



Московский институт электроники и  
математики имени А. Н. Тихонова

Магистерская диссертация  
Прикладная электроника и  
фотоника М11.04.04

Москва  
04.06.2024

## Изучение столкновения двух твёрдых точечных частиц в формализме квантовой механики в фазовом пространстве



Пугач Наталия Григорьевна  
**Научный руководитель**  
профессор, МИЭМ ДЭИ



Ильин Евгений  
Владимирович  
**Магистрант**



Сеидов Сеидали Сахиб Оглы  
**Консультант**  
К.ф.-м.н.



**Ключевые слова:** квантовая механика, квантово-классическое соответствие, функция Вигнера, столкновение частиц.

**Проблема:** исследовать квантово-классическое соответствие на примере **системы двух сталкивающихся частиц**.

**Научная новизна** работы заключается в разработке алгоритма и программы для численного расчета функции Вигнера.

**Актуальность исследования** обусловлена фундаментальной важностью проблемы квантово-классического соответствия.

**Предмет исследования** — это описание квантовых и классических аспектов динамики сталкивающихся частиц с помощью функции Вигнера, а также декогеренция по причине столкновения частиц.

**Цель работы** — это провести численное моделирование функции Вигнера для системы двух сталкивающихся частиц.

*Изучение столкновений частиц позволяет глубже понять квантовые эффекты декогеренции, играющие важную роль в развитии квантовых технологий.*



1. Освоить методы квантовой механики в фазовом пространстве, включая использование **функции Вигнера** для описания состояния системы.
2. Разработать **алгоритм** и реализовать **программу** для численного расчета функции Вигнера и визуализации ее графиков.
3. Проанализировать **квантовую динамику** сталкивающихся частиц и сравнить её с классической.

Функция Вигнера системы в состоянии  $\hat{\rho}$ :

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

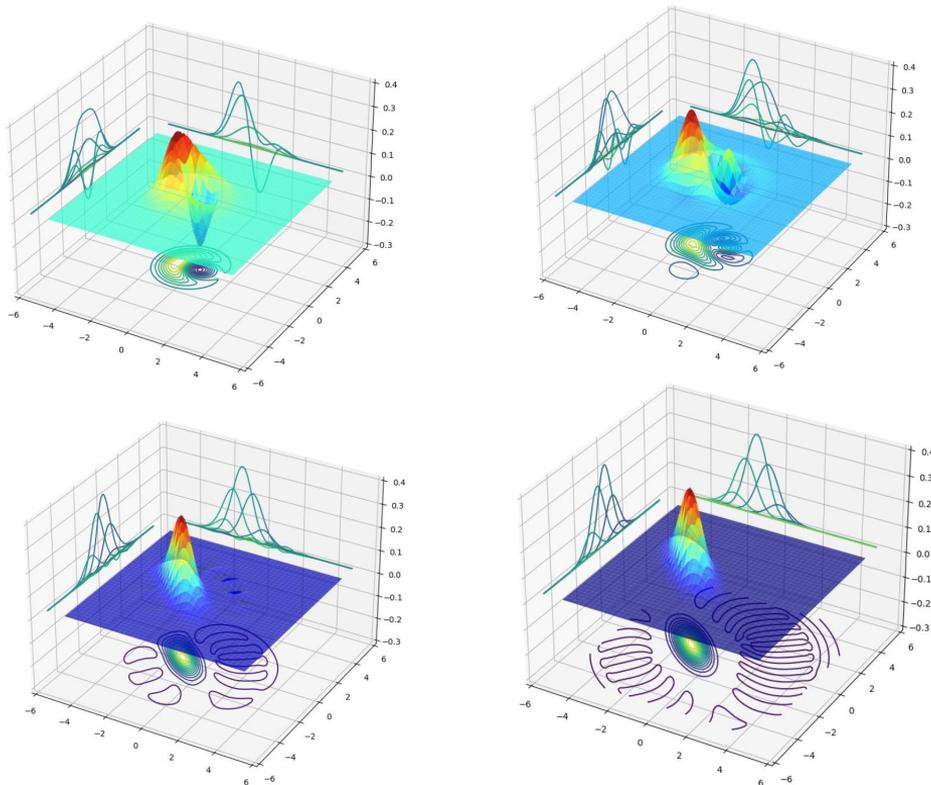
В чистом состоянии  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ :

