



AGH

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Praca doktorska

Damian Kołaczek

Dynamika stanów kwantowych w przestrzeni
fazowej

Promotorzy: dr hab. inż. Bartłomiej Spisak, prof. AGH

dr hab. Michał Wojtylak, prof. UJ
WMiI UJ, Kraków

Kraków, 2022

Oświadczenie autora rozprawy:

Oświadczam, świadomy(-a) odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę doktorską wykonałem(-am) osobiście i samodzielnie i że nie korzystałem(-am) ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

data, podpis autora

Oświadczenie promotora rozprawy:

Niniejsza rozprawa jest gotowa do oceny przez recenzentów.

data, podpis promotora rozprawy

Pragnę bardzo serdecznie podziękować moim promotorem – dr. hab. inż. Bartłomiejowi Spisakowi oraz dr. hab. Michałowi Wojtylakowi za opiekę naukową, poświęcony czas, okazane wsparcie oraz wyrozumiałość przez cały okres studiów doktoranckich.

Niniejsza rozprawa doktorska została wykonana w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój, nr projektu POWR.03.02.00-00-I004/16, współfinansowanego ze środków Unii Europejskiej.

Spis treści

1	Wstęp	5
2	Elementy mechaniki kwantowej w przestrzeniach Hilberta	10
2.1	Schrödingerowska mechanika falowa	10
2.2	Operatory ograniczone, nieograniczone, klasy śladowej, sprzężenie operatora . .	12
2.3	Silnie ciągłe grupy i półgrupy operatorów i ich związek z równaniami ewolucyjnymi, problem Cauchy’ego	16
2.4	Sformułowanie mechaniki kwantowej przy użyciu funkcji falowych	18
2.5	Sformułowanie mechaniki kwantowej przy użyciu operatora gęstości	21
3	Elementy teorii kwantowej w ujęciu przestrzenno-fazowym	25
3.1	Problem kwantyzacji oraz operatory i symbole Weyla	25
3.2	Funkcja Wignera	28
3.3	Równanie Moyala	30
4	Numeryczne metody obliczania eksponenty operatorowej	34
4.1	Ogólne metody faktoryzacji eksponenty operatorowej	34
4.2	Faktoryzacje drugiego rzędu	35
4.3	Oszacowanie błędu lokalnego faktoryzacji drugiego rzędu – ujęcie abstrakcyjne .	36
4.4	Oszacowanie błędu lokalnego i globalnego faktoryzacji drugiego rzędu dla równania Moyala	41
4.5	Faktoryzacja czwartego rzędu	58
4.6	Dyskretyzacja transformaty Fouriera	59
5	Dynamika stanów kwantowych w przestrzeni fazowej. Wyniki symulacji	64
5.1	Warunek początkowy i rozpatrywane profile energii potencjalnej	64
5.2	Dynamika funkcji Wignera dla stanu koherentnego	64
5.3	Dynamika funkcji Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera	70
5.4	Lokalizacja w przestrzeni fazowej poprzez entropową zasadę nieokreśloności . . .	83
5.5	Reżim odbicia nad barierą oraz prawdopodobieństwo transmisji zdefektowanego stanu kota Schrödingera	84
6	Podsumowanie	90
7	Dodatek: pojęcia matematyczne	92
7.1	Przestrzeń Banacha oraz Hilberta	92
7.2	Przestrzeń $L^p(\mathbb{R}^n)$	92
7.3	Iloczyn tensorowy	93
7.4	Przestrzeń Schwartza oraz przestrzeń dystrybucji temperowanych	93
7.5	Przestrzeń Sobolewa	94
7.6	Transformata Fouriera	94
	Bibliografia	96

1 Wstęp

Opis teoretyczny zjawisk fizycznych wymaga sformułowania odpowiednich modeli matematycznych, a z kolei ich przydatność jest zwyczajowo weryfikowana w oparciu o logicznie spójną interpretację wyników eksperymentalnych. Podobnie było również z teorią kwantową. Powstała ona na gruncie niepowodzeń w zastosowaniu teorii klasycznych do opisu zjawisk fizycznych zachodzących w mikroskali.

Do początku XX wieku panowało dość powszechne przekonanie, że modele układów mechanicznych oraz polowych w pełni opisują świat zjawisk zachodzących w skali makroskopowej, a występujące trudności mają co najwyżej charakter przejściowy i zazwyczaj wynikają one, np. z braku odpowiednich narzędzi matematycznych umożliwiających dokładne rozwiązanie postawionego problemu. Stąd też, badania nad modelami matematycznymi zjawisk fizycznych dość często stawały się inspiracją dla wypracowania metod rachunkowych umożliwiających rozwiązywanie praktycznych problemów.

W fizyce sytuacja zaczęła dramatycznie się zmieniać wraz z rozwojem metod doświadczalnych i ich możliwości, bowiem badania eksperymentalne zaczęły obejmować zjawiska zachodzące w coraz to mniejszych skalach przestrzennych i czasowych, a modele matematyczne wypracowane na potrzeby opisu zjawisk makroskopowych nie potrafiły wytłumaczyć w zadowalający sposób obserwowalnych wyników eksperymentalnych. Te niepowodzenia miały charakter bardziej fundamentalny niż początkowo się wydawało, gdyż okazało się, że zjawiska zachodzące w mikroskali wymagają bardziej wyrafinowanego modelu matematycznego opartego na zupełnie nowych koncepcjach, obcych dotychczasowej fizyce klasycznej. W ten sposób narodziła się teoria kwantowa.

W ogólności, teoria kwantowa może być sformułowana na wiele sposobów, przegląd niektórych z nich został przedstawiony w pracy [1], przy czym należy zauważyć, że niektóre sformułowania tam podane częściowo przekrywają się ze sobą. Historycznie pierwsze, nie licząc tzw. „starszej” teorii kwantów [2], było sformułowanie macierzowe Heisenberga [3], w którym wielkościom dynamicznym są przypisane macierze (niekiedy nieskończonego rozmiaru), a stan układu jest reprezentowany przez wektor kolumnowy. Kolejnym sformulowaniem jest obecnie najpowszechniej stosowane ujęcie falowe. W tym przypadku stan układu jest reprezentowany przez funkcję falową, a wielkościom dynamicznym odpowiadają operatory samosprężone działające w przestrzeni Hilberta funkcji całkownych z kwadratem. W ramach tego sformułowania możliwe są różne reprezentacje, przy czym dwie najczęściej używane to odpowiednio reprezentacja położeniowa oraz pędowa. W zależności od przyjętej reprezentacji, danej wielkości dynamicznej odpowiadają operatory samosprężone o różnych postaciach. Następnym sformulowaniem teorii kwantowej jest sformułowanie Feynmana przy użyciu całek po trajektoriach [4]. W ramach tej teorii uwaga jest skupiona nie tyle na samym stanie kwantowym, co na prawdopodobieństwie przejścia między dwoma stanami. Mocno uproszczona idea wyznaczenia amplitudy prawdopodobieństwa tego przejścia jest następująca, rozważane są wszystkie możliwe trajektorie przejścia ze stanu początkowego do końcowego i wyznaczane jest dla nich klasyczne działanie S , następnie każdej trajektorii przypisywana jest amplituda proporcjonalna do $\exp(iS/\hbar)$, w końcu amplitudy te są sumowane po wszystkich trajektoriach. Całki Feynmana po trajektoriach stały się też podstawowym narzędziem kwantowej teorii pola. Kolejnym sformulowaniem teorii kwantów jest ujęcie przy pomocy operatora gęstości [5]. Może ono być postrzegane jako przykład uogólnienia ujęcia falowego i w ramach tego podejścia można wprowadzić pojęcie stanów mieszanych. Dzięki takiemu podejściu możliwe staje się również modelowanie układów otwartych [6, 7, 8]. Następnym sformulowaniem jest ujęcie przestrzenno-fazowe, na którym to najmocniej skupiona zostanie uwaga w tej pracy. W ramach tego sformułowania stanom układu przypisujemy funkcje na przestrzeni fazowej, które posiadają pewne własności funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Należy to rozumieć w ten sposób, że taka funkcja nie może naraz spełniać

wszystkich własności charakterystycznych dla funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Wielkościom dynamicznym również przypisujemy pewne funkcje na przestrzeni fazowej, przy czym tworzą one nieprzemianą algebrę ze względu na iloczyn takich funkcji na przestrzeni fazowej. Należy przy tym zaznaczyć, że ujęcie przestrzenno-fazowe teorii kwantowej charakteryzuje się pewną niejednoznacznością wynikającą bezpośrednio z problemu uprządkowania operatorów odpowiadających temu samemu wyrażeniu klasycznemu. W ramach sformułowania przestrzenno-fazowego do opisu stanu układu najpowszechniej stosowana jest funkcja Wignera i to właśnie jej poświęcimy najwięcej uwagi w niniejszej pracy. Warto też zauważyć, że w ramach omawianego ujęcia można uwzględnić zarówno stany czyste, jak i mieszane. Co więcej, stosunkowo prosto można też uogólnić to podejście na przypadek układów otwartych bądź też układów hybrydowych [9, 10, 11]. Kolejnym sformułowaniem mechaniki kwantowej jest tak zwany formalizm drugiej kwantyzacji [12, 13]. Pierwotnie został on opracowany na potrzeby kwantowej teorii pola, jednak można go również zastosować do nierelatywistycznej mechaniki kwantowej układów wielocząstkowych. Istnieje także sformułowanie wariacyjne mechaniki kwantowej. Jego opracowanie było motywowane wariacyjnym podejściem do mechaniki klasycznej [14]. Niemniej jednak w tym sformułowaniu obiektem, w którym jest zawarta informacja o stanie układu, wciąż pozostaje funkcja falowa. Oprócz wyżej wymienionych sformułowań można także spotkać się z innymi, np. sformułowaniem fali pilotującej de Broglie-Bohma [15, 16], które jest związane z alternatywną do kopenhaskiej interpretacją mechaniki kwantowej zwaną interpretacją Bohma. Sformułowanie de Broglie-Bohma jest deterministyczne oraz jawnie nielokalne, stan układu jest opisywany zarówno poprzez punkt w przestrzeni konfiguracyjnej (jak ma to miejsce w mechanice klasycznej) jak i poprzez funkcję falową zwaną falą pilotującą, która to wraz z klasycznym potencjałem determinuje ewolucję czasową układu. Co ciekawe, niedawno zostało pokazane [17], że funkcja Wignera stanowi pomost łączący mechanikę de Broglie-Bohma z mechaniką falową. Dzięki temu odkryciu dodatkowe postulaty, których używano dotychczas, by powiązać oba sformułowania teorii kwantów, okazały się niepotrzebne. Oprócz wspomnianego wyżej sformułowania można także spotkać się ze sformułowaniem hydrodynamicznym zwanym też sformułowaniem Hamiltona-Jacobiego. Podobnie jak sformułowanie wariacyjne było ono inspirowane metodami wypracowanymi na potrzeby mechaniki klasycznej [18]. Niezależnie od wymienionych wyżej różnych sformułowań teorii kwantowej można także natknąć się na sformułowanie holomorficzne [19, 20, 21]. W takim podejściu stany są reprezentowane przez funkcje holomorficzne będące elementami przestrzeni Segala-Bargmanna rozumianej jako przestrzeń stanów. Wreszcie, istnieje też abstrakcyjne ujęcie mechaniki kwantowej oparte na użyciu C^* -algebr [22, 23]. Podejście to można stosować zarówno w przypadku stanów czystych, jak i mieszanych, a biorąc pod uwagę konkretne reprezentacje tych C^* -algebr można odtworzyć chociażby ujęcie falowe w reprezentacji położeniowej bądź pędowej.

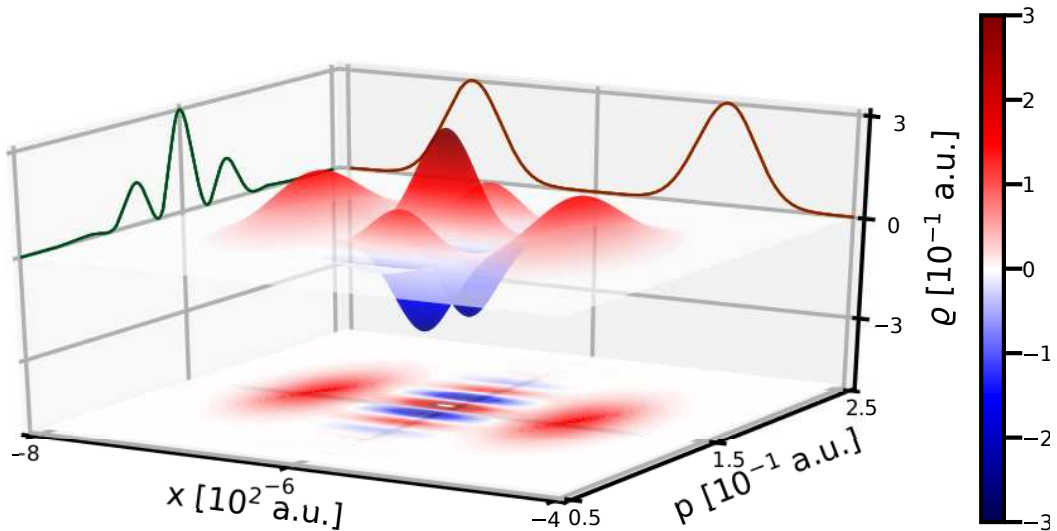
Historia powstawania ujęcia przestrzenno-fazowego teorii kwantowej została przedstawiona w książce [24]. Ujęcie to zostało wprowadzone przez E. Wignera przy okazji poszukiwania poprawek kwantowych dla układów znajdujących się w równowadze termodynamicznej [25]. Wigner opisał stan układu kwantowego poprzez funkcję określoną na przestrzeni fazowej, która pozornie odgrywała rolę funkcji rozkładu. Niemniej jednak przy bliższej analizie własności tej funkcji, zauważył, że może ona przyjmować w pewnych obszarach przestrzeni fazowej ujemne wartości, co dyskwalifikowało ją jako klasycznie rozumianą funkcję rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Dzisiaj ta funkcja jest nazywana funkcją Wignera i jest jedną z możliwych funkcji określanych mianem funkcji rozkładu quasi-prawdopodobieństwa [26]. We wspomnianej już pracy [25], autor także wyprowadza równanie ewolucji czasowej dla funkcji Wignera w postaci równania różniczkowo-całkowego. Należy jednak zauważyć, że takie podejście zostało poprzedzone pracą matematyczną H. Weyla [27] dotyczącą przypisania operatorom kwantowo-mechanicznym funkcji określonych na przestrzeni fazowej oraz pracą J. von Neumanna [28] w której wprowadził on \star -iloczyn zadany poprzez transformatę Fouriera dla funkcji określonej

na przestrzeni fazowej oraz pokazał, że istnieje izomorfizm pomiędzy iloczynem operatorów kwantowo-mechanicznych, a \star -iloczynem odpowiadających im (na podstawie pracy [27]) funkcji na przestrzeni fazowej [24]. Duży wkład w opracowanie tej teorii mieli również H. Groenewold [29], który pokazał, że procedura Weyla przypisania operatorom kwantowo-mechanicznym funkcji na przestrzeni fazowej jest odwracalna i tak samo można funkcjom na przestrzeni fazowej przypisać odpowiednie operatory. Należy też podkreślić, że Groenewold rozwinął także teorię \star -iloczynu. Oprócz wymienionych wyżej, istotny wkład do przestrzenno-fazowego ujęcia teorii kwantowej wniósł J. Moyal [30]. Mianowicie, dokonał on syntezy wyników dotyczących tego sformułowania. Przedstawił to podejście jako alternatywne, niezależne sformułowanie teorii kwantowej, jak również zajął się problemem wyznaczania wartości oczekiwanych obserwabli w ramach tego formalizmu, interpretacją ujemnych wartości funkcji Wignera i powiązał je z zasadą nieokreśloności. Ponadto, Moyal przedstawił także problem ewolucji czasowej funkcji Wignera wyrażoną poprzez deformację nawiasu Poissona znanego z hamiltonowskiego ujęcia mechaniki klasycznej. Dzięki temu, przestrzenno-fazowe ujęcie teorii kwantowej upodobniło się do mechaniki statystycznej z tą jednak różnicą, że zmienne dynamiczne (obserwable) są elementami algebry nieprzemiennej ze względu na działanie \star -iloczynu.

W wignerowskim sformułowaniu teorii kwantów, stan czysty układu kwantowego jest reprezentowany przez funkcję rzeczywistą określoną na przestrzeni fazowej zgodnie ze wzorem [25]

$$\varrho(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} \psi\left(x + \frac{y}{2}\right) \psi^*\left(x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{ipy}{\hbar}} dy, \quad (1)$$

gdzie $\psi(\cdot)$ jest funkcją falową. To właśnie funkcja określona tym wzorem jest nazywana obecnie funkcją Wignera. Charakteryzuje się tym, że ma dobrze zdefiniowane rozkłady brzegowe, a także jest ograniczona. Jednakże jej najbardziej wyróżniającą się cechą jest to, że może ona przyjmować ujemne wartości w niektórych obszarach przestrzeni fazowej, co już zostało zaobserwowane przez Wignera w oryginalnej pracy. Przykładowy wykres funkcji Wignera znajduje się na rysunku 1. Przedstawiona tam funkcja Wignera odpowiada tak zwanemu stanowi kota Schrödingera [31, 32]. Z rysunku wynika, że funkcja Wignera przyjmuje w pewnych obszarach ujemne wartości, natomiast rozkłady brzegowe pędów i położenia są nieujemne. Przytoczony przykład jasno pokazuje dlaczego nie można traktować funkcji Wignera jako pełnoprawnej funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa na przestrzeni fazowej.



Rysunek 1: Funkcja Wignera odpowiadająca stanowi kota Schrödingera wraz z rozkładami brzegowymi w przestrzeni położeniowej i pędowej.

Współcześnie ujęcie przestrzenno-fazowe znalazło rozliczne zastosowania w różnych działach fizyki. Okazało się bardzo użyteczne do opisu procesów transportu kwantowego, które są istotne z punktu widzenia fizyki jądrowej i fizyki cząstek elementarnych [33], fizyki materii skondensowanej [34], optyki kwantowej [35], badania granicy półklasycznej układów mezoskopowych [36], czy przejścia do klasycznej mechaniki statystycznej [37]. Ujęcie to znalazło też zastosowanie przy badaniu dekoherencji i chaosu kwantowego [38, 39], co jest istotne z punktu widzenia obliczeń kwantowych [40]. Ponadto narzędzia opracowane na potrzeby ujęcia przestrzenno-fazowego znalazły liczne zastosowania w analizie czasowo-częstotliwościowej sygnałów z uwagi na analogiczną strukturę matematyczną (np. przejście między czasową i częstotliwościową reprezentacją sygnału odbywa się za pomocą transformaty Fouriera, analogicznie jak przejście między położeniową i pędową reprezentacją funkcji falowej, można skonstruować analogiczną czasowo-częstotliwościową zasadę nieokreśloności dla sygnałów.) Ujęcie przestrzenno-fazowe teorii kwantów stanowiło również inspirację do rozwoju teorii matematycznych, jak np. geometria nieprzemiana [41] czy teoria deformacji [42, 43, 44, 45, 46].

Przewodnym motywem pracy jest zbadanie dynamiki izolowanych układów kwantowych w oparciu o numeryczne rozwiązanie równania Moyala dla funkcji Wignera, wykorzystując do tego celu algorytm oparty na metodzie typu split-operator [39, 47]. Należy zauważyć, że równanie ewolucyjne funkcji Wignera pierwotnie zostało sformułowane w postaci równania różniczkowo-całkowego [25]. Okazało się jednak, że numeryczne podejście tego równania jest niezmiernie czasochłonne i napotyka na szereg ograniczeń wynikających nie tylko z stosowanych algorytmów, ale również i możliwości obliczeniowych współczesnych komputerów. Alternatywnie, równanie ewolucyjne dla funkcji Wignera może być wyrażone w różniczkowej postaci Moyala, która przejawia istotne zalety w kwestii złożoności obliczeniowej, co umożliwia symulowanie bardziej realistycznych układów kwantowych. Dla tak zapisanego równania ewolucji czasowej w naturalny sposób nasuwa się metoda split-operator, która cechuje się wyraźnie mniejszą złożonością obliczeniową. Pierwotnie, metoda ta została zaproponowana w pracy [48] do rozwiązywania zależnego od czasu równania Schrödingera, a następnie została ona zaadaptowana do badania klasycznych układów dynamicznych w przestrzeni fazowej [49]. Możliwości tej metody zostały także zweryfikowane pod kątem jej przydatności do rozwiązywania problemów dynamicznych dla układów kwantowych w przestrzeni fazowej [50, 39]. Obecnie stosowane są różne warianty tej metody do analizy kwantowo-mechanicznych problemów dynamicznych w ujęciu przestrzenno-fazowym. Do tych wariantów możemy zaliczyć m.in. metodę Stranga drugiego rzędu [51], czy metodę China czwartego rzędu [52]. Istnieją również inne realizacje tej metody ale ich użycie cechuje się mniejszą efektywnością obliczeniową [53]. W przypadku większości prac dotyczących metody split-operator nie wykonuje się dokładnego szacowania błędu, a jedynie wykazuje się jak ten błąd się skaluje w funkcji kroku czasowego. Jednym z wyjątków jest praca [54], gdzie przeprowadzono taką analizę dla równania Schrödingera i metody pierwszego rzędu oraz szkic takiej analizy dla metody drugiego rzędu. Z uwagi na to, że w literaturze przedmiotu nie ma przeprowadzonej analizy dla metody split-operator drugiego rzędu w odniesieniu do równania Moyala, podjęto się próby przeanalizowania tego problemu z wykorzystaniem aparatu matematycznego teorii operatorów. W związku z tym jednym z głównych celów pracy stało się przeprowadzenie analizy algorytmów numerycznych opartych na metodzie split-operator drugiego rzędu do rozwiązywania równania Moyala pod kątem ich dokładności. Natomiast, drugim głównym celem pracy jest zastosowanie analizowanego algorytmu do zbadania dynamiki funkcji Wignera odpowiadającej zdeformowanemu stanowi kota Schrödingera w przestrzeni fazowej, która jest generowana przez równanie Moyala. Na przedstawione wyżej cele główne składają się cele szczegółowe, zrealizowane w trakcie badań, których wyniki są przedstawione w poszczególnych rozdziałach pracy.

Struktura niniejszej pracy jest następująca, w rozdziale 2 jest przedstawione krótkie omówienie nierelatywistycznej mechaniki kwantowej w ramach sformułowania opierającego się na

funkcji falowej oraz na operatorze gęstości. Jeden z podrozdziałów w całości poświęciliśmy wprowadzeniu niezbędnych struktur matematycznych. W rozdziale 3 przedstawiono elementy przestrzenno-fazowe sformułowania mechaniki kwantowej bazujące na funkcji Wignera oraz niezbędne do tego elementy teorii operatorów pseudoróżniczkowych. Rozdział 4 został poświęcony przedstawieniu metody numerycznej używanej w niniejszej pracy. W tej części są omawiane różne schematy faktoryzacji operatora ewolucji czasowej zgodnie z metodą spectral split-operator oraz ich błędy, a także schemat dyskretyzacji przestrzeni fazowej. W rozdziale 5 zostały przedstawione wyniki badań nad dynamiką stanów koherentnych oraz zdefektowanych stanów kota Schrödingera w oparciu o numeryczne rozwiązanie równania Moyala. Na podstawie tych symulacji zostały wyznaczone podstawowe charakterystyki dynamiczne dla wybranych układów izolowanych. Niniejsza praca została też uzupełniona o dodatek matematyczny, gdzie umieszczone zostały krótkie informacje na temat wykorzystywanych struktur matematycznych i które nie znalazły się w głównym tekście pracy, by nie zaburzać jego czytelności.

Oryginalne osiągnięcia autora zamieszczone w tej pracy wynikają bezpośrednio ze zrealizowania nakreślonych celów szczegółowych, do których należy zaliczyć:

1. Analiza błędu wartości oczekiwanej energii całkowitej w czasie symulacji dynamiki gaussowskiego pakietu falowego potencjałach wiążących, dla których istniały rozwiązania analityczne. W ramach tej analizy porównano metodę Stranga drugiego rzędu oraz metodę China czwartego rzędu. Wyniki tych badań są przedstawione w podrozdziale 5.1, a niezależnie od tego zostały opublikowane w pracach [47, 55].
2. Wyprowadzenie jawnej postaci na funkcję Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera i analiza wpływu parametrów takiego stanu na jego własności. Wyniki tych badań są przedstawione w podrozdziale 5.3.
3. Scharakteryzowanie dynamicznych własności zdefektowanego stanu kota Schrödingera przy pomocy parametru nieklasyczności, entropowej zasady nieokreśloności. Wyniki tych badań są przedstawione w podrozdziale 5.3, a niezależnie od tego zostały opublikowane w pracy [56].
4. Wyznaczenie prawdopodobieństwa transmisji przez barierę gaussowską zdefektowanego stanu kota Schrödingera w funkcji jego parametrów. Wyniki tych badań zostały przedstawione w podrozdziale 5.5.

2 Elementy mechaniki kwantowej w przestrzeniach Hilberta

2.1 Schrödingerowska mechanika falowa

Przedstawiony w tym podrozdziale ogólny zarys teorii kwantów w ujęciu schrödingerowskim jest daleki od ścisłości, ale wprowadza pewne koncepcje oraz aparat pojęciowy niezbędny do opisu zjawisk fizycznych zachodzących w skali atomowej. Nadanie formalnej struktury matematycznej wprowadzonym pojęciom będzie przedmiotem kolejnych podrozdziałów.

W nierelatywistycznej mechanice falowej stan izolowanego układu kwantowo-mechanicznego jest reprezentowany przez funkcję falową $\psi(x)$, która zgodnie z interpretacją kopenhaską opisuje falę prawdopodobieństwa [2]. Funkcja ta jest jednoznaczna, może przyjmować wartości zespolone, a kwadrat jej modułu,

$$n(x) = |\psi(x)|^2, \quad (2)$$

jest interpretowany jako funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w położeniu x . Zgodnie z tą interpretacją można wnioskować, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przedziale $I = [x_1, x_2]$, przy czym $I \subset \mathbb{R}$, wynosi

$$P_I = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx. \quad (3)$$

Z drugiej strony, skoro prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przedziale I wynosi P_I , to prawdopodobieństwo znalezienia jej gdziekolwiek w przestrzeni \mathbb{R} powinno wynosić 1. Wobec tego należy oczekiwać, że dla funkcji falowej $\psi(x)$ powinna zachodzić własność

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad (4)$$

która jest traktowana jako warunek normalizacyjny dla tej funkcji w przestrzeni \mathbb{R} . Warto też zaznaczyć, że choć funkcja falowa nie jest wielkością bezpośrednio mierzalną, to jednak dzięki niej mogą być wyznaczone wartości oczekiwane zmiennych dynamicznych charakteryzujących badany układ kwantowo-mechaniczny. W nierelatywistycznej mechanice falowej przyjmuje się, że wartość oczekiwana zmiennej dynamicznej O w stanie opisanym funkcją falową $\psi(x)$ jest wyrażona wzorem [2]

$$\langle \hat{O} \rangle_{\psi} = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \hat{O} \psi(x) dx, \quad (5)$$

gdzie \hat{O} jest operatorem samosprężonym odpowiadającym rozpatrywanej zmiennej dynamicznej O .

W schrödingerowskim opisie układów kwantowo-mechanicznych fundamentalną rolę pełnią operatory położenia \hat{x} oraz pędu \hat{p} . Są one określone w następujący sposób [2]

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad (6)$$

oraz

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x), \quad (7)$$

przy czym spełniają one tzw. kanoniczną relację komutacji

$$[\hat{x}, \hat{p}] \psi(x) = i\hbar \psi(x), \quad (8)$$

co oznacza, że tworzą one parę operatorów nieprzemiennych. Bezpośrednią konsekwencją nieprzemienności tych operatorów jest stwierdzenie, że położenie i pęd cząstki nie mogą zostać

jednocześnie dokładnie wyznaczone i nie jest to kwestia precyzji aparatury pomiarowej, tylko fundamentalnego ograniczenia zawartego w samej naturze. Powyższe stwierdzenie urasta do rangi jednej z fundamentalnych zasad fizyki kwantowej, które jest znane jako zasada nieokreśloności. Zgodnie z nią iloczyn nieokreśloności jednoczesnego wyznaczenia pędu i położenia jest ograniczony z dołu przez stałą równą $(\hbar/2)^2$, co można zapisać w postaci następującej nierówności

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (9)$$

gdzie σ_x^2 jest wariancją położenia w stanie opisanym funkcją falową ψ ,

$$\sigma_x^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{x} \rangle_\psi^2, \quad (10)$$

a z kolei σ_p^2 jest wariancją pędu w tym samym stanie,

$$\sigma_p^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle_\psi - \langle \hat{p} \rangle_\psi^2. \quad (11)$$

Uprzywilejowana rola operatorów położenia i pędu w opisie izolowanych układów kwantowo-mechanicznych wynika także stąd, że mogą one posłużyć do skonstruowania bardziej złożonych operatorów samosprzężonych w postaci

$$\hat{O} = O(\hat{x}, \hat{p}) \quad (12)$$

które odpowiadają innym zmiennym dynamicznym. Z punktu widzenia badań nad układami fizycznymi, szczególnie ważnym przykładem operatora w postaci (12) jest hamiltonian stanowiący podstawową charakterystykę układu mechanicznego. Jest on bowiem interpretowany jako operator całkowitej energii dla układu izolowanego,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (13)$$

gdzie $V(x)$ jest operatorem energii potencjalnej. Równanie własne dla hamiltonianu (13)

$$\hat{H}\phi_n(x) = E_n\phi_n(x), \quad (14)$$

jest nazywane niezależnym od czasu równaniem Schrödingera. Przy ustalonym warunku brzegowym, adekwatnym do natury rozważanego układu fizycznego, rozwiązaniem tego równania są energie własne E_n oraz odpowiadające im funkcje własne $\phi_n(x)$.

Równie ważnym aspektem prezentowanego podejścia jest badanie układów kwantowo-mechanicznych, które ewoluują w czasie. Wtedy w każdej chwili czasu t stan układu jest opisywany poprzez funkcję falową $\psi(x; t)$, a jej ewolucja czasowa jest zadana poprzez zależne od czasu równanie Schrödingera,

$$i\hbar\partial_t\psi(x; t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x; t) + V(x)\psi(x; t). \quad (15)$$

Równania (14) oraz (15) są podstawowymi równaniami mechaniki kwantowej w ujęciu schrödingerowskim. Pozwalają one na wyznaczenie stanów związanych i rozproszonych oraz badania dynamiki układów kwantowych.

W omówionym powyżej przedstawieniu mechaniki falowej, argumentem funkcji falowej jest zmienna położeniowa $x \in \mathbb{R}$. Wybór ten wydaje się dość intuicyjny i w zasadzie jest uwarunkowany historycznie pracami Schrödingera. Należy zauważyć bowiem, że argument funkcji

falowej może być równie dobrze wybrany w postaci zmiennej pędowej $p \in \mathbb{R}$. W takim przypadku funkcja falowa $\tilde{\psi}(p)$ opisuje amplitudę prawdopodobieństwa znalezienia cząstki z pędem p , przy czym warunek unormowania ma następującą postać

$$\int_{\mathbb{R}} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1. \quad (16)$$

Przejście między położeniową, a pędową reprezentacją funkcji falowej odbywa się poprzez transformatę Fouriera

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx, \quad (17)$$

natomiast przejście w przeciwną stronę odbywa się poprzez odwrotną transformatę Fouriera

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp. \quad (18)$$

Omówiona w tym podrozdziale mechanika falowa bazuje na pojęciu funkcji falowej. Pojęcie to odgrywa kluczową rolę w opisie stanu izolowanego układu kwantowo-mechanicznego dostarczając pełnej informacji o nim. Co więcej, funkcja falowa może być zapisana w jednej z dwóch omówionych tutaj reprezentacji, tj. położeniowej oraz pędowej. W ogólności, zmiana reprezentacji funkcji falowej nie pociąga za sobą zmiany informacji o układzie w niej zawartej, a jedynie jest podyktowana pewnym pragmatyzmem wynikającym z prowadzonej analizy rozpatrywanego układu izolowanego. Inną sprawą jest też pytanie o zasadność bezwzględnego stosowania funkcji falowej do opisu stanu izolowanego układu kwantowo-mechanicznego. W tym miejscu jedynie zwrócimy uwagę na fakt, że zdarzają się takie sytuacje w których opis układu kwantowo-mechanicznego przy użyciu funkcji falowej jest niewystarczający, a ominięcie tej trudności staje się możliwe dzięki zastosowaniu do opisu stanu układu macierzy gęstości, do czego powrócimy w podrozdziale 2.5. W ramach przedstawionego w tym podrozdziale ujęcia teorii kwantowej, bezprzedmiotowym staje się także koncepcja funkcji falowej zapisanej w reprezentacji mieszanej, tzn. położeniowo-pędowej, która nawiązywałaby do pojęcia zaczerpniętego z mechaniki statystycznej, tj. funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa określonej na przestrzeni fazowej wyznaczonej przez parę zmiennych sprzężonych kanonicznie jakimi są położenie i pęd. Takie ujęcie teorii kwantowej wydaje się być dość atrakcyjne bowiem narzuca ono pewną analogię do teorii statystycznej, a tym samym pozwala spojrzeć na granicę między teorią kwantową a klasyczną układów mechanicznych, w szczególności izolowanych. Sformułowaniem przestrzenno-fazowym teorii kwantowej zajmiemy się szerzej w rozdziale 3.

2.2 Operatory ograniczone, nieograniczone, klasy śladowej, sprzężenie operatora

W tym podrozdziale zostało przedstawionych kilka wybranych pojęć z teorii operatorów, wykorzystywanych w dalszej części rozprawy. Notacje przyjęto za pozycją [57], odsyłamy czytelnika również do [58, 59, 60]. W przytoczonych definicjach przyjęto założenie, że w przestrzeni Hilberta, \mathcal{H} , określonej nad ciałem liczb zespolonych (por. dodatek matematyczny 7.1), iloczyn skalarny jest liniowy względem drugiego argumentu, tzn.

$$\langle a\psi, b\varphi \rangle_{\mathcal{H}} = a^*b \langle \psi, \varphi \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (19)$$

dla dowolnych $a, b \in \mathbb{C}$ oraz $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$.

Definicja 2.1. Poprzez *operator w przestrzeni \mathcal{H}* rozumiemy odwzorowanie liniowe \hat{A} z pewnej podprzestrzeni $D(\hat{A})$ w przestrzeń \mathcal{H} . Zbiór $D(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H}$ nazywamy *dziedziną* tego operatora.

Operator \hat{A} jest nazywany *operatorem ograniczonym*, jeżeli istnieje stała $C \geq 0$ taka, że warunek

$$\|\hat{A}\psi\|_{\mathcal{H}} \leq C\|\psi\|_{\mathcal{H}} \quad (20)$$

jest spełniony dla wszystkich $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$. Najmniejszą stałą $C > 0$ spełniającą powyższe równanie nazywamy *normą* operatora \hat{A} i oznaczamy jako $\|\hat{A}\|$.

Przypomnijmy, że ograniczoność operatora jest równoważna jego ciągłości. Zatem, jeśli operator \hat{A} jest ograniczony na pewnej dziedzinie, gęstej w przestrzeni \mathcal{H} , to możemy go jednoznacznie rozszerzyć do operatora ograniczonego na całej przestrzeni \mathcal{H} . Zbiór wszystkich operatorów ograniczonych o dziedzinie równej \mathcal{H} oznaczamy jako $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Ważną klasę w niniejszej rozprawie stanowią operatory, dla których warunek ograniczoności nie zachodzi, nazwiemy je *operatorami nieograniczonymi*. Ponieważ operatora nieograniczonego nie możemy rozszerzyć na całą przestrzeń, musimy wypracować pewne pojęcia pozwalające na wyprowadzenie stosownych własności.

Definicja 2.2. Wykresem operatora liniowego \hat{A} na przestrzeni Hilberta \mathcal{H} jest nazywany zbiór

$$G(\hat{A}) = \{(\psi, \hat{A}\psi) : \psi \in \mathcal{D}(\hat{A})\} \subseteq \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}, \quad (21)$$

gdzie $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ oznacza sumę prostą przestrzeni Hilberta (ona również jest przestrzenią Hilberta). Jeżeli domknięcie wykresu $\overline{G(\hat{A})}$ jest również wykresem pewnego operatora, to operator \hat{A} nazywamy domykalnym i istnieje wtedy jedyny operator $\overline{\hat{A}}$ taki, że

$$G(\overline{\hat{A}}) = \overline{G(\hat{A})}. \quad (22)$$

Operator $\overline{\hat{A}}$ nazywamy *domknięciem* operatora \hat{A} . *Rdzeniem* operatora \hat{A} nazywany jest dowolny podzbiór jego dziedziny $X \subset \mathcal{D}(\hat{A})$ taki, że spełniony jest warunek

$$\overline{\hat{A} \upharpoonright X} = \hat{A}, \quad (23)$$

gdzie $\hat{A} \upharpoonright X$ oznacza zawężenie operatora \hat{A} do podzbioru dziedziny oznaczonego przez X .

Ważną klasę operatorów stanowią operatory symetryczne i samosprężone. W przypadku operatorów ograniczonych pojęcia te są równoważne, jednakże w przypadku operatorów nieograniczonych problem ten wymaga bardziej ostrożnej analizy.

Definicja 2.3. Niech \hat{A} będzie gęsto określonym operatorem w przestrzeni Hilberta \mathcal{H} oraz niech funkcje $\eta, \psi \in \mathcal{H}$ będą takie, że spełnione jest

$$\langle \eta, \varphi \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \psi, \hat{A}\varphi \rangle_{\mathcal{H}}, \quad \varphi \in \mathcal{D}(\hat{A}). \quad (24)$$

Sprężenie operatora \hat{A} jest oznaczane jako \hat{A}^* , a jego dziedzina $\mathcal{D}(\hat{A}^*)$ składa się ze wszystkich funkcji $\psi \in \mathcal{H}$, dla których istnieje $\eta \in \mathcal{H}$, taka że spełnione jest równanie (24). Jeżeli operator \hat{A} jest gęsto określony, to taka funkcja η jest wyznaczona jednoznacznie. Operator \hat{A}^* jest zdefiniowany następująco

$$\hat{A}^*\psi = \eta, \quad \psi \in \mathcal{D}(\hat{A}^*). \quad (25)$$

Operatorem *symetrycznym* nazywany jest operator $\hat{A} \subseteq \hat{A}^*$, co jest równoważne z tym, że $\mathcal{D}(\hat{A}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{A}^*)$ oraz

$$\langle \hat{A}\psi, \varphi \rangle_{\mathcal{H}} = \langle \psi, \hat{A}\varphi \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (26)$$

gdzie funkcje $\psi, \varphi \in D(\hat{A})$. Operatory symetryczne bywają niekiedy nazywane operatorami formalnie samosprzężonymi. Operatorem *samosprzężonym* jest nazywany taki operator symetryczny, że spełniony jest warunek

$$\hat{A} = \hat{A}^*, \quad (27)$$

lub równoważnie przy założeniu symetryczności operatora \hat{A}

$$D(\hat{A}) = D(\hat{A}^*). \quad (28)$$

Operatorem *istotnie samosprzężonym* jest nazywany operator \hat{A} taki, że operator $\overline{\hat{A}}$ jest operatorem samosprzężonym.

Zauważmy, że zwężenie operatora samosprzężonego \hat{A} do jego rdzenia jest operatorem istotnie samosprzężonym. Omówimy teraz kilka ważnych przykładów operatorów samosprzężonych w przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \in \mathbb{N}$, które okażą się przydatne w dalszej części pracy.

Przykład 2.1. Rozważmy przestrzeń Hilberta $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \in \mathbb{N}$. Operator $\hat{A} : L^2(\mathbb{R}^n) \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ niech będzie operatorem mnożenia przez funkcję mierzalną $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

$$(\hat{A}\psi)(u) = f(u)\psi(u), \quad u \in \mathbb{R}^n, \psi \in D(\hat{A}) \quad (29)$$

z dziedziną

$$D(\hat{A}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) : f\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)\}. \quad (30)$$

Wtedy dziedzina $D(\hat{A})$ jest zbiorem gęstym w $L^2(\mathbb{R}^n)$, a operator \hat{A} jest operatorem samosprzężonym (Propozycja 9.30 w [61]).

Definicja 2.4. Operatorem *nieujemnym*¹ nazywamy operator $\hat{A} : \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ taki, że

$$\langle \psi, \hat{A}\psi \rangle_{\mathcal{H}} \geq 0, \quad \psi \in D(\hat{A}). \quad (31)$$

Ważną klasą operatorów ograniczonych są operatory klasy śladowej. Do ich zdefiniowania potrzebne jest pojęcie śladu operatora.

Definicja 2.5. Niech $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ będzie samosprzężony i nieujemny oraz niech $(\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ będzie dowolną bazą ortonormalną w przestrzeni \mathcal{H} . Wtedy odwzorowanie

$$\text{Tr } \hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_n, \hat{A}\psi_n \rangle_{\mathcal{H}} \quad (32)$$

nazywamy *śladem* operatora \hat{A} , jego wartość nie zależy od wyboru bazy ortonormalnej w przestrzeni \mathcal{H} ([61] podrozdział 19.2). Operatorem *klasy śladowej* jest nazywany operator $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, który spełnia dodatkowo warunek

$$\text{Tr } |\hat{A}| < \infty, \quad (33)$$

gdzie $|\hat{A}| = \sqrt{\hat{A}^* \hat{A}}$.

Zauważmy, że dla każdego operatora ograniczonego \hat{A} , operator $\hat{A}^* \hat{A}$ jest nieujemny oraz samosprzężony. Pojęcie pierwiastka z operatora na gruncie analizy funkcjonalnej jest omówione np. w podrozdziale VIII.9 w [60]. Z uwagi na zastosowanie do wyznaczania wartości oczekiwanych dla stanów mieszanych w podrozdziale 2.5 przydatne okazuje się następujące twierdzenie (propozycja 19.3 w [61]).

¹niekiedy w literaturze przyjmuje się nazwę dodatnio półokreślony.

Twierdzenie 2.1. Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Jeżeli $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ jest operatorem klasy śladowej, to dla dowolnego operatora $\hat{B} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ operatory $\hat{A}\hat{B}$ oraz $\hat{B}\hat{A}$ są operatorami klasy śladowej oraz zachodzi dla nich własność

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A}). \quad (34)$$

Oprócz wyżej wprowadzonych operatorów, istotną rolę w teorii kwantów odgrywają też operatory unitarne określone na przestrzeniach Hilberta. Ich znaczenie wynika stąd, że zachowują normę, a także za ich pomocą są realizowane przejścia między różnymi bazami w tej przestrzeni. Za pomocą operatorów unitarnych jest także opisana ewolucja czasowa układów izolowanych.

Definicja 2.6. Niech \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 będą przestrzeniami Hilberta. Operator ograniczony $\hat{U} : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ nazywamy *unitarnym*, jeżeli spełnione są warunki

$$\hat{U}^*\hat{U} = \hat{I}_{\mathcal{H}_1}, \quad \hat{U}\hat{U}^* = \hat{I}_{\mathcal{H}_2}, \quad (35)$$

co jest równoważne z tym, że

$$\hat{U}^* = \hat{U}^{-1}. \quad (36)$$

Dla takiego operatora zachodzi również

$$\langle \hat{U}\phi, \hat{U}\psi \rangle_{\mathcal{H}_2} = \langle \phi, \psi \rangle_{\mathcal{H}_1}, \quad \phi, \psi \in \mathcal{H}_1 \quad (37)$$

oraz

$$\|\hat{U}\psi\|_{\mathcal{H}_2} = \|\psi\|_{\mathcal{H}_1}. \quad (38)$$

Niech $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \supseteq \mathrm{D}(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}_1$, wtedy operator $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \supseteq \mathrm{D}(\hat{B}) \rightarrow \mathcal{H}_2$

$$\hat{B}\psi = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}\psi, \quad \psi \in \mathrm{D}(\hat{B}) \quad (39)$$

z dziedziną

$$\mathrm{D}(\hat{B}) = \hat{U}(\mathrm{D}(\hat{A})) \quad (40)$$

nazywamy operatorem *unitarnie równoważnym* do operatora \hat{A} . Operator \hat{B} jest samosprzężony wtedy i tylko wtedy, gdy samosprzężony jest operator \hat{A} .

