Husimi 图

邴泓霖

2022 年 3 月 19 日

目录

1. 论文中基本概念的梳理
   - 流算符
   - 流算符的本征态
2. Husimi 表象
   - 流算符的测量
   - 多模态分析算法
3. 复现的结果
   - 未处理的 Husimi 图
   - 处理过的 Husimi 图

目录

流算符

在量子力学的课本中，在某一点的概率流算符 (the probability flux) 算符可以定义为

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}} = \frac{1}{2m}(|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\,\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\,|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|) \tag{1}$$

其中 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{p}$ 分别是质量为 m 的粒子的位置和动量。
同时，可以计算出概率流算符的平均值

$$\begin{aligned}\langle\psi|\,\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}}\,|\psi\rangle &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r})) \\ &= \frac{1}{m}\Im[\psi^*(\mathbf{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{m}\Im[\psi^*(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r})]\end{aligned} \tag{2}$$

流算符的“矛盾”

从式 (2) 可以看出流算符的概念有一些“矛盾”，我们知道位置很精确的同时，还需要一些关于动量的信息。

原文 [2]

The concept of “flux at a point” seems paradoxical because we say something about momentum while also knowing position precisely.

造成“矛盾”的原因

Heisenberg 不确定性原理

$$\Delta x \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

流算符

对于传统的流算符，存在如下问题:

- 概率流是否可以被测量
- 具有时间反演对称性的系统，其概率流会消失。

高斯型基矢可以写为

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0, \sigma \rangle = N_\sigma^{d/2} \mathrm{e}^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2}} \tag{3}$$

将式 (1) 改写成

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}_0,\sigma} = \frac{1}{2m}(|\mathbf{r}_0, \sigma\rangle \langle \mathbf{r}_0, \sigma| \, \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \, |\mathbf{r}_0, \sigma\rangle \langle \mathbf{r}_0, \sigma|) \tag{4}$$

流算符的本征态

写出本征方程:

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}_0,\sigma,i}\left|\lambda_{\sigma,i}\right\rangle = \lambda_{\sigma,i}\left|\lambda_{\sigma,i}\right\rangle \tag{5}$$

式 (4) 与 (5) 中的 i 是空间的维度指标。该本征方程的解可以写为

$$\left|\lambda_{\sigma,i}\right\rangle = \left|\mathbf{r}_0,\sigma\right\rangle + a\hat{p}_i\left|\mathbf{r}_0,\sigma\right\rangle$$

可以将求解本征方程转换成:

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}_0,\sigma}\left|\lambda_{\sigma,i}\right\rangle = \frac{1}{2m}\left(a\left\langle\hat{p}_i^2\right\rangle_\sigma\left|\mathbf{r}_0,\sigma\right\rangle + \hat{p}_i\left|\mathbf{r}_0,\sigma\right\rangle\right) \tag{6}$$

流算符的本征态

由于 $\langle \hat{p}_i^2 \rangle_\sigma = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$ 因此有两个本征值可写为

$$\lambda_{\sigma,i,\pm} = \pm \frac{\hbar}{4m\sigma} \tag{7}$$

本征态在坐标表象的形式如下

$$\langle \mathbf{r} | \lambda_{\sigma,i,\pm} \rangle = \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0, \sigma \rangle \pm \frac{\mathrm{i}}{\sigma} \mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0, \sigma \rangle \tag{8}$$

谐振子的本征态

$$
\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}|0\rangle &= \langle \mathbf{r}|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle \\
\langle \mathbf{r}|1\rangle &= \frac{\mathrm{e}_i\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}{\sigma}\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle \\
&\vdots
\end{aligned}
\tag{9}
$$

流算符和本征态的矩阵表示

流算符：

$$\hat{j}_{\mathbf{r}_0,\sigma,i} = \begin{bmatrix} 0 & +\mathrm{i}\lambda & 0\cdots & 0 \\ -\mathrm{i}\lambda & 0 & 0\cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0\cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

本征态：

$$|\lambda_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad |\lambda_2\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix} \quad |\lambda_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \cdots$$