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

$$-\frac{2}{\hbar} \leq W(x, p) \leq \frac{2}{\hbar}$$

$$P(x) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p) dp \quad P(p) = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p) dx$$

Пример визуализации функции Вигнера (по приложению 1)



$$\begin{aligned}
 \hat{A}\hat{B} &\rightarrow A(x, p) \star B(x, p) \\
 [\hat{A}, \hat{B}] &\rightarrow \{\{A(x, p), B(x, p)\}\} \\
 \dot{\hat{\rho}} = i[\hat{H}, \hat{\rho}] &\rightarrow \dot{W} = i\{\{H, W\}\}
 \end{aligned}$$

Квазиклассика:

$$\{\{A(x, p), B(x, p)\}\} = \{A, B\} + O(\hbar^2)$$

Классическая механика:

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \{q, H\}; \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \{p, H\}. \end{cases}
 \quad
 \begin{aligned}
 \frac{d}{dt} f(p, q, t) &= \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial t} \\
 &= \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}.
 \end{aligned}$$

Квантование **Вейля-Вигнера** является методом для представления квантовых операторов в виде функций на фазовом пространстве.

Операторы **A** и **B** в квантовой механике связаны с функциями **A(x, p)** и **B(x, p)** на фазовом пространстве через преобразование Вейля-Вигнера.

**Квазиклассическая формула**, связывающая **скобку Пуассона {A, B}** с функцией Вигнера для операторов **A** и **B** позволяет аппроксимировать квантовую динамику классической с некоторыми поправками.

Абсолютно упругое столкновение точечных частиц.

Модель описывается гамильтонианом с **дельта-функцией** взаимодействия.

Перепишем гамильтониан в координатах центра масс **R** и относительных координатах **r**.

Интересует движение частиц относительно друг друга, то есть изменение координаты **r**.

Рассмотреть предел, когда потенциал **U<sub>0</sub>** стремится к бесконечности, который сводится к одномерной задаче об отражении от стенки.

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U_0 \delta(|X_1 - X_2|)$$

где  $p_1$  и  $p_2$  - импульсы частиц,  $m_1$  и  $m_2$  - их массы,  $X_1$  и  $X_2$  - координаты частиц,  $U_0$  - потенциал взаимодействия.

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{x}_1 + m_2 \mathbf{x}_2}{m_1 + m_2} \quad \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \quad \mathbf{p} = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}$$

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + U_0 \delta(r)$$

где  $P$  - общий импульс системы,  $p$  - относительный импульс,  $M = m_1 + m_2$  - суммарная масса системы, а  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$  - приведённая масса.

1. Воспользоваться формулой

$$W(R, r, P, p, t) = \frac{2r}{\pi} \theta(r) W_0 \left( R - \frac{Pt}{m_1 + m_2}, r - \frac{pt}{\mu}, P, p, 0 \right) *_p \text{sinc}(2pr).$$

2. Подобрать начальную функцию  $W_0$  в виде локализованного волнового пакета

$$w(R, r, P, p) = \frac{1}{\pi^2} e^{-(R-R_0)^2 - (P-P_0)^2} e^{-(r-r_0)^2 - (p-p_0)^2}.$$