Powyższa konstrukcja zostanie teraz zastosowana do przypadku, gdzie transformacją unitarną będzie transformata Fouriera, która zostanie omówiona w podrozdziale 7.6.

Przykład 2.2. Rozważmy przestrzeń Hilberta $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \in \mathbb{N}$ oraz rzeczywisty wielomian n zmiennych $P : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Operator $\hat{A} : L^2(\mathbb{R}^n) \supseteq \mathrm{D}(\hat{A}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ niech będzie operatorem różniczkowym

$$(\hat{A}\psi)(x_1, \dots, x_n) = (P(-i\partial_{x_1}, \dots, -i\partial_{x_n})\psi)(x_1, \dots, x_n), \quad \psi \in \mathrm{D}(\hat{A}), \quad (41)$$

gdzie dziedzina operatora \hat{A} ma postać

$$\mathrm{D}(\hat{A}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^n) : \lambda \mapsto P(\lambda)(\mathcal{F}\psi)(\lambda) \in L^2(\mathbb{R}^n)\}, \quad (42)$$

przy czym symbol \mathcal{F} oznacza transformatę Fouriera, a pochodne występujące w (41) należy rozumieć w sensie dystrybucji. Operator \hat{A} jest samosprzężony, jako że poprzez transformatę Fouriera jest unitarnie równoważny do operatora mnożenia

$$(\hat{B}\psi)(x) = (\mathcal{F}^{-1}\hat{A}\mathcal{F}\psi)(x) = P(x)\psi(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \psi \in \{\phi \in L^2(\mathbb{R}^n) : P\phi \in L^2(\mathbb{R}^n)\}, \quad (43)$$

który jest samosprzężony (patrz przykład 2.1).

Istnienie samosprzężonego operatora mnożenia unitarnie równoważnego do każdego operatora samosprzężonego jest gwarantowane wprost przez jedno ze sformułowań twierdzenia spektralnego dla operatorów samosprzężonych (patrz twierdzenie VIII.4 w [60]). Dla wspomnianego operatora różniczkowego (41) transformacją unitarną przekształcającą go do operatora mnożenia jest transformata Fouriera (por. dodatek 7.6). Z uwagi na zastosowanie do mechaniki kwantowej istotne jest też następujące twierdzenie związane z niezmienniczością śladu operatora pod wpływem transformacji unitarnej.

Twierdzenie 2.2. Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Jeżeli $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ jest operatorem klasy śladowej, to dla dowolnego operatora unitarnego $\hat{U} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ zachodzi następująca własność

$$\mathrm{Tr}(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^*) = \mathrm{Tr}(\hat{A}). \quad (44)$$

Na zakończenie tego podrozdziału zostanie jeszcze wprowadzone pojęcie iloczynu tensorowego operatorów liniowych w przestrzeniach Hilberta z uwagi na jego wykorzystanie w dalszej części pracy.

Definicja 2.7. Niech \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 będą przestrzeniami Hilberta, a $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}_1$ oraz $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \supseteq D(\hat{B}) \rightarrow \mathcal{H}_2$ niech będą gęsto określonymi operatorami liniowymi działającymi w tychże przestrzeniach Hilberta. Okazuje się, że $D(\hat{A}) \otimes D(\hat{B})$ jest gęstym podzbiorem przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$ (patrz podrozdział 7.1). *Iloczynem tensorowym* operatorów \hat{A} oraz \hat{B} nazywamy operator $\hat{A} \otimes \hat{B} : \mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2 \supseteq D(\hat{A}) \otimes D(\hat{B}) \rightarrow \mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$ zdefiniowany następująco

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})(\psi \otimes \phi) = (\hat{A}\psi) \otimes (\hat{B}\phi), \quad \psi \in D(\hat{A}), \phi \in D(\hat{B}). \quad (45)$$

Jego domknięcie będzie oznaczane następująco

$$\overline{\hat{A} \otimes \hat{B}} = \hat{A} \hat{\otimes} \hat{B}. \quad (46)$$

Jeżeli $\hat{A} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1)$ oraz $\hat{B} \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2)$ to zachodzi następująca równość dla normy operatora $\hat{A} \otimes \hat{B}$

$$\|\hat{A} \otimes \hat{B}\| = \|\hat{A}\| \|\hat{B}\|. \quad (47)$$

Przedstawimy teraz ważne twierdzenie (szczególny przypadek twierdzenia VIII.33 z [60]) odnośnie iloczynu tensorowego operatorów, które będzie używane w dalszej części pracy.

Twierdzenie 2.3. Niech \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 będą przestrzeniami Hilberta, a $\hat{A} : \mathcal{H}_1 \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}_1$ oraz $\hat{B} : \mathcal{H}_2 \supseteq D(\hat{B}) \rightarrow \mathcal{H}_2$ niech będą operatorami istotnie samosprzężonymi. Wtedy operator $\hat{A} \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_2} + \hat{1}_{\mathcal{H}_1} \otimes \hat{B}$ jest istotnie samosprzężony na dziedzinie

$$D(\hat{A} \otimes \hat{1}_{\mathcal{H}_2} + \hat{1}_{\mathcal{H}_1} \otimes \hat{B}) = D(\hat{A}) \otimes D(\hat{B}), \quad (48)$$

przy czym $\hat{1}_{\mathcal{H}_1}$ oraz $\hat{1}_{\mathcal{H}_2}$ oznaczają operatory jednostkowe odpowiednio na przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 .

2.3 Silnie ciągłe grupy i półgrupy operatorów i ich związek z równaniami ewolucyjnymi, problem Cauchy'ego

Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta (patrz podrozdział 7.1). Problem Cauchy'ego w \mathcal{H} dla abstrakcyjnego autonomicznego liniowego równania jednorodnego [62]

$$\begin{cases} \frac{du(t)}{dt} = \hat{A}u(t), & t > 0 \\ u(0) = u_0, \end{cases} \quad (49)$$

gdzie u_0 jest warunkiem początkowym, \hat{A} jest operatorem liniowym generującym C_0 -półgrupę oraz $D(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H}$, ma rozwiązanie w postaci

$$u(t) = e^{t\hat{A}}u_0. \quad (50)$$

Jeżeli $u_0 \in D(\hat{A})$, to rozwiązanie (50) jest nazywane rozwiązaniem silnym, natomiast jeżeli $u_0 \in \mathcal{H}$ to przedstawione rozwiązanie jest nazywane słabym [62].

Problem Cauchy'ego dla abstrakcyjnego autonomicznego liniowego równania niejednorodnego [62] z warunkiem początkowym u_0 ,

$$\begin{cases} \frac{du(t)}{dt} = \hat{A}u(t) + f(t), & t \in [0, T] \\ u(0) = u_0, \end{cases} \quad (51)$$

gdzie \hat{A} jest operatorem liniowym generującym C_0 -półgrupę oraz $D(\hat{A}) \subseteq \mathcal{H}$, $f \in L^1(0, T; \mathcal{H})$, $u_0 \in \mathcal{H}$ ma słabe rozwiązanie w postaci

$$u(t) = e^{t\hat{A}}u_0 + \int_{t_0}^t e^{(t-s)\hat{A}}f(s)ds, \quad (52)$$

gdzie całka w powyższym wyrażeniu to całka Bochnera (patrz rozdział IX w [63]).

Niech operator $\hat{A}: \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ generuje C_0 -półgrupę $(e^{t\hat{A}})_{t \geq 0}$ oraz niech operator $\hat{C}: \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ generuje C_0 -półgrupę $(e^{t\hat{C}})_{t \geq 0}$, gdzie $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, przy czym operator $\hat{B} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Wówczas rozwiązanie problemu Cauchy'ego dla abstrakcyjnego autonomicznego liniowego równania jednorodnego,

$$\begin{cases} \frac{du(t)}{dt} = \hat{C}u(t), & t > 0 \\ u(0) = u_0, \end{cases} \quad (53)$$

ma postać

$$u(t) = e^{t\hat{A}}u_0 + \int_0^t e^{(t-s)\hat{A}}\hat{B}u_0. \quad (54)$$

Jeżeli $u_0 \in D(\hat{A})$ to jest to rozwiązanie silne, natomiast jeżeli $u_0 \in \mathcal{H}$ to jest to rozwiązanie słabe. Przedstawione w tym podrozdziale pojęcia dotyczące półgrup zostały ograniczone do przestrzeni Hilberta z uwagi na zagadnienia poruszane w tej pracy. Niemniej jednak można je wprost uogólnić na przypadek przestrzeni Banacha [62]. W dalszej części pracy użyteczne będzie następujące twierdzenie, które jest szczególnym przypadkiem propozycji 1.7 z [64]

Twierdzenie 2.4. Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta, a $\hat{A}: \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ niech będzie generatorem silnie ciągłej jednoparametrowej półgrupy $(e^{t\hat{A}})_{t \geq 0}$ na przestrzeni \mathcal{H} . Jeżeli podzbiór $D \subset D(\hat{A})$ jest gęsty w \mathcal{H} oraz $e^{t\hat{A}}D \subseteq D$, gdzie $t \geq 0$, to podzbiór D jest rdzeniem operatora \hat{A} .

Z powyższego twierdzenia możemy wyciągnąć wniosek odnośnie rdzeni operatorów samosprężonych, jako że generują one silnie ciągłe jednoparametrowe grupy unitarne (a więc zarówno sam taki operator samosprężony \hat{A} , jak i operator $-\hat{A}$ generują silnie ciągłe jednoparametrowe półgrupy).

Twierdzenie 2.5. Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta, a $\hat{A}: \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ niech będzie operatorem samosprężonym, który na mocy twierdzenia Stone'a (patrz twierdzenie VIII.7 w [60]) generuje jednoparametrową silnie ciągłą grupę $(e^{it\hat{A}})_{t \in \mathbb{R}}$ na przestrzeni \mathcal{H} . Jeżeli podzbiór $D \subset D(\hat{A})$ jest gęsty w \mathcal{H} oraz $e^{it\hat{A}}D \subseteq D$, gdzie $t \in \mathbb{R}$, to podzbiór D jest rdzeniem operatora \hat{A} , a zatem operator $\hat{A} \upharpoonright D$ jest istotnie samosprężony.

2.4 Sformułowanie mechaniki kwantowej przy użyciu funkcji falowych

W podrozdziale 2.1 podstawy schrödingerowskiej mechaniki kwantowej zostały przedstawione w sposób bardziej formalny, tzn. bez zgłębiania się w szczegóły matematyczne. Korzystając z aparatu wprowadzonego w podrozdziałach 2.2 oraz 2.3, podstawowe pojęcia z mechaniki kwantowej zostaną doprecyzowane w niniejszym podrozdziale. W reprezentacji schrödingerowskiej operatory położenia oraz pędu są zdefiniowane następująco:

a) operator położenia

$$(\hat{x}\psi)(x) = x\psi(x), \quad (55)$$

dla dowolnej funkcji ψ należącej do dziedziny operatora położenia:

$$D(\hat{x}) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : x\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})\}. \quad (56)$$

b) operator pędu

$$(\hat{p}\psi)(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x), \quad (57)$$

gdzie $\psi \in D(\hat{p})$, przy czym dziedzina operatora pędu $D(\hat{p})$ ma postać

$$D(\hat{p}) = \left\{ \psi \in L^2(\mathbb{R}) : \frac{d}{dx} \psi(x) \in L^2(\mathbb{R}) \right\}, \quad (58)$$

gdzie pochodna jest rozumiana w sensie dystrybucji. Dziedzina operatora pędu jest tożsama z przestrzenią Sobolewa $H^1(\mathbb{R})$ (patrz podrozdział 7.5).

Operatory te są do siebie unitarnie równoważne poprzez transformatę Fouriera-Plancherela (372) i (373) oraz spełniają kanoniczną relację komutacji

$$[\hat{x}, \hat{p}] \psi = i\hbar \psi, \quad \psi \in D([\hat{x}, \hat{p}]), \quad (59)$$

gdzie $D([\hat{x}, \hat{p}]) \supseteq \mathcal{S}(\mathbb{R})$, a $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ jest przestrzenią Schwartza (patrz podrozdział 7.4), która jest gęstym podzbiorem przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$. Wprowadzone operatory położenia i pędu są przykładami operatorów nieograniczonych. Wprowadźmy następującą definicję ważną dla operatorów nieograniczonych.

Definicja 2.8. Niech \hat{A} i \hat{B} będą gęsto określonymi operatorami liniowymi w przestrzeni Hilberta \mathcal{H} . Jeżeli $D(\hat{A}) \subset D(\hat{B})$ oraz dla pewnych $a, b \geq 0$ zachodzi

$$\|\hat{B}\psi\|_{\mathcal{H}} \leq a\|\hat{A}\psi\|_{\mathcal{H}} + b\|\psi\|_{\mathcal{H}}, \quad \psi \in D(\hat{A}), \quad (60)$$

to operator \hat{B} jest nazywany \hat{A} -ograniczonym.

Następujący rezultat, znany jako twierdzenie Kato-Rellicha (patrz twierdzenie IV.5 w [57]), dostarcza bardzo użytecznego kryterium na samosprężoność.

Twierdzenie 2.6. Niech operator $\hat{A} : \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ będzie samosprężony, a operator \hat{B} niech będzie symetryczny i \hat{A} -ograniczony ze stałą $a < 1$. Wtedy operator $\hat{A} + \hat{B}$ jest samosprężony na $D(\hat{A})$ oraz istotnie samosprężony na dowolnym rdzeniu operatora \hat{A} .

Jak łatwo wywnioskować z definicji 2.1, jeśli operator \hat{B} jest ograniczony, to jest on trywialnie \hat{A} -ograniczony ze stałymi $a = 0$ oraz $b = \|\hat{B}\|$.

Z punktu widzenia teorii kwantowej jednym z najważniejszych operatorów jest hamiltonian,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (61)$$

wprowadzony w podrozdziale 2.1. Dziedzina $D(\hat{H})$, na której ten operator jest samosprężony, nie jest w ogólności łatwa do wyznaczenia i zależy od postaci energii potencjalnej V . Dla cząstki swobodnej ($V \equiv 0$) mamy $D(\hat{H}) = H^2(\mathbb{R})$. Dla istotnie ograniczonych energii potencjalnych $V \in L^\infty(\mathbb{R})$, na podstawie twierdzenia Kato-Relicha, również mamy $D(\hat{H}) = H^2(\mathbb{R})$. Możemy również wziąć pod uwagę szerszą klasę potencjałów, dla których jawne scharakteryzowanie dziedzin, na której hamiltoniany są samosprężone, staje się bardzo kłopotliwe, jednak jest możliwe proste scharakteryzowanie rdzenia takich operatorów. Przez $L^2_{loc}(\mathbb{R})$ rozumiemy tutaj przestrzeń funkcji zespolonych na \mathbb{R} , których zawężenie do dowolnego zwartego podzbioru \mathbb{R} jest całkowalne z kwadratem.

Twierdzenie 2.7. Niech $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$ oraz $V(x) \geq 0$ ($x \in \mathbb{R}$), wtedy hamiltonian

$$(\hat{H}\psi)(x) = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x), \quad x \in \mathbb{R}, \psi \in D(\hat{H}) \quad (62)$$

z dziedziną $D(\hat{H}) = C_0^\infty(\mathbb{R})$ jest istotnie samosprężony.

Wynik ten można prosto uogólnić na przypadki potencjałów $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$ ograniczonych od dołu. Niech funkcja $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$ będzie ograniczona od dołu, wtedy istnieje stała $C \geq 0$ taka, że funkcja $V_1 = V + C$ spełnia warunek $V_1(x) \geq 0$ ($x \in \mathbb{R}$). Na podstawie twierdzenia 2.7 hamiltonian

$$(\hat{H}_1\psi)(x) = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x)\right) \psi(x), \quad x \in \mathbb{R}, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \quad (63)$$

jest istotnie samosprężony. Stąd, na podstawie twierdzenia 2.6, operator

$$(\hat{H}\psi)(x) = (\hat{H}_1 - C)\psi(x) = \left(-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x), \quad x \in \mathbb{R}, \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \quad (64)$$

również jest istotnie samosprężony. Prezentujemy poniżej kilka ważnych potencjałów do których ma zastosowanie podane twierdzenie:

a) potencjał oscylatora harmonicznego (zwany też potencjałem parabolicznym)

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (65)$$

gdzie $\omega > 0$ jest częstością oscylatora, $m > 0$ jest masą; zauważmy, że $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$, $V(x) \geq 0$ ($x \in \mathbb{R}$);

b) potencjał gaussowski

$$V(x) = U_0 e^{-\frac{(x-x_B)^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (66)$$

gdzie $U_0 \in \mathbb{R}$ jest wysokością bariery potencjału (dla $U_0 > 0$) lub głębokością studni potencjału (dla $U_0 < 0$), $x_B \in \mathbb{R}$ jest współrzędną położenia ekstremum funkcji gaussowskiej, a $\sigma_B > 0$ jest odchyleniem standardowym tejże funkcji; zauważmy, że $V \in L^\infty(\mathbb{R})$;

c) potencjał Pöschla-Tellera

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2mL^2} \frac{\lambda(\lambda+1)}{\cosh^2\left(\frac{x}{L}\right)}, \quad (67)$$

gdzie $m > 0$ jest masą, $L > 0$ jest związane z szerokością studni potencjału, a parametr $\lambda \in \mathbb{N}$ jest związany z głębokością studni potencjału; zauważmy, że $V \in L^\infty(\mathbb{R})$;

d) potencjał wykładniczo-potęgowy

$$V(x) = U_0 e^{-\ln 2 \left(\frac{x-x_B}{x_{1/2}}\right)^{2n}}, \quad (68)$$

gdzie $U_0 \in \mathbb{R}$ jest wysokością bariery potencjału (dla $U_0 > 0$) lub głębokością studni potencjału (dla $U_0 < 0$), x_B jest współrzędną położenia ekstremum potencjału, $x_{1/2}$ jest połową jego szerokości połówkowej, a $n \in \mathbb{N}$ jest parametrem odpowiadającym za kształt potencjału, który interpoluje między potencjałem gaussowskim ($n = 1$), a barierą prostokątną $n \rightarrow \infty$; zauważmy, że $V \in L^\infty(\mathbb{R})$;

e) potencjał Konwenta

$$V(x) = V_0 (A \cosh(ax) - 1)^2 \quad (69)$$

gdzie $V_0, A, a > 0$; zauważmy, że $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$;

f) potencjał Morse'a

$$V(x) = D_e (e^{-2b(x-x_e)} - 2e^{-b(x-x_e)}) \quad (70)$$

gdzie $D_e > 0$ jest głębokością studni potencjału, $b > 0$ jest związane z jej szerokością, a $x_e \in \mathbb{R}$ jest współrzędną położenia minimum potencjału; zauważmy, że $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$.

Wyżej wprowadzone potencjały mają szerokie zastosowanie w różnych działach fizyki współczesnej wykorzystującej aparat mechaniki kwantowej do modelowania potencjałów uwięzienia bądź bariery potencjału. Przykładowo potencjał a) jest stosowany w fizyce atomowej [65] i molekularnej [66], w fizyce jądrowej [67, 68], w fizyce ciała stałego [69] oraz fizyce plazmy [70]. Potencjał b) jest stosowany w fizyce atomowej [71] i molekularnej [72], fizyce jądrowej [73], w fizyce ciała stałego [74, 75, 76, 77]. Z kolei potencjał c) jest stosowany w fizyce atomowej [78] i molekularnej [79], w fizyce ciała stałego [80], natomiast potencjał d) jest stosowany w fizyce ciała stałego [81] oraz fizyce atomowej [82]. Potencjał e) jest stosowany w fizyce ciała stałego [83]. W końcu potencjał f) jest stosowany w fizyce molekularnej [79], w fizyce jądrowej [84], w fizyce ciała stałego [80] oraz fizyce plazmy [85].

Ważną kwestią, poruszoną już w podrozdziale 2.1, jest obliczenie wartości oczekiwanej zmiennej dynamicznej, której odpowiada w ogólności nieograniczony operator samosprzężony \hat{O} . W stanie czystym opisanym funkcją falową ψ wartość oczekiwaną takiej zmiennej dynamicznej wyraża się następująco

$$\langle \hat{O} \rangle_\psi = \langle \psi, \hat{O}\psi \rangle_{L^2(\mathbb{R})}, \quad \psi \in \mathcal{D}(\hat{O}). \quad (71)$$

Jeżeli $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subseteq \mathcal{D}(\hat{O})$ (gdzie $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ jest przestrzenią Schwartza), to formułę na wartość oczekiwaną można przepisać przy pomocy nawiasu dystrybucyjnego

$$\langle \hat{O} \rangle_\psi = \langle \hat{O}\psi, \psi^* \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})}, \quad (72)$$

jako że $\hat{O} \upharpoonright \mathcal{S}(\mathbb{R})$ jest ciągłym (w topologii ultrasłabej) operatorem $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R})$, patrz dodatek (rozdział 7.4).

2.5 Sformułowanie mechaniki kwantowej przy użyciu operatora gęstości

Należy zauważyć, że opis układów kwantowych przy użyciu funkcji falowej nie może być stosowany we wszystkich przypadkach, jako że nie zawsze dysponujemy pełną informacją o układzie kwantowym. W niektórych przypadkach bywa konieczny opis przy użyciu rozkładu statystycznego [5, 86, 6], kiedy nie mamy pełnej informacji o stanie układu kwantowego zawartej w funkcji falowej, a wiemy jedynie, że układ może się znajdować w stanie opisanym funkcją falową ψ_l z prawdopodobieństwem p_l , gdzie $l = 0, 1, \dots, N$, a $N \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, ponadto wymagamy by $\sum_{n=0}^N p_n = 1$. W tym podejściu operator gęstości jest używany do scharakteryzowania stanu kwantowego. Operator gęstości,

$$\hat{\rho}\phi = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \langle \psi_n, \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \psi_n, \quad \phi \in L^2(\mathbb{R}), \quad (73)$$

należy do klasy operatorów ograniczonych, które są ponadto samosprężone, nieujemne oraz klasy śladowej ze śladem równym jeden. Szereg (73) jest zbieżny w normie operatorowej, korzystając z subaddytywności normy otrzymujemy

$$\|\hat{\rho}\| \leq \sum_{n=0}^{\infty} p_n \|\langle \psi_n, \cdot \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \psi_n\| = \sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1. \quad (74)$$

Wartość oczekiwana obserwabli, której odpowiada samosprężony operator $\hat{O} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, w stanie kwantowym opisanym operatorem gęstości $\hat{\rho}$, jest zdefiniowana następująco [87] (patrz również twierdzenie 2.1)

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}} = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}). \quad (75)$$

Jeżeli operator \hat{O} jest nieograniczony, to w ogólności operatory $\hat{O}\hat{\rho}$ oraz $\hat{\rho}\hat{O}$ nie są już klasy śladowej. Problem ścisłego matematycznie zdefiniowania wartości oczekiwanych w takich przypadkach został poruszony w pracy [88]. Rozważmy teraz szczególny przypadek, gdy operator gęstości jest operatorem skończonego rzędu

$$\hat{\rho}\phi = \sum_{n=0}^N p_n \langle \psi_n, \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \psi_n, \quad N \in \mathbb{N}, \phi \in L^2(\mathbb{R}), \quad (76)$$

gdzie $p_0, p_1, \dots, p_N > 0$, $\sum_{p=0}^N p_p = 1$ oraz $(\psi_n)_{n=0}^N$ jest zbiorem ortogonalnym. Z przypadkiem takim będziemy mieli do czynienia w dalszej części pracy (patrz podrozdział 5.3). Wtedy wartość oczekiwaną w ogólności nieograniczonego operatora \hat{O} w stanie mieszanym opisanym operatorem gęstości (76) możemy wyrazić analogicznie do (71), jeśli tylko $\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_N \in \mathcal{D}(\hat{O})$

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{n=0}^N p_n \langle \psi_n, \hat{O}\psi_n \rangle_{L^2(\mathbb{R})}. \quad (77)$$

Niestety w ogólnym przypadku przy $N \rightarrow \infty$ zbieżność szeregu nie jest gwarantowana. Narzucimy teraz jeszcze mocniejsze warunki na operator gęstości, niż w (76),

$$\hat{\rho}\phi = \sum_{n=0}^N p_n \langle \psi_n, \phi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \psi_n, \quad N \in \mathbb{N}, \phi \in L^2(\mathbb{R}), \quad (78)$$

gdzie $p_0, p_1, \dots, p_N > 0$, $\sum_{p=0}^N p_p = 1$ oraz $(\psi_n)_{n=0}^N$ jest zbiorem ortogonalnym i $\psi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Wtedy formułę na wartość oczekiwaną (77) możemy przepisać przy pomocy

nawiasu dystrybucyjnego, jako że operator $\hat{O} \upharpoonright \mathcal{S}(\mathbb{R})$ jest ciągłym (w topologii ultrasłabej) operatorem $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R})$,

$$\langle \hat{O} \rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{n=0}^N p_n \langle \hat{O} \psi_n^*, \psi_n \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})}, \quad \psi_0, \psi_1, \dots, \psi_N \in \mathcal{S}(\mathbb{R}). \quad (79)$$

Jądro całkowe operatora gęstości (73) jest wyrażone poprzez formułę

$$\rho(x, x') = \sum_{l=0}^{\infty} p_l \psi_l(x) \psi_l^*(x'), \quad (80)$$

gdzie $(\psi_l)_{l=0}^{\infty}$ stanowi bazę ortonormalną w przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$, a $(p_l)_{l=0}^{\infty}$ jest ciągiem liczb nieujemnych spełniających warunek $\sum_l p_l = 1$. Zgodnie z probabilistyczną interpretacją mechaniki kwantowej, p_l jest prawdopodobieństwem znajdowania się naszego układu w stanie czystym scharakteryzowanym funkcją falową $\psi_l(x)$.

Definicja $\rho(x, x')$ dana w równaniu (80) może być uzasadniona na podstawie twierdzenia spektralnego dla zwartych operatorów samosprzężonych [58], zgodnie z którym każdy taki operator $\hat{\Omega}$ może być przedstawiony następująco

$$(\hat{\Omega}\phi)(x) = \sum_{l=0}^{\infty} p_l \langle \psi_l, \phi \rangle \psi_l(x) = \sum_{l=0}^{\infty} p_l \psi_l(x) \int_{\mathbb{R}} \psi_l^*(x') \phi(x') dx', \quad (81)$$

gdzie $\phi \in L^2(\mathbb{R})$ oraz $(\psi_l)_{l=0}^{\infty}$ jest pewną bazą ortonormalną. Dodatkowo, jeżeli założymy jeszcze $p_l \geq 0$, $l = 0, 1, \dots$ oraz $\sum_l p_l = 1$, to $\hat{\Omega}$ jest operatorem gęstości. Wtedy równanie (81) może być przekształcone do następującej postaci

$$(\hat{\Omega}\phi)(x) = \int_{\mathbb{R}} \left(\sum_{l=0}^{\infty} p_l \psi_l(x) \psi_l^*(x') \right) \phi(x') dx', \quad (82)$$

stąd jest czytelne, że jądro całkowe operatora gęstości $\hat{\rho}$ jest dane przez (80). W terminologii kwantowej jądro całkowe operatora gęstości jest nazywane macierzą gęstości.

Z przedstawionego powyżej opisu wynika, że charakterystyka stanu izolowanego układu kwantowego o hamiltonianie (62) jest wyrażona w sposób równoważny do ujęcia falowego (por. podrozdz. 2.4) za pomocą macierzy gęstości. Należy jednak zauważyć, że dotychczasowy opis nie uwzględnia aspektu dynamicznego rozpatrywanego układu. Niemniej jednak, z konstrukcji macierzy gęstości wynika, że jej zależność czasowa powinna wynikać z zależności czasowej funkcji falowej będącej rozwiązaniem zależnego od czasu równania Schrödingera. Zauważmy bowiem, że unitarna ewolucja funkcji falowej jest generowana przez hamiltonian (62) zgodnie z twierdzeniem Stone'a (patrz twierdzenie VIII.7 w [60])

$$\psi_l(\cdot; t) = e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi_l(\cdot; 0), \quad (83)$$

natomiast ewolucja czasowa sprzężenia zespolonego funkcji falowej jest wyrażona wzorem

$$\psi_l^*(\cdot; t) = e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi_l^*(\cdot; 0), \quad (84)$$

gdzie zmienna t jest czasem ($t \geq 0$), natomiast funkcja falowa $\psi(\cdot; 0) \in \mathcal{D}(\hat{H})$, skąd wprost wynika, że jej sprzężenie zespolone $\psi^*(\cdot; 0) \in \mathcal{D}(\hat{H})$. Zatem macierz gęstości charakteryzująca stan kwantowy w chwili $t \in \mathbb{R}$ ma postać

$$\rho(x, x'; t) = \sum_l p_l \psi_l(x; t) \psi_l^*(x'; t) = \sum_l p_l (\psi_l(\cdot; t) \otimes \psi_l^*(\cdot; t))(x, x'), \quad \sum_l p_l = 1, \quad p_l \geq 0, \quad (85)$$

gdzie $\rho(\cdot, \cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}^2)$. Zauważmy, że ślad macierzy gęstości jest zachowany w czasie ewolucji czasowej,

$$\frac{d}{dt} \text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 0. \quad (86)$$

Wynika to wprost z unitarnej ewolucji funkcji falowych $\psi_l(x; t)$ i równania (85). Jedną z zalet wprowadzonego podejścia opartego na formalizmie operatora gęstości jest możliwe rozróżnienie między stanami czystymi oraz mieszanymi rozważanego układu kwantowego. To rozróżnienie między takimi stanami bierze się z następującej obserwacji. Dla każdego stanu układu kwantowego możemy wyznaczyć jego czystość $\text{Tr}(\hat{\rho}^2(t))$. Dla dowolnego operatora gęstości wielkość ta spełnia następującą nierówność [87].

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2(t)) \leq 1. \quad (87)$$

Stan układu kwantowego jest czysty wtedy i tylko wtedy, gdy $\hat{\rho}^2(t) = \hat{\rho}(t)$, w przeciwnym przypadku stan ten jest mieszany.

Istotne jest, iż czystość stanów kwantowych jest niezmiennicza podczas unitarnej ewolucji czasowej. By pokazać tę własność, znajdziemy postać jądra całkowego $K_{\hat{\rho}^2(t)}(x, x'; t)$ kwadratu operatora gęstości,

$$(\hat{\rho}^2(t)\phi)(x) = \int_{\mathbb{R}} K_{\hat{\rho}^2(t)}(x, x'; t)\phi(x')dx', \quad (88)$$

gdzie $\phi \in L^2(\mathbb{R})$. W tym celu skorzystamy z jądra całkowego operatora gęstości (85), konkretnie

$$\begin{aligned} K_{\hat{\rho}^2(t)}(x, x'; t) &= \int_{\mathbb{R}} \rho(x, x''; t)\rho(x'', x'; t)dx'' \\ &= \int_{\mathbb{R}} \sum_l \sum_n p_l p_n \psi_l(x; t)\psi_l^*(x''; t)\psi_n(x''; t)\psi_n^*(x'; t)dx'' \\ &= \sum_l \sum_n p_l p_n \int_{\mathbb{R}} \psi_l(x; t)\psi_l^*(x''; t)\psi_n(x''; t)\psi_n^*(x'; t)dx'' \\ &= \sum_l \sum_n p_l p_n \psi_l(x; t)\delta_{ln}\psi_n^*(x'; t) = \sum_l p_l^2 \psi_l(x; t)\psi_l^*(x'; t). \end{aligned} \quad (89)$$

Następnie, skorzystanie z twierdzenia 3.1 z [89] pozwala nam wykazać, że czystość stanu kwantowego

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2(t)) = \int_{\mathbb{R}} \sum_l p_l^2 |\psi_l(x; t)|^2 = \sum_l p_l^2 \int_{\mathbb{R}} |\psi_l(x; t)|^2 = \sum_l p_l^2 \leq 1, \quad (90)$$

nie zależy od chwili czasowej t , zatem wielkość ta jest zachowana w czasie ewolucji czasowej. Stąd stany mieszane ewoluują w stany mieszane, a stany czyste ewoluują w stany czyste.

Zależność czasowa macierzy gęstości może być użyta do skontruowania dla niej równania ewolucji czasowej. Podstawienie jawnej postaci ewolucji unitarnej funkcji falowej oraz jej sprzężenia zespolonego (84) do równania (85) prowadzi do następującego wyrażenia

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; t) &= \sum_{l=0}^{\infty} p_l \left(\left(e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi_l \right) (\cdot; 0) \otimes \left(e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \psi_l^* \right) (\cdot; 0) \right) (x, x') \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} p_l \left(e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \hat{\otimes} e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \right) (\psi_l(\cdot; 0) \otimes \psi_l^*(\cdot; 0))(x, x') \\ &= \left(e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \hat{\otimes} e^{\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \right) \sum_{l=0}^{\infty} p_l (\psi_l(\cdot; 0) \otimes \psi_l^*(\cdot; 0))(x, x'). \end{aligned} \quad (91)$$

Zauważmy, że iloczyn tensorowy operatorów ewolucji czasowej może być przedstawiony jako (przy czym przez $\hat{1}$ oznaczamy operator jednostkowy na przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R})$)

$$\left(\left(e^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \hat{\otimes} e^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \right) f \right) (x, x') = \left(e^{-\frac{it}{\hbar}(\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H})} f \right) (x, x'), \quad (92)$$

dla $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$, przypomnijmy, że identyfikujemy przestrzeń $L^2(\mathbb{R}) \hat{\otimes} L^2(\mathbb{R})$ z przestrzenią $L^2(\mathbb{R}^2)$. Ponadto, operator $\hat{H} \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{H}$ jest istotnie samosprężony w przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^2)$ na dziedzinie $D(\hat{H} \otimes \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{H}) = D(\hat{H}) \otimes D(\hat{H})$. Zatem operator $\hat{H} \hat{\otimes} \hat{1} - \hat{1} \otimes \hat{H}$ jest operatorem samosprężonym, który zgodnie z twierdzeniem Stone'a (patrz twierdzenie VIII.7 w [60]) generuje jednoparametrową silnie ciągłą grupę unitarną

$$\hat{U}_{DM}(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}(\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H})}, \quad t \in \mathbb{R}. \quad (93)$$

Elementy tej grupy są operatorami ewolucji czasowej. Zatem zależność od czasu macierzy gęstości jest wyrażona wzorem

$$\rho(x, x'; t) = \left(e^{-\frac{it}{\hbar}(\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H})} \rho(\cdot, \cdot; 0) \right) (x, x') \quad (94)$$

i stanowi ona rozwiązanie następującego równania różniczkowego

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, x'; t) = \left((\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H}) \rho \right) (x, x'; t), \quad (95)$$

z warunkiem początkowym $\rho(\cdot, \cdot; 0) \in D(\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H})$. W ogólności nie jest łatwo scharakteryzować dziedzinę, na której operator $\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H}$ jest samosprężony, jednak dla potencjałów istotnie ograniczonych $V \in L^\infty(\mathbb{R})$ podzbiorem tej dziedziny jest przestrzeń Sobolewa $H^2(\mathbb{R}^2)$. Jeżeli potencjał jest lokalnie całkowalny z kwadratem $V \in L^2_{loc}(\mathbb{R})$, to rdzeniem operatora $\hat{H}\hat{\otimes}\hat{1} - \hat{1}\hat{\otimes}\hat{H}$ jest zbiór $C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$. Jawna postać tego równania z hamiltonianem zdefiniowanym w (61) jest następująca

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, x'; t) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) + V(x) - V(x') \right) \rho(x, x'; t), \quad (96)$$

gdzie pochodne są rozumiane w sensie dystrybucji. Jest to reprezentacja Schrödingera równania von Neumanna dla macierzy gęstości. Ewolucja czasowa operatora gęstości (73) jest następująca [61]

$$\hat{\rho}(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}\hat{H}} \hat{\rho}(0) e^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}}. \quad (97)$$

Różniczkując to wyrażenie względem zmiennej czasowej, otrzymujemy (formalne) równanie von Neumanna dla operatora gęstości

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho}(t) = \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t) \right]. \quad (98)$$

W większości prac problem ścisłego sformułowania równania ewolucji dla operatora gęstości jest pomijany. Rzadkim wyjątkiem jest książka [90] (patrz rozdział XVII, część B paragraf 5), w której zagadnienie to zostało precyzyjnie omówione od strony matematycznej.

3 Elementy teorii kwantowej w ujęciu przestrzenno-fazowym

3.1 Problem kwantyzacji oraz operatory i symbole Weyla

W poprzednim rozdziale zajmowaliśmy się sformułowaniem teorii kwantowej przy użyciu funkcji falowej oraz operatorów samosprzężonych, a także wprowadziliśmy zasadnicze idee sformułowania tej teorii przy pomocy operatora gęstości. Takie podejście umożliwiło nam uwzględnienie w opisie również stanów mieszanych układu kwantowego. Oczywiście, nie wyczerpuje to wszystkich możliwości opisu układów kwantowych, ale niewątpliwie pozwala to zauważyć, że teoria kwantowa może być formułowana na różne sposoby. Jedno z takich sformułowań ma swoją genezę w uogólnieniu liouville'owskiego sformułowania mechaniki klasycznej. W ujęciu przestrzenno-fazowym teorii kwantowej zmienne dynamiczne są wyrażone za pomocą funkcji (lub ogólniej dystrybucji) na przestrzeni fazowej. Funkcje te tworzą algebrę nieprzemianą [91, 92], która odzwierciedla fakt, że operatory samosprężone odpowiadające różnym zmiennym dynamicznym również w ogólności nie komutują. Problem sformułowania mechaniki kwantowej na przestrzeni fazowej jest blisko związany z problemem kwantyzacji, to jest przyporządkowania funkcjom (lub ogólniej dystrybucjom) związanym z klasycznymi wielkościami dynamicznymi na przestrzeni fazowej operatorów działających w przestrzeni Hilberta. Właściwym narzędziem do matematycznego opisu problemu kwantyzacji okazała się teoria operatorów pseudoróżniczkowych, w ramach której operatorom przyporządkowuje się funkcje (lub ogólniej dystrybucje) zwane symbolami tych operatorów. Wiele własności takich operatorów można wyznaczyć w oparciu o badanie ich symboli. Zagadnienie kwantyzacji nie jest jednoznaczne, gdyż funkcje określone na przestrzeni fazowej są przemienne w odróżnieniu od operatorów w przestrzeni Hilberta. Przed przejściem do szczegółów poczyńmy jeszcze ważne rozróżnienie, mianowicie w rozdziale 2 mówiliśmy o przyporządkowaniu zmiennym dynamicznym operatorów samosprężonych z uwagi na ich własności: rzeczywiste widmo odpowiadające możliwym wartościom pomiaru oraz generowanie przez nie silnie ciągłych jednoparametrowych grup unitarnych na przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R})$. Podejście takie stwarza jednak sporo problemów przy próbie ogólnego uchwycenia problemu kwantyzacji z uwagi na niemożliwość wyznaczenia dziedzin wszystkich interesujących nas operatorów w sposób ogólny. Naturalnym wyjściem w tym przypadku jest rozpatrywanie zawężeń tych operatorów do pewnego wspólnego gęstego podzbioru ich dziedzin. Przykładowo w książce [61], gdzie w rozdziale 22 jest rozpatrywany problem kwantyzacji, przyjęto zawężenie operatorów do przestrzeni funkcji gładkich o zwartym nośniku $C_0^\infty(\mathbb{R})$. W niniejszej pracy bardziej naturalne będzie przyjęcie zawężenia operatorów do przestrzeni Schwartza $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ z uwagi na jej niezmienniczość względem transformat Fouriera, co znacząco ułatwi wiele zagadnień. W ogólności nie jest to prawdą, jednak dla interesujących nas operatorów pokażemy, że ich zawężenie do przestrzeni Schwartza daje operatory istotnie samosprężone, a zatem mające dokładnie jedno rozszerzenie samosprężone, które możemy uzyskać poprzez domknięcie wyjściowego operatora. Przykładowo klasycznie $xp = px$, gdzie x to zmienna położeniowa, a p to sprzężona do niej kanonicznie zmienna pędowa, natomiast w przypadku kwantowym mamy $\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$, gdzie operatory \hat{x} oraz \hat{p} są odpowiednio operatorami położenia oraz pędu zdefiniowanymi w (55) oraz (57). Prowadzi to do problemu uporządkowania operatorów, gdzie różne uporządkowania operatorów odpowiadają różnym rodzajom operatorów pseudoróżniczkowych. Zgodnie z twierdzeniem Groenewolda (patrz podrozdział 13.4 w [61]), nie istnieje procedura kwantyzacji, która w ogólnym przypadku zastępowałaby nawias Poissona dwóch funkcji na przestrzeni fazowej komutatorem przyporządkowanym im poprzez wspomnianą procedurę kwantyzacji operatorów. Najpopularniejsze oraz

historycznie jedno z pierwszych, jest uporządkowanie Weyla [93]

$$x^r p^s \xrightarrow[\text{Weyla}]{\text{kwantyzacja}} \frac{1}{2^s} \sum_{l=0}^s \binom{s}{l} \hat{p}^{s-l} \hat{x}^r \hat{p}^l, \quad r, s \in \mathbb{N}, \quad x, p \in \mathbb{R}, \quad (99)$$

gdzie operator po prawej stronie ma sens dla wszystkich funkcji z przestrzeni Schwartza $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, co jest prostym wnioskiem z definicji półnorm w tejże przestrzeni (361). Uporządkowaniu takiemu odpowiada klasa operatorów pseudoróżniczkowych zwanych operatorami Weyla. Teoria operatorów pseudoróżniczkowych, w tym operatorów Weyla, została omówiona z punktu widzenia mechaniki kwantowej chociażby w pracach [94, 95, 96, 97, 98]. Dla szerszego kontekstu odnośnie operatorów pseudoróżniczkowych warto też sięgnąć do [99, 100, 101]. Operator Weyla odpowiadający symbolowi $a \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ będziemy oznaczać jako $Op_W(a)$. Zanim przejdziemy do najogólniejszej definicji, przedstawimy na początek prostszą, która jest poprawna tylko dla mniejszego zbioru symboli

$$(Op_W(a)\psi)(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} e^{\frac{ip}{\hbar}(x-y)} a\left(\frac{1}{2}(x+y), p\right) \psi(y) dy dp, \quad a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2), \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}). \quad (100)$$

Do rozszerzenia powyższej definicji operatora Weyla na symbole będące dystrybucjami temperowanymi potrzebne nam będzie następujące pojęcie (propozycja 5 z [97]).

Definicja 3.1. *Operatorem Grossmana-Royera* nazywamy operator liniowy zdefiniowany następująco

$$\left(\hat{R}(x_0, p_0)\psi\right)(x) = e^{\frac{2i}{\hbar}p_0(x-x_0)} \psi(2x_0 - x), \quad x, x_0, p_0 \in \mathbb{R}, \psi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}). \quad (101)$$

Jest on involucją na przestrzeniach $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, $L^2(\mathbb{R})$ oraz $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Na przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ jest on także operatorem unitarnym.

