

Husimi 图

郝泓霖

2022 年 3 月 23 日

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

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

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

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

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

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

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。

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

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 σ

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

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）

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

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

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

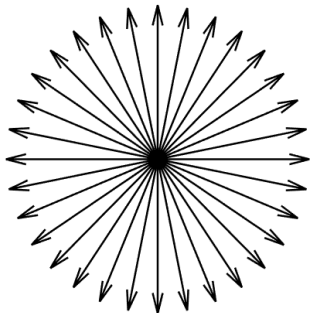
利用式 (17), 应用相干态定义一种波函数的测量值 (测试波包):

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

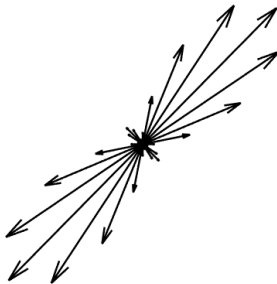
Husimi 矢量

Husimi 矢量：通过加权每一个用于测试的 \mathbf{k}_0 。

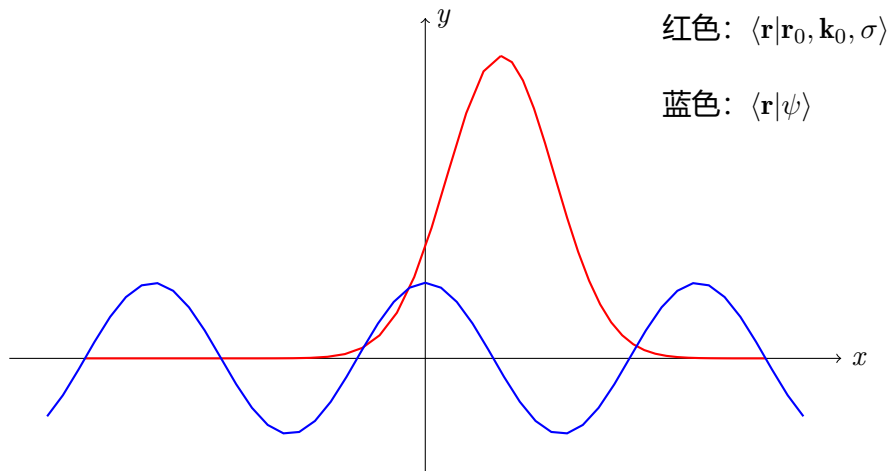
$$\text{Hu}(\mathbf{r}_0, \mathbf{k}_0, \sigma, \psi(\mathbf{r})) = \left| \int \psi^*(\mathbf{r}) N_\sigma^{d/2} e^{-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2}{4\sigma^2} + i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|^2$$



(a) 加权前 \mathbf{k}_0



(b) 加权后 \mathbf{k}_0



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。

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)

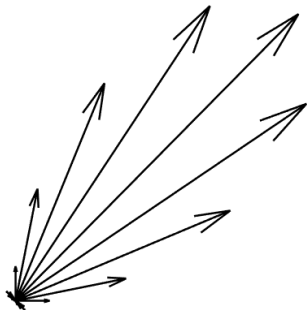
1. A set of Husimi templates on N wavevectors $\{\mathbf{k}_j\}$ is created for the wavefunctions $\Psi = e^{i\mathbf{k}_i^{\text{test}} \cdot \mathbf{r}}$ generated by the M wavevectors $\{\mathbf{k}_i^{\text{test}}\}$. Both sets of wavevectors lie along the dispersion contour. Each template can be 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

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

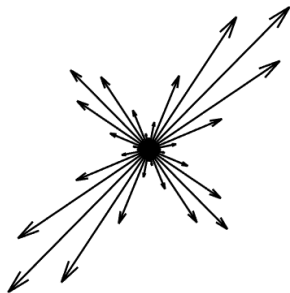
- 1: 用 M 个波矢 $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$ 生成测试平面波 $\psi = e^{i\mathbf{k}_i^{test} \cdot \mathbf{r}}$, 将每个测试平面波用 N 个测试波矢 $\{\mathbf{k}_j\}$ (非测试平面波的波矢) 生成模板集合的成员。两组波矢 $\{\mathbf{k}_i^{test}\}$ 和 $\{\mathbf{k}_j\}$ 都位于色散等值线上。每个模板 (个数为 M) 存储的值为 \mathbf{u}_i , \mathbf{u}_i 的每一个成员对应于 Husimi 函数 (式18) 值;
- 2: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

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。

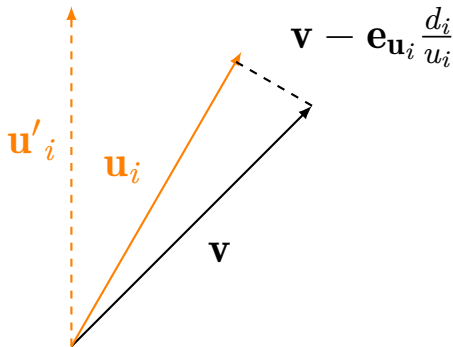


(c) $\psi^{test} = e^{i\mathbf{k}_i^{test} \cdot \mathbf{r}}$



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

MMA 的思想 II

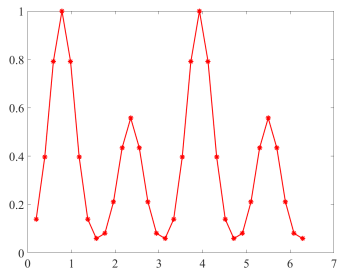


寻找 d_i 最大值

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

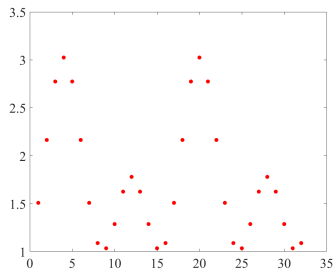
其中 $|\mathbf{v}| = 1, |\mathbf{u}_i| = 1$

