的 *LRC* 电路[4]等体系.此类哈密顿量由于存在空间和时间连续反演的对称性(Parity-Time Symmetry，简称 PT 对称)，本征值也表现为实数，并满足物理量可测量的性质.以耦合的 *LRC* 电路为例[4]，如果引入一个放大器和一个等效衰减器，则体系的能量将出现增益及损耗，并由参数 γ_{PT} 来描述.该参数的出现导致本征频率发生从实数到复数的相位转变.于是，体系的哈密顿量表现出 PT 对称的性质.目前，PT 对称的非厄米系统在许多领域中得到了研究者的广泛关注[5-7]，如，量子力学基础理论、数学物理、开放的量子系统、无序体系、具有复折射率的光学系统以及拓扑绝缘体等.

量子力学是物理专业的必修课程，亦是现代物理学科研工作的理论基础.因此，在教学中除阐明量子力学的基本概念和物理图像外，很有必要适当引入相关的研究进展.这样有利于学生强化对量子力学内容的理解，还能紧跟科学研究前沿，对提高教学质量和提升学生科研素养有所裨益.本文以一维 PT 对称的量子体系为例，利用量子力学课程中的基本方法，在紧束缚近似的理论框架下，讨论如何求解该类特殊体系的能谱及其性质.

1 一维 PT 对称的量子体系

对于某一维量子体系，如果进行格点分立化，选择依赖于格点的局域波函数$\{\varphi_i, i=1,2,\ldots,N\}$为基，其哈密顿量可以写为

$$H=\sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i+\sum_i t_{i,i+1}c_i^\dagger c_{i+1}+\text{h.c.} \tag{1}$$

其中 $\varepsilon_i=\langle\varphi_i|H|\varphi_i\rangle$ 是格点能量，$t_{i,i+1}=\langle\varphi_i|H|\varphi_{i+1}\rangle$ 表示第 i 个和第 $i+1$ 个格点之间电子波函数的交叠积分.对于 $\varepsilon_i=\varepsilon_0$ 及 $t_{i,i+1}=t$ 的理想情况，该体系的本征能量在形式上满足 $E_k=\varepsilon_0+2t\cos ka$($k$ 为波矢，a 为格点间距).所以，该体系的能谱是中心为 ε_0，宽度为 $4t$ 的能带[8].而对于存在有限格点的一维体系，其本征能量和波函数的具体形式可以通过矩阵量子力学知识来求解.首先，对于均匀的一维有限长量子体系，它的哈密顿量 H 写成如下矩阵形式：

$$H=\begin{pmatrix}\varepsilon_0 & t & & & \\ t & \varepsilon_0 & t & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & t & \varepsilon_0 & t \\ & & & t & \varepsilon_0\end{pmatrix} \tag{2}$$

显然，这是一个三对角矩阵，由能量本征值方程 $H\psi=E\psi$ 可求得本征值：

$$E_m=\varepsilon_0+2t\cos\frac{m\pi}{N+1},\quad (m=1,2\cdots N) \tag{3}$$

本征波函数：

收稿日期：2017-03-21；修回日期：2017-08-09.

作者简介：占国慧(1996—)，男，江西九江人，东北大学理学院 2014 级本科生.

通讯作者：张莲莲，Email：38328265@qq.com

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{N+1}}\begin{pmatrix}\sin\frac{\pi}{N+1} & \sin\frac{2\pi}{N+1} & \cdots & \sin\frac{N\pi}{N+1}\\ \sin\frac{2\pi}{N+1} & \sin\frac{4\pi}{N+1} & \cdots & \sin\frac{2N\pi}{N+1}\\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots\\ \sin\frac{N\pi}{N+1} & \sin\frac{2N\pi}{N+1} & \cdots & \sin\frac{N^2\pi}{N+1}\end{pmatrix} \tag{4}$$

N 表示格点数目或者矩阵维度[5].