拓展后的流算符

利用基矢的完备性，可以将流算符写成

$$\langle\psi|\,\hat{j}_{\mathbf{r}_0,\sigma,i}\,|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty}\langle\psi|\,\hat{j}_{\mathbf{r}_0,\sigma,i}\,|\lambda_i\rangle\,\langle\lambda_i|\psi\rangle \tag{10}$$

$$= \lambda|\,\langle\psi|\lambda_1\rangle\,|^2 - \lambda|\,\langle\psi|\lambda_2\rangle\,|^2 \tag{11}$$

$$= \frac{\mathrm{i}\hbar}{4m\sigma^2}[\langle\psi|\,\mathbf{e}_i\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\,|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle\,\langle\psi|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle^* - \langle\psi|\,\mathbf{e}_i\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\,|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle^*\,\langle\psi|\mathbf{r}_0,\sigma\rangle] \tag{12}$$

课本上定义的流（式 (2)）可以看作是 $\sigma\to 0^+$ 的特殊情况。

目录

流算符的测量

将式 (8) 与下面的泰勒展开进行比较

$$e^{\pm\frac{i}{\sigma}\mathbf{e}_i\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} \approx 1 \pm \frac{i}{\sigma}\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \tag{13}$$

将流算符的本征态和相干态联系起来，可以定义

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle = N_\sigma^{d/2} e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2}+i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} \tag{14}$$

条件

$$\sigma k \ll 1$$

相干态中的不确定关系 σ

$$\Delta x \propto 1/\Delta k \propto \sigma \tag{15}$$

对于 $\sigma \to 0$ 的情况：动量空间的 $\sigma_k = \infty$，实空间的 $\sigma_r = 0$，与传统的流算符的测量结果相同。

相空间分布函数

- Wigner 准概率分布函数
- Husimi 分布函数（相空间的概率密度）

Husimi 函数

将 $|\psi\rangle$ 与流算符的本征态 $|\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle$ 作内积可得

$$\langle\psi|\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle = \int \mathrm{d}\mathbf{r} \, \langle\psi|\mathbf{r}\rangle \, \langle\mathbf{r}|\lambda, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle \tag{16}$$

$$= \int \mathrm{d}\mathbf{r} \; \psi^*(\mathbf{r}) \, N_\sigma^{d/2} \mathrm{e}^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2} + \mathrm{i}\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \tag{17}$$

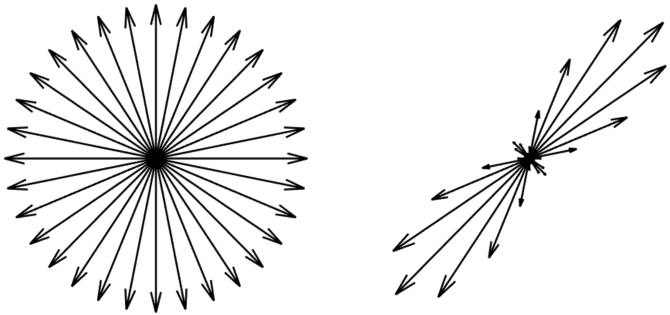
利用式（17)，可以拓展流算符的测量定义：

$$\mathrm{Hu}(\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma, \psi(\mathbf{r})) = |\langle\psi \,|\, \mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle|^2 \tag{18}$$

Husimi 矢量

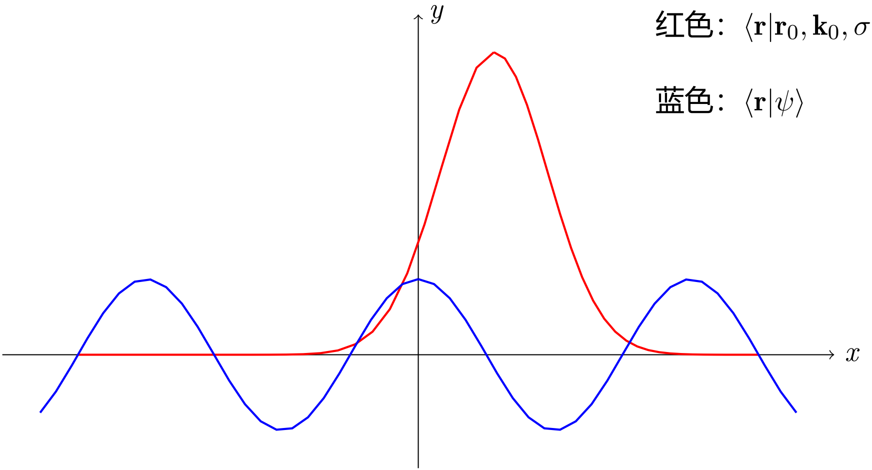
Husimi 矢量：通过加权每一个用于测试的 $\mathbf{k}_0$。

$$\mathrm{Hu}(\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma, \psi(\mathbf{r})) = \left| \int \psi^*(\mathbf{r})\, N_\sigma^{d/2} \mathrm{e}^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2} + \mathrm{i}\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}\, \mathrm{d}\mathbf{r} \right|^2$$



