



**AGH**

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

**DZIEDZINA NAUKI ŚCISŁE I PRZYRODNICZE**

DYSCYPLINA NAUKI FIZYCZNE

## **ROZPRAWA DOKTORSKA**

Zastosowanie metod entropowych do badania  
dynamiki stanów w „małych” układach kwantowych  
– ujęcie przestrzenno-fazowe

Autor: Maciej Kalka

Promotor rozprawy: dr hab. inż. Bartłomiej J. Spisak, prof. AGH

Praca wykonana: Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie,  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kraków, 2026



**Oświadczenie autora rozprawy:**

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

data,      podpis  
27.01.2026      [podpis]

**Oświadczenie promotora rozprawy:**

Niniejsza rozprawa jest gotowa do oceny przez recenzentów.

27.01.2026      [podpis]  
data,      podpis



# 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



# Abstract

The formalism based on the Wigner function and the Moyal equation provides a natural bridge between classical and quantum descriptions of physical systems, enabling the use of the conceptual apparatus of statistical mechanics for the analysis of quantum phenomena. This work explores and develops entropic methods within the phase-space formalism of quantum theory to investigate the dynamics of so-called “small” systems where quantum effects play a fundamental role.

The central part of this work is the introduction of Wigner-Rényi entropy as a measure of non-classicality of quantum states in the phase-space representation. A rigorous relation between the one-half entropy (for Rényi index  $\alpha = 1/2$ ) and the Kenfack-Życzkowski non-classicality parameter is established, providing a strict physical interpretation of this entropy. Furthermore, the universality of the Wigner-Rényi entropy family for characterizing topological phase transitions in two-dimensional Dirac materials is demonstrated using silicene as an example. A systematic analysis of the dynamics of a family of Schrödinger cat states – even, odd, and Yurke-Stoler states – interacting with a Gaussian potential barrier is performed. Numerical experiments employing the entropic measure of non-classicality allowed to identify the role of initial state symmetry in the scattering process. It is shown that potential parameters can be used to control the degree of non-classicality of quantum states.

In the subsequent sections of this work, the developed methods are applied to a problem in quantum biology – proton tunneling in the adenine-thymine base pair of DNA structure under electromagnetic radiation. Using an effective double-well potential model, phase-space entropic measures, and the Floquet state formalism, it is demonstrated that infrared radiation at a frequency of approximately 15 THz leads to resonant enhancement of tunneling. A correlation between increased non-classicality of the state, as measured by one-half Wigner-Rényi entropy, and enhanced tunneling capability, expressed through the dynamical transmission coefficient based on the Wigner function, is confirmed.

The theoretical results are supported by numerical calculations. A spectral split-operator method for time-independent as well as explicitly time-dependent potentials has been developed and implemented in C++. Moreover, the algorithms for transformation between the density matrix and the Wigner function based on shearing matrix decomposition were developed and applied to formulate an algorithm for solving the self-consistent Moyal-Poisson problem.

**Keywords:** Wigner-Rényi entropy, non-classicality of quantum states, Wigner function, Moyal equation, phase-space formalism, DNA tautomerization



# Podziękowania

Przez ostatnich kilka lat, w toku badań naukowych i przygotowania niniejszej rozprawy, miałem okazję zobaczyć kilkadziesiąt prac doktorskich. Chociaż niewiele z nich przestudiowałem w całości, to w każdej z dużym zainteresowaniem wczytywałem się w treść podziękowań. Zawsze fascynowało mnie, jak wiele osób, interakcji i doświadczeń składa się na ostateczne powstanie każdej rozprawy. Nie inaczej jest z tą pracą i, korzystając z tej skromnej przestrzeni, chciałbym podziękować wszystkim zaangażowanym w jej powstanie.

Dziękuję mojemu promotorowi dr. hab. inż. Bartłomiejowi J. Spisakowi za opiekę naukową, cenne rady metodologiczne (i metodyczne) oraz dużą dążność do cierpliwości i wyrozumiałości. Dziękuję dr. inż. Damianowi Kołaczkowi oraz dr. hab. inż. Maciejowi Wołoszynowi za wskazówki i porady przy opracowaniu metod numerycznych wykorzystanych w tej pracy. Dziękuję najbliższym współpracownikom, będącym jednocześnie kolegami z uczelnianego pokoju, Dariuszowi Woźniakowi oraz Piotrowi Pigoniowi – za wszystkie wspólne dyskusje, które kształtowały wyniki tej pracy oraz ich interpretację.

Dziękuję kolegom i koleżankom z WFiIS AGH – Mateuszowi, Kamilowi, Władysławowi, Paulinie, Kamili, Maćkowi, Kubie, Marcie – za dobrą atmosferę i wymianę doświadczeń badawczych. Dziękuję przyjaciółom z PWr i UW – dr. Pawłowi Piszko oraz dr. Maciejowi Kierkli – za możliwość dzielenia lekcji na ścieżkach naukowych. Dziękuję przyjaciółom z Górnego Śląska i Krakowa – za cierpliwość i finezję w próbach zrozumienia, czego dotyczą moje badania.

Chciałbym również podziękować współpracownikom w IGSMiE PAN, w projekcie DOSE-3D oraz w vLayer Labs, w szczególności dr. inż. Pablo Benalcazarowi (IGSMiE PAN), dr. inż. Bartłomiejowi Rachwałowi (WFiIS AGH) oraz Markowi Kirejczukowi i Hubertowi Rachwalskiemu von Rejchwald (vLayer Labs) za okazane zaufanie i motywację do interdyscyplinarnego rozwoju.

Pracę dedykuję moim najbliższym, mojemu *Ex Silesia Lux*. Tym, którzy stanowią dla mnie inspirację i bez których wsparcia, zrozumienia i oddania na przestrzeni lat nie byłbym teraz w tym miejscu. Mojej żonie Karolinie, rodzicom Marzenie i Markowi, bratu Michałowi, babci Irenie oraz tym, którzy nie doczekali.



# Podsumowanie działalności naukowej

Osiągnięcia uzyskane w czasie realizacji doktoratu (10.2020-01.2026)

Stan dorobku naukowego na dzień: 27.01.2026

## Publikacje naukowe (nauki fizyczne)

1. **Kalka M**, Spisak B J, Woźniak D, Wołoszyn M, Kołaczek D, Dynamical entropic measure of nonclassicality of phase-dependent family of Schrödinger cat states, *Scientific Reports* 13(1), 16266, (2023)  
DOI: 10.1038/s41598-023-43421-2, (140 pkt. MEiN, IF = 3.9)
2. **Kalka M**, Pigoń P, Spisak B J, Phase-Space Approach for Topological Phase Transitions in Silicene, *Entropy* 27 (8), 857, (2025)  
DOI: 10.3390/e27080857, (100 pkt. MEiN, IF = 2.0)
3. Woźniak D, Spisak B J, **Kalka M**, Wołoszyn M, Wlekińska M, Pigoń P, Kołaczek D, Interaction time of Schrödinger cat states with a periodically driven quantum system: Symplectic covariance approach, *Physical Review A* 110 (2), 022416, (2024)  
DOI: 10.1103/PhysRevA.110.022416, (100 pkt. MEiN, IF = 2.9)
4. Woźniak D, **Kalka M**, Kołaczek D, Wołoszyn M, Spisak B J, Wignerian symplectic covariance approach to the interaction-time problem, *Scientific Reports* 14 (1), 31294, (2024)  
DOI: 10.1038/s41598-024-82744-6, (140 pkt. MEiN, IF = 3.9)
5. Woźniak D, **Kalka M**, Pigoń P, Spisak B J, Phase-space analysis of spinning particle dynamics in two-dimensional Weyl systems: Stratonovich–Weyl approach, *New Journal of Physics* 27, 103501, (2025)  
DOI: 10.1088/1367-2630/ae081f, (140 pkt. MEiN, IF = 2.8)

## Publikacje naukowe (pozostałe dyscypliny)

1. Benalcazar P, **Kalka M**, Kamiński J, From consumer to prosumer: A model-based analysis of costs and benefits of grid-connected residential PV-battery systems, *Energy Policy* 191, 114167, (2024)  
DOI: 10.1016/j.enpol.2024.114167, (140 pkt. MEiN, IF = 9.2)

2. Benalcazar P, **Kalka M**, Kamiński J, Transitioning from net-metering to net-billing: A model-based analysis for Poland, *Sustainable Energy Technologies and Assessments* 72, 104073, (2024)  
DOI: 10.1016/j.seta.2024.104073, (**140 pkt. MEiN, IF = 7.1**)
3. **Kalka M**, Kirejczyk M, A Comprehensive Review of TLSNotary Protocol (2024)  
(**arXiv preprint arXiv:2409.17670**)
4. Kirejczyk M, **Kalka M**, Logvinov L, Historical and Multichain Storage Proofs (2024)  
(**arXiv preprint arXiv:2411.00193**)

### Indeks Hirscha oraz liczba cytowań

Indeks Hirscha (h-index) oraz liczba cytowań wg. baz danych:

- Google Scholar: h-index = 4, liczba cytowań = 50
- Scopus: h-index = 3, liczba cytowań = 34
- Web of Science: h-index = 3, liczba cytowań = 31

### Udział w projektach

- Wykonawca w projekcie IDUB działanie D4 System grantów uczelnianych na prace badawcze realizowane z udziałem doktorantów - IV edycja pt. „Struktura elektronowa, własności nadprzewodzące, topologiczne i transportowe układów definiowanych w nowych materiałach dwuwymiarowych” (nr. projektu POB7 ID 6412). Okres realizacji: 24 miesiące (05.2023-05.2025)
- Asystent badawczy w projekcie TEAM-NET Fundacji na rzecz Nauki Polskiej pt. „Reconfigurable detector for measuring the spatial distribution of radiation dose for applications in the preparation of individual patient treatment plans” (nr. projektu POIR.04.04.00-00-15E5/18). Okres realizacji: 9 miesięcy (05.2023-01.2024)

### Wybrane wystąpienia konferencyjne

- *Analiza czasowo-częstotliwościowa oscylatora Duffinga*, XXV Minisymposium Fizyki Statystycznej, 04.07.2022, Kraków (**Wystąpienie ustne**)
- *Tunneling process of symmetrical state – phase-space approach based on the time evolution of the Wigner distribution function*, 11-12.06.2023, Barcelona (**Wystąpienie ustne**)
- *Phase-space approach for the topological phase transitions in silicene*, Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS), 3-8.12.2023, Kailua-Kona, HI, USA (**Wystąpienie ustne**)
- *Phase-space entropic indicators of the topological phase transitions in silicene*, 2D Quantum Materials for Spintronics (2DQMS), 29-31.01.2024, Poznań (**Poster**)

- *Dynamiczna entropowa miara nieklasyczności w badaniu stanów kota Schrödingera*, XXVI Mini-symposium Fizyki Statystycznej, 24.05.2026, Poznań (**Wystąpienie ustne**)



# Spis treści

|          |                                                                                                       |          |
|----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Wstęp</b>                                                                                          | <b>1</b> |
| 1.1      | Formalizm przestrzenno-fazowy teorii kwantowej . . . . .                                              | 1        |
| 1.2      | Małe układy kwantowe . . . . .                                                                        | 3        |
| 1.2.1    | Tunelowanie protonu w parach zasad DNA . . . . .                                                      | 4        |
| 1.3      | Cele i zakres pracy . . . . .                                                                         | 5        |
| 1.4      | Struktura pracy . . . . .                                                                             | 6        |
| <b>2</b> | <b>Dynamika kwantowa w przestrzeni fazowej</b>                                                        | <b>9</b> |
| 2.1      | Operatorowe sformułowanie mechaniki kwantowej . . . . .                                               | 9        |
| 2.1.1    | Mechanika kwantowa w obrazie Schrödingera . . . . .                                                   | 9        |
| 2.1.2    | Operator gęstości . . . . .                                                                           | 10       |
| 2.2      | Funkcja Wignera . . . . .                                                                             | 11       |
| 2.2.1    | Transformata Weyla . . . . .                                                                          | 11       |
| 2.2.2    | Funkcja Wignera jako symbol Weyla operatora gęstości . . . . .                                        | 12       |
| 2.2.3    | Wartości oczekiwane zmiennych dynamicznych w przestrzeni fazowej . . . . .                            | 13       |
| 2.3      | Równanie Moyala . . . . .                                                                             | 14       |
| 2.3.1    | Iloczyn Moyala . . . . .                                                                              | 14       |
| 2.3.2    | Nawias Moyala i jego własności . . . . .                                                              | 15       |
| 2.3.3    | Wyprowadzenie równania ruchu dla funkcji Wignera . . . . .                                            | 16       |
| 2.4      | Metody rozwiązywania równania Moyala . . . . .                                                        | 16       |
| 2.4.1    | Spektralna metoda split-operator . . . . .                                                            | 17       |
| 2.4.2    | Schemat drugiego rzędu – faktoryzacja Stranga . . . . .                                               | 18       |
| 2.4.3    | Schemat czwartego rzędu – faktoryzacja China . . . . .                                                | 18       |
| 2.4.4    | Dyskretyzacja przestrzeni fazowej . . . . .                                                           | 19       |
| 2.5      | Dynamika układu kwantowego w przestrzeni fazowej pod wpływem pola elektromagne-<br>tycznego . . . . . | 20       |
| 2.5.1    | Modyfikacja równania Moyala dla potencjałów zależnych od czasu . . . . .                              | 20       |
| 2.5.2    | Metoda split-operator dla potencjałów zależnych od czasu . . . . .                                    | 20       |
| 2.5.3    | Zmodyfikowane schematy Stranga i China . . . . .                                                      | 21       |
| 2.5.4    | Samouzgodniony opis cząstki naładowanej . . . . .                                                     | 22       |
| 2.5.5    | Układ równań Moyala–Poissona . . . . .                                                                | 23       |
| 2.6      | Metody numerycznego rozwiązywania układu Moyala–Poissona . . . . .                                    | 23       |

|          |                                                                                   |           |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 2.6.1    | Metoda split-operator dla równania von Neumanna . . . . .                         | 23        |
| 2.6.2    | Transformacja macierzy gęstości do funkcji Wignera . . . . .                      | 24        |
| 2.6.3    | Pełny algorytm rozwiązywania układu Moyala–Poissona . . . . .                     | 25        |
| <b>3</b> | <b>Dynamiczna entropowa miara nieklasyczności</b>                                 | <b>29</b> |
| 3.1      | Miary entropowe w reprezentacji przestrzenno-fazowej . . . . .                    | 30        |
| 3.1.1    | Entropia Wignera-Rényiego . . . . .                                               | 30        |
| 3.1.2    | Związek entropii Wignera-Rényiego z topologicznymi przejściami fazowymi . . . . . | 31        |
| 3.1.3    | Dolne ograniczenie na entropię Wignera-Rényiego . . . . .                         | 33        |
| 3.1.4    | Entropia połówkowa: Interpretacja fizyczna i związek z nieklasycznością . . . . . | 35        |
| 3.1.5    | Monotoniczność entropii Wignera-Rényiego względem indeksu Rényiego . . . . .      | 35        |
| 3.1.6    | Symplektyczna niezmienniczość miar entropowych . . . . .                          | 36        |
| 3.2      | Model układu . . . . .                                                            | 37        |
| 3.2.1    | Stan początkowy: rodzina stanów kota Schrödingera . . . . .                       | 37        |
| 3.2.2    | Potencjał gaussowski . . . . .                                                    | 38        |
| 3.2.3    | Parametry bariery potencjału . . . . .                                            | 39        |
| 3.3      | Metodologia obliczeń . . . . .                                                    | 39        |
| 3.3.1    | Parametry siatki obliczeniowej . . . . .                                          | 40        |
| 3.4      | Wyniki . . . . .                                                                  | 41        |
| 3.4.1    | Dynamika funkcji Wignera w przestrzeni fazowej . . . . .                          | 41        |
| 3.4.2    | Ewolucja gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej . . . . .              | 43        |
| 3.4.3    | Dynamika nieklasyczności . . . . .                                                | 44        |
| 3.4.4    | Wpływ wysokości bariery . . . . .                                                 | 45        |
| 3.5      | Wnioski . . . . .                                                                 | 46        |
| <b>4</b> | <b>Tunelowanie protonu w DNA pod wpływem pola elektromagnetycznego</b>            | <b>49</b> |
| 4.1      | Model teoretyczny układu . . . . .                                                | 50        |
| 4.1.1    | Oddziaływanie z promieniowaniem elektromagnetycznym . . . . .                     | 52        |
| 4.1.2    | Dynamiczne miary tunelowania . . . . .                                            | 54        |
| 4.2      | Metodologia obliczeń . . . . .                                                    | 54        |
| 4.2.1    | Warunek początkowy . . . . .                                                      | 55        |
| 4.3      | Dynamika tunelowania bez zaburzeń zewnętrznych . . . . .                          | 56        |
| 4.3.1    | Rozkład funkcji Wignera na stany własne . . . . .                                 | 56        |
| 4.3.2    | Widmo mocy współczynnika tunelowania . . . . .                                    | 56        |
| 4.4      | Wpływ pola elektromagnetycznego na proces tunelowania . . . . .                   | 58        |
| 4.4.1    | Formalizm stanów Floqueta . . . . .                                               | 58        |
| 4.4.2    | Modyfikacja widma mocy przez pole zewnętrzne . . . . .                            | 58        |
| 4.4.3    | Zależność współczynnika tunelowania od częstotliwości promieniowania IR . . . . . | 61        |
| 4.4.4    | Wzmocnienie tunelowania i implikacje dla stabilności genetycznej . . . . .        | 62        |
| <b>5</b> | <b>Podsumowanie i perspektywy</b>                                                 | <b>63</b> |

|          |                                                                          |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>A</b> | <b>Dodatek</b>                                                           | <b>65</b> |
| A.1      | Konwencja transformaty Fouriera . . . . .                                | 65        |
| A.2      | Podstawy klasycznej mechaniki statystycznej . . . . .                    | 65        |
| A.2.1    | Przestrzeń fazowa i formalizm Hamiltona . . . . .                        | 65        |
| A.2.2    | Nawias Poissona . . . . .                                                | 66        |
| A.2.3    | Gęstość fazowa i równanie Liouville’a . . . . .                          | 66        |
| A.2.4    | Funkcja charakterystyczna rozkładu prawdopodobieństwa . . . . .          | 67        |
| A.3      | Oryginalne wyprowadzenie równania Moyala . . . . .                       | 67        |
| A.3.1    | Operator charakterystyczny . . . . .                                     | 67        |
| A.3.2    | Kwantowa funkcja charakterystyczna . . . . .                             | 68        |
| A.3.3    | Związek kwantowej funkcji charakterystycznej z funkcją Wignera . . . . . | 68        |
| A.3.4    | Ewolucja czasowa . . . . .                                               | 69        |
| A.4      | Omówienie kodu numerycznego . . . . .                                    | 69        |
| A.4.1    | Architektura programu . . . . .                                          | 69        |
| A.4.2    | Reprezentacja danych . . . . .                                           | 69        |
| A.4.3    | Implementacja transformaty Fouriera . . . . .                            | 70        |
| A.4.4    | Iloczyn Hadamarda . . . . .                                              | 72        |
| A.4.5    | Implementacja schematu split-operator . . . . .                          | 72        |
| A.4.6    | Schemat dla potencjałów zależnych od czasu . . . . .                     | 73        |
| A.4.7    | Warunki początkowe . . . . .                                             | 74        |
| A.4.8    | Implementacja potencjałów . . . . .                                      | 74        |
| A.4.9    | Obliczanie obserwabli . . . . .                                          | 75        |
| A.4.10   | Stabilność numeryczna i walidacja . . . . .                              | 75        |
| A.4.11   | Jednostki atomowe . . . . .                                              | 75        |
| A.4.12   | Format pliku konfiguracyjnego . . . . .                                  | 76        |
|          | <b>Bibliografia</b>                                                      | <b>77</b> |



# Rozdział 1

## Wstęp

So long as big and small are merely relative concepts, it is no help to explain the big in terms of the small. It is therefore necessary to modify classical ideas in such a way to give an absolute meaning to size.

---

*P. A. M. Dirac*

Rozwój technik eksperymentalnych w ostatnich dekadach przyspieszył postęp w badaniu tzw. „małych” układów (ang. *small systems*), w których efekty kwantowe mogą odgrywać znaczącą rolę [1, 2]. Na tym poziomie materia przejawia własności znacząco różniące się od zachowania układów makroskopowych, a zjawiska takie jak tunelowanie kwantowe czy interferencja determinują dynamikę w układzie. Klasyczny opis tych systemów opiera się na formalizmie mechaniki statystycznej i termodynamiki [2, 3, 4]. Fakt ten motywuje wykorzystanie sformułowania teorii kwantów bliższego tym podejściom do opisu takich układów.

Formalizm teorii kwantowej w przestrzeni fazowej, oparty na funkcji Wignera, stanowi naturalny pomost między klasycznym, a kwantowym opisem układów fizycznych. Podejście to pozwala na wykorzystanie intuicji i aparatu pojęciowego mechaniki statystycznej do analizy zjawisk kwantowych, przy jednoczesnym zachowaniu pełnej informacji o stanie kwantowym badanego układu. Niniejsza praca poświęcona jest zastosowaniu formalizmu przestrzenno-fazowego do analizy dynamiki stanów w „małych” układach kwantowych.

### 1.1 Formalizm przestrzenno-fazowy teorii kwantowej

Formalizm teorii kwantowej w przestrzeni fazowej, podobnie jak wiele przełomowych osiągnięć w fizyce, nie powstał jako dzieło jednego człowieka. Jego rozwój doskonale ilustruje słynna sentencja Isaaca Newtona: „*Jeśli widzę dalej, to tylko dlatego, że stoję na ramionach olbrzymów*” [5]. W przypadku przestrzenno-fazowego sformułowania teorii kwantów możemy wskazać przynajmniej pięciu takich gigantów, których prace, powstające w latach 1927–1949, złożyły się na spójny formalizm [6, 7].

Pierwszy krok stanowiło ustanowienie przez Hermanna Weyla w 1927 roku korespondencji między funkcjami rzeczywistymi na przestrzeni fazowej, a operatorami kwantowymi w przestrzeni Hilberta [8].

W pracy *Quantenmechanik und Gruppentheorie* Weyl zaproponował systematyczną regułę przyporządkowania, pozwalającą na konstrukcję operatorów kwantowych z ich klasycznych odpowiedników. Pięć lat później John von Neumann w dziele *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* wykorzystał korespondencję Weyla i wyprowadził regułę rządzącą nieprzemiennym składaniem funkcji w przestrzeni fazowej – wczesną postać iloczynu gwiazdkowego [9]. W tym samym roku, 1932, Eugene Wigner poszukując „poprawki kwantowej dla równowagi termodynamicznej”, wprowadził quasi-rozkład prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej [10]. Funkcja Wignera, choć pierwotnie zaproponowana jako narzędzie do obliczeń termodynamicznych, stanowi w istocie pełną reprezentację stanu kwantowego w przestrzeni fazowej. Istotny wkład do rozwoju teorii wniósł Hilbrand Groenewold w 1946 roku, rozwijając formalizm nieprzemiennego iloczynu gwiazdkowego i rozpoznając, że korespondencja Weyla stanowi odwracalną transformację (transformację Wignera-Weyla), a nie jedynie procedurę kwantyzacji [11]. Jak ujmują to Curtright, Fairlie i Zachos [6], to José Enrique Moyal swojej pracy z 1949 roku [12] „ogłosił wielką syntezę”, która pogodziła formalizm „ujemnych prawdopodobieństw” funkcji Wignera z zasadą nieokreśloności. Argumentując, że przeformułowanie zasad mechaniki kwantowej w czysto statystycznych terminach pozwoli na głębsze zrozumienie teorii, Moyal wprowadził nawias noszący dziś jego imię – uogólnienie klasycznego nawiasu Poissona – oraz równanie ewolucji funkcji Wignera, o strukturze analogicznej do równania Liouville’a w mechanice klasycznej [13].

Funkcja Wignera dla znormalizowanej funkcji falowej  $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$  definiowana jest jako:

$$\varrho_\psi(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dy \, \psi\left(x + \frac{y}{2}\right) \psi^*\left(x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot y}. \quad (1.1)$$

Kluczową właściwością tak skonstruowanej funkcji w przestrzeni fazowej  $(x, p)$  jest to, że jej rozkłady brzegowe odtwarzają prawidłowe kwantowo-mechaniczne rozkłady prawdopodobieństwa

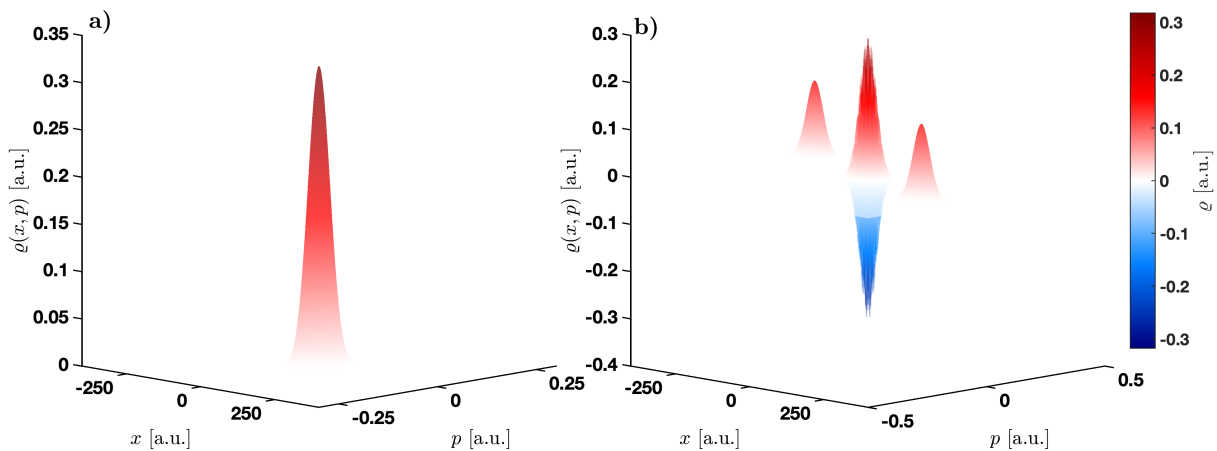
$$\int_{\mathbb{R}} dp \, \varrho_\psi(x, p) = |\psi(x)|^2, \quad (1.2)$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, \varrho_\psi(x, p) = |\tilde{\psi}(p)|^2, \quad (1.3)$$

gdzie  $\tilde{\psi}(p)$  oznacza transformatę Fouriera funkcji falowej  $\psi(x)$ , mianowicie

$$\tilde{\psi}(p) = \mathcal{F}_{x \rightarrow p} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \, e^{-\frac{ixp}{\hbar}} \psi(x). \quad (1.4)$$

Zastosowana w niniejszej pracy konwencja transformat Fouriera została szczegółowo omówiona w Dodatku A.1. Ponadto funkcja Wignera jest rzeczywista i znormalizowana do jedności. W przeciwieństwie jednak do klasycznych rozkładów prawdopodobieństwa funkcja Wignera nie jest funkcją nieujemną. Ta różnica sprawia, że nazywa się ją *quasi-rozkładem prawdopodobieństwa*. Jak udowodnił Hudson [14], funkcja Wignera jest nieujemna wtedy i tylko wtedy, gdy odpowiadająca jej funkcja falowa ma postać gaussowską. Ujemność funkcji Wignera interpretowana jest jako przejaw nieklasyczności stanu i może być skwantyfikowana za pomocą odpowiednich miar, takich jak parametr Kenfacka-Życzkowskiego [15] lub Benedicta [16]. Jak zaprezentowano na rysunku 1.1 stan przedstawiony w panelu (a) charakteryzuje się nieujemną, gaussowską funkcją Wignera, podczas gdy stan kota Schrödingera w panelu (b) wykazuje oscylacyjne struktury interferencyjne z obszarami ujemnych wartości (zaznaczone kolorem niebieskim), które stanowią o nieklasyczności stanu.



Rysunek 1.1: Porównanie funkcji Wignera dla (a) stanu gaussowskiego oraz (b) parzystego stanu kota Schrödingera.

Współczesne zastosowania formalizmu przestrzenno-fazowego wykraczają daleko poza pierwotne intencje jego twórców, obejmując szerokie spektrum współczesnych problemów kwantowych [17], w tym badania splątania kwantowego [18, 19], transportu kwantowego w nanostrukturach półprzewodnikowych [20, 21], a także w zakresie obliczeń kwantowych [22], czy metrologii kwantowej [23]. Kolejne zastosowania można znaleźć w optyce kwantowej [24], fizyce atomowej [25, 26], elektrodynamice kwantowej [27], fizyce plazmy [28], fizyce materii skondensowanej [29, 30], grawitacji i kosmologii [31, 32, 33] oraz kwantowej teorii pola [34]. Ponadto, formalizm ten znajduje liczne zastosowania interdyscyplinarne [17], m.in. w elektronice kwantowej [35, 36], chemii kwantowej [37, 38], biologii kwantowej [39, 40] czy przetwarzaniu sygnałów [41, 42, 43]. Idea funkcji Wignera wywarła również wpływ na rozwój niektórych dziedzin matematyki, takich jak geometria nieprzemienne [44, 45], kwantyzacja geometryczna [46], czy teoria operatorów pseudodifferentialnych [47, 48].