2.1 Простейший вид локализованного волнового пакета (гауссиана)

$$f_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{r^2}{2}} H_n(r).$$

2.2 Она не удовлетворяет граничному условию, поэтому применим разложение по базису  $f_n$

$$W_0(R, r, P, p, 0) = \sum_{n=0}^N c_{2n+1}(R, P) f_{2n+1}(r).$$

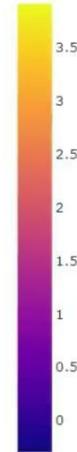
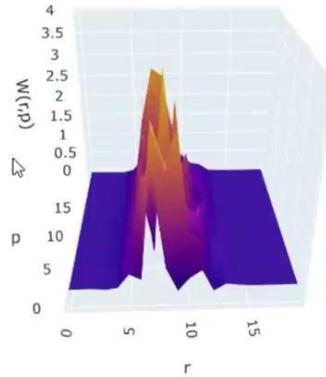
3. Подставить функцию Вигнера в виде суммы и построить график полученной функции.

$$c_n = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(r-r_0)^2}{2}} r^2 H_n(r) dr.$$

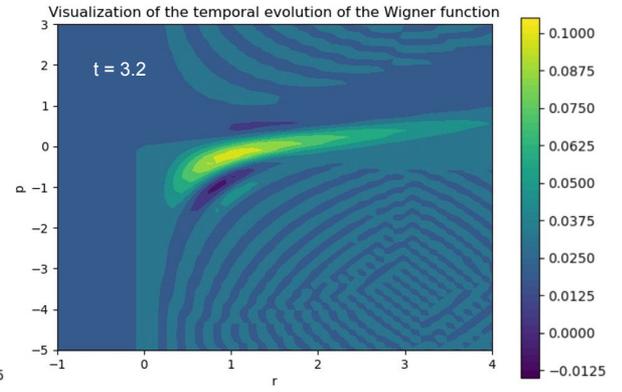
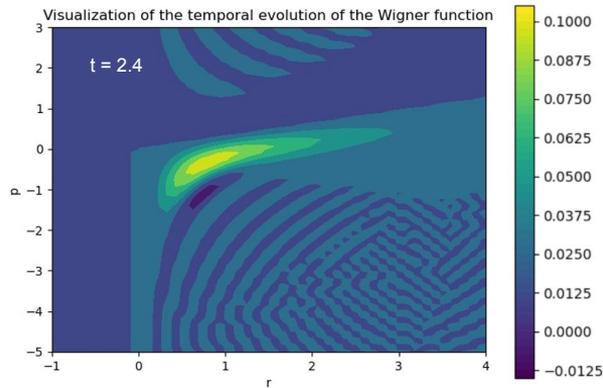
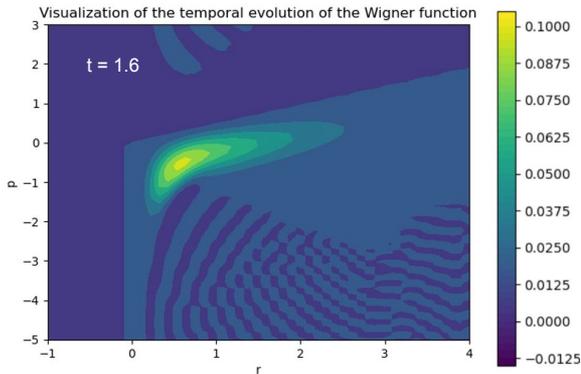
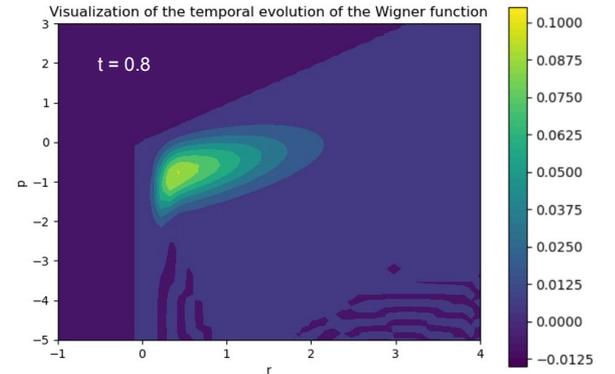
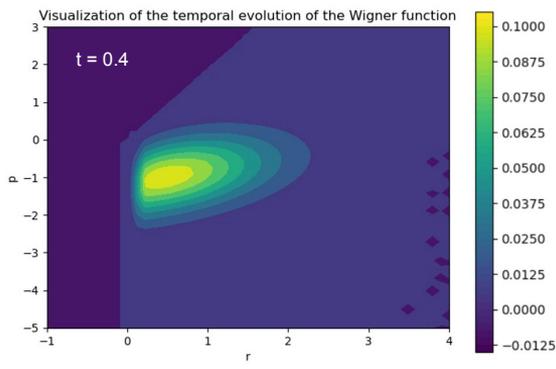
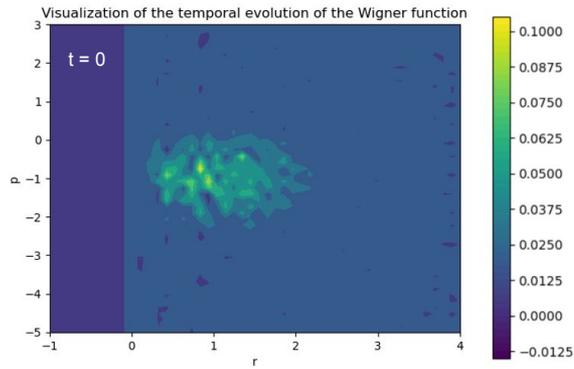


