

# Husimi 图

BHL

2022 年 4 月 3 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

## ④ 应用

- 圆形系统
- 运动场区域

# 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

## ④ 应用

- 圆形系统
- 运动场区域

# 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

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

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

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

# 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

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

# 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

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

其中  $N_{\sigma}^{d/2} = (\sigma \sqrt{2\pi})^{-1}$ , 将式 (1) 改写成

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

# 流算符的本征态

写出本征方程：

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{r}_0, \sigma, i} |\lambda_{\sigma, i}\rangle = \lambda_{\sigma, i} |\lambda_{\sigma, i}\rangle \quad (5)$$

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

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

可以将求解本征方程转换成：

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

# 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

$$\lambda_{\sigma,i,\pm} = \pm \frac{\hbar}{4m\sigma} \quad (7)$$

本征态在坐标表象的形式如下

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

# 谐振子的本征态

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

# 流算符和本征态的矩阵表示

流算符：

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

本征态：

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

# 拓展后的流算符

利用基矢的完备性，可以将流算符写成

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

$$= \lambda |\langle \psi | \lambda_1 \rangle|^2 - \lambda |\langle \psi | \lambda_2 \rangle|^2 \quad (11)$$

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

其中  $\lambda = \frac{\hbar}{4m\sigma}$  课本上定义的流（式(2)) 可以看作是  $\sigma \rightarrow 0^+$  的特殊情况。

# 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

## ④ 应用

- 圆形系统
- 运动场区域

# 流算符的测量

将式 (8) 与下面的泰勒展开进行比较

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

将流算符的本征态和相干态联系起来，可以定义

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

## 条件

$$\sigma k \ll 1$$

# 相干态中的不确定关系 $\sigma$

$$\Delta x \propto 1/\Delta k \propto \sigma \quad (15)$$

对于  $\sigma \rightarrow 0$  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

$$\langle\psi|\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle = \int d\mathbf{r} \langle\psi|\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\lambda, \mathbf{k}_0, \sigma\rangle \quad (16)$$

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

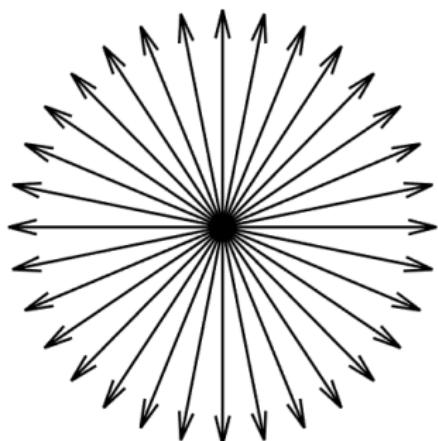
利用式 (17)，应用相干态定义一种波函数的测量值（测试波包）：

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

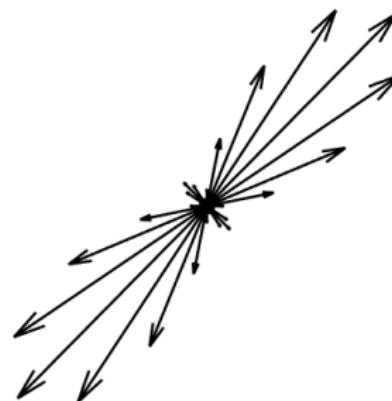
# Husimi 矢量

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

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

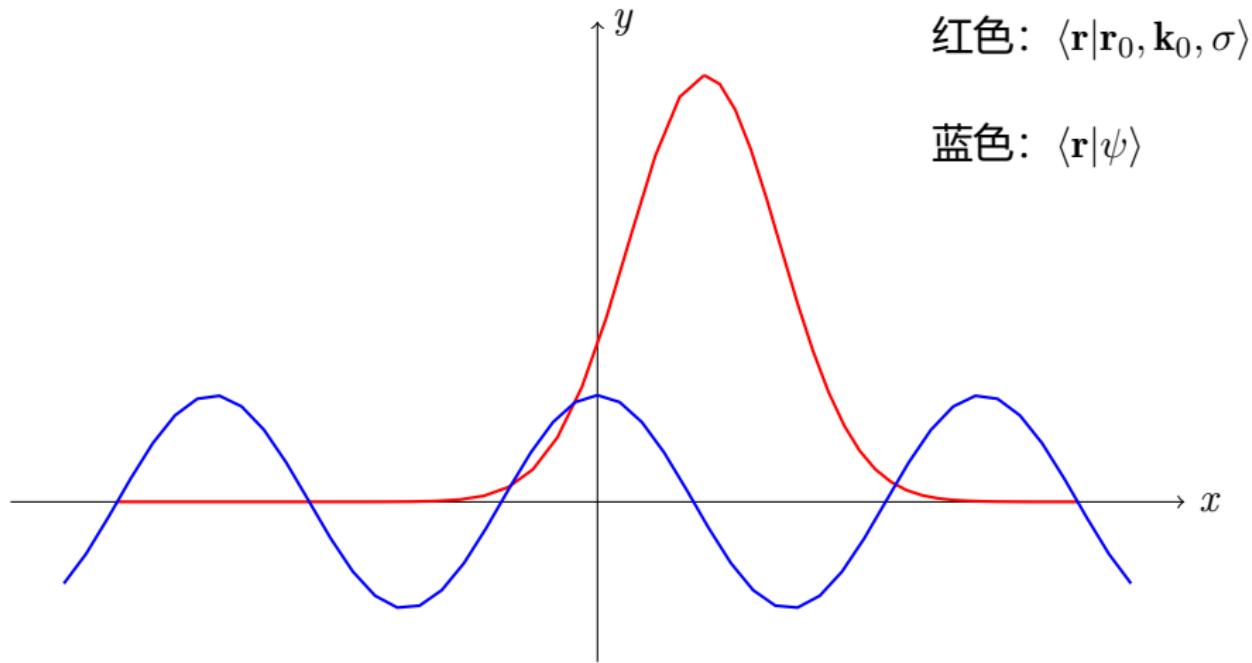


(a) 加权前  $\mathbf{k}_0$



(b) 加权后  $\mathbf{k}_0$

# Husimi 矢量



只有在以  $r_0$  为圆心，半径  $r \approx 3\sqrt{2}\sigma$  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  $\Psi = e^{i\mathbf{k}_i^{\text{test}} \cdot \mathbf{r}}$  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 from 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