(a) 加权前 $\mathbf{k}_0$ (b) 加权后 $\mathbf{k}_0$

Husimi 矢量



红色：$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma \rangle$

蓝色：$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle$

只有在以 r_0 为圆心，半径为 σ 的圆内的点，才对 Husimi 函数值有贡献。

多模态分析算法

D. J. Mason 在文中 [1][2] 关于 Multi-Modal Analysis (MMA) 算法的描述如下所示

Algorithm 1 Multi-Modal Analysis (MMA)

1. A set of Husimi templates on N wavevectors $\{\mathbf{k}_j\}$ is created for the wavefunctions $\Psi = e^{i\mathbf{k}_i^{\text{test}}\cdot r}$ generated by the M wavevectors $\{\mathbf{k}_i^{\text{test}}\}$. Both sets of wavevectors lie along the dispersion contour. Each template can be stored as a vector of values $\mathbf{u}_i$ of length M where each member corresponds to the Husimi function along the wavevector $\mathbf{k}_j$.
2. Writing the Husimi projection as the vector $\mathbf{v}$, a metric is computed $d_i = \mathbf{v}\cdot\mathbf{u}_i$ for each Husimi template.
3. The maximum of the set $\{d_i\}$ is determined, and both the wavevector $\mathbf{k}_i^{\text{test}}$ and the dot product d_i are stored.
4. The contribution of the trajectory with wavevector $\mathbf{k}_i^{\text{test}}$ is determined by the re-weighted vector $\mathbf{u}_i\frac{d_i}{\mathbf{u}_i\cdot\mathbf{u}_i}$.
5. The re-weighted template vector is subtracted form the projection, that is, $\mathbf{v}\rightarrow\mathbf{v}-\mathbf{u}_i\frac{d_i}{\mathbf{u}_i\cdot\mathbf{u}_i}$.
6. All elements of $\mathbf{v}$ which are now negative are set to zero.
7. Steps 1-6 are repeated until the metric d_i dips below a threshold.
8. The set of vectors $\{d_i\mathbf{k}_i^{\text{test}}\}$ are used to approximate the Husimi projection

多模态分析算法

Algorithm 1 多模态分析法（MAA:Multi-Modal Analysis）

1: 用 M 个波矢 $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$ 生成测试平面波 $\psi = \mathrm{e}^{\mathbf{i}\mathbf{k}_i^{test}\cdot\mathbf{r}}$ ，将每个测试平面波用 N 个测试波矢 $\{\mathbf{k}_j\}$（非测试平面波的波矢）生成模板集合的成员。两组波矢 $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$ 和 $\{\mathbf{k}_j\}$ 都位于色散等值线上。每个模板 (个数为 M) 存储的值为 $\mathbf{u}_i$，$\mathbf{u}_i$ 的每一个成员对应于 Husimi 函数（式18）值;

2: 相似程度的衡量标准由 $\mathbf{d}_i = \mathbf{v}\cdot\mathbf{u}_i$ 给出，其中矢量 $\mathbf{v}$ 表示 Husimi 矢量，$\mathbf{u}_i$ 表示在步骤1) 中的每个模板;

3: 找出集合 $\{d_i\}$ 的极大值和对应的波矢 $\mathbf{k}_i^{test}$，并将它们保存下来;

4: 带波矢 $\mathbf{k}_i^{test}$ 的轨迹的贡献由重新加权的矢量决定 $\mathbf{u}_i\frac{d_i}{\mathbf{u}_i\cdot\mathbf{u}_i}$;

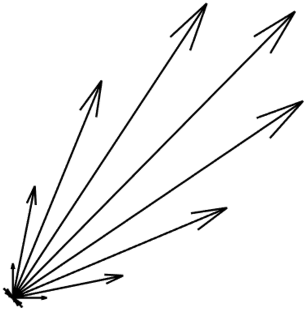
5: Husimi 矢量减去加权后的模板矢量，即 $\mathbf{v}_i \to \mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i\frac{d_i}{\mathbf{u}_i\cdot\mathbf{u}_i}$

6: 将 $\mathbf{v}$ 的所有负元素设为零;