## 1.2 Małe układy kwantowe

Pod pojęciem „małych” układów fizycznych (ang. *small systems*) rozumie się systemy o rozmiarach typowo mieszczących się w zakresie od pojedynczych nanometrów do submikronów [4]. Na tym poziomie obserwuje się niezwykłą różnorodność systemów fizycznych: od pojedynczych makromolekuł biologicznych (2–100 nm), poprzez kropki kwantowe, aż po domeny magnetyczne w ferromagnetykach (< 300 nm) [2]. Jednymi z największych układów uznawanych za „małe” są układy koloidalne o rozmiarach rzędu 1  $\mu\text{m}$ , które pozwalają na bezpośrednią obserwację efektów fluktuacyjnych przy użyciu mikroskopii optycznej [1, 2]. Poza rozmiarem, cechą definiującą małe układy jest dominująca rola fluktuacji energetycznych. W układach makroskopowych, zgodnie z prawem wielkich liczb, względne fluktuacje wielkości termody-

namicznych maleją z pierwiastkiem z liczby cząstek układu [2]. W przypadku małych układów, gdzie liczba cząstek może być rzędu kilkuset lub mniej, fluktuacje stają się porównywalne z wartościami średnimi [4].

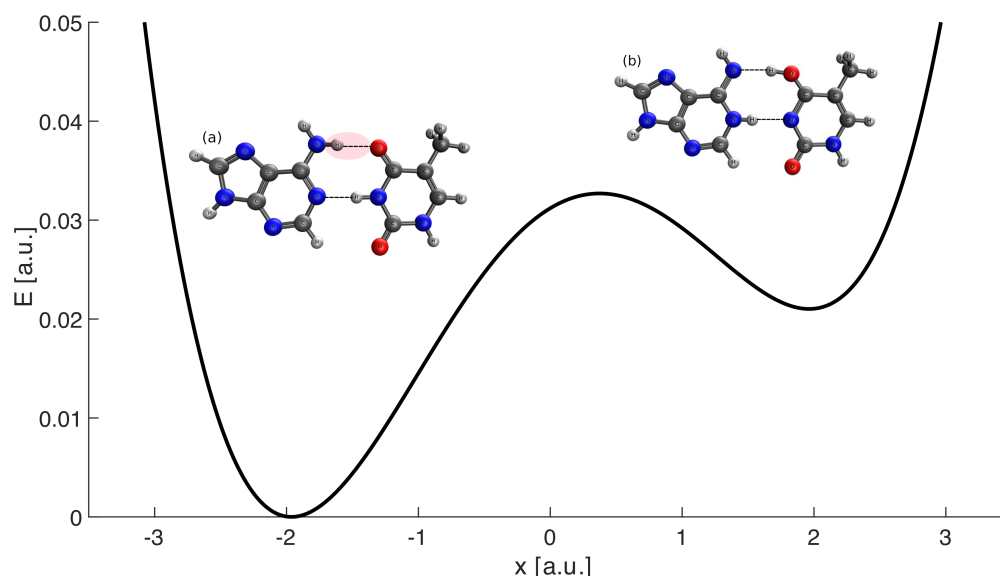
W nanometrowej skali długości obserwuje się szereg zjawisk fizycznych, których nie można w pełni wyjaśnić na gruncie fizyki klasycznej. Manifestacja kwantowej natury materii staje się dominująca, gdy rozmiary układu są porównywalne z charakterystycznymi długościami kwantowymi, takimi jak długość fali de Broglie'a, czy promień Bohra. Naturalnym przykładem efektu kwantowego jest zjawisko tunelowania, tj. proces w którym cząstka pokonuje barierę potencjału mimo posiadania energii niższej niż wysokość tej bariery. Tunelowanie kwantowe obserwuje się w wielu układach nanoskopowych, w szczególności w procesach transportowych w nanostrukturach półprzewodnikowych oraz w reakcjach chemicznych i biochemicznych. Wobec kluczowej roli efektów kwantowych w dynamice małych układów konieczne staje się zastosowanie formalizmu kwantowego do ich opisu. Formalizm przestrzenno-fazowy oparty na funkcji Wignera pozwalając na wykorzystanie aparatu pojęciowego mechaniki statystycznej do ilościowej charakterystyki kwantowych aspektów dynamiki stanowi więc naturalne podejście.

### 1.2.1 Tunelowanie protonu w parach zasad DNA

Choć przez wiele lat panowało przekonanie, że podczas gdy zjawiska fizyczne i chemiczne są determinowane przez mechanikę kwantową, procesy biologiczne można w pełni opisać za pomocą fizyki klasycznej [49], rozwój technik eksperymentalnych i metod obliczeniowych pozwolił na odkrycie, że efekty kwantowe mogą odgrywać fundamentalną rolę również w procesach biologicznych, co dało początek nowej dziedzinie nauki – biologii kwantowej [50, 51]. Jednym z przykładów kwantowych efektów w biologii jest proces tunelowania protonu w parach zasad DNA, który może prowadzić do spontanicznych mutacji genetycznych [52, 49, 53].

Przełomowym momentem w zrozumieniu struktury i funkcji DNA było opublikowanie w 1953 roku przez Watsona i Cricka modelu podwójnej helisy [54] opartego na wynikach uzyskanych przez Rosalind Franklin [55, 56]. W pracach przedstawiono nie tylko model strukturalny, ale sygnalizowano również istnienie rzadkich form tautomerycznych zasad azotowych, które mogłyby być odpowiedzialne za spontaniczne mutacje. Około dekadę później Löwdin [57] wskazał, że tautomeryzacja polega na spontanicznej migracji atomu wodoru poprzez tunelowanie protonu między dwoma energetycznie korzystnymi położeniami w cząsteczce. Zgodnie z modelem Watsona-Cricka w strukturze DNA występują dwa rodzaje par zasad: adenina-tymina (A–T) połączona dwoma wiązaniami wodorowymi oraz guanina-cytozyna (G–C) połączona trzema wiązaniami wodorowymi. Każda z tych par może występować w stanie kanonicznym o niższej energii lub w stanie tautomerycznym o wyższej energii [58] (por. rys. 1.2). Szczególne znaczenie biologiczne tautomeryzacji par zasad wynika z faktu, że formy tautomeryczne mogą prowadzić do błędnego parowania podczas replikacji DNA. Na przykład tautomeryczna forma pary A–T (oznaczana jako A\*–T\*) może skutkować utworzeniem nieprawidłowych par A\*–C lub T\*–G prowadząc do mutacji punktowej [52].

Hipoteza Löwdina stanowi przedmiot intensywnych badań, przede wszystkim w ramach studiów teoretycznych koncentrujących się na wyznaczeniu profilu energii potencjalnej [49, 52, 53, 59, 60, 61], parametrach tunelowania takich jak prawdopodobieństwo transferu [52, 53], zależności temperaturowej tautomeryzacji [53, 49], szybkościach reakcji [62, 63] oraz wpływie zewnętrznego pola elektrycznego [64, 63].



Rysunek 1.2: Schemat procesu tautomeryzacji pary zasad adenina-tymina. (a) Struktury chemiczne formy kanonicznej A–T oraz (b) tautomerycznej A\*–T\*, powstającej w wyniku jednoczesnego przeniesienia dwóch protonów w wiązaniach wodorowych. Profil energetyczny: asymetryczny potencjał podwójnej studni z głębszym minimum odpowiadającym stabilnej formie kanonicznej oraz płytszym minimum formy tautomerycznej koresponduje z procesem przeniesienia protonu oznaczonego kolorem czerwonym na rysunku (a). Przeniesienie protonu jest modelowane poprzez tunelowanie kwantowe przez barierę potencjału. Model ten jest szczegółowo analizowany w Rozdziale 4.

Wzbudzenie protonu ze stanu kanonicznego może wymagać ekspozycji na promieniowanie o określonej długości fali. Promieniowanie jonizujące i ultrafioletowe uszkadzają DNA poprzez bezpośrednią jonizację lub reaktywne formy tlenu [65, 66, 67]. Promieniowanie UV, wraz ze światłem widzialnym, może powodować powstawanie dimerów pirymidynowych, utlenianie lub produkcję tlenu singletowego [65]. Promieniowanie mikrofalowe i radiowe były badane eksperymentalnie i stwierdzono, że również mogą mieć negatywny wpływ na strukturę cząsteczki DNA [68, 69]. Jednakże wpływ promieniowania podczerwonego nie został jeszcze dokładnie zbadany i nie jest jasne, czy powoduje ono jakiegokolwiek uszkodzenia [70]. Zrozumienie mechanizmu oddziaływania pola elektromagnetycznego z DNA jest istotne nie tylko z punktu widzenia fundamentalnego, ale także ze względu na potencjalne implikacje dla stabilności genetycznej.

### 1.3 Cele i zakres pracy

Głównym celem niniejszej pracy jest wykorzystanie formalizmu teorii kwantowej w przestrzeni fazowej, a w szczególności metod entropowych w przestrzeni fazowej, do analizy dynamiki kwantowej „małego” układu biologicznego pod wpływem zaburzenia elektromagnetycznego. W ramach realizacji tego celu:

1. Wprowadzono entropię Wignera-Rényiego jako miarę nieklasyczności stanu kwantowego w reprezentacji przestrzenno-fazowej i wykazano jej ścisły związek z parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego [71].

2. Przeprowadzono analizę dynamiki rodziny stanów kota Schrödingera oddziałujących z gaussowską barierą potencjału. Zbadano wpływ fazy względnej superpozycji oraz parametrów bariery na ewolucję entropową, wykazując rolę symetrii stanu początkowego w zachowaniu nieklasyczności po procesie rozpraszania [71].
3. Zademonstrowano uniwersalność rodziny entropii Wignera-Rényiego jako narzędzia do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca na przykładzie silicenu [72].
4. Opracowano i zaimplementowano metody numeryczne rozwiązywania równania Moyala, w tym spektralną metodę split-operator dla potencjałów jawnie zależnych od czasu. Szczegóły implementacji numerycznej umieszczono w Dodatku A.4.
5. Zaproponowano algorytmy transformacji między macierzą gęstości, a funkcją Wignera oparte na dekompozycji przez macierze ścinania, które zastosowano do przedstawienia algorytmu rozwiązania samosprężonego problemu Moyala-Poissona.
6. Zbadano wpływ promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni na prawdopodobieństwo tunelowania protonu, identyfikując częstotliwości rezonansowe prowadzące do wzmocnienia procesu tautomerizacji i związane z tym implikacje.
7. Potwierdzono związek między nieklasycznością stanu, mierzoną entropią połówkową Wignera-Rényiego, a zdolnością tunelową wyrażoną dynamicznym współczynnikiem transmisji opartym na funkcji Wignera.

Praca łączy rozwój narzędzi teoretycznych – w szczególności entropowej miary nieklasyczności w formalizmie przestrzenno-fazowym – z ich zastosowaniem do rozwiązania problemu biofizycznego. Wyniki badań teoretycznych zostały wsparte obliczeniami numerycznymi. Wyniki obliczeń numerycznych zostały uzyskane przy pomocy opracowanego kodu numerycznego, zaimplementowanego w języku C++, którego strukturę omówiono w Dodatku A.4.

## 1.4 Struktura pracy

Niniejsza praca składa się z czterech rozdziałów, dodatku oraz bibliografii. Rozdział 2 zawiera systematyczne wprowadzenie do dynamiki kwantowej w przestrzeni fazowej. Przedstawiono w nim sformułowanie mechaniki kwantowej oparte na operatorze gęstości, transformatę Weyla ustanawiającą odpowiedniość między operatorami, a funkcjami na przestrzeni fazowej oraz definicję i podstawowe właściwości funkcji Wignera. Szczegółowo omówiono równanie Moyala opisujące ewolucję czasową funkcji Wignera. Rozdział kończy prezentacja metod rozwiązywania równania Moyala, ze szczególnym uwzględnieniem numerycznej metody split-operator wykorzystanej w obliczeniach prezentowanych w dalszej części pracy. Rozdział 3 poświęcony jest miarom entropowym w przestrzeni fazowej i ich zastosowaniom. Wprowadzono w nim entropię Wignera-Rényiego i wykazano ścisły związek między entropią połówkową ( $\alpha = 1/2$ ), a parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego. Ponadto zademonstrowano zastosowanie entropii Wignera-

Rényiego do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca na przykładzie silicenu. Następnie wykorzystano dynamiczną entropową miarę nieklasyczości w analizie oddziaływania stanów kwantowych z barierą potencjału. Przeprowadzono systematyczną analizę ewolucji czasowej entropii Wignera-Rényiego dla rodziny stanów kota Schrödingera – stanu parzystego, nieparzystego oraz stanu Yurke’a-Stolera – oddziałujących z gaussowską barierą potencjału. Zbadano wpływ wysokości i szerokości bariery na dynamikę układu oraz sformułowano wnioski dotyczące zachowania symetrii i nieklasyczości stanów. Rozdział 4 stanowi zastosowanie metod rozwiniętych w poprzednim rozdziale do problemu biofizycznego – dynamiki kwantowej transferu protonu w parze zasad adenina-tymina struktury DNA pod wpływem promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni. Przedstawiono model teoretyczny układu oparty na efektywnym potencjale podwójnej niesymetrycznej studni. Wprowadzono dynamiczny współczynnik tunelowania oparty na funkcji Wignera oraz przeanalizowano widmo mocy jego amplitudy w celu identyfikacji przejść między stanami własnymi. Główną część rozdziału stanowi analiza wpływu zależnego od czasu pola elektrycznego na proces tunelowania, prowadzona w formalizmie stanów Floqueta. W ramach opracowanego podejścia wykazano, że promieniowanie podczerwone o częstotliwości około 15 THz prowadzi do znacznego wzmocnienia prawdopodobieństwa tunelowania. Pracę podsumowuje rozdział 5 zawierające syntezę uzyskanych wyników oraz perspektywy dalszych badań. Dodatek A zawiera uzupełniający materiał matematyczny: przyjętą konwencję transformat Fouriera, elementy klasycznej mechaniki statystycznej stanowiące punkt odniesienia dla kwantowego formalizmu przestrzenno-fazowego, oryginalne wyprowadzenie równania Moyala metodą funkcji charakterystycznej oraz omówienie implementacji numerycznej algorytmów wykorzystanych w obliczeniach. Pracę zamyka wykaz literatury.



## Rozdział 2

# Dynamika kwantowa w przestrzeni fazowej

It doesn't seem to be true that God created a classical universe on the first day and then quantized it on the second day.

---

*John C. Baez [73]*

### 2.1 Operatorowe sformułowanie mechaniki kwantowej

Sformułowanie mechaniki kwantowej oparte na wektorach stanu i równaniu Schrödingera jest wystarczające do opisu stanów czystych w układach kwantowych. W praktyce jednak często mamy do czynienia z układami, których stan nie jest dokładnie znany lub które oddziałują z otoczeniem [74]. W takich przypadkach konieczne jest wprowadzenie podejścia statystycznego, które pozwala na opis zarówno czystych stanów kwantowych, jak i ich mieszanin statystycznych. Fundamentalnym obiektem w tym podejściu jest operator gęstości oraz jego równanie ewolucji czasowej.

#### 2.1.1 Mechanika kwantowa w obrazie Schrödingera

Formalizm mechaniki kwantowej opiera się na postulacie, że układ fizyczny opisywany jest przez abstrakcyjne wektory stanu  $|\psi(t)\rangle$  należące do przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}$  określonej nad ciałem liczb zespolonych [75]. Przykładowa realizacja tej przestrzeni to przestrzeń funkcji  $L^2(\mathbb{R})$  z iloczynem skalarnym zdefiniowanym jako

$$\langle f|g\rangle = \int dx f^*(x)g(x). \quad (2.1)$$

Reprezentacja wektora stanu w wybranej bazie  $|\xi\rangle$  realizowana jest przez funkcję falową

$$\psi(\xi, t) = \langle \xi | \psi(t) \rangle, \quad (2.2)$$

którą interpretuje się jako rzut wektora  $|\psi(t)\rangle$  na stan bazowy  $|\xi\rangle$ . Podstawowe obserwabie układu – położenie  $x$  i pęd  $p$  – są reprezentowane przez operatory hermitowskie  $\hat{x}$  i  $\hat{p}$  spełniające równania własne w postaci

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle, \quad \hat{p} |p\rangle = p |p\rangle. \quad (2.3)$$

Operatory te spełniają kanoniczną relację komutacji Heisenberga:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (2.4)$$

W opisywanym podejściu, układ kwantowy jest scharakteryzowany przez hamiltonian  $\hat{H}$ , który jest operatorem hermitowskim. Ewolucja czasowa wektora stanu opisana jest równaniem ewolucyjnym

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle, \quad (2.5)$$

które wraz z warunkiem początkowym definiuje zagadnienie początkowe. Rozwiązanie ogólne tego zagadnienia można formalnie wyrazić wzorem

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0\rangle, \quad (2.6)$$

gdzie operator  $\hat{U}(t)$  jest operatorem ewolucji czasowej spełniającym równania:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H} \hat{U}(t), \quad (2.7)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}^\dagger(t) = -\hat{U}^\dagger(t) \hat{H}, \quad (2.8)$$

przy czym

$$\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{1}, \quad (2.9)$$

tzn. operator  $\hat{U}(t)$  jest operatorem unitarnym.

### 2.1.2 Operator gęstości

Operator gęstości  $\hat{\rho}$  jest dodatnio określonym operatorem hermitowskim o śladzie równym 1 [74]. W ogólności przyjmuje on postać

$$\hat{\rho}(t) = \sum_n p_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)|, \quad (2.10)$$

gdzie  $p_n \geq 0$  określa prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie własnym  $|\psi_n(t)\rangle$ , przy czym zachodzi warunek  $\sum_n p_n = 1$ . Dla stanu czystego operator gęstości redukuje się do operatora rzutowego

$$\hat{P}_k = |\psi_k(t)\rangle \langle \psi_k(t)| := \hat{\rho}_k(t). \quad (2.11)$$

Operator gęstości spełnia następujące własności [76, 13]

1. Hermitowskość:  $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ .
2. Nieujemność:  $\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle \geq 0$  dla dowolnego  $|\phi\rangle$ .
3.  $\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1$ .
4.  $\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1$ , przy czym równość zachodzi wyłącznie dla stanów czystych.

W reprezentacji położeniowej operator gęstości definiuje się następująco

$$\rho(x, x'; t) = \langle x' | \hat{\rho}(t) | x \rangle, \quad (2.12)$$

i nazywa się macierzą gęstości w tejże reprezentacji. Korzystając z rozwiązania (2.6), można wyznaczyć ewolucję czasową operatora gęstości zgodnie ze wzorem

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t) \hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger(t), \quad (2.13)$$

gdzie  $\hat{\rho}_0$  jest operatorem gęstości w chwili początkowej  $t = 0$ . Różniczkując równanie (2.13) po czasie i korzystając z własności operatora ewolucji (2.7)–(2.8), otrzymujemy równanie von Neumanna

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (2.14)$$

które stanowi równanie ewolucji operatora gęstości.

## 2.2 Funkcja Wignera

Przedstawione w poprzedniej sekcji sformułowanie mechaniki kwantowej, oparte na operatorze gęstości, umożliwia przejście do opisu stanów kwantowych w przestrzeni fazowej. Kluczową rolę odgrywa tu funkcja Wignera, wprowadzona po raz pierwszy przez Eugene'a Wignera w 1932 roku [10]. Funkcja Wignera stanowi podstawę sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej, pozwalając na interpretację teorii kwantów jako teorii statystycznej, w której obserwabla tworzą algebrę nieprzemiennej. Takie ujęcie prowadzi do opisu zjawisk kwantowych za pomocą rzeczywistych funkcji na przestrzeni fazowej  $(x, p)$ , gdzie stała Plancka stanowi parametr deformacyjny algebry Poissona [13].

### 2.2.1 Transformata Weyla

Podstawą sformułowania teorii kwantowej w przestrzeni fazowej jest transformata Weyla [8], która ustanawia wzajemnie jednoznaczność między operatorami działającymi w przestrzeni Hilberta a funkcjami skalarnymi na przestrzeni fazowej.

**Definicja 2.1** (Symbol Weyla). Symbol Weyla operatora  $\hat{A}$  to funkcja w przestrzeni fazowej następującej postaci:

$$A_W(x, p) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{A} \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-\frac{ip\xi}{\hbar}}, \quad (2.15)$$

gdzie całkowanie przebiega po zmiennej pomocniczej  $\xi$ .

Dla operatorów położenia i pędu symbole Weyla przyjmują następującą postać

$$x_W = x, \quad p_W = p. \quad (2.16)$$

Dla jednocząstkowego hamiltonianu postaci:  $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{p}^2/2m + U(\hat{x})$  symbol Weyla pokrywa się z klasyczną funkcją Hamiltona, mianowicie

$$H_W(x, p) = H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + U(x). \quad (2.17)$$

Fakt ten wynika stąd, że hamiltonian  $\hat{H}(\hat{x}, \hat{p})$  jest sumą funkcji zależnych osobno od operatorów  $\hat{x}$  i  $\hat{p}$ .

### 2.2.2 Funkcja Wignera jako symbol Weyla operatora gęstości

**Definicja 2.2** (Funkcja Wignera). Funkcja Wignera  $\varrho(x, p; t)$  stanowi reprezentację stanu kwantowego w przestrzeni fazowej i jest wyrażona jako przeskalowany symbol Weyla operatora gęstości  $\hat{\rho}(t)$ , tzn.

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left\langle x + \frac{\xi}{2} \left| \hat{\rho}(t) \right| x - \frac{\xi}{2} \right\rangle e^{-\frac{ip\xi}{\hbar}}. \quad (2.18)$$

Dla stanu czystego opisanego funkcją falową  $\psi(x, t)$ , gdzie operator gęstości ma postać (2.11), funkcja Wignera przyjmuje postać:

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \psi^*\left(x - \frac{\xi}{2}, t\right) \psi\left(x + \frac{\xi}{2}, t\right) e^{-\frac{ip\xi}{\hbar}}. \quad (2.19)$$

Związek funkcji Wignera z macierzą gęstości w reprezentacji położeniowej (2.12) można wyrazić za pomocą równania:

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \rho\left(x + \frac{\xi}{2}, x - \frac{\xi}{2}; t\right) e^{-\frac{ip\xi}{\hbar}}. \quad (2.20)$$

Funkcja Wignera posiada szereg charakterystycznych własności:

1. Rzeczywistość:

$$\varrho(x, p; t) \in \mathbb{R} \quad (2.21)$$

2. Normalizacja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t) = 1. \quad (2.22)$$

3. Rozkłady brzegowe: całkowanie funkcji Wignera po zmiennej pędowej daje gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \varrho(x, p; t) = |\psi(x, t)|^2 \equiv n(x, t). \quad (2.23)$$

Analogicznie, całkowanie po zmiennej położeniowej daje poprawny rozkład pędów

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \varrho(x, p; t) = \left| \tilde{\psi}(p, t) \right|^2 \equiv \tilde{n}(p, t), \quad (2.24)$$

gdzie  $\tilde{\psi}(p, t)$  jest transformatą Fouriera funkcji falowej.

4. Ograniczoność:

$$-\frac{1}{\pi\hbar} \leq \varrho(x, p; t) \leq \frac{1}{\pi\hbar}. \quad (2.25)$$

Charakterystyczną cechą funkcji Wignera, odróżniającą ją od klasycznych rozkładów prawdopodobieństwa, jest możliwość przyjmowania wartości ujemnych w pewnych obszarach przestrzeni fazowej. Ta właściwość czyni funkcję Wignera przykładem quasi-rozkładu prawdopodobieństwa, gdyż spełnia ona wszystkie pozostałe aksjomaty teorii prawdopodobieństwa Kołmogorowa. Fundamentalny wynik dotyczący znaku funkcji Wignera stanowi twierdzenie Hudsona [14] i jego dalsze uogólnienia [77].

**Twierdzenie 2.1** (Hudson, 1974). Funkcja Wignera jest nieujemna w całej przestrzeni fazowej wtedy i tylko wtedy, gdy odpowiadający jej stan kwantowy jest stanem gaussowskim.

Wszystkie inne stany kwantowe, które są opisane funkcją Wignera charakteryzują się ujemnymi wartościami tej funkcji w pewnych obszarach przestrzeni fazowej, co jest interpretowane jako miara ich nieklasyczności [15, 16]. Alternatywna interpretacja, traktująca funkcję Wignera jako amplitudę prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej, proponuje rozpatrywać  $|\varrho(x, p; t)|^2$  jako właściwą gęstość prawdopodobieństwa [78, 79, 80]. Podejście to eliminuje problem znaku, lecz ogranicza się do stanów czystych. Ujemność funkcji Wignera można skwantyfikować za pomocą parametru nieklasyczności wprowadzonego przez Kenfacka i Życzkowskiego [15].

**Definicja 2.3** (Parametr nieklasyczności).

$$\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\varrho(x, p; t)| dx dp - 1. \quad (2.26)$$

Parametr  $\delta(t)$  równy jest podwojonej wartości objętości ujemnej części funkcji Wignera w przestrzeni fazowej. Jak wynika z podanej definicji 2.3

- dla stanów gaussowskich:  $\delta = 0$ ,
- dla stanów nieklasycznych:  $\delta > 0$

### 2.2.3 Wartości oczekiwane zmiennych dynamicznych w przestrzeni fazowej

Jedną z zalet sformułowania teorii kwantowej w przestrzeni fazowej jest możliwość obliczania wartości średnich obserwabli kwantowych za pomocą całek fazowych. Wartość oczekiwana operatora  $\hat{A}$  w stanie opisanym operatorem gęstości  $\hat{\rho}$  wyraża się jako

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}[\hat{\rho}\hat{A}] = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t) A_W(x, p)}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t)}, \quad (2.27)$$

gdzie  $A_W(x, p)$  jest symbolem Weyla operatora  $\hat{A}$ . Uwzględniając normalizację funkcji Wignera zgodnie z równaniem (2.22), wyrażenie (2.27) przyjmuje postać

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t) A_W(x, p). \quad (2.28)$$

Dla podstawowych obserwabli wzory te przyjmują szczególnie proste postacie:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t) x, \quad (2.29)$$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t) p. \quad (2.30)$$

W formalizmie przestrzenno-fazowym obliczanie wartości średnich położenia i pędu sprowadza się do obliczenia standardowych całek z wagą daną przez funkcję Wignera, co stanowi bezpośrednią analogię z klasyczną mechaniką statystyczną.

## 2.3 Równanie Moyala

W swoim przełomowym artykule [12] Moyal wykazał, że mechanikę kwantową można przeformułować na język klasycznej mechaniki statystycznej, wprowadzając nieprzemienią algebrę funkcji określonych na przestrzeni fazowej. Oryginalne podejście Moyala opierało się na konstrukcji operatora charakterystycznego  $\hat{M}(\tau, \theta) = \exp[i(\tau\hat{p} + \theta\hat{x})]$  i analizie jego wartości oczekiwanej interpretowanej jako kwantowej funkcji charakterystycznej. Szczegóły tego wyprowadzenia przedstawiono w Dodatku A.3. W niniejszej sekcji przedstawione zostało wyprowadzenie równania ruchu dla funkcji Wignera, wychodząc bezpośrednio od równania von Neumanna (2.14) i wykorzystując transformację Weyla. Podejście to uwidacznia związek między operatorowym sformułowaniem teorii kwantowej, a jej reprezentacją w przestrzeni fazowej.

### 2.3.1 Iloczyn Moyala

Kluczowym elementem przestrzenno-fazowego sformułowania teorii kwantowej jest nieprzemienność algebry obserwabli kwantowych. W reprezentacji Schrodingera wyraża się ona przez zasadę nieokreśloności Heisenberga (2.4). W obrazie przestrzeni fazowej nieprzemienność ta jest zadana przez iloczyn Moyala (zwany również  $\star$ -iloczynem), który definiuje mnożenie symboli Weyla odpowiadających iloczynowi operatorów [11, 81].