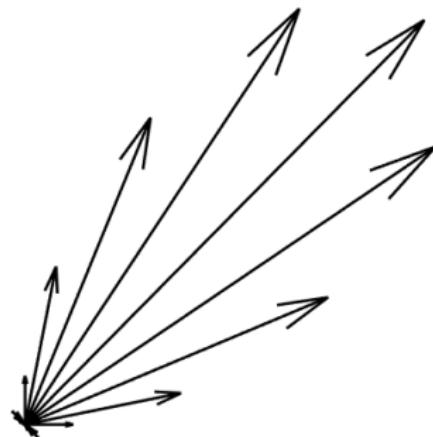
# 多模态分析算法

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

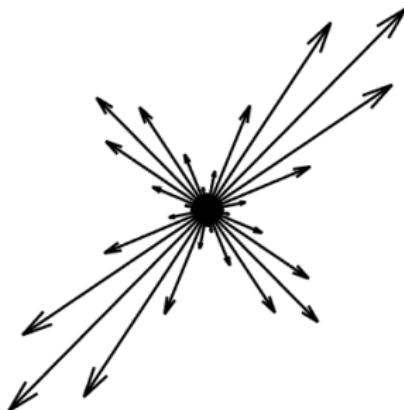
- 1: 用 M 个波矢  $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$  生成测试平面波  $\psi = e^{i\mathbf{k}_i^{test} \cdot \mathbf{r}}$ ，将每个测试平面波用 N 个测试波矢  $\{\mathbf{k}_j\}$  (非测试平面波的波矢) 生成模板集合的成员。两组波矢  $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$  和  $\{\mathbf{k}_j\}$  都位于色散等值线上。每个模板 (个数为 M) 存储的值为  $\mathbf{u}_i$ ,  $\mathbf{u}_i$  的每一个成员对应于 Husimi 函数 (式18) 值;
- 2: 相似程度的衡量标准由  $d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$  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  $\mathbf{v}_i \rightarrow \mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i \frac{d_i}{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i}$
- 6: 将  $\mathbf{v}$  的所有负元素设为零;
- 7: 重复步骤1)-6) 直到  $d_i$  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;

# MMA 的思想 |

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。

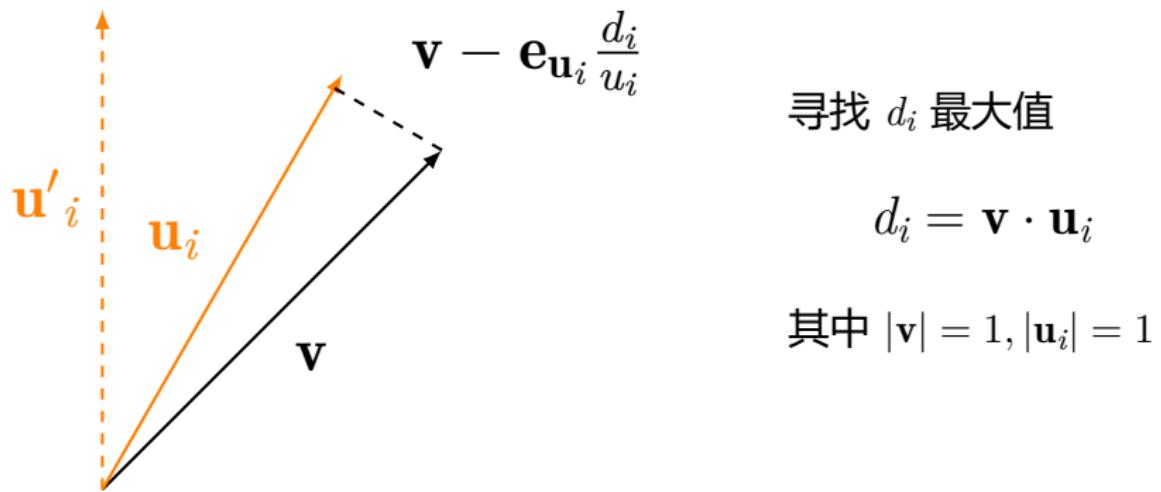


$$(c) \psi^{test} = e^{ik_i^{test} \cdot r}$$

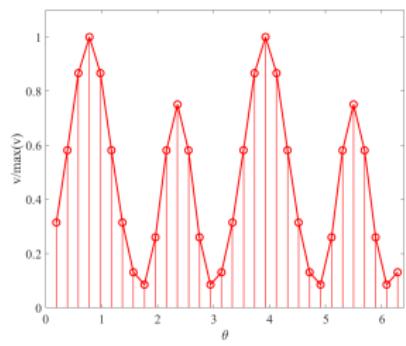


$$(d) \psi = \alpha \cos(\mathbf{i}\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) + \beta \cos(\mathbf{i}\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r})$$

## MMA 的思想 II

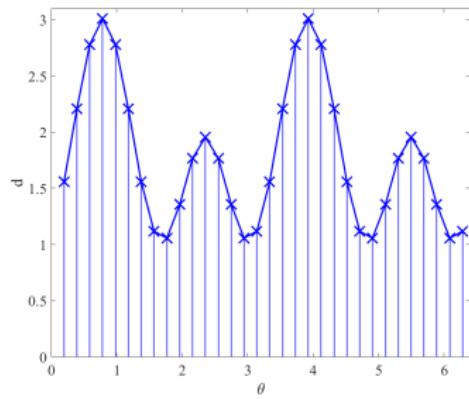


# MMA 的实际操作 I



(e) 处理前  $v$

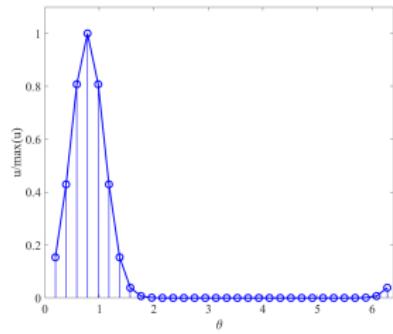
$$d_i = \underline{\underline{v} \cdot u_i} \text{ 卷积}$$