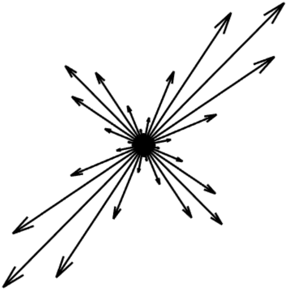
7: 重复步骤1)-6) 直到 $\mathbf{d}_i$ 低于一个阈值;

8: 矢量集合 $\{d_i\mathbf{k}_i^{test}\}$ 近似为处理后的 Husimi 流;

将测试平面波与未知波的 Husimi 函数值进行比较，找到相似之处。

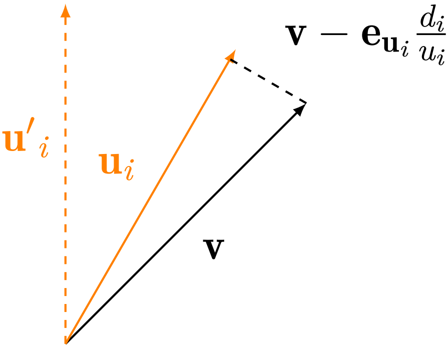


(c) $\psi^{test} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}_i^{test}\cdot\mathbf{r}}$



(d) $\psi = \alpha\cos\left(\mathrm{i}\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}\right)+\beta\cos\left(\mathrm{i}\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}\right)$

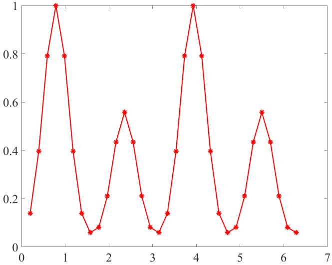
MMA 的思想 II



寻找 d_i 最大值

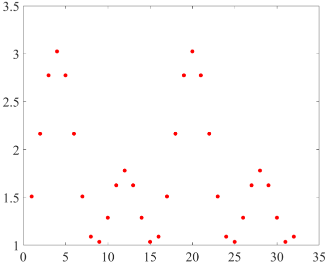
$$d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$$

其中 $|\mathbf{v}| = 1, |\mathbf{u}_i| = 1$



(e) 处理前 $\mathbf{v}$

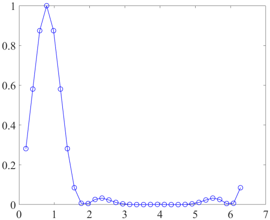
$$\xRightarrow{d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i}$$



(f) $\{d_i\}$

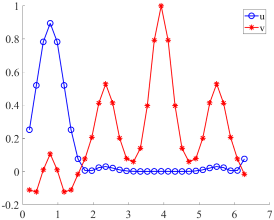
MMA 的实际操作 II

$\xRightarrow{\max d_i}$



(g) $\max d_i$ 对于的 u_i

$\xRightarrow{\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} - \mathbf{u}_i \frac{d_i}{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i}}$

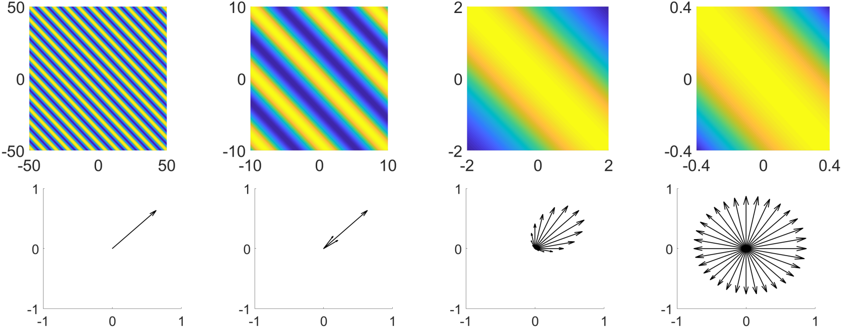


(h) 处理后的 $\mathbf{v}$ 和加权后的 $\mathbf{u_{i_max}}$

MMA 的流程 I

1. - 每个模板 $\mathbf{u}_i = [u_i^1 \ \ u_i^1 \ \ \cdots u_i^N]$，其中每个成员 $u_i^j = \mathrm{Hu}(\psi^{test}, \mathbf{k}_j)$
   - Husimi 矢量 $\mathbf{v} = [v^1 \ \ v^1 \ \ \cdots v^N]$，其中每个成员 $v^j = \mathrm{Hu}(\psi, \mathbf{k}_j)$
2. - $d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$
   - find $\max\{d_i\}$
   - $\max\{d_i\}$，$\mathbf{k}_i^{test}$ 保存
3. $\mathbf{v} \to \mathbf{v} - \mathbf{u}_i \frac{d_i}{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i}$
4. 将 $\mathbf{v}$ 中小于零的值设为零
5. 重复 1) - 6) 直到 $d_i < eps$
6. $\{d_i \mathbf{k}_i^{test}\}$ 就是 Husimi 流