**Definicja 2.4** (Iloczyn Moyala). Dla dwóch funkcji  $a(x, p)$  i  $b(x, p)$  będących symbolami Weyla operatorów  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$ , iloczyn Moyala jest zadany przez symbol Weyla iloczynu  $\hat{A}\hat{B}$ :

$$(a \star b)(x, p) := a(x, p) \star b(x, p) = (\hat{A}\hat{B})_W(x, p). \quad (2.31)$$

Iloczyn ten można przedstawić w postaci całkowej [82]

$$(a \star b)(x, p) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2} \int d\xi d\eta d\xi' d\eta' a(x + \xi, p + \eta) b(x + \xi', p + \eta') e^{\frac{2i}{\hbar}(\xi\eta' - \eta\xi')}, \quad (2.32)$$

lub w równoważnej postaci różniczkowej [11]

$$a \star b = a(x, p) \exp\left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x\right)\right] b(x, p), \quad (2.33)$$

gdzie strzałki wskazują kierunek działania pochodnych cząstkowych. Rozwijając operator wykładniczy w szereg Taylora, otrzymujemy:

$$a \star b = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^k \frac{\partial^{n-k} a}{\partial x^{n-k}} \frac{\partial^k a}{\partial p^k} \frac{\partial^k b}{\partial x^k} \frac{\partial^{n-k} b}{\partial p^{n-k}}, \quad (2.34)$$

co dla funkcji klasy  $C^\infty$  można zapisać zwięźle jako:

$$a \star b = ab + \frac{i\hbar}{2} \{a, b\} + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (2.35)$$

gdzie wyrażenie:

$$\{a, b\} = \frac{\partial a}{\partial x} \frac{\partial b}{\partial p} - \frac{\partial a}{\partial p} \frac{\partial b}{\partial x} \quad (2.36)$$

jest nawiasem Poissona (por. Dodatek A, równanie (A.7)), natomiast  $i\hbar/2$  jest nazywane parametrem deformacji [13].

### 2.3.2 Nawias Moyala i jego własności

**Definicja 2.5** (Nawias Moyala). Nawias Moyala jest dany jako znormalizowana antysymetryzacja iloczynu  $\star$ :

$$\{a, b\}_\star := \frac{1}{i\hbar}(a \star b - b \star a). \quad (2.37)$$

Wykorzystując rozwinięcie (2.33), nawias Moyala można przedstawić w zwartej postaci:

$$\{a, b\}_\star = \frac{2}{\hbar}a(x, p) \sin \left[ \frac{\hbar}{2} \left( \overleftarrow{\partial}_x \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_x \right) \right] b(x, p), \quad (2.38)$$

Dla zmiennych kanonicznych nawias Moyala odtwarza kanoniczną relację komutacji

$$\{x, p\}_\star = 1, \quad (2.39)$$

co stanowi przestrzenno-fazowy odpowiednik relacji nieokreśloności Heisenberga (2.4). Nawias Moyala spełnia następujące własności algebraiczne [81]:

1. Antysymetria:

$$\{a, b\}_\star = -\{b, a\}_\star. \quad (2.40)$$

2. Liniowość:

$$\{\alpha a + \beta b, c\}_\star = \alpha \{a, c\}_\star + \beta \{b, c\}_\star. \quad (2.41)$$

3. Tożsamość Jacobiego:

$$\{a, \{b, c\}_\star\}_\star + \{b, \{c, a\}_\star\}_\star + \{c, \{a, b\}_\star\}_\star = 0. \quad (2.42)$$

4. Reguła Leibniza względem iloczynu  $\star$ :

$$\{a, b \star c\}_\star = \{a, b\}_\star \star c + b \star \{a, c\}_\star. \quad (2.43)$$

Własności te gwarantują, że przestrzeń funkcji na przestrzeni fazowej z nawiasem Moyala tworzy algebrę Liego, będącą deformacją algebry Poissona [83, 84, 13, 85]. Związek między tymi strukturami algebraicznymi najwyraźniej widoczny jest w rozwinięciu w szereg potęgowy względem  $\hbar$ . Korzystając z (2.38) i rozwijając funkcję sinus, otrzymujemy:

$$\{a, b\}_\star = \{a, b\} + \frac{\hbar^2}{24} \hat{\mathcal{D}}_3(a, b) + \mathcal{O}(\hbar^4), \quad (2.44)$$

gdzie operator różniczkowy  $\hat{\mathcal{D}}_3$  ma postać:

$$\hat{\mathcal{D}}_3(a, b) = \frac{\partial^3 a}{\partial x^3} \frac{\partial^3 b}{\partial p^3} - 3 \frac{\partial^2 a}{\partial x \partial x} p \frac{\partial^2 b}{\partial x \partial p} p + 3 \frac{\partial^2 a}{\partial x \partial p} p \frac{\partial^2 b}{\partial x \partial x} p - \frac{\partial^3 a}{\partial p^3} \frac{\partial^3 b}{\partial x^3}. \quad (2.45)$$

W zerowym rzędzie przedstawionego rozwinięcia (2.44) względem  $\hbar$  nawias Moyala redukuje się do nawiasu Poissona

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \{a, b\}_\star = \{a, b\}. \quad (2.46)$$

Tym samym w granicy klasycznej otwarzana jest struktura algebraiczną klasycznej mechaniki statystycznej (por. Dodatek A). Poprawki kwantowe rzędu  $\hbar^{2n}$  dla  $n \geq 1$  zawierają pochodne cząstkowe rzędu  $2n + 1$  względem zmiennych fazowych. Ma to istotną konsekwencję: dla funkcji będących wielomianami stopnia co najwyżej drugiego względem zmiennych  $x$  i  $p$  wszystkie poprawki kwantowe znikają i nawias Moyala jest tożsamy z nawiasem Poissona. W szczególności dotyczy to hamiltonianu oscylatora harmonicznego  $H(x, p) = p^2/2m + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ .

### 2.3.3 Wyprowadzenie równania ruchu dla funkcji Wignera

Równanie ewolucji czasowej funkcji Wignera otrzymujemy, stosując transformację Weyla do równania von Neumanna (2.14). Wykorzystując fundamentalną własność [81, 82]

$$[\hat{A}, \hat{B}]_W = i\hbar \{A_W, B_W\}_*, \quad (2.47)$$

gdzie  $[\cdot, \cdot]_W$  jest symbolem Weyla komutatora dwóch operatorów, otrzymujemy

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_W = \{H_W, \varrho\}_* = -\{\varrho, H_W\}_*, \quad (2.48)$$

gdzie  $H_W = H_W(x, p)$  jest symbolem Weyla operatora Hamiltona (2.17), a  $\varrho = \varrho(x, p; t)$  jest funkcją Wignera zdefiniowaną w (2.18).

**Równanie Moyala.** Ewolucja czasowa funkcji Wignera jest zadana równaniem

$$\frac{\partial \varrho(x, p; t)}{\partial t} + \{\varrho(x, p; t), H(x, p)\}_* = 0. \quad (2.49)$$

Jest to fundamentalne równanie ewolucji czasowej w przestrzenno-fazowym sformułowaniu teorii kwantowej. Strukturalnie przypomina ono klasyczne równanie Liouville'a (por. Dodatek A, równanie (A.11)), z nawiasem Moyala zastępującym nawias Poissona. Dla hamiltonianu postaci  $H(x, p) = p^2/2m + U(x)$  równanie Moyala można zapisać w jawnej postaci. Wykorzystując rozwinięcie (2.38) i fakt, że wyraz kinetyczny jest kwadratowy w  $p$ , otrzymujemy

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \varrho}{\partial x} - \frac{1}{i\hbar} \left[ U\left(x + \frac{i\hbar}{2} \partial_p\right) - U\left(x - \frac{i\hbar}{2} \partial_p\right) \right] \varrho = 0, \quad (2.50)$$

gdzie wyraz  $U(x + i\hbar\partial_p/2) - U(x - i\hbar\partial_p/2)$  jest nazywany energią potencjalną Wignera [7]. Dla energii potencjalnej  $U(x)$  klasy  $C^\infty$  rozwinięcie energii potencjalnej Wignera w szereg Taylora daje:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \varrho}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial \varrho}{\partial p} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \hbar^{2n}}{2^{2n} (2n+1)!} \frac{\partial^{2n+1} U}{\partial x^{2n+1}} \frac{\partial^{2n+1} \varrho}{\partial p^{2n+1}}. \quad (2.51)$$

Lewa strona równania (2.51) odpowiada klasycznemu równaniu Liouville'a (por. Dodatek A, równanie (A.11)), natomiast prawa strona zawiera kwantowe poprawki proporcjonalne do parzystych potęg  $\hbar$ .

## 2.4 Metody rozwiązywania równania Moyala

Równanie Moyala (2.51) jest równaniem różniczkowym, którego analityczne rozwiązanie można znaleźć jedynie w nielicznych przypadkach szczególnych, takich jak oscylator harmoniczny, czy cząstka swobodna.

W przypadku potencjałów bardziej złożonych niż wielomiany stopnia co najwyżej drugiego, konieczne jest stosowanie metod numerycznych. W literaturze rozwinięto kilka klas metod stosowanych do rozwiązania równania ewolucji funkcji Wignera. Rozwiązanie metodami różnic skończonych polega na dyskretnym sformułowaniu równania Moyala z wykorzystaniem schematów różnicowych [86]. Wyzwaniem numerycznym jest poprawna dyskretyzacja pseudoróżniczkowego operatora energii potencjalnej, który w postaci całkowej wymaga obliczania splotów w przestrzeni pędów. Alternatywnym podejściem są metody stochastyczne Monte Carlo, w których ewolucję funkcji Wignera symuluje się poprzez śledzenie trajektorii cząstek w przestrzeni fazowej z losowym rozpraszaniem [87]. Metody te są szczególnie użyteczne w symulacjach transportu w urządzeniach półprzewodnikowych [7]. Z kolei wykorzystanie metod pseudospektralnych pozwala na efektywną reprezentację funkcji Wignera i jej pochodnych. Metody te oferują wykładniczą zbieżność dla gładkich rozwiązań [88]. Innym podejściem jest spektralna metoda split-operator, pierwotnie opracowana dla równania Schrödingera przez Feita, Flecka i Steigera [89], a następnie zaadaptowana do równania Liouville'a [90, 91] i równania Moyala [92, 93, 94]. Metoda ta wykorzystuje transformatę Fouriera do przełączania między reprezentacjami, w których poszczególne części hamiltonianu są operatorami mnożenia. W dalszej części tego rozdziału przedstawiono szczegółowy opis metody split-operator, z uwagi na fakt, że będzie ona stanowiła podstawowy algorytm do ewolucji funkcji Wignera w prezentowanej pracy. Szczegóły implementacji numerycznej wraz z pseudokodem algorytmów zamieszczono w Dodatku A.4.

### 2.4.1 Spektralna metoda split-operator

Rozwiązanie formalne równania (2.49) ma postać:

$$\varrho(t_0 + \Delta t) = \hat{U}(\Delta t)\varrho(t_0), \quad (2.52)$$

gdzie  $\Delta t \in \mathbb{R}$  jest skończonym interwałem czasu zwanym krokiem czasowym, a  $\hat{U}(\Delta t)$  jest unitarnym operatorem ewolucji czasowej. Operator ten można zapisać jako

$$\hat{U}(\Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\hat{T} + \hat{U})\Delta t\right], \quad (2.53)$$

gdzie operatory kinetyczny  $\hat{T}$  i potencjalny  $\hat{U}$  definiuje się następująco:

$$\hat{T} = \frac{-i\hbar}{m}p\partial_x, \quad (2.54)$$

$$\hat{U} = U\left(x + \frac{i\hbar\partial_p}{2}\right) - U\left(x - \frac{i\hbar\partial_p}{2}\right). \quad (2.55)$$

Operatory  $\hat{T}$  i  $\hat{U}$  nie komutują ze sobą, co uniemożliwia bezpośrednie rozdzielenie operatora wykładniczego. Metoda split-operator polega na aproksymacji operatora ewolucji przez iloczyn operatorów wykładniczych operatorów  $\hat{T}$  i  $\hat{U}$ , gdzie każdy z nich jest łatwy do obliczenia w odpowiedniej reprezentacji [79, 93]. Efektywność metody split-operator wynika z faktu, że operatory  $\hat{T}$  i  $\hat{U}$  stają się operatorami mnożenia (diagonalnymi) w zależności od reprezentacji. W reprezentacji  $\langle\lambda p|$ , gdzie  $\hat{x} = i\partial_\lambda$ ,  $\hat{p} = p$ ,  $\hat{\lambda} = \lambda$ ,  $\hat{\theta} = -i\partial_p$ , operator kinetyczny  $\hat{T}$  jest operatorem mnożenia

$$\langle\lambda p|\hat{T}|\varrho\rangle = \frac{\hbar\lambda p}{m}\langle\lambda p|\varrho\rangle. \quad (2.56)$$

W reprezentacji  $\langle x\theta|$ , gdzie  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{p} = i\partial_\theta$ ,  $\hat{\lambda} = -i\partial_x$ ,  $\hat{\theta} = \theta$ , operator potencjalny  $\hat{U}$  jest operatorem mnożenia:

$$\langle x\theta|\hat{U}|\varrho\rangle = \left[ U\left(x - \frac{\hbar\theta}{2}\right) - U\left(x + \frac{\hbar\theta}{2}\right) \right] \langle x\theta|\varrho\rangle. \quad (2.57)$$

Przejście między reprezentacjami realizowane jest przez transformaty Fouriera zdefiniowane w Dodatku A.1. Oznaczając przez  $\mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda}$  transformatę Fouriera względem zmiennej  $x$  ze zmienną sprzężoną  $\lambda$ , oraz przez  $\mathcal{F}_{p \rightarrow \theta}$  transformatę względem  $p$  ze zmienną sprzężoną  $\theta$ , mamy

$$\langle x\theta|\varrho\rangle = \mathcal{F}_{p \rightarrow \theta} \langle xp|\varrho\rangle, \quad (2.58)$$

$$\langle \lambda p|\varrho\rangle = \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \langle xp|\varrho\rangle. \quad (2.59)$$

W praktyce numerycznej stosuje się szybką transformatę Fouriera (FFT), której złożoność obliczeniowa wynosi  $\mathcal{O}(N \log N)$  dla siatki o  $N$  punktach [93, 94, 71]. Implementację transformacji FFT z wykorzystaniem biblioteki FFTW3 omówiono w sekcji dodatku A.4.3.

## 2.4.2 Schemat drugiego rzędu – faktoryzacja Stranga

Najprostszą aproksymacją operatora ewolucji jest symetryczny podział Stranga [95]:

$$\hat{\mathcal{U}}_2(\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{U}\Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right), \quad (2.60)$$

który jest dokładny do drugiego rzędu w kroku czasowym  $\Delta t$ :

$$\hat{\mathcal{U}}(\Delta t) = \hat{\mathcal{U}}_2(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.61)$$

Pojedynczy krok czasowy realizowany jest według następującego algorytmu

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m}\lambda p\right) \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \\ &\times \mathcal{F}_{\theta \rightarrow p}^{-1} \exp\left(\frac{i\Delta t}{\hbar}U_\Delta(x, \theta)\right) \mathcal{F}_{p \rightarrow \theta} \\ &\times \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m}\lambda p\right) \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t_0), \end{aligned} \quad (2.62)$$

gdzie wprowadzono następujące oznaczenie na różnicę potencjałów:

$$U_\Delta(x, \theta) = U\left(x - \frac{\hbar\theta}{2}\right) - U\left(x + \frac{\hbar\theta}{2}\right). \quad (2.63)$$

Pseudokod algorytmu przedstawiono w sekcji dodatku A.4.5.

## 2.4.3 Schemat czwartego rzędu – faktoryzacja China

Wyższą dokładność można osiągnąć stosując faktoryzację czwartego rzędu [96, 97]

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{U}}_4(\Delta t) &= \exp\left(-\frac{i}{6\hbar}\hat{U}\Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right) \\ &\times \exp\left(-\frac{2i}{3\hbar}\hat{W}\Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\hat{T}\Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{6\hbar}\hat{U}\Delta t\right), \end{aligned} \quad (2.64)$$

gdzie zmodyfikowany operator potencjalny  $\hat{W}$  zawiera poprawkę wynikającą z komutatora:

$$\hat{W} = \hat{U} - \frac{\Delta t^2}{48\hbar^2} [\hat{U}, [\hat{T}, \hat{U}]]. \quad (2.65)$$

Błąd tej aproksymacji jest rzędu  $\mathcal{O}(\Delta t^5)$ :

$$\hat{\mathcal{U}}(\Delta t) = \hat{\mathcal{U}}_4(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^5). \quad (2.66)$$

W reprezentacji  $\langle x\theta |$  zmodyfikowany potencjał przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} W(x, \theta) = & U_{\Delta}(x, \theta) - \frac{\Delta t^2}{48} \\ & \times \left[ U' \left( x - \frac{\hbar\theta}{2} \right) - U' \left( x + \frac{\hbar\theta}{2} \right) \right] \\ & \times \left[ U' \left( x - \frac{\hbar\theta}{2} \right) + U' \left( x + \frac{\hbar\theta}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.67)$$

gdzie  $U'(x)$  oznacza pochodną potencjału. Schemat czwartego rzędu wymaga 5/3 razy więcej operacji niż schemat drugiego rzędu (pięć mnożeń przez funkcje fazowe i odpowiednio więcej FFT), jednak dla tej samej dokładności pozwala na użycie znacznie większego kroku czasowego, co czyni go efektywniejszym obliczeniowo w niektórych zastosowaniach [93].

#### 2.4.4 Dyskretyzacja przestrzeni fazowej

W implementacji numerycznej dwuwymiarowa przestrzeń fazowa jest ograniczona do skończonego obszaru  $[-L_x, L_x] \times [-L_p, L_p]$  i dyskretyzowana na siatce o wymiarach  $N_x \times N_p$ , na której położenie w  $m$ -tym punkcie  $x_m$  oraz pęd  $p_n$  w  $n$ -tym punkcie siatki wyrażone są wzorami

$$x_m = -L_x + m\Delta x, \quad p_n = -L_p + n\Delta p, \quad (2.68)$$

gdzie  $\Delta x = 2L_x/N_x$ ,  $\Delta p = 2L_p/N_p$ , natomiast  $m = 0, 1, \dots, N_x - 1$ ,  $n = 0, 1, \dots, N_p - 1$ . Dla zmiennych sprzężonych przez transformatę Fouriera mamy odpowiednio:

$$\Delta\lambda = \frac{\pi}{L_x}, \quad \Delta\theta = \frac{\pi}{L_p}, \quad L_{\lambda} = \frac{N_x\Delta\lambda}{2}, \quad L_{\theta} = \frac{N_p\Delta\theta}{2}. \quad (2.69)$$

Ze względu na właściwości dyskretnej transformaty Fouriera, siatka zmiennych  $\lambda$  i  $\theta$  wymaga przesunięcia:

$$\lambda_k = \begin{cases} -L_{\lambda} + (k + \frac{N_x}{2})\Delta\lambda, & k = 0, 1, \dots, \frac{N_x}{2} - 1, \\ -L_{\lambda} + (k - \frac{N_x}{2})\Delta\lambda, & k = \frac{N_x}{2}, \dots, N_x - 1, \end{cases} \quad (2.70)$$

i analogicznie dla  $\theta_l$ . Dokładność numeryczna metody split-operator zależy zarówno od kroku czasowego  $\Delta t$ , jak i od rozdzielczości siatki fazowej. Błąd dyskretyzacji przestrzennej jest zwykle zaniedbywalny w porównaniu z błędem podziału operatorowego, o ile siatka jest wystarczająco gęsta, aby uchwycić strukturę funkcji Wignera [93].

## 2.5 Dynamika układu kwantowego w przestrzeni fazowej pod wpływem pola elektromagnetycznego

Dotychczasowe rozważania dotyczyły układów kwantowych w potencjałach niezależnych od czasu. W wielu zastosowaniach praktycznych, ważną rolę odgrywa oddziaływanie układu z polem elektromagnetycznym. Pole to może mieć charakter zewnętrzny, jak w przypadku naświetlania próbki promieniowaniem laserowym, lub oddziaływanie może mieć charakter samouzgodniony. Oba scenariusze wymagają odpowiedniej modyfikacji równania Moyala (2.49) i jego rozwiązań.

### 2.5.1 Modyfikacja równania Moyala dla potencjałów zależnych od czasu

W obecności zewnętrznego pola elektromagnetycznego energia potencjalna cząstki naładowanej oddziałującej z polem może jawnie zależeć od czasu. Rozważamy hamiltonian o symbolu Weyla w następującej postaci

$$H(x, p; t) = \frac{p^2}{2m} + U(x; t), \quad (2.71)$$

gdzie całkowita energię potencjalną  $U(x; t)$  można rozłożyć na część statyczną i zmienną w czasie w następujący sposób:

$$U(x; t) = U_b(x) + U_e(x; t). \quad (2.72)$$

Wyraz  $U_b(x)$  reprezentuje część wiążącą energii potencjalnej, natomiast  $U_e(x; t)$  opisuje oddziaływanie z polem zewnętrznym. Jawna zależność hamiltonianu od czasu wprowadza modyfikację w równaniu Moyala. Operator gęstości nie jest już zachowany względem przekształceń generowanych przez stały hamiltonian, a równanie von Neumanna (2.14) przyjmuje postać z jawnie zależnym od czasu hamiltonianem  $\hat{H}(t)$ . Stosując transformację Weyla, otrzymujemy równanie Moyala w postaci

$$\frac{\partial \varrho(x, p; t)}{\partial t} + \{\varrho(x, p; t), H(x, p; t)\}_\star = 0, \quad (2.73)$$

gdzie nawias Moyala jest obliczany dla funkcji  $H(x, p; t)$  traktowanej jako funkcja zmiennych fazowych przy ustalonym czasie  $t$ . Dla hamiltonianu (2.71) jawna postać równania przyjmuje formę:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial \varrho}{\partial x} - \frac{1}{i\hbar} \left[ U\left(x + \frac{i\hbar}{2} \partial_p; t\right) - U\left(x - \frac{i\hbar}{2} \partial_p; t\right) \right] \varrho = 0. \quad (2.74)$$

Struktura równania jest analogiczna do przypadku stacjonarnego (2.50), z tą różnicą, że energia potencjalna  $U$  jest teraz funkcją zarówno położenia, jak i czasu.

### 2.5.2 Metoda split-operator dla potencjałów zależnych od czasu

Numeryczne rozwiązanie równania (2.73) wymaga modyfikacji schematu split-operator przedstawionego w sekcji 2.4.1. Operator ewolucji dla układu z hamiltonianem zależnym od czasu nie jest już zwyczajnym operatorem wykładniczym, lecz operatorem wykładniczym czasowo uporządkowanym danym wzorem [76]

$$\hat{U}(t + \Delta t, t) = \hat{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \hat{H}(t') dt'\right), \quad (2.75)$$

gdzie  $\hat{H}(t) = \hat{T} + \hat{U}(x, t)$ , a  $\hat{T}$  oznacza operator porządkowania czasowego Dysona. Zgodnie z [97, 98] powyższy operator ewolucji czasowej można zapisać w postaci

$$\hat{U}(t + \Delta t, t) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}(t) + \hat{D} \right) \right], \quad (2.76)$$

przy czym działanie operatora  $\hat{D}$  definiuje się następująco:

$$F(t) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{D}} G(t) := F(t + \Delta t) G(t), \quad (2.77)$$

gdzie  $F(t), G(t)$  są funkcjami zależnymi od czasu. Na implementację metody split operator dla hamiltonianu z energią potencjalną zależną od czasu składają się następujące etapy:

1. Wprowadzamy operator  $\hat{T}_t = \hat{T} + \hat{D}$ .
2. Korzystamy z omówionych wcześniej schematów podziału operatora ewolucji [95, 96, 97]
3. Wykorzystujemy fakt, że operatory  $\hat{T}$  oraz  $\hat{D}$  komutują, co w konsekwencji prowadzi do faktoryzacji:

$$e^{\hat{T} + \hat{D}} = e^{\hat{T}} e^{\hat{D}}. \quad (2.78)$$

### 2.5.3 Zmodyfikowane schematy Stranga i China

Korzystając z faktoryzacji Stranga (2.60), otrzymujemy zmodyfikowany schemat ewolucji

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) &\approx \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t \right) \\ &\times \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{U} \left( t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t \right] \\ &\times \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t \right), \end{aligned} \quad (2.79)$$

gdzie operator kinetyczny  $\hat{T}$  jest zdefiniowany w (2.54), natomiast operator potencjalny zależy teraz jawnie od czasu:

$$\hat{U}(t) = U \left( \hat{x} - \frac{\hbar}{2} \hat{\theta}; t \right) - U \left( \hat{x} + \frac{\hbar}{2} \hat{\theta}; t \right). \quad (2.80)$$

Pojedynczy krok czasowy realizuje się według algorytmu

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp \left( -\frac{i\Delta t}{2m\hbar} \lambda p \right) \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \\ &\times \mathcal{F}_{\theta \rightarrow p}^{-1} \exp \left[ \frac{i\Delta t}{\hbar} U_{\Delta} \left( x, \theta; t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) \right] \mathcal{F}_{p \rightarrow \theta} \\ &\times \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp \left( -\frac{i\Delta t}{2m\hbar} \lambda p \right) \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t_0), \end{aligned} \quad (2.81)$$

gdzie różnica potencjałów jest teraz funkcją czasu:

$$U_{\Delta}(x, \theta; t) = U \left( x - \frac{\hbar\theta}{2}; t \right) - U \left( x + \frac{\hbar\theta}{2}; t \right). \quad (2.82)$$

Analogicznie pojedynczy krok czasowy można zrealizować według schematu czwartego rzędu (China)

$$\begin{aligned}
 \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{2,\theta \rightarrow p}^{-1} \exp \left[ \frac{i\Delta t}{6} U_{\Delta}(x, \theta; t_0 + \Delta t) \right] \mathcal{F}_{2,p \rightarrow y} \\
 &\times \mathcal{F}_{1,\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp \left( -\frac{i\Delta t}{2m_{eff}} \lambda p \right) \mathcal{F}_{1,x \rightarrow \lambda} \\
 &\times \mathcal{F}_{2,\theta \rightarrow p}^{-1} \exp \left[ \frac{2i\Delta t}{3} W \left( x, \theta; t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) \right] \mathcal{F}_{2,p \rightarrow \theta} \\
 &\times \mathcal{F}_{1,\lambda \rightarrow x}^{-1} \exp \left( -\frac{i\Delta t}{2m_{eff}} \lambda p \right) \mathcal{F}_{1,x \rightarrow \lambda} \\
 &\times \mathcal{F}_{2,\theta \rightarrow p}^{-1} \exp \left[ \frac{i\Delta t}{6} U_{\Delta}(x, \theta; t_0) \right] \mathcal{F}_{2,p \rightarrow \theta} \varrho(x, p; t_0),
 \end{aligned} \tag{2.83}$$

gdzie

$$\begin{aligned}
 W(x, y; t) &= U_{\Delta}(x, \theta; t) - \frac{\Delta t^2}{48} \left[ U' \left( x + \frac{\hbar\theta}{2}; t \right) - U' \left( x - \frac{\hbar\theta}{2}; t \right) \right] \\
 &\times \left[ U' \left( x + \frac{\hbar\theta}{2}; t \right) + U' \left( x - \frac{\hbar\theta}{2}; t \right) \right],
 \end{aligned} \tag{2.84}$$

Szczegóły implementacji schematu dla potencjałów zależnych od czasu, w tym algorytm aktualizacji macierzy potencjału, przedstawiono w sekcji dodatku A.4.6.