(f)  $\{d_i\}$

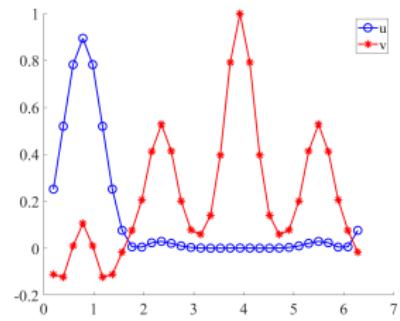
# MMA 的实际操作 II

$$\max d_i \implies$$



(g)  $\max d_i$  对于的  $u_i$

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



(h) 处理后的  $\mathbf{v}$  和加权后的  $\mathbf{u}_{i_{\max}}$

# MMA 的流程 I

## ① 准备

- 每个模板  $\mathbf{u}_i = [u_i^1 \ u_i^1 \ \cdots \ u_i^N]$ , 其中每个成员  $u_i^j = \text{Hu}(\psi^{test}, \mathbf{k}_j)$
- Husimi 矢量  $\mathbf{v} = [v^1 \ v^1 \ \cdots \ v^N]$ , 其中每个成员  $v^j = \text{Hu}(\psi, \mathbf{k}_j)$

## ② 寻找

- $d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$
- find  $\max\{d_i\}$
- $\max\{d_i\}$ ,  $\mathbf{k}_i^{test}$  保存

③  $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v} - \mathbf{u}_i \frac{d_i}{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i}$

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

## 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

## ④ 应用

- 圆形系统
- 运动场区域

# 文中 [2] 的图 2

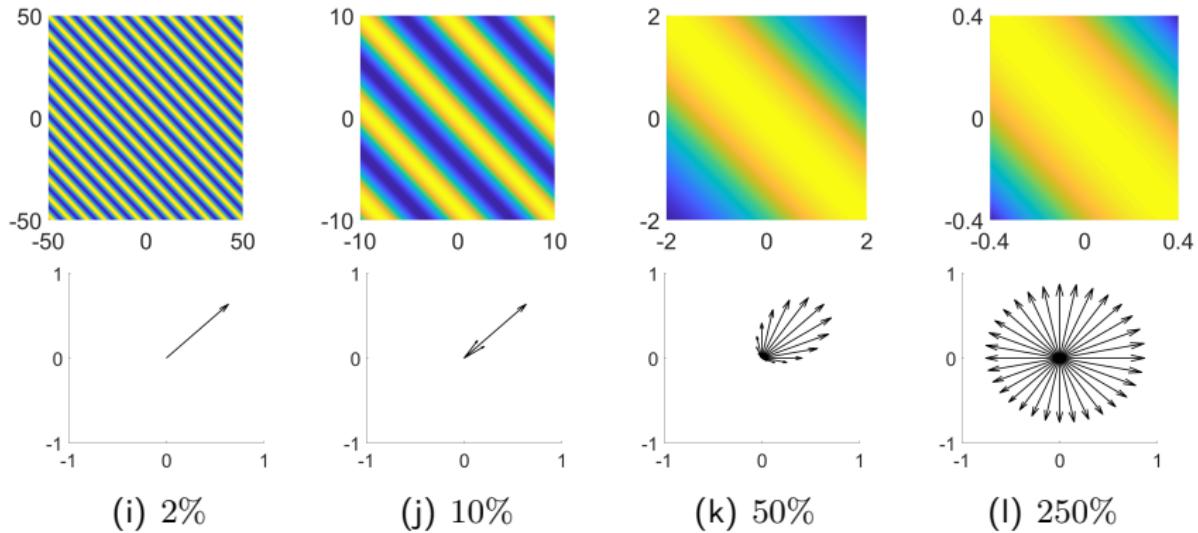


图:  $\psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , 小图  $\Delta k/k$

# 文中 [2] 的图 2

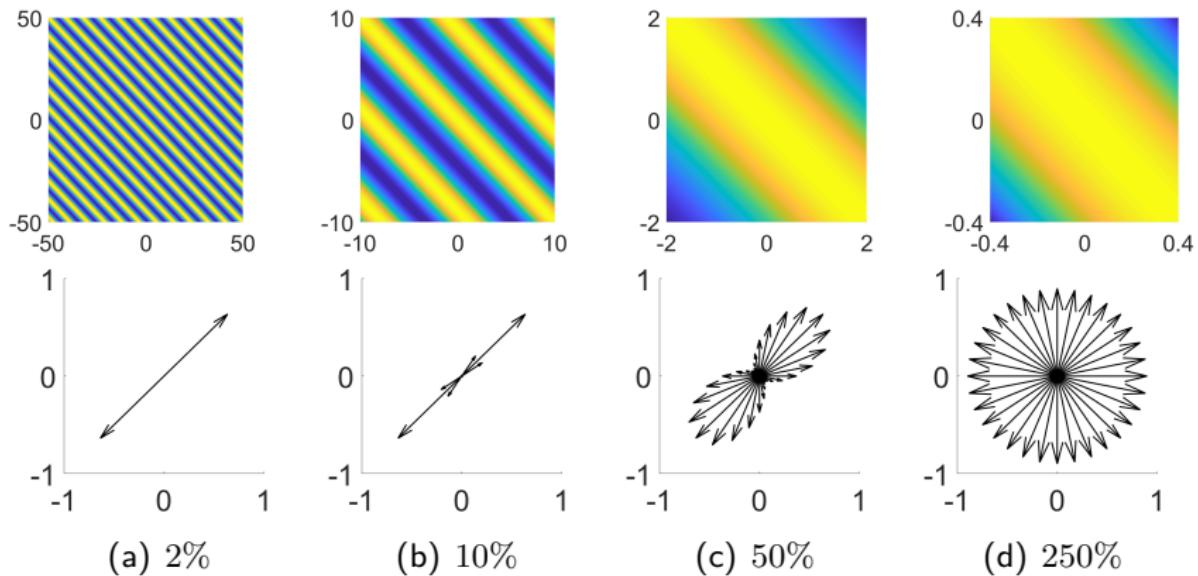
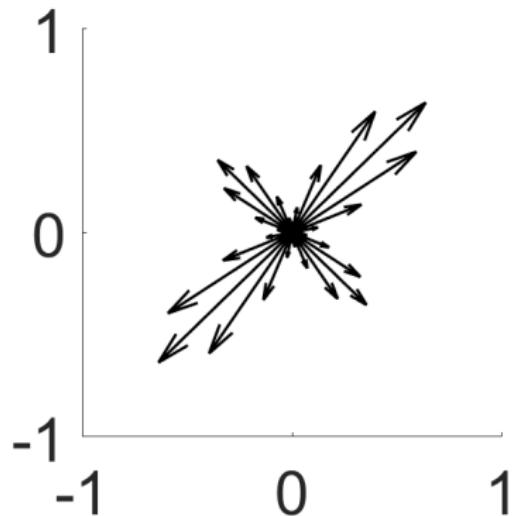
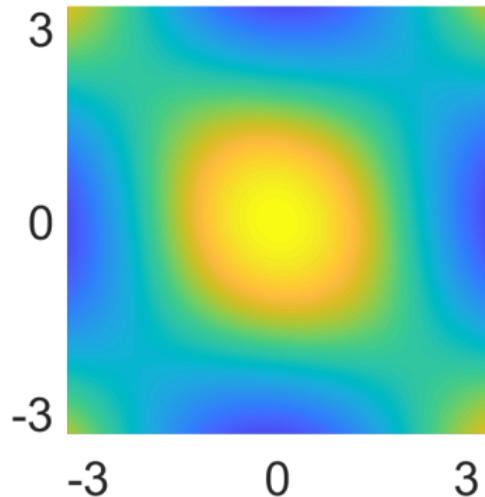