Korzystając z operatora Grossmana-Royera, możemy równoważnie wyrazić definicję operatora Weyla (100), jako

$$(Op_W(a)\psi)(x) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} a(x_0, p_0) \left(\hat{R}(x_0, p_0)\psi\right)(x), \quad a \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2), \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}). \quad (102)$$

Zapisanie równania (102) przy pomocy nawiasu dystrybucyjnego umożliwia nam uogólnienie definicji operatora Weyla na przypadek, gdy jego symbol jest dystrybucją temperowaną

$$(Op_W(a)\psi)(x) = \frac{1}{\pi\hbar} \left\langle a(\cdot, \cdot), \hat{R}(\cdot, \cdot)\psi(x) \right\rangle, \quad a \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2), \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}). \quad (103)$$

Jako że wszystkie wielomiany mogą być utożsamione z dystrybucjami temperowanymi (patrz podrozdział 7.4), z definicji operatora Weyla (103) można pokazać, że (99) zachodzi. Zostało to zasygnalizowane w podrozdziale 6.4.1, oraz przeliczone dla ogólniejszego przypadku (operator Weyla otrzymujemy dla $\tau = 1/2$) w podrozdziale 9.1.2 z [96].

Zajmiemy się teraz wyrażeniem symbolu operatora Weyla poprzez jądro tego operatora. Ważnym narzędziem do dalszej analizy jest twierdzenie Schwartza o jądrze (twierdzenie 14.3.4 z [99]).

Twierdzenie 3.1. Jeżeli $\hat{A} : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ jest ciągłym operatorem liniowym, to istnieje wtedy dystrybucja temperowana $K \in \mathcal{S}'(\mathcal{R}^2)$ (zwana dystrybucyjnym jądrem operatora \hat{A}), taka że

$$\left\langle \hat{A}\psi, \phi \right\rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})} = \langle K_{\hat{A}}, \psi \otimes \phi \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})}, \quad \psi, \phi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n). \quad (104)$$

Z uwagi na to, że dla dalszych rachunków w tej pracy wygodniej nam było zdefiniować transformaty Fouriera bez skalowania o stałą Plancka \hbar (patrz podrozdział 7.6), wprowadzimy teraz dodatkowo operator skalowania.

Definicja 3.2. *Operatorem skalowania* nazywamy operator $\hat{D}(c_1)$, taki że

$$\hat{D}(c_1)\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{c_1}}\psi(c_1x), \quad c_1 > 0, \quad (105)$$

natomiast operator do niego odwrotny ma następującą postać

$$\hat{D}^{-1}(c_1)\psi(x) = \sqrt{c_1}\psi\left(\frac{x}{c_1}\right) = \hat{D}\left(\frac{1}{c_1}\right)\psi(x), \quad c_1 > 0. \quad (106)$$

Jest on automorfizmem na przestrzeniach $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, $L^2(\mathbb{R})$ oraz $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Na przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$ jest on dodatkowo operatorem unitarnym.

Przydatny będzie również następujący operator skalowania tylko drugiej zmiennej dla funkcji (bądź dystrybucji) dwóch zmiennych

$$\left(\hat{D}_2(c_1)\phi\right)(x, y) = \left(\hat{1} \otimes \hat{D}(c_1)\right)\phi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{c_1}}\phi(x, c_1y), \quad c_1 > 0. \quad (107)$$

Analogicznie do (105), operator $\hat{D}_2(c_1)$ jest automorfizmem na przestrzeniach $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, $L^2(\mathbb{R}^2)$ oraz $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$. Na przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^2)$ jest on dodatkowo operatorem unitarnym. Rozważmy teraz *operator skręcenia*, który jest zadany w następujący sposób

$$(\hat{S}f)(x, y) = f\left(x + \frac{y}{2}, x - \frac{y}{2}\right) \quad (108)$$

oraz operator do niego odwrotny

$$(\hat{S}^{-1}f)(x, y) = f\left(\frac{x+y}{2}, x-y\right), \quad (109)$$

które oba są automorfizmami na przestrzeniach $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, $L^2(\mathbb{R}^2)$ oraz $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$. Symbol Weyla ciągłego operatora liniowego $\hat{A} : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ można powiązać z jądrem dystrybucyjnym $K_{\hat{A}} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ operatora \hat{A} (patrz twierdzenie 3.1) następująco (patrz podrozdział 4.1.2 w [97])

$$a = \hat{D}_2(\hbar)\mathcal{F}_2\hat{S}K_{\hat{A}}, \quad (110)$$

przy czym $\hat{A} = Op_W(a)$. Dla wygody dalszych rozważań wprowadźmy operator

$$\hat{W} = \hat{D}_2(\hbar)\mathcal{F}_2\hat{S}. \quad (111)$$

Jest on automorfizmem na przestrzeniach $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ oraz $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$, a także unitarnym automorfizmem na przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$. Wynika to wprost z faktu, że wszystkie operatory $\hat{D}_2(\hbar)$, \mathcal{F}_2 oraz \hat{S} również spełniają takie własności. Jeżeli symbol Weyla a jest rzeczywisty, to operator Weyla $Op_w(a)$ jest symetryczny (patrz podrozdział 4.2 w [97]). Mamy następujące twierdzenie (propozycja 162 z [97]).

Twierdzenie 3.2. Niech operatory $\hat{A} = Op_W(a)$ oraz $\hat{B} = Op_W(b)$ będą operatorami Hilberta-Schmidta (patrz rozdział 11 w [98]) na przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R})$. Wtedy zachodzi następująca własność

$$\text{Tr}\left(\hat{A}\hat{B}\right) = \text{Tr}\left(\hat{B}\hat{A}\right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} a(x, p)b(x, p)dx dp. \quad (112)$$

Twierdzenie 3.3. Niech $\hat{A} = Op_W(a)$ będzie operatorem klasy śladowej działającym na przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R})$, a także niech $a \in L^1(\mathbb{R}^2)$. Wtedy zachodzi następująca własność

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} a(x, p) dx dp. \quad (113)$$

Poniższa definicja będzie przydatna przy problemie ścisłego zdefiniowania wartości oczekiwanych w formalizmie funkcji Wignera (definicja 5.1.2 z [98])

Twierdzenie 3.4. Niech $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ oraz $a \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$. Wtedy operator Weyla $Op_W(a)$ jest jedynym operatorem $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ takim, że

$$\langle Op_W(a)\psi, \psi^* \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})} = \left\langle a, \hat{W}(\psi^* \otimes \psi) \right\rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2), \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)}. \quad (114)$$

W szczególnym przypadku, gdy $Op_W(a) : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$, lewą stronę równania (114) można zapisać następująco (patrz równanie (366))

$$\langle Op_W(a)\psi, \psi^* \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}), \mathcal{S}(\mathbb{R})} = \langle \psi, Op_W(a)\psi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} \quad (115)$$

Komentarz 3.1. Taka konstrukcja obserwabli ma sens tylko dla takich zmiennych dynamicznych, że przestrzeń Schwartza jest podzbiorem dziedzin odpowiadających im operatorów samosprzężonych. Warunek ten nie jest spełniony w przypadku niektórych operatorów istotnych w mechanice kwantowej. W szczególności problem ten napotykamy w przypadku hamiltonianów, w których energia potencjalna rośnie wykładniczo w nieskończoności. Spośród hamiltonianów wymienionych w podrozdziale 2.4 problem ten zachodzi dla hamiltonianów z potencjałem Morse'a oraz Konwenta.

3.2 Funkcja Wignera

W poprzednim rozdziale zajmowaliśmy się sformułowaniem teorii kwantowej przy użyciu funkcji falowej oraz wprowadziliśmy zasadnicze idee sformułowania tej teorii przy pomocy operatora gęstości. Takie podejście umożliwiło nam uwzględnienie w opisie stanów mieszanych. Oczywiście, nie wyczerpuje to wszystkich możliwości opisu układów kwantowych, ale niewątpliwie pozwala to zauważyć, że teoria kwantowa może być formułowana na różne sposoby. Jedno z takich sformułowań ma swoją genezę w uogólnieniu liouvillońskiego sformułowania mechaniki klasycznej, gdzie centralną rolę odgrywa pojęcie funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa określonej na przestrzeni fazowej. W takim podejściu należy jednak wbudować w strukturę przestrzeni fazowej zasadę nieokreśloności a następnie zmierzyć się z jej konsekwencjami. W rezultacie prowadzi to do dość zaskakującego wyniku, bowiem mechanika kwantowa może być postrzegana jako mechanika statystyczna z nieprzemianą algebrą obserwabli. Warto w tym miejscu nadmienić, że jednym ze skutków takiego postępowania jest utrata interpretacji pojedynczego punktu fazowego jako stanu układu na rzecz odpowiednio zdefiniowanych funkcji rozkładu, gdyż zasada nieokreśloności uniemożliwia nam jednoczesne wyznaczenie położenia oraz pędu. Cechą charakterystyczną tych funkcji jest to, że nie posiadają one wszystkich własności przynależnych do klasycznej funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w sensie teorii Kołmogorowa i stąd też są one nazywane funkcjami rozkładu gęstości quasi-prawdopodobieństwa [26, 102]. Funkcje te są ściśle związane z problemem kwantyzacji i uporządkowania operatorów, o czym wspomnimy nieco więcej w następnym podrozdziale. Najpopularniejsze i historycznie jedno z pierwszych przestrzenno-fazowych sformułowań mechaniki kwantowej jest związane z pojęciem *funkcji Wignera* jako funkcji opisującej stan układu kwantowego w przestrzeni fazowej.

To na takim sformułowaniu będziemy w większości bazowali w dalszej części rozprawy. Funkcja Wignera jest zdefiniowana następująco [25]

$$\varrho(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} \psi\left(x + \frac{y}{2}\right) \psi^*\left(x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{ipy}{\hbar}} dy, \quad \psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}), \quad (116)$$

gdzie ψ jest funkcją falową opisującą stan układu kwantowego. Powyższa definicja nie jest w pełni zadowalająca, gdyż w ogólności funkcja falowa układu kwantowego należy do przestrzeni $L^2(\mathbb{R})$. Możemy jednak poradzić sobie z tym problemem uogólniając definicję funkcji Wignera (116) w następujący sposób [103]

$$\varrho(x, p) = \text{l. i. m.}_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{|y| \leq R} \psi\left(x + \frac{y}{2}\right) \psi^*\left(x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{ipy}{\hbar}} dy, \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}), \quad (117)$$

gdzie l. i. m. oznacza granicę w normie $L^2(\mathbb{R}^2)$. Z kolei w przypadku stanów mieszanych uogólnienie powyższej definicji można zapisać następująco

$$\varrho(x, p) = \text{l. i. m.}_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{|y| \leq R} \rho\left(x + \frac{y}{2}, x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{ipy}{\hbar}} dy, \quad \rho \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2), \quad (118)$$

gdzie ρ jest jądrem całkowym operatora gęstości $\hat{\rho}$.

Funkcja Wignera ϱ jest symbolem Weyla operatora gęstości $\hat{\rho}$, w związku z czym można ją przedstawić następująco

$$\varrho(\cdot, \cdot; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\hat{W}\rho \right) (\cdot, \cdot; t). \quad (119)$$

(propozycja 117 z [98]) oraz wzór (111). Jako że każdy operator klasy śladowej jest operatorem Hilberta-Schmidta to przy pomocy tożsamości (112) możemy wyrazić czystość stanu kwantowego (87) opisanego operatorem gęstości $\hat{\rho}$ poprzez odpowiadającą mu funkcję Wignera ϱ

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}^2} \varrho^2(x, p) dx dp. \quad (120)$$

Definicja 3.3. Przez algebrę Feichtingera $\mathcal{S}_0(\mathbb{R})$ [104] rozumiemy zbiór wszystkich funkcji $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, takich że spełniony jest warunek

$$\hat{W}(\psi^* \otimes \psi) \in L^1(\mathbb{R}^2). \quad (121)$$

Jako że \hat{W} jest automorfizmem na $L^2(\mathbb{R}^2)$, dla funkcji falowej $\psi \in \mathcal{S}_0(\mathbb{R})$ odpowiadająca jej funkcja Wignera $\hat{W}(\psi^* \otimes \psi) \in L^1(\mathbb{R}^2) \cap L^2(\mathbb{R}^2)$. Algebra Feichtingera została szczegółowo omówiona w książce [99], a także w artykule przeglądowym [104]. Funkcja Wignera ma następujące własności

1. Jeżeli funkcja falowa $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, to odpowiadająca jej funkcja Wignera przyjmuje wartości rzeczywiste.
2. Jeżeli funkcja falowa $\psi \in \mathcal{S}_0(\mathbb{R})$, to

$$\int_{\mathbb{R}^2} \varrho(x, p) dx dp = \langle \psi, \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R})}. \quad (122)$$

Jest to prosta konsekwencja własności 3.3.

3. Jeżeli funkcja falowa $\psi \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$, to odpowiadająca jej funkcja Wignera ϱ ma dobrze określone rozkłady brzegowe (patrz propozycja 21 z [97]), tzn. że istnieją następujące całki

$$\int_{\mathbb{R}} \varrho(x, p) dp = |\psi(x)|^2, \quad (123)$$

oraz

$$\int_{\mathbb{R}} \varrho(x, p) dx = \left| (\hat{D}(\hbar)\mathcal{F}\psi)(p) \right|^2 \quad (124)$$

i są równe odpowiednio funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej oraz w przestrzeni pędowej.

4. Jeżeli funkcja falowa $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, to odpowiadająca jej funkcja Wignera jest ograniczona oraz ciągła (patrz propozycja 19 z [97]), to znaczy $\varrho \in L^\infty(\mathbb{R}^2) \cap C^0(\mathbb{R}^2)$.
5. W ogólnym przypadku, funkcja Wignera nie jest nieujemnie określona, bowiem może przyjmować wartości ujemne w niektórych obszarach przestrzeni fazowej. W szczególności można wykazać, że dla stanów czystych funkcja Wignera jest nieujemna jedynie dla stanów gaussowskich. Spostrzeżenie to jest treścią twierdzenia Hudsona [105] oraz jego uogólnienia na przypadek wielowymiarowych układów kwantowych [106]. W przypadku stanów mieszanych sytuacja się komplikuje i nie da się już tak łatwo scharakteryzować klasy wszystkich stanów, dla których funkcja Wignera jest nieujemna. W szczególności może to zachodzić również dla stanów nie będących stanami gaussowskimi. Pewne częściowe wyniki w ramach tego problemu zostały przedstawione chociażby w pracach [107, 108, 109].

Z przedstawionych wyżej własności 1, 2 oraz 3 wynika, że funkcja Wignera jest rzeczywista, unormowana do jedności oraz ma dobrze określone rozkłady brzegowe i tym samym mogłaby być uważana za funkcję rozkładu gęstości prawdopodobieństwa. Niemniej jednak własność 5 sprawia, że taka interpretacja nie da się utrzymać ze względu na przyjmowanie przez funkcję Wignera ujemnych wartości. Fakt ten często jest interpretowany jako przykład naruszenia zasady nieokreśloności Heisenberga (patrz str. 127 w [2]). Stąd też w literaturze przyjęło się traktować funkcję Wignera jako funkcję rozkładu quasi-prawdopodobieństwa [26]. Powyżej przedstawiono kilka wybranych własności funkcji Wignera, natomiast inne jej własności wraz z dowodami można znaleźć chociażby w pracy [110] lub pracy przeglądowej [102].

Wróćmy teraz do problemu wyznaczania wartości oczekiwanych zmiennych dynamicznych. Korzystając z (79) oraz (114), otrzymujemy następujący wzór na wartość oczekiwaną zmiennej dynamicznej, której odpowiada operator samosprzężony \hat{A} , którego rdzeniem jest $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, w stanie mieszanym zadanym operatorem gęstości (78)

$$\langle \hat{A} \rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^N p_n \langle a, \hat{W}(\psi^* \otimes \psi) \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}^2), \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)}. \quad (125)$$

3.3 Równanie Moyala

W podrozdziale 2.5 wyznaczaliśmy równanie ewolucji czasowej dla macierzy gęstości wychodząc od równania Schrödingera i definicji macierzy gęstości. Korzystając z (110) wyrażającego funkcję Wignera poprzez macierz gęstości oraz z równania von Neumanna dla macierzy gęstości (96), otrzymujemy równanie ewolucji czasowej dla funkcji Wignera

$$i\hbar \partial_t \varrho(x, p; t) = \hat{D}_2(\hbar) \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p} \hat{S} \left(\frac{\hbar^2}{2m} (-\partial_x^2 + \partial_y^2) + U(x) - U(y) \right) \hat{S}^{-1} \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y}^{-1} \hat{D}_2^{-1}(\hbar) \varrho(x, p; t), \quad (126)$$

co może zostać równoważnie przedstawione jako

$$\partial_t \varrho(x, p; t) = \left(-\frac{1}{m} p \partial_x - \frac{i}{\hbar} \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p} \left(U \left(x + \frac{1}{2} y \right) - U \left(x - \frac{1}{2} y \right) \right) \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y}^{-1} \right) \varrho(x, p; t). \quad (127)$$

Wprowadzimy teraz pomocnicze operatory

$$(\hat{A}f)(x, p) = -\frac{i}{m} p \partial_x f(x, p), \quad f \in \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2)), \quad (128)$$

gdzie $\mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$ oznacza obraz przestrzeni Sobolewa $H^2(\mathbb{R}^2)$ względem częściowej transformaty Fouriera względem drugiej zmiennej, oraz

$$\hat{B}f(x, p) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p} \left(U \left(x + \frac{1}{2} y \right) - U \left(x - \frac{1}{2} y \right) \right) \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y}^{-1} f(x, p), \quad f \in L^2(\mathbb{R}^2). \quad (129)$$

Pokażemy teraz, że zdefiniowane powyżej operatory \hat{A} oraz \hat{B} są samosprężone. Operator \hat{A} jest unitarnie równoważny do operatora mnożenia \hat{A}_1

$$(\hat{A}_1 f)(\lambda, p) = \frac{1}{m} \lambda p f(\lambda, p) \quad (130)$$

z dziedziną $D(\hat{A}_1) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) : \lambda p f(\lambda, p) \in L^2(\mathbb{R}^2)\}$, przy czym zachodzi $\hat{A}_1 = \mathcal{F}_1 \hat{A} \mathcal{F}_1^{-1}$. Operator mnożenia \hat{A}_1 jest samosprężony zgodnie z propozycją 9.30 z książki [61], stąd operator \hat{A} również jest samosprężony. Operator \hat{B} jest unitarnie równoważny do operatora

$$(\hat{B}_1 f)(x, y) = \frac{1}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{1}{2} y \right) - U \left(x - \frac{1}{2} y \right) \right) f(x, y), \quad (131)$$

zadanego jako $\hat{B}_1 = \mathcal{F}_2^{-1} \hat{B} \mathcal{F}_2$, gdzie $U \in L^\infty(\mathbb{R})$, stąd \hat{B}_1 jest ograniczonym operatorem mnożenia przez funkcję o wartościach rzeczywistych, stąd wynika, że jest on operatorem symetrycznym. Jego dziedziną jest cała przestrzeń $L^2(\mathbb{R}^2)$ co prowadzi do wniosku, że operator \hat{B}_1 jest samosprężony. Stąd z uwagi na unitarną równoważność operator \hat{B} również jest operatorem samosprężonym, a jego dziedziną jest cała przestrzeń $L^2(\mathbb{R}^2)$. Korzystając z wprowadzonych powyżej operatorów, równanie Moyala (127) możemy przedstawić w następującej postaci

$$\partial_t \varrho(\cdot, \cdot; t) = -i (\hat{A} + \hat{B}) \varrho(\cdot, \cdot; t). \quad (132)$$

Na podstawie twierdzenia 2.6 wnioskujemy, że operator $\hat{A} + \hat{B}$ z dziedziną $D(\hat{A} + \hat{B}) = \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$ jest operatorem samosprężonym, zatem na podstawie twierdzenia Stone'a (patrz twierdzenie VIII.7 w [60]) generuje jednoparametrową silnie ciągłą grupę operatorów unitarnych. Słabe rozwiązanie równania (127) ma następującą postać (patrz podrozdział 2.3)

$$\varrho(\cdot, \cdot; t) = e^{-it(\hat{A} + \hat{B})} \varrho_0(\cdot, \cdot), \quad (133)$$

przy czym $\varrho_0 \in L^2(\mathbb{R}^2)$ jest funkcją Wignera w chwili początkowej. Przyjmując mocniejsze założenie $\varrho_0 \in D(\hat{A} + \hat{B}) = \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$, rozwiązanie podane w równaniu (133) stanie się rozwiązaniem silnym równania (127). Rozwijając funkcję $U(x \pm y/2)$ w szereg Taylora wokół punktu x , otrzymujemy

$$U \left(x \pm \frac{y}{2} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} U^{(n)}(x) \left(\pm \frac{y}{2} \right)^n, \quad (134)$$

przy czym symbol $U^{(n)}(x)$ został użyty do oznaczenia n -tej pochodnej funkcji $U(x)$. Uwzględnienie tego rozwinięcia w równaniu (127) prowadzi do formalnej postaci równania Moyala [25], które w literaturze fizycznej zazwyczaj jest zapisywane następująco

$$\partial_t \varrho(x, p; t) + \frac{p}{m} \partial_x \varrho(x, p; t) - U'(x) \partial_p \varrho(x, p; t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{2n} U^{(2n+1)}(x) \partial_p^{2n+1} \varrho(x, p; t). \quad (135)$$

Równanie ruchu dla funkcji Wignera w postaci wyrażonej wzorem (135) ma dość sugestywną postać, bowiem można nadać znaczenie fizyczne jego poszczególnym wyrazom, odwołując się bezpośrednio do Liouville'owskiego sformułowania mechaniki klasycznej. Na początek zauważmy, że dla przypadku cząstki swobodnej (tj. gdy $U(x) \equiv 0$), równanie Moyala (135) jest tożsame z równaniem Liouville'a,

$$\partial_t \varrho(x, p; t) + \frac{p}{m} \partial_x \varrho(x, p; t) = 0, \quad (136)$$

które opisuje ewolucję czasową rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w klasycznej mechanice statystycznej. Z kolei dla potencjałów wybranych w postaci wielomianów rzędu drugiego, równanie Moyala (135) przyjmie postać równania Liouville'a dla cząstki poruszającej się pod działaniem siły harmoniczej $F(x)$, tzn.

$$\partial_t \varrho(x, p; t) + \frac{p}{m} \partial_x \varrho(x, p; t) + F(x) \partial_p \varrho(x, p; t) = 0. \quad (137)$$

Zauważmy zresztą, że równanie Liouville wyrażone wzorem (137) nie zmieni swojej postaci, gdy zrezygnujemy z założenia o sile harmoniczej na rzecz dowolnych sił klasycznych, gdyż w takim przypadku siła $F(x)$ jest związana z energią potencjalną $U(x)$ wzorem: $F(x) = -U'(x)$, gdzie symbol *prime* został użyty do oznaczenia pierwszej pochodnej. Zwróćmy też uwagę, że zastosowanie metody charakterystyk do rozwiązywania równania Liouville'a (137) pozwala stwierdzić, że każdy punkt funkcji przyjętej jako warunek początkowy porusza się wzdłuż swojej trajektorii fazowej niezależnie od trajektorii pozostałych punktów, które są wyznaczone przez rozwiązania układu równań Hamiltona

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial_p H(x, p) \\ -\partial_x H(x, p) \end{bmatrix}, \quad (138)$$

gdzie $H(x, p)$ jest funkcją Hamiltona badanego układu, przy czym w naszym przypadku mamy $H(x, p) = p^2/(2m) + U(x)$. Na podstawie przedstawionej dyskusji można wnioskować, że ewolucja czasowa funkcji Wignera wynikająca z rozwiązania równania Moyala (135) dla którego prawa strona jest równa zero jest wyznaczona przez równania Hamiltona (138). Zatem odtworzenie dynamiki klasycznej funkcji Wignera na podstawie równania Moyala (135) może być rozumiane jako przejście graniczne związane z $\hbar \rightarrow 0$. Tym samym wnioskujemy, że prawa strona równania Moyala (135) reprezentuje poprawki kwantowe kolejnych rzędów względem parametru \hbar do klasycznego równania Liouville'a. Jednakże przy rozważaniu tego typu przejścia granicznego należy zachować pewną ostrożność, gdyż \hbar jako takie przyjmuje stałą wartość, natomiast wraz ze wzrostem rozmiarów układu, który rozpatrujemy, będzie ona proporcjonalnie coraz mniejsza w stosunku do wartości działania. Z drugiej strony można spróbować też spojrzeć na rozwiązanie równania Moyala w podobny sposób. Okazuje się wówczas, że uwzględnienie poprawek kwantowych zawartych po prawej stronie równania Moyala (135) pozwala formalnie zapisać równania ewolucji czasowej każdego punktu początkowej funkcji Wignera w postaci uogólnionych równań Hamiltona [111]

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} x(t) \\ p(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{p}{m} \\ -U'(x) + \frac{\hbar^2}{24} U'''(x) \frac{1}{\varrho} \partial_p^2 \varrho + \dots \end{bmatrix}. \quad (139)$$

Jednak w tym przypadku nie można już traktować trajektorii poszczególnych punktów funkcji Wignera będącej warunkiem początkowym dla równania Moyala jako niezależnych, gdyż te zależą od stanu układu jako całości, co odzwierciedla jawna zależność od ϱ po prawej stronie równania (139). W zdecydowanej większości interesujących nas przypadków równanie Moyala (127) nie daje się rozwiązać analitycznie, co wymusza na nas zastosowanie metod numerycznych. Z uwagi na fakt, że operatory \hat{A} oraz \hat{B} ze wzoru (133) nie komutują ze sobą, obliczenie działania operatora unitarnego $e^{-it(\hat{A}+\hat{B})}$ na funkcję Wignera jest problematyczne numerycznie. Opisowi metody numerycznej pozwalającej rozwiązać ten problem wraz z oszacowaniem jej błędu został poświęcony kolejny rozdział.

Nie jest to tematem tej pracy, ale bardzo ciekawe i systematyczne podejście do opisu układów klasycznych, kwantowych oraz relacji między nimi umożliwia teoria C^* -algebr. W przystępny sposób jest to przedstawione chociażby w podręczniku [23].

4 Numeryczne metody obliczania eksponenty operatorowej

W tym rozdziale skoncentrujemy się na faktoryzacji eksponenty operatorowej oraz dyskretyzacji transformat Fouriera. Są to niezwykle ważne zagadnienia, stanowiące istotę konstrukcji algorytmu do symulacji numerycznej równania Moyal'a. Szczególną uwagę poświęcimy faktoryzacji Stranga drugiego rzędu, dla której przeprowadzimy dokładne szacowanie błędu lokalnego oraz globalnego. Ponadto przedstawimy też metodę China czwartego rzędu.

4.1 Ogólne metody faktoryzacji eksponenty operatorowej

W wielu zastosowaniach fizyki operator ewolucji czasowej można zapisać w postaci $e^{it(\hat{A}+\hat{B})}$, przy czym w większości przypadków nie jest łatwo obliczyć numerycznie wynik działania takiego operatora na funkcję [112, 113]. Z drugiej strony najczęściej znacznie łatwiej jest numerycznie wyznaczyć działanie operatorów w postaci $e^{it\hat{A}}$ oraz $e^{it\hat{B}}$, które w przypadku kwantowomechanicznym okazują się najczęściej unitarnie równoważne poprzez odpowiednią transformatę Fouriera do operatora mnożenia przez funkcję, co umożliwia bardzo sprawną implementację numeryczną, możemy też skorzystać z algorytmu szybkiej transformaty Fouriera. Co prawda jeżeli operator $\hat{A} + \hat{B}$ jest operatorem samosprzężonym, jak to będzie miało miejsce w naszym przypadku, to jedno ze sformułowań twierdzenia spektralnego dla operatorów samosprzężonych mówi o tym, że istnieje transformacja unitarna, względem której operator ten jest unitarnie równoważny do operatora mnożenia na pewnej przestrzeni L^2 (patrz twierdzenie 10.10 w [61]). Jednak w przypadku ogólnym nie istnieje metoda konstrukcji takiej transformacji unitarnej dla zadanego operatora samosprzężonego, a nawet jeżeli udałoby się to zrobić, w ogólności wcale nie musi istnieć efektywna i dokładna implementacja numeryczna takiej transformacji. Przedstawione powyżej problemy prowadzą nas do pilnego zapotrzebowania na precyzyjne przybliżenie operatora $e^{it(\hat{A}+\hat{B})}$ poprzez iloczyn operatorów w postaci $e^{it\hat{A}}$ oraz $e^{it\hat{B}}$. Przedstawione poniżej twierdzenie, znane jako Twierdzenie Trottera (twierdzenie VIII.31 z [60]) mówi nam o zbieżności takiego przybliżenia w silnej topologii operatorowej.

Twierdzenie 4.1. Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta, a $\hat{A} : \mathcal{H} \supseteq D(\hat{A}) \rightarrow \mathcal{H}$ oraz $\hat{B} : \mathcal{H} \supseteq D(\hat{B}) \rightarrow \mathcal{H}$ niech będą operatorami samosprzężonymi. Wtedy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| \left(e^{\frac{it}{n}\hat{A}} e^{\frac{it}{n}\hat{B}} \right)^n \psi - e^{it(\hat{A}+\hat{B})} \psi \right\|_{\mathcal{H}} = 0, \quad \psi \in \mathcal{H}. \quad (140)$$

W przypadku symulacji numerycznej możemy oczywiście wykonać jedynie skończoną liczbę operacji działania eksponentami operatorowymi, jednak powyższe twierdzenie może naprowadzić nas na najprostszy schemat faktoryzacji, to jest faktoryzację Trottera-Liego [54]

$$e^{-it(\hat{A}+\hat{B})} = e^{-it\hat{A}} e^{-it\hat{B}} + \mathcal{O}(t^2). \quad (141)$$

Powyższy wzór jest jasny, jeżeli operatory \hat{A} oraz \hat{B} są operatorami ograniczonymi, wynika on wprost z rozwinięcia lewej strony w szereg. Zagadnienie faktoryzacji zostało omówione chociażby w pracy [114] czy w podrozdziale II.5 z [115]. Przypadek nieograniczony będzie szeregowo rozpatrywany w następnym podrozdziale. Ogólny schemat faktoryzacji ma postać

$$e^{-it(\hat{A}+\hat{B})} = \prod_{j=1}^N e^{-it\beta_j\hat{A}} e^{-it\gamma_j\hat{B}} + \mathcal{O}(t^{N+1}), \quad (142)$$

dla pewnej wartości N powiązanej z liczbą eksponent w konkretnych faktoryzacjach. Wartości parametrów $(\beta_j)_{j=1}^N$ oraz $(\gamma_j)_{j=1}^N$ wyznacza się na ogół korzystając z rozwinięć Zassenhauza

i Bakera-Campbella-Hausdorffa, a także z rozwinięcia Taylora i żądając, by wszystkie wyrazy aż do określonego rzędu w zmiennej t pokrywały się między wyjściową eksponentą, a jej przybliżeniem poprzez określoną faktoryzację. W pracy [116] zostało pokazane, że jeżeli ograniczymy się do rzeczywistych i dodatnich wartości tych parametrów w faktoryzacji (142), to dla $n > 2$ niektóre z tych parametrów muszą być ujemne, a także mogą przyjmować duże wartości, co sprawia problemy numeryczne [52]. Jedną z możliwych metod obejścia problemu ujemnych współczynników jest uwzględnienie w faktoryzacji nie tylko eksponent operatorów \hat{A} oraz \hat{B} , ale również ich wielokrotnych komutatorów. W najprostszym przypadku należy uwzględnić dodatkowo komutator $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$

$$e^{-it(\hat{A}+\hat{B})} = \prod_{j=1}^N e^{-it\beta_j\hat{A}} e^{-it\gamma_j\hat{B}+it^3\delta_j[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]]} + \mathcal{O}(t^{n+1}). \quad (143)$$

W przypadku równań mechaniki kwantowej, jak równanie Schrödingera, czy równanie Moyala, które będziemy rozwiązywać numerycznie w dalszej części pracy, podwójny komutator $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]$ jest unitarnie równoważny do operatora mnożenia poprzez taką samą transformację unitającą jak operator B (dla równania Schrödingera jest to omówione w pracy [52], natomiast dla równania Moyala będziemy to omawiać w dalszej części pracy, patrz równania (273), (274)), więc umieszczenie ich razem w wykładniku jednej eksponenty w formule (143) nie prowadzi do dodatkowych trudności w implementacji numerycznej takiego algorytmu. Niestety dla komutatorów wyższych rzędów nie jest to w ogólności prawdą. Alternatywna metoda obejścia problemu ujemnych współczynników w rozwinięciu (142) została przedstawiona w pracy [117], gdzie zaproponowano wprowadzenie współczynników $(\beta_j)_j$ oraz $(\gamma_j)_j$ o wartościach zespolonych z nieujemną częścią rzeczywistą. Jeżeli operatory \hat{A} i \hat{B} są ograniczone, to notacja $\mathcal{O}(t^{n+1})$ jest jasna. Wynik ten można elementarnie uzyskać rozwijając wszystkie eksponenty zgodnie ze wzorem Taylora, a następnie zauważając, że wszystkie wyrazy do rzędu n włącznie się skracają.

4.2 Faktoryzacje drugiego rzędu

W tym podrozdziale zajmiemy się szczegółową analizą faktoryzacji drugiego rzędu eksponenty operatorowej

$$e^{\Delta t(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\frac{1}{2}\Delta t\hat{A}} e^{\Delta t\hat{B}} e^{\frac{1}{2}\Delta t\hat{A}} + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (144)$$

zwanej faktoryzacją Stranga, bądź faktoryzacją Marchuka-Stranga. Jest to szczególny przypadek ogólnego schematu faktoryzacji (142) dla $N = 2$ oraz $\beta_1 = \frac{1}{2}$, $\gamma_1 = 1$, $\beta_2 = \frac{1}{2}$, $\gamma_2 = 0$. Powyższe wyrażenie jest prawdziwe w przypadku operatorów ograniczonych, wtedy wystarczy rozwinąć wszystkie eksponenty zgodnie ze wzorem Taylora, by zauważyć że wyrazy do rzędu drugiego włącznie względem Δt się skracają, co uzasadnia użycie oznaczenia $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. W przypadku operatorów, gdy przynajmniej jeden z operatorów \hat{A} oraz \hat{B} jest nieograniczony, sytuacja mocno się komplikuje. Na ogół konieczne jest przyjęcie pewnych założeń co do tych operatorów, a także rozpatrywanie ich nie na całej przestrzeni Hilberta, a jedynie na jej pewnym gęstym podzbiórze. Problem ten został poruszony chociażby w pracach [118, 119, 120]. W przypadku równania Moyala (127) mamy

$$\hat{A}f(x, p) = \frac{p}{m}\partial_x f(x, p), \quad f \in \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2)), \quad (145)$$

oraz

$$\hat{B}f(x, p) = \frac{1}{i\hbar}\mathcal{F}_{2,y \rightarrow p} \left(U \left(x + \frac{1}{2}y \right) - U \left(x - \frac{1}{2}y \right) \right) \mathcal{F}_{2,p \rightarrow y}^{-1} f(x, p), \quad f \in L^2(\mathbb{R}^2), \quad (146)$$

gdzie $U \in L^\infty(\mathbb{R})$ jest energią potencjalną. Prowadzi to do schematu spectral split-operator

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2} \lambda p\right) \mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, p)} \exp(-i\Delta t U_\Delta(x, y)) \\ &\cdot \mathcal{F}_{(\lambda, p) \rightarrow (x, y)}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2} \lambda p\right) \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t_0), \end{aligned} \quad (147)$$

where $U_\Delta(x, y) = U\left(x + \frac{y}{2}\right) - U\left(x - \frac{y}{2}\right)$.

4.3 Oszacowanie błędu lokalnego faktoryzacji drugiego rzędu – ujęcie abstrakcyjne

W tym podrozdziale zajmiemy się oszacowaniem od góry błędu lokalnego dla faktoryzacji Stranga. Jest to błąd po wykonaniu jednego kroku czasowego i definiujemy go jak przedstawiono poniżej.

Definicja 4.1. Przez błąd lokalny metody faktoryzacji Stranga przybliżającej operator $e^{t(\hat{A}+\hat{B})}$ poprzez operator $e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}$ rozumiemy następującą normę

$$\|e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f\|_X, \quad f \in Y, \quad (148)$$

przy czym Y jest pewnym gęstym podzbiorem przestrzeni Hilberta X , dobieranym w zależności od postaci operatorów \hat{A} oraz \hat{B} .

Zanim zajmiemy się szacowaniem wspomnianego błędu lokalnego, przedstawimy najpierw dwa lematy, które będą do niego użyteczne.

Lemat 4.1. Niech X będzie przestrzenią Hilberta, $\hat{A} : X \supset D(\hat{A}) \rightarrow X$ operatorem skończone samosprzężonym, a $\hat{B} \in \mathcal{B}(X)$. Wtedy zachodzi

$$e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f = e^{t\hat{A}}f + \frac{t}{2} \left(e^{t\hat{A}}\hat{B} + \hat{B}e^{t\hat{A}} \right) f + \frac{t^2}{8} \left(e^{t\hat{A}}\hat{B}^2 + 2\hat{B}e^{t\hat{A}}\hat{B} + \hat{B}^2e^{t\hat{A}} \right) f + \hat{R}f, \quad (149)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{R}f &= \frac{1}{16}e^{t\hat{A}} \int_0^t (t-s)^2 e^{\frac{s}{2}\hat{B}} \hat{B}^3 f ds + \frac{t}{8}\hat{B}e^{t\hat{A}} \int_0^t (t-s)e^{\frac{s}{2}\hat{B}} \hat{B}^2 f ds \\ &+ \frac{t^2}{16}\hat{B}^2e^{t\hat{A}} \int_0^t e^{\frac{s}{2}\hat{B}} \hat{B} f ds, \quad f \in X \end{aligned} \quad (150)$$

oraz

$$\|\hat{R}\| \leq \frac{7}{48}t^3\|\hat{B}\|^3. \quad (151)$$

Dowód. Stosując wzór (E_3) z podrozdziału 11.8 w [121]

$$e^{t\hat{C}}f = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{t^k}{k!} \hat{C}^k f + \frac{1}{(n-1)!} \int_0^t (t-s)^{n-1} e^{t\hat{C}} \hat{C}^n f ds, \quad (152)$$

$f \in D(\hat{C}^n)$ for $n = 3$ do pierwszej eksponenty po lewej stronie (149) i wprowadzając pomocniczy operator $\hat{B}_1 = \hat{B}/2$, dostajemy

$$\begin{aligned} e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f &= e^{t\hat{B}_1}e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f \\ &= e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f + t\hat{B}_1e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f + \frac{t^2}{2}\hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f \\ &+ \frac{1}{2} \int_0^t (t-s)^2 e^{s\hat{B}_1} \hat{B}_1^3 e^{t\hat{A}} e^{t\hat{B}_1} f ds, \end{aligned} \quad (153)$$

$f \in X$. Korzystając z (152) dla $n = 3$ i dla operatora $e^{t\hat{B}_1}$ w pierwszym składniku po prawej stronie równania (153), dostajemy

$$e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f = e^{t\hat{A}}f + te^{t\hat{A}}\hat{B}_1f + \frac{t^2}{2}e^{t\hat{A}}\hat{B}_1^2f + \frac{1}{2}e^{t\hat{A}}\int_0^t(t-s)^2e^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1^3f ds, \quad (154)$$

$f \in X$. Korzystając z (152) dla $n = 2$ i dla operatora $e^{t\hat{B}_1}$ w drugim składniku po prawej stronie równania (153), otrzymujemy

$$t\hat{B}_1e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f = t\hat{B}_1e^{t\hat{A}}f + t^2\hat{B}_1e^{t\hat{A}}\hat{B}_1f + t\hat{B}_1e^{t\hat{A}}\int_0^t(t-s)e^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1^2f ds, \quad (155)$$

$f \in X$. Korzystając z (152) dla $n = 1$ i dla operatora $e^{t\hat{B}_1}$ w trzecim składniku po prawej stronie równania (153), dostajemy

$$\frac{t^2}{2}\hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}_1}f = \frac{t^2}{2}\hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}f + \frac{t^2}{2}\hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}\int_0^te^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1f ds, \quad (156)$$

$f \in X$. Wstawiając (154), (155) oraz (156) do równania (153), otrzymujemy

$$e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f = e^{t\hat{A}}f + t\left(e^{t\hat{A}}\hat{B}_1 + \hat{B}_1e^{t\hat{A}}\right)f + \frac{t^2}{2}\left(e^{t\hat{A}}\hat{B}_1^2 + 2\hat{B}_1e^{t\hat{A}}\hat{B}_1 + \hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}\right)f + \hat{R}f, \quad (157)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{R}f &= \frac{1}{2}e^{t\hat{A}}\int_0^t(t-s)^2e^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1^3f ds + t\hat{B}_1e^{t\hat{A}}\int_0^t(t-s)e^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1^2f ds \\ &\quad + \frac{t^2}{2}\hat{B}_1^2e^{t\hat{A}}\int_0^te^{s\hat{B}_1}\hat{B}_1f ds. \end{aligned} \quad (158)$$

Podstawiając $\hat{B}_1 = \hat{B}/2$ w (157) oraz (158), odtwarzamy równania (149) oraz (150). Korzystając z faktu, że \hat{A} oraz \hat{B}_1 są skośnie samosprężone, otrzymujemy ograniczenie

$$\|\hat{R}\| \leq \|\hat{B}_1\|^3 \left(\frac{1}{2} \int_0^t (t-s)^2 ds + t \int_0^t (t-s) ds + \frac{t^2}{2} \int_0^t ds \right) = \frac{7}{6}t^3 \|\hat{B}_1\|^3. \quad (159)$$

Podstawiając $\hat{B}_1 = \hat{B}/2$, odtwarzamy równanie (151), co kończy dowód. \square

Lemat 4.2. Niech X będzie przestrzenią Hilberta, a $h : \mathbb{R}^2 \rightarrow X$ niech będzie funkcją klasy C_1 . Wtedy dla $(s_0, \sigma_0), (s, \sigma) \in \Omega_t$, gdzie

$$\Omega_t = \{(s, \sigma) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq s \leq t, 0 \leq \sigma \leq t - s\}, \quad t > 0,$$

zachodzi następująca nierówność

$$\left\| \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds - \frac{t^2}{2} h(s_0, \sigma_0) \right\|_X \leq c_1(s_0) \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_s h(s, \sigma)\|_X + c_2(\sigma_0) \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_\sigma h(s, \sigma)\|_X, \quad (160)$$

gdzie

$$c_1(s_0) = \int_0^t \int_0^{t-s} |s - s_0| d\sigma ds \quad (161)$$

oraz

$$c_2(\sigma_0) = \int_0^t \int_0^{t-s} |\sigma - \sigma_0| d\sigma ds. \quad (162)$$

Dowód. Zaczniemy od wprowadzenia funkcji pomocniczej $H : \mathbb{R} \rightarrow X$,

$$H(\omega) = h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)), \quad (163)$$

gdzie $(s, \sigma), (s_0, \sigma_0) \in \Omega_t$. Zgodnie z twierdzeniem VII.9.2 z [63], możemy zapisać rozwinięcie Taylora dla funkcji H wokół punktu $\omega = 0$

$$H(\omega) = H(0) + \int_0^\omega H'(\omega_1) d\omega_1. \quad (164)$$

Wstawiając (164) oraz $\omega = 1$ do (163), otrzymujemy

$$\begin{aligned} h(s, \sigma) &= h(s_0, \sigma_0) + (s - s_0) \int_0^1 \partial_1 h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega \\ &\quad + (\sigma - \sigma_0) \int_0^1 \partial_2 h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega, \end{aligned} \quad (165)$$

gdzie $\partial_1 h(s, \sigma) \equiv \partial_s h(s, \sigma)$ oraz $\partial_2 h(s, \sigma) \equiv \partial_\sigma h(s, \sigma)$. Reguły różniczkowania funkcji o wartościach wektorowych, analogiczne jak dla standardowych funkcji o wartościach liczbowych, zostały dokładnie omówione w rozdziale VII z książki [63]. Całkując obie strony równania (165) po obszarze Ω_t , otrzymujemy

$$\begin{aligned} &\int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds - \frac{t^2}{2} h(s_0, \sigma_0) \\ &= \int_0^t \int_0^{t-s} (s - s_0) \int_0^1 \partial_s h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega d\sigma ds \\ &\quad + \int_0^t \int_0^{t-s} (\sigma - \sigma_0) \int_0^1 \partial_\sigma h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega d\sigma ds. \end{aligned} \quad (166)$$

Biorąc obustronnie normę operatorową i korzystając z elementarnych własności całki Bochnera, dostajemy

$$\begin{aligned} &\left\| \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds - \frac{t^2}{2} h(s_0, \sigma_0) \right\|_X \\ &\leq \int_0^t \int_0^{t-s} |s - s_0| \left\| \int_0^1 \partial_s h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega \right\|_X d\sigma ds \\ &\quad + \int_0^t \int_0^{t-s} |\sigma - \sigma_0| \left\| \int_0^1 \partial_\sigma h(s_0 + \omega(s - s_0), \sigma_0 + \omega(\sigma - \sigma_0)) d\omega \right\|_X d\sigma ds \\ &\leq \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_s h(s, \sigma)\|_X \int_0^t \int_0^{t-s} |s - s_0| d\sigma ds \\ &\quad + \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_\sigma h(s, \sigma)\|_X \int_0^t \int_0^{t-s} |\sigma - \sigma_0| d\sigma ds, \end{aligned} \quad (167)$$

co kończy dowód. \square

Mając lematy 4.1 oraz 4.2, możemy teraz zająć się twierdzeniem dotyczącym oszacowania błędu lokalnego dla faktoryzacji Stranga w ujęciu abstrakcyjnym.