目录



(i) 2%　(j) 10%　(k) 50%　(l) 250%

图: $\psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, 小图 $\Delta k/k$

文中 [2] 的图 2

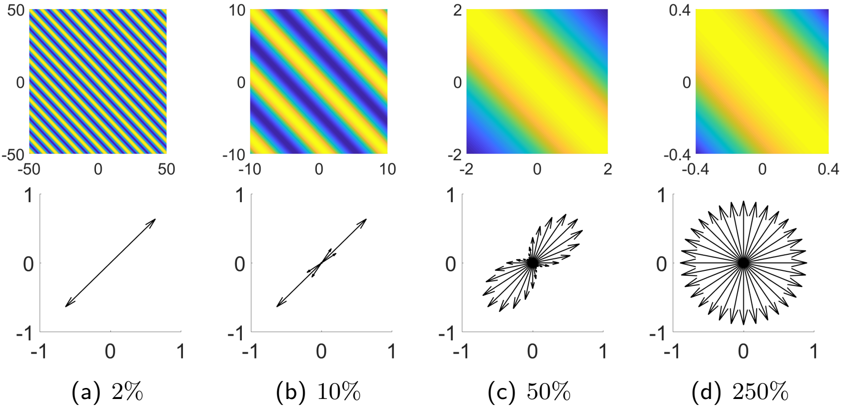
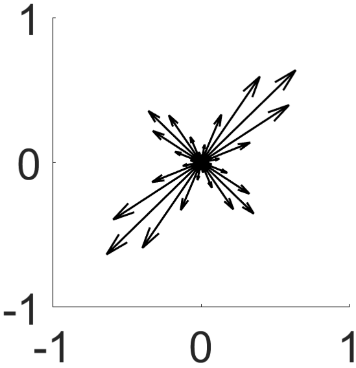
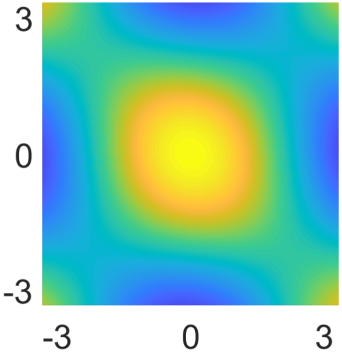


图: $\psi_B(\mathbf{r}) = \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$, 小图 $\Delta k/k$

文中 [2] 的图 3



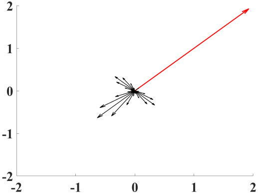
(a) $\Delta k/k = 30\%$ 时的 Husimi 图



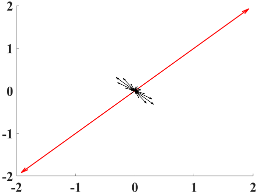
(b) $\Psi_C = \alpha\cos(\mathbf{ik}\cdot\mathbf{r}) + \beta\cos(\mathbf{ik}\cdot\mathbf{r})$

图: Husimi 图

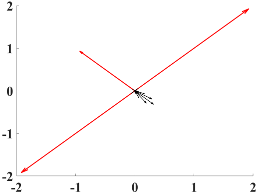
利用 MMA 算法处理过的 ψ_c



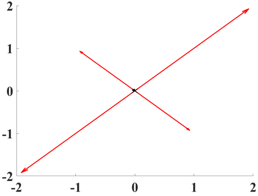
(a)



(b)



(c)



(d)

参考文献

Douglas J Mason, Mario F Borunda, and Eric J Heller.
Extending the concept of probability flux.
arXiv preprint arXiv:1205.3708, 2012.

Douglas J Mason, Mario F Borunda, and Eric J Heller.
Quantum flux and reverse engineering of quantum wave functions.
EPL (Europhysics Letters), 102(6):60005, 2013.

致谢

谢谢