Time: 0.0

Play



Пример программной реализации моделирования столкновения частиц на языке Python.



- Были созданы программы для численного расчета и визуализации функции Вигнера двух сталкивающихся частиц с использованием библиотек NumPy, QuTiP, SciPy и Plotly.
- Результаты визуализации представлены в виде анимированных 2D и 3D-графиков, демонстрирующих временную эволюцию функции Вигнера для моделируемого процесса столкновения.
- Отражение частиц происходит корректно, это основной классический вклад в динамику. Кроме него наблюдаются квантовые интерференционные эффекты проявляющиеся в осцилляциях функции Вигнера вблизи  $r = 0$ .

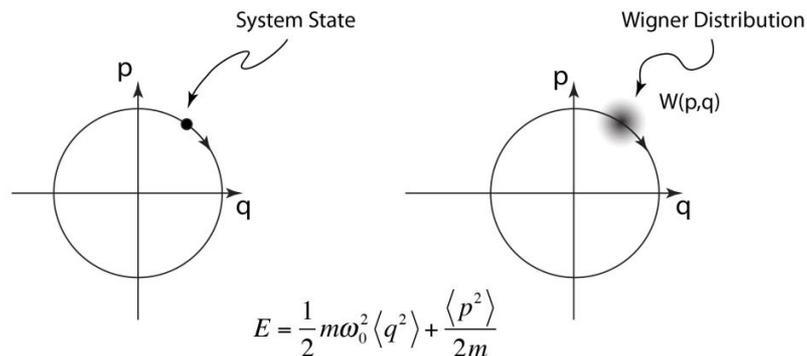


Классический и квантовый портреты гармонического осциллятора в фазовом пространстве.