接下来,将上述体系转变为一维PT对称的非厄米体系.在量子力学中,空间反演算符是 $\hat{P}$,时间反演算符是 $\hat{T}$.如果体系PT对称,则满足 $\hat{P}\hat{T}H=H\hat{P}\hat{T}$ 的关系.考虑一维体系,PT对称的哈密顿量所对应的势函数满足 $V(x)=V^*(-x)$,* 表示复共轭.这样就要求势函数的实部是关于 x 偶对称,而虚部是奇对称的.在某些光学领域中,PT对称的势函数可以通过复折射率分布获得,其实部对应于介质的折射率,虚部对应于介质的增益/损耗[2].对于式(2)中的哈密顿量,在两终端引入幅值相等的正负复势能即可反映PT对称性[5].于是,新的哈密顿量写为

$$\widetilde{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon_0+\mathrm{i}\gamma & t & & & \\ t & \varepsilon_0 & t & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & t & \varepsilon_0 & t\\ & & & t & \varepsilon_0-\mathrm{i}\gamma\end{pmatrix} \tag{5}$$

其中 γ 表示复势能的幅值.不难看出,经空间和时间反演连续操作后,该哈密顿量仍保持原有形式.我们将从两个角度讨论该体系的能谱性质.

2　一维PT对称的量子体系能谱微扰理论解

当体系中 $\gamma\ll t$ 时,该体系的能谱可以采用微扰进行计算.此时,哈密顿量存在如下形式:

$$\widetilde{H}=H_0+\widetilde{H}' \tag{6}$$

其中

$$H=\begin{pmatrix}\varepsilon_0 & t & & & \\ t & \varepsilon_0 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & t & \varepsilon_0 & t\\ & & & t & \varepsilon_0\end{pmatrix},$$

$$\widetilde{H}'=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\gamma & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & 0 & 0\\ & & & 0 & -\mathrm{i}\gamma\end{pmatrix}$$

很显然,零级近似的能量为

$$E_m^{(0)}=\varepsilon_0+2t\cos\frac{m\pi}{N+1},\quad (m=1,2,\cdots,N)$$

能量的一级和二级近似可以根据微扰理论相关公式进行求解.首先,能量的一级近似为微扰哈密顿量在零级近似波函数上的平均,即

$$E_m^{(1)}=\langle\psi_m^{(0)}|\widetilde{H}'|\psi_m^{(0)}\rangle$$

通过计算,容易发现

$$E_m^{(1)}=\begin{pmatrix}\sin\frac{m\pi}{N+1} & \sin\frac{2m\pi}{N+1} & \cdots & \sin\frac{Nm\pi}{N+1}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\gamma & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 0 & 0 & 0\\ & & & 0 & -\mathrm{i}\gamma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sin\frac{m\pi}{N+1}\\ \sin\frac{2m\pi}{N+1}\\ \vdots\\ \sin\frac{Nm\pi}{N+1}\end{pmatrix}=\mathrm{i}\gamma\left(\sin^2\frac{m\pi}{N+1}-\sin^2\frac{Nm\pi}{N+1}\right)=0 \tag{7}$$

因此,一级微扰对能谱没有贡献.接下来,有必要对能量的二级近似进行求解.其公式为

$$E_m^{(2)}=\sum_{m\neq k}\frac{|\langle\psi_k^{(0)}|\widetilde{H}'|\psi_m^{(0)}\rangle|^2}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}$$

计算 $\langle\psi_k^{(0)}|\widetilde{H}'|\psi_m^{(0)}\rangle$,发现

$$\langle\psi_k^{(0)}|\widetilde{H}'|\psi_m^{(0)}\rangle=$$

$$\mathrm{i}\gamma\left(\sin\frac{k\pi}{N+1}\sin\frac{km\pi}{N+1}-\sin\frac{Nk\pi}{N+1}\sin\frac{Nm\pi}{N+1}\right)$$

基于这一结果,容易得出二级微扰近似下的能量为

$$E_m^{(2)}=\sum_{\substack{k\neq m\\ m+k=\mathrm{odd}}}2\gamma^2\sin^2\frac{k\pi}{N+1}\sin^2\frac{m\pi}{N+1}\Big/\left[t\left(\cos\frac{k\pi}{N+1}-\cos\frac{m\pi}{N+1}\right)\right] \tag{8}$$

相应地,体系的总能量为

$$E_m = \varepsilon_0 + 2t\cos\frac{m\pi}{N+1} + \sum_{\substack{k\neq m\\ m+k=\mathrm{odd}}} 2\gamma^2 \sin^2\frac{k\pi}{N+1}\sin^2\frac{m\pi}{N+1} \Big/ \left[t\left(\cos\frac{k\pi}{N+1} - \cos\frac{m\pi}{N+1}\right)\right],$$
$$(m = 1, 2, \cdots, N) \tag{9}$$

通过微扰求解，发现在 PT 对称势能较弱的情况下，一维量子体系能谱存在解析形式.并且，只有近似到二阶时该势能才对体系的能谱产生影响.