Twierdzenie 4.2. Niech \hat{A} oraz \hat{B} będą operatorami skończie samosprężonymi działającym w przestrzeni Hilberta X , przy czym $\hat{B} \in \mathcal{B}(X)$, a także niech Y będzie takim gęstym podzbiorem przestrzeni Hilberta X , że zachodzi: $Y \subseteq \mathcal{D}([\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]) \subseteq X$ oraz spełnione są warunki

$e^{t\hat{A}}Y \subseteq Y$, gdzie $t \in \mathbb{R}$ oraz $\hat{B}Y \subseteq Y$. Wtedy błąd lokalny faktoryzacji Stranga jest następująco ograniczony od góry

$$\begin{aligned} \|e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f\|_X &\leq t^3 \left(\frac{15}{48} \|\hat{B}\|^3 \|f\|_X + \max_{(s,\sigma) \in \Omega_t} \frac{5}{24} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s-\sigma)\hat{A}}f \right\|_X \right. \\ &\quad + \frac{11}{24} \|\hat{B}\| \max_{(s,\sigma) \in \Omega_t} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}}f \right\|_X \\ &\quad \left. + \frac{1}{12} \max_{s \in [0,t]} \left\| \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}}f \right\|_X \right), \quad f \in Y \end{aligned} \quad (168)$$

przy czym $\Omega_t = \{(s, \sigma) \in \mathbb{R}^2 : (0 \leq s \leq t) \wedge (0 \leq \sigma \leq t - s)\}$, $t > 0$.

Dowód. Do oszacowania błędu lokalnego faktoryzacji Stranga będziemy korzystać z narzędzi podobnych do tych użytych w pracy [118], jednak będziemy postępować bardziej ostrożnie, by oszacować stałą proporcjonalności przy t^3 przez konkretną wartość, a nie wyłącznie pokazać, że taka stała istnieje. Jako że \hat{A} , \hat{B} oraz $\hat{A}+\hat{B}$ są operatorami skończone samosprzężonymi w X , każdy z nich generuje jednoparametrową silnie ciąglą grupę operatorów unitarnych na X . Korzystając z wniosku 1.7 z rozdziału III w książce [64], otrzymujemy

$$e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f = e^{t\hat{A}}f + \int_0^t e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s)(\hat{A}+\hat{B})}f ds. \quad (169)$$

Korzystając z tej formuły (zwaną nieraz formułą uzmienniania stałej) jeszcze dwa razy, dostajemy

$$e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f = e^{t\hat{A}}f + \int_0^t e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s)\hat{A}}f ds + \int_0^t \int_0^{t-s} e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{\sigma\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s-\sigma)\hat{A}}f d\sigma ds + \hat{R}_2f, \quad (170)$$

gdzie

$$\hat{R}_2f = \int_0^t \int_0^{t-s} \int_0^{t-s-\sigma} e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{\sigma\hat{A}}\hat{B}e^{r\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s-\sigma-r)(\hat{A}+\hat{B})}f dr d\sigma ds \quad (171)$$

oraz

$$\|\hat{R}_2\| \leq \|\hat{B}\|^3 \int_0^t \int_0^{t-s} \int_0^{t-s-\sigma} dr d\sigma ds = \frac{t^3}{6} \|\hat{B}\|^3. \quad (172)$$

Korzystając z (170) oraz lematu 4.1, możemy zapisać

$$e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f = \hat{D}_1f + \hat{D}_2f + \hat{R}f - \hat{R}_2f, \quad (173)$$

gdzie

$$\hat{D}_1f = \frac{t}{2} \left(e^{t\hat{A}}\hat{B} + \hat{B}e^{t\hat{A}} \right) f - \int_0^t e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s)\hat{A}}f ds \quad (174)$$

oraz

$$\hat{D}_2f = \frac{t^2}{8} \left(e^{t\hat{A}}\hat{B}^2 + 2\hat{B}e^{t\hat{A}}\hat{B} + \hat{B}^2e^{t\hat{A}} \right) f - \int_0^t \int_0^{t-s} e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{\sigma\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s-\sigma)\hat{A}}f d\sigma ds. \quad (175)$$

Wprowadzając funkcję pomocniczą $g : \mathbb{R} \rightarrow X$, $g(s) = e^{s\hat{A}}\hat{B}e^{(t-s)\hat{A}}f$, $f \in Y$, możemy wyrazić \hat{D}_1f jako błąd kwadratury dla pewnej całki Bochnera

$$\hat{D}_1f = \frac{t}{2} (g(0) + g(t)) - \int_0^t g(s) ds, \quad (176)$$

konkretnie jest to błąd dla metody trapezów. W przypadku całek pojedynczych funkcji o wartościach liczbowych ogólnym narzędziem do szacowania błędów kwadratur jest twierdzenie o jądrze Peano (patrz rozdział 13 w [122]). Okazuje się, że twierdzenie to ma swoje uogólnienie na przypadek całek pojedynczych funkcji o wartościach wektorowych [123, 124]. Dla błędów metody trapezów zastosowanej do całki Bochnera otrzymujemy analogiczny wynik, jak w przypadku zwykłej całki funkcji o wartościach liczbowych

$$\left\| \frac{t}{2} (g(0) + g(t)) - \int_0^t g(s) ds \right\|_X \leq \frac{t^3}{12} \max_{s \in [0, t]} \|g''(s)\|_X, \quad (177)$$

jedynie w miejsce wartości bezwzględnych pojawiły się odpowiednie normy. Druga pochodna funkcji g ma następującą postać

$$g''(s) = e^{s\hat{A}} \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}} f, \quad (178)$$

w związku z czym, korzystając dodatkowo ze wzoru (177), otrzymujemy oszacowanie

$$\begin{aligned} \|\hat{D}_1 f\|_X &\leq \frac{t^3}{2} \max_{s \in [0, t]} \left\| \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}} f \right\|_X \int_0^1 \theta(1-\theta) d\theta \\ &= \frac{t^3}{12} \max_{s \in [0, t]} \left\| \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}} f \right\|_X. \end{aligned} \quad (179)$$

Wprowadzając funkcję pomocniczą $h : \mathbb{R}^2 \rightarrow X$, $h(s, \sigma) = e^{s\hat{A}} \hat{B} e^{\sigma\hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f$, $f \in Y$, możemy wyrazić $\hat{D}_2 f$ następująco

$$\begin{aligned} \hat{D}_2 f &= \frac{t^2}{8} (h(t, 0) + 2h(0, t) + h(0, 0)) - \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds \\ &= \frac{1}{4} \left(\frac{t^2}{2} h(t, 0) - \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{t^2}{2} h(0, t) - \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds \right) \\ &+ \frac{1}{4} \left(\frac{t^2}{2} h(0, 0) - \int_0^t \int_0^{t-s} h(s, \sigma) d\sigma ds \right). \end{aligned} \quad (180)$$

Jest to błąd pewnej kwadratury dla całki podwójnej funkcji o wartościach wektorowych. Problem ten jest bardziej złożony, niż rozważany powyżej przypadek całki pojedynczej, gdyż dla funkcji wielu zmiennych nie istnieje odpowiednik twierdzenia o jądrze Peano, które pozwalałoby w sposób ogólny oszacować od góry błędy kwadratur dla całek wielowymiarowych. By oszacować błąd kwadratury ze wzoru (175), korzystamy na początek z lematu 4.2

$$\|\hat{D}_2 f\|_X \leq \frac{5}{24} t^3 \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_s h(s, \sigma)\|_X + \frac{1}{4} t^3 \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \|\partial_\sigma h(s, \sigma)\|_X, \quad (181)$$

gdzie $\Omega_t = \{(s, \sigma) \in \mathbb{R}^2 : (0 \leq s \leq t) \wedge (0 \leq \sigma \leq t - s)\}$, $t > 0$. Warto przy tym zauważyć, że o ile przypadek kwadratur dla całek pojedynczych został gruntownie przebadany i znane oszacowanie dla metody trapezów możemy ze sporą dozą prawdopodobieństwa uważać za optymalne, to przypadek kwadratur dla całek funkcji wielu zmiennych jest bardziej problematyczny. Poprawienie oszacowania rozpatrywanej kwadratury dla całki funkcji dwóch zmiennych, a także poszukiwanie ogólnej metody szacowania błędów kwadratur funkcji całek wielu zmiennych (które pojawiają się przy szacowaniu szacowaniu błędów różnych schematów faktoryzacji operatora ewolucji czasowej) są ciekawymi problemami do rozpatrzenia w przyszłości. Wracając do rozpatrywanego problemu, pochodne cząstkowe funkcji h mają postać

$$\partial_s h(s, \sigma) = e^{s\hat{A}} \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma\hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f + e^{s\hat{A}} \hat{B} e^{\sigma\hat{A}} \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \quad (182)$$

oraz

$$\partial_\sigma h(s, \sigma) = e^{s\hat{A}} \hat{B} e^{\sigma\hat{A}} \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f, \quad (183)$$

a zatem

$$\begin{aligned} \|\hat{D}_2 f\|_X &\leq \frac{5}{24} t^3 \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma\hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_X \\ &+ \frac{11}{24} t^3 \|\hat{B}\| \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \left\| e^{\sigma\hat{A}} \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_X \\ &= \frac{5}{24} t^3 \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma\hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_X \\ &+ \frac{11}{24} t^3 \|\hat{B}\| \max_{(s, \sigma) \in \Omega_t} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_X, \quad f \in Y. \end{aligned} \quad (184)$$

Ostatecznie, korzystając z (151), (172), (179) oraz (184), na podstawie (173) uzyskujemy (168), przy czym przyjęte założenia do do podzbioru Y gwarantują, że prawa strona nierówności (168) jest dobrze zdefiniowana i ograniczona. \square

4.4 Oszacowanie błędu lokalnego i globalnego faktoryzacji drugiego rzędu dla równania Moyala

W tym podrozdziale zastosujemy twierdzeniem 4.2 do równania Moyala (127). Zaczniemy od przedstawienia dwóch lematów, które pomogą sprawdzić, że wszystkie założenia twierdzenia 4.2 są spełnione

Lemat 4.3. Niech \hat{A}_1 będzie następującym operatorem w przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R}^2)$

$$(\hat{A}_1 f)(x, y) = i\partial_x \partial_y f(x, y)$$

z dziedziną $D(\hat{A}_1) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) : \lambda p \mathcal{F}_{(x,y) \rightarrow (\lambda,p)} f(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^2)\}$. Zachodzi wtedy

$$e^{t\hat{A}_1} H^n(\mathbb{R}^2) \subseteq H^n(\mathbb{R}^2), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0.$$

Dowód. Zaczniemy od pokazania, że $e^{t\hat{A}_2} \mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2) \subseteq \mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2)$, gdzie

$$(\hat{A}_2 f)(x, y) = ixyf(x, y), \quad (185)$$

$D(\hat{A}_2) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) : xyf(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^2)\}$ oraz $\hat{A}_1 = \mathcal{F}^{-1} \hat{A}_2 \mathcal{F}$. Przestrzeń Sobolewa $H^n(\mathbb{R}^2)$ może być scharakteryzowana na wiele równoważnych sposobów, jeden z nich ma następującą postać (patrz podrozdział 1.1 w [125])

$$H^n(\mathbb{R}^2) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) : \mathcal{F}_{(\lambda,p) \rightarrow (x,y)}^{-1} (1 + \lambda^2 + p^2)^{n/2} \mathcal{F}_{(x,y) \rightarrow (\lambda,p)} f(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^2)\}, \quad (186)$$

mamy zatem

$$\mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2) = \{f \in L^2(\mathbb{R}^2) : (1 + x^2 + y^2)^{n/2} f(x, y) \in L^2(\mathbb{R}^2)\}. \quad (187)$$

Dla $f \in \mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2)$ zachodzi

$$|(1 + x^2 + y^2)^{n/2} e^{itxy} f(x, y)| = |(1 + x^2 + y^2)^{n/2} f(x, y)|, \quad (188)$$

zatem $e^{t\hat{A}_2} \mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2) \subseteq \mathcal{F}H^n(\mathbb{R}^2)$. Biorąc obustronnie odwrotną transformatę Fouriera, otrzymujemy ostatecznie $e^{t\hat{A}_1} H^n(\mathbb{R}^2) \subseteq H^n(\mathbb{R}^2)$, co kończy dowód. \square

Kolejny lemat potrzebny, by wykazać, że założenia twierdzenia 4.3 są spełnione w przypadku równania Moyala, przedstawiamy poniżej.

Lemat 4.4. Dla dowolnych $f \in W^{q,\infty}(\mathbb{R}^n)$ oraz $g \in H^q(\mathbb{R}^n)$, $n, q \geq 1$, $|\alpha| \leq q$, mamy $fg \in H^q(\mathbb{R}^n)$ oraz

$$D^\alpha(f, g) = \sum_{\beta \leq \alpha} \binom{\alpha}{\beta} (D^\beta f) D^{\alpha-\beta} g. \quad (189)$$

Dowód. Z mocniejszym założeniem $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ jest to standardowy wynik podręcznikowy (patrz np. twierzenie 1 (iv) z podrozdziału 5.2 w książce [126]. By udowodnić przypadek ogólny, zauważmy że dla $|\alpha| = 1$ możemy skorzystać z wniosku 4.1.18. z [127], wtedy standardowa procedura indukcji matematycznej (analogicznie jak zostało to zrobione w [126]) prowadzi do wyniku ogólnego. \square

Zastosujemy teraz twierdzenie 4.2 do równania Moyala (127), które może być przekształcone do następującej postaci

$$\partial_t \varrho(x, p; t) = \left(-\frac{1}{m} p \partial_x + \frac{i}{\hbar} \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p} \left(U \left(x - \frac{y}{2} \right) - U \left(x + \frac{y}{2} \right) \right) \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p}^{-1} \right) \varrho(x, p; t), \quad (190)$$

gdzie energia potencjalna $U \in W^{4,\infty}(\mathbb{R})$ oraz

$$W^{4,\infty}(\mathbb{R}) = \left\{ f \in L^\infty(\mathbb{R}) : \sum_{k=0}^4 \|f^{(k)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})} < \infty \right\}.$$

Zacznijmy od wprowadzenia skośnie samosprzężonych operatorów

$$(\hat{A}f)(x, p) = -\frac{1}{m} p \partial_x f(x, p), \quad \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2)), \quad (191)$$

oraz

$$(\hat{B}f)(x, p) = \frac{i}{\hbar} \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p} \left(U \left(x - \frac{1}{2}y \right) - U \left(x + \frac{1}{2}y \right) \right) \mathcal{F}_{2,p \rightarrow y}^{-1} f(x, p), \quad f \in L^2(\mathbb{R}), \quad (192)$$

przy czym $U \in W^{4,\infty}(\mathbb{R})$. Łatwo pokazać, że zdefiniowane powyżej operatory faktycznie są skośnie samosprzężone, gdyż powstały one przez przemnożenie samosprzężonych operatorów (128) oraz (129) przez czynnik $-i$.

Twierdzenie 4.3. Niech \hat{A} oraz \hat{B} będą operatorami skośnie samosprzężonymi zdefiniowanymi w (191) oraz (192), działającymi w przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R}^2)$ oraz niech $f \in \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$. Wtedy błąd lokalny faktoryzacji Stranga ma następujące ograniczenie górne

$$\|e^{\frac{t}{2}\hat{B}} e^{t\hat{A}} e^{\frac{t}{2}\hat{B}} f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq t^3 \left(C_1 \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_2 \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_4 \|p\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_5 \|\partial_x^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 \|p^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right), \quad (193)$$

gdzie

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \left(\frac{15}{48\hbar^3} (U_s - U_i)^3 + \frac{2}{3m\hbar^2} U_s'' (U_s - U_i) + \frac{5}{12m\hbar^2} U_s' (U_s' - U_i') + \frac{1}{48m\hbar^2} (U_s^{(4)} - U_i^{(4)}) \right), \\
 C_2 &= \left(\frac{2}{3m\hbar^2} U_s' (U_s' - U_i') + \frac{1}{24m^2\hbar} (U_s''' - U_i''') \right), \\
 C_3 &= \left(\frac{2}{3m\hbar^2} (U_s' - U_i') (U_s - U_i) + \frac{1}{6m^2\hbar} U_s''' \right), \\
 C_4 &= \frac{1}{6m^2\hbar} U_s'', \\
 C_5 &= \frac{1}{48m^2\hbar} (U_s'' - U_i''), \\
 C_6 &= \frac{1}{12m^2\hbar} (U_s'' - U_i''), \tag{194}
 \end{aligned}$$

przy czym użyliśmy następującej notacji

$$U_s^{(n)} = \operatorname{ess\,sup}_{x \in \mathbb{R}} U^{(n)}(x), \tag{195}$$

$$U_i^{(n)} = \operatorname{ess\,inf}_{x \in \mathbb{R}} U^{(n)}(x), \tag{196}$$

$n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$.

Dowód. Na początku założymy, że $f \in H^4(\mathbb{R}^2)$ i wprowadźmy pomocniczy operator $\hat{A}_1 = \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p}^{-1} \hat{A} \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p}$, dla którego zachodzi

$$(\hat{A}_1 f)(x, y) = \frac{1}{m} \partial_x \partial_y f(x, y), \quad f \in H^2(\mathbb{R}^2), \tag{197}$$

oraz drugi pomocniczy operator $\hat{B}_1 = \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p}^{-1} \hat{B} \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p}$, dla którego mamy

$$(\hat{B}_1 f)(x, p) = \frac{i}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{1}{2}y \right) - U \left(x - \frac{1}{2}y \right) \right) f(x, y), \quad f \in L^2(\mathbb{R}^2), \tag{198}$$

przy czym $U \in W^{4,\infty}(\mathbb{R})$. Komutatory mają następującą postać

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}_1, \hat{B}_1]f(x, y) &= \frac{1}{m\hbar} \left(\left(\frac{1}{2}U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2}U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2}U' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_x + \frac{1}{2}U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_x \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + U' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_y - U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_y \right) \right) f(x, y), \tag{199}
 \end{aligned}$$

gdzie $D([\hat{A}_1, \hat{B}_1]) \subseteq H^4(\mathbb{R}^2)$ oraz

$$\begin{aligned}
 &[\hat{A}_1, [\hat{A}_1, \hat{B}_1]]f(x, y) \\
 &= \frac{1}{m^2\hbar} \left(\left(\frac{1}{4}U^{(4)} \left(x + \frac{y}{2} \right) - \frac{1}{4}U^{(4)} \left(x - \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2}U''' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_x - \frac{1}{2}U''' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_x \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + U''' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_y + U''' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_y + U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_x \partial_y + U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_x \partial_y \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{1}{4}U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_x^2 - \frac{1}{4}U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_x^2 + U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) \partial_y^2 - U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \partial_y^2 \right) \right) f(x, y), \tag{200}
 \end{aligned}$$

gdzie $D([\hat{A}_1, [\hat{A}_1, \hat{B}_1]]) \subseteq H^4(\mathbb{R}^2)$. Możemy teraz oszacować wszystkie normy występujące po prawej stronie nierówności (168) dla przypadku równania Moyala. Normę operatora \hat{B} możemy oszacować następująco

$$\|\hat{B}\| = \|\hat{B}_1\| \leq \frac{1}{\hbar} \sup_{(x,y) \in \mathbb{R}^2} \left(U \left(x + \frac{1}{2}y \right) - U \left(x - \frac{1}{2}y \right) \right) = \frac{1}{\hbar} (U_s - U_i). \quad (201)$$

Dla pierwszej normy zawierającej komutator otrzymujemy

$$\begin{aligned} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma \hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \left\| \mathcal{F}_2 \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{\sigma \hat{A}} \hat{B} e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \left[\hat{A}_1, \hat{B}_1 \right] e^{\sigma \hat{A}_1} \hat{B}_1 e^{(t-s-\sigma)\hat{A}_1} \mathcal{F}_2 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \frac{1}{m\hbar^2} \left((U_s'' (U_s - U_i) + 2U_s' (U_s' - U_i')) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\ &\quad \left. + U_s' (U_s' - U_i') \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\ &\quad \left. + (U_s' - U_i') (U_s - U_i) \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right), \end{aligned} \quad (202)$$

natomiast dla drugiej otrzymujemy

$$\begin{aligned} \left\| \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \left\| \mathcal{F}_2 \left[\hat{A}, \hat{B} \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \left[\hat{A}_1, \hat{B}_1 \right] e^{(t-s-\sigma)\hat{A}_1} \mathcal{F}_2 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \frac{1}{m\hbar} \left(U_s'' \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + U_s' \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + (U_s' - U_i') \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \end{aligned} \quad (203)$$

Dla normy zawierającej podwójny komutator otrzymujemy następujące oszacowanie

$$\begin{aligned} \left\| \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &= \left\| \mathcal{F}_2 \left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \left[\hat{A}_1, \left[\hat{A}_1, \hat{B}_1 \right] \right] e^{(t-s)\hat{A}_1} \mathcal{F}_2 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \frac{1}{m^2\hbar} \left(\frac{1}{4} (U_s^{(4)} - U_i^{(4)}) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{1}{2} (U_s''' - U_i''') \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\ &\quad \left. + 2U_s''' \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2U_s'' \|p\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{4} (U_s'' - U_i'') \|\partial_x^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + (U_s'' - U_i'') \|p^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right). \end{aligned} \quad (204)$$

Wstawiając wzory (201)-(204) do nierówności (168) otrzymujemy ostatecznie

$$\begin{aligned}
 \|e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left(\frac{15}{48\hbar^3}(U_s - U_i)^3 + \frac{2}{3m\hbar^2}U_s''(U_s - U_i) + \frac{5}{12m\hbar^2}U_s'(U_s' - U_i') \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{48m^2\hbar}(U_s^{(4)} - U_i^{(4)}) \right) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 &\quad + \left(\frac{2}{3m\hbar^2}U_s'(U_s' - U_i') + \frac{1}{24m^2\hbar}(U_s''' - U_i''') \right) \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 &\quad + \left(\frac{2}{3m\hbar^2}(U_s' - U_i')(U_s - U_i) + \frac{1}{6m^2\hbar}U_s'' \right) \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 &\quad + \frac{1}{6m^2\hbar}U_s''\|p\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{1}{48m^2\hbar}(U_s'' - U_i'')\|\partial_x^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 &\quad + \frac{1}{12m^2\hbar}(U_s'' - U_i'')\|p^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \tag{205}
 \end{aligned}$$

Jako że prawa strona równania (205) ma sens również dla $f \in H^2(\mathbb{R}^2)$, oraz $H^4(\mathbb{R}^2)$ jest gęstym podzbiorem $H^2(\mathbb{R}^2)$, uzyskujemy formułę (193), co kończy dowód. \square

Błąd faktoryzacji z twierdzenia 4.3 rośnie szybko wraz ze wzrostem t . Dodatkowo w większości przypadków interesuje nas nie tylko stan końcowy układu, ale również stany pośrednie w czasie symulacji. Korzystając z własności grupowej operatora ewolucji czasowej

$$e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = \left(e^{\frac{t}{N}(\hat{A}+\hat{B})} \right)^N, \quad N \in \mathbb{N} \tag{206}$$

możemy ewoluować nasz układ od chwili 0 do chwili końcowej t nie w jednym, ale w N krokach o długości $\Delta t = t/N$ każdy. Możemy zastosować faktoryzację Stranga do operatorów z prawej strony równania (206).

Definicja 4.2. Przez błąd globalny po N krokach dla metody faktoryzacji przybliżającej operator $e^{t(\hat{A}+\hat{B})}$ poprzez operator $\hat{S}_{\hat{A}+\hat{B}}(t)$, rozumiemy następującą normę

$$\|\hat{S}_{\hat{A}+\hat{B}}^N \left(\frac{t}{N} \right) f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} f\|_X, \quad f \in Y, \tag{207}$$

przy czym Y jest pewnym gęstym podzbiorem przestrzeni Hilberta X , dobieranym w zależności od postaci operatorów \hat{A} oraz \hat{B} .

Przedstawimy teraz twierdzenie dotyczące oszacowania błędu globalnego dla faktoryzacji Stranga zastosowanej do równania Moyala.

Twierdzenie 4.4. Niech \hat{A} oraz \hat{B} będą operatorami skośnie samosprężonymi, które zostały zdefiniowane w (191) oraz (192), działającymi w przestrzeni Hilberta $L^2(\mathbb{R}^2)$ oraz niech $f \in$

$\mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$. Błąd globalny faktoryzacji Stranga spełnia następujące ograniczenie górne

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left(e^{\frac{\Delta t}{2}\hat{B}} e^{\Delta t\hat{A}} e^{\frac{\Delta t}{2}\hat{B}} \right)^N f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \leq \Delta t^2 \left(t (C_1 \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_2 \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_4 \|p\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & \quad + C_5 \|\partial_x^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 \|p^2 f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}) \\
 & \quad + \frac{t^2}{2} \left(1 - \frac{1}{N} \right) (C_2 (U'_s - U'_i) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 U'_s \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2C_4 U'_s \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \quad + C_4 U''_s \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_5 (U'_s - U'_i) \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_5 (U''_s - U''_i) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \quad + 2C_6 U'_s \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 (U''_s - U''_i) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}) \\
 & \quad \left. + \frac{t^3}{3} \left(1 - \frac{3}{2N} + \frac{1}{2N^2} \right) \left(C_4 U'_s (U'_s - U'_i) + \frac{C_5}{2} (U'_s - U'_i)^2 + C_6 U_s^2 \right) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right), \quad (208)
 \end{aligned}$$

gdzie $N \in \mathbb{N}$ oraz $\Delta t = \frac{t}{N}$.

Dowód. Wprowadzając funkcję pomocniczą $F(t) = e^{t(\hat{A}+\hat{B})} f$ oraz korzystając z wachlarza Lady Windermere [54], otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 & \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} \right)^N F(0) - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} F(0) \\
 & = \sum_{n=0}^{N-1} \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} \right)^{N-n-1} \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} - e^{\frac{t}{N}(\hat{A}+\hat{B})} \right) F\left(\frac{nt}{N}\right), \quad (209)
 \end{aligned}$$

co prowadzi do

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} \right)^N F(0) - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} F(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \leq \sum_{n=0}^{N-1} \left\| \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} - e^{\frac{t}{N}(\hat{A}+\hat{B})} \right) F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \quad (210)
 \end{aligned}$$

Korzystając z twierdzenia 5.1, otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} \right)^N F(0) - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} F(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq \frac{t^3}{N^3} \sum_{n=0}^{N-1} \left[C_1 \left\| F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & \quad + C_2 \left\| \partial_x F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 \left\| pF\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_4 \left\| p\partial_x F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \quad \left. + C_5 \left\| \partial_x^2 F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 \left\| p^2 F\left(\frac{nt}{N}\right) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right]. \quad (211)
 \end{aligned}$$

Będziemy używali następującej notacji $\varrho(\cdot, \cdot; t) = F(t)$, gdzie $\varrho(\cdot, \cdot; t) \in \mathcal{F}_2(H^2(\mathbb{R}^2))$. Wprowadzając $\tilde{\varrho}(\cdot, \cdot; t) = \mathcal{F}_2^{-1}\varrho(\cdot, \cdot; t)$, $\tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) = \partial_x \tilde{\varrho}(x, y; t)$, $\tilde{F}(t) = \tilde{\varrho}(\cdot, \cdot; t)$, $\tilde{F}_{10}(t) = \tilde{\varrho}_{10}(\cdot, \cdot; t)$, otrzymujemy równanie ewolucji czasowej dla $\tilde{\varrho}_{10}$

$$\begin{aligned}
 i\partial_t \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) & = -\frac{1}{m} \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) + \frac{1}{\hbar} \left(U\left(x + \frac{y}{2}\right) - U\left(x - \frac{y}{2}\right) \right) \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) \\
 & \quad + \frac{1}{\hbar} \left(U'\left(x + \frac{y}{2}\right) - U'\left(x - \frac{y}{2}\right) \right) \tilde{\varrho}(x, y; t) \\
 & = \left(\hat{A}_1 + \hat{B}_1 \right) \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) + \hat{C}_{10} \tilde{\varrho}(x, y; t), \quad (212)
 \end{aligned}$$

gdzie

$$\left(\hat{C}_{10}g\right)(x, y) = \frac{1}{\hbar} \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) g(x, y) \quad (213)$$

oraz $g \in D(\hat{C}_1) = L^2(\mathbb{R}^2)$. Mamy również

$$\|\hat{C}_{10}\| \leq \frac{1}{\hbar} (U'_s - U'_i). \quad (214)$$

Rozwiązanie równania (212) możemy zapisać korzystając z formuły na uzmiennianie stałej

$$\tilde{F}_{10}(t) = e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{10}(0) + \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \hat{C}_{10} \tilde{F}(s) ds. \quad (215)$$

Mamy

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{F}_{10}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \left\| \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \hat{C}_1 \tilde{F}(s) ds \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\leq \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \int_0^t \left\| e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \hat{C}_1 \tilde{F}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds \\ &\leq \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \int_0^t \|\hat{C}_1\| \left\| \tilde{F}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds \\ &= \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + t \|\hat{C}_1\| \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t}{\hbar} (U'_s - U'_i) \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned} \quad (216)$$

Dla $\tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) = \partial_y \tilde{\varrho}(x, y; t)$, równanie ewolucji ma następującą postać

$$\begin{aligned} i\partial_t \tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) &= -\frac{1}{m} \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}_{01} + \frac{1}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{y}{2} \right) - U \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{2} U' \left(x + \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2} U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}(x, y; t) \\ &= \left(\hat{A}_1 + \hat{B}_1 \right) \tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) + \hat{C}_{01} \tilde{\varrho}(x, y; t), \end{aligned} \quad (217)$$

gdzie

$$\left(\hat{C}_{01}g\right)(x, y) = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{1}{2} U' \left(x + \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2} U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) g(x, y) \quad (218)$$

oraz $g \in D(\hat{C}_{01}) = L^2(\mathbb{R}^2)$. Mamy również

$$\|\hat{C}_{01}\| \leq \frac{U'_s}{\hbar}. \quad (219)$$

Używając notacji $\tilde{F}_{01}(t) = \tilde{u}_{01}(\cdot, \cdot; t)$, rozwiązanie równania (217) jest zadane przez formułę na uzmiennianie stałej

$$\tilde{F}_{01}(t) = e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{01}(0) + \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \hat{C}_{01} \tilde{F}(s) ds \quad (220)$$

i analogicznie do poprzedniego przypadku mamy

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{F}_{01}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| \tilde{F}_{01}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + t \|\hat{C}_{01}\| \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \tilde{F}_{01}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t}{\hbar} U'_s \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned} \quad (221)$$

Dla $\tilde{\varrho}_{20}(x, y; t) = \partial_x^2 \tilde{\varrho}(x, y; t)$ równanie ewolucji czasowej ma postać

$$\begin{aligned} i\partial_t \tilde{\varrho}_{20}(x, y; t) &= -\frac{1}{m} \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}_{20} + \frac{1}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{y}{2} \right) - U \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{20}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{2}{\hbar} \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \left(U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}(x, y; t) \\ &= \left(\hat{A}_1 + \hat{B}_1 \right) \tilde{\varrho}_{20}(x, y; t) + 2\hat{C}_{10} \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) + \hat{C}_{20} \tilde{\varrho}(x, y; t), \end{aligned} \quad (222)$$

gdzie

$$\left(\hat{C}_{20} g \right) (x, y) = \frac{1}{\hbar} \left(U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) g(x, y) \quad (223)$$

oraz $g \in \mathcal{D}(\hat{C}_{20}) = L^2(\mathbb{R}^2)$. Mamy również

$$\|\hat{C}_{20}\| \leq \frac{1}{\hbar} (U''_s - U''_i). \quad (224)$$

Używając notacji $\tilde{F}_{20}(t) = \varrho_{20}(\cdot, \cdot; t)$, rozwiązanie równania (222) można zapisać korzystając z formuły na uzmiennianie stałej

$$\tilde{F}_{20}(t) = e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{20}(0) + \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \left(\hat{C}_{10} \tilde{F}_{10}(s) + \hat{C}_{20} \tilde{F}(s) \right) ds \quad (225)$$

i analogicznie do poprzednich przypadków mamy

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{F}_{20}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| \tilde{F}_{20}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \int_0^t \left\| \hat{C}_{10} \right\| \left\| \tilde{F}_{10}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds + \int_0^t \left\| \hat{C}_{20} \right\| \left\| \tilde{F}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds \\ &\leq \left\| \tilde{F}_{20}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{1}{\hbar} (U'_s - U'_i) \int_0^t \left(\left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{s}{\hbar} (U'_s - U'_i) \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) ds \\ &\quad + \frac{t}{\hbar} (U''_s - U''_i) \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \tilde{F}_{20}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t}{\hbar} (U'_s - U'_i) \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t^2}{2\hbar^2} (U'_s - U'_i)^2 \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\quad + \frac{t}{\hbar} (U''_s - U''_i) \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned} \quad (226)$$

Dla $\tilde{\varrho}_{11} = \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}$ równanie ewolucji ma postać

$$\begin{aligned} i\partial_t \tilde{\varrho}_{11}(x, y; t) &= -\frac{1}{m} \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}_{11} + \frac{1}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{y}{2} \right) - U \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{11}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) + U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar} \left(U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) + U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}(x, y; t) \\ &= \left(\hat{A}_1 + \hat{B}_1 \right) \tilde{\varrho}_{11}(x, y; t) + 2\hat{C}_{01} \tilde{\varrho}_{10}(x, y; t) + \hat{C}_{11} \tilde{\varrho}(x, y; t), \end{aligned} \quad (227)$$

gdzie

$$\left(\hat{C}_{11} g \right) (x, y) = \left(\frac{1}{2\hbar} U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{2} U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) g(x, y) \quad (228)$$

and $g \in D(\hat{C}_{11}) = L^2(\mathbb{R}^2)$. Mamy również

$$\|\hat{C}_{11}\| \leq \frac{U_s''}{\hbar}. \quad (229)$$

Używając notacji $\tilde{F}_{11}(t) = \tilde{\varrho}_{11}(\cdot, \cdot; t)$, rozwiązanie równania (227) można zapisać korzystając z formuły na uzmiennianie stałej

$$\tilde{F}_{11}(t) = e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{11}(0) + \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \left(2\hat{C}_{01} \tilde{F}_{10}(s) + \hat{C}_{11} \tilde{F}(s) \right) ds \quad (230)$$

i analogicznie do poprzednich przypadków mamy

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{F}_{11}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| \tilde{F}_{11}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2 \int_0^t \left\| \hat{C}_{01} \right\| \left\| \tilde{F}_{10}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds + \int_0^t \left\| \hat{C}_{11} \right\| \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds \\ &\leq \left\| \tilde{F}_{11}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{2U_s'}{\hbar} \int_0^t \left(\left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{s}{\hbar} (U_s' - U_i') \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) ds \\ &\quad + \frac{tU_s''}{\hbar} \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \tilde{F}_{11}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{2tU_s'}{\hbar} \left\| \tilde{F}_{10}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t^2}{\hbar^2} U_s' (U_s' - U_i') \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\quad + \frac{tU_s''}{\hbar} \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned} \quad (231)$$

Dla $\tilde{\varrho}_{02}(x, y; t) = \partial_y^2 \tilde{\varrho}(x, y; t)$ równanie ewolucji ma następującą postać

$$\begin{aligned} i\partial_t \tilde{\varrho}_{02}(x, y; t) &= -\frac{1}{m} \partial_x \partial_y \tilde{\varrho}_{02} + \frac{1}{\hbar} \left(U \left(x + \frac{y}{2} \right) - U \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{02}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) + U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) \\ &\quad + \frac{1}{2\hbar} \left(U'' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U'' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \tilde{\varrho}(x, y; t) \\ &= \left(\hat{A}_1 + \hat{B}_1 \right) \tilde{\varrho}_{02}(x, y; t) + 2\hat{C}_{01} \tilde{\varrho}_{01}(x, y; t) + \frac{1}{2} \hat{C}_{20} \tilde{\varrho}(x, y; t). \end{aligned} \quad (232)$$

Używając notacji $\tilde{F}_{02}(t) = \tilde{\varrho}(\cdot, \cdot; t)$, rozwiązanie równania (222) można zapisać korzystając z formuły uzmienniania stałej

$$\tilde{F}_{02}(t) = e^{t(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \tilde{F}_{02}(0) + \int_0^t e^{(t-s)(\hat{A}_1 + \hat{B}_1)} \left(2\hat{C}_{01} \tilde{F}_{01}(s) + \frac{1}{2} \hat{C}_{20} \tilde{F}(s) \right) ds \quad (233)$$

i analogicznie do poprzednich przypadków mamy

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{F}_{02}(t) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} &\leq \left\| \tilde{F}_{02}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2 \int_0^t \left\| \hat{C}_{01} \right\| \left\| \tilde{F}_{01}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds + \frac{1}{2} \int_0^t \left\| \hat{C}_{20} \right\| \left\| \tilde{F}(s) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} ds \\ &\leq \left\| \tilde{F}_{02}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{2U_s'}{\hbar} \int_0^t \left(\left\| \tilde{F}_{01}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{sU_s'}{\hbar} \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) ds \\ &\quad + \frac{t}{2\hbar} (U_s'' - U_i'') \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &= \left\| \tilde{F}_{02}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{2tU_s'}{\hbar} \left\| \tilde{F}_{01}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{t^2 U_s'^2}{\hbar^2} \left\| \tilde{F}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\ &\quad + \frac{t}{2\hbar} (U_s'' - U_i'') \left\| \tilde{f}(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \end{aligned} \quad (234)$$

Wstawiając powyższe wyniki do (211), otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left(e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} e^{\frac{t}{N}\hat{A}} e^{\frac{t}{2N}\hat{B}} \right)^N F(0) - e^{t(\hat{A}+\hat{B})} F(0) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq \frac{t^3}{N^3} \sum_{n=0}^{N-1} \left[C_1 \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & + C_2 \left(\|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{nt}{N\hbar} (U'_s - U'_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \\
 & + C_3 \left(\|pF(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{nt}{N\hbar} U'_s \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \\
 & + C_4 \left(\|p\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2\frac{nt}{N} U'_s \|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & + \left. \left(\frac{n^2 t^2}{N^2} U'_s (U'_s - U'_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{nt}{N} U''_s \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \right. \\
 & + C_5 \left(\|\partial_x^2 F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{nt}{N} (U'_s - U'_i) \|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{n^2 t^2}{2N^2} (U'_s - U'_i)^2 \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & + \left. \frac{nt}{N} (U''_s - U''_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \\
 & + C_6 \left(\|p^2 F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2\frac{nt}{N} U'_s \|pF(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \frac{n^2 t^2}{N^2} U_s'^2 \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & + \left. \frac{nt}{2N} (U''_s - U''_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \\
 & = \frac{t^3}{N^2} (C_1 \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_2 \|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 \|pF(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_4 \|p\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & + C_5 \|\partial_x^2 F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 \|p^2 F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}) \\
 & + \frac{(N-1)t^4}{2N^3} (C_2 (U'_s - U'_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_3 U'_s \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 2C_4 U'_s \|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & + C_4 U''_s \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_5 (U'_s - U'_i) \|\partial_x F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_5 (U''_s - U''_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & + 2C_6 U'_s \|pF(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + C_6 (U''_s - U''_i) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}) \\
 & + \frac{(N-1)(2N-1)t^5}{6N^4} \left(C_4 U'_s (U'_s - U'_i) + \frac{C_5}{2} (U'_s - U'_i)^2 + C_6 U_s'^2 \right) \|F(0)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}. \quad (235)
 \end{aligned}$$

Korzystając z równości $\Delta t = \frac{t}{N}$ i wstawiając $F(0) = f$, otrzymujemy równanie (208), co kończy dowód. \square

Błąd lokalny i globalny dla rozpraszania stanu koherentnego na potencjale gaussowskim

Jako przykład zastosowania wyprowadzonych w tym rozdziale wyników zilustrowany zostanie teraz błąd lokalny oraz globalny funkcji Wignera w normie $L^2(\mathbb{R}^2)$ przy schemacie Stranga dla układu rozproszeniowego, w którym koherentny stan początkowy zadany w postaci funkcji gaussowskiej ulega rozproszeniu na gaussowskiej barierze potencjału. Zgodnie z przyjętymi założeniami stan początkowy jest wyrażony wzorem

$$\varrho_0(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{2\sigma_x^2(p - p_0)^2}{\hbar^2} \right), \quad (236)$$

gdzie parametry gaussianu σ_x oraz σ_p minimalizują zasadę nieokreśloności Heisenberga