### Quantum Trajectory in Phase Space

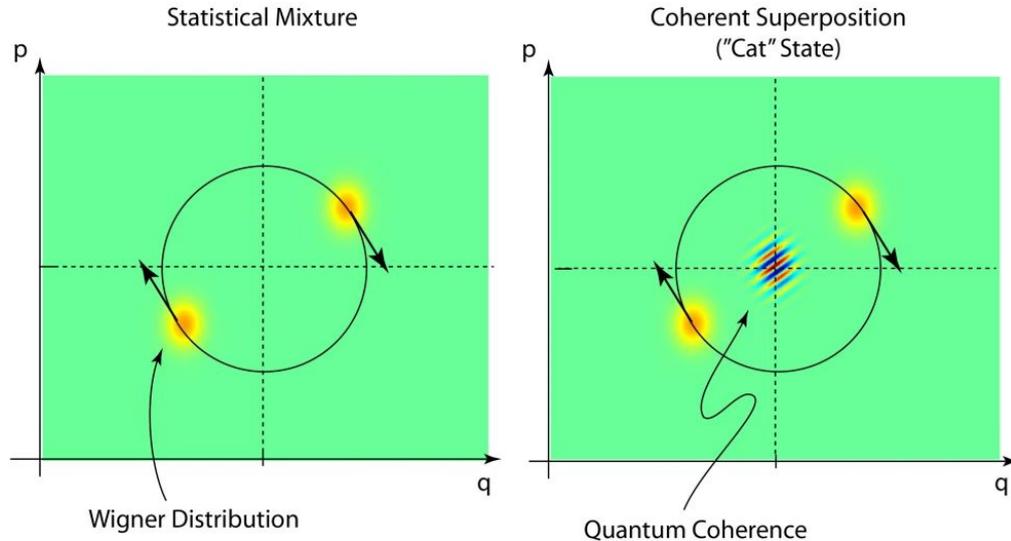
Classical Harmonic Oscillator

Quantum Harmonic Oscillator



Wigner.

## Wave Packets in Phase Space



**Квантовые фазово-пространственные портреты двойных волновых пакетов.**

Слева волновые пакеты не имеют когерентности, являясь статистической смесью.

Справа - случай когерентной суперпозиции, или "кошачьего состояния", для двух волновых пакетов в одномерном гармоническом осцилляторе.

## Отражение от стенки

В пределе  $U \rightarrow \infty$  задача сводится к свободному движению частицы на полуплоскости  $R \in \mathbb{R}$ ,  $r \in \mathbb{R}_+$ . Движение вдоль координаты  $r$  сводится к одномерной задаче об отражении от стенки в точке  $r = 0$ . Тогда функция Вигнера представляется в виде свёртки:

$$W(R, r, P, p, t) = \frac{2r}{\pi} \theta(r) W \left( R - \frac{Pt}{m_1 + m_2}, r - \frac{pt}{\mu}, P, p, 0 \right) *_p \text{sinc}(2pr). \quad (4)$$

## Начальное условие

Функция Вигнера в начальный момент времени должна удовлетворять условию  $W(r = 0, t = 0) = 0$ . Для его выполнения удобно разложить функцию Вигнера  $W(t = 0)$  по некоторому базису ортогональных функций  $f_n(r)$  таких, что  $f_n(0) = 0$ . Функции  $f_n(r) = \sin(\pi nr)$  не подходят, так как в силу их периодичности не удастся сконструировать волновой пакет такой, что  $W(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Вместо них выберем базис нечётных собственных состояний квантового осциллятора

$$f_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{r^2}{2}} H_n(r), \quad (5)$$

где  $H_n(r)$  — полиномы Эрмита порядка  $n$ . Так как функции  $f_n(r)$  не периодичны и затухают при  $r \rightarrow \infty$ , с их помощью можно сконструировать локализованный волновой пакет.

**Теоретическая значимость** работы заключается в том, что в ней разработаны и уточнены следующие теоретические положения:

1. На основе аналитическое выражение для функции Вигнера системы двух сталкивающихся частиц с учетом всех необходимых граничных условий.
2. Выведены соотношения для коэффициентов разложения функции Вигнера по базису нечетных состояний квантового осциллятора.
3. Акт столкновения это модель при взаимодействии с внешней средой для понимания процессов декогеренции с внешней средой

**Практическая значимость работы** заключается в том, что полученные результаты имеют следующие практические применения:

- Разработанные алгоритмы и программы для вычисления функции Вигнера могут быть использованы для моделирования процессов в квантовых системах.
- Полученные результаты важны для понимания границ применимости квантовой и классической механики при описании реальных физических процессов.
- Выводы, касающиеся особенностей квантово-классического соответствия, актуальны для развития квантовых вычислений и проектирования квантовых алгоритмов.
- Множество систем в электронике являются квазиклассическими...
- Подход вигнера используется при выводе уравнений Эленбергера и Узаделя