3 一维 PT 对称的量子体系能谱的数值解

在一般情况下，矩阵形式哈密顿量的本征值可以通过求解其本征值方程的久期方程来完成.

首先，写出式(6)中哈密顿量对应的久期方程：

$$\widetilde{D}_n = \begin{vmatrix} \varepsilon_0+\mathrm{i}\gamma-E & t & & & \\ t & \varepsilon_0-E & t & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & t & \varepsilon_0-E & t \\ & & & t & \varepsilon_0-\mathrm{i}\gamma-E \end{vmatrix} = 0 \tag{10}$$

由行列式性质可知，$\widetilde{D}_N$ 可以表示为如下形式[9]，即：$\widetilde{D}_N = D_N + \gamma^2 D_{N-2}$.进一步整理，得出：

$$\widetilde{D}_N = \frac{t^N}{\sin\theta}\left[\sin(N+1)\theta + \frac{\gamma^2}{t^2}\sin(N-1)\theta\right] \tag{11}$$

其中 $\sin\theta = \dfrac{\sqrt{4t^2-(E-\varepsilon_0)^2}}{2t}$，$\cos\theta = \dfrac{\sqrt{\varepsilon_0-E}}{2t}$.可以发现，当 $\theta = 0$、π 时，$\widetilde{D}_N$ 分子分母都趋于零，由洛必达法则可知，此时 $\widetilde{D}_N \neq 0$.因此，只需要讨论 $\theta = 0$、π 的情况.在该情况下，$\widetilde{D}_N$ 的分母不为零，所以只需要考虑

$$\sin(N+1)\theta + \frac{\gamma^2}{t^2}\sin(N-1)\theta = 0 \tag{12}$$

对于该方程的求解，先讨论极限情况，即：$\gamma^2/t^2 = 1$.此时，

$$\widetilde{D}_N = \frac{t^N}{\sin\theta}\left[\sin(N+1)\theta + \sin(N-1)\theta\right] = 2t^N \sin N\theta\cot\theta = 0 \tag{13}$$

容易求得方程的解为：$\theta = \dfrac{m\pi}{N}$ 或 $\theta = \dfrac{\pi}{2}$.可以发现，当 N 为奇数时，本征能量有 N 个不同的取值，量子链非简并；当 N 为偶数时，本征能量只有 $N-1$ 个不同的取值.这说明对于矩阵维度为偶数的一维量子体系，PT 对称的复势能有机会导致能级简并.具体来讲，当 $\gamma^2/t^2 = 1$ 时，本征能量 $E_m = 0$ 存在二度简并，这是由于该势能引入的特殊对称性所致.对于 $\gamma^2/t^2 \neq 1$ 的情况，能量的本征值不存在解析解，只能通过数值求解得到.图 1 中，我们展示了一维 PT 对称量子体系的能谱结果.图 1(a)—图(d)中 γ^2/t^2 的取值分别为 0.0、0.1、0.5、1.0.从图中看出，复势能对一维量子体系的影响较为复杂.首先，它不影响 N 为奇数情况下 $E_m = 0$ 这一本征值.另外，随着 γ 的增加，体系能量本征值的最值相应增大.而当 $\gamma = t$ 时，能量出现简并.同时，能量最值有所减小.