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (237)$$

Z kolei energia potencjalna związana z gaussowską barierą potencjału ma postać

$$U(x) = U_0 e^{-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (238)$$

gdzie U_0 jest jej wysokością, a σ_B odchyleniem standardowym. Dla tak ustalonych parametrów badanego układu, poniżej zostały wyliczone jawne postacie wyrażeń występujących w udowodnionym twierdzeniu o błędzie lokalnym 4.3. Zatem

$$U_s = U_0, \quad (239)$$

$$U_i = 0, \quad (240)$$

$$U'(x) = -\frac{U_0 x}{\sigma_B^2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (241)$$

$$U'_s = \frac{U_0}{\sigma_B \sqrt{e}}, \quad (242)$$

$$U'_i = -\frac{U_0}{\sigma_B \sqrt{e}}, \quad (243)$$

$$U''(x) = U_0 \left(-\frac{1}{\sigma_B^2} + \frac{x^2}{\sigma_B^4} \right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (244)$$

$$U''_s = \frac{2U_0}{\sigma_B^2 e^{3/2}}, \quad (245)$$

$$U''_i = -\frac{U_0}{\sigma_B^2}, \quad (246)$$

$$U'''(x) = U_0 \left(\frac{3x}{\sigma_B^4} - \frac{x^3}{\sigma_B^6} \right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (247)$$

$$U'''_s = U_0 \frac{\sqrt{18 - 6\sqrt{6}}}{\sigma_B^3 e^{\frac{3-\sqrt{6}}{2}}}, \quad (248)$$

$$U'''_i = -U_0 \frac{\sqrt{18 - 6\sqrt{6}}}{\sigma_B^3 e^{\frac{3-\sqrt{6}}{2}}}, \quad (249)$$

$$U^{(4)}(x) = U_0 \left(\frac{3}{\sigma_B^4} - \frac{6x^2}{\sigma_B^6} + \frac{x^4}{\sigma_B^8} \right) e^{-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}}, \quad (250)$$

$$U^{(4)}_s = U_0 \frac{3}{\sigma_B^4}, \quad (251)$$

$$U^{(4)}_i = U_0 \frac{8 - 4\sqrt{10}}{\sigma_B^4 e^{\frac{5-\sqrt{10}}{2}}}, \quad (252)$$

$$\|\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (253)$$

$$\|\partial_x \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \frac{1}{2\sigma_x \sqrt{\pi\hbar}}, \quad (254)$$

$$\|p\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{\frac{\hbar}{16\pi\sigma_x^2} + \frac{p_0^2}{2\pi\hbar}}, \quad (255)$$

$$\|p\partial_x\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{\frac{\hbar}{32\pi\sigma_x^3} + \frac{p_0^2}{4\sigma_x^2\pi\hbar}}, \quad (256)$$

$$\|\partial_x^2\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \frac{\sqrt{3}}{2\sigma_x^2\sqrt{\pi\hbar}}, \quad (257)$$

$$\|p^2\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{\frac{3\hbar^3}{128\pi\sigma_x^4} + \frac{3p_0^2\hbar}{8\pi\sigma_x^2} + \frac{p_0^4}{2\pi\hbar}}. \quad (258)$$

Podstawienie obliczonych wartości do wyrażenia (193), będącego częścią twierdzenia 4.3, prowadzi do następującego wyniku

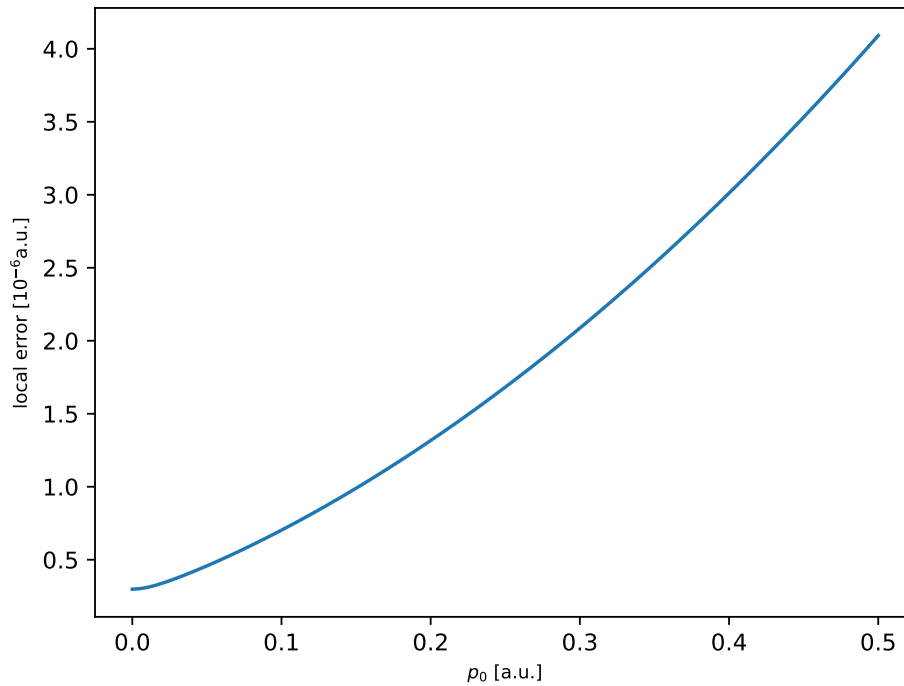
$$\begin{aligned} \|e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq t^3 & \left(\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}} + \frac{C_2}{2\sigma_x\sqrt{\pi\hbar}} + C_3\sqrt{\frac{\hbar}{16\pi\sigma_x^2} + \frac{p_0^2}{2\pi\hbar}} \right. \\ & + C_4\sqrt{\frac{\hbar}{32\pi\sigma_x^3} + \frac{p_0^2}{4\sigma_x^2\pi\hbar}} + \frac{\sqrt{3}C_5}{2\sigma_x^2\sqrt{\pi\hbar}} \\ & \left. + C_6\sqrt{\frac{3\hbar^3}{128\pi\sigma_x^4} + \frac{3p_0^2\hbar}{8\pi\sigma_x^2} + \frac{p_0^4}{2\pi\hbar}} \right), \quad (259) \end{aligned}$$

gdzie stałe C_i dla $i = 1, \dots, 6$ zdefiniowane w równaniach (194), przyjmują następujące postaci

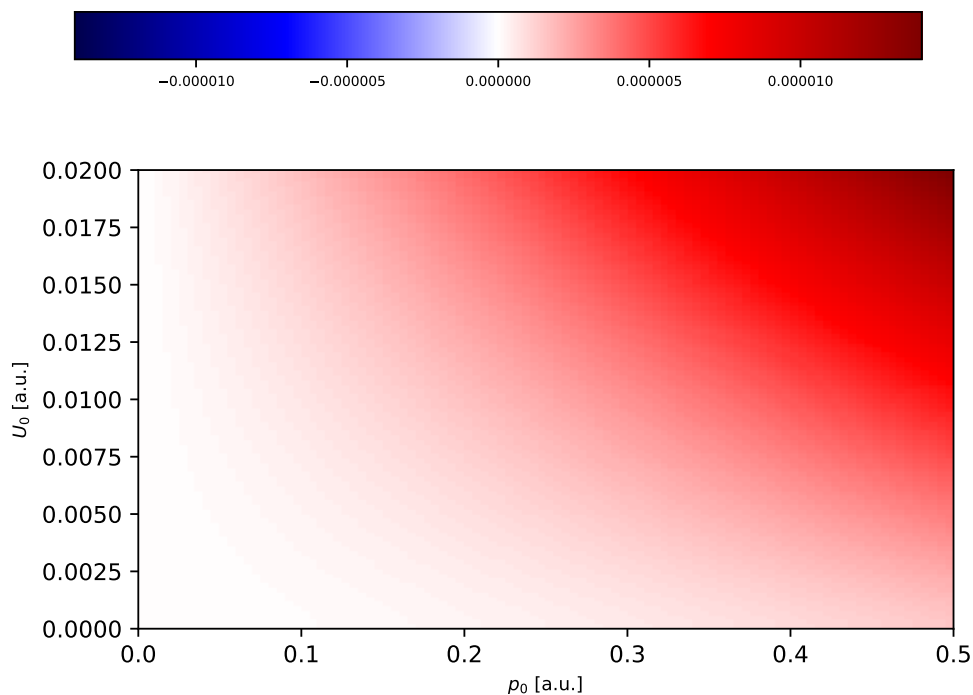
$$\begin{aligned} C_1 &= \left(\frac{15}{6\hbar^3} \left(\frac{U_0}{\sigma_B\sqrt{e}} \right)^3 + \frac{8}{3m\hbar^2} \frac{U_0^2}{\sigma_B^3 e^2} + \frac{5}{6m\hbar^2} \frac{U_0^2}{\sigma_B^2 e} + \frac{U_0}{48m^2\hbar} \left(\frac{3}{\sigma_B^4} + \frac{4\sqrt{10}-8}{\sigma_B^4 e^{\frac{5-\sqrt{10}}{2}}} \right) \right), \\ C_2 &= \left(\frac{4}{3m\hbar^2} \frac{U_0^2}{\sigma_B^2 e} + \frac{1}{12m^2\hbar} U_0 \frac{\sqrt{18-6\sqrt{6}}}{\sigma_B^3 e^{\frac{3-\sqrt{6}}{2}}} \right), \\ C_3 &= \left(\frac{4}{3m\hbar^2} \frac{U_0^2}{\sigma_B\sqrt{e}} + \frac{1}{6m^2\hbar} U_0 \frac{\sqrt{18-6\sqrt{6}}}{\sigma_B^3 e^{\frac{3-\sqrt{6}}{2}}} \right), \\ C_4 &= \frac{1}{6m^2\hbar} \frac{2U_0}{\sigma_B^2 e^{3/2}}, \\ C_5 &= \frac{1}{48m^2\hbar} \left(\frac{2U_0}{\sigma_B^2 e^{3/2}} + \frac{U_0}{\sigma_B^2} \right), \\ C_6 &= \frac{1}{12m^2\hbar} \left(\frac{2U_0}{\sigma_B^2 e^{3/2}} + \frac{U_0}{\sigma_B^2} \right). \quad (260) \end{aligned}$$

W dalszej części tego podrozdziału dla uproszczenia przyjmujemy jednostki atomowe, tj. $m = \hbar = 1$. Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) zależy od dwóch parametrów bariery potencjału, tj. jej wysokości U_0 i odchylenia standardowego σ_B oraz od dwóch parametrów stanu początkowego, tj. pędu początkowego p_0 oraz odchylenia standardowego w przestrzeni położeniowej σ_x . Ustalając $p_0 = 0.15$ a.u., $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u., $U_0 = 0.008$ a.u. oraz $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u., współczynnik ten przyjmuje wartość 1.2×10^{-6} .

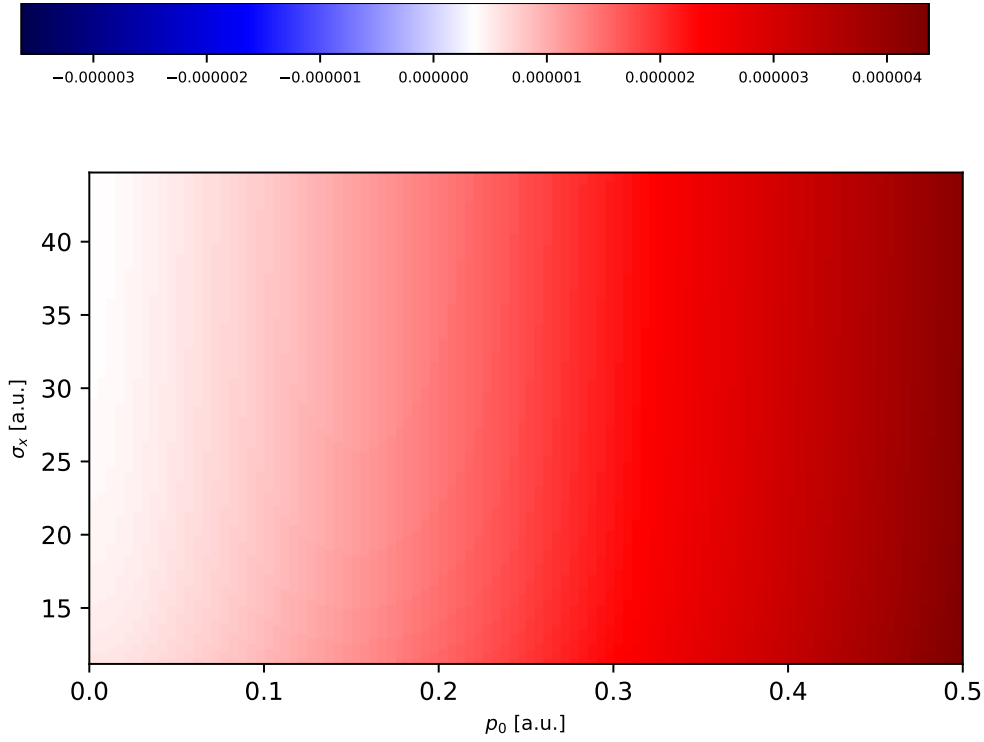
Poniżej przedstawimy kilka rysunków przedstawiających zachowanie tego błędu, gdzie z konieczności wartości części parametrów przyjęliśmy jako stałe. Dla wszystkich stałych parametrów będziemy przyjmować wartości jak przyjęte powyżej. Zależność współczynnika przy t^3 dla oszacowania błędu lokalnego (259) w funkcji parametru p_0 przedstawia rysunek 2. Zależność tego współczynnika w funkcji parametrów p_0 oraz U_0 przedstawia rysunek 3.



Rysunek 2: Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) w funkcji p_0 dla ustalonych parametrów $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u., $U_0 = 0,008$ a.u. oraz $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u.



Rysunek 3: Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) w funkcji p_0 oraz U_0 dla ustalonych parametrów $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u. oraz $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u.



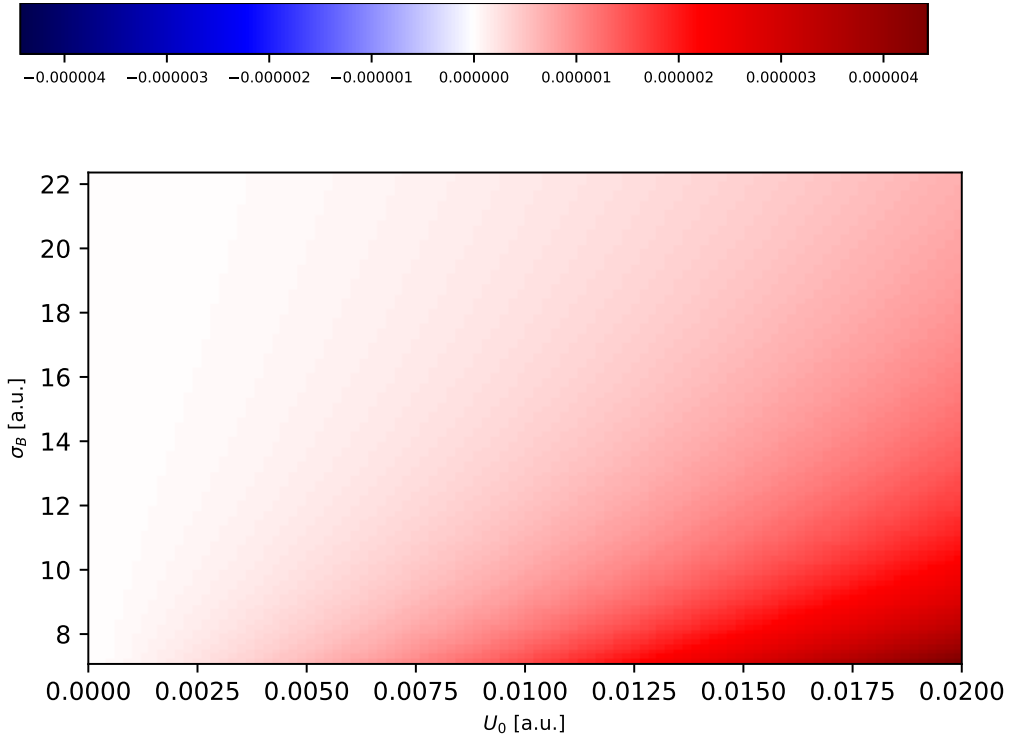
Rysunek 4: Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) w funkcji p_0 oraz U_0 dla ustalonych parametrów $U_0 = 0.008$ a.u. oraz $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u.

Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) w funkcji p_0 oraz σ_x dla ustalonych parametrów $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u. oraz $U_0 = 0,008$ a.u. przedstawia rysunek 4, natomiast zależność tego współczynnika w funkcji parametrów U_0 oraz σ_B dla ustalonych $p_0 = 0.15$ a.u. oraz $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u. przedstawia rysunek 5. Stałe C_i , $i = 1, \dots, 6$, zadane wzorami (260) można oszacować następująco, przybliżając numerycznie wartości stałych liczbowych oraz zaokrąglając do góry,

$$\begin{aligned}
 C_1 &\leq 0.6 \frac{U_0^3}{\sigma_B^3} + 0.4 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} + 0.4 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2} + 0.2 \frac{U_0}{\sigma_B^4}, \\
 C_2 &\leq 0.5 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2} + 0.2 \frac{U_0}{\sigma_B^3}, \\
 C_3 &\leq 0.9 \frac{U_0^2}{\sigma_B} + 0.4 \frac{U_0}{\sigma_B^3}, \\
 C_4 &\leq 0.1 \frac{U_0}{\sigma_B^2}, \\
 C_5 &\leq 0.1 \frac{U_0}{\sigma_B^2}, \\
 C_6 &\leq 0.2 \frac{U_0}{\sigma_B^2},
 \end{aligned} \tag{261}$$

oraz dla norm zawierających funkcję Wignera

$$\|\varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq 0.4, \tag{262}$$



Rysunek 5: Współczynnik przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) w funkcji U_0 oraz σ_B dla ustalonych parametrów $p_0 = 0.15$ a.u. oraz $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u.

$$\|\partial_x \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 0.3 \frac{1}{\sigma_x}, \quad (263)$$

$$\|p \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{0.02 \frac{1}{\sigma_x^2} + 0.2 p_0^2}, \quad (264)$$

$$\|p \partial_x \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^3} + 0.08 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2}}, \quad (265)$$

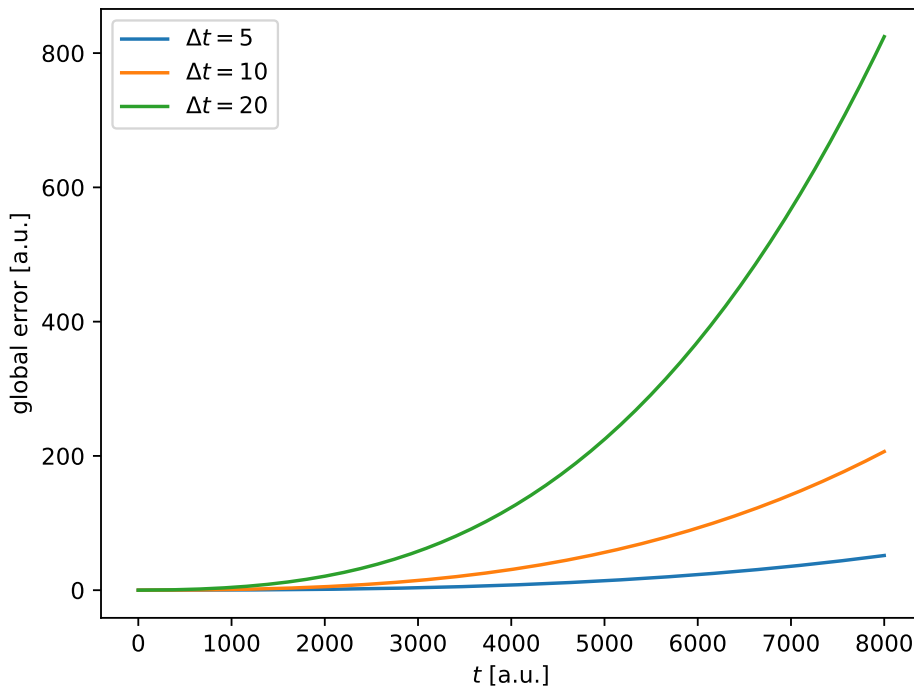
$$\|\partial_x^2 \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 0.5 \frac{1}{\sigma_x^2}, \quad (266)$$

$$\|p^2 \varrho_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^4} + 0.12 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2} + 0.16 p_0^4}. \quad (267)$$

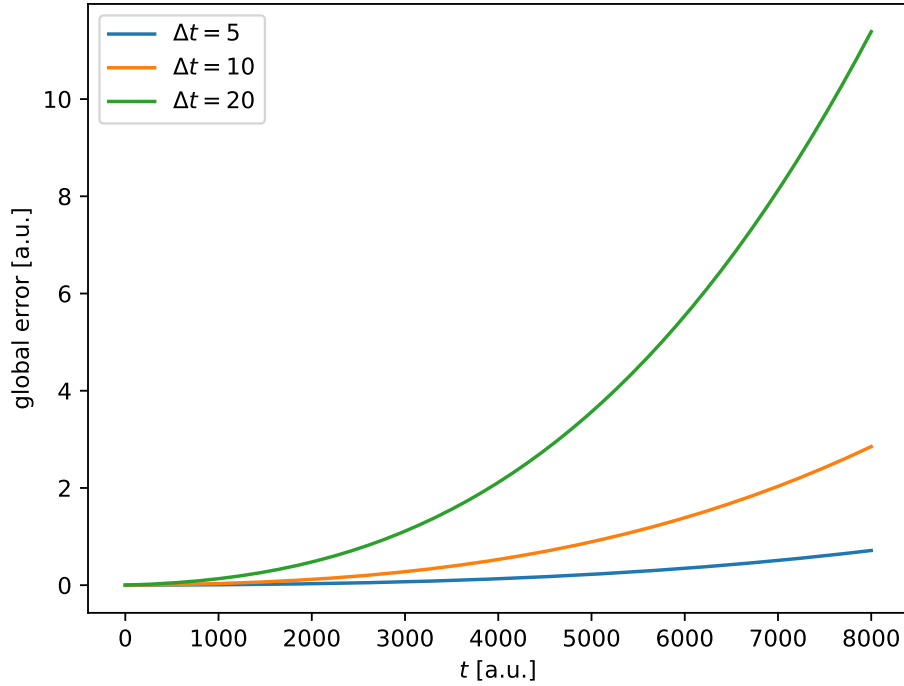
Stosując twierdzenie 4.3, otrzymujemy

$$\begin{aligned}
 \|e^{\frac{t}{2}\hat{B}}e^{t\hat{A}}e^{\frac{t}{2}\hat{B}}f - e^{t(\hat{A}+\hat{B})}f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq t^3 & \left(0.24 \frac{U_0^3}{\sigma_B^3} + 0.16 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} + 0.16 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2} + 0.08 \frac{U_0}{\sigma_B^4} \right. \\
 & + 0.15 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2 \sigma_x} + 0.06 \frac{U_0}{\sigma_B^3 \sigma_x} \\
 & + \left(0.9 \frac{U_0^2}{\sigma_B} + 0.4 \frac{U_0}{\sigma_B^3} \right) \sqrt{0.02 \frac{1}{\sigma_x^2} + 0.2 p_0^2} \\
 & + 0.1 \frac{U_0}{\sigma_B^2} \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^3} + 0.08 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2}} + 0.05 \frac{U_0}{\sigma_B^2 \sigma_x^2} \\
 & \left. + 0.2 \frac{U_0}{\sigma_B^2} \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^4} + 0.12 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2} + 0.16 p_0^4} \right). \quad (268)
 \end{aligned}$$

Przyjmując wartości parametrów $U_0 = 0.008$ a.u., $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u. oraz $p_0 \in [0.05]$, $\sigma_x \in [\sqrt{125}, \sqrt{2000}]$, zależność współczynnika przy t^3 w oszacowaniu błędu lokalnego (259) jako funkcja parametrów p_0 oraz σ_x przedstawia rysunek 4.



Rysunek 6: Błąd globalny w funkcji czasu symulacji dla różnych długości kroku czasowego Δt dla odchylenia standardowego bariery $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u.



Rysunek 7: Błąd globalny w funkcji czasu symulacji dla różnych długości kroku czasowego Δt dla odchylenia standardowego bariery $\sigma_B = \sqrt{500}$ a.u.

Na podstawie twierdzenia 4.4, otrzymujemy dla rozważanego przypadku z barierą gaussowską oraz gaussowskim stanem początkowym następujące oszacowanie błędu globalnego metody split-operator dla faktoryzacji drugiego rzędu

$$\begin{aligned}
 & \left\| \left(e^{\frac{\Delta t}{2} \hat{B}} e^{\Delta t \hat{A}} e^{\frac{\Delta t}{2} \hat{B}} \right)^N f - e^{t(\hat{A} + \hat{B})} f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \\
 & \leq \Delta t^2 \left(t \left(0.24 \frac{U_0^3}{\sigma_B^3} + 0.16 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} + 0.16 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2} + 0.08 \frac{U_0}{\sigma_B^4} + 0.15 \frac{U_0^2}{\sigma_B^2 \sigma_x} + 0.06 \frac{U_0}{\sigma_B^3 \sigma_x} \right. \right. \\
 & + \left(0.9 \frac{U_0^2}{\sigma_B} + 0.4 \frac{U_0}{\sigma_B^3} \right) \sqrt{0.02 \frac{1}{\sigma_x^2} + 0.2 p_0^2} + 0.1 \frac{U_0}{\sigma_B^2} \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^3} + 0.08 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2}} + 0.05 \frac{U_0}{\sigma_B^2 \sigma_x^2} \\
 & + \left. \left. 0.2 \frac{U_0}{\sigma_B^2} \sqrt{0.01 \frac{1}{\sigma_x^4} + 0.12 \frac{p_0^2}{\sigma_x^2} + 0.16 p_0^4} \right) \right. \\
 & + \frac{t^2}{2} \left(\left(0.7 \frac{U_0^3}{\sigma_B^3} + 0.9 \frac{U_0^2}{\sigma_B^4} \right) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \left(0.7 \frac{U_0^3}{\sigma_B^2} + 0.3 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} \right) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + 0.4 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} \|\partial_x f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right. \\
 & + \left. \left. 0.3 \frac{U_0^2}{\sigma_B^3} \|pf\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right) \right. \\
 & + \left. \left. 0.1 t^3 \frac{U_0^3}{\sigma_B^4} \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \right), \tag{269}
 \end{aligned}$$

Dla przyjętych parametrów $U = 0.008$ a.u., $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u., $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u. oraz $p_0 = 0.15$ a.u. zależność oszacowania błędu globalnego (269) od czasu dla kilku kroków czasowych Δt przedstawia rysunek 6. Warto zauważyć, że z uwagi na występowanie σ_B wyłącznie w mianowniku po

prawej stronie nierówności (269), poszerzenie bariery do $\sigma_B = \sqrt{500}$ a.u. pozwala na wyraźne zmniejszenie górnego oszacowania błędu globalnego, co obrazuje rysunek 7. Zauważmy, że dla zupełnie dowolnych operatorów unitarnych \hat{U}_1 i \hat{U}_2 na przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^2)$ oraz $f \in L^2(\mathbb{R}^2)$, takiej że $\|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 1 \setminus \sqrt{2\pi}$ (co odpowiada unormowaniu funkcji Wignera stanu czystego przy $\hbar = 1$), mamy następujące oszacowanie

$$\left\| \hat{U}_1 f - \hat{U}_2 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} \leq \left\| \hat{U}_1 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \left\| \hat{U}_2 f \right\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} + \|f\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx 0.8 \quad (270)$$

zatem uzyskane przez nas oszacowania zawarte w twierdzeniach 4.3 oraz 4.4 mają wartość tylko w przypadku takiego dobrania parametrów, że oszacowanie to jest mniejsze niż $\sqrt{2\pi}$. Tabela 1 przedstawia wartości oszacowania błędu lokalnego (nie samego współczynnika stojącego przy t^3 , jak robiliśmy poprzednio), błędu globalnego na końcu symulacji trwającej 8000 a.u. oraz przybliżonego czasu obliczeń takiego przypadku na komputerze, który mieliśmy do dyspozycji, w funkcji kroku czasowego Δt , przy czym przyjęliśmy odchylenie standardowe bariery $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u.

Δt [a.u.]	bł. lokalny	bł. globalny	czas obliczeń
10	$1.2 \cdot 10^{-3}$	$2.07 \cdot 10^2$	14min
1	$1.2 \cdot 10^{-6}$	2.07	2h 20min
0.1	$1.2 \cdot 10^{-9}$	$2.07 \cdot 10^{-2}$	23h 20min
0.01	$1.2 \cdot 10^{-12}$	$2.07 \cdot 10^{-4}$	9d 17h 20min

Tabela 1: Zależność błędu lokalnego, błędu globalnego na końcu symulacji oraz przybliżonego czasu obliczeń dla odchylenia standardowego bariery gaussowskiej $\sigma_B = \sqrt{50}$ a.u. oraz różnych wartości kroku czasowego Δt .

Tabela 2 przedstawia analogiczne wyniki, co tabela 1 z tą różnicą, że przyjęto większe odchylenie standardowe bariery $\sigma_B = \sqrt{500}$ a.u., co zmniejszyło zarówno błąd lokalny, jak i globalny o rząd wielkości.

Δt [a.u.]	bł. lokalny	bł. globalny	czas obliczeń
10	$1.3 \cdot 10^{-4}$	2.86	14min
1	$1.3 \cdot 10^{-7}$	$2.86 \cdot 10^{-2}$	2h 20min
0.1	$1.3 \cdot 10^{-10}$	$2.86 \cdot 10^{-4}$	23h 20min
0.01	$1.3 \cdot 10^{-13}$	$2.86 \cdot 10^{-6}$	9d 17h 20min

Tabela 2: Zależność błędu lokalnego, błędu globalnego na końcu symulacji oraz przybliżonego czasu obliczeń dla odchylenia standardowego bariery gaussowskiej $\sigma_B = \sqrt{500}$ a.u. oraz różnych wartości kroku czasowego Δt .

Do uzyskania tego oszacowania przyjęliśmy najgorszy możliwy scenariusz, w praktyce błąd będzie na ogół sporo mniejszy i w większości przypadków można stosować dłuższy krok czasowy, niż wynikałoby to z uzyskanego oszacowania błędu globalnego dla faktoryzacji Stranga.

4.5 Faktoryzacja czwartego rzędu

Jak zostało już zasygnalizowane na początku tego rozdziału, uwzględnienie w faktoryzacji podwójnego komutatora pozwala znacząco poprawić dokładność obliczeń. Metoda faktoryzacji

czwartego rzędu, z której będziemy korzystać w tej pracy, pochodzi z pracy [52] i ma następującą postać

$$e^{\Delta t(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\frac{1}{6}\Delta t\hat{B}} e^{\frac{1}{2}\Delta t\hat{A}} e^{\frac{2}{3}\Delta t\hat{C}} e^{\frac{1}{2}\Delta t\hat{A}} e^{\frac{1}{6}\Delta t\hat{B}} + O(\Delta t^5), \quad (271)$$

gdzie

$$\hat{C} = \hat{B} + \frac{\Delta t^2}{48}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] \quad (272)$$

Równanie (271) jest szczególnym przypadkiem ogólnej faktoryzacji (143) dla $N = 3$ oraz $\beta_1 = 0$, $\gamma_1 = \frac{1}{6}$, $\delta_1 = 0$, $\beta_2 = \frac{1}{2}$, $\gamma_2 = \frac{2}{3}$, $\delta_2 = \frac{1}{48}$, $\beta_3 = \frac{1}{2}$, $\gamma_3 = \frac{1}{6}$, $\delta_3 = 0$. Można pokazać, że

$$\left(\hat{W}f\right)(x, p) = \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p} W(x, y) \mathcal{F}_{2,p \rightarrow y}^{-1} f(x, p), \quad (273)$$

przy czym

$$\begin{aligned} W(x, y) = & U_{\Delta}(x, y) - \frac{\Delta t^2}{48} \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) - U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right) \\ & \cdot \left(U' \left(x + \frac{y}{2} \right) + U' \left(x - \frac{y}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (274)$$

gdzie $U_{\Delta}(x, y) = U \left(x + \frac{y}{2} \right) - U \left(x - \frac{y}{2} \right)$ oraz $U'(x) = \frac{dU}{dx}(x)$. Metoda faktoryzacji China czwartego rzędu prowadzi do następującego algorytmu obliczeniowego dla pojedynczego kroku czasowego

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) \approx & \mathcal{F}_{2,y \rightarrow p} \exp \left(-\frac{i\Delta t}{6} U_{\Delta}(x, y) \right) \mathcal{F}_{(\lambda,p) \rightarrow (x,y)}^{-1} \exp \left(-\frac{i\Delta t}{2} \lambda p \right) \\ & \cdot \mathcal{F}_{(x,y) \rightarrow (\lambda,p)} \exp \left(-\frac{2i\Delta t}{3} W(x, y) \right) \\ & \cdot \mathcal{F}_{(\lambda,p) \rightarrow (x,y)}^{-1} \exp \left(-\frac{i\Delta t}{2} \lambda p \right) \\ & \cdot \mathcal{F}_{(x,y) \rightarrow (\lambda,p)} \exp \left(-\frac{i\Delta t}{6} U_{\Delta}(x, y) \right) \mathcal{F}_{2,p \rightarrow y}^{-1} \varrho(x, p; t_0). \end{aligned} \quad (275)$$

Błąd lokalny oraz globalny dla ogólnego przypadku faktoryzacji (143) w przypadku operatorów nieograniczonych został omówiony w pracy [128], nie zostało tam jednak wykonanego szacowania stałej proporcjonalności, a jedynie pokazano jak błąd się skaluje w funkcji kroku czasowego.

4.6 Dyskretyzacja transformaty Fouriera

Do symulacji numerycznej równania konieczna jest dyskretyzacja przestrzeni fazowej. Jak się okaże, dyskretyzacja ciągłej transformacji Fouriera nie sprowadza się do prostego zastąpienia jej dyskretną transformatą Fouriera (dla której istnieje bardzo efektywny algorytm szybkiej transformaty Fouriera), lecz ma bardziej skomplikowaną postać. Nadal można w niej wykorzystać dyskretną transformatę Fouriera, musi ona jednak być połączona z dodatkowymi operacjami. Poniżej wyprowadzimy dokładnie taką dyskretyzację dla jednowymiarowej transformacji Fouriera, jest to wystarczające, gdyż wielowymiarowe transformacje Fouriera są tylko iloczynem tensorowym transformacji jednowymiarowych. Ciągła transformata Fouriera funkcji f wyraża się wzorem

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{i\epsilon k x} dx, \quad (276)$$

gdzie $\epsilon = -1$ dla transformaty do przodu i $\epsilon = 1$ dla transformaty do tyłu (jest to odpowiednik FFTsign w bibliotece FFTW). Zakładając, że $f(x) \approx 0$ dla $x \notin [-L_x, L_x]$, dostajemy

$$F(k) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-L_x}^{L_x} f(x) e^{i\epsilon kx} dx. \quad (277)$$

Dyskretyzujemy teraz zmienną x , $x_n = -L_x + n\Delta x$, gdzie $\Delta x = \frac{2L_x}{N_x}$, $n \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}$, wprowadzamy oznaczenie $f_n \equiv f(x_n)$ oraz zamieniamy całkę na sumę

$$F(k) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{i\epsilon kx_n} \Delta x. \quad (278)$$

Dyskretyzujemy też zmienną k , $k_m = -L_k + m\Delta k$, $k \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}$, gdzie $\Delta k = \frac{2L_k}{N_x}$ i wprowadzamy oznaczenie $F_m \equiv F(k_m)$

$$\begin{aligned} F_m &= \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{i\epsilon k_m x_n} = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{i\epsilon(-L_k+m\Delta k)(-L_x+n\Delta x)} \\ &= \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} e^{i\epsilon L_k L_x} e^{-i\epsilon L_x m \Delta k} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-i\epsilon L_k n \Delta x} e^{i\epsilon m n \Delta x \Delta k}. \end{aligned} \quad (279)$$

Dyskretna transformata Fouriera (DFT) jest dana wzorem

$$\hat{f}_m = \frac{1}{N_x} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{2\pi i \epsilon m n / N_x}, \quad (280)$$

gdzie znowu $\epsilon = -1$ oznacza transformatę do przodu, a $\epsilon = 1$ transformatę do tyłu. By w sumie w równaniu (279) dostrzec DFT, dostajemy warunek na wykładnik eksponenty

$$i\epsilon m n \Delta x \Delta k = 2\pi i \epsilon m n / N_x, \quad (281)$$

co prowadzi do

$$\Delta k = \frac{2\pi}{N_x \Delta x} = \frac{\pi}{L_x} \quad (282)$$

Mamy również

$$L_k = \frac{\Delta k N_x}{2} = \frac{\pi N_x}{2L_x} = \frac{\pi}{\Delta x}. \quad (283)$$

Wstawiamy wyznaczone wartości L_k i Δk do równania (279)

$$F_m = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} e^{i\epsilon \pi N_x / 2} e^{-i\epsilon m \pi} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-i\epsilon \pi n} e^{2\pi i \epsilon m n / N_x}. \quad (284)$$

Wiedząc, że $e^{\pm i\pi} = -1$, oraz przyjmując dla uproszczenia pierwszej eksponenty, że $N_x \bmod 4 = 0$, otrzymujemy

$$F_m = (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} (-1)^n f_n e^{2\pi i \epsilon m n / N_x}. \quad (285)$$

Przy tych samych założeniach można zdyskretyzować transformatę w przeciwną stronę

$$f_n = (-1)^n \frac{\Delta k}{\sqrt{2\pi}} \sum_{m=0}^{N_x-1} (-1)^m F_m e^{-2\pi i \epsilon m n / N_x}. \quad (286)$$

Iloczyn wyrazów normalizacyjnych transformat (285) i (286) wynosi

$$\frac{\Delta x \Delta k}{2\pi} = \frac{1}{N_x}, \quad (287)$$

co zgadza się z iloczynem stałych normalizacyjnych DFT (standardowo używa się konwencji niesymetrycznej dla DFT, transformacja do przodu ma czynnik $1/N_x$, a transformacja do tyłu czynnik 1, w bibliotece FFTW transformaty nie są znormalizowane. Z równania (285) widzimy, że przy przyjętych założeniach możemy przybliżyć ciągłą transformatę Fouriera jako złożenie trzech operacji:

- a) mnożenia przez „grzebień”, czyli funkcję $g_n = (-1)^n$, $n \in \{0, 1, N_x - 1\}$,
- b) dyskretnej transformacji Fouriera,
- c) ponownego mnożenia przez „grzebień”.

Oznaczmy przez fałkę następujące przesunięcie (FFTshift) dla wektora o parzystej liczbie elementów (i tak założyliśmy wcześniej, że $N_x \bmod 4 = 0$)

$$\tilde{f}_n = \begin{cases} f_{n+N_x/2} & \text{dla } n = 0, 1, \dots, \frac{N_x}{2} - 1 \\ f_{n-N_x/2} & \text{dla } n = \frac{N_x}{2}, \dots, N_x - 1. \end{cases} \quad (288)$$

Lemat 4.5. Dla $m \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}$ zachodzi

$$\sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x} = (-1)^m \sum_{n'=0}^{N_x-1} \tilde{f}_{n'} e^{-2\pi i m n' / N_x}, \quad (289)$$

przy czym \tilde{f}_n zostało zdefiniowane w równaniu (288).

Dowód. W pierwszym kroku rozkładamy wyrażenie po lewej stronie równania (289) na dwie sumy

$$\sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x} = \underbrace{\sum_{n=0}^{\frac{N_x}{2}-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x}}_{A_m} + \underbrace{\sum_{n=\frac{N_x}{2}}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x}}_{B_m}. \quad (290)$$

W sumie A_m przesuwamy indeks, $n' = n + \frac{N_x}{2}$, $n = n' - \frac{N_x}{2}$

$$\begin{aligned} A_m &= \sum_{n'=\frac{N_x}{2}}^{N_x-1} f_{n'-\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m (n'-\frac{N_x}{2}) / N_x} = \sum_{n'=\frac{N_x}{2}}^{N_x-1} f_{n'-\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x} e^{i\pi m} \\ &= (-1)^m \sum_{n'=\frac{N_x}{2}}^{N_x-1} f_{n'-\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x}. \end{aligned} \quad (291)$$

W sumie B_m przesuwamy indeks, $n' = n - \frac{N_x}{2}$, $n = n' + \frac{N_x}{2}$

$$\begin{aligned} B_m &= \sum_{n'=0}^{\frac{N_x}{2}-1} f_{n'+\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m (n'+\frac{N_x}{2}) / N_x} = \sum_{n'=0}^{\frac{N_x}{2}-1} f_{n'+\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x} e^{-i\pi m} \\ &= (-1)^m \sum_{n'=0}^{\frac{N_x}{2}-1} f_{n'+\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x}. \end{aligned} \quad (292)$$

Wstawiając (291) oraz (292) do równania (290), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x} &= (-1)^m \sum_{n'=0}^{\frac{N_x}{2}-1} f_{n'+\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x} + (-1)^m \sum_{n'=\frac{N_x}{2}}^{N_x-1} f_{n'-\frac{N_x}{2}} e^{-2\pi i m n' / N_x} \\ &= (-1)^m \sum_{n'=0}^{N_x-1} \tilde{f}_{n'} e^{-2\pi i m n' / N_x}, \end{aligned} \quad (293)$$

co kończy dowód. \square

Udowodnimy teraz następujący lemat, który będzie przydatny w dalszych rozważaniach na temat dyskretyzacji transformaty Fouriera

Lemat 4.6. Niech $N_x \in \mathbb{N}$, wtedy dyskretna transformata Fouriera z ciągu $(\tilde{f}_n)_{n=0}^{N_x-1}$ wyraża się następująco

$$\tilde{F}_m = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} \tilde{f}_n e^{-2\pi i m n / N_x}. \quad (294)$$

Dowód. Na początek rozpatrzmy przypadek $m \in \{0, 1, \dots, \frac{N_x}{2} - 1\}$, pamiętając o założeniu, że $N_x \bmod 4 = 0$, co w szczególności daje nam $(-1)^{N_x/2} = 1$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_m &= F_{m+N_x/2} = (-1)^{m+N_x/2} \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} (-1)^n f_n e^{-2\pi i (m+N_x/2)n / N_x} \\ &= (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} (-1)^n f_n e^{-i\pi n} e^{-2\pi i m n / N_x} = (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x}. \end{aligned} \quad (295)$$

Korzystając z lematu 4.5, otrzymujemy

$$\tilde{F}_m = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n'=0}^{N_x-1} \tilde{f}_{n'} e^{-2\pi i m n' / N_x}. \quad (296)$$

Teraz przeprowadzimy analogiczny dowód dla przypadku $m \in \{\frac{N_x}{2}, \dots, N_x - 1\}$

$$\begin{aligned} \tilde{F}_m &= F_{m-\frac{N_x}{2}} = (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} (-1)^n f_n e^{-2\pi i (m-\frac{N_x}{2})n / N_x} \\ &= (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} (-1)^n f_n e^{-2\pi i m n / N_x} e^{i\pi n} = (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x}. \end{aligned} \quad (297)$$

Korzystając z lematu 4.5, otrzymujemy

$$\tilde{F}_m = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n'=0}^{N_x-1} \tilde{f}_{n'} e^{-2\pi i m n' / N_x}, \quad (298)$$

co kończy dowód. \square

Stąd alternatywnie możemy przybliżyć ciągłą transformatę Fouriera jako złożenie trzech operacji:

- a) przesunięcia FFTshift,

- b) dyskretnej transformaty Fouriera,
- c) ponownego przesunięcia FFTshift.

Na koniec zauważmy (będzie to najbardziej praktyczna opcja do symulacji), że zachodzi również

$$\tilde{F}_m = (-1)^m \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{N_x-1} f_n e^{-2\pi i m n / N_x}. \quad (299)$$

Wynika to wprost z równań (295) i (297). Zatem alternatywnie możemy przybliżyć ciągłą transformatę Fouriera jako złożenie trzech operacji:

- a) dyskretnej transformaty Fouriera,
- b) mnożenia przez „grzebień”,
- c) przesunięcia FFTshift.

Operacje FFTshift oraz mnożenia przez „grzebień” są inwolucjami. Dodatkowo dla N_x będącego wielokrotnością 4 (co już wcześniej założyliśmy) są przemienne (wtedy FFTshift jest cyklicznym przesunięciem o parzystą liczbę $N_x/2$, a „grzebień” mnoży węzły o parzystych (nieparzystych) indeksach przez 1 (-1)). Przedstawione w tej części rozważania były konieczne, gdyż dyskretna transformata Fouriera (280) jest dyskretyzacją całki

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty f(x) e^{iekx} dx, \quad (300)$$

co nie odpowiada naszemu przypadkowi.