图:  $\psi_B(\mathbf{r}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , 小图  $\Delta k/k$

# 文中 [2] 的图 3



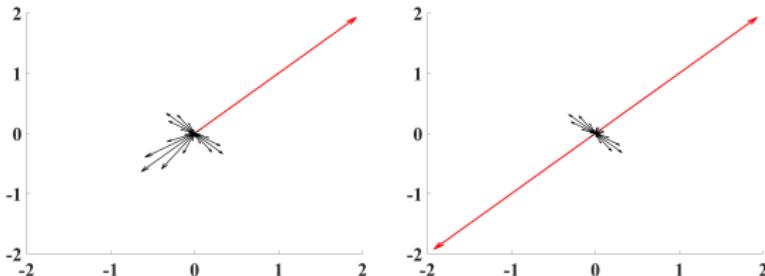
(a)  $\Delta k/k = 30\%$  时的 Husimi 图



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

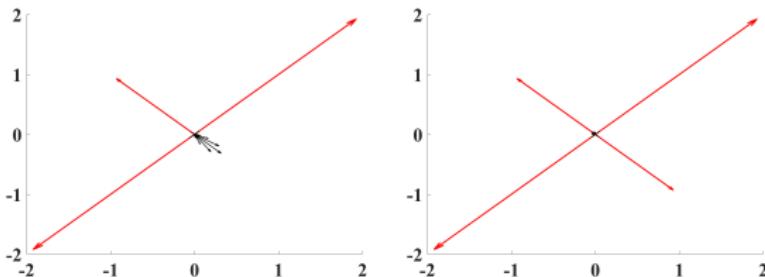
图: Husimi 图

# 利用 MMA 算法处理过的 $\psi_c$



(a)

(b)



(c)

(d)

# 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

## ④ 应用

- 圆形系统
- 运动场区域

# 采样点

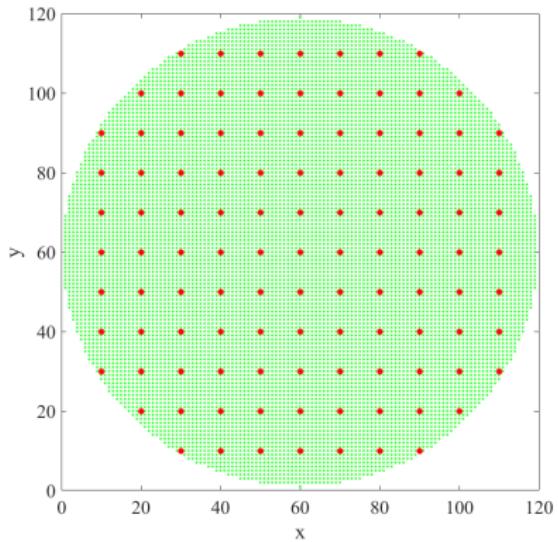
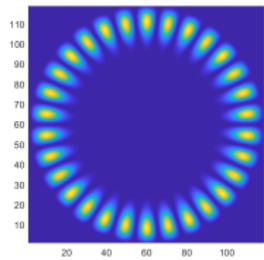
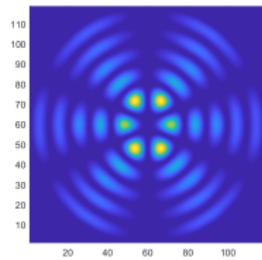