## Отражение от стенки

В пределе  $U \rightarrow \infty$  задача сводится к свободному движению частицы на полуплоскости  $R \in \mathbb{R}$ ,  $r \in \mathbb{R}_+$ . Движение вдоль координаты  $r$  сводится к одномерной задаче об отражении от стенки в точке  $r = 0$ . Тогда функция Вигнера представляется в виде свёртки:

$$W(R, r, P, p, t) = \frac{2r}{\pi} \theta(r) W\left(R - \frac{Pt}{m_1 + m_2}, r - \frac{pt}{\mu}, P, p, 0\right) *_p \text{sinc}(2pr). \quad (4)$$

## Начальное условие

Функция Вигнера в начальный момент времени должна удовлетворять условию  $W(r = 0, t = 0) = 0$ . Для его выполнения удобно разложить функцию Вигнера  $W(t = 0)$  по некоторому базису ортогональных функций  $f_n(r)$  таких, что  $f_n(0) = 0$ . Функции  $f_n(r) = \sin(\pi nr)$  не подходят, так как в силу их периодичности не удастся сконструировать волновой пакет такой, что  $W(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Вместо них выберем базис нечётных собственных состояний квантового осциллятора

$$f_n(r) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r^2}{2}} H_n(r), \quad (5)$$

где  $H_n(r)$  — полиномы Эрмита порядка  $n$ . Так как функции  $f_n(r)$  не периодичны и затухают при  $r \rightarrow \infty$ , с их помощью можно сконструировать локализованный волновой пакет. Тогда функцию Вигнера в начальный момент времени можно записать в виде суммы

$$W(R, r, P, p, 0) = \sum_{n=0}^N c_{2n+1}(R, P, p) f_{2n+1}(r). \quad (6)$$

Коэффициенты  $c_n(R, P, p)$  следует выбрать из физических соображений. Например, для гауссиано-подобного начального состояния, локализованного в точке  $r_0$

$$c_n(R, r, p) = \frac{e^{-R^2 - P^2}}{\pi^2} \int e^{-(r-r_0)^2 - p^2} f_n(r) dr. \quad (7)$$

## Разложение по ортогональному базису

Гауссоподобную функцию Вигнера, удовлетворяющую граничному условию  $W(r = 0) = 0$ , получим разложением по базису (5) функции Вигнера

$$w(R, r, P, p) = \frac{1}{\pi^2} e^{-(R-R_0)^2 - (P-P_0)^2} e^{-(r-r_0)^2 - (p-p_0)^2}. \quad (10)$$

То есть,

$$\begin{aligned} W(R, r, P, p, 0) &= \sum_n f_{2n+1}(r) \int w(R, r, P, p) f_{2n+1}(r) dr = \\ &= \frac{e^{-(R-R_0)^2 - (P-P_0)^2 - (p-p_0)^2}}{\pi^2} \sum_n c_n f_{2n+1}(r). \end{aligned} \quad (11)$$

Коэффициенты  $c_n$  представляют собой интеграл

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \int e^{-(r-r_0)^2} e^{-\frac{r^2}{2}} H_n(r) dr. \quad (12)$$

Интеграл данного типа можно найти в справочнике Градштейна и Рыжика:

$$\int e^{-\frac{(x-y)^2}{2u}} H_n(x) dx = \sqrt{2\pi u} (1 - 2u)^{n/2} H_n\left(\frac{y}{\sqrt{1-2u}}\right). \quad (13)$$

Выделяя полный квадрат в показателе экспоненты получим

$$c_n = \frac{e^{-\frac{r_0^2}{3}}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} \int e^{-\frac{3}{2}(r-\frac{2}{3}r_0)^2} H_n(r) dr = \frac{3^{-\frac{n+1}{2}}}{\sqrt{2^{n-1} n!} \sqrt{\pi}} e^{-\frac{r_0^2}{3}} H_n\left(\frac{2r_0}{3}\right). \quad (14)$$