5 Dynamika stanów kwantowych w przestrzeni fazowej. Wyniki symulacji

5.1 Warunek początkowy i rozpatrywane profile energii potencjalnej

Omówiony algorytm, bazujący na metodzie spectral split-operator dla zadanego stanu początkowego w chwili $t = 0$, umożliwia nam wyznaczenie ewolucji czasowej funkcji Wignera poprzez sukcesywne działanie operatorem ewolucji czasowej o wybrany krok czasowy Δt . W prezentowanej pracy badaniu były poddane układy izolowane w których jako stan początkowy układu przyjęliśmy gaussowski stan koherentny lub stan będący superpozycją stanów gaussowskich z rzeczywistym parametrem modelującym jakość jego przygotowania. W dalszej części pracy takie stany są nazywane zdefektowanymi stanami kota Schrödingera [56]. W przypadku dynamiki funkcji Wignera dla stanu koherentnego rozpatrywanymi układami były potencjały uwięzienia reprezentowane przez potencjały ograniczone: gaussowski i wykładniczo-potęgowy oraz potencjał półograniczony – oscylator harmoniczny. Natomiast w przypadku dynamiki funkcji Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera był rozpatrywany potencjał rozproszony zadany przez potencjał ograniczony w postaci bariery gaussowskiej.

5.2 Dynamika funkcji Wignera dla stanu koherentnego

Stany koherentne można zdefiniować jako stany minimalizujące zasadę nieokreśloności Heisenberga [2] z której wynika, że rozwiązaniem równania [129, 130]

$$(\hat{p} - p_0) \psi(x) = c(\hat{x} - x_0) \psi(x), \quad c \in \mathbb{C}, \quad (301)$$

gdzie stałą c można wyznaczyć z warunku

$$\langle \psi, (\hat{x} - x_0)^2 \psi \rangle_{L^2(\mathbb{R})} = \sigma_x^2, \quad (302)$$

jest funkcja gaussowska w postaci

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2} + \frac{i}{\hbar} p_0 x\right). \quad (303)$$

Uzyskana funkcja falowa reprezentuje gaussowski stan koherentny o wariancji σ_x^2 w przestrzeni położeniowej i skoncentrowany wokół wartości oczekiwanych położenia x_0 i pędu p_0 . Zgodnie z wynikami przedstawionymi w podrozdziale 3.2 funkcji falowej (303) odpowiada funkcja Wignera w postaci

$$\varrho(x, p; 0) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{2\sigma_x^2(p-p_0)^2}{\hbar^2} - \frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right). \quad (304)$$

Jak wynika z konstrukcji teorii kwantowej, istotną rolę w charakterystyce dynamicznej układów odgrywają wartości oczekiwane zmiennych dynamicznych. W szczególności dla układów izolowanych taką podstawową wielkością charakteryzującą układ jest jego energia całkowita. Zgodnie z wynikami przedstawionymi w rozdziale 3, wartość oczekiwana energii całkowitej w stanie opisanym przez funkcję Wignera w chwili t jest wyrażona wzorem

$$\langle E(t) \rangle = \int \left(\frac{p^2}{2m} + U(x) \right) \varrho(x, p; t) dx dp. \quad (305)$$

W czasie symulacji w każdym kroku czasowym będziemy wyznaczać wartość oczekiwaną energii całkowitej badanego układu. Jako że rozpatrywany układ jest izolowany, należy oczekiwać, że

wartość oczekiwana energii całkowitej powinna być stała, a jakiegokolwiek odchylenia od tej wartości posłużą nam za miarę dokładności zastosowanego algorytmu numerycznego. Poniżej będziemy rozpatrywali następujące miary błędu dla przeprowadzonych obliczeń

$$\text{error}(E; t, \Delta t) = E^{num}(t, \Delta t) - E^{exact}, \quad (306)$$

oraz

$$\text{error}(E; \Delta t) = \max_t |\text{error}(E; t, \Delta t)|, \quad (307)$$

gdzie E^{num} jest wartością oczekiwaną energii całkowitej obliczanej numerycznie w czasie symulacji, natomiast E^{exact} jest dokładną wartością energii całkowitej rozpatrywanego układu izolowanego.

Jak już to zostało wcześniej wspomniane, (por. podrozdz. 5.1) będą rozpatrywane następujące profile energii potencjalnej:

a) studnia paraboliczna

$$U_{SHO}(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (308)$$

b) studnia gaussowska

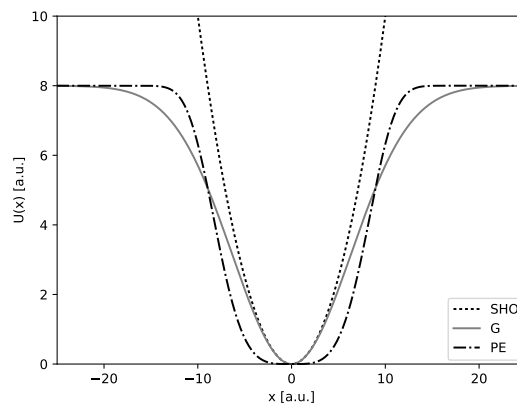
$$U_G(x) = U_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_B^2}\right) \right] \quad (309)$$

c) studnia wykładniczo-potęgowa

$$U_{PE}(x) = U_0 \left\{ 1 - \exp\left[-\left(\frac{x}{\sqrt{2}\sigma_B}\right)^{2n}\right] \right\}, \quad (310)$$

dla $n = 2$. Przy okazji warto zaznaczyć, że energia potencjalna wyrażona wzorem (309) jest szczególnym przypadkiem funkcji wykładniczo-potęgowej (310) dla $n = 1$.

W powyższych równaniach (308)-(310) użyte symbole mają następujące znaczenie m jest masą cząstki, ω jest częstością kołową oscylatora harmonicznego, U_0 jest głębokością studni potencjału, a σ_x jest związana z szerokością studni potencjału. Dla przyjętych wartości parametrów, które zostaną podane w dalszej części, profile energii potencjalnych są przedstawione na rys. 8.



Rysunek 8: Rozważane profile energii potencjalnej: oscylator harmoniczny (SHO), studnia gaussowska (G) i studnia wykładniczo-potęgowa (PE).

Mając zadaną funkcję Wignera w stanie początkowym (304) oraz trzy powyższe profile energii potencjalnej, możemy wyznaczyć analitycznie wartości oczekiwane energii potencjalnej dla każdego z tych przypadków na podstawie wzoru (305). W rezultacie otrzymujemy następujące wyrażenia:

a) dla studni parabolicznej

$$E_{SHO}^{exact} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} + p_0^2 \right) + \frac{m\omega^2}{2} \sigma_B^2, \quad (311)$$

b) dla studni gaussowskiej

$$E_G^{exact} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} + p_0^2 \right) + U_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\sigma_B^2}{\sigma_x^2 + \sigma_B^2}} \right), \quad (312)$$

c) dla studni wykładniczo-potęgowej

$$E_{PE}^{exact} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2} + p_0^2 \right) + U_0 \left[1 - \frac{\sigma_B^2}{2\pi\sigma_x^2} \exp\left(\frac{\sigma_B^4}{8\sigma_x^4}\right) K_{\frac{1}{4}}\left(\frac{\sigma_B^4}{8\sigma_x^4}\right) \right], \quad (313)$$

gdzie $K_\nu(x)$ jest zmodyfikowaną funkcją Bessela drugiego rodzaju.

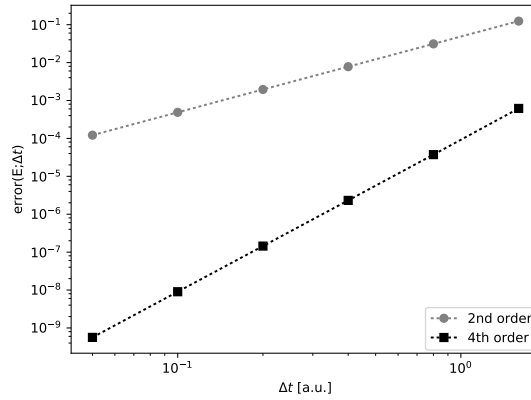
Wszystkie obliczenia zostały przeprowadzone w jednostkach atomowych (a.u.), to znaczy $\hbar = m = 1$. Szczególnego znaczenia nabiera przypadek parabolicznej studni potencjału, bowiem ewolucja czasowa może zostać wyznaczona analitycznie i dla tego przypadku wprowadzamy dodatkową miarę dokładności algorytmu numerycznego, konkretnie

$$\text{error}(\varrho; \Delta t) = \max_t \left\{ \hbar \sum_{ij} [\varrho_{ij}^{exact}(t) - \varrho_{ij}^{num}(t; \Delta t)]^2 \Delta x \Delta p \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (314)$$

Jest to pierwiastek średniego błędu kwadratowego funkcji Wignera, a stała \hbar została wprowadzona, by zapewnić bezwymiarowość rozważanej miary błędu.

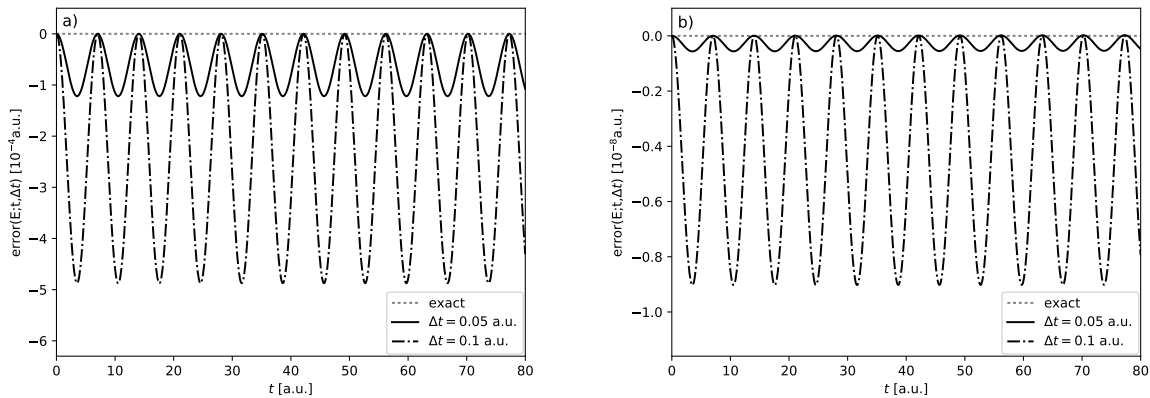
Potencjał oscylatora harmonicznego

W naszych obliczeniach korzystaliśmy z energii potencjalnej (308) z parametrem $\omega = 1/\sqrt{5}$ a.u. W funkcji Wignera stanu początkowego (304) przyjęliśmy z kolei $p_0 = 1$ a.u. oraz $\sigma_x^2 = 0.25$ a.u. Wtedy wartość oczekiwana energii całkowitej (311) przyjmuje wartość $E_{HO}^{exact} = 1.025$ a.u. Maksyma błędów energii potencjalnej w czasie całej symulacji dla faktoryzacji operatora ewolucji czasowej drugiego oraz czwartego rzędu zostały przedstawione na rysunku 9 w funkcji kroku czasowego Δt . Rysunek ten pokazuje, że dla najkrótszego kroku czasowego $\Delta t = 0.05$ a.u. metoda czwartego rzędu daje nam błąd o pięć rzędów wielkości mniejszy, niż w przypadku metody drugiego rzędu. Nawet dla najdłuższego rozważanego kroku czasowego $\Delta t = 1.6$ a.u. błąd metody czwartego rzędu jest porównywalny do błędu metody drugiego rzędu z najkrótszym krokiem czasowym $\Delta t = 0.05$ a.u.



Rysunek 9: Maksyma błędów energii całkowitej w czasie symulacji dla różnych kroków czasowych w przypadku algorytmów drugiego oraz czwartego rzędu zastosowanych w przypadku potencjału oscylatora harmonicznego

Zależność czasowa błędów energii całkowitej w czasie symulacji, dla każdej z metod, została przedstawiona na rysunku 10.



Rysunek 10: Zależność błędów energii całkowitej od czasu dla różnych wartości kroków czasowych: $\Delta t = 0.05$ a.u. (linia ciągła) oraz $\Delta t = 0.1$ a.u. (linia przerywana) dla a) algorytmu drugiego rzędu oraz b) algorytmu czwartego rzędu, w obu przypadkach dla potencjału oscylatora harmonicznego.

Jedyną widoczną różnicą pomiędzy wykresami dla tych dwóch różnych kroków czasowych jest skalowanie, kształt pozostaje praktycznie ten sam. Obserwacja ta jest też prawdziwa dla wszystkich pozostałych kroków czasowych, które były rozważane. W przypadku oscylatora harmonicznego równanie Moyala może zostać rozwiązane analitycznie, chociażby przy pomocy metody charakterystyk (patrz podrozdział 3.2 w [126]). Rozwiązanie to ma postać [131]

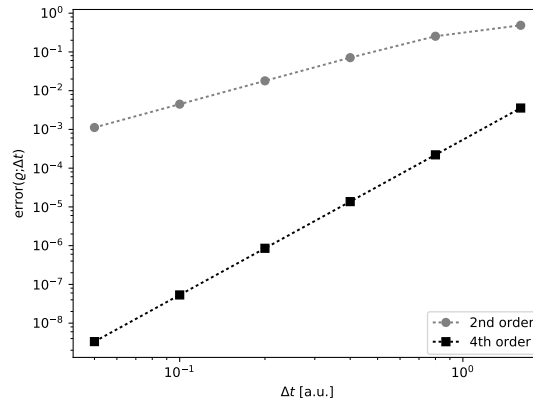
$$\varrho(x, p; t) = \varrho \left(x \cos \omega t - \frac{p}{m\omega} \sin \omega t, p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t; 0 \right). \quad (315)$$

Dla stanu początkowego w postaci (304) powyższa formuła prowadzi do następującej ewolucji

czasowej funkcji Wignera

$$\varrho_{SHO}(x, p, t) = \frac{1}{\pi \hbar} \exp \left[-\frac{\left(x \cos \omega t - \frac{p}{m\omega} \sin \omega t\right)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2 \left(p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t - p_0\right)^2}{\hbar^2} \right]. \quad (316)$$

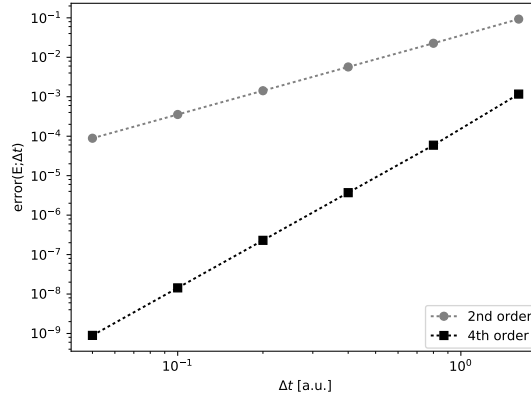
Maksima błędów dla funkcji Wignera dla obu rozważanych faktoryzacji operatora ewolucji czasowej w funkcji długości kroku czasowego Δt są przedstawione na rysunku 11. Możemy zaobserwować, że dla najkrótszego kroku czasowego $\Delta t = 0.05$ a.u. metoda czwartego rzędu daje błąd o pięć rzędów wielkości mniejszy, niż metoda drugiego rzędu. Nawet dla najdłuższego rozważanego kroku czasowego $\Delta t = 1.6$ a.u. błąd metody czwartego rzędu jest porównywalny do błędu metody drugiego rzędu z najkrótszym krokiem czasowym Δt . Błąd funkcji Wignera zachowuje się praktycznie identycznie do błędu energii całkowitej na rysunku 9 poza minimalnym odchyleniem od zależności liniowej w podwójnej skali logarytmicznej dla najdłuższego kroku czasowego w metodzie drugiego rzędu.



Rysunek 11: Maksima wartości błędu funkcji Wignera w czasie symulacji dla różnych kroków czasowych w przypadku faktoryzacji drugiego oraz czwartego rzędu zastosowanych do układu z potencjałem oscylatora harmonicznego.

Potencjał gaussowski

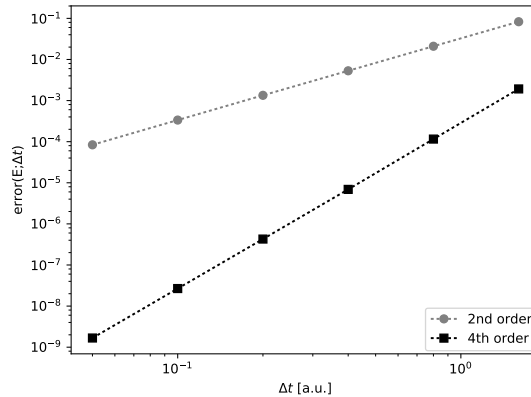
W naszych obliczeniach używaliśmy energii potencjalnej (309) z wartościami parametrów $U_0 = 8$ a.u. oraz $\sigma_B^2 = 40$ a.u. W funkcji Wignera dla stanu początkowego (304) przyjęto $p_0 = 1$ a.u. oraz $\sigma_x^2 = 0.25$ a.u. Wtedy wartość oczekiwana energii całkowitej (312) wynosi $E_g^{exact} = 1.024883$ a.u. Maksima błędu energii całkowitej dla obu faktoryzacji operatora ewolucji czasowej zostały przedstawione na rysunku 12. Okazują się one analogiczne do wyników uzyskanych poprzednio dla potencjału oscylatora harmonicznego. Analogicznie dla kroku czasowego $\Delta t = 0.05$ a.u. metoda czwartego rzędu daje błąd mniejszy o pięć rzędów wielkości, niż metoda drugiego rzędu. Również dla najdłuższego badanego kroku czasowego $\Delta t = 1.6$ a.u. błąd dla metody czwartego rzędu jest porównywalny do błędu dla metody drugiego rzędu i najkrótszego kroku czasowego $\Delta t = 0.05$ a.u.



Rysunek 12: Maksima błędów energii całkowitej w czasie symulacji dla różnych kroków czasowych w przypadku faktoryzacji rzędu drugiego oraz czwartego dla układu z potencjałem gaussowskim.

Potencjał wykładniczo-potęgowy

W naszych obliczeniach używaliśmy energii potencjalnej (310) z następującymi wartościami parametrów $U_0 = 8$ a.u. oraz $\sigma_B^2 = 40$ a.u. W funkcji Wignera dla stanu początkowego (304) przyjęliśmy tak jak poprzednio $p_0 = 1$ a.u. oraz $\sigma_x^2 = 0.25$ a.u. Wartość oczekiwana energii całkowitej dla takiego układu (312) wynosi $E_g^{exact} = 1.000234$ a.u. Maksima błędów energii całkowitej dla obu faktoryzacji operatora ewolucji czasowej zostały przedstawione na rysunku 13. Przedstawiają one bardzo podobne zachowanie do wyników uzyskanych poprzednio dla oscylatora harmonicznego oraz potencjału gaussowskiego, przedstawionych na rysunkach odpowiednio 9 oraz 12.



Rysunek 13: Maksima błędów energii całkowitej dla różnych kroków czasowych oraz faktoryzacji drugiego i czwartego rzędu dla układu z potencjałem wykładniczo-potęgowym.

Podsumowanie

W podsumowaniu, badaliśmy dynamikę funkcji Wignera dla stanu koherentnego w przestrzeni fazowej dla trzech różnych potencjałów uwięzienia, zgodnie z równaniem Moyala zadającym ewolucję czasową funkcji Wignera. Analizowaliśmy dokładność algorytmu bazującego na metodzie spectral split-operator dla różnych długości kroku czasowego oraz dla faktoryzacji operatora ewolucji czasowego drugiego i czwartego rzędu. Faktoryzacja czwartego rzędu została po raz

pierwszy użyta do badania dynamiki funkcji Wignera w przestrzeni fazowej. Wpływ warunków brzegowych na dynamikę funkcji Wignera został ominięty poprzez zastosowanie na tyle dużego pudła obliczeniowego, by w czasie całej symulacji funkcja Wignera nie dotarła do brzegów pudła obliczeniowego. Używany przez nas rozmiar siatki obliczeniowej 1024×1024 jest na tyle duży, że błąd związany z dyskretyzacją zmiennych przestrzenno-fazowych jest znacznie mniejszy, niż błąd związany z faktoryzacją operatora ewolucji czasowej dla rozważanych długości kroku czasowego. Jako miary dokładności algorytmu używaliśmy odchylenia wartości energii całkowitej od wartości dokładnej wyznaczonej analitycznie. Dla każdego profilu energii potencjalnej otrzymaliśmy bardzo podobne zależności błędu energii całkowitej w funkcji długości kroku czasowego. Wspomniane zależności są bardzo bliskie liniowym w podwójnej skali logarytmicznej, co oznacza, że są one bardzo bliskie zależnościom potęgowym. Dokładniej, niezależnie od postaci energii potencjalnej, błąd energii całkowitej jest w dobrym przybliżeniu proporcjonalny do pewnej potęgi kroku czasowego, która to potęga okazała się równa rzędowi użytej faktoryzacji operatora ewolucji czasowej. Dla zadanej faktoryzacji operatora ewolucji czasowej oraz zadanego profilu energii potencjalnej, błąd energii całkowitej w funkcji czasu wykazuje praktycznie identyczny kształt niezależnie od długości kroku czasowego, który ma jedynie wpływ na skalowanie tego błędu. Dokładniej to skalowanie ma postać ilorazu długości dwóch rozważanych kroków czasowych podniesionego do potęgi równej rzędowi faktoryzacji operatora ewolucji czasowej, która jest używana. Dodatkowo, w przypadku oscylatora harmonicznego przebadaliśmy również błąd w normie L^2 dla numerycznie wyznaczonej funkcji Wignera w stosunku do funkcji Wignera wyznaczonej analitycznie. Zaobserwowane zachowanie błędu oraz jego skalowanie jest bardzo bliskie wynikom zaobserwowanym dla błędu energii całkowitej. Po przeprowadzeniu wszystkich symulacji możemy bez wątpliwości stwierdzić, że metoda faktoryzacji operatora ewolucji czasowej rzędu czwartego jest wyraźnie lepsza, niż faktoryzacja rzędu drugiego. Metoda czwartego rzędu wymaga jedynie $5/3$ razy więcej operacji do obliczenia pojedynczego kroku czasowego (dziesięć transformacji Fouriera i pięć iloczynów Hadamarda w porównaniu do sześciu transformacji Fouriera i trzech iloczynów Hadamarda dla faktoryzacji drugiego rzędu), a jednocześnie daje o kilka rzędów wielkości lepszą dokładność obliczeń dla identycznej długości kroku czasowego.

5.3 Dynamika funkcji Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera

Ogólna charakterystyka zdefektowanego stanu kota Schrödingera

Jednym z fundamentów teorii kwantowej jest zasada superpozycji stanów zgodnie z którą układ kwantowy może znaleźć się w stanie będącym kombinacją liniową różnych stanów realizowanych przez rozpatrywany układ. Za przykład zastosowania tej zasady do modelowania nieklasycznych stanów układu kwantowego może posłużyć konstrukcja funkcji falowej będącej kombinacją liniową dwóch identycznych pakietów gaussowskich rozsuniętych przestrzennie [132]. Tak utworzona funkcja falowa jest często wykorzystywana do opisanego nieklasycznego stanu nazywanego stanem kota Schrödingera [31]. W reprezentacji położeniowej funkcja falowa takiego stanu może być zapisana w następującej postaci

$$\psi_{SC}(x) = N_{SC} \left(\sqrt{1 - \beta} \psi_1(x) + \sqrt{\beta} e^{i\theta} \psi_2(x) \right), \quad (317)$$

przy czym gaussowskie funkcje falowe $\psi_{1,2}(x)$ tworzące ten stan przyjmujemy w postaci zgodnej ze wzorem (303), tj.

$$\psi_{1,2}(x) = \sqrt[4]{\frac{1}{2\pi\sigma_x^2}} \exp \left(-\frac{(x - \langle x_{1,2} \rangle)^2}{4\sigma_x^2} + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x \right). \quad (318)$$

Podstawienie ich do wyrażenia danego wzorem (317) prowadzi do funkcji falowej dla stanu kota Schrödingera w następującej postaci

$$\begin{aligned} \psi_{SC}(x) = N_{SC} & \left(\sqrt{1-\beta} \exp \left(-\frac{(x-\langle x_1 \rangle)^2}{4\sigma_x^2} + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x \right) \right. \\ & \left. + \sqrt{\beta} e^{i\theta} \exp \left(-\frac{(x-\langle x_2 \rangle)^2}{4\sigma_x^2} + \frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x \right) \right), \end{aligned} \quad (319)$$

gdzie parametry $N_{SC}, \beta, \theta \in \mathbb{R}$. Parametr β jest związany ze stosunkiem amplitud tych dwóch funkcji falowych tworzących superpozycję, N_{SC} jest stałą normalizacyjną, θ jest fazą względną między dwoma pakietami gaussowskimi natomiast pozostałe symbole występujące w tym wyrażeniu są zgodne ze standardowymi oznaczeniami, przy czym $\langle x_{1(2)} \rangle$ oznacza wartość oczekiwaną położenia dla pierwszego (drugiego) gaussianu, a $\langle p \rangle$ oznacza wartość oczekiwaną pędu. Macierz gęstości w reprezentacji położeniowej odpowiadająca stanowi kota Schrödingera (317) ma następującą postać

$$\begin{aligned} \rho_{SC}(x, y) = \psi_{SC}(x)\psi_{SC}^*(y) = N_{SC}^2 & \left((1-\beta) \psi_1(x)\psi_1^*(y) + \beta\psi_2(x)\psi_2^*(y) \right. \\ & \left. + \sqrt{\beta(1-\beta)} (e^{i\theta}\psi_2(x)\psi_1^*(y) + e^{-i\theta}\psi_1(x)\psi_2^*(y)) \right), \end{aligned} \quad (320)$$

natomiast dla stanu mieszanego utworzonego z dwóch pakietów gaussowskich $\psi_1(x)$ oraz $\psi_2(x)$, macierz gęstości ma postać

$$\rho_{mix}(x, y) = N_{mix}^2 ((1-\beta) \psi_1(x)\psi_1^*(y) + \beta\psi_2(x)\psi_2^*(y)). \quad (321)$$

Z porównania wzorów (320) i (321) wynika, że macierz gęstości odpowiadająca stanowi kota Schrödingera zawiera dodatkowy wyraz, reprezentujący interferencję kwantową pomiędzy stanami $\psi_1(x)$ i $\psi_2(x)$. Następnie wprowadźmy macierz gęstości odpowiadającą *zdefektowanemu* stanowi kota Schrödingera (ang. defected Schrödinger cat state – *DSC* state) [56, 133, 134] jako interpolację pomiędzy wprowadzonymi wcześniej stanami reprezentowanymi przez macierze gęstości (320) i (321). Zatem, macierz gęstości stanu *DSC* ma postać

$$\begin{aligned} \rho_{DSC}(x, y) = N_{\Gamma}^2 & \left((1-\beta) \psi_1(x)\psi_1^*(y) + \beta\psi_2(x)\psi_2^*(y) \right. \\ & \left. + \Gamma\sqrt{\beta(1-\beta)} (e^{i\theta}\psi_2(x)\psi_1^*(y) + e^{-i\theta}\psi_1(x)\psi_2^*(y)) \right), \end{aligned} \quad (322)$$

gdzie $\Gamma \in [0, 1]$, a stała normalizacyjna N_{Γ} ma następującą postać

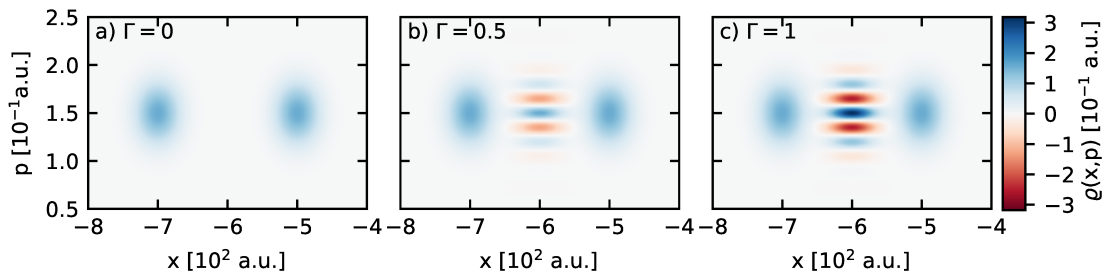
$$N_{\Gamma} = \left(1 + 2\Gamma\sqrt{\beta(1-\beta)} \exp \left(-\frac{(\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle)^2}{8\sigma_x^2} \right) \cos \theta \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (323)$$

W ogólności dla $\Gamma < 1$ jest to stan mieszany, w którym została zniszczona część (bądź całość dla $\Gamma = 0$) interferencji kwantowej między gaussianami. Wartością parametru $\Gamma < 1$ możemy modelować nieuniknioną w warunkach eksperymentalnych niedoskonałość przygotowania stanu kota Schrödingera i związaną z tym utratę części interferencji kwantowej pomiędzy gaussianami. Podstawienie wyrażenia danego wzorem (322) do wzoru na funkcję Wignera (118), pozwala wyprowadzić jawną postać tej ostatniej. W rezultacie funkcja Wignera stanu *DSC* przyjmuje

następującą postać

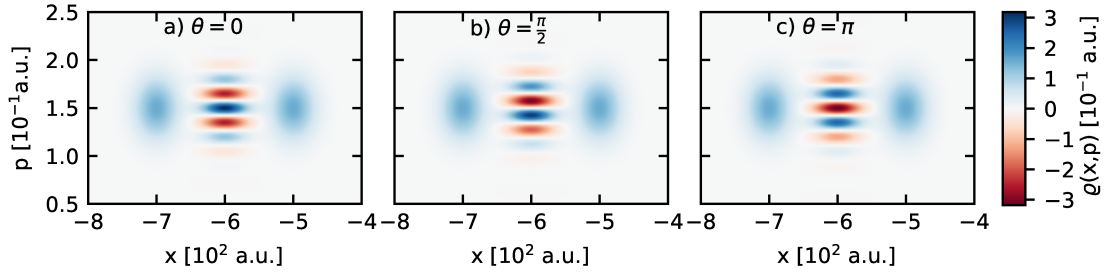
$$\begin{aligned}
 \varrho_{DSC}(x, p) = & N_{\Gamma}^2 \frac{1 - \beta}{\pi \hbar} \exp \left(-\frac{(x - \langle x_1 \rangle)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{2\sigma_x^2 (p - \langle p \rangle)^2}{\hbar^2} \right) \\
 & + N_{\Gamma}^2 \frac{\beta}{\pi \hbar} \exp \left(-\frac{(x - \langle x_2 \rangle)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{2\sigma_x^2 (p - \langle p \rangle)^2}{\hbar^2} \right) \\
 & + 2N_{\Gamma}^2 \Gamma \frac{\sqrt{\beta(1 - \beta)}}{\pi \hbar} \cos \left(\theta + \frac{\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle}{\hbar} (p - \langle p \rangle) \right) \\
 & \cdot \exp \left(-\frac{\left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2} \right)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{2\sigma_x^2 (p - \langle p \rangle)^2}{\hbar^2} \right), \tag{324}
 \end{aligned}$$

Wprowadzona powyżej funkcja Wignera dla stanu DSC (324) będzie użyta w dalszej części jako warunek początkowy dla równania Moyala z następującymi parametrami: $\langle x_1 \rangle = -500$ a.u., $\langle x_2 \rangle = -700$ a.u., $\langle p \rangle = 0, 15$ a.u., $\sigma_x^2 = 500$ a.u., $\theta = 0$ oraz $\beta = 0, 5$. Wybór wartości $\beta = 0, 5$ był podyktowany tym, że wtedy funkcja $\sqrt{\beta(1 - \beta)}$ osiąga maksimum. Tym samym mamy wtedy najsilniejszą interferencję pomiędzy stanami koherentnymi. Odległość między centrami obu pakietów gaussowskich $|\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle|$ dobrano tak, aby przy zadanym σ_x^2 oba pakiety gaussowskie praktycznie się nie przekrywały, a z drugiej strony nie była przesadnie duża, jako że eksperymentalna produkcja takich stanów staje się bardzo trudna, gdy chcemy uzyskać znaczne rozseparowanie przestrzenne pakietów będących w superpozycji. Na rysunku 14 przedstawiono wpływ zmian wartości parametru Γ na funkcję Wignera stanu DSC dla różnicy faz $\theta = 0$, co w zasadzie jest podyktowane dalszym wykorzystaniem jej w obliczeniach związanych z ewolucją czasową.



Rysunek 14: Funkcja Wignera stanu DSC dla $\theta = 0$ oraz różnych wartości Γ .

Jak wynika z przedstawionego rysunku, parametr Γ znacząco modyfikuje jedynie amplitudę wyrazu interferencyjnego w funkcji Wignera, a w granicznym przypadku odpowiadającym $\Gamma = 0$ prowadzi do jej wygaszenia. Z drugiej strony na rysunku 15 zilustrowano także wpływ względnej fazy θ pomiędzy dwoma pakietami gaussowskimi dla parametru $\Gamma = 1$.


 Rysunek 15: Funkcja Wignera stanu DSC dla $\Gamma = 1$ oraz różnych wartości θ .

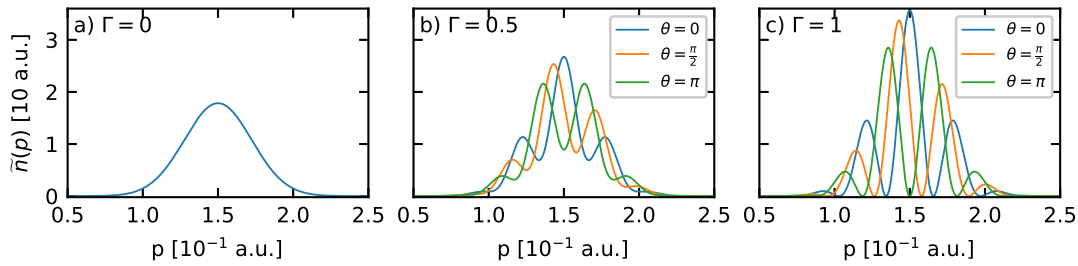
Jak z niego wynika, względna faza manifestuje się wyłącznie poprzez przesunięcie w fazie cosinusa modulującego gaussian we wspomnianym już wyrazie interferencyjnym. Jednakże dalsza analiza wpływu względnej fazy na dynamikę kwantową stanu DSC nie była przedmiotem tej pracy i w związku z tym nie będzie ona dalej omawiana szczegółowo. Znajomość jawnej postaci funkcji Wignera dla stanu DSC wyrażonej wzorem (324) umożliwia wyznaczenie jej rozkładów brzegowych zgodnie ze wzorami (123) oraz (124). Zatem, rozkład brzegowy odpowiadający stanowi DSC w przestrzeni położeniowej ma postać wyrażoną następującym wzorem

$$\begin{aligned}
 n(x) = & \frac{N_{\Gamma}^2}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \left((1 - \beta) \exp\left(-\frac{(x - \langle x_1 \rangle)^2}{2\sigma_x^2}\right) + \beta \exp\left(-\frac{(x - \langle x_2 \rangle)^2}{2\sigma_x^2}\right) \right) \\
 & + \frac{2N_{\Gamma}^2\Gamma\sqrt{\beta(1 - \beta)}}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{(\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle)^2}{8\sigma_x^2}\right) \exp\left(-\frac{\left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2}\right)^2}{2\sigma_x^2}\right) \cos \theta. \quad (325)
 \end{aligned}$$

Jako, że dla przyjętych parametrów stanu wartość czynnika eksponencjalnego $\exp[-(\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle)/(8\sigma_x^2)]$ wynosi $0,454 \times 10^{-5}$, to trzeci składnik po prawej stronie w (325) jest w zasadzie zaniedbywalny. Stąd rozkład brzegowy w przestrzeni położeniowej praktycznie nie zależy od parametrów Γ i θ dla rozpatrywanego stanu DSC . Kompletnie inaczej sytuacja wygląda w przypadku rozkładu brzegowego w przestrzeni pędowej dla tego stanu, mianowicie jest on wyrażony wzorem

$$\begin{aligned}
 \tilde{n}(p) = & \frac{N_{\Gamma}^2}{\hbar} \sqrt{\frac{2\sigma_x^2}{\pi}} \left(1 + 2\sqrt{\beta(1 - \beta)}\Gamma \cos\left(\theta + \frac{\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle}{\hbar}(p - \langle p \rangle)\right) \right) \\
 & \cdot \exp\left(-\frac{2\sigma_x^2(p - \langle p \rangle)^2}{\hbar^2}\right). \quad (326)
 \end{aligned}$$

Na rysunku 16 został przedstawiony powyższy rozkład brzegowy w przestrzeni pędowej dla różnych wartości parametrów θ i Γ , przy czym wartości pozostałych parametrów charakteryzujących ten stan pozostały takie same jak poprzednio.



Rysunek 16: Rozkład brzegowy funkcji Wignera stanu DSC w przestrzeni pędowej dla różnych wartości Γ i $\theta = 0$.

W rozkładzie brzegowym w przestrzeni pędowej, który może być relatywnie prosto zmierzony eksperymentalnie, wyraźnie zaznacza się wpływ poszczególnych parametrów naszego stanu. Obwiednia takiej gęstości ma zawsze postać gaussiana, natomiast wraz ze wzrostem parametru Γ pojawiają się coraz wyraźniejsze oscylacje (ich amplituda jest wprost proporcjonalna do wartości tegoż parametru (patrz wzór (326))). Zmiana parametru θ prowadzi do przesunięcia wspomnianych oscylacji w fazie. Dodatkowo częstotliwość tych oscylacji jest wprost proporcjonalna do odległości między centrami obu pakietów falowych tworzących stanu DSC . Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na na niezbyt intuicyjny efekt związany z rozpatrywanym stanem DSC , mianowicie tak skonstruowany stan, tzn. złożony z dwóch stanów koherentnych o wartości oczekiwanej pędu $\langle p \rangle$, sam nie zawsze ma wartość oczekiwaną pędu równą $\langle p \rangle$, ale jest on funkcją jego parametrów, konkretnie wyraża się ona następująco (wprowadziliśmy oznaczenie $D = |\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle|$)

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_{DSC} &= \int_{\mathbb{R}^2} p \varrho(x, p) dx dp \\ &= N_{\Gamma}^2 \left(\langle p \rangle + 2\Gamma \sqrt{\beta(1-\beta)} \exp\left(-\frac{D^2}{8\sigma_x^2}\right) \left(\langle p \rangle \cos \theta + \frac{\hbar D}{\sigma_x^2} \right) \right). \end{aligned} \quad (327)$$

Ustalając wartości pozostałych parametrów charakteryzujących stan DSC tak samo jak w poprzednim przypadku, tj. $D = 200$ a.u., pęd początkowy $\langle p \rangle = 0.15$ a.u., $\beta = 0.5$, $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u., policzyliśmy wartości oczekiwane pędu stanu DSC dla różnych wartości Γ oraz θ . Wyniki tych obliczeń zostały zebrane i przedstawione w tabeli poniżej.

Γ	$\theta = 0$	$\theta = \frac{\pi}{2}$	$\theta = \pi$
0	0,15	0,15	0,15
0,5	0,149990920220	0,149990920014	0,149990919808
1	0,149981840853	0,149981840028	0,149981839204

Tabela 3: Wartość oczekiwana pędu wyrażonego w [a.u.] dla stanu DSC dla różnych wartości parametrów θ i Γ .

Uzyskane wyniki pozwalają stwierdzić, że wpływ rozpatrywanych parametrów na wartość oczekiwaną pędu stanu DSC jest praktycznie pomijalny, bowiem w tych przypadkach wartości oczekiwane pędu są do siebie bardzo zbliżone. Na zakończenie charakterystyki stanu DSC wyznaczmy jeszcze wpływ wartości parametrów Γ i θ na wartość oczekiwaną jego energii

kinetycznej, która jest określona wzorem

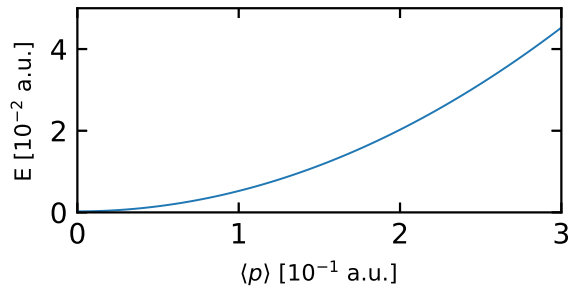
$$\begin{aligned}
 E_{DSC} &= \int \frac{p^2}{2m} \varrho_{DSC}(x, p) dx dp = \frac{1}{2m} \int p^2 \tilde{n}(p) dp \\
 &= \frac{N_{\Gamma}^2}{2m} \left(\langle p \rangle^2 + \frac{\pi \hbar^3}{4\sigma_x^2} \right) + \frac{N_{\Gamma}^2 \Gamma}{m} \sqrt{\beta(1-\beta)} \exp\left(-\frac{D^2}{8\sigma_x^2}\right) \\
 &\quad \cdot \left(\frac{\hbar^2}{16\sigma_x^4} (4\sigma_x^2 - D^2) \cos \theta + \langle p \rangle^2 \cos(\theta) - 2 \langle p \rangle \frac{\hbar D}{\sigma_x^2} \sin \theta \right). \tag{328}
 \end{aligned}$$

Ustalając wartości pozostałych parametrów charakteryzujących stan DSC tak samo jak w poprzednim przypadku, tj. $D = 200$ a.u., pęd początkowy $\langle p \rangle = 0.15$ a.u., $\beta = 0.5$, $\sigma_x = \sqrt{500}$ a.u., policzyliśmy wartości energii kinetycznej tego stanu. Wyniki tych obliczeń zostały zebrane i przedstawione w poniższej tabeli.

Γ	$\theta = 0$	$\theta = \frac{\pi}{2}$	$\theta = \pi$
0	0,0114994779245	0,0114994779245	0,0114994779245
0,5	0,0114996254676	0,0114998184085	0,0114993303814
1	0,0114997730107	0,0115001588925	0,0114991828384

Tabela 4: Wartość oczekiwana energii kinetycznej wyrażonej w [a.u.] dla stanu DSC dla różnych wartości parametrów θ i Γ .

Uzyskane wyniki pozwalają stwierdzić, że wpływ rozpatrywanych parametrów na energię kinetyczną stanu DSC jest bardzo nieznaczny, bowiem w tych przypadkach wartości oczekiwane energii kinetycznej są bardzo zbliżone do siebie. Z kolei wpływ parametru $\langle p \rangle$ na wartość oczekiwaną energii kinetycznej stanu DSC przedstawia rysunek 17.



Rysunek 17: Wartość oczekiwana energia całkowitej stanu DSC w funkcji $\langle p \rangle$.

Uzyskane wartości praktycznie nie zależą od wartości parametrów Γ oraz θ dla uprzednio przyjętych pozostałych parametrów charakteryzujących rozpatrywany stan DSC .