MMA 的实际操作 I



(e) 处理前 \mathbf{v}

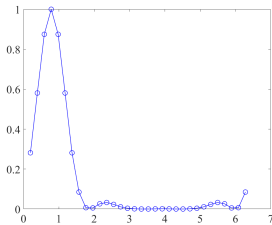
$$d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$$



(f) $\{d_i\}$

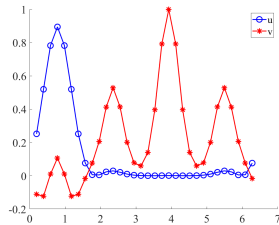
MMA 的实际操作 II

$\max d_i$
 \Rightarrow



(g) $\max d_i$ 对于的 u_i

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



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

- $d_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_i$
- $\text{find } \max\{d_i\}$
- $\max\{d_i\}$, \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

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

文中 [2] 的图 2

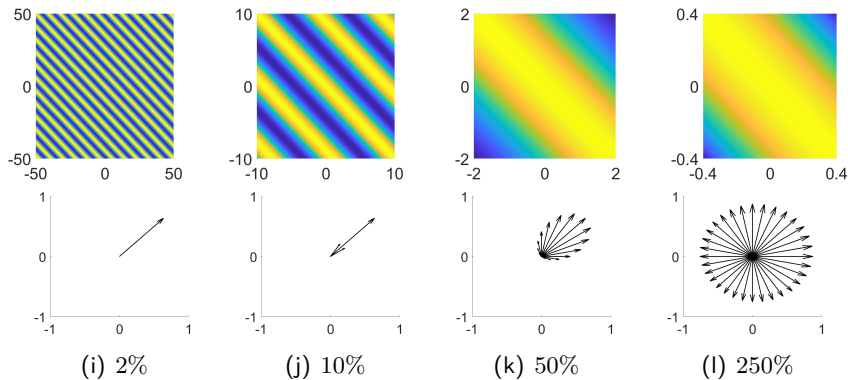


图: $\psi_A(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, 小图 $\Delta k/k$

文中 [2] 的图 2

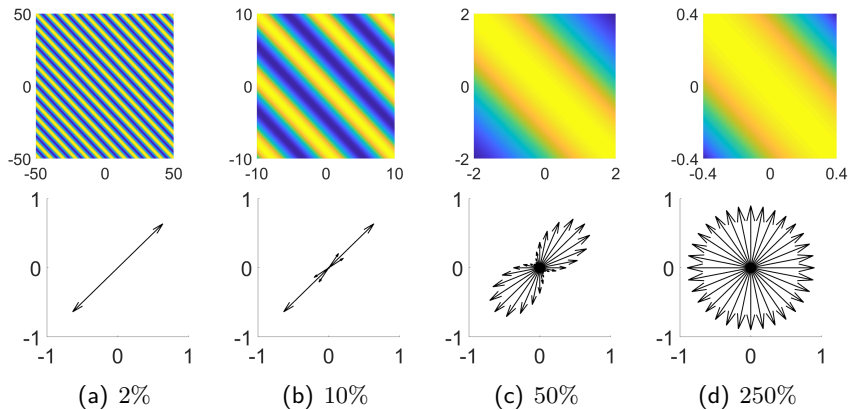
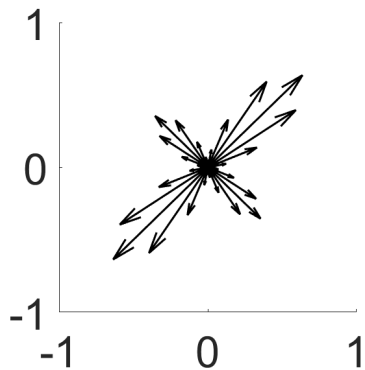
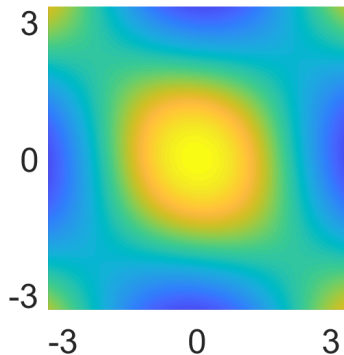


图: $\psi_B(\mathbf{r}) = \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, 小图 $\Delta k/k$

文中 [2] 的图 3



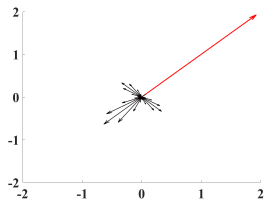
(a) $\Delta k/k = 30\%$ 时的 Husimi 图



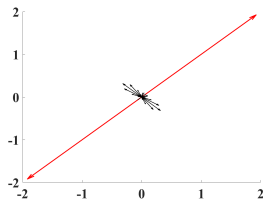
(b) $\Psi_C = \alpha \cos(\mathbf{i}\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \beta \cos(\mathbf{i}\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$

图: Husimi 图

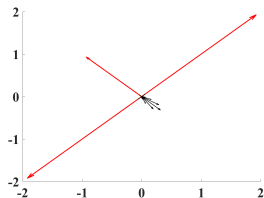
利用 MMA 算法处理过的 ψ_c



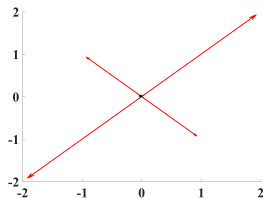
(a)



(b)



(c)



(d)



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.

谢谢