### 2.5.4 Samouzgodniony opis cząstki naładowanej

Dotychczas omówione schematy numeryczne zakładały, że energia potencjalna zależna od czasu,  $U(x; t)$ , jest zadana a priori, niezależnie od stanu układu kwantowego. W przypadku cząstek naładowanych rozkład przestrzenny ładunku generuje jednak pole elektryczne, co stwarza możliwość zaproponowania opisu dynamiki na podstawie schematu samouzgodnionego. Rozważamy cząstkę o ładunku  $q$  i masie  $m$  z wiążącą energią potencjalną  $U_b(x)$ . Efektywna energia potencjalna odczuwana przez pojedynczą cząstkę składa się z części zewnętrznej oraz pola elektrycznego generowanego przez rozkład ładunku

$$U(x; t) = U_b(x) + U_e(x; t), \tag{2.85}$$

gdzie  $U_e(x; t) = q\phi(x; t)$  jest energią potencjalną cząstki w polu elektrostatycznym o potencjale skalarnym  $\phi(x; t)$ . Potencjał skalarny spełnia równanie Poissona:

$$\frac{d^2\phi(x; t)}{dx^2} = -\frac{\rho_e(x; t)}{\epsilon}, \tag{2.86}$$

gdzie  $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$  jest przenikalnością elektryczną ośrodka, przy czym  $\epsilon_0$  – przenikalność próżni,  $\epsilon_r$  – względna przenikalność dielektryczna, a  $\rho_e(x; t)$  jest gęstością ładunku elektrycznego. Dla cząstki opisanej funkcją Wignera  $\varrho(x, p; t)$ , gęstość ładunku można wyznaczyć z rozkładu brzegowego (2.23):

$$\rho_e(x; t) = q \int_{-\infty}^{\infty} dp \varrho(x, p; t) = qn(x; t), \tag{2.87}$$

gdzie  $n(x; t)$  jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w położeniu  $x$ , por. wzór (2.23). Mnożąc równanie (2.86) przez  $q$  i wprowadzając energię potencjalną  $U_e = q\phi$ , otrzymujemy równanie Poissona w postaci

$$\frac{d^2U_e(x; t)}{dx^2} = -\frac{q^2}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varrho(x, p; t). \tag{2.88}$$

### 2.5.5 Układ równań Moyala–Poissona

Pełny opis samouzgodnionej dynamiki układu naładowanych cząstek w przestrzeni fazowej dany jest przez układ równań Moyala–Poissona:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varrho(x, p; t)}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial \varrho(x, p; t)}{\partial x} \\ \quad + \frac{1}{i\hbar} \left[ U\left(x + \frac{i\hbar}{2} \partial_p; t\right) - U\left(x - \frac{i\hbar}{2} \partial_p; t\right) \right] \varrho(x, p; t) \\ U(x; t) = U_b(x) + U_e(x; t) \\ \frac{d^2 U_e(x; t)}{dx^2} = -\frac{q^2}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dp \varrho(x, p; t) \end{array} \right. \quad (2.89)$$

Układ (2.89) stanowi kwantowy odpowiednik klasycznego układu Vlasova–Poissona [99]. Nieliniowy charakter tego układu wynika z faktu, że energia potencjalna  $U_e(x; t)$  zależy funkcjonalnie od funkcji Wignera  $\varrho(x, p; t)$ , która z kolei ewoluje pod wpływem pełnej energii potencjalnej  $U(x; t)$ . Rozwiązanie układu (2.89) wymaga określenia:

- Warunku początkowego dla funkcji Wignera:  $\varrho_0(x, p) = \varrho(x, p; t = 0)$ .
- Warunków brzegowych dla energii potencjalnej  $U_e(x; t)$ .

W przypadku rozwiązania numerycznego na brzegu skończonej dziedziny obliczeniowej należy dodatkowo uwzględnić warunki brzegowe dla funkcji Wignera.

## 2.6 Metody numerycznego rozwiązywania układu Moyala–Poissona

Numeryczne rozwiązanie układu (2.89) wymaga iteracyjnego sprzężenia rozwiązania równania ewolucji funkcji Wignera z rozwiązaniem równania Poissona. Ze względu na nieliniowy charakter sprzężenia, konieczne jest staranne dobranie schematu czasowego zapewniającego stabilność i zbieżność. Alternatywnym podejściem do bezpośredniego rozwiązywania równania Moyala jest propagacja macierzy gęstości w reprezentacji położeniowej metodą split-operator, a następnie wyznaczanie funkcji Wignera przez transformatę Fouriera. Podejście to zostanie omówione w niniejszym rozdziale.

### 2.6.1 Metoda split-operator dla równania von Neumanna

Równanie von Neumanna (2.14) w reprezentacji położeniowej przyjmuje postać:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U(x; t) - U(y; t) \right] \rho(x, y; t), \quad (2.90)$$

gdzie  $\rho(x, y; t) = \langle x | \hat{\rho}(t) | y \rangle$  jest macierzą gęstości, a zmienne  $x$  i  $y$  odpowiadają dwóm niezależnym współrzędnym położeniowym. Równanie (2.90) można zapisać w zwartej postaci:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, y; t) = \left[ \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}}(t) \right] \rho(x, y; t), \quad (2.91)$$

gdzie operatory kinetyczny  $\hat{T}$  i potencjalny  $\hat{V}(t)$  są zdefiniowane następująco:

$$\hat{T} = \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \quad (2.92)$$

$$\hat{V}(t) = -\frac{i}{\hbar} [U(x; t) - U(y; t)]. \quad (2.93)$$

Operator kinetyczny (2.92) staje się operatorem mnożenia w przestrzeni pędów. Wprowadzając zmienne  $\lambda$  i  $\theta$  sprzężone odpowiednio do  $x$  i  $y$  przez transformaty Fouriera, otrzymujemy

$$\hat{T} = \mathcal{F}_{(\lambda, \theta) \rightarrow (x, y)}^{-1} \left[ \frac{-i(\lambda^2 - \theta^2)}{2\hbar m} \right] \mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, \theta)}, \quad (2.94)$$

gdzie dwuwymiarowa transformata Fouriera jest zdefiniowana jako:

$$\mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, \theta)} \rho(x, y; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint_{\mathbb{R}^2} dx dy e^{-\frac{i}{\hbar}(x\lambda + y\theta)} \rho(x, y; t). \quad (2.95)$$

Stosując symetryczny podział Stranga do operatora ewolucji, otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) &\approx \exp \left[ \frac{\Delta t}{2} \hat{V} \left( t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) \right] \\ &\times \exp \left[ \Delta t \hat{T} \right] \\ &\times \exp \left[ \frac{\Delta t}{2} \hat{V} \left( t_0 + \frac{\Delta t}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.96)$$

Pojedynczy krok czasowy  $\Delta t$  ewolucji macierzy gęstości przyjmuje zatem postać:

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t_0 + \Delta t) &\approx \exp \left[ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} (U(x; t_m) - U(y; t_m)) \right] \\ &\times \mathcal{F}_{(\lambda, \theta) \rightarrow (x, y)}^{-1} \exp \left[ \frac{-i\Delta t(\lambda^2 - \theta^2)}{2\hbar m} \right] \mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, \theta)} \\ &\times \exp \left[ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} (U(x; t_m) - U(y; t_m)) \right] \rho(x, y; t_0), \end{aligned} \quad (2.97)$$

gdzie  $t_m = t_0 + \Delta t/2$ .

### 2.6.2 Transformacja macierzy gęstości do funkcji Wignera

Po wyznaczeniu macierzy gęstości  $\rho(x, y; t)$  metodą split-operator konieczne jest obliczenie funkcji Wignera w celu wyznaczenia gęstości ładunku (2.87), potrzebnej do rozwiązania równania Poissona. Funkcja Wignera jest związana z macierzą gęstości przez transformatę (2.20), którą po podstawieniu  $\xi \rightarrow -y$  można zapisać w równoważnej postaci jako:

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy \rho \left( x - \frac{y}{2}, x + \frac{y}{2}; t \right) \exp \left( \frac{ipy}{\hbar} \right). \quad (2.98)$$

Transformacja ta wymaga ewaluacji macierzy gęstości wzdłuż przekątnych  $(x - y/2, x + y/2)$ , co nie odpowiada bezpośrednio węzłom siatki obliczeniowej  $(x_m, y_n)$ . Problem ten można rozwiązać przez dekompozycję transformacji liniowej na macierze ścinania (ang. *shear decomposition*). Transformację współrzędnych  $(x, y) \mapsto (x - y/2, x + y/2)$  można przedstawić w postaci macierzowej:

$$\begin{pmatrix} x - \frac{y}{2} \\ x + \frac{y}{2} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \quad (2.99)$$

Macierz  $\mathbf{M}$  ma wyznacznik równy 1, co gwarantuje zachowanie miary (objętości) przy transformacji. Każda macierz rzeczywista o wyznaczniku równym 1 może być rozłożona na iloczyn macierzy ścinania (por. rozdział 3.2.10 w [100]). Dla macierzy  $\mathbf{M}$  we wzorze (2.99) dekompozycja przyjmuje postać:

$$\begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.100)$$

Każda macierz ścinania odpowiada operatorowi przesunięcia, który można zrealizować efektywnie w przestrzeni Fouriera.

**Definicja 2.6** (Operatory ścinania). Operatorami ścinania nazywamy następujące operatory [85]

$$\hat{S}_1 f(x, y) = f(x, x + y) = e^{x\partial_y} f(x, y), \quad (2.101)$$

$$\hat{S}_2 f(x, y) = f\left(x - \frac{y}{2}, y\right) = e^{-\frac{y}{2}\partial_x} f(x, y). \quad (2.102)$$

Wykorzystując następujące własności transformaty Fouriera:

$$\begin{aligned} \partial_x &= \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} (i\lambda/\hbar) \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda}, \\ \partial_y &= \mathcal{F}_{\theta \rightarrow y} (-i\theta/\hbar) \mathcal{F}_{y \rightarrow \theta}^{-1}, \end{aligned} \quad (2.103)$$

operatory  $\hat{S}_1$  i  $\hat{S}_2$  można zapisać jako:

$$\hat{S}_1 = \mathcal{F}_{\theta \rightarrow y} e^{-\frac{i}{\hbar} x \theta} \mathcal{F}_{y \rightarrow \theta}^{-1}, \quad (2.104)$$

$$\hat{S}_2 = \mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} e^{-\frac{i}{2\hbar} y \lambda} \mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda}. \quad (2.105)$$

Łącząc dekompozycję (2.100) z definicją (2.98), otrzymujemy algorytm obliczania funkcji Wignera z macierzy gęstości:

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathcal{F}_{y \rightarrow p}^{-1} \hat{S}_1 \hat{S}_2 \rho(x, y; t), \quad (2.106)$$

lub rozpisując jawnie kolejność operacji, dostajemy

$$\varrho(x, p; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} x p} \mathcal{F}_{(\lambda, y) \rightarrow (x, p)}^{-1} e^{-\frac{i}{2\hbar} y \lambda} \mathcal{F}_{(x, \theta) \rightarrow (\lambda, y)} \mathcal{F}_{y \rightarrow \theta}^{-1} \rho(x, y; t). \quad (2.107)$$

### 2.6.3 Pełny algorytm rozwiązywania układu Moyala–Poissona

Łącząc metodę split-operator dla równania von Neumanna (2.97) z transformacją do funkcji Wignera (2.106), otrzymujemy kompletny algorytm rozwiązywania układu Moyala–Poissona. Przed rozpoczęciem propagacji czasowej należy:

1. Zadać początkową macierz gęstości  $\rho(x, y; t = 0)$  lub funkcję Wignera  $\varrho(x, p; t = 0)$
2. Obliczyć początkową gęstość cząstek  $n(x; t = 0)$
3. Rozwiązać równanie Poissona dla  $U_e(x; t = 0)$  przy zadanych warunkach brzegowych
4. Wyznaczyć początkowy potencjał całkowity  $U(x; t = 0) = U_b(x) + U_e(x; t = 0)$

Następnie, w każdym kroku czasowym  $t_n \rightarrow t_{n+1} = t_n + \Delta t$  należy następujące operacje:

1. **Propagacja macierzy gęstości:** Zastosowanie schematu split-operator (2.97):

$$\begin{aligned} \rho(x, y; t_{n+1}) = & \exp \left[ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} (U(x; t_m) - U(y; t_m)) \right] \\ & \times \mathcal{F}_{(\lambda, \theta) \rightarrow (x, y)}^{-1} \exp \left[ \frac{-i\Delta t(\lambda^2 - \theta^2)}{2\hbar m} \right] \mathcal{F}_{(x, y) \rightarrow (\lambda, \theta)} \\ & \times \exp \left[ -\frac{i\Delta t}{2\hbar} (U(x; t_m) - U(y; t_m)) \right] \rho(x, y; t_n), \end{aligned} \quad (2.108)$$

gdzie  $t_m = t_n + \Delta t/2$ .

2. **Transformacja do funkcji Wignera:** zastosowanie formuły (2.106):

$$\varrho(x, p; t_{n+1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathcal{F}_{y \rightarrow p}^{-1} \hat{S}_1 \hat{S}_2 \rho(x, y; t_{n+1}). \quad (2.109)$$

3. **Obliczenie gęstości cząstek:** Całkowanie funkcji Wignera po pędach:

$$n(x; t_{n+1}) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \varrho(x, p; t_{n+1}). \quad (2.110)$$

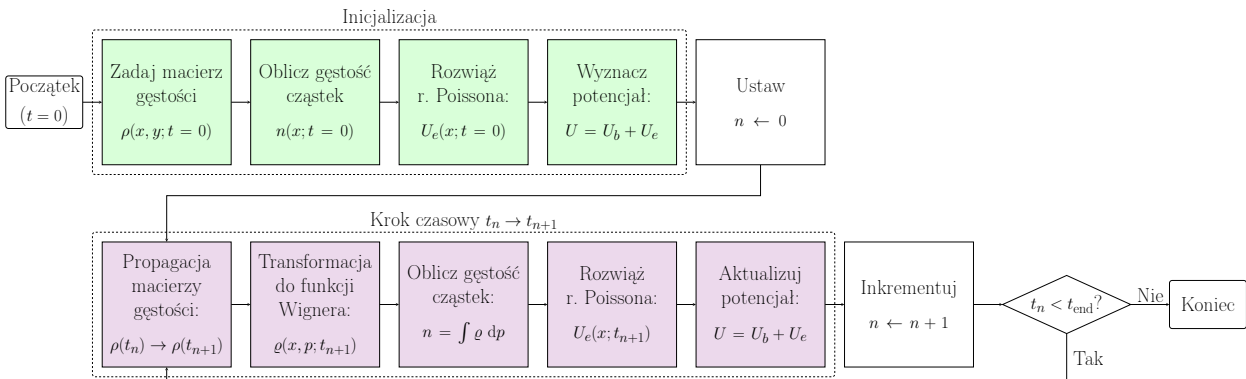
4. **Rozwiązanie równania Poissona:** Wyznaczenie nowego potencjału  $U_e(x; t_{n+1})$ :

$$\frac{d^2 U_e(x; t_{n+1})}{dx^2} = -\frac{q^2}{\epsilon} n(x; t_{n+1}). \quad (2.111)$$

5. **Aktualizacja potencjału całkowitego:**

$$U(x; t_{n+1}) = U_b(x) + U_e(x; t_{n+1}). \quad (2.112)$$

Schemat blokowy przedstawiony na rysunku 2.1 ilustruje pełny algorytm rozwiązywania układu Moyala–Poissona.



Rysunek 2.1: Schemat blokowy algorytmu rozwiązywania układu Moyala–Poissona.

Przedstawiony algorytm rozwiązywania układu Moyala–Poissona, choć jest ogólny i kompletny pod względem teoretycznym, naraża na znaczne trudności w implementacji numerycznej. Głównym wyzwaniem jest iteracyjny charakter sprzężenia między równaniem ewolucji funkcji Wignera a równaniem Poissona, który wymaga starannego doboru schematu czasowego zapewniającego zarówno stabilność, jak i zbieżność rozwiązania. W szczególności, aktualizacja energii potencjalnej  $U_e(x; t)$  w każdym kroku czasowym

wprowadza nieliniowe sprzężenie zwrotne, które może prowadzić do niestabilności numerycznych przy zbyt dużych krokach czasowych lub niedostatecznej rozdzielczości siatki przestrzennej. Konieczność rozwiązywania równania Poissona (2.111) w każdym kroku czasowym znacząco zwiększa koszt obliczeniowy w porównaniu ze schematami dla zadanego potencjału zewnętrznego. Dodatkowo, transformacja między macierzą gęstości a funkcją Wignera (2.106) wymaga precyzyjnej implementacji dekompozycji przez macierze ścinania, która jest wrażliwa na błędy zaokrągleń przy dużych rozmiarach siatek obliczeniowych. Z powyższych względów, w ramach niniejszej pracy nie zaimplementowano pełnego algorytmu samouzgodnionego. Obecnie prowadzone badania nad zastosowaniem tego algorytmu numerycznego zostały poprzedzone opracowaniem dynamiki w zewnętrznych polach elektromagnetycznych – wyniki te zostały szczegółowo omówione w rozdziale 4. Uzyskane tam doświadczenia stanowią podstawę do dalszego rozwoju kodu numerycznego. Szczegółowy opis architektury zaimplementowanego kodu oraz pseudokod głównych algorytmów umieszczono w Dodatku A.4.



## Rozdział 3

# Dynamiczna entropowa miara nieklasyczności

For Wiener, entropy was a measure of disorder; for Shannon, of uncertainty. Fundamentally, as they were realizing, these were the same.

---

*James Gleick [101]*

Niniejszy rozdział poświęcony jest analizie dynamiki stanów kwantowych w ujęciu przestrzenno-fazowym, ze szczególnym uwzględnieniem rodziny stanów kota Schrödingera oddziałujących z barierą potencjału. Centralnym elementem prezentowanych badań jest wykorzystanie entropii Wignera-Rényiego jako miary nieklasyczności stanów, której związek z parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego.

Rozdział otwiera Sekcja 3.1, w której wprowadzono entropię Wignera-Rényiego w kontekście przestrzenno-fazowego opisu stanów kwantowych. Przedstawiono definicję tej rodziny entropii, wyprowadzono dolne ograniczenie wraz z dowodem oraz wykazano związek między entropią połówkową ( $\alpha = 1/2$ ) a parametrem nieklasyczności w postaci zaproponowanej przez Kenfacka i Życzkowskiego w pracy [15]. Omówiono również związek rodziny entropii Wignera-Rényiego z topologicznymi przejściami fazowymi w materiałach Diraca, symplektyczną niezmienniczość miar entropowych oraz własność monotoniczności entropii względem indeksu Rényiego.

W Sekcji 3.2 opisano model fizyczny badanego układu. Zdefiniowano gaussowską barierę potencjału wraz z jej parametrami, omówiono reżimy rozpraszania nadbarierowego i podbarierowego oraz wprowadzono rodzinę stanów kota Schrödingera zależną od fazy względnej: stan parzysty ( $\theta = 0$ ), stan Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ) oraz stan nieparzysty ( $\theta = \pi$ ).

Sekcja 3.3 zawiera opis metodologii obliczeń numerycznych. Przedstawiono adaptację spektralnej metody split-operator do rozwiązywania równania Moyala dla potencjału niezależnego od czasu, szczegóły dyskretyzacji przestrzeni fazowej oraz parametry siatki obliczeniowej użytej w symulacjach.

Wyniki symulacji numerycznych zaprezentowano w Sekcji 3.4. Przeanalizowano ewolucję czasową funkcji Wignera w przestrzeni fazowej dla wszystkich trzech stanów, zbadano wpływ fazy względnej na cha-

rakterystyki entropowe oraz przeprowadzono systematyczną analizę wpływu parametrów bariery – jej wysokości i szerokości – na dynamikę entropii Wignera-Rényiego i parametru nieklasyczności.

### 3.1 Miary entropowe w reprezentacji przestrzenno-fazowej

Sformułowanie teorii kwantowej w przestrzeni fazowej jako teorii statystycznej z nieprzemiennej algebrą obserwabli w naturalny sposób prowadzi do wprowadzenia pojęcia entropii jako fundamentalnej charakterystyki stanu kwantowego. Jednakże definicja entropii w kontekście funkcji Wignera napotyka na trudności koncepcyjne związane z możliwością przyjmowania przez tę funkcję wartości ujemnych. Pierwsze próby zdefiniowania entropii stanów kwantowych w reprezentacji przestrzenno-fazowej opierały się na koncepcji stanów koherentnych, uznawanych za „najbardziej klasyczne” stany kwantowe. Stany koherentne, reprezentowane przez funkcje gaussowskie minimalizujące zasadę nieokreśloności, charakteryzują się nieujemną funkcją Wignera zgodnie z twierdzeniem Hudsona (por. podrozdz. 2.2.2).

Znaczący postęp w rozwoju koncepcji entropii stanów kwantowych w podejściu przestrzenno-fazowym stanowiły prace Manfrediego i Feixa [102], którzy wprowadzili pojęcie kwantowej entropii liniowej wykorzystując funkcjonal kwadratu funkcji Wignera. Alternatywne podejście zaproponowali van Herstraeten i Cerf [103], wprowadzając pojęcie kwantowej entropii Wignera-Shannona opartej na stanach kwantowych o dodatniej funkcji Wignera. Wyniki te zostały następnie uogólnione na przypadek dowolnych całkowalnych funkcji Wignera [104, 105].

Inny kierunek badań reprezentuje podejście oparte na rzucie stanu kwantowego na stan koherentny, prowadzące do quasi-rozkładu Husimiego, które doprowadziło Wehrla do koncepcji entropii von Neumanna w przestrzeni fazowej [106]. Wynik Wehrla natomiast można rozpatrywać jako szczególny przypadek entropii Rényiiego-Wehrla – która stanowi zdefiniowaną na bazie rozkładu Husimiego miarę lokalizacji stanów kwantowych w przestrzeni fazowej [107].

#### 3.1.1 Entropia Wignera-Rényiego

Entropia Wignera-Rényiego stanowi uogólnienie klasycznej entropii Rényiiego na przypadek stanów kwantowych reprezentowanych w przestrzeni fazowej. Dla stanów czystych, gdzie funkcja Wignera może być interpretowana jako amplituda prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej [78, 79, 80], kwadrat modułu znormalizowanej funkcji Wignera stanowi właściwą gęstość prawdopodobieństwa. Norma funkcji Wignera w przestrzeni  $L^2(\mathbb{R}^2)$  dla stanów czystych przyjmuje stałą wartość:

$$\|\varrho(\cdot, \cdot; t)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = \left( \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)|^2 \right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}. \quad (3.1)$$

Na tej podstawie wprowadza się znormalizowaną funkcję Wignera zgodnie ze wzorem:

$$\tilde{\varrho}(x, p; t) = \frac{\varrho(x, p; t)}{\|\varrho(\cdot, \cdot; t)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}} = \sqrt{2\pi\hbar} \varrho(x, p; t), \quad (3.2)$$

dla której kwadrat modułu,  $|\tilde{\varrho}(x, p; t)|^2$ , może być interpretowany jako gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej.

**Definicja 3.1** (Entropia Wignera-Rényiego). Entropia Wignera-Rényiego dla indeksu  $\alpha > 0$ ,  $\alpha \neq 1$  ma postać

$$S_\alpha(t) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[ (2\pi\hbar)^{\alpha-1} \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)|^{2\alpha} \right]. \quad (3.3)$$

Powyższa definicja stanowi rozszerzenie wyniku [104] na przypadek entropii Rényiego. W przypadku granicznym  $\alpha \rightarrow 1$ , entropia Wignera-Rényiego przechodzi w entropię Wignera-Shannona:

$$S_1(t) = \lim_{\alpha \rightarrow 1} S_\alpha(t) = -\ln(2\pi\hbar) - 2\pi\hbar \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)|^2 \ln [\varrho^2(x, p; t)], \quad (3.4)$$

Szczególne przypadki entropii Wignera-Rényiego odpowiadają innym charakterystycznym miarom entropowym. Dla  $\alpha = 2$  otrzymuje się entropię kolizyjną w postaci:

$$S_2(t) = -\ln \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\tilde{\varrho}(x, p, t)|^4, \quad (3.5)$$

natomiast przypadek  $\alpha \rightarrow \infty$  prowadzi do entropii min-max

$$S_\infty(t) = \lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[ \int_{\mathbb{R}^2} dx dp (|\tilde{\varrho}(x, p, t)|^2)^\alpha \right] = -\ln \left( \max_{(x,p) \in \mathbb{R}^2} |\tilde{\varrho}(x, p, t)|^2 \right). \quad (3.6)$$

Każda z wymienionych entropii posiada precyzyjną interpretację fizyczną. Entropia Shannona ( $\alpha = 1$ ) opisuje deformację obszaru zajmowanego przez funkcję Wignera w przestrzeni fazowej, wywołaną kwantowymi korelacjami położenie-pęd, które jednocześnie wpływają na kształt tej funkcji. Entropia kolizyjna ( $\alpha = 2$ ) jest związana z odwrotnością współczynnika partycypacji w przestrzeni fazowej [108], stanowiąc miarę lokalizacji stanu kwantowego. Entropia min-max ( $\alpha \rightarrow \infty$ ) odpowiada maksimum gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej. Innym interesującym przypadkiem jest entropia połówkowa Wignera-Rényiego ( $\alpha = 1/2$ ), która stanowi miarę nieklasyczności stanu kwantowego, równoważną parametrowi nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego [15, 71]. Interpretacja entropii połówkowej zostanie szczegółowo omówiona w rozdziale 3.1.4, gdyż stanowi to istotny oryginalny wynik niniejszej pracy.

### 3.1.2 Związek entropii Wignera-Rényiego z topologicznymi przejściami fazowymi

Przedstawiona definicja entropii Wignera-Rényiego ma charakter ogólny i znajduje zastosowanie w różnych obszarach fizyki kwantowej [71, 109, 110]. Interesującym przykładem jest wykorzystanie rodziny entropii  $S_\alpha$  dla różnych indeksów Rényiego do detekcji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca [72]. Materiałem modelowym, w którym można zaobserwować topologiczne przejście fazowe, jest silicen – dwuwymiarowa cienka warstwa krzemu [111]. W odróżnieniu od grafenu, silicen charakteryzuje się silnym sprzężeniem spin-orbita, które otwiera przerwę energetyczną w punktach Diraca. Szerokość tej przerwy można kontrolować za pomocą prostopadłego pola elektrycznego o natężeniu  $\Delta_z$ , co umożliwia przejście między stanem izolatora topologicznego ( $\Delta_z < \Delta_{SO}$ ), a stanem izolatora pasmowego ( $\Delta_z > \Delta_{SO}$ ), gdzie  $\Delta_{SO}$  oznacza stałą sprzężenia spin-orbita [112, 113]. Kanonicznie topologiczne przejścia fazowe charakteryzuje się za pomocą liczby Cherna – całkowitoliczbowego niezmiennika topologicznego. Alternatywną metodę, opartą na teorii informacji, zaproponowali Bolívar i współpracownicy [114], definiując topologiczną liczbę kwantową poprzez względną entropię Rényiego

$$C(\Delta_z) = \text{sign} \left\{ \frac{\partial R_\alpha^{n,s}(\Delta_z)}{\partial \Delta_z} \frac{\partial R_\alpha^{n,-s}(\Delta_z)}{\partial \Delta_z} \right\}, \quad (3.7)$$

gdzie  $R_\alpha^{n,s}(\Delta_z)$  jest sumą względnych entropii Rényiego dla elektronów i dziur na  $n$ -tym poziomie Landaua, a  $s$  oznacza kierunek spinu. Wielkość  $C(\Delta_z)$  przyjmuje wartość  $+1$  dla izolatora pasmowego oraz  $-1$  dla izolatora topologicznego.

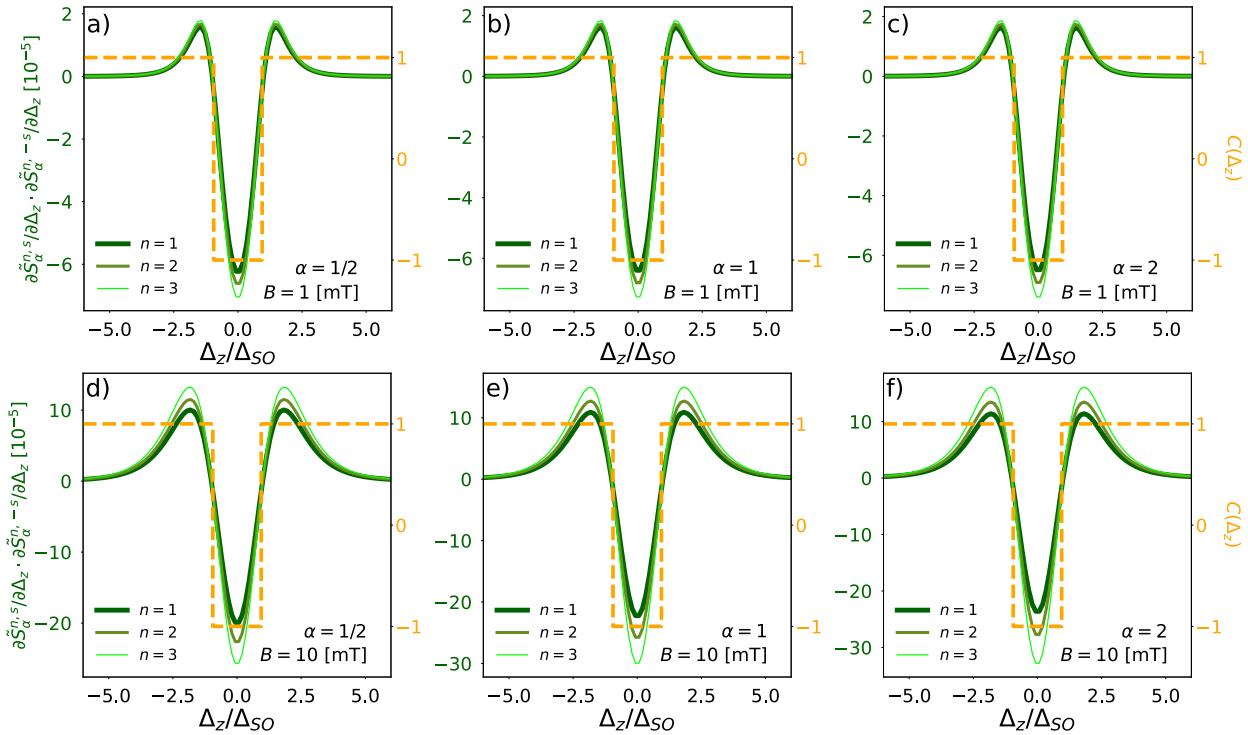
Podejście to można rozszerzyć, zastępując względną entropię Rényiego entropią Wignera-Rényiego (3.3), jak pokazano w [72]. Zmodyfikowana topologiczna liczba kwantowa przyjmuje wówczas postać:

$$C(\Delta_z) = \text{sign} \left\{ \frac{\partial \tilde{S}_\alpha^{n,s}(\Delta_z)}{\partial \Delta_z} \frac{\partial \tilde{S}_\alpha^{n,-s}(\Delta_z)}{\partial \Delta_z} \right\}, \quad (3.8)$$

gdzie  $\tilde{S}_\alpha^{n,s}(\Delta_z)$  oznacza całkowitą entropię Wignera-Rényiego dla elektronów i dziur

$$\tilde{S}_\alpha^{n,s}(\Delta_z) = S_\alpha^{n,s}(\Delta_z) + S_\alpha^{-n,s}(\Delta_z). \quad (3.9)$$

Zastąpienie względnej entropii Rényiego entropią Wignera-Rényiego ma istotne uzasadnienie fizyczne.