Ewolucja rozkładów gęstości prawdopodobieństwa

Ewolucja czasowa funkcji Wignera stanu DSC poruszającego się w pustej przestrzeni jest rozwiązaniem równania Moyala (127) dla energii potencjalnej $U(x) = 0$. Rozwiązanie tego równania można uzyskać stosunkowo prosto poprzez zastosowanie metody charakterystyk (patrz podrozdział 3.2 w [126]). W rezultacie zależność czasowa funkcji Wignera rozważanego stanu może być zapisana w postaci [131]

$$\varrho(x, p; t) = \varrho\left(x - \frac{t}{m}p, p; 0\right). \tag{329}$$

Dzięki temu można także wyznaczyć, zgodnie ze wzorem (123), ewolucję czasową rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej $n(x; t)$. Uzyskany w ten sposób rozkład $n(x; t)$ jest wyrażony wzorem

$$n(x; t) = \int \varrho(x, p; t) dp = \int \varrho \left(x - \frac{t}{m} p, p; 0 \right) dp. \quad (330)$$

Przyjmując, że w chwili początkowej stan *DSC* jest zadany przez funkcję Wignera $\varrho(x, p; 0)$ wyrażoną wzorem (324), otrzymujemy

$$\begin{aligned} n(x; t) = C_t \left\{ (1 - \beta) \exp \left[-\frac{\left(x - \langle x_1 \rangle - \frac{t}{m} \langle p \rangle \right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] + \beta \exp \left[-\frac{\left(x - \langle x_2 \rangle - \frac{t}{m} \langle p \rangle \right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] \right. \\ \left. + 2\Gamma \sqrt{\beta(1 - \beta)} N(t) \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2} - \frac{t}{m} \langle p \rangle \right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] \right. \\ \left. \cdot \cos \left[\theta + k(t) \left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2} - \frac{t}{m} \langle p \rangle \right) \right] \right\}, \quad (331) \end{aligned}$$

gdzie funkcje: $\sigma^2(t)$, $N(t)$, $k(t)$ oraz $C(t)$ występujące w tym wyrażeniu są określone w następujący sposób

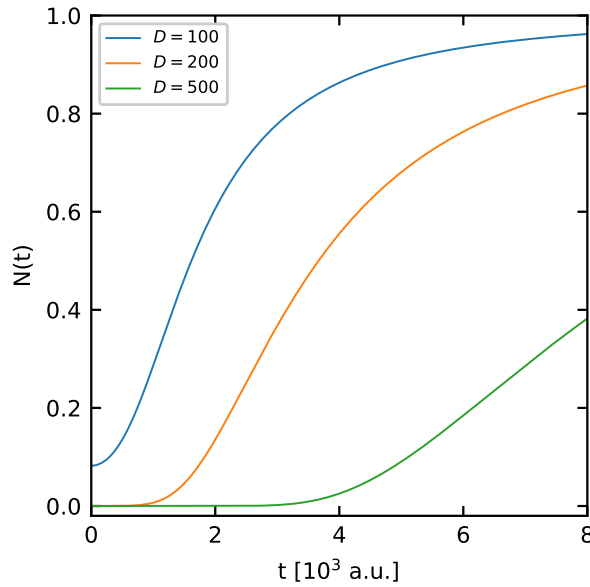
$$\sigma^2(t) = \sigma_x^2 \left(1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4\sigma_x^4 m^2} \right), \quad (332)$$

$$N(t) = \exp \left(-\frac{m^2 \sigma_x^2 (\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle)^2}{2(\hbar^2 t^2 + 4\sigma_x^4 m^2)} \right), \quad (333)$$

$$k(t) = \frac{\hbar m (\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle) t}{\hbar^2 t^2 + 4\sigma_x^4 m^2}, \quad (334)$$

$$C(t) = \frac{N_\Gamma^2}{\pi} \sqrt{\frac{2\pi\sigma_x^2 m^2}{\hbar^2 t^2 + 4\sigma_x^4 m^2}}, \quad (335)$$

przy czym N_Γ wyraża się wzorem (323). Ostatni składnik we wzorze (331) zawiera zależny od czasu czynnik $N(t)$, który jest funkcją ściśle rosnącą na przedziale $[0, \infty)$ i o tej własności, że $\lim_{t \rightarrow \infty} N(t) = 1$. Wykres tej funkcji, dla różnych wartości odległości D między gaussianami tworzącymi rozpatrywany stan, jest przedstawiony na rysunku 18 dla następującej wartości wariancji $\sigma_x^2 = 500$ a.u. Z przedstawionej zależności wynika, że tempo wzrostu funkcji $N(t)$ maleje wraz ze wzrostem odległości D .



Rysunek 18: Zależność czasowa $N(t)$ dla różnych wartości $D = |\langle x_1 \rangle - \langle x_2 \rangle|$.

Ewolucja czasowa rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej $n(x; t)$ określona wzorem (331) może zostać wyrażona w następującej postaci

$$n(x; t) = n_1(x; t) + n_2(x; t), \quad (336)$$

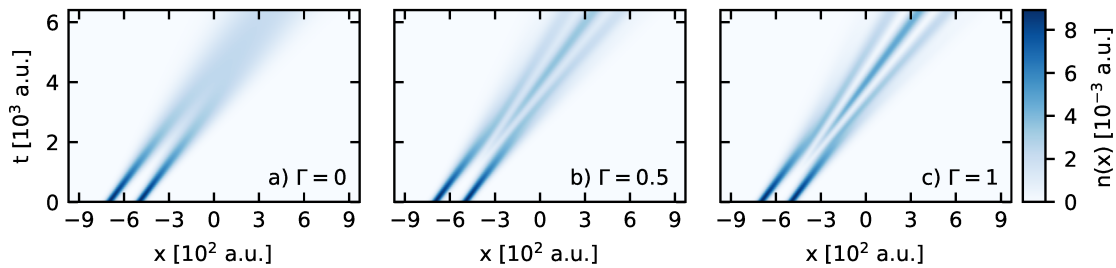
gdzie wyraz $n_1(x; t)$ jest dany wzorem

$$n_1(x; t) = C_t \left\{ (1 - \beta) \exp \left[-\frac{\left(x - \langle x_1 \rangle - \frac{t}{m} \langle p \rangle\right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] + \beta \exp \left[-\frac{\left(x - \langle x_2 \rangle - \frac{t}{m} \langle p \rangle\right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] \right\}, \quad (337)$$

natomiast wyraz $n_2(x; t)$ ma następującą postać

$$n_2(x; t) = C_t \left\{ 2\Gamma \sqrt{\beta(1 - \beta)} N(t) \exp \left[-\frac{\left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2} - \frac{t}{m} \langle p \rangle\right)^2}{2\sigma^2(t)} \right] \cdot \cos \left[\theta + k(t) \left(x - \frac{\langle x_1 \rangle + \langle x_2 \rangle}{2} - \frac{t}{m} \langle p \rangle\right) \right] \right\}. \quad (338)$$

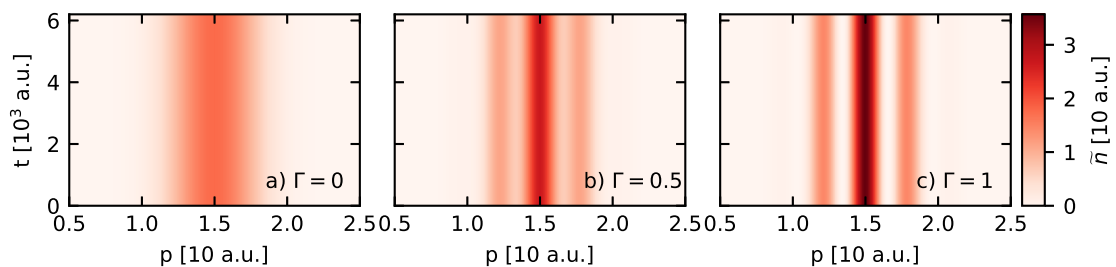
Przedstawiony podział rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej pozwala stwierdzić, że istotny wpływ parametru Γ na analizowany rozkład wynika z wyrazu $n_2(x; t)$, bowiem modyfikacja wyrazu $n_1(x; t)$ pochodząca od Γ jest zanedbywalna dla rozseparowanych gaussianów. Na rysunku 19 została przedstawiona ewolucja czasowa rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej dla różnych wartości parametru Γ . Dla parametru $\Gamma = 0$ obserwujemy, że oba gaussiany się rozszerzają, aż w pewnym momencie zlewają się ze sobą. Dla niezerowych wartości Γ obserwujemy różnicę w ewolucji czasowej w stosunku do przypadku $\Gamma = 0$ dopiero po upływie pewnego czasu. Jest to związane z faktem, że funkcja $N(t)$ sterująca amplitudą funkcji $n_2(x; t)$ w chwili początkowej przyjmuje wartość 0 i narasta wraz z upływem czasu.



Rysunek 19: Ewolucja gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej w przypadku pustej przestrzeni.

Rysunek 19 może być uważany za rodzaj tzw. dywanu kwantowego (z ang. quantum carpet) obrazującego zmiany czasowe rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej na płaszczyźnie czas-położenie.

Z kolei rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej wyrażony wzorem (326) został przedstawiony na rysunku 20.



Rysunek 20: Ewolucja gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej w przypadku pustej przestrzeni.

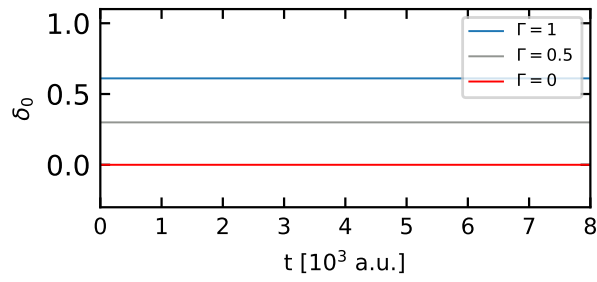
W gruncie rzeczy z przedstawionego rysunku wynika, że rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej ustalony w chwili $t = 0$, jak to ma miejsce na rysunku 16, pozostaje zachowany w trakcie trwania ewolucji tego stanu dla $t > 0$.

Parametr nieklasyczności

Jak już wspomnieliśmy w rozdziale 3, w odróżnieniu od klasycznej funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa, funkcja Wignera może przyjmować wartości ujemne w pewnych obszarach przestrzeni fazowej. Wyznaczając objętość zajmowaną przez ujemną część funkcji Wignera można ilościowo wyrazić nieklasyczność odpowiadającego jej stanu kwantowego. Powyższe stwierdzenie jest oparte na spostrzeżeniu, że dla stanów czystych funkcja Wignera jest nieujemna tylko dla stanów gaussowskich (uważanych za stany najbliższe klasycznym), o czym mówi twierdzenie Hudsona [105], wspomniane już w rozdziale 3. Jedną z powszechnie stosowanych w literaturze miar nieklasyczności stanu wyrażonego przez funkcję Wignera w przestrzeni fazowej jest parametr określający podwojoną objętość ujemnej części funkcji Wignera wprowadzony przez A. Kenfacka i K. Życzkowskiego w pracy [135], mianowicie

$$\delta(t) = \int (|\varrho(x, p, t)| - \varrho(x, p, t)) dx dp. \quad (339)$$

Na rysunku 21 zostały przedstawione zmiany czasowe parametru nieklasyczności dla ustalonych wartości Γ w przypadku ewolucji stanu DSC w pustej przestrzeni.



Rysunek 21: Ewolucja czasowa parametru nieklasyczości w pustej przestrzeni i dla stanu początkowego w postaci stanu DSC .

Zgodnie z przewidywaniami parametr nieklasyczości nie zmienia się w trakcie ewolucji czasowej w rozpatrywanym przypadku, ponieważ jak już zauważyliśmy w rozdziale 3, dla potencjałów w postaci wielomianu stopnia co najwyżej drugiego (pusta przestrzeń odpowiada potencjałowi w postaci wielomianu stopnia zerowego), równanie Moyala upraszcza się do równania Liouville'a (137). Zgodnie z przeprowadzoną wcześniej dyskusją taka ewolucja czasowa funkcji Wignera jest wyrażona wzorem (329)

$$\varrho(x, p; t) = \varrho\left(x - \frac{pt}{m}p; 0\right). \quad (340)$$

Zatem, parametr nieklasyczości (339) w chwili czasu t ma następującą postać

$$\delta(t) = \int_{\mathbb{R}^2} |\varrho(x, p; t)| dx dp - 1 = \int_{\mathbb{R}^2} \left| \varrho\left(x - \frac{pt}{m}p; 0\right) \right| dx dp - 1. \quad (341)$$

Dokonując zamiany zmiennych $x' = x - pt/m$, $p' = p$, której jacobian wynosi 1, otrzymujemy

$$\delta(t) = \int_{\mathbb{R}^2} |\varrho(x', p'; t)| dx' dp' - 1 = \delta(0), \quad (342)$$

co dowodzi naszego przypuszczenia, że wartość parametru nieklasyczości nie ulega zmianie gdy brana jest pod uwagę swobodna ewolucja funkcji Wignera.

Rozpraszanie na pojedynczej barierze

Rozważmy teraz dynamikę stanu DSC w przestrzeni położeniowej w której umiejscowiona jest pojedyncza bariera gaussowska. Wtedy operator energii potencjalnej ma następującą postać

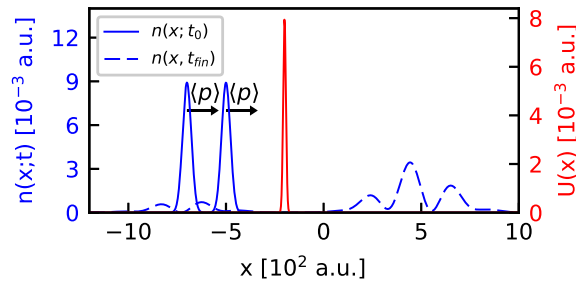
$$U(x) = U_0 \exp\left(-\frac{(x - x_B)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (343)$$

gdzie parametry bariery oraz parametry funkcji Wignera odpowiadające stanowi DSC zostały zebrane w tabeli 5.

stan początkowy	
$\langle x_1 \rangle$	-500 a.u.
$\langle x_2 \rangle$	-700 a.u.
$\langle p \rangle$	0,15 a.u.
σ_x^2	500 a.u.
β	0,5
bariera	
U_0	0,008 a.u.
σ_B^2	50 a.u.
x_B	-200 a.u.

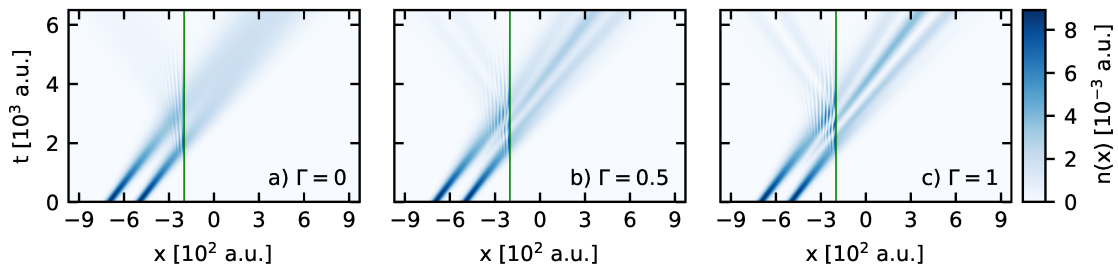
Tabela 5: Przyjęte do symulacji wartości parametrów bariery gaussowskiej oraz stanu początkowego w postaci stanu *DSC*.

Wybór parametrów w tej postaci umożliwił nam ustalenie symulacji dynamiki stanu *DSC* w tzw. reżimie odbicia nad barierą [136, 56], który omówimy dokładniej w podrozdziale 5.5. Poniżej, na rysunku 22, przedstawiono energię potencjalną rozpatrywanego układu oraz gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej na początku i na końcu trwania symulacji.



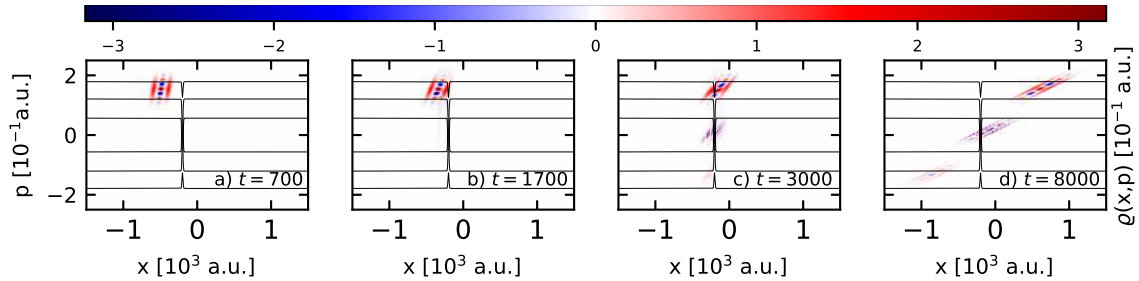
Rysunek 22: Rozkład brzegowy w przestrzeni położeniowej w chwili początkowej (ciągła niebieska linia), w chwili końcowej (przerywana niebieska linia) oraz profil energii potencjalnej rozważanego układu (linia czerwona).

Ewolucję czasową gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej dla $\theta = 0$ i różnych wartości Γ przedstawia rysunek 23, na którym zaznaczono również zieloną linią środek bariery potencjału.



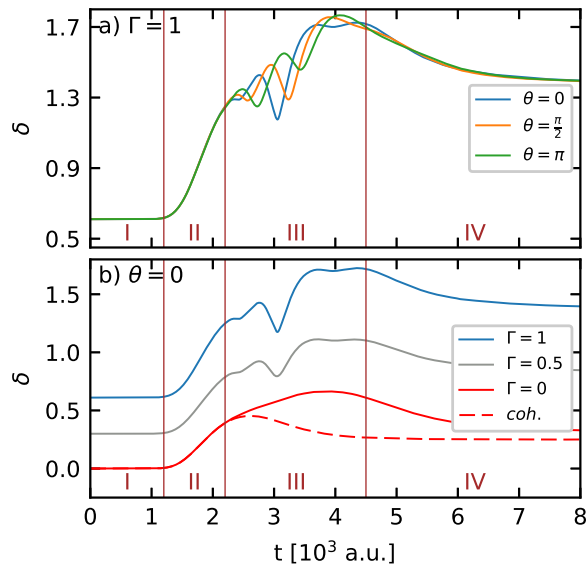
Rysunek 23: Ewolucja gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położeniowej dla bariery gaussowskiej (położenie jej centrum zaznaczono zieloną linią) oraz stanu początkowego w postaci stanu *DSC*.

Widocznym efektem oddziaływania stanu DSC jest pojawienie się części odbitej od bariery. Ponadto można też zaobserwować prążki interferencyjne przed barierą, co może być interpretowane jako wynik wtórnej interferencji związanej z oddziaływaniem stanu DSC z barierą. Wyraz interferencyjny można zilustrować poprzez analizę ewolucji czasowej funkcji Wignera w przestrzeni fazowej. Na rysunku 24 została przedstawiona mapa obrazująca dynamikę funkcji Wignera poprzez ukazanie jej w kilku chwilach czasowych.



Rysunek 24: Mapa obrazująca ewolucję czasową funkcji Wignera dla układu z barierą gaussowską oraz stanem początkowym w postaci stanu DSC .

Z przedstawionego rysunku wynika, że początkowo badany stan przemieszczając się w kierunku bariery podlega deformacjom wynikającym z ruchu swobodnego, który jest opisany równaniem (340). Oddziaływanie z barierą prowadzi do pojawienia się części przechodzącej i odbitej funkcji Wignera oraz oscylacyjnej części między nimi zlokalizowanej w okolicach bariery, która jest interpretowana jako wyraz interferencyjny.



Rysunek 25: Wykresy obrazujące ewolucję czasową parametru nieklasyczności a) w funkcji kąta θ dla $\Gamma = 1$ oraz b) w funkcji parametru Γ dla ustalonego θ dla układu z barierą gaussowską oraz stanem początkowym w postaci stanu DSC .

Z przedstawionej dyskusji wynika, że w wyniku oddziaływania stanu DSC z barierą pojawia się wtórna interferencja względem interferencji występującej w rozpatrywanym stanie. Ten dodatkowy efekt można scharakteryzować ilościowo poprzez analizę parametru nieklasyczności

wyrażonego wzorem (339). Rysunek 25.a) przedstawia ewolucję czasową parametru nieklasyczości dla $\Gamma = 1$ i różnych wartości fazy względnej θ . Na początku symulacji możemy zaobserwować niezerową wartość parametru nieklasyczości z uwagi na oscylujący wyraz interferencyjny w stanie początkowym (324), który przyjmuje również wartości ujemne. Na otrzymanym wykresie można wydzielić cztery obszary:

- Obszar I, gdzie pakiet falowy praktycznie nie odczuwa wpływu bariery potencjału i ewoluuje niemalże jak w pustej przestrzeni. Obszar I rozciąga się od $t = 0$ a.u. do mniej więcej $t = 1200$ a.u. i parametr nieklasyczości jest w nim praktycznie stały.
- Obszar II, gdzie pierwszy z pakietów falowych, składających się na stan układu, zaczyna oddziaływać z barierą potencjału. Obszar II rozciąga się od mniej więcej $t = 1200$ a.u. do mniej więcej $t = 2200$ a.u. i parametr nieklasyczości w nim rośnie ponieważ zaczynają się wtedy pojawiać nowe efekty nieklasyczne, związane ze zjawiskiem tunelowania przez barierę.
- Obszar III, gdzie pierwszy z pakietów falowych składających się na stan układu już w większości przeszedł przez barierę potencjału, a nadchodzący drugi pakiet falowy właśnie rozpoczyna proces oddziaływania z barierą. Obszar III rozciąga się mniej więcej od $t = 2200$ a.u. do około $t = 4500$ a.u., (gdy w zasadzie kończy się silne oddziaływanie z barierą, część stanu kwantowego zdążyła przejść przez barierę potencjału, a pozostałą część zdążyła już się odbić od bariery). W obszarze tym nakładają się na siebie interferencje kwantowe z dwóch źródeł, interferencję pierwotną zawartą w stanie początkowym w postaci stanu *DSC* i interferencję związaną z oddziaływaniem z barierą. Można zaobserwować wyraźne oscylacje w wartości parametru nieklasyczości związane z tym, nakładające się na siebie interferencje w różnych chwilach czasowych, albo się wzmacniają (dominuje interferencja konstruktywna), albo wygaszają (dominuje interferencja destruktywna). Faza względna θ przesuwana w fazie wyrazu interferencyjnego w funkcji Wignera stanu początkowego, co w trakcie symulacji prowadzi do przesunięcia w fazie oscylacji w wartościach parametru nieklasyczości w obszarze III. Przeprowadzenie symulacji dla różnych wartości θ umożliwiło dokładniejsze zlokalizowanie obszaru III, jako że tylko w nim, z uwagi na nakładanie się na siebie interferencji kwantowej z dwóch różnych źródeł, obserwujemy wyraźną różnicę w przebiegu wartości parametru nieklasyczości w zależności od fazy względnej θ .
- Obszar IV, pakiet falowy stopniowo kończy oddziaływanie z barierą i jego ewolucja czasowa zaczyna coraz bardziej przypominać ewolucję w pustej przestrzeni. Obszar IV rozciąga się mniej więcej od $t = 4500$ a.u. do końca symulacji. Wartość parametru nieklasyczości w tym obszarze asymptotycznie maleje do stałej wartości, ale wyższej niż w obszarze I, gdyż pojawia się w funkcji Wignera dodatkowo wyraz interferencyjny pomiędzy częścią odbitą pakietu falowego, a częścią pakietu falowego, która przeszła przez barierę.

Rysunek 25.b) przedstawia, dla ustalonej wartości $\theta=0$, zależność parametru nieklasyczości w funkcji czasu dla różnych wartości parametru Γ .

Początkowa wartość parametru nieklasyczości rośnie wraz z parametrem Γ , jako że jest on związany z amplitudą oscylującego wyrazu interferencyjnego w stanie początkowym (324), który przyjmuje również ujemne wartości. Zależność taka, że wraz ze wzrostem Γ rośnie parametr nieklasyczości jest zachowana także we wszystkich kolejnych chwilach czasu. Spadek wartości Γ powoduje spadek amplitudy oscylacji wartości parametru nieklasyczości w obszarze III, co jest zrozumiałe, jako że ma tam miejsce nakładanie się na siebie dwóch interferencji kwantowych, a parametr Γ jest proporcjonalny do jednej z nich. Dodatkowo przerywaną linią przedstawiono

tę zależność dla układu, gdzie za stan początkowy przyjęto pojedynczy stan koherentny. Co ważne został on unormowany nie do 1, a do 0,5. Zatem jest on dokładnie tożsamy jednemu z dwóch pakietów falowych, które tworzą stan *DSC* dla $\Gamma = 0$, który sprowadza się wtedy do stanu mieszanego dwóch rozsuniętych przestrzennie stanów koherentnych, konkretnie do tego bliższego barierze. Na rysunku 25.b) moment w których czerwone krzywe, ciągła oraz przerywana, rozdzielają się informuje nas, że wtedy zaczyna się oddziaływanie z barierą drugiego z pakietów falowych tworzącego stan *DSC*. Jak łatwo zauważyć, otrzymane wnioski są spójne z uzyskanymi wcześniej dla rysunku 25.a), jako że czerwone krzywe, ciągła oraz przerywana, separują się dokładnie, kiedy zaczyna się obszar III.

5.4 Lokalizacja w przestrzeni fazowej poprzez entropową zasadę nieokreśloności

Obszar zajmowany przez stan kwantowy w przestrzeni fazowej jest jednym z ważniejszych czynników charakteryzujących taki stan. Najpowszechniej stosowana miara lokalizacji oparta na pojęciu wariancji jest nieadekwatna w rozpatrywanym przypadku, ponieważ badany stan jest dwumodalny, a ponadto przeprowadzone obliczenia pokazały, że wpływ parametru Γ na tak zdefiniowaną miarę lokalizacji jest niezwykle trudny do zaobserwowania ze względu na to, że mody oddalają się od siebie w przestrzeni położeniowej po oddziaływaniu z barierą, co powoduje bardzo szybki wzrost wariancji. Ta trudność może zostać ominięta poprzez zastosowanie entropowej miary lokalizacji, której to przewaga nad miarą lokalizacji opartą na wariancji w przypadku rozkładów dwumodalnych została przystępnie omówiona na prostym przypadku dyskretnym w pracy [137]. Punktem wyjścia do zdefiniowania entropowej miary lokalizacji jest pojęcie ciągłej entropii Shannona. Ciągła entropia Shannona dla funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa $n(u)$ jest zdefiniowana następująco [137]

$$S^{(u)} = - \int_{\mathbb{R}} n(u) \ln [n(u)l_u] du, \quad (344)$$

gdzie l_u jest pewną stałą o takim samym wymiarze jak zmienna u . Z własności funkcji logarytmicznej można prosto pokazać, że ciągłe entropie Shannona (344) dla różnych wartości stałej l_u różnią się tylko o stałą addytywną. Motywowani tym faktem przyjęliśmy $l_u = 1$ a.u. dla uproszczenia. Dla rozkładów brzegowych funkcji Wignera można następująco sformułować entropową zasadę nieokreśloności [137]

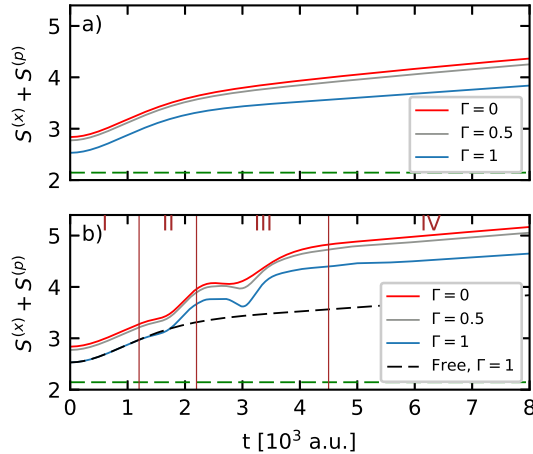
$$S^{(x)} + S^{(p)} = - \int_{\mathbb{R}} n(x) \ln n(x) dx - \int_{\mathbb{R}} \tilde{n}(p) \ln \tilde{n}(p) dp \geq 1 + \ln \pi. \quad (345)$$

Dokładnie tak jak w przypadku zasady nieokreśloności Heisenberga, entropowa zasada nieokreśloności (345) jest minimalizowana przez stany koherentne. W dalszej części entropowa zasada nieokreśloności wyrażona wzorem (345) zostanie uogólniona na przypadek dynamiczny celem zbadania zmian w czasie obszaru zajmowanego przez rozpatrywany stan kwantowy w przestrzeni fazowej. W tym celu uwzględniamy, że funkcja Wignera zmienia się w czasie zgodnie z równaniem Moyala (127), a zatem jej rozkłady brzegowe też zależą od czasu, dzięki czemu podana entropowa miara lokalizacji (345) może zostać uogólniona do postaci dynamicznej

$$S^{(x)}(t) + S^{(p)}(t) = - \int_{\mathbb{R}} n(x;t) \ln n(x;t) dx - \int_{\mathbb{R}} \tilde{n}(p;t) \ln \tilde{n}(p;t) dp \geq 1 + \ln \pi. \quad (346)$$

Na rysunku 26 zostały przedstawione zmiany entropowej miary lokalizacji dla wybranych wartości parametru Γ . Na podanym rysunku możemy zaobserwować dwa odchylenia od monotonicznego wzrostu dla pustej przestrzeni, nagły wzrost kąta nachylenia krzywej na wykresie

w obszarze II oraz lokalne minimum w obszarze III. Oba te odchylenia są związane z oddziaływaniem z barierą potencjału. Pierwsze z nich pojawia się niedługo po tym, gdy pierwszy gaussian zaczyna oddziaływać z barierą, natomiast drugie ze wspomnianych odchylen pojawia się niedługo po tym, gdy drugi gaussian rozpoczyna oddziaływanie z barierą potencjału. Chwile, gdy pierwszy oraz drugi gaussian rozpoczyna oddziaływanie z barierą zostały dokładnie omówione powyżej przy okazji komentowania rysunku 25.



Rysunek 26: Entropowa miara lokalizacji w funkcji czasu dla różnych wartości Γ . Zielona przerywana linia oznacza minimalną wartość, jaką może przyjąć entropowa zasada nieokreśloności. Rysunek a) odpowiada ewolucji czasowej w pustej przestrzeni, natomiast b) odpowiada rozpraszaniu na pojedynczej gaussowskiej barierze potencjału.

5.5 Reżim odbicia nad barierą oraz prawdopodobieństwo transmisji zdefektowanego stanu kota Schrödingera

Wyniki omawiane w tym podrozdziale zostały przedstawione w publikacji [56]. Przejście stanu kwantowego przez barierę potencjału jest związane z wystąpieniem zjawiska tunelowania [136]. Zjawisko to można scharakteryzować ilościowo przez współczynnik transmisji $T(p)$, który opisuje prawdopodobieństwo transmisji fali płaskiej o pędzie p przez barierę [138]. W rozpatrywanym przez nas przypadku sytuacja jest bardziej złożona, gdyż stan początkowy jest zadany przez funkcję Wignera odpowiadającą superpozycji dwóch stanów koherentnych. Asymptotyczna postać funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej po dostatecznie długim czasie, gdy oddziaływanie z barierą już praktycznie nie zachodzi, jest następująca

$$\tilde{n}_{fin}(p; \langle p \rangle) = \tilde{n}_{trans}(p; \langle p \rangle) + \tilde{n}_{refl}(p; \langle p \rangle), \quad (347)$$

gdzie pierwsza funkcja po prawej stronie odpowiada części pakietu początkowego, który pokonał barierę, a druga odpowiada części odbitej pakietu. Obie mogą zostać wyrażone poprzez funkcję rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej $\tilde{n}_0(p; \langle p \rangle)$ odpowiadającej chwili początkowej przed oddziaływaniem z barierą potencjału oraz poprzez współczynniki transmisji $T(p)$ i odbicia $R(p) = 1 - T(p)$ dla fali płaskiej, jak to zostało pokazane w [138]

$$\tilde{n}_{refl}(-p; \langle p \rangle) = \tilde{n}_0(p; \langle p \rangle)R(p), \quad (348)$$

oraz

$$\tilde{n}_{trans}(p; p_0) = \tilde{n}_0(p; \langle p \rangle) T(p), \quad (349)$$

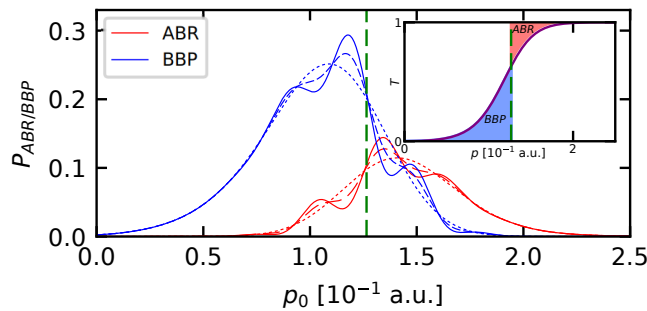
gdzie znak minus w wyrażeniu $\tilde{n}_{refl}(-p; p_0)$ jest spowodowany faktem, że tak część pakietu po odbiciu porusza się w lewo. Oddziaływanie z barierą potencjału może prowadzić do dwóch nieklasycznych efektów. Pierwszy z nich to tunelowanie przez barierę cząstki o energii niższej, niż wysokość tej bariery, który nazywamy tunelowaniem poniżej bariery (ang. below barrier penetration - *BBP*). Pęd fali płaskiej odpowiadający energii równej wysokości bariery U_0 jest następujący $p_B = \sqrt{2mU_0}$, a prawdopodobieństwo tunelowania poniżej bariery dla stanu kwantowego będącego superpozycją fal płaskich, jakim jest rozważany przez nas stan *DSC*, jest następujące

$$P_{BBP}(\langle p \rangle) = \int_0^{p_B} dp \tilde{n}_{trans}(p; \langle p \rangle) = \int_0^{p_B} dp T(p) \tilde{n}(p; \langle p \rangle). \quad (350)$$

Drugim nieklasycznym efektem, który może zaistnieć przy oddziaływaniu z barierą potencjału jest odbicie się od bariery cząstki, której energia jest większa, niż wysokość bariery. Efekt ten nazywamy odbiciem nad barierą (ang. above barrier reflection - *ABR*), a jego teoretyczne wyjaśnienie bazuje na połączeniu rachunku zaburzeń oraz metodzie WKB [139]. Przedstawione tam wyniki prowadzą do wniosku, że efektywny potencjał dla funkcji falowej w przybliżeniu WKB różni się od pierwotnego potencjału, a różnica między nimi powoduje rozważany efekt odbicia cząstki mimo energii przewyższającej wysokość bariery. Rozważenie tego problemu w ramach opisu przestrzenno-fazowego [139, 140] pokazuje, że odbicie nad barierą jest związane z wirtualną trajekcją równoległą do osi pędów, łączącą trajektoria w przestrzeni fazowej odpowiadające przeciwnym pędom. Efekt ten został zinterpretowany jako tunelowanie w przestrzeni pędowej [141]. Efekt ten bywa też nazywany wsteczną dyfrakcją [142, 143]. Analogicznie do poprzedniego przypadku tunelowania pod barierą, prawdopodobieństwo odbicia nad barierą dla rozważanego stanu *DSC* jest zadane następującą formułą

$$P_{ABR}(\langle p \rangle) = \int_{p_B}^{\infty} dp \tilde{n}_{refl}(-p; \langle p \rangle) = \int_{p_B}^{\infty} dp R(p) \tilde{n}(p; \langle p \rangle). \quad (351)$$

Prawdopodobieństwa omawianych efektów *BBP* oraz *ABR* dla rozważanego układu kwantowego z gaussowską barierą potencjału oraz stanem początkowym w postaci stanu *DSC* w funkcji parametru $\langle p \rangle$, który jest bardzo bliski wartości oczekiwanej pędu tego stanu, zostały przedstawione na rysunku 27, przy czym zielona przerywana pionowa linia odpowiada pędowi p_B . Współczynnik transmisji $T(p)$ dla rozpatrywanej bariery gaussowskiej został wyznaczony numerycznie za pomocą metody „quantum transmitting boundary method” opisanej m.in. w pracy [144].



Rysunek 27: Prawdopodobieństwo efektów BBP oraz ABR stanu początkowego DSC oddziałującego z barierą gaussowską. Ciągła, kreskowana oraz kropkowana linia odpowiada odpowiednio przypadkowi $\Gamma = 1$, $\Gamma = 0.5$ oraz $\Gamma = 0$; pionowa przerywana zielona linia odpowiada pędowi $p_B = \sqrt{2mU_0}$. Wykres wstawiony w prawym górnym rogu przedstawia współczynnik transmisji dla fali płaskiej $T(p)$.

Na podstawie rysunku 27 możemy zaobserwować, że efekt BBP jest najbardziej widoczny dla wartości parametru $\langle p \rangle$ minimalnie poniżej p_B , podczas gdy efekt ABR jest najmocniejszy dla wartości parametru $\langle p \rangle$ nieco powyżej p_B . Z uwagi na fakt, że postanowiliśmy rozważyć reżim ABR , fakt wybrania przez nas wartości parametru $\langle p \rangle = 0.15$ a.u. jest uzasadniony. Rozważany przypadek stanu DSC z wybranymi przez nas parametrami odpowiada sytuacji, gdzie wartość oczekiwana energii kinetycznej stanu początkowego jest większa, niż wysokość bariery U_0 . Część naszego stanu, która znajduje się nad barierą (gdyż stan DSC jest rozmyty pędowo) możemy obliczyć następująco

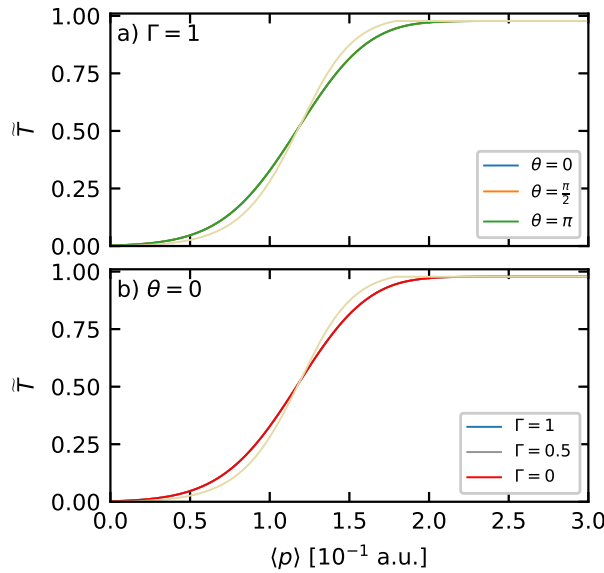
$$\int_{p_B}^{\infty} dp \tilde{n}(p; p_0) \approx 0.8, \quad (352)$$

co oznacza, że tylko około 20% tego stanu tworzy niskoenergetyczny ogon, który klasycznie zahaczyłby o barierę. Jak pokazuje wstawka w prawym górnym rogu rysunku 27, współczynnik transmisji $T(p)$ obliczony dla rozważanej bariery gaussowskiej nie przejawia żadnych oscylacji i jest funkcją monotonicznie rosnącą. Dodatkowo wraz ze wzrostem szerokości gaussowskiej bariery potencjału współczynnik transmisji staje się coraz bardziej stromy (czerwony i niebieski obszar na wykresie wstawionym w prawym górnym rogu rysunku 27 stają się coraz mniejsze) co hamuje nieklasyczne efekty ABR oraz BBP .

Rozważmy teraz prawdopodobieństwo przejścia rozważanego stanu DSC przez barierę. Wyraża się ono wzorem [56]

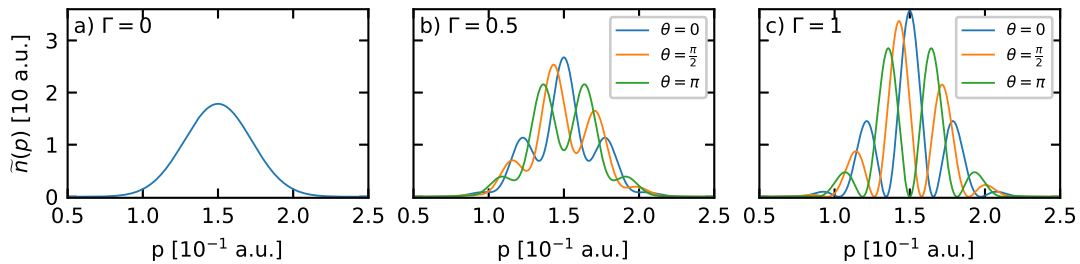
$$\tilde{T}(\langle p \rangle) = \int_0^{\infty} \tilde{n}_0(p, \langle p \rangle) T(p) dp, \quad (353)$$

gdzie $\tilde{n}(p, \langle p \rangle)$ jest rozkładem brzegowym funkcji Wignera w przestrzeni pędowej w chwili $t = 0$ i dla centrum rozkładu pędowego położonego w punkcie $p = \langle p \rangle$. Wpływ parametrów Γ oraz θ na prawdopodobieństwo transmisji stanu DSC przez barierę gaussowską jest przedstawiony na rysunku 28, na którym beżową linią zaznaczono współczynnik transmisji $T(p)$ dla fali płaskiej.



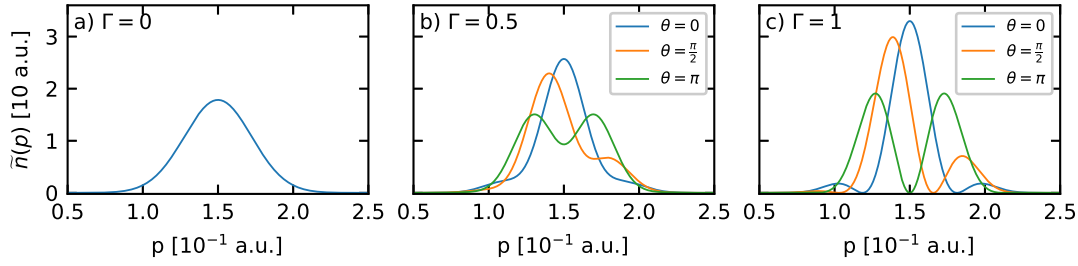
Rysunek 28: Prawdopodobieństwo transmisji przez barierę dla układu z barierą gaussowską oraz stanem początkowym w postaci stanu DSC dla różnych wartości parametrów Γ oraz θ oraz $\langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 200$ a.u.

Z równania (353) wynika, że jednym z czynników powodujących widoczną zależność prawdopodobieństwa transmisji pakietu falowego przez barierę od wyżej wspomnianych parametrów stanu początkowego jest występowanie oscylacji we współczynniku transmisji, gdyż wtedy przy odpowiednim doborze parametrów Γ oraz θ oscylacje we współczynniku transmisji oraz w rozkładzie gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej będą się na siebie nakładać tym samym wzmacniając zmienność prawdopodobieństwa transmisji w funkcji $\langle p \rangle$. Jednakże, gdy oscylacje we współczynniku transmisji nie występują, jak to ma miejsce pojedynczej gaussowskiej bariery potencjału (por. rysunek 28), to nadal jest możliwe zaobserwowanie widocznego wpływu parametrów Γ i θ stanu początkowego o ile odległość między gaussianami tworzącymi rozpatrywany stan jest dobrana optymalnie względem parametrów bariery. W celu uzasadnienia tego stwierdzenia należy przeanalizować rozkłady brzegowe w przestrzeni pędowej dla różnych odległości między gaussianami tworzącymi rozpatrywany stan, bowiem przywołany rozkład w chwili początkowej ma postać gaussianu modulowanego cosinusem, którego częstotliwość jest wprost proporcjonalna do odległości między gaussianami w stanie początkowym. Wpływ parametrów Γ oraz θ na rozkłady brzegowe w przestrzeni pędowej dla przypadku odpowiadającego $D = \langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 200$ a.u. jest przedstawiony na rysunku 29.



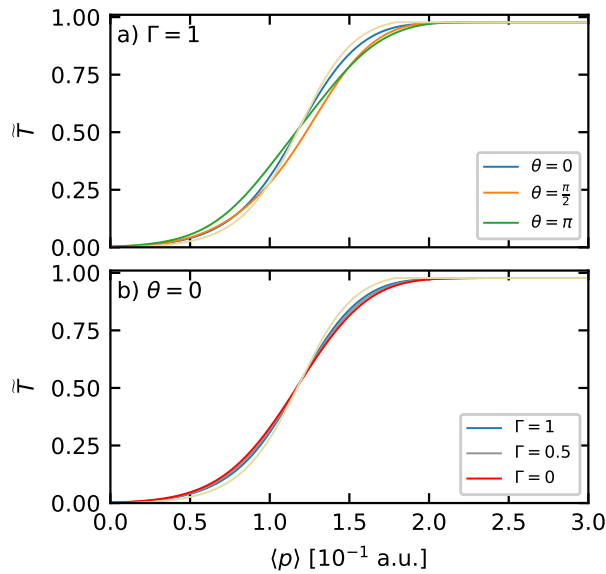
Rysunek 29: Rozkład brzegowy dla funkcji Wignera stanu DSC w przestrzeni pędowej dla różnych wartości Γ i $\theta = 0$ oraz $\langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 200$ a.u.

natomiast przypadek $D = \langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 100$ a.u. jest przedstawiony na rysunku 30.



