Траектории Вигнера частицы при наличии непроницаемых граничных условий

Сеидов С.С.[1,2]
[1] НИУ ВШЭ, МИЭМ, Москва, Россия
[2] НИТУ МИСИС, кафедра ТФиКТ, Москва, Россия
Работа выполнена в рамках гранта РНФ № 23-72-01067

S|Q⟩H 2024
Superconducting Quantum Hardware
International Annual School

Функция Вигнера

Функция Вигнера квантовой системы в состоянии $\hat{\rho}$ определяется как

$$W(x,p,t) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ipy}\left\langle x-\frac{y}{2}\right|\hat{\rho}(t)\left|x+\frac{y}{2}\right\rangle dy.$$

В чистом состоянии $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, тогда

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ipy}\psi^*\left(x-\frac{y}{2},t\right)\psi\left(x+\frac{y}{2},t\right)dy.$$

Классические траектории

Для классической системы выполняется уравнение Лиувилля

$$\dot{\rho}(x,p;t) = -\dot{x}\partial_x\rho - \dot{p}\partial_p\rho$$
$$\dot{x} = \partial_p H \qquad \dot{p} = -\partial_x H.$$

То есть, начальное состояние $\rho_0(x,p)$ эволюционирует согласно уравнениям движения:

$$\rho(x,p;t) = \rho_0(x(-t),p(-t)).$$

Траектории Вигнера

Идея траекторий Вигнера заключается в том, чтобы записать уравнение движения для $W(x,p,t)$ по аналогии с уравнением Лиувилля:

$$\dot{W}(x,p,t) = \dot{x}_{\text{eff}}(-t)\partial_x W(x,p,t) + \dot{p}_{\text{eff}}(-t)\partial_p W(x,p,t).$$

Обычно траектории Вигнера получают путём конструирования эффективного потенциала V_{eff}:

$$\dot{x}_{\text{eff}} = \frac{p_{\text{eff}}}{m} \qquad \dot{p}_{\text{eff}} = -\partial_x V_{\text{eff}}(x,p).$$

Однако мы поступим иначе, воспользовавшись тем, что при отражении от стенки частица почти всегда движется свободно.

Свободное движение

Если частица движется свободно, $x(t) = x_0 + \frac{p_0 t}{m}$, $p = p_0$. Тогда $\rho(x,p,t) = \rho_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right)$ и легко проверить, что

$$\dot{x} = -\frac{\dot{\rho}}{\partial_x\rho} = \frac{p}{m}.$$

Для функции Вигнера аналогично

$$W(x,p,t) = W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) \Rightarrow \dot{x}_{\text{eff}} = -\frac{\dot{W}}{\partial_x W} = \frac{p_{\text{eff}}}{m}.$$

Отражение от стенки

Волновая функция частицы в потенциале

$$U = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ \infty, & x \leqslant 0 \end{cases}$$

имеет вид $\psi(x,t) = \varphi(x,t)\theta(x)$. Тогда функцию Вигнера можно записать как

$$W(x,p,t) = \mathcal{F}_y\left\{\varphi^*\left(x-\frac{y}{2},t\right)\varphi\left(x+\frac{y}{2},t\right)\theta\left(x-\frac{y}{2}\right)\theta\left(x+\frac{y}{2}\right)\right\}.$$

Это Фурье–образ произведения, который можно представить как свёртку Фурье–образов:

$$W(x,p,t) = W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p G(x,p) \qquad G(x,p) = \frac{\theta(x)\sin(2px)}{\pi p}$$

$$W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) = \mathcal{F}_y\{f(x,y,t)\} \qquad f(x,y,t) = \varphi^*\left(x-\frac{y}{2},t\right)\varphi\left(x+\frac{y}{2},t\right).$$

Свёртка

Свёртка функций $u(p)$ и $v(p)$ определяется как

$$u(p) *_p v(p) = \int u(p-k)v(k)dk$$
$$(pu) *_p v = p(u *_p v) - u *_p (pv).$$

План действий

Попробуем вычислить

$$\dot{x}_{\text{eff}} = -\frac{\dot{W}}{\partial_x W}.$$

Производная по координате

$$\partial_x W(x,p,t) = \partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p G(x,p) +$$
$$+ W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p \partial_x G(x,p)$$

Вычислим свёртку с $\partial_x G(x,p) = \frac{2\theta(x)}{\pi}\cos(2px) + \frac{\delta(x)}{\pi p}\sin(2px)$:

$$W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p \cos(2px) = 2\Re\left[e^{2ipx}f(x,\pm 2x,t)\right] = 0.$$

То есть, второй член равен нулю и получим

$$\partial_x W(x,p,t) = -\frac{p}{m}\left[\partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p G(x,p)\right].$$

Производная по времени

$$\dot{W}(x,p,t) = -\left[\frac{p}{m}\partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right)\right] *_p G(x,p) =$$
$$= -\frac{p}{m}\left[\partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p G(x,p)\right] +$$
$$+ \frac{1}{m}\partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p [pG(x,p)].$$

Свёртка с $pG(x,p) = \frac{\theta(x)}{\pi}\sin(2px)$:

$$\partial_x W_0\left(x-\frac{pt}{m},p\right) *_p \sin(2px) = 2\Im\left[e^{2ipx}\partial_x f(x,2x,t)\right].$$

Траектория Вигнера

Отношение вычисленных производных есть

$$\dot{x}_{\text{eff}} = -\frac{\dot{W}}{\partial_x W} = \frac{p}{m} - \frac{2\theta(x)\Im\left[e^{2ipx}\partial_x\varphi^*(0,t)\varphi(2x,t)\right]}{\pi m\,\partial_x W_0 *_p G}.$$

Виден классический вклад в динамику и квантовая поправка. Вдали от стенки, если $\varphi(\infty,t) \to 0$, квантовая поправка отсутствует и частица движется классически.

Транспортное уравнение

Уравнение движения можно также записать в виде

$$\dot{W}(x,p,t) = -\frac{p}{m}\partial_x W(x,p,t) + \frac{2\theta(x)}{\pi m}\Im\left[e^{2ipx}\partial_x\varphi^*(0,t)\varphi(2x,t)\right]$$

Это транспортное уравнение с источником, решение которого известно. Его можно получить если записать уравнение Мояля $\dot{W} = \{\{H,W\}\}$ с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\delta'(x)}{2m}.$$