Rysunek 3.1: Topologiczna liczba kwantowa  $C(\Delta_z)$  oparta na entropii Wignera-Rényiego dla silicenu w obecności pola magnetycznego  $B = 1$  mT (górny rząd) oraz  $B = 10$  mT (dolny rząd). Kolumny odpowiadają indeksom Rényiego  $\alpha = 1/2, 1$  i  $2$ . Krzywe zielone przedstawiają iloczyn pochodnych kombinowanej entropii  $\partial \tilde{S}_\alpha^{n,s} / \partial \Delta_z \cdot \partial \tilde{S}_\alpha^{n,-s} / \partial \Delta_z$  dla poziomów Landaua  $n = 1, 2, 3$ . Linie żółte oznaczają znak tego iloczynu, stanowiący topologiczną liczbę kwantową:  $C = -1$  dla izolatora topologicznego ( $\Delta_z < \Delta_{SO}$ ) oraz  $C = +1$  dla izolatora pasmowego ( $\Delta_z > \Delta_{SO}$ ).

Względna entropia Rényiego opiera się wyłącznie na diagonalnych elementach macierzy gęstości w reprezentacji położeniowej, będąc wrażliwą jedynie na lokalizację przestrzenną stanu. Funkcja Wignera natomiast zawiera pełną informację o macierzy gęstości – elementy pozadiagonalne są przekształcane w zmienne pędowe poprzez transformatę Weyla-Wignera. W konsekwencji entropia Wignera-Rényiego jest

dodatkowo wrażliwa na korelacje położenie-pęd, które są indukowane przez zewnętrzne pole magnetyczne obecne w rozważanym układzie. Obliczenia numeryczne dla silicenu w obecności równoległych pól magnetycznego i elektrycznego potwierdzają skuteczność podejścia przestrzenno-fazowego [72]. Rysunek 3.1 przedstawia topologiczną liczbę kwantową  $C(\Delta_z)$  wyznaczoną na podstawie pochodnych kombinowanej entropii Wignera-Rényiego dla trzech najniższych poziomów Landaua ( $n = 1, 2, 3$ ) i trzech indeksów Rényiego ( $\alpha = 1/2, 1, 2$ ). Iloczyn pochodnych entropii dla stanów o przeciwnych spinach (krzywe zielone) zmienia znak w punkcie krytycznym  $\Delta_z/\Delta_{SO} = 1$ , co przekłada się na skokową zmianę topologicznej liczby kwantowej (linie żółte) z wartości  $C = -1$  (izolator topologiczny) do  $C = +1$  (izolator pasmowy). Wszystkie trzy indeksy Rényiego – odpowiadające entropii połówkowej ( $\alpha = 1/2$ ), entropii Shannona ( $\alpha = 1$ ) oraz entropii kolizyjnej ( $\alpha = 2$ ) – poprawnie identyfikują punkt przejścia fazowego, co potwierdza uniwersalność rodziny entropii Wignera-Rényiego jako narzędzia do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych. Przedstawione podejście może być zastosowane do innych dwuwymiarowych materiałów Diraca z przerwą energetyczną, takich jak germanen czy stanenen, rozszerzając zakres metod teorii informacji w fizyce ciała stałego [72].

### 3.1.3 Dolne ograniczenie na entropię Wignera-Rényiego

**Twierdzenie 3.1** (Dolne ograniczenie entropii Wignera-Rényiego). Dla indeksu Rényiego  $\alpha \geq 1/2$  entropia Wignera-Rényiego spełnia nierówność:

$$S_\alpha(t) \geq \frac{1}{1-\alpha} \ln \left[ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{2}{\pi\hbar} \right)^{\alpha-1} \right]. \quad (3.10)$$

Nierówność (3.10) wysyca się wtedy i tylko wtedy, gdy  $S_\alpha(t)$  jest obliczona dla gaussowskiej funkcji Wignera.

*Dowód.* Dowód opiera się na wynikach Lieba [115] dotyczących ograniczeń norm  $L^p$  funkcji Wignera i został przedstawiony w pracy [71]. W pracy [115] rozważany jest uogólniony rozkład Wignera  $W_{f,g}$  zdefiniowany dla dwóch funkcji  $f(x)$  i  $g(x)$ , związany z funkcją niejednoznaczności wykorzystywaną w przetwarzaniu sygnałów. Funkcja Wignera stanu kwantowego reprezentowanego przez funkcję falową  $\psi(x)$  odpowiada przypadkowi szczególnemu  $f(x) = g(x) = \psi(x)$ , co wynika bezpośrednio z definicji funkcji Wignera przyjętej w niniejszej pracy (por. równanie (2.19)). Warunek (3.10) jest spełniony dla stanów czystych, dla których zdefiniowano entropię Wignera-Rényiego (por. Rozdział 3.1.1). Za pracą Lieba [115] definiuje się funkcjonal  $I^{2\alpha}(t)$  w postaci

$$I^{2\alpha}(t) = 2^{1-\alpha} (\pi\hbar)^{\alpha-1} \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\tilde{\varrho}(x, p; t)|^{2\alpha}, \quad (3.11)$$

który odpowiada normie  $L^q$  rozważanej w pracy [115] dla  $q = 2\alpha$ .

*Przypadek  $\alpha > 1$ :* Zgodnie z Twierdzeniem 1(d) pracy Lieba [115] (nierówność (1.22)), dla  $p > 2$  i warunku  $g(x) = f(x)$  zachodzi górne ograniczenie

$$I_{f,f}(p) \leq K(p, a, b) (\|f\|_a \|f\|_b)^p, \quad (3.12)$$

$\|f\|_a$  oznacza normę  $L^a(\mathbb{R})$ ,  $K(p, a, b)$  jest stałą (por. wzór (1.16) w [115]), a  $1/a + 1/b = 1$ . Dla  $a = b = 2$  oraz funkcji Wignera stanu czystego  $\|f\|_2 = 1$ , stała  $K(p, 2, 2) = 2/p$ , co daje

$$I^{2\alpha}(t) \leq \frac{1}{\alpha}. \quad (3.13)$$

Biorąc logarytm naturalny obu stron nierówności (3.13), otrzymuje się

$$\ln I^{2\alpha}(t) \leq -\ln \alpha. \quad (3.14)$$

Z definicji (3.11) wynika, że:

$$\ln I^{2\alpha}(t) = (1 - \alpha) \ln 2 + (\alpha - 1) \ln(\pi \hbar) + \ln \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\tilde{q}(x, p; t)|^{2\alpha}. \quad (3.15)$$

Podstawiając (3.15) do (3.14) i przekształcając, uzyskuje się

$$\ln \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\tilde{q}(x, p; t)|^{2\alpha} \leq -\ln \alpha + (\alpha - 1) \ln \frac{2}{\pi \hbar}. \quad (3.16)$$

Mnożąc obie strony nierówności (3.16) przez czynnik  $1/(1 - \alpha)$ , który dla  $\alpha > 1$  jest ujemny, znak nierówności ulega odwróceniu:

$$\frac{1}{1 - \alpha} \ln \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\tilde{q}(x, p; t)|^{2\alpha} \geq \frac{1}{1 - \alpha} \left[ -\ln \alpha + (\alpha - 1) \ln \frac{2}{\pi \hbar} \right]. \quad (3.17)$$

Lewa strona nierówności (3.17) jest równa entropii Wignera-Rényiego  $S_\alpha(t)$  zgodnie z definicją (3.3).

Prawa strona po uproszczeniu przyjmuje postać

$$\frac{1}{1 - \alpha} \ln \left[ \frac{1}{\alpha} \left( \frac{2}{\pi \hbar} \right)^{\alpha-1} \right], \quad (3.18)$$

co dowodzi nierówności (3.10) dla  $\alpha > 1$ .

*Przypadek  $1/2 \leq \alpha < 1$ :* Dla tego zakresu indeksu Rényiego stosuje się Twierdzenie 2 pracy Lieba [115], część dotyczącą warunku  $g(x) = f(x)$  (por. nierówność (1.25) w [115]), które dla  $1 \leq p < 2$  daje dolne ograniczenie

$$I_{f,f}(p) \geq K(p, a, b) (\|f\|_a \|f\|_b)^p. \quad (3.19)$$

Ponieważ  $2\alpha \in [1, 2)$  dla  $\alpha \in [1/2, 1)$ , oraz przyjmując  $a = b = 2$  i  $\|f\|_2 = 1$ , nierówność (3.19) implikuje

$$I^{2\alpha}(t) \geq \frac{1}{\alpha}. \quad (3.20)$$

Biorąc logarytm i mnożąc przez  $1/(1 - \alpha)$ , który dla  $\alpha < 1$  jest dodatni, znak nierówności zostaje zachowany, co prowadzi bezpośrednio do (3.10).

*Warunek równości:* Zgodnie z Twierdzeniem 1(d) pracy Lieba [115], równość w nierówności (3.12) dla warunku  $g(x) = f(x)$  zachodzi wtedy i tylko wtedy, gdy  $f(x)$  jest dowolną funkcją gaussowską, natomiast funkcja Wignera funkcji gaussowskiej jest funkcją gaussowską [81]. Analogiczny warunek równości obowiązuje dla Twierdzenia 2. W konsekwencji dolne ograniczenie entropii Wignera-Rényiego (3.10) jest osiągnięte wyłącznie dla stanów kwantowych reprezentowanych przez gaussowską funkcję Wignera.  $\square$

### 3.1.4 Entropia połówkowa: Interpretacja fizyczna i związek z nieklasycznością

Podstawiając  $\alpha = 1/2$  do definicji (3.3) i wykonując odpowiednie przekształcenia algebraiczne, otrzymujemy entropię połówkową Wignera-Rényiego:

$$S_{1/2}(t) = 2 \ln \left[ \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)| \right] + \ln(2\pi\hbar). \quad (3.21)$$

Porównując powyższe wyrażenie z definicją parametru nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego wyrażoną wzorem (2.26):

$$\delta(t) = \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)| - 1, \quad (3.22)$$

otrzymujemy związek między tymi wielkościami

$$S_{1/2}(t) = 2 \ln[\delta(t) + 1] + \ln(2\pi\hbar) \quad (3.23)$$

Związek ten pozwala na interpretację entropii  $S_{1/2}$  jako logarytmicznej miary nieklasyczności stanu reprezentowanego przez funkcję Wignera rozumianą jako funkcja falowa w przestrzeni fazowej. Parametr nieklasyczności można również wyrazić przez entropię

$$\delta(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[ \frac{S_{1/2}(t)}{2} \right] - 1. \quad (3.24)$$

Dla stanów o nieujemnej funkcji Wignera (gaussowskich), gdzie  $\delta = 0$ , entropia przyjmuje stałą minimalną wartość  $S_{1/2} = \ln(2\pi\hbar)$ , reprezentującą logarytm objętości komórki kwantowej w przestrzeni fazowej. Wartość ta stanowi dolne ograniczenie entropii zgodne z Twierdzeniem 3.1. Warto zauważyć, że Sadeghi i współpracownicy [116] wykazali związek parametru nieklasyczności z entropią Tsallisa opartą na funkcji Wignera dla indeksu Tsallisa równego jeden, jednak nie podali jawnej formuły łączącej te wielkości. Przedstawiony powyżej wynik (3.23) stanowi dokładny związek między entropią Wignera-Rényiego a parametrem nieklasyczności. Warto zauważyć, że dla  $\alpha = 1/2$  dolne ograniczenie wyrażone wzorem (3.10) przyjmuje wartość  $S_{1/2} = \ln(2\pi\hbar)$ , co odpowiada logarytmowi objętości komórki w przestrzeni fazowej.

### 3.1.5 Monotoniczność entropii Wignera-Rényiego względem indeksu Rényiego

Istotną własnością rodziny entropii Wignera-Rényiego jest ich monotoniczność względem indeksu Rényiego. Własność ta ma znaczenie dla hierarchii miar entropowych.

**Twierdzenie 3.2** (Monotoniczność entropii Wignera-Rényiego). Niech  $f(x, p; t) = |\tilde{\varrho}(x, p; t)|^2$  będzie gęstością prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej. Wówczas entropia Wignera-Rényiego rzędu  $\alpha \geq 0$  spełnia nierówność:

$$S_\alpha(t) \leq S_\beta(t), \quad \text{dla } \alpha \geq \beta. \quad (3.25)$$

*Dowód.* Dowód twierdzenia został pierwotnie przedstawiony w pracy [110] (por. [110] Appendix B). Oblicza się pochodną entropii  $S_\alpha(t)$  względem parametru  $\alpha$ :

$$\partial_\alpha S_\alpha(t) = \frac{1}{(1-\alpha)^2} \ln N_\alpha(t) + \frac{1}{1-\alpha} \frac{1}{N_\alpha(t)} \int_{\mathbb{R}^2} dx dp f^\alpha(x, p; t) \ln f(x, p; t), \quad (3.26)$$

gdzie  $N_\alpha(t) = \int_{\mathbb{R}^2} dx dp f^\alpha(x, p; t)$  oznacza  $\alpha$ -tą potęgę normy  $\alpha$  funkcji  $f$ . Wprowadzając znormalizowany rozkład prawdopodobieństwa:

$$q_\alpha(x, p; t) = \frac{f^\alpha(x, p; t)}{N_\alpha(t)}, \quad (3.27)$$

po odpowiednich przekształceniach otrzymuje się:

$$\partial_\alpha S_\alpha(t) = -\frac{1}{(1-\alpha)^2} \int_{\mathbb{R}^2} dx dp q_\alpha(x, p; t) \ln \frac{q_\alpha(x, p; t)}{|\tilde{q}(x, p; t)|^2}. \quad (3.28)$$

Wyrażenie po prawej stronie jest dywergencją Kullbacka-Leiblera  $D_{KL}(q_\alpha || |\tilde{q}|^2)$ , która jest zawsze nieujemna [117]:

$$D_{KL}(q_\alpha || |\tilde{q}|^2) \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \partial_\alpha S_\alpha(t) \leq 0. \quad (3.29)$$

Stąd entropia  $S_\alpha(t)$  jest funkcją nierosnącą względem  $\alpha$ , co kończy dowód.  $\square$

Bezpośrednią konsekwencją Twierdzenia 3.2 jest hierarchia entropii:

$$S_{1/2}(t) \geq S_1(t) \geq S_2(t) \geq \dots \geq S_\infty(t). \quad (3.30)$$

Hierarchia ta ma istotne implikacje praktyczne entropia połówkowa  $S_{1/2}$  stanowi górne ograniczenie dla wszystkich entropii Wignera-Rényiego wyższego rzędu.

### 3.1.6 Symplektyczna niezmienniczość miar entropowych

Fundamentalną własnością miar entropowych opartych na funkcji Wignera jest ich niezmienniczość względem transformacji symplektycznych. Własność ta wynika bezpośrednio z symplektycznej kowariancji funkcji Wignera [13, 85, 118]. Grupa symplektyczna  $Sp(1, \mathbb{R})$  składa się z macierzy  $2 \times 2$  o wyznaczniku równym jeden:

$$Sp(1, \mathbb{R}) = \{\mathbf{S} \in \mathcal{M}_{2 \times 2}(\mathbb{R}) : \mathbf{S}^T \mathbf{J} \mathbf{S} = \mathbf{J}\} = \{\mathbf{S} \in \mathcal{M}_{2 \times 2}(\mathbb{R}) : \det \mathbf{S} = 1\}, \quad (3.31)$$

gdzie  $\mathbf{J}$  jest standardową macierzą symplektyczną spełniającą warunki  $\mathbf{J}^T = -\mathbf{J}$  oraz  $\mathbf{J}^2 = -\mathbf{I}$ . Symplektyczna kowariancja funkcji Wignera oznacza, że symplektyczna zmiana zmiennych w argumentach funkcji Wignera jest równoważna obliczeniu funkcji Wignera dla przetransformowanej funkcji falowej [74]:

$$\varrho_{\hat{\mathcal{K}}_S \psi}(x, p) = \varrho_\psi(\mathbf{S}^{-1}[x \ p]^T), \quad (3.32)$$

gdzie symbol  $\hat{\mathcal{K}}_S$  oznacza operator należący do grupy metaplektycznej  $Mp(1)$  – grupy unitarnych operatorów działających w przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem [85].

**Definicja 3.2** (Symplektyczna niezmienniczość miar). Niech  $f : [-1/(\pi\hbar), 1/(\pi\hbar)] \rightarrow \mathbb{R}$  będzie funkcją taką, że całka

$$\zeta(t) = \int_{\mathbb{R}^2} dx dp f(\varrho(x, p; t)) \quad (3.33)$$

jest skończona. Jeżeli ewolucja czasowa funkcji Wignera jest generowana przez hamiltonian z potencjałem będącym wielomianem stopnia co najwyżej drugiego, to miara  $\zeta(t)$  jest niezmiennikiem ruchu.

W szczególności, dla ruchu swobodnego (potencjał zerowy) operator ewolucji czasowej jest operatorem metaplektycznym, a zatem:

$$\int_{\mathbb{R}^2} dx dp f \left( \varrho_{\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} t\right)} \psi_0(x, p) \right) = \int_{\mathbb{R}^2} dx dp f(\varrho_{\psi_0}(x, p)). \quad (3.34)$$

Naturalną konsekwencją definicji 3.2 jest niezmienniczość entropii Wignera-Rényiego przy swobodnej ewolucji:

$$S_\alpha(t) = S_\alpha(0) = \text{const} \quad \text{dla ruchu swobodnego.} \quad (3.35)$$

Własność ta ma znaczenie praktyczne. Pozwala ona na wykorzystanie entropii Wignera-Rényiego jako wskaźnika interakcji stanu kwantowego z potencjałem rozpraszającym [109, 110]. Przed wejściem w obszar oddziaływania, gdy stan ewoluuje swobodnie, entropia pozostaje stała. W obszarze oddziaływania z energią potencjalną o charakterze nieharmonicznym ewolucja przestaje być symplektyczna, a entropia ulega zmianie. Wreszcie, po opuszczeniu obszaru oddziaływania, gdy stan ponownie ewoluuje swobodnie, entropia stabilizuje się na nowej, stałej wartości. Obserwacja ta umożliwia wyznaczenie czasu interakcji stanu kwantowego z barierą potencjału jako przedziału czasowego, w którym entropia  $S_\alpha(t)$  odbiega od wartości stałej. Zgodnie z hierarchią (3.30), entropia połówkowa  $S_{1/2}$  zapewnia górne ograniczenie na czas interakcji, podczas gdy entropie wyższego rzędu dają coraz węższe oszacowania [110].

## 3.2 Model układu

W niniejszej sekcji przedstawiono model wykorzystany do badania dynamiki rodziny stanów kota Schrödingera oddziałujących z barierą potencjału. Rozważany układ, przedstawiony schematycznie na rys. 3.2, składa się z bimodalnego stanu kwantowego, który oddziałuje z gaussowską barierą potencjału.

### 3.2.1 Stan początkowy: rodzina stanów kota Schrödingera

Stanem początkowym w przeprowadzonych symulacjach jest koherentna superpozycja dwóch gaussowskich pakietów falowych – tak zwany stan kota Schrödingera [119, 120, 121]. Funkcja Wignera takiego stanu przyjmuje ogólną postać [94]:

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; 0) = & A^2 \frac{1 - \beta}{\pi \hbar} \exp \left[ -\frac{(x - x_1)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} (p - p_1)^2 \right] \\ & + A^2 \frac{\beta}{\pi \hbar} \exp \left[ -\frac{(x - x_2)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} (p - p_2)^2 \right] \\ & + 2A^2 \frac{\sqrt{\beta(1 - \beta)}}{\pi \hbar} \cos \left[ \theta + \frac{p_1 - p_2}{\hbar} x + \frac{x_2 - x_1}{\hbar} \left( p - \frac{p_1 + p_2}{2} \right) \right] \\ & \times \exp \left[ -\frac{1}{2\delta_x^2} \left( x - \frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} \left( p - \frac{p_1 + p_2}{2} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.36)$$

gdzie czynnik normalizacyjny  $A$  dany jest wzorem:

$$A = \left\{ 1 + 2\sqrt{\beta(1 - \beta)} \exp \left[ -\frac{\delta_x^2(p_1 - p_2)^2}{\hbar^2} - \frac{(x_1 - x_2)^2}{8\delta_x^2} \right] \cos \left[ \theta + \frac{(x_1 + x_2)(p_1 - p_2)}{2\hbar} \right] \right\}^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.37)$$

Struktura funkcji Wignera (3.36) składa się z trzech wyrazów. Pierwszy wyraz opisuje gaussowski pakiet falowy zlokalizowany w punkcie  $(x_1, p_1)$  przestrzeni fazowej z wagą  $(1 - \beta)$ . Drugi wyraz odpowiada gaussowskiemu pakietowi zlokalizowanemu w punkcie  $(x_2, p_2)$  z wagą  $\beta$ . Trzeci wyraz stanowi wyraz interferencyjny – ma on charakter oscylujący z obwiednią gaussowską i zlokalizowany jest pomiędzy dwoma pakietami gaussowskimi. To właśnie ten wyraz interferencyjny, przyjmujący wartości ujemne w pewnych obszarach przestrzeni fazowej, stanowi o nieklasyczności stanu kota Schrödingera. W przeprowadzonych badaniach przyjęto konfigurację, w której oba pakiety poruszają się ku sobie z przeciwnymi pędami:  $p_2 = -p_1 = -p_0$  (por. rys. 3.2). Funkcja Wignera wyrażona wzorem (3.36) upraszcza się wówczas do postaci

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; 0) = & A^2 \frac{1 - \beta}{\pi \hbar} \exp \left[ -\frac{(x - x_1)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} (p - p_0)^2 \right] \\ & + A^2 \frac{\beta}{\pi \hbar} \exp \left[ -\frac{(x - x_2)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} (p + p_0)^2 \right] \\ & + 2A^2 \frac{\sqrt{\beta(1 - \beta)}}{\pi \hbar} \cos \left[ \theta + \frac{2p_0}{\hbar} x + \frac{x_2 - x_1}{\hbar} p \right] \\ & \times \exp \left[ -\frac{1}{2\delta_x^2} \left( x - \frac{x_1 + x_2}{2} \right)^2 - \frac{2\delta_x^2}{\hbar^2} p^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Zgodnie z pracami [94, 71] przyjęto następujące wartości parametrów

$$\beta = 0,5, \quad \delta_x^2 = 500 \text{ a.u.}, \quad x_1 = -300 \text{ a.u.}, \quad x_2 = 300 \text{ a.u.}, \quad p_0 = 0,15 \text{ a.u.} \quad (3.39)$$

Wybór  $\beta = 0,5$  zapewnia równe wagi obu pakietów, co prowadzi do symetrycznej postaci funkcji Wignera. Parametr fazy względnej  $\theta$  w wyrażeniu (3.38) określa charakter interferencji między składowymi superpozycji. Rozważano trzy szczególne przypadki, tworzące trzelementową rodzinę stanów kota Schrödingera. Dla  $\theta = 0$  otrzymujemy parzysty stan kota Schrödingera (ang. *even cat state*) [18]. Odpowiadająca mu funkcja falowa w reprezentacji położeniowej jest symetryczna względem odbicia:  $\psi(-x) = \psi(x)$ . Wyraz interferencyjny w funkcji Wignera przyjmuje maksimum w środku układu ( $x = 0$ ). Dla  $\theta = \pi$  otrzymujemy nieparzysty stan kota Schrödingera (ang. *odd cat state*) [18]. Funkcja falowa jest antysymetryczna:  $\psi(-x) = -\psi(x)$ . Wyraz interferencyjny przyjmuje wartość zero w środku układu. Dla  $\theta = \pi/2$  otrzymujemy stan Yurke’go-Stolera [122], będący superpozycją z fazą względną  $\pm i$ . Dla przyjętych parametrów (3.39) czynniki wykładnicze w wyrażeniu na normalizację (3.37):

$$\exp \left( -\frac{2p_0^2 \delta_x^2}{\hbar^2} \right) \approx 1,7 \times 10^{-10}, \quad \exp \left( -\frac{(x_1 - x_2)^2}{8\delta_x^2} \right) \approx 8,2 \times 10^{-40} \quad (3.40)$$

są pomijalnie małe. W konsekwencji wpływ fazy  $\theta$  na wartość czynnika normalizacyjnego  $A$  jest zaniedbywalny, a wszystkie trzy stany mają prawie identyczną normę.

### 3.2.2 Potencjał gaussowski

Centrum rozpraszające modelowane jest przez barierę potencjału w postaci funkcji gaussowskiej

$$U(x) = U_0 \exp \left[ -\frac{(x - X_B)^2}{w^2} \right], \quad (3.41)$$

gdzie  $U_0$  oznacza wysokość bariery,  $w$  jest parametrem szerokości bariery, a  $X_B$  określa położenie jej maksimum. W przeprowadzonych symulacjach bariera umieszczona została w centrum obszaru obliczeniowego ( $X_B = 0$ ). Wybór potencjału gaussowskiego jest podyktowany kilkoma czynnikami. Potencjał ten należy do klasy funkcji bezwzględnie całkowalnych ( $U \in L^1(\mathbb{R})$ ), co zapewnia skończony zasięg oddziaływania i umożliwia jednoznaczną identyfikację strefy oddziaływania. Ponadto bariera gaussowska stanowi dobre przybliżenie rzeczywistych potencjałów rozpraszających występujących w układach nanoelektronicznych [17, 7].

### 3.2.3 Parametry bariery potencjału

Dynamika stanu kwantowego w obecności bariery potencjału zależy od relacji między energią kinetyczną stanu a wysokością bariery. Rozróżniamy dwa podstawowe reżimy. W reżimie nadbarierowym średnia energia kinetyczna pakietu falowego  $\langle E_k \rangle = \langle p \rangle^2 / (2m)$  przewyższa wysokość bariery  $U_0$ :

$$\langle E_k \rangle > U_0. \quad (3.42)$$

W tym przypadku klasyczny odpowiednik cząstki przeszedłby nad barierą bez odbicia. Jednakże w przypadku kwantowym, obserwuje się zarówno transmisję, jak i częściowe odbicie stanu kwantowego. W reżimie podbarierowym średnia energia kinetyczna jest mniejsza od wysokości bariery:

$$\langle E_k \rangle < U_0. \quad (3.43)$$

W tym przypadku dominującym mechanizmem przenikania przez barierę jest efekt tunelowy. W przeprowadzonych symulacjach zastosowano następujący zestaw parametrów, określany jako parametry standardowe:

$$U_0 = 0,008 \text{ a.u.}, \quad w^2 = 50 \text{ a.u.}, \quad X_B = 0. \quad (3.44)$$

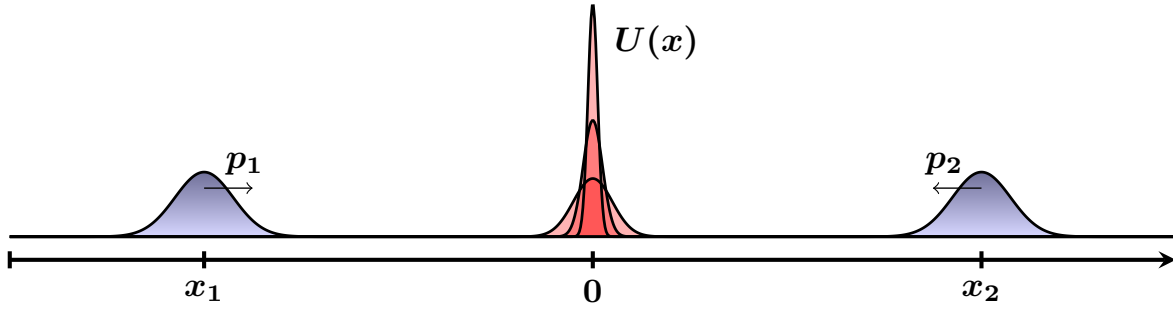
Dodatkowo zbadano wpływ zmian wysokości bariery w zakresie  $U_0 \in \{0,004; 0,008; 0,012; 0,016; 0,020\}$  a.u. oraz szerokości w zakresie  $w^2 \in \{50; 148; 216; 298; 500\}$  a.u. Taki dobór parametrów umożliwia zbadanie dynamiki kwantowej w reżimie nadbarierowym oraz tunelowym. Dla przyjętych parametrów początkowych (pęd  $p_0 = 0,15$  a.u., masa  $m = 1$  a.u.) średnia energia kinetyczna wynosi:

$$\langle E_k \rangle = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{(0,15)^2}{2} = 0,01125 \text{ a.u.} \quad (3.45)$$

Porównując z wysokością bariery standardowej  $U_0 = 0,008$  a.u., stwierdzamy, że symulacje dla parametrów standardowych przeprowadzono w reżimie nadbarierowym. Zmiana wysokości bariery do  $U_0 = 0,012$  a.u. lub wyższej prowadzi do przejścia w reżim tunelowy.

