

Streszczenie

Formalizm oparty na funkcji Wignera i równaniu Moyala stanowi naturalny pomost między klasycznym a kwantowym opisem układów fizycznych, umożliwiając wykorzystanie aparatu pojęciowego mechaniki statystycznej do analizy zjawisk kwantowych. Niniejsza praca poświęcona jest rozwojowi i zastosowaniu metod entropowych w formalizmie przestrzenno-fazowym teorii kwantowej do badania dynamiki tzw. „małych” układów, w których efekty kwantowe odgrywają fundamentalną rolę.

Centralnym elementem pracy jest wprowadzenie entropii Wignera-Rényiego jako miary nieklasyczności stanów kwantowych w reprezentacji przestrzenno-fazowej. Wykazano ścisły związek między entropią połówkową (dla indeksu Rényiego $\alpha = 1/2$) a parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego, co dostarcza ścisłej interpretacji fizycznej tejże entropii. Ponadto, zademonstrowano uniwersalność rodziny entropii Wignera-Rényiego do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca na przykładzie silicenu. Przeprowadzono systematyczną analizę dynamiki rodziny stanów kota Schrödingera – stanu parzystego, nieparzystego oraz stanu Yurkego-Stolera – oddziałujących z gausowską barierą potencjału. Eksperymenty numeryczne z wykorzystaniem entropowej miary nieklasyczności pozwoliły ustalić rolę symetrii stanu początkowego w procesie rozpraszania. Wykazano, że parametry potencjału można wykorzystać do kontrolowania stopnia nieklasyczności stanów kwantowych.

W dalszej części pracy opracowane metody zastosowano do problemu z dziedziny biologii kwantowej – tunelowania protonu w parze zasad adenina-tymina struktury DNA pod wpływem promieniowania elektromagnetycznego. Wykorzystując model efektywnego potencjału podwójnej studni, przestrzenno-fazowe miary entropowe oraz formalizm stanów Floqueta wykazano, że promieniowanie podczerwone o częstotliwości około 15 THz prowadzi do rezonansowego wzmocnienia tunelowania. Potwierdzono korelację między zwiększoną nieklasycznością stanu, mierzoną entropią Wignera-Rényiego, a zwiększoną zdolnością tunelową wyrażoną przez dynamiczny współczynnik transmisji oparty na funkcji Wignera.

Wyniki badań teoretycznych wsparto obliczeniami numerycznymi. Opracowano i zaimplementowano w języku C++ spektralną metodę split-operator dla potencjałów niezależnych oraz jawnie zależnych od czasu, a także opracowano algorytmy transformacji między macierzą gęstości a funkcją Wignera oparte na dekompozycji przez macierze ścinania, które zastosowano do przedstawienia algorytmu rozwiązania samosprężonego problemu Moyala-Poissona.

Słowa kluczowe: entropia Wignera-Rényiego, nieklasyczność stanów kwantowych, funkcja Wignera, równanie Moyala, formalizm przestrzenno-fazowy, tautomeryzacja DNA