图: 红色: 采样点; 绿色: 离散的格点

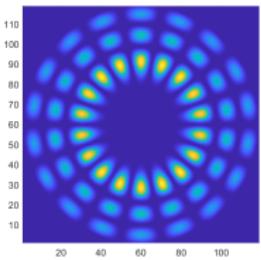
# 硬墙



(a)  $n = 91(m = 0)$



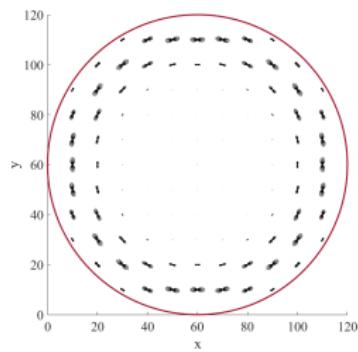
(b)  $n = 84(n \gg m)$



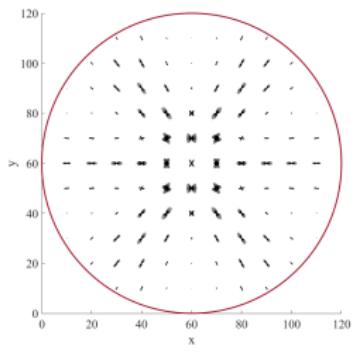
(c)  $n = 97(n \approx m)$

图: 波函数  $\psi$  的模方

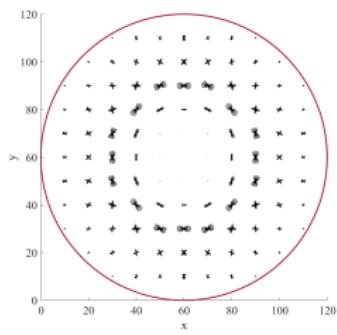
# 未处理的 Husimi 图



(a)  $n = 91$



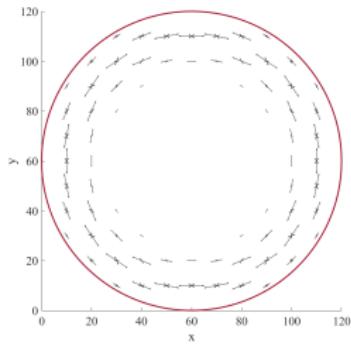
(b)  $n = 84$



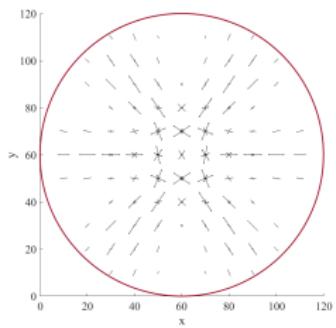
(c)  $n = 97$

图: 波函数  $\psi$  的 Husimi 图

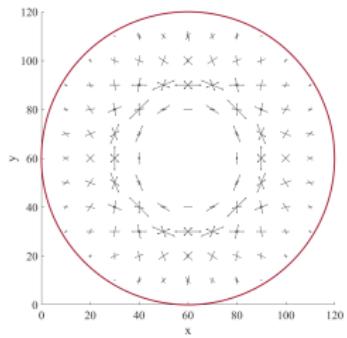
# 处理过的 Husimi 图



(a)  $n = 91$



(b)  $n = 84$



(c)  $n = 97$

图: 波函数  $\psi$  处理过的 Husimi 图 (MMA)。

上面的结果与文中 [3] 图 2: (a) - (e) 的结果相似。

# 软墙 ( $V = V_0(\mathbf{r})$ )

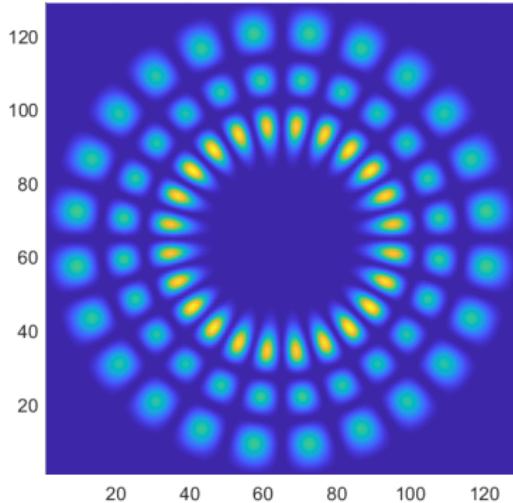


图: 波函数  $\psi$  的模方,  $n = 141$

# 未处理的 Husimi 图

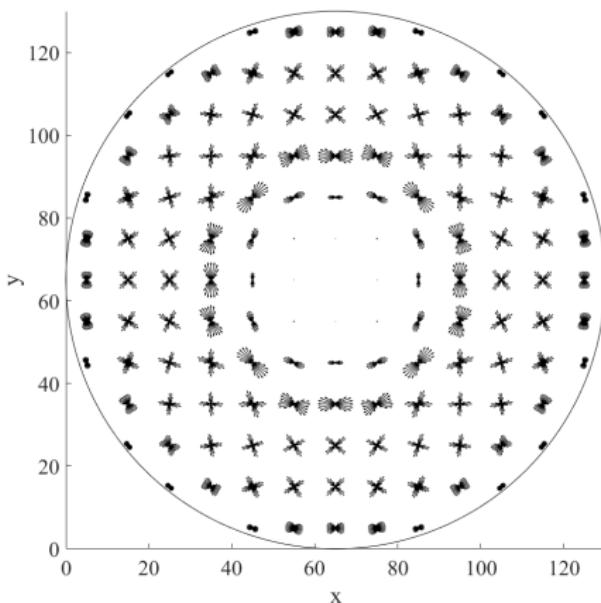


图: Raw Husimi Map,  $n = 141$

# 处理过的 Husimi 图

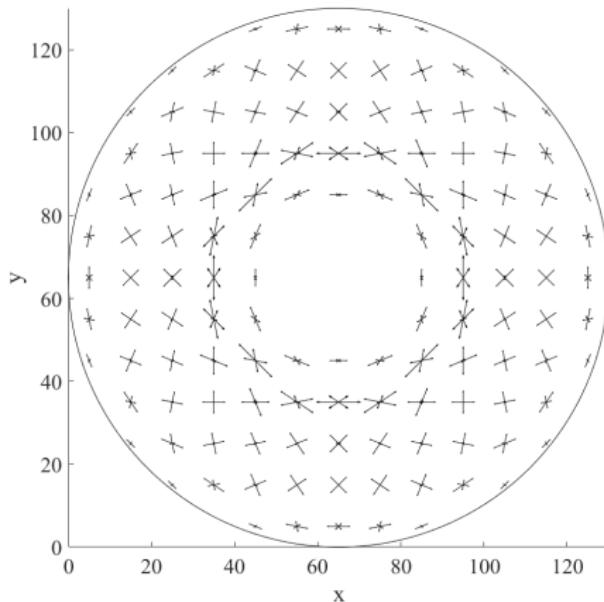
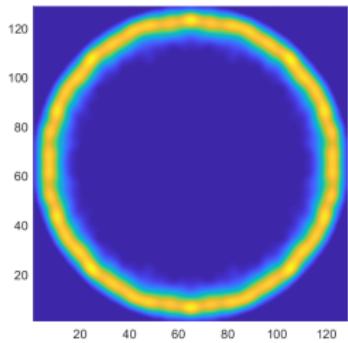
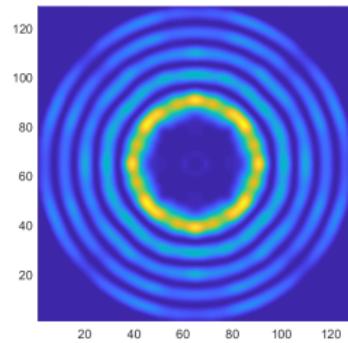