## 3.3 Metodologia obliczeń

Ewolucja czasowa funkcji Wignera jest wyznaczana przez numeryczne rozwiązanie równania Moyala (2.49) z warunkiem początkowym w postaci stanu kota Schrödingera (3.38). W niniejszej sekcji przedstawiono szczegóły implementacji numerycznej. Zastosowana metoda numeryczna opiera się na spektralnej metodzie



Rysunek 3.2: Schemat koncepcyjny badanego układu. Dwa gaussowskie pakiety falowe tworzące stan kota Schrödingera są zlokalizowane w punktach  $x_1$  i  $x_2$  po przeciwnych stronach gaussowskiej bariery potencjału  $U(x)$ . Pakiety poruszają się ku sobie z przeciwnymi pędami  $p_1$  i  $p_2 = -p_1$ .

split-operator opisanej szczegółowo w sekcji 2.4.1. Dla hamiltonianu z potencjałem niezależnym od czasu,  $H(x, p) = p^2/(2m) + U(x)$ , formalne rozwiązanie równania Moyala można zapisać w postaci

$$\varrho(x, p; t) = \hat{U}(t) \varrho(x, p; 0), \quad (3.46)$$

Operator ewolucji jest aproksymowany za pomocą symetrycznego rozkładu Stranga [95]

$$\hat{U}(\Delta t) \approx \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{U} \Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t\right) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (3.47)$$

gdzie  $\hat{T}$  jest operatorem kinetycznym, a  $\hat{U}$  operatorem potencjalnym. Pojedynczy krok czasowy ewolucji funkcji Wignera przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m} \lambda p\right) \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} \\ &\times \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p}^{-1} \exp[i\Delta t U_{\Delta}(x, y)] \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y} \\ &\times \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m} \lambda p\right) \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t_0), \end{aligned} \quad (3.48)$$

gdzie funkcja pomocnicza  $U_{\Delta}(x, y)$  zdefiniowana jest jako

$$U_{\Delta}(x, y) = U\left(x + \frac{y}{2}\right) - U\left(x - \frac{y}{2}\right). \quad (3.49)$$

Efektywna implementacja metody split-operator wykorzystuje szybkie transformaty Fouriera (FFT) do przełączania między reprezentacjami.

### 3.3.1 Parametry siatki obliczeniowej

Obliczenia przeprowadzono w jednostkach atomowych ( $\hbar = e = m = 1$ ) z następującymi parametrami siatki obliczeniowej:

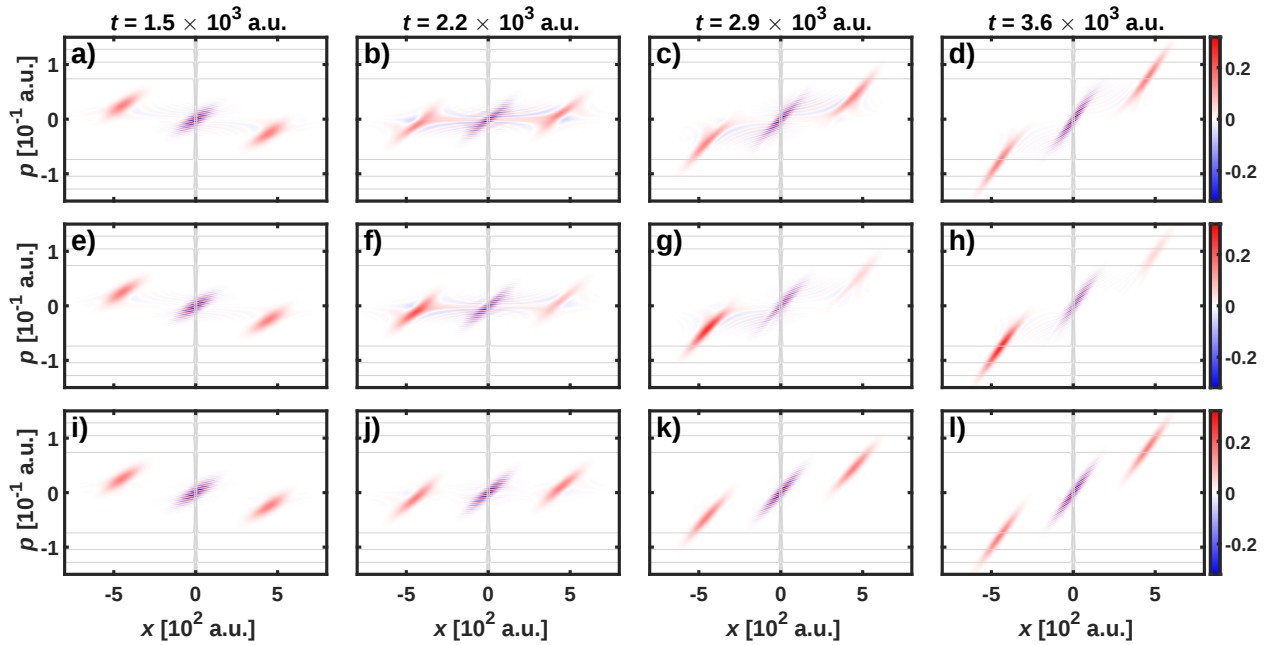
$$N_x = N_p = 1024, \quad L_x = 1500 \text{ a.u.}, \quad L_p = 0,5 \text{ a.u.}, \quad \Delta t = 10 \text{ a.u.} \quad (3.50)$$

Rozmiary pudła obliczeniowego dobrano tak, aby funkcja Wignera zanikała w pobliżu brzegów w całym czasie trwania symulacji. W każdym kroku czasowym obliczane są entropia Wignera-Rényiego (3.21) oraz parametr nieklasyczności (3.22) przez numeryczne całkowanie po przestrzeni fazowej.

### 3.4 Wyniki

#### 3.4.1 Dynamika funkcji Wignera w przestrzeni fazowej

Rysunek 3.3 przedstawia migawki funkcji Wignera  $\varrho(x, p; t)$  dla trzech rozważanych stanów w wybranych chwilach czasowych podczas interakcji z barierą potencjału. W odróżnieniu od gęstości prawdopodobieństwa  $|\varrho(x, p; t)|^2$  przedstawionej w dalszej części rozdziału, bezpośrednia wizualizacja funkcji Wignera umożliwia obserwację obszarów przyjmujących wartości ujemne, które stanowią o nieklasyczności stanu.



Rysunek 3.3: Migawki funkcji Wignera  $\varrho(x, p; t)$  w przestrzeni fazowej dla parzystego stanu kota Schrödingera (górny rząd, panele a–d), stanu Yurkego-Stolera (środkowy rząd, panele e–h) oraz nieparzystego stanu kota Schrödingera (dolny rząd, panele i–l) w chwilach  $t = 1,5; 2,2; 2,9; 3,6 \times 10^3$  a.u. Obszary dodatnie zaznaczono kolorem czerwonym, obszary ujemne kolorem niebieskim. Szare kontury reprezentują linie ekwipotencjalne klasycznego hamiltonianu.

Jeszcze przed rozpoczęciem interakcji z barierą ujemne wartości funkcji Wignera są wyraźnie widoczne dla wszystkich trzech rozważanych stanów początkowych [rys. 3.3(a), (e), (i)]. Obszary te powstają za sprawą wyrazu interferencyjnego w wyrażeniu (3.38) i świadczą o nieklasycznym charakterze stanów kota Schrödingera. Podczas interakcji z barierą potencjału dla nieparzystego stanu kota Schrödingera ( $\theta = \pi$ ) obserwuje się szczególnie wyraźne prążki interferencyjne w przestrzeni fazowej [rys. 3.3(j), (k)]. Prążki te są przejawem kwantowej interferencji między składowymi superpozycji. Analogiczne struktury występują dla stanu parzystego, jednak z mniejszą amplitudą. Inną obserwacją jest proces asymetryzacji stanu Yurkego-Stolera podczas interakcji z barierą. Jak widać na rys. 3.3(f)–(h), początkowo symetryczna funkcja Wignera stanu Yurkego-Stolera ulega asymetryzacji podczas oddziaływania z potencjałem i kontynuuje swobodną ewolucję w asymetrycznej formie. Po interakcji większa część funkcji Wignera pozostaje po lewej stronie bariery.

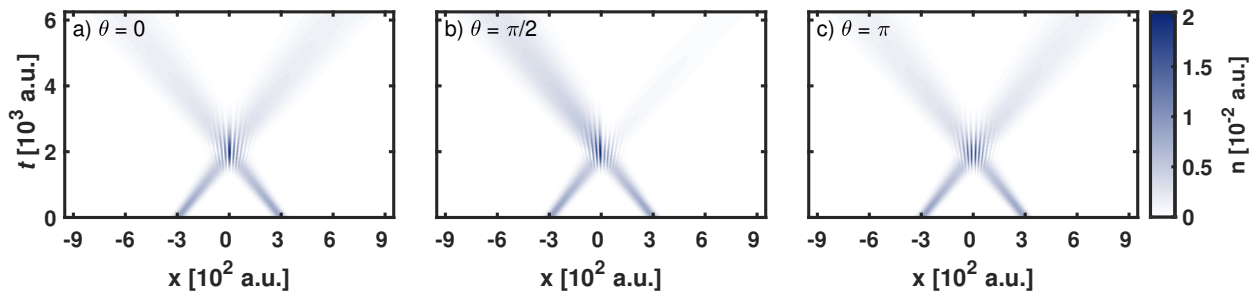
Uzupełnieniem analizy dynamiki funkcji Wignera w przestrzeni fazowej jest badanie ewolucji rozkładów brzegowych funkcji Wignera. Zgodnie z wzorami (2.23) oraz (2.23) gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia oraz gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni pędów definiowane są jako zerowe momenty funkcji Wignera. Dla stanu początkowego (3.38) rozkłady brzegowe można wyznaczyć analitycznie. Gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia przyjmuje postać

$$n(x; 0) = A^2 \frac{1 - \beta}{\sqrt{2\pi\delta_x^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_1)^2}{2\delta_x^2}\right] + A^2 \frac{\beta}{\sqrt{2\pi\delta_x^2}} \exp\left[-\frac{(x - x_2)^2}{2\delta_x^2}\right] + A^2 \frac{2\sqrt{\beta(1 - \beta)}}{\sqrt{2\pi\delta_x^2}} \exp\left[-\frac{(x - \frac{x_1 + x_2}{2})^2}{2\delta_x^2}\right] \exp\left[-\frac{(x_1 - x_2)^2}{8\delta_x^2}\right] \cos\left[\frac{2p_0}{\hbar}x + \theta\right], \quad (3.51)$$

natomiast gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni pędów

$$\tilde{n}(p; 0) = A^2(1 - \beta)\sqrt{\frac{2\delta_x^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left[-\frac{2\delta_x^2}{\hbar^2}(p - p_0)^2\right] + A^2\beta\sqrt{\frac{2\delta_x^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left[-\frac{2\delta_x^2}{\hbar^2}(p + p_0)^2\right] + 2A^2\sqrt{\beta(1 - \beta)}\sqrt{\frac{2\delta_x^2}{\pi\hbar^2}} \exp\left[-\frac{2\delta_x^2}{\hbar^2}p^2\right] \exp\left[-\frac{2\delta_x^2 p_0^2}{\hbar^2}\right] \cos\left[\frac{(x_2 - x_1)}{\hbar}p + \frac{(x_1 + x_2)p_0}{\hbar} + \theta\right]. \quad (3.52)$$

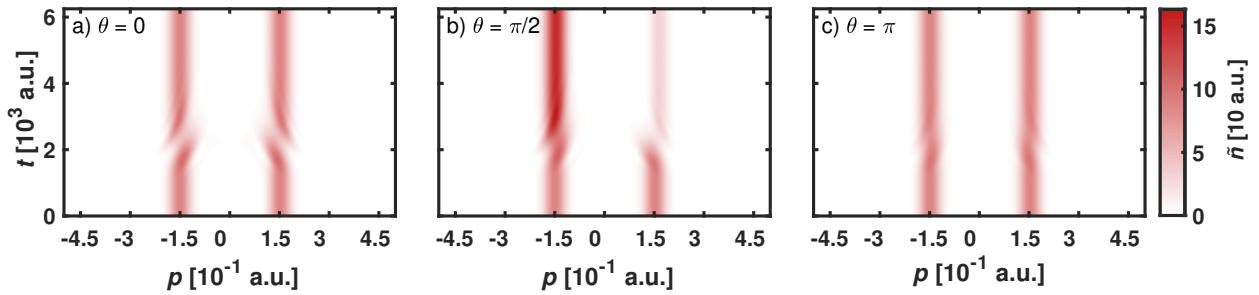
Struktura obu rozkładów (3.51) i (3.52) jest analogiczna do struktury funkcji Wignera (3.38): składają się z dwóch wyrazów gaussowskich odpowiadających poszczególnym pakietom oraz wyrazu interferencyjnego modulowanego funkcją cosinus zależną od fazy  $\theta$ . Czynniki wykładnicze tłumiące wyrazy interferencyjne są rzędu  $10^{-10}$  dla rozkładu pędowego i  $10^{-40}$  dla rozkładu położeniowego, co oznacza, że wpływ fazy  $\theta$  na rozkłady brzegowe w chwili początkowej jest pomijalny. Rysunek 3.4 przedstawia ewolucję czasową gęstości położeniowej  $n(x; t)$  dla trzech rozważanych stanów. Dla stanów parzystego [rys. 3.4(a)] i nieparzystego [rys. 3.4(c)] dynamika jest symetryczna – oba pakiety falowe zbliżają się do bariery, oddziałują z nią i rozchodzą się symetrycznie po obu stronach. Podczas interakcji z barierą widoczne są wyraźne prążki interferencyjne w przestrzeni położenia.



Rysunek 3.4: Ewolucja czasowa gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia  $n(x; t)$  dla standardowych parametrów bariery: (a) parzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = 0$ ), (b) stan Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ), (c) nieparzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = \pi$ ).

Odmierna sytuacja występuje dla stanu Yurkego-Stolera [rys. 3.4(b)]. Po interakcji z barierą potencjału rozkład gęstości staje się wyraźnie asymetryczny – około 85% gęstości prawdopodobieństwa pozostaje w obszarze po lewej stronie bariery. Rysunek 3.5 przedstawia ewolucję czasową gęstości pędowej  $\tilde{n}(p; t)$ . Początkowo dla wszystkich stanów obserwuje się dwa wyraźne piki odpowiadające pędowi  $p_0 = 0,15$  a.u.

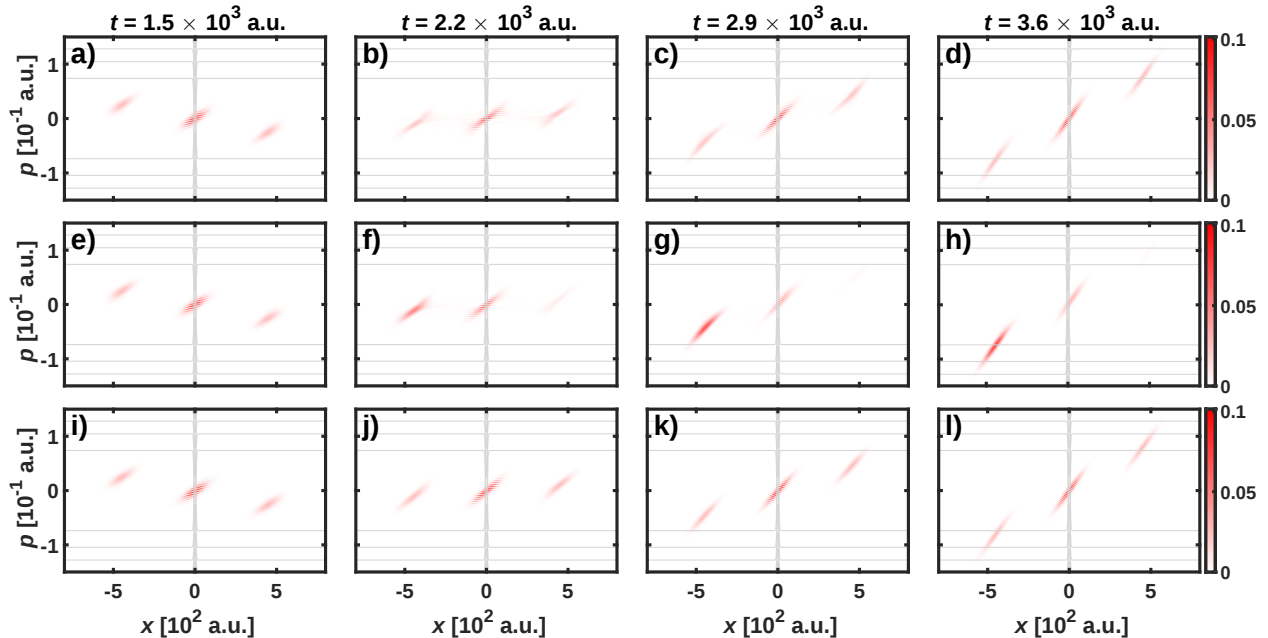
i  $-p_0 = -0,15$  a.u. Podczas interakcji z barierą rozkład pędów ulega poszerzeniu i modyfikacji. Dla stanów parzystego i nieparzystego rozkład pędowy pozostaje symetryczny względem  $p = 0$  przez cały czas symulacji [rys. 3.5(a), (c)]. Natomiast dla stanu Yurkego-Stolera [rys. 3.5(b)] po interakcji z barierą obserwuje się asymetrię rozkładu pędowego, zgodną z asymetrią przestrzenną pokazaną na rys. 3.4(b).



Rysunek 3.5: Ewolucja czasowa gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni pędów  $\tilde{n}(p; t)$  dla standardowych parametrów bariery: (a) parzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = 0$ ), (b) stan Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ), (c) nieparzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = \pi$ ).

### 3.4.2 Ewolucja gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej

Rysunek 3.6 przedstawia migawki gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej,  $|\varrho(x, p; t)|^2$ , dla trzech rozważanych stanów. Wielkość ta, w odróżnieniu od samej funkcji Wignera, jest zawsze nieujemna.

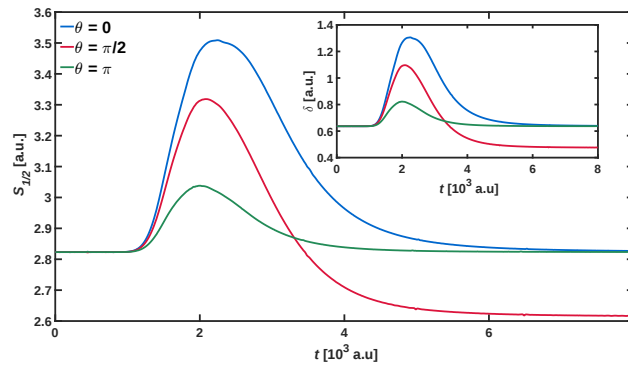


Rysunek 3.6: Migawki gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej  $|\varrho(x, p; t)|^2$  dla parzystego stanu kota Schrödingera (górny rząd, panele a–d), stanu Yurkego-Stolera (środkowy rząd, panele e–h) oraz nieparzystego stanu kota Schrödingera (dolny rząd, panele i–l) w chwilach  $t = 1,5; 2,2; 2,9; 3,6 \times 10^3$  a.u. Szare kontury reprezentują linie ekwipotencjalne klasycznego hamiltonianu.

Przed wejściem w obszar oddziaływania z barierą potencjału wszystkie trzy stany ewoluują swobodnie. W tej fazie zachowana jest początkowa symetria funkcji Wignera względem osi  $x = 0$  dla wszystkich stanów. W reżimie nadbarierowym (dla parametrów standardowych bariery) interakcja stanów parzystego i nieparzystego z barierą nie prowadzi do naruszenia ich początkowej symetrii względem inwersji przestrzennej – oba stany zachowują symetrię w całym procesie rozpraszania. Sytuacja jest jakościowo odmienna dla stanu Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ), gdzie interakcja z symetryczną barierą potencjału prowadzi do asymetryzacji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa, co jest zgodne z obserwacjami dla funkcji Wignera i rozkładów brzegowych przedstawionymi powyżej.

### 3.4.3 Dynamika nieklasyczności

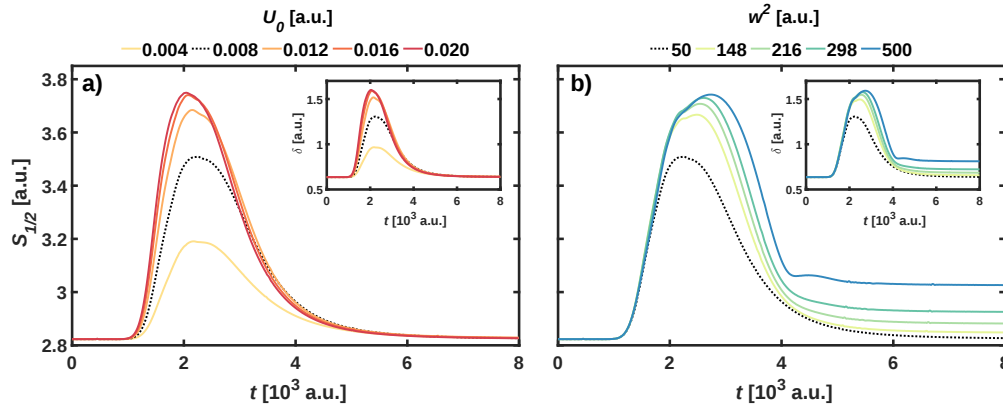
Zgodnie z wyprowadzonym związkiem (3.23), entropia  $S_{1/2}(t)$  i parametr nieklasyczności  $\delta(t)$  zmieniają się w niemal identyczny sposób dla każdego z rozważanych stanów. Rysunek 3.7 przedstawia zależność czasową entropii Wignera-Rényiego  $S_{1/2}(t)$  oraz parametru nieklasyczności  $\delta(t)$  dla trzech rozważanych stanów przy standardowych parametrach bariery i stanowi obliczeniowy dowód poprawności wyprowadzonej relacji. Parzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = 0$ ) charakteryzuje się największymi wartościami maksymalnymi entropii  $S_{1/2}$  i parametru  $\delta$  podczas interakcji z barierą. Krzywe wykazują wyraźny pik w obszarze interakcji, a następnie stopniowo dążą do wartości asymptotycznej. Nieparzysty stan kota Schrödingera ( $\theta = \pi$ ) osiąga mniejsze wartości maksymalne obu wielkości w porównaniu ze stanem parzystym, a wartości asymptotyczne są osiągane wyraźnie szybciej. Stan Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ) przejawia pośrednie zachowanie pod względem wartości maksymalnych, lecz charakteryzuje się istotną różnicą jakościową – wartość końcowa entropii (i parametru  $\delta$ ) jest mniejsza od wartości początkowej. Zmniejszenie to jest bezpośrednio związane z asymetryzacją stanu podczas interakcji z barierą, obserwowaną na rys. 3.3(f)–(h) oraz rys. 3.4(b). Asymetryzacja prowadzi do częściowej destrukcji wyrazu interferencyjnego w funkcji Wignera, który jest źródłem ujemnych wartości tej funkcji i tym samym nieklasyczności stanu.



Rysunek 3.7: Wpływ fazy względnej  $\theta$  na entropię Wignera-Rényiego rzędu  $\alpha = 1/2$  dla standardowych parametrów bariery. Wstawka przedstawia parametr nieklasyczności  $\delta(t)$ .

### 3.4.4 Wpływ wysokości bariery

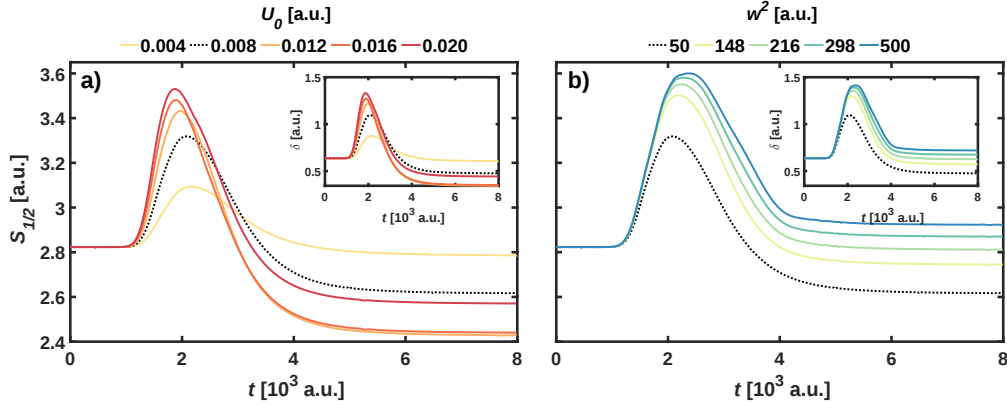
Rysunki 3.8, 3.9 i 3.10 przedstawiają wpływ wysokości bariery  $U_0$  i szerokości  $w$  na parametr nieklasyczności oraz entropię połówkową Wignera-Rényiego odpowiednio dla stanu parzystego, stanu Yurkego-Stolera i stanu nieparzystego.



Rysunek 3.8: Wpływ (a) parametru  $U_0$  oraz (b) parametru  $w^2$  na entropię Wignera-Rényiego  $S_{1/2}$  dla parzystego stanu kota Schrödingera ( $\theta = 0$ ). Wstawki przedstawiają parametr nieklasyczności  $\delta$ . Gruba przerywana czarna linia odpowiada wynikom dla standardowych parametrów bariery ( $U_0 = 0,008$  a.u.,  $w^2 = 50$  a.u.).

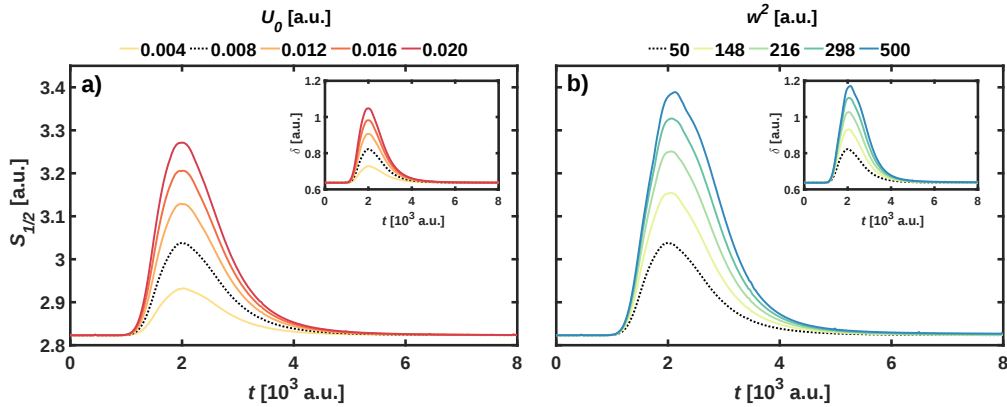
Dla parzystego stanu kota Schrödingera (Rysunek 3.8a) bariery wyższe niż  $U_0 = 0,012$  a.u. (tj. w reżimie podbarierowym) prowadzą do największych wartości szczytowych entropii  $S_{1/2}$  spośród wszystkich rozważanych stanów. Dla najniższej bariery  $U_0 = 0,004$  a.u. entropia nie tylko osiąga najmniejsze maksimum, ale także najszybciej dąży do stałej wartości końcowej. Co istotne, wartości początkowe i końcowe entropii są identyczne dla wszystkich wysokości bariery – parzysty stan kota Schrödingera zachowuje swoją symetrię niezależnie od siły oddziaływania z barierą. Wpływ szerokości bariery na dynamikę stanu parzystego (Rysunek 3.8b) wykazuje istotne różnice w porównaniu ze zmianą wysokości. Jedynie dla standardowych parametrów wartości początkowe i końcowe entropii są identyczne. Ze wzrostem szerokości bariery wartości końcowe entropii rosną względem początkowych, a im szersza bariera, tym szybciej entropia i parametr nieklasyczności osiągają stałą wartość asymptotyczną. Zwiększenie szerokości bariery skutkuje zatem stanem końcowym o większej nieklasyczności.