Rysunek 30: Rozkład brzegowy w przestrzeni pędowej dla różnych wartości Γ i $\theta = 0$ oraz $\langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 100$ a.u.

Dla tego ostatniego przypadku prawdopodobieństwa transmisji przez barierę dla różnych wartości parametrów Γ oraz θ są przedstawione na rysunku 31.



Rysunek 31: Prawdopodobieństwo transmisji przez barierę dla układu z barierą gaussowską oraz stanem początkowym w postaci stanu DSC dla $\langle x_2 \rangle - \langle x_1 \rangle = 100$ a.u. oraz różnych wartości parametrów Γ oraz θ .

Z rysunku 31.a) wynika, że dla $\theta = \pi$ zależność prawdopodobieństwa transmisji jest bardziej spłaszczona, niż dla $\theta = 0$, gdyż dla obu wartości θ rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej jest symetryczny względem wartości $\langle p \rangle$, jednakże zauważmy, że dla $\theta = \pi$ jest on mniej zlokalizowany. Z kolei dla $\theta = \pi/2$ zależność prawdopodobieństwa transmisji jest przesunięta w dół względem zależności odpowiadającej $\theta = 0$. Ma to związek z tym, że dla $\theta = \pi/2$ rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej jest asymetryczny i przesunięty w lewo. Analogicznie dla $\theta = 3\pi/2$ (nieuwzględniony na wykresie) mielibyśmy rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej asymetryczny, ale przesunięty w prawo i w konsekwencji zależność prawdopodobieństwa transmisji byłaby przesunięta w górę względem zależności dla $\theta = 0$. W przypadku 31. b) obserwujemy, że spadek wartości Γ nieznacznie spłaszcza zależność prawdopodobieństwa transmisji. Ma to związek z tym, że dla $\theta = 0$ wraz

ze spadkiem Γ zwiększa się rozmycie rozkładu gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej.

Przy większych odległościach między gaussianami w stanie początkowym mamy większą częstotliwość cosinusa modulującego rozkład gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędowej, co sprawia, że wspomniane wyżej efekty asymetrii, oraz widocznych różnic w lokalizacji jako funkcji parametrów θ i Γ , szybko maleją, co sprawia, że dla w przypadku większej separacji między gaussianami w stanie początkowym praktycznie nie obserwujemy różnic w zależności prawdopodobieństwa transmisji pakietu falowego przez barierę.

6 Podsumowanie

Teorię kwantową niewątpliwie można zaliczyć do jednego z najważniejszych osiągnięć XX-wiecznej fizyki teoretycznej ze względu na jej treść fizyczną jak i matematyczną. Obecnie, teoria kwantowa ze względu na swoje liczne sukcesy znajduje dość szerokie zainteresowanie. Już nie ogranicza się tylko do fizyki i matematyki, ale również jest obecna w biologii, chemii, informatyce, inżynierii materiałowej, czy nawet ekonomii. Co ważniejsze, teoria kwantowa wciąż pozostaje źródłem inspiracji dla chemików, fizyków i matematyków do prowadzenia badań nad nią, co skutkuje jej dalszymi możliwymi uogólnieniami, czy rozlicznymi zastosowaniami. Możliwość sformułowania teorii kwantowej na wiele różnych sposobów dało początek różnym jej ujęciom. Jednym z nich jest ujęcie przestrzenno-fazowe, zainicjowane przez E. Wignera w 1932. W ujęciu wignerowskim przyjmuje się, że stan układu jest reprezentowany przez funkcję rozkładu quasi-prawdopodobieństwa², a jej ewolucja czasowa jest generowana poprzez rozwiązanie zagadnienia Cauchy'ego dla równania Moyala, które jest równaniem różniczkowym cząstkowym o strukturze zbliżonej do klasycznych równań ewolucyjnych typu Liouville'a, Vlasova, czy bezkolizyjnego równania Boltzmanna znanych z mechaniki statystycznej. Z dotychczasowych przeprowadzonych badań nad równaniem Moyala wynika, że może ono zostać rozwiązane ściśle tylko w nielicznych przypadkach, natomiast w przypadkach fizycznych, które wydają się szczególnie interesujące z aplikacyjnego punktu widzenia, zachodzi potrzeba zastosowania metod przybliżonych lub numerycznych do ich rozwiązania. W szczególności, te ostatnie metody (numeryczne) nabierają obecnie coraz większego znaczenia z uwagi na coraz większe możliwości obliczeniowe współczesnych komputerów. Niniejsza praca bezpośrednio nawiązuje do tych trendów badań, bowiem zostały w niej przedstawione wyniki badań nad zastosowaniem metody split-operator do numerycznego rozwiązywania równania Moyala dla konkretnego zagadnienia fizycznego jakim jest ruch cząstki w polu sił potencjalnych. Wyniki zebrane w pracy zostały podzielone na dwie części. W pierwszej z nich przedstawiono szczegółową analizę błędu lokalnego i globalnego metody split-operator dla równania Moyala. Konsekwencją tego jest sformułowanie i udowodnienie dwóch twierdzeń dotyczących błędu lokalnego i globalnego metody. Praktyczna realizacja tych twierdzeń została zilustrowana na przykładzie rozpraszania wignerowskiego pakietu falowego odpowiadającego stanowi koherentnemu na gaussowskiej barierze potencjału. Uzyskane wyniki są w pełni oryginalnym wkładem do badań nad tą tematyką i nie mają swojego odpowiednika w dotychczasowej literaturze przedmiotu. Z kolei, w drugiej części pracy przedstawiono szczegółowe wyniki badań nad zagadnieniem dynamiki funkcji Wignera dla zdefektowanego stanu kota Schrödingera w tzw. reżimie odbicia nad barierą. Zjawisko to nie ma swojego odpowiednika klasycznego. Uzyskanie tych wyników było możliwe dzięki zastosowaniu metody split-operator do numerycznego rozwiązania zagadnienia początkowego dla równania Moyala. Podobnie jak poprzednio, uzyskane wyniki są w pełni oryginalne i pozwalają spojrzeć na badania innych autorów nad zagadnieniem wstecznego rozpraszania nad barierą z szerszej perspektywy.

Choć sformułowane w pracy cele ogólne i szczegółowe zostały w pełni rozwiązane, to należy mieć świadomość, że nie wyczerpują one wszystkich możliwości jakie stwarza metoda split-operator jak i jej zastosowanie do numerycznego rozwiązywania równania Moyala. Jednak już na tym etapie badań, analiza uzyskanych wyników pozwala sformułować kilka nowych i ciekawych zagadnień, które mogą być przedmiotem dalszych badań. Można do nich zaliczyć m. in. a) kontynuację badań nad błędem lokalnym oraz globalnym metody split-operator dla innych faktoryzacji, w tym chociażby opracowanie ostrzejszego oszacowania dla przypadku rozpatrywanego w tej pracy, porównanie ze sobą różnych metod rzędu drugiego, czy uwzględnienie metod wyższych rzędów b) próbę matematycznego uzasadnienia poczynionej w pracy obser-

²Jedną z możliwych, która obecnie jest ona nazywana funkcją Wignera.

wacji dotyczącej skalowania się błędu wartości oczekiwanej energii całkowitej w funkcji czasu w zależności od długości kroku czasowego, c) kontynuację rozpoczętych w tej pracy badań nad ścisłym matematycznie podejściem do wyliczania wartości oczekiwanych zmiennych dynamicznych w ramach formalizmu przestrzenno-fazowego przy użyciu funkcji Wignera dla różnych klas operatorów samosprzężonych odpowiadających zmiennym dynamicznym, a także uwzględnienie problemu wyliczania wartości oczekiwanych podczas ewolucji czasowej układu, co wymaga wykazania dla jakich klas potencjałów przyjęty początkowo konkretny gęsty podzbiór przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^2)$ jako zbiór dopuszczalnych funkcji Wignera w stanie początkowym jest niezmienniczy względem działania operatora ewolucji czasowej.

Na szczególną uwagę zasługuje też dalsze praktyczne wykorzystanie metody split-operator do badania dynamiki układów kwantowych w ujęciu wignerowskim, bowiem to podejście umożliwia uogólnienie dotychczasowych wyników na przypadek układów otwartych i hybrydowych. To oczywiście wyznacza tylko jeden z możliwych kierunków dalszych badań. Z drugiej strony równie ciekawym kierunkiem badań wydaje się zaadaptowanie tej metody do układów kwantowych z masą zależną od położenia, czy też układów z potencjałem zależnym od czasu.

7 Dodatek: pojęcia matematyczne

7.1 Przestrzeń Banacha oraz Hilberta

Przestrzeń unormowaną nad ciałem liczb zespolonych \mathbb{C} nazywamy przestrzeń liniową \mathcal{X} wraz z odwzorowaniem $\|\cdot\|_{\mathcal{X}} : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$, które dla dowolnych $a \in \mathbb{C}$ oraz $\psi, \varphi \in \mathcal{X}$, spełniają następujące warunki

- a) $\|\psi\|_{\mathcal{X}} \geq 0$,
- b) $\|\psi\|_{\mathcal{X}} = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $\psi = 0$,
- c) $\|a\psi\|_{\mathcal{X}} = |a| \|\psi\|_{\mathcal{X}}$,
- d) $\|\psi + \varphi\|_{\mathcal{X}} \leq \|\psi\|_{\mathcal{X}} + \|\varphi\|_{\mathcal{X}}$.

Odwzorowanie $\|\cdot\|_{\mathcal{X}} : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ spełniające warunki a)-d) jest nazywane normą w \mathcal{X} (patrz rozdział I w [60]).

Przestrzeń Banacha nad ciałem liczb zespolonych jest nazywana przestrzeń unormowana \mathcal{X} , która jest zupełna ze względu na normę, tj. każdy ciąg Cauchy'ego o elementach w przestrzeni \mathcal{X} jest zbieżny do pewnego elementu z tejże przestrzeni (patrz rozdział IV w [60]).

Przestrzeń unitarną³ jest nazywana zespolona przestrzeń liniowa \mathcal{V} wraz z odwzorowaniem $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{V}} : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$ takie, że dla dowolnych $a \in \mathbb{C}$ oraz $\psi, \varphi, \eta \in \mathcal{V}$, spełnione są warunki

- a) $\langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{V}} \geq 0$, $\langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{V}} = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $\varphi = 0$,
- b) $\langle \varphi, \psi + \eta \rangle_{\mathcal{V}} = \langle \varphi, \psi \rangle_{\mathcal{V}} + \langle \varphi, \eta \rangle_{\mathcal{V}}$,
- c) $\langle a\varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{V}} = a^* \langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{V}}$,
- d) $\langle \varphi, \psi \rangle_{\mathcal{V}} = (\langle \psi, \varphi \rangle_{\mathcal{V}})^*$.

Odwzorowanie $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{V}}$ spełniające warunki a) – d) jest nazywane iloczynem skalarnym w \mathcal{V} (patrz rozdział II w [60]).

Przestrzeń Hilberta jest nazywana przestrzeń unitarna \mathcal{H} , która jest zupełna ze względu na normę indukowaną przez iloczyn skalarny, tj. każdy ciąg Cauchy'ego o elementach w przestrzeni \mathcal{H} jest zbieżny do pewnego elementu z tejże przestrzeni.

7.2 Przestrzeń $L^p(\mathbb{R}^n)$

Przestrzeń $L^p(\mathbb{R}^n)$, gdzie $n \in \mathbb{N}$ oraz $1 \leq p \leq \infty$, nazywamy zbiór wszystkich funkcji (utożsamiamy ze sobą funkcje równe prawie wszędzie) f mierzalnych na \mathbb{R}^n , takich że

$$\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} < \infty \tag{354}$$

Dla przypadku $1 \leq p < \infty$ norma w przestrzeni $L^p(\mathbb{R}^n)$ jest zadana następująco

$$\|f\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |f(x)|^p dx \right)^{1/p}, \tag{355}$$

natomiast w przypadku, gdy $p = \infty$, norma wyraża się następująco

$$\|f\|_{L^\infty(\mathbb{R}^n)} = \operatorname{ess\,sup}_{x \in \mathbb{R}^n} |f(x)|. \tag{356}$$

³używana jest też nazwa przestrzeń prehilbertowska

Dla $1 \leq p \leq \infty$ przestrzeń $L^p(\mathbb{R}^n)$ z normą (355) jest przestrzenią Banacha. Gdy $p = 2$, przestrzeń $L^2(\mathbb{R}^n)$ jest dodatkowo przestrzenią Hilberta z iloczynem skalarnym

$$\langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \int_{\mathbb{R}^n} f^*(x)g(x)dx, \quad (357)$$

gdzie korzystamy z fizycznej konwencji iloczynu skalarnego, sprzęgając w sposób zespolony pierwszą funkcję.

7.3 Iloczyn tensorowy

Dla dowolnych dwóch przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 można zdefiniować ich *iloczyn tensorowy*. Przez $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ oznaczmy przestrzeń liniową złożoną ze wszystkich skończonych kombinacji liniowych elementów w postaci formalnych iloczynów $\psi \otimes \phi$, gdzie $\psi \in \mathcal{H}_1$ oraz $\phi \in \mathcal{H}_2$ wyposażoną w iloczyn skalarny

$$\langle \psi_1 \otimes \phi_1, \psi_2 \otimes \phi_2 \rangle_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2} = \langle \psi_1, \psi_2 \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \phi_1, \phi_2 \rangle_{\mathcal{H}_2}. \quad (358)$$

Uzupełnienie takiej przestrzeni unitarnej względem iloczynu skalarnego $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2}$ nazywamy iloczynem tensorowym przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_1 oraz \mathcal{H}_2 i oznaczamy jako $\mathcal{H}_1 \hat{\otimes} \mathcal{H}_2$. Jest to również przestrzeń Hilberta (patrz rozdział I w [145],).

Przykład 7.1. Wybierzmy przestrzenie Hilberta następująco: $\mathcal{H}_1 = L^2(\mathbb{R}^{m_1})$, $\mathcal{H}_2 = L^2(\mathbb{R}^{m_2})$, $m_1, m_2 \in \mathbb{N}$. Wtedy przestrzeń Hilberta $L^2(\mathbb{R}^{m_1}) \hat{\otimes} L^2(\mathbb{R}^{m_2})$ jest izomorficzna do przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^{m_1+m_2})$, a iloczyn tensorowy elementów tych przestrzeni jest zadany następująco

$$(\psi \otimes \phi)(x, y) = \psi(x)\phi(y), \quad \psi \in L^2(\mathbb{R}^{m_1}), \phi \in L^2(\mathbb{R}^{m_2}). \quad (359)$$

7.4 Przestrzeń Schwartza oraz przestrzeni dystrybucji temperowanych

Przestrzenią Schwartza nazywamy zbiór funkcji spełniających poniższy warunek

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) = \left\{ f \in C^\infty(\mathbb{R}^n) : \forall_{\alpha, \beta \in \mathbb{N}^n} \|f\|_{\alpha, \beta} < \infty \right\} \quad (360)$$

gdzie rodzina półnorm $\|\cdot\|_{\alpha, \beta}$, zadających topologię tej przestrzeni, jest zadana następująco

$$\|f\|_{\alpha, \beta} = \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |x^\alpha D^\beta f(x)|, \quad (361)$$

przy czym $x^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_n^{\alpha_n}$ i wprowadzamy oznaczenie $|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n$. Mamy także $D^\beta = \partial_{x_1}^{\beta_1} \partial_{x_2}^{\beta_2} \dots \partial_{x_n}^{\beta_n}$ oraz wprowadzamy oznaczenie $|\beta| = \beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_n$. Przestrzenią dualną do przestrzeni Schwartza jest przestrzeń dystrybucji temperowanych oznaczana jako $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ (patrz podrozdział V.3 w [60]). Jest to przestrzeń ciągłych odwzorowań liniowych $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \ni g \rightarrow T_f(g) \in \mathbb{C}$. Jeżeli mierzalna funkcja $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$ spełnia następujący warunek

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{|f(u)|}{(1+|u|)^N} du < \infty \quad (362)$$

dla pewnego $N \in \mathbb{N}$, to nazywamy ją *funkcją temperowaną* (patrz rozdział 1 w [95]). Możemy wtedy zapisać ciągłe odwzorowanie liniowe $T_f(\cdot)$ przy pomocy następującej całki

$$T_f(g) = \int_{\mathbb{R}^n} f(u)g(u)du, \quad g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \quad (363)$$

gdzie możemy ze sobą utożsamić funkcję temperowaną f z dystrybucją temperowaną $T_f(\cdot)$. Podobieństwo prawej strony równania (363) do definicji iloczynu skalarnego na przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^n)$ (357), za wyjątkiem sprzężenia pierwszej funkcji, motywuje wprowadzenie następującej notacji używającej *nawiasu dystrybucyjnego*

$$T_f(g) = \langle f, g \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n), \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}, \quad f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n), g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n), \quad (364)$$

z której korzystaliśmy w tej pracy. Dla $1 \leq p \leq \infty$ zachodzą następujące inkluzje

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^p(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n) \quad (365)$$

Dla $1 \leq p < \infty$ przestrzeń Schwartza $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ jest gęsta w $L^p(\mathbb{R}^n)$. Jeżeli $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$, to mamy następującą zależność między iloczynem skalarnym na przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^n)$, a nawiasem dystrybucyjnym

$$\langle g, f \rangle_{L^2(\mathbb{R}^n)} = \langle f, g^* \rangle_{\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n), \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)}, \quad g \in \mathcal{S}, \quad (366)$$

co łatwo sprawdzić porównując ze sobą wzory (363) oraz (357). Lewa strona równania (366) jest dobrze określona, gdyż $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^2(\mathbb{R}^n)$.

7.5 Przestrzeń Sobolewa

Przestrzeń Sobolewa $W^{k,p}(\mathbb{R}^n)$ nazywamy zbiór wszystkich funkcji mierzalnych na \mathbb{R}^n , takich że

$$W^{k,p}(\mathbb{R}^n) = \{f \in L^p(\mathbb{R}^n) : \forall_{|\beta| \leq k} D^\beta f \in L^p(\mathbb{R}^n)\}. \quad (367)$$

Przestrzeń ta jest przestrzenią Banacha z normą

$$\|f\|_{W^{k,p}(\mathbb{R}^n)} = \sum_{|\beta| \leq k} \|D^\beta f\|_{L^p(\mathbb{R}^n)} \quad (368)$$

Dla $p = 2$ przyjmujemy oznaczenie $W^{k,p}(\mathbb{R}^n) \equiv H^p(\mathbb{R}^n)$. W tym przypadku jest to zarazem przestrzeń Hilberta z następującym iloczynem skalarnym

$$\langle f, g \rangle_{H^p(\mathbb{R}^n)} = \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |k|^2)^p (\mathcal{F}f)^*(k) (\mathcal{F}g)(k) dk. \quad (369)$$

7.6 Transformata Fouriera

Definicja 7.1. Niech $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$. Transformata Fouriera funkcji f jest zdefiniowana następująco

$$(\mathcal{F}f)(k) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(x) e^{-ik \cdot x} dx, \quad k \in \mathbb{R}^n, \quad (370)$$

natomiast odwrotna transformata Fouriera funkcji f

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(x) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} f(k) e^{ik \cdot x} dk, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (371)$$

gdzie $k \cdot x = k_1 x_1 + k_2 x_2 + \dots + k_n x_n$.

Jako że na podstawie (365) mamy $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n) \subset L^1(\mathbb{R}^n)$, całki w równaniach (370) oraz (371) mają sens. Transformata Fouriera \mathcal{F} oraz odwrotna transformata Fouriera \mathcal{F}^{-1} są ciągłymi automorfizmami na przestrzeni $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ i mogą zostać rozszerzone do ciągłych automorfizmów na przestrzeni dystrybucji temperowanych $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ (patrz rozdział IX w [146]).

Definicja 7.2. Niech $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Transformata Fouriera funkcji f jest zdefiniowana następująco

$$(\mathcal{F}f)(k) = \text{l. i. m.}_{R \rightarrow \infty} (2\pi)^{-n/2} \int_{|x| \leq R} f(x) e^{-ik \cdot x} dx, \quad k \in \mathbb{R}^n, \quad (372)$$

natomiast odwrotna transformata Fouriera

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(x) = \text{l. i. m.}_{R \rightarrow \infty} (2\pi)^{-n/2} \int_{|k| \leq R} f(k) e^{ik \cdot x} dk, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (373)$$

gdzie l. i. m. oznacza granicę w normie $L^2(\mathbb{R}^n)$. Rozszerzenie transformaty Fouriera do przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^n)$ jest operatorem unitarnym nazywanym nieraz transformatą Fouriera-Plancherela. Transformata Fouriera \mathcal{F} oraz odwrotna transformata Fouriera \mathcal{F}^{-1} są ciągłymi unitarnymi automorfizmami na przestrzeni $L^2(\mathbb{R}^n)$.

W przypadku transformat Fouriera funkcji dwóch zmiennych ($n = 2$), które najczęściej pojawiają się w tej pracy, przyjęliśmy następującą notację, odpowiednio dla transformaty częściowej względem pierwszej zmiennej

$$(\mathcal{F}_1 f)(\lambda, y) = \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x, y) e^{-i\lambda x} dx, \quad \lambda, y \in \mathbb{R}, \quad (374)$$

oraz transformaty do niej odwrotnej

$$(\mathcal{F}_1^{-1} g)(x, y) = \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} g(\lambda, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} g(\lambda, y) e^{i\lambda x} d\lambda, \quad x, y \in \mathbb{R}, \quad (375)$$

transformaty częściowej względem drugiej zmiennej

$$(\mathcal{F}_2 f)(x, p) = \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p} f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} f(x, y) e^{-ipy} dy, \quad x, p \in \mathbb{R}, \quad (376)$$

oraz transformaty do niej odwrotnej

$$(\mathcal{F}_2^{-1} g)(x, y) = \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y}^{-1} g(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} g(x, p) e^{ipy} dp, \quad x, y \in \mathbb{R}, \quad (377)$$

transformaty względem obu zmiennych

$$(\mathcal{F}h)(\lambda, p) = \mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, p)} h(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} h(x, y) e^{-i\lambda x - ipy} dx dy, \quad \lambda, p \in \mathbb{R}, \quad (378)$$

oraz transformaty do niej odwrotnej

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(x, y) = \mathcal{F}_{(\lambda, p) \rightarrow (x, y)}^{-1} w(\lambda, p) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} w(\lambda, p) e^{i\lambda x + ipy} d\lambda dp, \quad x, y \in \mathbb{R}. \quad (379)$$

Bibliografia

- [1] D. F. Styer, M. S. Balkin, K. M. Becker *et al.* Nine formulations of quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, 70:280, 2002.
- [2] I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński. *Teoria Kwantów. Mechanika falowa*. Wydawnictwo Naukowe PWN, 2001.
- [3] T. F. Jordan. *Quantum Mechanics in Simple Matrix Form*. Dover Publications, 2005.
- [4] R. P. Feynman, A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill College, 1965.
- [5] U. Fano. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Rev. Mod. Phys.*, 29:74, 1957.
- [6] H.-P. Breuer, F. Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford University Press, 2007.
- [7] A. Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non-Hamiltonian systems. *Rep. Math. Phys.*, 3:247, 1972.
- [8] G. Lindblad. On the generators of quantum dynamical semigroups. *Commun. in Math. Phys.*, 48:119, 1976.
- [9] M. O. Burkatchii. Wigner function of open quantum system. *Infin. Dimens. Anal. Qu.*, 21:1850026, 2018.
- [10] R. P. Rundle, B. I. Davies, V. M. Dwyer, T. Tilma, M. J. Everitt. Visualization of correlations in hybrid discrete—continuous variable quantum systems. *J. Phys. Commun.*, 4:025002, 2020.
- [11] J. Svozilík, R. Hidalgo-Sacoto, I. I. Arkhipov. Characterization of Dephasing and Dissipating Effects in Hybrid Quantum Systems. *Frontiers in Optics / Laser Science*, page JTh4A.34, 2020.
- [12] W. E. Lawrence. Algebraic identities relating first- and second-quantized operators. *Am. J. Phys.*, 68:167, 2000.
- [13] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer, 2000.
- [14] P. Morse, H. Feshbach, G. P. Harnwell. *Methods of Theoretical Physics, Part I*. McGraw-Hill Book, 1953.
- [15] D. Dürr, S. Teufel. *Bohmian Mechanics*. Springer, 2009.
- [16] X. Oriols, J. Mompart. *Applied Bohmian Mechanics: From Nanoscale Systems to Cosmology*. Pan Stanford Publishing Pte Ltd, 2012.
- [17] M. Bonilla-Licea, D. Schuch. Connection between Bohmian and quantum mechanics via the Wigner function. *Phys. Lett. A*, 423:127812, 2022.
- [18] R. A. Leacock, M. J. Padgett. Hamilton-Jacobi/action-angle quantum mechanics. *Phys. Rev. D*, 28:2491, 1983.

- [19] V. Bargmann. On a Hilbert space of analytic functions and an associated integral transform part I. *Commun. Pur. Appl. Math.*, 14:187, 1961.
- [20] V. Bargmann. On a Hilbert Space of Analytic Functions and an Associated Integral Transform. Part II. A Family of Related Function Spaces Application to Distribution Theory. *Commun. Pur. Appl. Math.*, 20:1, 1967.
- [21] J. Zinn-Justin. *Path Integrals in Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 2010.
- [22] M. A. Rieffer. Quantization and C^* -algebras. *Contemp. Math.*, 167:67, 1994.
- [23] F. Strocchi. *An Introduction to the Mathematical Structure of Quantum Mechanics: A Short Course for Mathematicians*. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [24] T. L. Curtright, D. B. Fairlie, C. K. Zachos. *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*. World Scientific Publishing, 2014.
- [25] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40:749, 1932.
- [26] H.-W. Lee. Theory and application of the quantum phase-space distribution functions. *Phys. Rep.*, 259:147, 1995.
- [27] H. Weyl. Quantenmechanik und Gruppentheorie. *Math. Ann.*, 46:1, 1927.
- [28] J. von Neumann. Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren. *Z. Phys.*, 104:570, 1931.
- [29] H. J. Groenewold. On the principles of elementary quantum mechanics. *Physica*, 12:405, 1946.
- [30] J. E. Moyal. Quantum mechanics as a statistical theory. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 45:99, 1949.
- [31] C. C. Gerry, P. L. Knight. Quantum superpositions and Schrödinger cat states in quantum optics. *Am. J. Phys.*, 65:964, 1997.
- [32] D. J. Wineland. Nobel lecture: Superposition, entanglement, and raising Schrödinger's cat. *Rev. Mod. Phys.*, 85:1103, 2013.
- [33] A. V. Belitsky, X. Ji, F. Yuan. Quark imaging in the proton via quantum phase-space distributions. *Phys. Rev. D*, 69:074014, 2004.
- [34] C. Jacoboni, R. Brunetti, S. Monastra. Quantum dynamics of polaron formation with the Wigner-function approach. *Phys. Rev. B*, 68:125205, 2003.
- [35] W. P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley, 2001.
- [36] M. Mallalieu, C. R. Stroud. Semiclassical theory of Rydberg-wave-packet interferometry. *Phys. Rev. A*, 51:1827–1835, 1995.
- [37] R. Simon, N. Mukunda. Optical phase space, Wigner representation, and invariant quality parameters. *J. Opt. Soc. Am. A*, 17:2440, 2000.
- [38] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Springer, 2010.

- [39] R. Cabrera, D. I. Bondar, K. Jacobs, H. A. Rabitz. Efficient method to generate time evolution of the Wigner function for open quantum systems. *Phys. Rev. A*, 92:042122, 2015.
- [40] V. Veitch, C. Ferrie, D. Gross, J. Emerson. Negative quasi-probability as a resource for quantum computation. *New J. Phys.*, 14:113011, 2012.
- [41] L. Castellani. Non-commutative geometry and physics: a review of selected recent results. *Class. Quantum Grav.*, 17:3377, 2000.
- [42] B. V. Fedosov. A simple geometrical construction of deformation quantization. *J. Differ. Geom.*, 40:213, 1994.
- [43] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, D. Sternheimer. Deformation theory and quantization. ii. physical applications. *Ann. Phys.*, 111:111, 1978.
- [44] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, D. Sternheimer. Deformation theory and quantization. i. deformations of symplectic structures. *Ann. Phys.*, 111:61, 1978.
- [45] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, D. Sternheimer. Quantum mechanics as a deformation of classical mechanics. *Lett Math Phys*, 1:521, 1977.
- [46] G. W. Delius, A. Hüffmann. On quantum lie algebras and quantum root systems. *J. Phys. A*, 29:1703, 1996.
- [47] D. Kołaczek, B. J. Spisak, M. Wołoszyn. The Phase-Space Approach to time Evolution of Quantum States in Confined Systems: the Spectral Split-Operator Method. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, 29:439, 2019.
- [48] M. D. Feit, J. A. Fleck, A. Steiger. Solution of the schrödinger equation by a spectral method. *J. Chem. Phys.*, 47:412, 1982.
- [49] G. Dattoli, L. Giannessi, P. L. Ottaviani, A. Torre. Split-operator technique and solution of Liouville propagation equations. *Phys. Rev. E*, 51:821, 1995.
- [50] G. Torres-Vega, J. H. Frederick. Numerical method for the propagation of quantum-mechanical wave functions in phase space. *Phys. Rev. Lett.*, 67:2601, 1991.
- [51] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5:506, 1968.
- [52] S. A. Chin. Symplectic integrators from composite operator factorizations. *Phys. Lett. A*, 226:344, 1997.
- [53] S. Chin, D. Kidwell. Higher Order Force Gradient Symplectic Algorithms. *Phys. Rev. E*, 62:8746, 2001.
- [54] S. Descombes, M. Thalhammer. An exact local error representation of exponential operator splitting methods for evolutionary problems and applications to linear Schrödinger equations in the semi-classical regime. *BIT*, 50:729, 2010.
- [55] D. Kołaczek, B. J. Spisak, M. Wołoszyn. Phase-space approach to time evolution of quantum states in confined systems. the spectral split-operator method. in *Information Technology, Systems Research and Computational Physics*, eds. P. Kulczycki, J. Kacprzyk, L. T. Kóczy, R. Mesiar, R. Wiśniewski, Springer, Adv. Intell. Syst., 945:307, 2018.

- [56] D. Kołaczek, B. J. Spisak, M. Wołoszyn. Phase-space studies of backscattering diffraction of defective Schrödinger cat states. *Sci. Rep.*, 11:11619, 2021.
- [57] M. Grabowski, R. S. Ingarden. *Mechanika kwantowa: ujęcie w przestrzeni Hilberta*. PWN, 1989.
- [58] T. Kato. *Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer-Verlag, New York, 1980.
- [59] J. Weidmann. *Linear Operators in Hilbert Spaces*. Springer-Verlag, New York, 1980.
- [60] M. Reed, B. Simon. *Functional Analysis (Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. 1)*. Academic Press, London, 1980.
- [61] B. C. Hall. *Quantum Theory for Mathematicians*. Springer, 2013.
- [62] A. Pazy. *Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations*. Springer, 1983.
- [63] K. Maurin. *Analysis: Part One: Elements*. Springer, 1976.
- [64] K.-J. Engel, R. Nagel. *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [65] A. M. Rey, G. Pupillo, C. W. Clark, C. J. Williams. Ultracold atoms confined in an optical lattice plus parabolic potential: A closed-form approach. *Phys. Rev. A*, 72:033616, 2005.
- [66] S. B. Zhu, J. Lee, G. W. Robinson. Molecular dynamics simulation of liquid carbon disulphide with a harmonic intramolecular potential. *Mol. Phys.*, 65:65, 1988.
- [67] B. F. Bayman, A. Bohr. On the connection between the cluster model and the SU3 coupling scheme for particles in a harmonic oscillator potential. *Nucl. Phys.*, 9(4):596, 1958.
- [68] T. Luu, M. J. Savage, A. Schwenk, J. P. Vary. Nucleon-nucleon scattering in a harmonic potential. *Phys. Rev. C*, 82:034003, 2010.
- [69] C. Bose, C. K. Sarkar. Effect of a parabolic potential on the impurity binding energy in spherical quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*, 253:238, 1998.
- [70] E. B. Tomme, D. A. Law, B. M. Annaratone, J. E. Allen. Parabolic Plasma Sheath Potentials and their Implications for the Charge on Levitated Dust Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 85:2518, 2000.
- [71] M. L. Wall, K. R. A. Hazzard, A. M. Rey. Effective many-body parameters for atoms in nonseparable Gaussian optical potentials. *Phys. Rev. A*, 92:013610, 2015.
- [72] B. A. Umarov, N. A. B. Aklan, B. B. Baizakov, F. K. Abdullaev. Scattering of a two-soliton molecule by Gaussian potentials in dipolar Bose-Einstein condensates. *J. Phys. B – At. Mol. Opt.*, 49:125307, 2016.
- [73] C. G. Koutroulos. Relativistic motion of the Lambda in hypernuclei using Woods-Saxon as well as Gaussian potentials. *J. Phys. G – Nucl. and Partic.*, 15:1659, 1989.
- [74] S. Gómez, R. Romero. Few-electron semiconductor quantum dots with gaussian confinement. *Open Phys.*, 7:12, 2008.

- [75] I. Inci. Excited states of the gaussian two-electron quantum dot. *Nucl. Phys. A*, 991:121611, 2019.
- [76] D. B. Nguyen, H. P. Trinh. Few-electron semiconductor quantum dots with gaussian confinement. *J. Eng. Appl. Sci.*, 68:17, 2021.
- [77] K. D. Sen, H. E. Montgomery Jr., B. Yu, J. Katriel. Excited states of the gaussian two-electron quantum dot. *Eur. Phys. J. B*, 17:175, 2021.
- [78] B. M. Raffah, K. Berrada. Nonclassical and nonlocal properties of atom-field systems in the framework of Pöschl-Teller potentials. *Results Phys.*, 13:102134, 2019.
- [79] J. S. Dehesa, A. Martínez-Finkelshtein, V. N. Sorokin. Information-theoretic measures for Morse and Pöschl-Teller potentials. *Mol. Phys.*, 104:613, 2006.
- [80] T. A. Sargsian, M. A. Mkrtchyan, H. A. Sarkisyan, D. B. Hayrapetyan. Effects of external electric and magnetic fields on the linear and nonlinear optical properties of InAs cylindrical quantum dot with modified Pöschl-Teller and Morse confinement potentials. *Physica E*, 126:114440, 2021.
- [81] M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, S. Bednarek. Modelling of confinement potentials in quantum dots. *Physica E*, 15:261, 12 2002.
- [82] C.-Y. Lin, Y. Ho. Photoionization of atoms encapsulated by cages using the power-exponential potential. *J. Phys B – At. Mol. Opt. Phys.*, 45:145001, 2012.
- [83] E.-B. Al, E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sökmen, C.-A. Duque. Binding Energy And Absorption of Donor Impurity In Spherical GaAs/AlxGa1-x As Quantum Dots With Konwent Potential. *preprint*, 2021.
- [84] I. Boztosun, D. Bonatsos, I. Inci. Analytical solutions of the Bohr Hamiltonian with the Morse potential. *Phys. Rev. C*, 77:044302, 2008.
- [85] B. A. Mamedov, H. Cacan. A general analytical method for evaluation of the thermodynamic properties of matters using virial coefficients with morse potential at high temperature. *Contrib. Plasm. Phys.*, 59, 2019.
- [86] K. Blum. *Density Matrix Theory and Applications*. Springer, 2012.
- [87] M. de Gosson. Quantum harmonic analysis of the density matrix. *Quanta*, 7:74, 2018.
- [88] J. Langerholc. Trace formalism for quantum mechanical expectation values. *J. Math. Phys.*, 6:1210, 1965.
- [89] C. Brislawn. Kernels of trace class operators. *Proc. Am. Math. Soc.*, 104:1181, 1988.
- [90] R. Dautray, J. L. Lions. *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology Vol. 5 Evolution Problems I*. Springer, 2000.
- [91] J. M. Gracia-Bondia, J. C. Varilly. Algebras of distributions suitable for phase-space quantum mechanics. I. *J. Math. Phys.*, 29:869, 1988.
- [92] J. C. Varilly, J. M. Gracia-Bondia. Algebras of distributions suitable for phase-space quantum mechanics. II. Topologies on the Moyal algebra. *J. Math. Phys.*, 29:880, 1988.

- [93] N. H. McCoy. On the Function in Quantum Mechanics which Corresponds to a Given Function in Classical Mechanics. *P. Natl Acad. Sci. USA*, 19:674, 1932.
- [94] G. B. Folland. *Harmonic Analysis in Phase-Space*. Princeton University Press, 1989.
- [95] M. W. Wong. *The Weyl Transform*. Springer, 1998.
- [96] M. de Gosson. *Born-Jordan Quantization*. Springer, 2016.
- [97] M. de Gosson. *The Wigner Transform*. World Scientific Publishing Company, 2017.
- [98] M. de Gosson. *Quantum Harmonic Analysis*. De Gruyter, 2021.
- [99] K. Gröchenig. *Foundations of Time-Frequency Analysis*. Birkhäuser, 2000.
- [100] M. A. Shubin, S. I. Andersson. *Pseudodifferential Operators and Spectral Theory*. Springer, 2001.
- [101] L. Hörmander. *The Analysis of Linear Partial Differential Operators III: Pseudo-Differential Operators*. Springer, 2003.
- [102] M Hillery, R F O'Connell, M O Scully, E P Wigner. Distribution functions in physics: Fundamentals. *Phys. Rep.*, 106:121, 1984.
- [103] J. C. T. Pool. Mathematical Aspects of the Weyl Correspondence. *J. Math. Phys.*, 7:66, 1966.
- [104] M. S. Jakobsen. On a (No Longer) New Segal Algebra: A Review of the Feichtinger Algebra. *J. Fourier Anal. Appl.*, 24:1579, 2018.
- [105] R. L. Hudson. When is the Wigner quasi-probability density non-negative? *Rev. Mod. Phys.*, 6:249, 1974.
- [106] F. Soto, P. Claverie. When is the Wigner function of multidimensional systems nonnegative? *J. Math. Phys.*, 24:97, 1983.
- [107] J. M. Garcia-Bondia, J. C. Várilly. Nonnegative mixed states in Weyl-Wigner-Moyal theory. *Phys. Lett. A*, 128:20, 1988.
- [108] T. Bröcker, R. F. Werner. Mixed states with positive Wigner functions. *J. Math. Phys.*, 36:62, 1995.
- [109] A. Mandilara, E. Karpov, N. J. Cerf. Extending Hudson's theorem to mixed quantum states. *Phys. Rev. A*, 79:062302, 2009.
- [110] R. F. O'Connell, E. P. Wigner. Quantum-mechanical distribution functions: Conditions for uniqueness. *Phys. Lett. A*, 83:145, 1981.
- [111] A. Donoso, C. C. Martens. Classical trajectory-based approaches to solving the quantum Liouville equation. *Int. J. Quantum Chem.*, 90:1438, 2002.
- [112] C. Moler, C. Van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix. *SIAM Rev.*, 20:801, 1978.
- [113] C. Moler, C. Van Loan. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later. *SIAM Rev.*, 45:3, 2003.

- [114] R. I. McLachlan, G. R. W. Quispel. Splitting methods. *Acta Numer.*, 11:341, 2002.
- [115] E. Hairer, G. Wanner, C. Lubich. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer, 2002.
- [116] M. Suzuki. Convergence of exponential product formulas for unbounded operators. *Rev. Math. Phys.*, 8:487, 1996.
- [117] S. Blanes, F. Casas, A. Escorihuela-Tomás. Applying splitting methods with complex coefficients to the numerical integration of unitary problems. *Journal of Computational Dynamics*, 9:85, 2022.
- [118] T. Jahnke, C. Lubich. Error bounds for exponential operator splitting. *BIT*, 40:735, 2000.
- [119] I. Farago, A. Havasi. Consistency Analysis of Operator Splitting Methods for C0-Semigroups Expression. *Semigroup Forum*, 74:125, 2007.
- [120] E. Hansen, A. Ostermann. Exponential splitting for unbounded operators. *Math. Comput.*, 78:1485, 2009.
- [121] E. Hille. *Functional Analysis And Semi-Groups*. Dutt Press, 2007.
- [122] J. R. Scott. *Numerical Analysis*. Princeton University Press, 2011.
- [123] S. De Marchi, M. Vianello. Peano's kernel theorem for vector-valued functions and some applications. *Numer. Funct. Anal. Optim.*, 17:57, 1996.
- [124] S. De Marchi, M. Vianello. Peano's kernel theorem for vector-valued functions: a weak version in normed spaces. *Numer. Funct. Anal. Optim.*, 18:65, 1997.
- [125] M. S. Agranovich. *Sobolev Spaces, Their Generalizations and Elliptic Problems in Smooth and Lipschitz Domains*. Springer, 2015.
- [126] L. C. Evans. *Partial Differential Equations: Second Edition*. American Mathematical Society, 2010.
- [127] <http://www.math.stonybrook.edu/joa/PUBLICATIONS/SOBOLEV.pdf>.
- [128] E. Kieri. Stiff convergence of force-gradient operator splitting methods. *Appl. Numer. Math.*, 94:33, 2015.
- [129] D. Kołaczek. *Dynamika stanów kota Schrödingera w przestrzeni fazowej*. Praca magisterska, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH, 2017.
- [130] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. Springer, 1980.
- [131] W. B. Case. Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians. *Am. J. Phys.*, 76:937, 2008.
- [132] V. V. Dodonov, I. A. Malkin, V. I. Man'ko. Even and odd coherent states and excitations of a singular oscillator. *Physica*, 72:597, 1974.
- [133] H. Jeong *et al.* Detecting the degree of macroscopic quantumness using an overlap measurement. *J. Opt. Soc. Am. B*, 31:3057, 2014.
- [134] C.-W. Lee, H. Jeong. Quantification of macroscopic quantum superpositions within phase space. *Phys. Rev. Lett.*, 106:220401, 2011.

- [135] A. Kenfack, K. Życzkowski. Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality. *J. Opt. B – Quantum S. O.*, 6:396, 2004.
- [136] E. Merzbacher. The Early History of Quantum Tunneling. *Phys. Today*, 55:44, 2002.
- [137] I. Białynicki-Birula, Ł. Rudnicki. *Entropic Uncertainty Relations in Quantum Physics*, pages 1–34. Springer Netherlands, Dordrecht, 2011.
- [138] D. J. Tannor. *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective*. University Science Books, 2006.
- [139] N. T. Maitra, E. J. Heller. Semiclassical perturbation approach to quantum reflection. *Phys. Rev. A*, 54:4763, 1996.
- [140] N. T. Maitra, E. J. Heller. Barrier tunneling and reflection in the time and energy domains: The battle of the exponentials. *Phys. Rev. Lett.*, 78:3035, 1997.
- [141] R. L. Jaffe. Reflection above the barrier as tunneling in momentum space. *Am. J. Phys.*, 78:620, 2010.
- [142] E. J. Heller. The many faces of tunneling. *J. Phys. Chem. A*, 103:49, 1999.
- [143] E. J. Heller. *The Semiclassical Way to Dynamics and Spectroscopy*. Princeton University Press, 2018.
- [144] C. S. Lent, D. J. Kirkner. The quantum transmitting boundary method. *J. Appl. Phys.*, 67:6353, 1990.
- [145] J. M. Berezanskii. *Expansion in Eigenfunctions of Selfadjoint Operators*. American Mathematical Society, 1968.
- [146] M. Reed, B. Simon. *Fourier Analysis, Self-Adjointness (Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. 2)*. Academic Press, London, 1975.