图: Processed Husimi Map,  $n = 141$

# 加入磁场



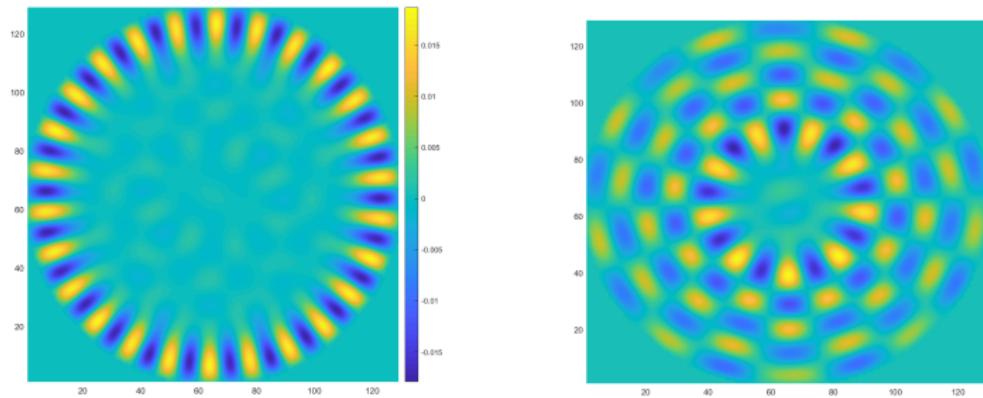
(a)  $n = 188$



(b)  $n = 196$

图: 波函数  $\psi$  的模方

# 加入磁场

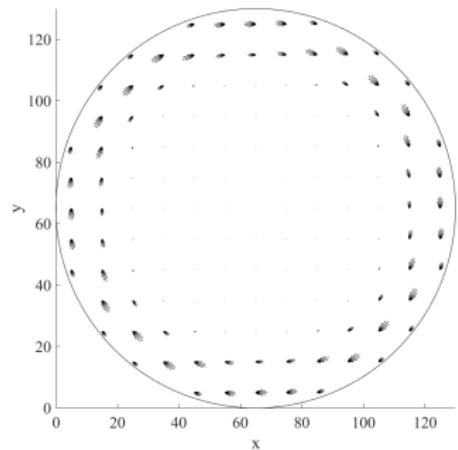


(a)  $n = 188$

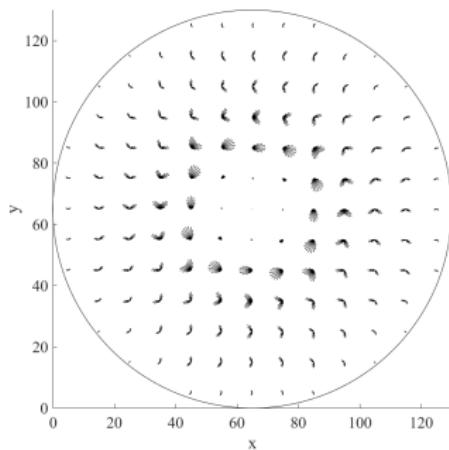
(b)  $n = 196$

图: 波函数  $\psi$  的实部

# 未处理的 Husimi 图



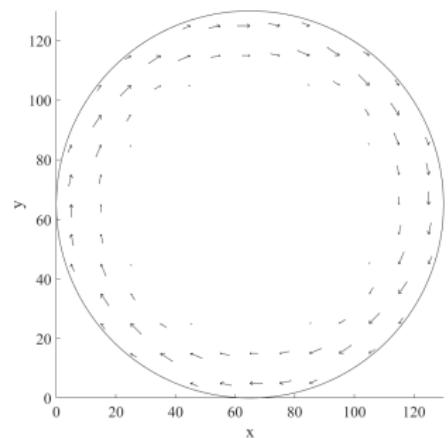
(a)  $n = 188$



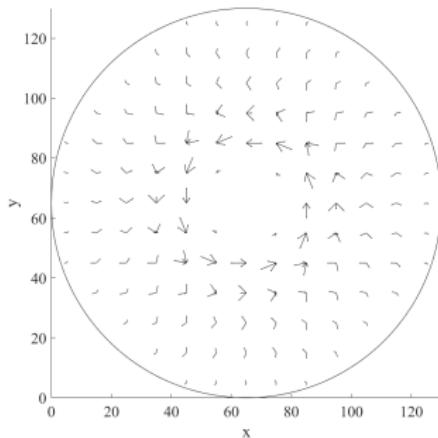
(b)  $n = 196$

图: Raw Husimi Map

# 处理过的 Husimi 图



(a)  $n = 188$



(b)  $n = 196$