Зависимость от времени найдём согласно (4):

$$\begin{aligned} W(R, r, P, p, t) &= \frac{2r}{\pi^3} \theta(r) e^{-(R-R_0 - \frac{Pt}{m_1+m_2})^2 - (P-P_0)^2} \times \\ &\times \sum_n c_n \left[ e^{-(p-p_0)^2} f_{2n+1}\left(r - \frac{pt}{\mu}\right) \right] *_p \text{sinc}(2pr). \end{aligned} \quad (15)$$

### Граничные условия как свертка

Функция Вигнера  $W(R, r, P, p, t)$  в начальный момент времени должна удовлетворять условию  $W(r = 0, t = 0) = 0$ , что означает, что частица не может находиться за стенкой.

Записав волновую функцию в виде  $\psi(x) = \varphi(x)\theta(x)$  и введя сокращенные обозначения для функций  $f(x, y, t)$  и  $g(x, y)$ , функцию Вигнера системы можно представить как:

$$W(x, p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipy} f(x, y, t) g(x, y) dy$$

где

$$f(x, y, t) = \varphi^* \left( x - \frac{y}{2}, t \right) \varphi \left( x + \frac{y}{2}, t \right)$$

$$g(x, y) = \theta \left( x - \frac{y}{2} \right) \theta \left( x + \frac{y}{2} \right)$$

Мы можем рассматривать функцию Вигнера как преобразование Фурье по произведению:

$$W(x, p, t) = \mathcal{F}_y[f g](x, p, t)$$

Здесь  $\mathcal{F}_y$  обозначает преобразование Фурье по переменной  $y$ .

Аргументы функций  $f$  и  $g$  для краткости не указываются. Функция  $g$  не зависит от времени, поэтому  $\dot{W}(x, p, t) = \mathcal{F}_y[\dot{f} g](x, p, t)$ . Преобразование Фурье произведения равно свертке преобразований Фурье, поэтому

$$\dot{W}(x, p, t) = \mathcal{F}_y[\dot{f}](x, p, t) *_p \mathcal{F}_y[g](x, p)$$

Свертка двух функций относительно переменной  $*_p$  (не путать с произведением Мойля):

$$u(p) *_p v(p) = \int_{-\infty}^{\infty} u(k)v(p - k)dk$$

Последний шаг - осознание того, что  $\mathcal{F}_y[\dot{f}](x, p, t) = \dot{W}_0(x, p, t)$  - это производная по времени функции Вигнера системы в отсутствие граничных условий. Таким образом, решение краевой задачи можно построить путем свертки свободного решения с некоторой функцией  $\mathcal{F}_y[g](x, p)$ , которая зависит от точной формы граничных условий:

$$W(x, p, t) = W_0 \left( x - \frac{pt}{m}, p, 0 \right) *_p \mathcal{F}_y[g](x, p)$$

$$\mathcal{F}_y[g] = \frac{\sin(2px)\theta(x)}{\pi p} = \frac{2x}{\pi} \theta(x) \operatorname{sinc}(2px)$$

## Динамика свободной частицы

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad \boxed{\dot{W}_0(x, p, t) = \frac{i}{2m} \left( p - \frac{i}{2} \partial_x \right)^2 W_0 - \frac{i}{2m} \left( p + \frac{i}{2} \partial_x \right)^2 W_0 = -\frac{p}{m} \partial_x W_0(x, p, t)}$$

$$A(x, p) \star B(x, p) = A \left( x + \frac{i}{2} \overrightarrow{\partial}_{p,p} - \frac{i}{2} \overrightarrow{\partial}_x \right) B(x, p) = A(x, p) B \left( x - \frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_{p,p} + \frac{i}{2} \overleftarrow{\partial}_x \right)$$