Dla stanu Yurkego-Stolera (Rysunek 3.9a) już przy standardowych parametrach bariery wartość końcowa entropii jest mniejsza od początkowej. Obniżenie bariery do  $U_0 = 0,004$  a.u. przybliży wartość końcową do początkowej, co sugeruje zachowanie początkowej symetrii stanu. Zwiększenie wysokości bariery prowadzi do większej asymetryzacji i tym samym większej różnicy między wartościami początkową i końcową. Dla  $U_0 = 0,020$  a.u. trend ulega odwróceniu – wartości końcowe zbliżają się do tych obserwowanych dla parametrów standardowych. Dla stanu Yurkego-Stolera (Rysunek 3.9b) zwiększenie szerokości bariery prowadzi do podobnego efektu jak dla stanu parzystego – wzrostu końcowej wartości entropii, co oznacza, że szersza bariera modyfikuje stopień asymetryzacji stanu. Obserwacje te wskazują, że asymetryzacja stanu Yurkego-Stolera może być kontrolowana przez parametry potencjału. Dla nieparzystego stanu kota Schrödingera (Rysunek 3.10a) wpływ wysokości bariery jest jakościowo podobny do stanu parzystego, z tą



Rysunek 3.9: Wpływ (a) parametru  $U_0$  oraz (b) parametru  $w^2$  na entropię Wignera-Rényiego  $S_{1/2}$  dla stanu Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ). Wstawki przedstawiają parametr nieklasyczności  $\delta$ . Gruba przerywana czarna linia odpowiada wynikom dla standardowych parametrów bariery.

różnicą, że wartości szczytowe entropii są systematycznie mniejsze. Oznacza to, że ewolucja nieparzystego stanu jest mniej nieklasyczna w porównaniu ze stanem parzystym dla tych samych parametrów bariery. Podobnie jak dla stanu parzystego, nieparzysty stan zachowuje początkową symetrię niezależnie od wysokości bariery. W przypadku stanu nieparzystego (Rysunek 3.10b) obserwuje się odmienne zachowanie. Niezależnie od szerokości bariery, wartości początkowe i końcowe entropii pozostają identyczne – początkowa symetria nieparzystego stanu jest zawsze zachowana po interakcji z barierą. W przeciwieństwie do stanu parzystego, dla nieparzystego stanu im szersza bariera, tym później entropia osiąga wartość asymptotyczną.



Rysunek 3.10: Wpływ (a) parametru  $U_0$  oraz (b) parametru  $w^2$  na entropię Wignera-Rényiego  $S_{1/2}$  dla nieparzystego stanu kota Schrödingera ( $\theta = \pi$ ). Wstawki przedstawiają parametr nieklasyczności  $\delta$ . Gruba przerywana czarna linia odpowiada wynikom dla standardowych parametrów bariery.

### 3.5 Wnioski

Przeprowadzona analiza dynamiki nieklasyczności stanów kwantowych w ujęciu przestrzenno-fazowym prowadzi do szeregu wniosków o znaczeniu zarówno fundamentalnym, jak i praktycznym.

Po pierwsze, wykazano ścisły związek między entropią Wignera-Rényiego rzędu  $\alpha = 1/2$  a parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego, wyrażony zależnością (3.23). Związek ten nie tylko potwierdza spójność obu miar nieklasyczności, ale także dostarcza interpretacji entropii połówkowej jako miary nieklasyczności.

Po drugie, systematyczna analiza dynamiki stanów kota Schrödingera ujawnia fundamentalną rolę symetrii stanu początkowego w procesie rozpraszania na barierze potencjału. Stany parzyste i nieparzyste zachowują tę symetrię niezależnie od parametrów bariery, co przejawia się w identycznych wartościach początkowych i końcowych entropii oraz parametru nieklasyczności. Stan Yurkego-Stolera, pozbawiony określonej parzystości, ulega asymetryzacji podczas oddziaływania z barierą, co prowadzi do częściowej destrukcji wyrazu interferencyjnego i zmniejszenia nieklasyczności stanu końcowego. Obserwacja ta ma potencjalne implikacje dla inżynierii stanów kwantowych – dobór odpowiedniej fazy względnej superpozycji oraz parametrów potencjału umożliwia kontrolowanie stopnia nieklasyczności stanów po procesie rozpraszania.

Po trzecie, wykazano uniwersalność rodziny entropii Wignera-Rényiego jako narzędzia do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca. Zdefiniowana topologiczna liczba kwantowa (3.8), oparta na pochodnych całkowitej entropii Wignera-Rényiego, poprawnie identyfikuje punkt przejścia między izolatorem topologicznym a izolatorem pasmowym dla różnych indeksów Rényiego. Podejście przestrzenno-fazowe ma przewagę nad metodami opartymi na względnej entropii Rényiego, gdyż funkcja Wignera zawiera pełną informację o macierzy gęstości, włącznie z korelacjami położenie-pęd indukowanymi przez zewnętrzne pole magnetyczne.

Przedstawione wyniki wskazują na entropię Wignera-Rényiego jako wszechstronne narzędzie do badania właściwości kwantowych układów fizycznych – od dynamiki nieklasyczności w procesach rozpraszania, poprzez charakterystykę topologicznych przejść fazowych, aż po potencjalne zastosowania w detekcji efektów kwantowych w układach biologicznych, co zostanie rozwinięte w rozdziale 4.



## Rozdział 4

# Tunelowanie protonu w DNA pod wpływem pola elektromagnetycznego

Are the laws of atomic and quantum physics  
of essential importance for life?

---

*Ernst Pascual Jordan [123]*

Niniejszy rozdział przedstawia wyniki badań nad dynamiką kwantową transferu protonu w parze zasad adenina-tymina (A–T) struktury DNA pod wpływem promieniowania elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni. Prezentowane badania oparte są na podejściu przestrzenno-fazowym wykorzystującym równanie Moyal’a dla funkcji Wignera i stanowią zastosowanie formalizmu przedstawionego w Rozdziale 2. Centralnym zagadnieniem jest analiza wpływu zmiennego w czasie pola elektrycznego na prawdopodobieństwo tunelowania protonu przez barierę potencjału między minimami energetycznymi formy kanonicznej oraz tautomerycznej pary zasad. Rozdział otwiera Sekcja 4.1, w której przedstawiono model teoretyczny badanego układu. Omówiono efektywny potencjał podwójnej studni opisujący stany energetyczne formy kanonicznej i tautomerycznej w parze zasad A–T. Następnie wyprowadzono postać zaburzenia wywołanego promieniowaniem elektromagnetycznym w przybliżeniu dipolowym oraz omówiono dynamiczne miary charakteryzujące proces tunelowania: dynamiczny współczynnik tunelowania i entropię połówkową Wignera-Rényiego. Sekcja 4.2 zawiera opis metodologii obliczeń numerycznych. W Sekcji 4.3 przeanalizowano dynamikę tunelowania protonu w nieobecności pola zewnętrznego. Wyznaczono widmo mocy amplitudy współczynnika tunelowania i zidentyfikowano piki spektralne odpowiadające przejściom między stanami własnymi ponad barierą potencjału. Sekcja 4.4 prezentuje główne wyniki dotyczące wpływu pola elektromagnetycznego na proces tunelowania. Zbadano modyfikację profilu potencjału przez oscylujące pole elektryczne, wprowadzono formalizm stanów Floqueta opisujący układ periodycznie zaburzany oraz przeprowadzono systematyczną analizę zależności współczynnika tunelowania oraz entropowej miary nieklasyczności od częstotliwości i amplitudy promieniowania podczerwonego w zakresie 10–18 THz.

## 4.1 Model teoretyczny układu

Struktura DNA, odkryta w 1953 roku [54, 55], opiera się na precyzyjnym parowaniu zasad azotowych poprzez wiązania wodorowe: adeniny z tyminą (A–T) oraz guaniny z cytozyną (G–C). Poprawne parowanie zasad jest fundamentalne dla przechowywania informacji genetycznej oraz procesu replikacji DNA. Jednakże, jak zasugerował Löwdin [57] około dekadę po odkryciu struktury DNA, zasady azotowe mogą występować w formach tautomerycznych, będących izomerami strukturalnymi różniącymi się położeniem protonów w wiązaniach wodorowych. Tautomeryzacja zachodzi wskutek spontanicznej migracji atomu wodoru (protonu) wzdłuż wiązania wodorowego łączącego zasady w parze. Proces ten, jest postrzegany jako tunelowanie kwantowe i może prowadzić do powstania form tautomerycznych  $A^*-T^*$ , które podczas replikacji DNA mogą powodować nieprawidłowe parowanie zasad, skutkując mutacjami punktowymi o potencjalnie mutagennych właściwościach. W prezentowanych badaniach zastosowano podejście przestrzenno-fazowe do opisu dynamiki protonu w parze zasad A–T. Model jednowymiarowy charakteryzowany jest przez symbol Weyla jednocząstkowego efektywnego hamiltonianu, którego postać jest zgodna z klasycznym odpowiednikiem:

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m_p} + U(x, t), \quad (4.1)$$

gdzie  $m_p$  oznacza masę protonu,  $p$  jest pędem,  $x$  położeniem, a  $U(x, t)$  energią potencjalną. Energia potencjalna składa się z dwóch wyrazów:

$$U(x, t) = U_b(x) + U_e(x, t), \quad (4.2)$$

gdzie  $U_b(x)$  reprezentuje energię potencjalną wiążącą, natomiast  $U_e(x, t)$  opisuje zależne od czasu zaburzenie wywołane promieniowaniem elektromagnetycznym. Część wiążącą  $U_b(x)$  przyjęto w postaci wielomianu czwartego stopnia, zgodnie z wynikami obliczeń DFT [52]:

$$U_b(x) = \sum_{i=0}^4 a_i \xi^i \quad (4.3)$$

gdzie wprowadzono bezwymiarową współrzędną  $\xi = x/\alpha$ , a parametr  $\alpha$  reprezentuje połowę odległości między minimami energii potencjalnej. Taka parametryzacja pozycjonuje minima w punktach  $\xi = \pm 1$ . Energia potencjalna (4.3) ma charakterystyczną strukturę asymetrycznej podwójnej studni potencjału: głębsza studnia odpowiada kanonicznemu stanowi A–T, natomiast płytsza – tautomerycznemu  $A^*-T^*$  [52]. Bariera potencjału separująca obie studnie stanowi przeszkodę, przez którą proton może tunelować. Wartości numeryczne współczynników  $a_i$  oraz parametru skalującego  $\alpha$  zestawiono w Tabeli 4.1. Parametr skalujący  $\alpha$  wyznaczono numerycznie poprzez porównanie obliczonych poziomów energetycznych z wartościami referencyjnymi podanymi w pracy [52]. Rozwiązując bezwymiarowe równanie Schrödingera niezależne od czasu:

$$\hat{H}_0 |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle, \quad \hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_p\alpha^2} \frac{d^2}{d\xi^2} + U_b(\xi), \quad (4.4)$$

metodą różnic skończonych na siatce przestrzennej  $x \in [-4.5, 4.5]$  a.u., określono optymalną wartość  $\alpha = 1.963$  a.u., dla której błąd procentowy względem ośmiu referencyjnych poziomów energetycznych nie

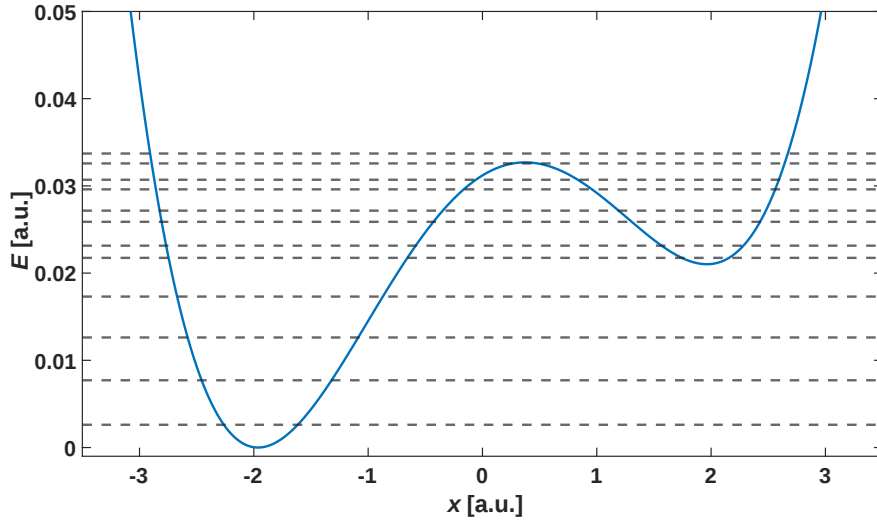
Tabela 4.1: Parametry potencjału wiążącego w jednostkach atomowych. Wartości współczynników  $a_i$  pochodzą z obliczeń DFT [52], parametr skalujący  $\alpha$  wyznaczono numerycznie przez dopasowanie do widma energetycznego.

| Parametr | Wartość [a.u.] |
|----------|----------------|
| $\alpha$ | 1.963          |
| $a_4$    | 0.0207         |
| $a_3$    | -0.0053        |
| $a_2$    | -0.0414        |
| $a_1$    | 0.0158         |
| $a_0$    | 0.0312         |

przekracza 0.2%. Analiza struktury stanów własnych, zilustrowanych na rys. 4.1, ujawnia istotne właściwości układu (por. tab. 4.2). Pierwsze pięć stanów własnych ( $k = 0, \dots, 4$ ) jest całkowicie zlokalizowanych w głębszej studni potencjału, odpowiadającej kanonicznemu stanowi A-T. Stan szósty ( $k = 5$ ) jest pierwszym stanem posiadającym niezerowe prawdopodobieństwo obecności w płytszej studni (reprezentującej stan tautomeryczny A\*-T\*). Stany  $k = 5$  i  $k = 6$  oraz  $k = 7$  i  $k = 8$  tworzą charakterystyczne dublety tunelowe. Dwunasty stan własny ( $k = 11$ ) o energii  $E_{11} = 0.03371$  a.u. (0.917 eV) jest pierwszym stanem leżącym powyżej bariery potencjału.

Tabela 4.2: Energie pierwszych dwunastu stanów własnych potencjału wiążącego. Stany od  $k = 0$  do  $k = 4$  są zlokalizowane w głębszej studni (forma kanoniczna), stany  $k = 5$  i  $k = 6$  oraz  $k = 7$  i  $k = 8$  tworzą dublety tunelowe, natomiast stan  $k = 11$  jest pierwszym stanem ponad barierą potencjału.

| Poziom $k$ | Energia [a.u.] | Energia [eV] |
|------------|----------------|--------------|
| 0          | 0.00261        | 0.071        |
| 1          | 0.00771        | 0.210        |
| 2          | 0.01262        | 0.343        |
| 3          | 0.01731        | 0.471        |
| 4          | 0.02175        | 0.592        |
| 5          | 0.02315        | 0.630        |
| 6          | 0.02588        | 0.704        |
| 7          | 0.02716        | 0.739        |
| 8          | 0.02960        | 0.806        |
| 9          | 0.03070        | 0.836        |
| 10         | 0.03258        | 0.886        |
| 11         | 0.03371        | 0.917        |



Rysunek 4.1: Profil wiążącej energii potencjalnej  $U_b(x)$  w postaci asymetrycznej podwójnej studni w jednostkach atomowych. Liniami poziomymi zaznaczono energie pierwszych dwunastu stanów własnych. Głębsza studnia (po lewej stronie) odpowiada kanonicznemu stanowi A–T, natomiast płytsza studnia (po prawej) – stanowi tautomerycznemu A\*–T\*. Asymetryczna bariera potencjału znajduje się w okolicy  $x \approx 0$ , jednakże jej maksimum nie leży dokładnie w zerze.

#### 4.1.1 Oddziaływanie z promieniowaniem elektromagnetycznym

Umieszczenie struktury DNA w obszarze zależnego od czasu pola elektromagnetycznego modyfikuje profil energii potencjalnej tunelującego protonu. Oddziaływanie protonu ze składową elektryczną promieniowania opisuje wyraz  $U_e(x, t)$  w równaniu (4.2), który można wyznaczyć z zależności:

$$\frac{dU_e(x; t)}{dx} = -qE(x; t), \quad (4.5)$$

gdzie  $q = +e$  jest ładunkiem protonu, a  $E(x; t)$  oznacza zależną od czasu składową pola elektrycznego promieniowania elektromagnetycznego. Dla fali płaskiej pole elektryczne przyjmuje postać

$$E(x; t) = E_0 \sin \left( \Omega t + \frac{2\pi}{\lambda} x \right), \quad (4.6)$$

gdzie  $E_0$  jest amplitudą pola elektrycznego,  $\Omega = 2\pi\nu$  częstością kołową,  $\nu$  częstotliwością, a  $\lambda$  długością fali promieniowania. Częstotliwość i długość fali związane są zależnością  $\nu = c/\lambda$ , gdzie  $c$  oznacza prędkość światła. Całkując równanie (4.5), otrzymujemy energię potencjalną oddziaływania:

$$U_e(x, t) = qE_0 \frac{\lambda}{2\pi} \left[ \cos \left( \Omega t + \frac{2\pi}{\lambda} x \right) - 1 \right]. \quad (4.7)$$

W prezentowanych badaniach rozważane jest promieniowanie podczerwone (IR) w zakresie THz. Wybór tego zakresu spektralnego podyktowany jest faktem, że promieniowanie IR, w przeciwieństwie do promieniowania ultrafioletowego, rentgenowskiego czy  $\gamma$ , nie powoduje bezpośrednich uszkodzeń strukturalnych DNA [124, 125, 126]. Promieniowanie o wyższych energiach prowadzi do modyfikacji zasad i może skutkować niestabilnością genomową [127, 128, 129, 130, 131]. Długości fal promieniowania IR mieszczą się w zakresie od  $10^5$  do  $10^2$  nm, co znacząco przekracza typowy wymiar obszaru transferu protonu  $d$ , który

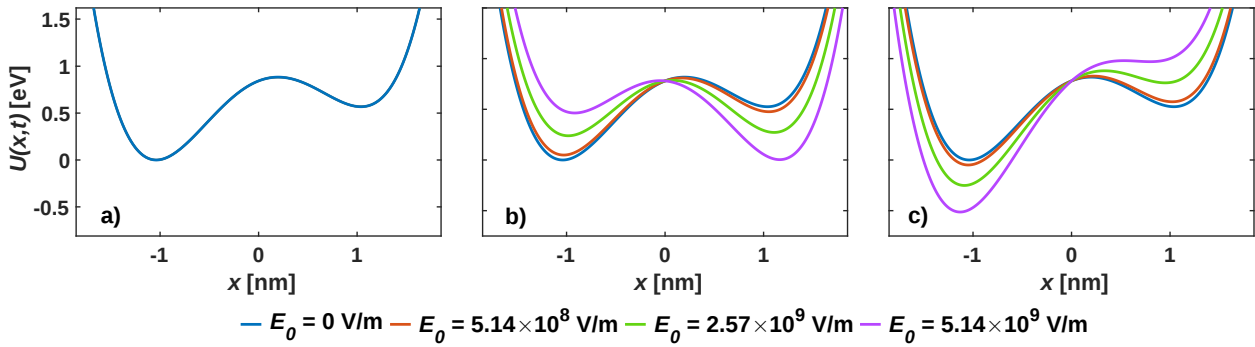
jest rzędu pojedynczych angstromów. Wobec faktu, że  $\lambda \gg d$  uzasadnione jest zastosowanie przybliżenia dipolowego, w którym wyrażenie (4.7) upraszcza się do postaci:

$$U_e(x, t) \approx -qE_0x \sin(\Omega t). \quad (4.8)$$

W przybliżeniu dipolowym potencjał oddziaływania jest liniowy względem położenia i oscyluje sinusoidalnie w czasie. Całkowity potencjał  $U(x, t) = U_b(x) + U_e(x, t)$  staje się zatem periodyczną funkcją czasu

$$U(x, t + T) = U(x, t), \quad T = \frac{2\pi}{\Omega} = \frac{1}{\nu}. \quad (4.9)$$

Rysunek 4.2 ilustruje wpływ oscylującego pola elektrycznego na profil potencjału całkowitego w trzech charakterystycznych chwilach czasowych. W chwili  $t = 0$  (por rys. 4.2(a)), przy której pole elektryczne jest zerowe zgodnie z (4.8), wszystkie profile pokrywają się z profilem energii wiążącej  $U_b(x)$ , wykazując charakterystyczną strukturę podwójnej studni z głębszym minimum po lewej stronie (stan kanoniczny A–T) i płytszym po prawej (stan tautomeryczny A\*–T\*). W chwili  $t = T/4$  (panel (b)), gdy  $\sin(\Omega t) = 1$ , wyraz  $-qE_0x$  osiąga maksymalną wartość ujemną dla  $x > 0$ , co prowadzi do obniżenia prawej studni i podniesienia lewej – efekt ten jest tym silniejszy, im większa jest amplituda  $E_0$ . W chwili  $t = 3T/4$  (panel (c)) sytuacja jest odwrotna:  $\sin(\Omega t) = -1$ . Powoduje to podniesienie prawej studni i obniżenie lewej. Te periodyczne deformacje profilu potencjału, szczególnie widoczne dla  $E_0 = 5.14$  V/nm (krzywa fioletowa), bezpośrednio wpływają na dynamikę transferu protonu między stanami kanonicznym i tautomerycznym. Rysunek 4.2 ilustruje wpływ oscylującego pola elektrycznego na profil potencjału całkowitego. W chwili



Rysunek 4.2: Ewolucja czasowa profilu całkowitej energii potencjalnej  $U(x, t)$  pod wpływem pola IR o częstotliwości  $\nu = 10^{13}$  Hz. Panele pokazują profile dla trzech charakterystycznych chwil czasowych: (a)  $t = 0$ , (b)  $t = T/4$ , (c)  $t = 3T/4$ , gdzie  $T = 1/\nu$  jest okresem oscylacji. Poszczególne krzywe odpowiadają różnym amplitudom pola:  $E_0 = 0$  (niebieski),  $E_0 = 0.51$  V/nm (pomarańczowy),  $E_0 = 2.57$  V/nm (żółty),  $E_0 = 5.14$  V/nm (fioletowy).

$t = 0$ , przy braku pola elektrycznego ( $E_0 = 0$ ), potencjał wykazuje charakterystyczną strukturę podwójnej studni. Wzrost amplitudy pola elektrycznego w zakresie od 0.51 do 5.14 V/nm, zgodnie z parametrami stosowanymi w badaniach tunelowania w stałych polach elektrycznych [64], prowadzi do progresywnej modyfikacji profilu potencjału. W chwilach  $t = T/4$  i  $t = 3T/4$  obserwuje się asymetryczne deformacje, które bezpośrednio wpływają na dynamikę transferu protonu między stanami kanonicznym i tautomerycznym.

### 4.1.2 Dynamiczne miary tunelowania

Do ilościowej analizy procesu tunelowania protonu wprowadza się dwie komplementarne miary dynamiczne: dynamiczny współczynnik tunelowania oraz entropię Wignera-Rényiego. Zgodnie z pracą [109], dynamiczny współczynnik tunelowania można zdefiniować jako prawdopodobieństwo znalezienia protonu po prawej stronie bariery potencjału:

$$P(t) = \int_{\mathbb{R}} \int_{x_P}^{\infty} dx dp \varrho(x, p; t), \quad (4.10)$$

gdzie  $x_P$  oznacza położenie lokalnego maksimum bariery potencjału separującej dwie asymetryczne studnie, a  $\varrho(x, p; t)$  jest funkcją Wignera opisującą stan protonu. Nieklasyczne właściwości stanu kwantowego charakteryzuje połówkowa entropia Wignera-Rényiego, zdefiniowana zgodnie z równaniem (3.3), a mianowicie:

$$S_{1/2}(t) = 2 \ln \left( \int_{\mathbb{R}^2} dx dp |\varrho(x, p; t)| \right) + \ln(2\pi\hbar). \quad (4.11)$$

Jak wykazano, zwiększona ujemność funkcji Wignera, wyrażająca się większą wartością entropii  $S_{1/2}$ , jest skorelowana ze zwiększoną zdolnością stanu kwantowego do tunelowania przez barierę potencjału [132]. Entropia Wignera-Rényiego stanowi zatem komplementarną do dynamicznego współczynnika transmisji miarę potencjału tunelowego stanu kwantowego.

## 4.2 Metodologia obliczeń

Ewolucja czasowa funkcji Wignera  $\varrho(x, p; t)$  opisującej stan protonu wyznaczana jest przez rozwiązanie zagadnienia początkowego dla równania Moyala (por. równanie (2.49) w Sekcji 2.3)

$$\begin{cases} \partial_t \varrho(x, p; t) = \{H(x, p, t), \varrho(x, p; t)\}_M, & t > 0, \\ \varrho(x, p; 0) = \varrho_0(x, p), \end{cases} \quad (4.12)$$

gdzie  $\{\cdot, \cdot\}_M$  oznacza nawias Moyala, a  $H(x, p, t)$  jest symbolem Weyla jednocząstkowego hamiltonianu (4.1). Nawias Moyala dla rozważanego hamiltonianu przyjmuje postać operatora różniczkowego:

$$\{H(x, p, t), \cdot\}_M = -\frac{p}{m_p} \partial_x + \frac{1}{i\hbar} \left[ U \left( x + \frac{i\hbar}{2} \partial_p, t \right) - U \left( x - \frac{i\hbar}{2} \partial_p, t \right) \right], \quad (4.13)$$

gdzie potencjał  $U(x, t) = U_b(x) + U_e(x, t)$  obejmuje zarówno wyraz wiążący (4.3), jak i zaburzenie elektromagnetyczne (4.8). Numeryczne rozwiązanie równania Moyala z energią potencjalną zależnym od czasu uzyskuje się metodą split-operator drugiego rzędu, szczegółowo opisaną w Sekcji 2.4.1. Operator ewolucji czasowej aproksymuje się korzystając z symetrycznej faktoryzacji Stranga

$$\hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) = \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{U}(t_0 + \Delta t/2) \Delta t \right) \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} \hat{T} \Delta t \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (4.14)$$

gdzie operatory kinetyczny  $\hat{T}$  i potencjalny  $\hat{U}(t)$  zdefiniowane są zgodnie z (2.54)–(2.55). Pojedynczy krok czasowy propagacji funkcji Wignera realizowany jest według algorytmu:

$$\begin{aligned} \varrho(x, p; t_0 + \Delta t) &\approx \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m_p \hbar} \lambda p\right) \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} \\ &\times \mathcal{F}_{2, y \rightarrow p}^{-1} \exp\left(\frac{i\Delta t}{\hbar} U_{\Delta}\left(x, y; t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) \mathcal{F}_{2, p \rightarrow y} \\ &\times \mathcal{F}_{1, \lambda \rightarrow x}^{-1} \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m_p \hbar} \lambda p\right) \mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t_0), \end{aligned} \quad (4.15)$$

gdzie  $\mathcal{F}_{1, x \rightarrow \lambda}$  i  $\mathcal{F}_{2, p \rightarrow y}$  oznaczają cząstkowe transformaty Fouriera względem pierwszej i drugiej zmiennej, odpowiednio, a funkcja pomocnicza  $U_{\Delta}(x, y; t)$  zdefiniowana jest jako różnica centralna potencjałów:

$$U_{\Delta}(x, y; t) = U\left(x + \frac{y}{2}; t\right) - U\left(x - \frac{y}{2}; t\right). \quad (4.16)$$

Przestrzeń fazowa jest ograniczona do prostokątnego pudła  $[-L_x, L_x] \times [-L_p, L_p]$  z periodycznymi warunkami brzegowymi wymuszonymi przez zastosowanie szybkiej transformaty Fouriera (FFT). Wymiary pudła dobrano tak, aby funkcja Wignera zanikała w pobliżu granic przez cały czas symulacji. Dyskretyzacja przestrzeni fazowej realizowana jest na siatce o rozmiarze  $N_x \times N_p$ :

$$x_m = -L_x + m\Delta_x, \quad m \in \{0, 1, \dots, N_x - 1\}, \quad (4.17)$$

$$p_n = -L_p + n\Delta_p, \quad n \in \{0, 1, \dots, N_p - 1\}, \quad (4.18)$$

gdzie kroki siatki wynoszą  $\Delta_x = 2L_x/N_x$  i  $\Delta_p = 2L_p/N_p$ . Pełne zestawienie parametrów siatki obliczeniowej przedstawiono w Tabeli 4.3.