图: Processed Husimi Map

# 采样点

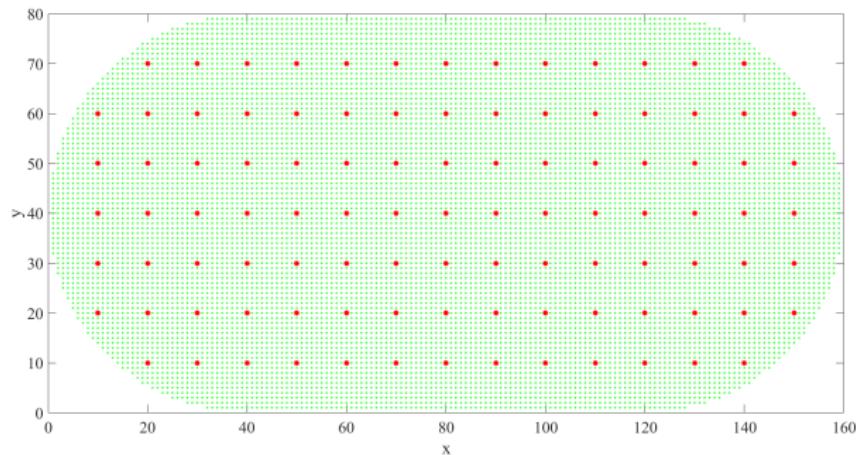


图: 红点: 采样点, 绿色: 格点

V型

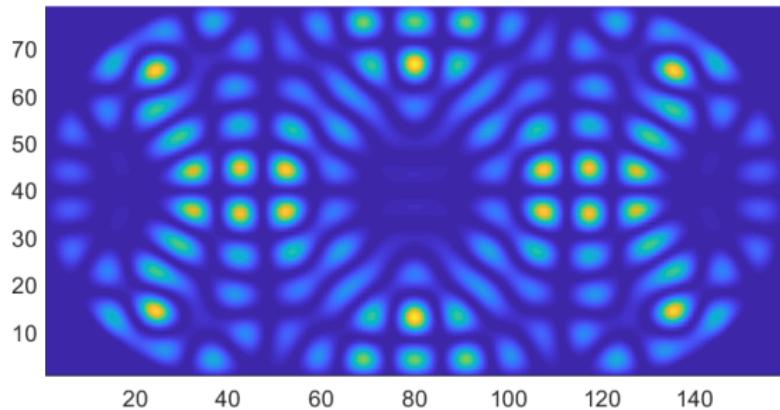


图: 波函数模方

V型

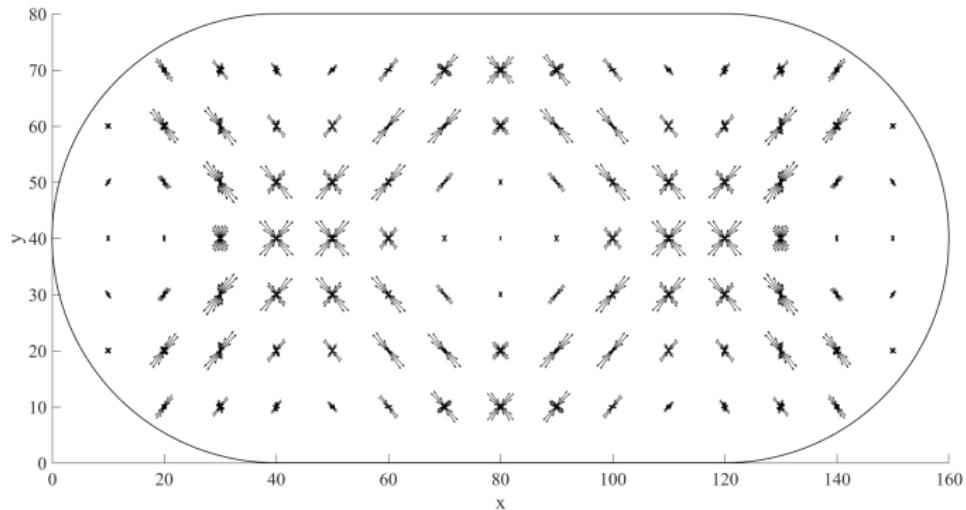


图: Raw Husimi Map

V型

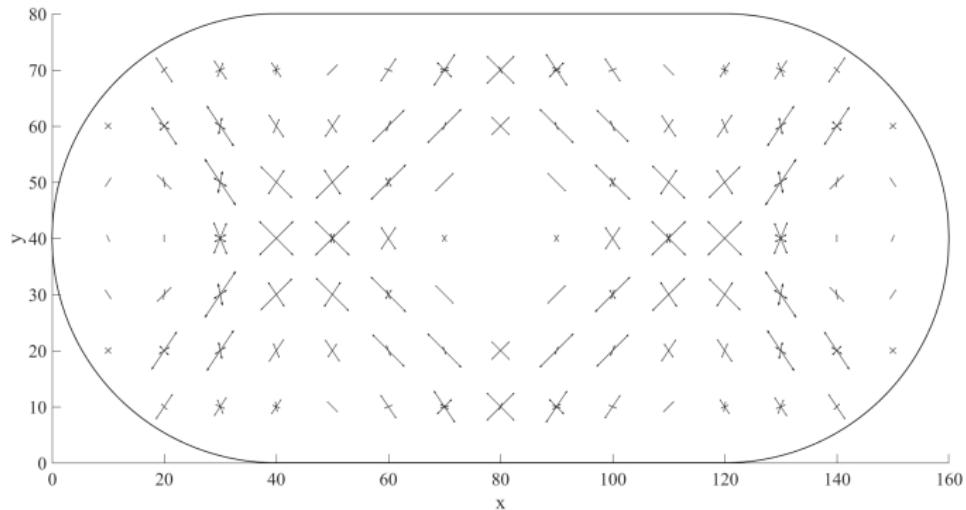


图: Processed Husimi Map

# 双三角型

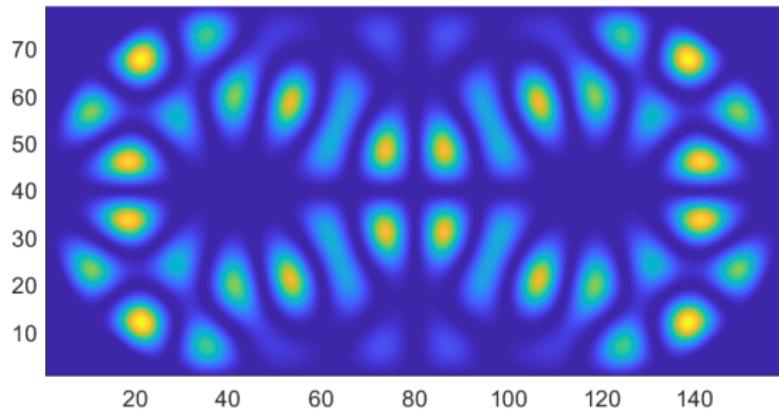


图: 波函数模方

# 双三角型

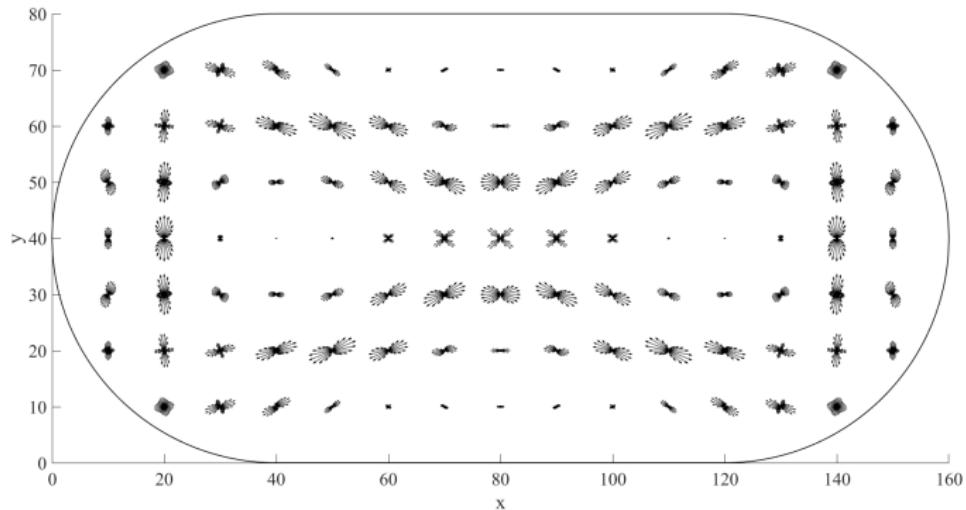


图: Raw Husimi Map

# 双三角型

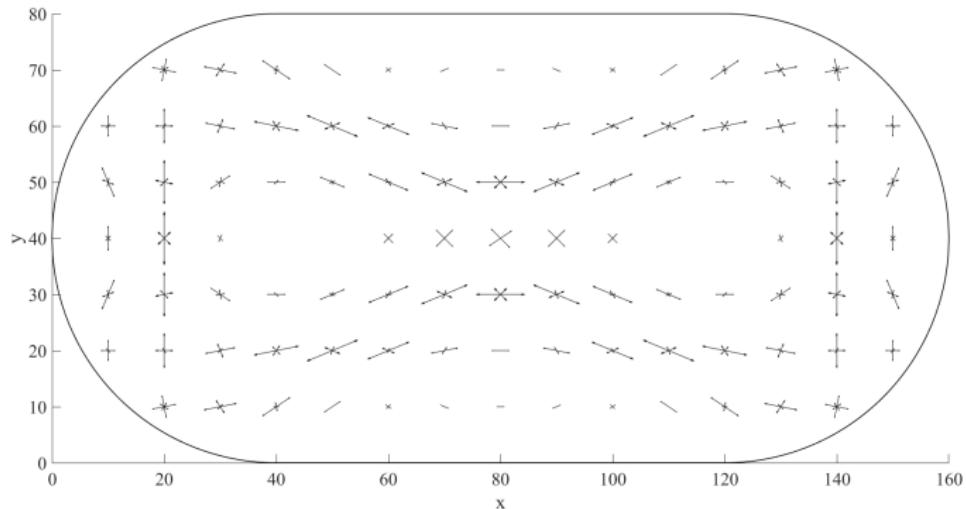


图: Processed Husimi Map