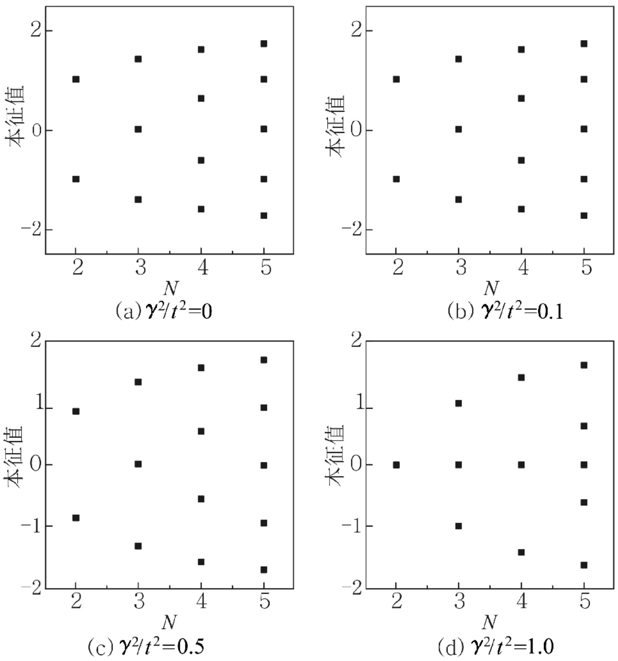

图 1 一维量子体系的本征能量随 N 变化的结果

结论

综上所述，我们采用一维量子体系模型，讨论了体系两端 PT 对称的复势能对能谱的影响.发现该势能可以对一维体系的能谱产生特殊作用，如果势能强度足够大，将引起能谱的简并.对于势能较弱的情况，利用微扰理论对能谱进行了计算，得到了二级微扰近似下的能量表示.相信本文有助于理解 PT 对称的非厄米体系的能谱性质，为拓展量子力学教学提供一定的参考.

参考文献：

[1] Regensburger A，Miri M A，Bersch C，et al. Observation of defect states in PT－symmetric optical lattices［J］. Physical Review Letters，2013，110（22）：223902-1-5.

[2] Guo A，Salamo G J，Duchesne D，et al. Observation of PT-symmetry breaking in complex optical potentials［J］. Physical Review Letter，2009，103（9）：093902-1-4.

[3] Rüter C E，Makris K G，El-Ganainy R，et al. Observation of parity-time symmetry in optics［J］. Nature Physics，2010，6：192-195.

[4] Schindler J，Li A，Zheng M C，et al. Experimental study of active LRC circuits with PT symmetries［J］. Physical Review A，2011，84（4），040101-1-5.

[5] Jin L，Song Z. Solution of PT-symmetric tight-bindingchain and its equivalent Hermitian counterpart［J］. Physical Review A. 2009，80（5）：052107-1-7.

[6] Joglekar Y N，Saxena A. Robust PT-symmetric chain and properties of its Hermitian counterpart［J］. Physical Review A. 2011，83（5）：050101-1-5.

[7] Valle G D，Longhi S. Spectral and transport properties of time-periodic PT－symmetric tight－binding lattices［J］. Physical Review A，2013，87（2）：022119-1-6.

[8] 公卫江，范爽，司秀丽，等. 一种求解一维量子体系本征态的方法［J］. 东北大学学报（自然科学版），2011（08）：1213-1216.

[9] 杨胜良. 三对角矩阵的特征值及其应用［J］. 数学的实践与认识，2010，40（3）：155-160.

The properties of energy spectrum in a non-Hermitian system with PT-symmetry

ZHAN Guo-hui，YU Dian-qiang，WANG Zhi-zhen，ZHANG Lian-lian，GONG Wei-jiang

（Department of Physics，College of Sciences，Northeastern University，Shenyang，Liaoning 110819，China）

Abstract： We study the effect of the PT-symmetric complex potentials on the energy spectrum of one-dimensional non-Hermitian systems. By solving the energy spectrum，we find that potentials can give rise to degeneracy of energy，when the potentials are high enough. For the case of weak potential，the perturbation theory is used to analyze the energy spectrum. It is believed that the results of this work are helpful in understanding the properties of energy spectrum in PT-symmetric non-Hermitian systems.

Key words： PT-symmetry；non-Hermitian system；energy spectrum

书讯

《基础物理教学问题选讲》推荐

如今不少中青年教师热心教学，努力探索如何上好基础物理课，在课堂教学中展示自己的学识和魅力. 然而当一些青年教师初上讲坛时，由于缺乏教学经验，还未能形成自己的教学理念和风格，对基础物理的教学要领和某些物理概念尚未把握到位，以致影响教学效果.

《基础物理教学问题选讲》一书正是针对上述问题出版的. 该书是罗蔚茵和郑庆璋教授关于基础物理教学心得的著作，将作者数十年教授基础物理过程中发表的教学论文进行了重新梳理和补充，包括作者的教学理念、对课程内容的处理、对某些物理概念的理解，以及一些问题的拓展讨论. 该书对正在主讲基础物理的中青年教师和正在学习基础物理课程的学生有一定的参考意义.

（高等教育出版社 张海雁）