# 双菱形型

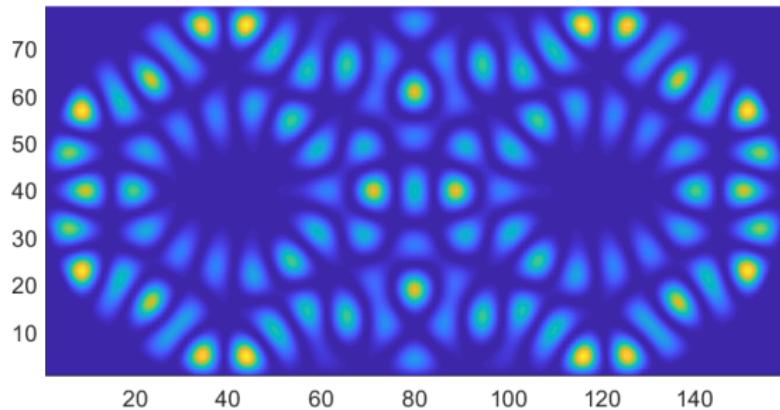


图: 波函数模方

# 双菱形型

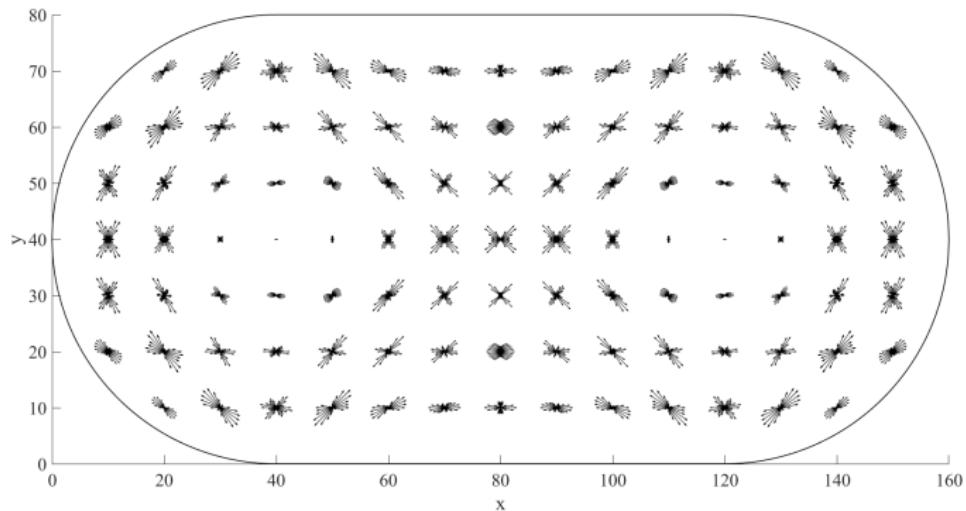


图: Raw Husimi Map

# 双菱形型

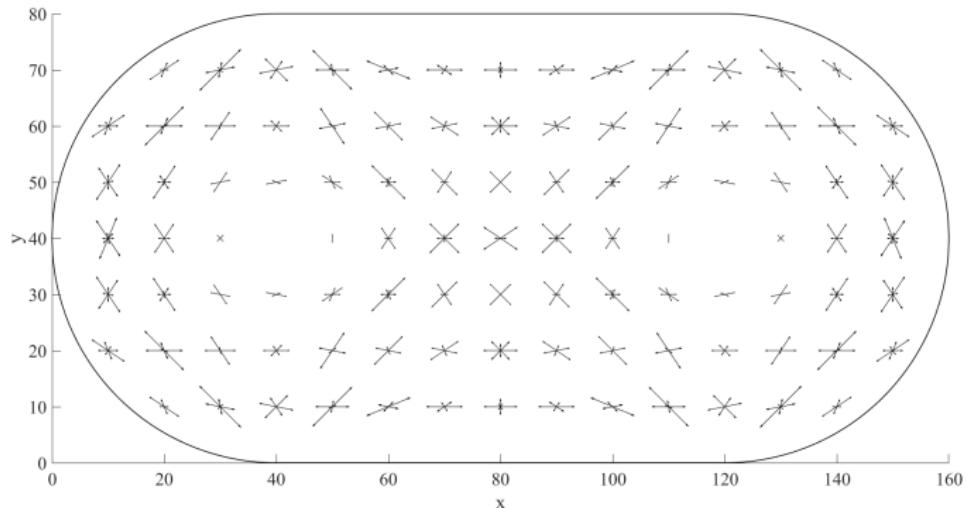


图: Processed Husimi Map

# 源代码

# 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.
-  Douglas J Mason, Mario F Borunda, and Eric J Heller.  
Revealing the flux: Using processed husimi maps to visualize dynamics  
of bound systems and mesoscopic transport.  
*Physical Review B*, 91(16):165405, 2015.

致谢

谢谢