Tabela 4.3: Parametry siatki obliczeniowej stosowane w symulacjach numerycznych. Wszystkie obliczenia wykonano w jednostkach atomowych ( $\hbar = e = m_e = 1$ ).

| Parametr                          | Wartość  |
|-----------------------------------|----------|
| Krok czasowy $\Delta t$           | 10 a.u.  |
| Rozmiar przestrzeni położeń $L_x$ | 4.5 a.u. |
| Rozmiar przestrzeni pędów $L_p$   | 20 a.u.  |
| Rozdzielczość siatki $N_x = N_p$  | 1024     |

#### 4.2.1 Warunek początkowy

Jako warunek początkowy przyjęto funkcję Wignera odpowiadającą gaussowskiemu pakietowi falowemu zlokalizowanemu w głębszej studni potencjału

$$\varrho_0(x, p) = \frac{1}{\pi \hbar} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\delta_x^2} - \frac{2\delta_x^2(p - p_0)^2}{\hbar^2}\right], \quad (4.19)$$

gdzie  $x_0 = -1.927$  a.u. jest położeniem środka pakietu,  $p_0 = 0$  jest średnim pędem, a  $\delta_x = 0.229$  a.u. jest szerokością pakietu w przestrzeni położeń. Parametry te zostały dobrane tak, aby zminimalizować wartość oczekiwaną energii całkowitej. Uzyskana wartość  $\langle E \rangle = 0.00262$  a.u. jest bardzo bliska energii stanu podstawowego  $E_0 = 0.00261$  a.u. (por. tab. 4.2), co zapewnia, że stan początkowy jest niemal stacjonarny i zlokalizowany w studni odpowiadającej formie kanonicznej A–T.

### 4.3 Dynamika tunelowania bez zaburzeń zewnętrznych

Analiza dynamiki tunelowania protonu w nieobecności pola zewnętrznego ( $U_e(x, t) = 0$ ) stanowi punkt wyjścia do zrozumienia wpływu promieniowania elektromagnetycznego na ten proces. W tym przypadku hamiltonian jest niezależny od czasu, a stany własne potencjału wiążącego  $U_b(x)$  są dobrze określone.

#### 4.3.1 Rozkład funkcji Wignera na stany własne

Dla hamiltonianu niezależnego od czasu funkcja Wignera może być rozłożona na składowe związane ze stanami własnymi

$$\varrho(x, p; t) = \sum_k |a_k|^2 \varrho_k(x, p) + 2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_k \sum_{l>k} a_k a_l^* \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (E_k - E_l) t \right] \varrho_{kl}(x, p) \right\}, \quad (4.20)$$

gdzie  $a_k$  jest amplitudą prawdopodobieństwa związaną z  $k$ -tą znormalizowaną funkcją własną  $\phi_k(x)$ ,  $\varrho_k(x, p)$  reprezentuje stacjonarną część funkcji Wignera związaną z funkcją falową  $\phi_k(x)$ , a  $\varrho_{kl}(x, p)$  jest krzyżową funkcją Wignera zdefiniowaną jako:

$$\varrho_{kl}(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{\mathbb{R}} dX \phi_k^* \left( x - \frac{X}{2} \right) \phi_l \left( x + \frac{X}{2} \right) \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} pX \right]. \quad (4.21)$$

#### 4.3.2 Widmo mocy współczynnika tunelowania

Dynamiczny współczynnik tunelowania  $P(t)$  wykazuje nieregularne oscylacje w czasie (por. rys. 4.4), których natura może być wyjaśniona przez analizę widma mocy. Amplitudę widma mocy definiuje się jako okienkowaną transformatę Fouriera, w następujący sposób:

$$\Pi(\omega) := \int_{\mathbb{R}} dt P(t) \exp(-i\omega t) [\Theta(t) - \Theta(t - t_{\max})] = \int_0^{t_{\max}} dt P(t) \exp(-i\omega t), \quad (4.22)$$

gdzie  $\omega = 2\pi\nu$  to częstość,  $t_{\max}$  jest czasem trwania symulacji numerycznej, a  $\Theta(\cdot)$  oznacza funkcję Heaviside'a. Podstawiając rozkład (4.20) do definicji współczynnika tunelowania (4.10), a następnie wykonując transformatę Fouriera (4.22), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \Pi(\omega) = & t_{\max} \exp \left( -\frac{i\omega t_{\max}}{2} \right) \sum_k |a_k|^2 P_k \operatorname{sinc} \left( \frac{\omega t_{\max}}{2} \right) \\ & + t_{\max} \exp \left( -\frac{i\omega t_{\max}}{2} \right) \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l}} a_k^* a_l P_{kl} \exp \left( \frac{i\omega_{kl} t_{\max}}{2} \right) \operatorname{sinc} \left( \frac{(\omega_{kl} - \omega) t_{\max}}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.23)$$

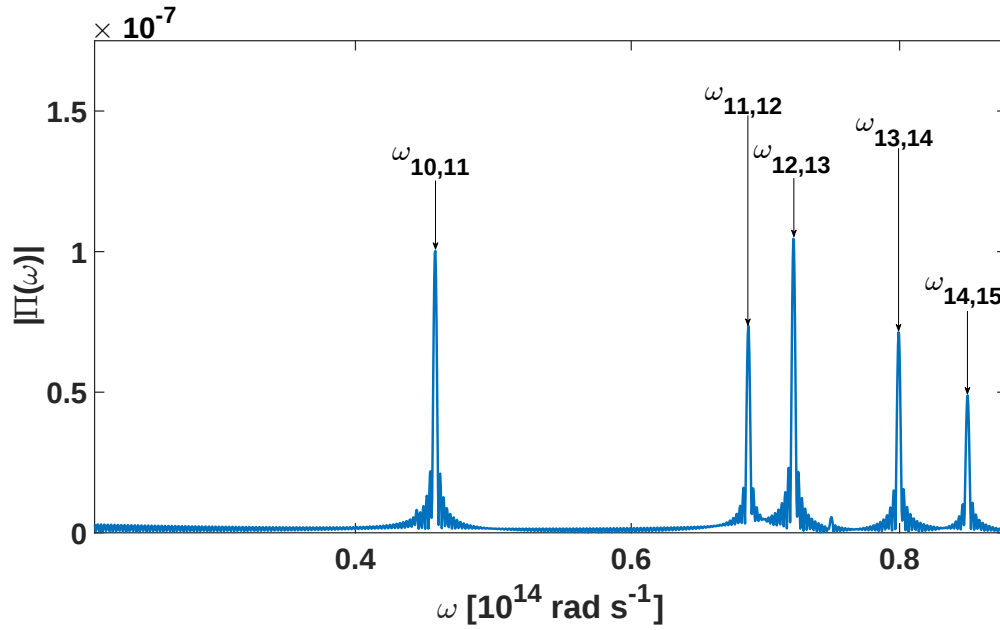
gdzie  $\omega_{kl} = (E_k - E_l)/\hbar$  jest częstością Bohra,  $\operatorname{sinc}(x) = \sin(x)/x$  jest funkcją sinus cardinalis, a wyraz  $P_{kl}$  zdefiniowany jest jako

$$P_{kl} := \int_{x_P}^{\infty} dx \phi_k(x) \phi_l^*(x). \quad (4.24)$$

Dla  $k = l$  otrzymujemy

$$P_k = \int_{x_P}^{\infty} dx |\phi_k(x)|^2 = \int_{x_P}^{\infty} dx n_k(x), \quad (4.25)$$

gdzie  $n_k(x)$  oznacza gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni rzeczywistej. Na podstawie wyprowadzo-



Rysunek 4.3: Amplituda widma mocy współczynnika tunelowania dynamicznego  $|\Pi(\omega)|$  jako funkcja częstości  $\omega$  w nieobecności pola zewnętrznego ( $E_0 = 0$ ). Piki spektralne zlokalizowane są przy częstościach Bohra  $\omega_{kl}$  odpowiadających przejściom między sąsiednimi stanami własnymi ponad barierą potencjału:  $\omega_{10,11}$ ,  $\omega_{11,12}$ ,  $\omega_{12,13}$ ,  $\omega_{13,14}$  oraz  $\omega_{14,15}$ .

nego wzoru (4.23) można sformułować następujące wnioski. Wyraz diagonalny widma  $\Pi(\omega)$  daje wkład do głównego piku spektralnego zlokalizowanego przy  $\omega = 0$ , reprezentującego stacjonarną składową współczynnika tunelowania. Z kolei wyraz pozadiagonalny odpowiada za powstawanie pików spektralnych przy odpowiednich częstościach  $\omega = \omega_{kl}$ , które odpowiadają przejściom między stanami o energiach  $E_k$  i  $E_l$ . Rysunek 4.3 przedstawia amplitudę widma mocy współczynnika tunelowania w nieobecności pola ze-

Tabela 4.4: Częstości Bohra  $\omega_{kl}$  [ $10^{14}$  rad s $^{-1}$ ] odpowiadające pikom spektralnym na rys. 4.3. Wszystkie przejścia zachodzą między stanami własnymi leżącymi powyżej bariery potencjału.

| Stan $ k\rangle$ | Stan $ l\rangle$ | $\omega_{kl}$ [ $10^{14}$ rad s $^{-1}$ ] |
|------------------|------------------|-------------------------------------------|
| 10               | 11               | 0.46                                      |
| 11               | 12               | 0.70                                      |
| 12               | 13               | 0.74                                      |
| 13               | 14               | 0.82                                      |
| 14               | 15               | 0.87                                      |

wewnętrznego (por. również rys. 4.4(a)). Wszystkie zidentyfikowane piki spektralne zlokalizowane są przy częstościach Bohra  $\omega_{kl}$  odpowiadających przejściom między stanami powyżej bariery potencjału (tab. 4.4). Wyraźnie widoczne są piki przy częstościach:  $\omega_{10,11} \approx 0.46 \times 10^{14}$  rad s $^{-1}$ ,  $\omega_{11,12} \approx 0.70 \times 10^{14}$  rad s $^{-1}$ ,  $\omega_{12,13} \approx 0.74 \times 10^{14}$  rad s $^{-1}$ ,  $\omega_{13,14} \approx 0.82 \times 10^{14}$  rad s $^{-1}$  oraz  $\omega_{14,15} \approx 0.87 \times 10^{14}$  rad s $^{-1}$ . Oznacza to, że w nieobecności pola elektrycznego oscylacje współczynnika tunelowania dynamicznego w czasie są

spowodowane transferem protonu między stanami własnymi podwójnej studni potencjału leżącymi ponad barierą.

## 4.4 Wpływ pola elektromagnetycznego na proces tunelowania

Włączenie czasowo-zależnego periodycznego pola elektrycznego,  $U_e(x, t+T) = U_e(x, t)$ , gdzie  $T = 2\pi/\Omega$  jest okresem oscylacji zmienia dynamikę protonu między studniami potencjału pary zasad DNA. W obecności takiego zaburzenia stany własne nie są już dobrze określone – zastępują je stany quasi-energetyczne wynikające z teorii Floqueta [133, 134].

### 4.4.1 Formalizm stanów Floqueta

Periodyczność energii potencjalnej (4.9) implikuje periodyczność hamiltonianu i odpowiedniego symbolu Weyla (4.1). W konsekwencji, do konstrukcji funkcji Wignera wykorzystuje się liniową kombinację modów Floqueta  $\chi_\alpha(x \pm X/2, t)$  w postaci:

$$\tilde{\phi}(x \pm X/2, t) = \sum_{\alpha=0}^{\infty} a_\alpha \chi_\alpha(x \pm X/2, t), \quad (4.26)$$

gdzie indeks  $\alpha$  numeruje mody Floqueta, które dane są wzorem:

$$\chi_\alpha(x \pm X/2, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \tilde{E}_\alpha t\right) u_\alpha(x \pm X/2, t), \quad (4.27)$$

przy czym  $\tilde{E}_\alpha = E_\alpha + m\hbar\Omega$  dla  $m \in \mathbb{Z}$  jest quasi-energią, a  $u_\alpha(x \pm X/2, t)$  jest funkcją  $T$ -periodyczną w postaci:

$$u_\alpha(x \pm X/2, t+T) = u_\alpha(x \pm X/2, t). \quad (4.28)$$

Funkcję  $u_\alpha$  można rozwinąć w szereg Fouriera

$$u_\alpha(x \pm X/2, t) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \tilde{u}_{\alpha,r}(x \pm X/2) \exp(i\Omega r t), \quad (4.29)$$

co prowadzi do następującej postaci modów Floqueta:

$$\chi_\alpha(x \pm X/2, t) = \sum_r \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{E}_\alpha - \hbar\Omega r\right) t\right] \tilde{u}_{\alpha,r}(x \pm X/2), \quad (4.30)$$

gdzie indeks  $r$  numeruje niezależne składowe należące do pojedynczego modu Floqueta oznaczonego przez  $\alpha$ .

### 4.4.2 Modyfikacja widma mocy przez pole zewnętrzne

Funkcja Wignera dla układu periodycznie zaburzanego przyjmuje postać

$$\tilde{\varrho}(x, p; t) = \sum_{\alpha,r} |a_\alpha|^2 \tilde{\varrho}_{\alpha r}(x, p) + \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ \alpha \neq \beta}} \sum_{\substack{r,s \\ r \neq s}} a_\alpha^* a_\beta \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(\tilde{E}_\alpha - \tilde{E}_\beta - \hbar\Omega(r-s)\right) t\right] \tilde{\varrho}_{\alpha r, \beta s}(x, p), \quad (4.31)$$

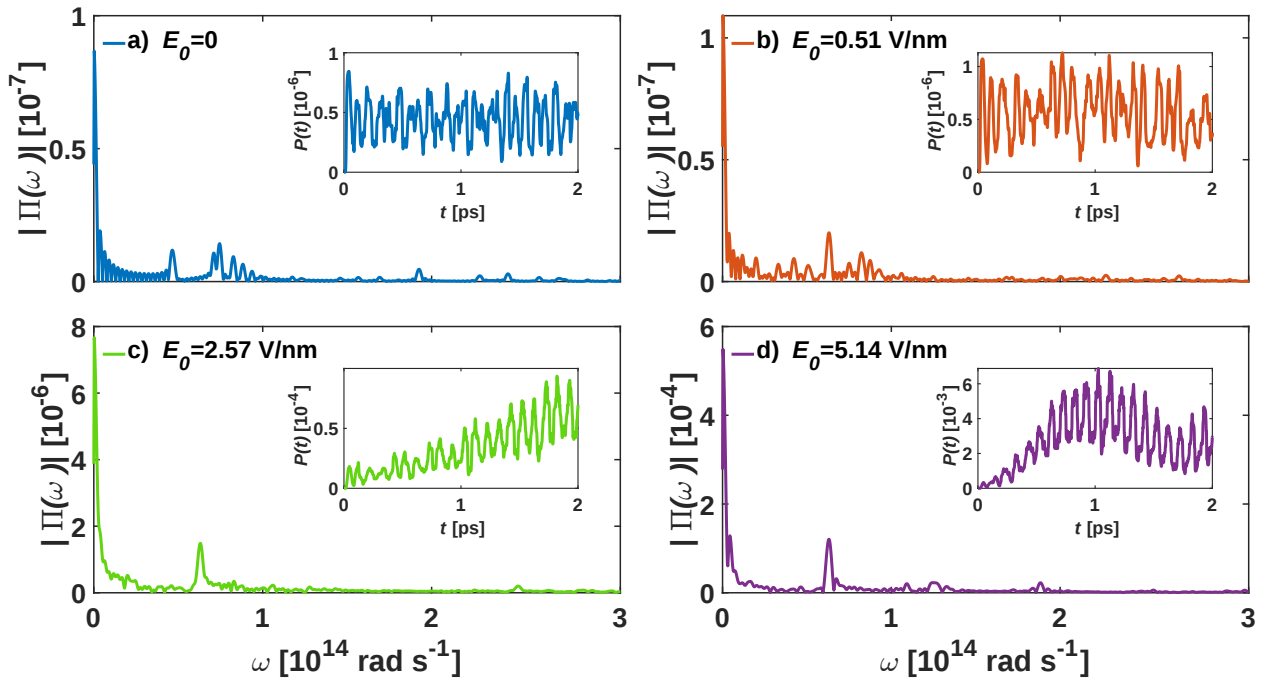
gdzie  $\tilde{\varrho}_{\alpha r, \beta s}(x, p)$  jest krzyżową funkcją Wignera zdefiniowaną analogicznie do (4.21) z funkcjami  $\tilde{u}_{\alpha, r}(\cdot, \cdot)$  i  $\tilde{u}_{\beta, s}(\cdot, \cdot)$ . Okienkowana transformata Fouriera współczynnika tunelowania dla układu zaburzonego przyjmuje wówczas postać

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}(\omega) = & t_{\max} \exp\left(-\frac{it_{\max}\omega}{2}\right) \sum_{\alpha, r} |a_{\alpha}|^2 \tilde{P}_{\alpha r} \operatorname{sinc}\left(\frac{t_{\max}\omega}{2}\right) \\ & + t_{\max} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha \neq \beta}} \sum_{\substack{r, s \\ r \neq s}} a_{\alpha}^* a_{\beta} \tilde{P}_{\alpha r, \beta s} \exp\left[\frac{i}{2\hbar} \left(\tilde{E}_{\alpha} - \tilde{E}_{\beta} - \hbar\Omega(r-s) - \hbar\omega\right) t_{\max}\right] \\ & \times \operatorname{sinc}\left[\frac{t_{\max}}{2\hbar} \left(\tilde{E}_{\alpha} - \tilde{E}_{\beta} - \hbar\Omega(r-s) - \hbar\omega\right)\right], \end{aligned} \quad (4.32)$$

gdzie wyrażenie  $\tilde{P}_{\alpha r, \beta s}$  jest dane wzorem:

$$\tilde{P}_{\alpha r, \beta s} = \int_{x_P}^{\infty} dx \tilde{u}_{\alpha, r}^*(x) \tilde{u}_{\beta, s}(x), \quad \tilde{P}_{\alpha r} = \int_{x_P}^{\infty} dx |\tilde{u}_{\alpha, r}(x)|^2. \quad (4.33)$$

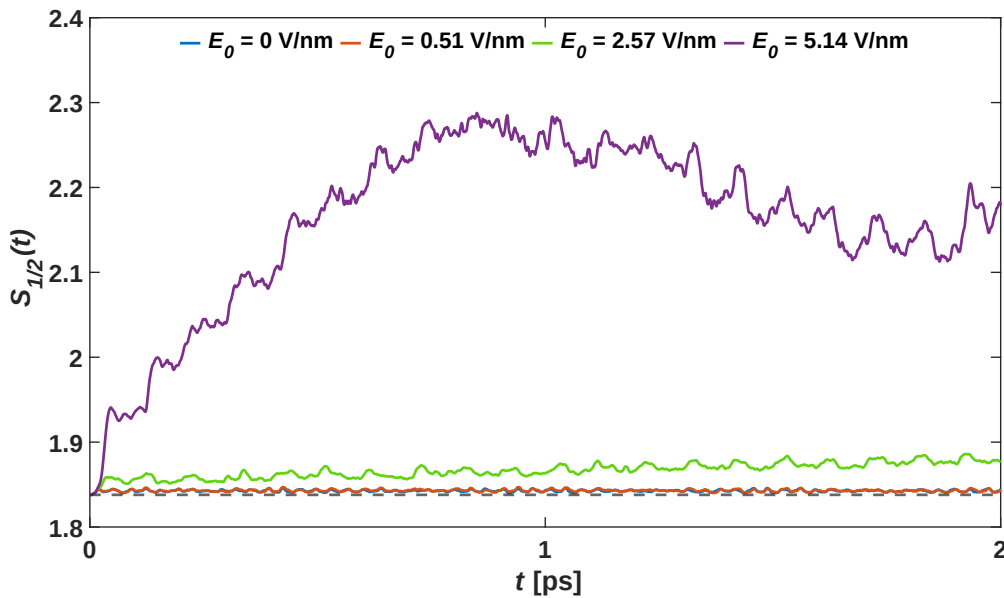
Porównanie wyrażeń (4.23) i (4.32) ujawnia różnice między przypadkiem bez zaburzenia i z zaburzeniem



Rysunek 4.4: Amplituda widma mocy współczynnika tunelowania dla różnych amplitud pola elektrycznego przy ustalonej częstotliwości  $\nu = 10$  THz: (a)  $E_0 = 0$  (brak pola), (b)  $E_0 = 0.51$  V/nm, (c)  $E_0 = 2.57$  V/nm, (d)  $E_0 = 5.14$  V/nm. Wstawki w każdym panelu pokazują współczynnik tunelowania  $P(t)$  jako funkcję czasu w pikosekundach.

periodycznym. W przypadku zaburzonym występuje dodatkowe sumowanie po składowych Fouriera należących do różnych modów Floqueta, a energie zastąpione są quasi-energiami. Ponadto, w argumentach funkcji wykładniczej i sinusa cardinalis pojawia się dodatkowy wyraz wynikający z modów Fouriera. Różnice te bezpośrednio wpływają na amplitudę widma mocy prawdopodobieństwa tunelowania: piki w widmie są przeskalowane i przesunięte przez oscylujące pole elektryczne w kierunku wyższych częstości, a dodatkowe

piki są rezultatem oddziaływania między składowymi modów Floqueta. Rysunek 4.4 ilustruje wpływ pola elektrycznego na widmo mocy współczynnika tunelowania oraz na sam współczynnik tunelowania  $P(t)$  (por. wstawki na rys. 4.4). W nieobecności pola ( $E_0 = 0$ , panel (a)) widmo wykazuje piki przy częstościach Bohra odpowiadających przejściom między stanami własnymi (por. rys. 4.3), a współczynnik tunelowania oscyluje wokół wartości ok.  $0.5 \times 10^{-6}$ . Włączenie słabego pola  $E_0 = 0.51$  V/nm (panel (b)) nie zmienia znacząco struktury widma ani amplitudy tunelowania. Dla  $E_0 = 2.57$  V/nm (panel (c)) obserwuje się poszerzenie struktury spektralnej, przesunięcie pików w kierunku wyższych częstości oraz wzrost amplitudy tunelowania do ok.  $0.5 \times 10^{-4}$ . Najsilniejsze pole, o amplitudzie  $E_0 = 5.14$  V/nm, (panel (d)) prowadzi do znacznych zmian: widmo staje się bogatsze w piki wynikające z oddziaływania składowych modów Floqueta, a współczynnik tunelowania wzrasta do wartości ok.  $6 \times 10^{-3}$ . Efekty te są bezpośrednią konsekwencją przejścia od opisu w terminach stanów własnych do opisu w terminach stanów quasi-energetycznych Floqueta, zgodnie z przewidywaniami teoretycznymi wyprowadzonymi w równaniu (4.32). Rysunek 4.5



Rysunek 4.5: Entropia Wignera-Rényiego rzędu  $1/2$  jako funkcja czasu dla różnych amplitud pola elektrycznego przy ustalonej częstotliwości IR  $\nu = 10$  THz:  $E_0 = 0$  (niebieski),  $E_0 = 0.51$  V/nm (pomarańczowy),  $E_0 = 2.57$  V/nm (żółty),  $E_0 = 5.14$  V/nm (fioletowy). Czarna linia przerywana wskazuje wartość entropii  $S_{1/2} \approx 1.84$  dla początkowego stanu gaussowskiego.

przedstawia ewolucję czasową połówkowej entropii Wignera-Rényiego  $S_{1/2}(t)$  dla różnych amplitud pola elektrycznego przy ustalonej częstotliwości IR,  $\nu = 10$  THz. Czarna linia przerywana wskazuje wartość entropii  $S_{1/2} \approx 1.84$  dla początkowego gaussowskiego stanu. W nieobecności pola zewnętrznego ( $E_0 = 0$ , krzywa niebieska) entropia pozostaje bliska wartości początkowej z niewielkimi oscylacjami. Włączenie pola elektrycznego o amplitudzie  $E_0 = 0.51$  V/nm (krzywa pomarańczowa) prowadzi do nieznacznego wzrostu entropii. Dla  $E_0 = 2.57$  V/nm (krzywa żółta) obserwuje się wyraźniejsze oscylacje z wartościami osiagającymi  $S_{1/2} \approx 1.95$ . Najsilniejsze pole  $E_0 = 5.14$  V/nm (krzywa fioletowa) powoduje wzrost entropii do wartości przekraczających  $S_{1/2} \approx 2.3$ , co świadczy o znacznym narastaniu nieklasyczności stanu. Zwiększona ujemność funkcji Wignera (co jest równoważne wyższej wartości entropii  $S_{1/2}$ ) jest skorelo-

wana ze zwiększoną zdolnością stanu kwantowego do tunelowania przez barierę [132]. Wyniki te wskazują, że zewnętrzne pole elektryczne może sterować nieklasycznymi właściwościami stanu, a zatem można wpływać na układ w celu zwiększenia jego zdolności tunelowych.

#### 4.4.3 Zależność współczynnika tunelowania od częstotliwości promieniowania IR

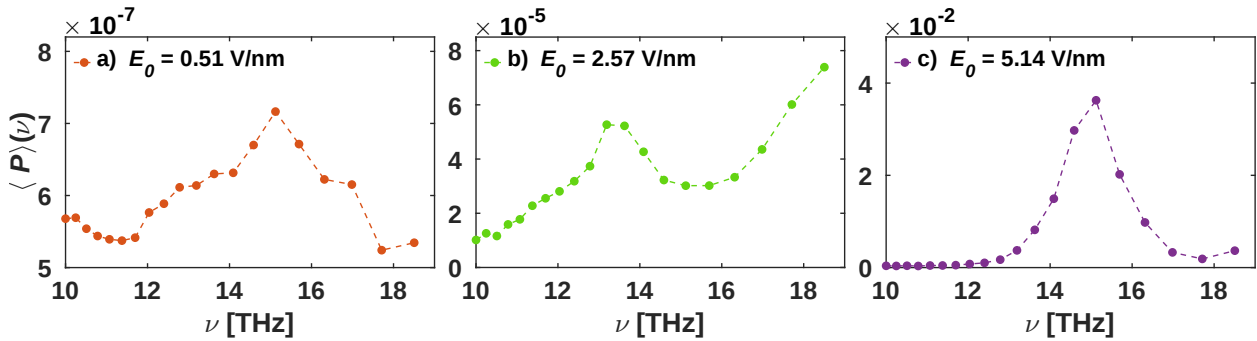
Dla ilościowej analizy wpływu promieniowania IR na tunelowanie protonu wprowadzono uśredniony po czasie współczynnik tunelowania

$$\langle P \rangle(\nu) = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} dt P(t; \nu), \quad (4.34)$$

gdzie  $t_{\max}$  jest czasem symulacji, a  $\nu$  częstotliwością pola elektrycznego. Analogicznie, uśrednioną entropię połówkową Wignera-Rényiego można zdefiniować jako

$$\langle S_{1/2} \rangle(\nu) = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} dt S_{1/2}(t; \nu). \quad (4.35)$$

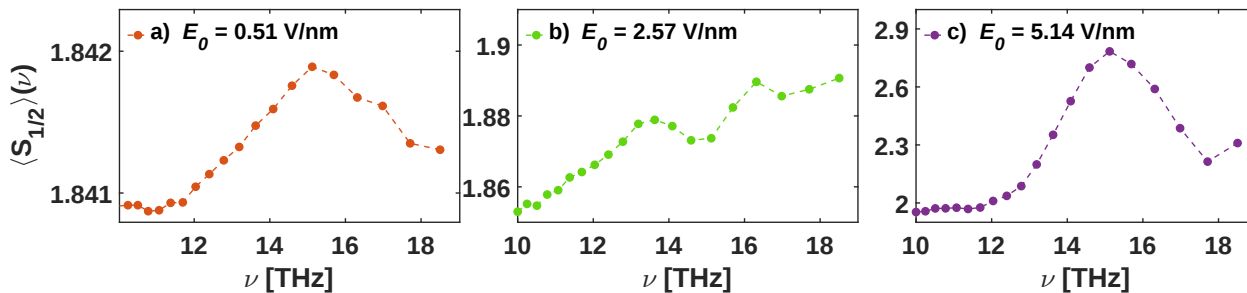
Wyniki przedstawione na rys. 4.6 i 4.7 ujawniają wyraźne zależności częstotliwościowe dla wszystkich badanych amplitud pola. Dla najsłabszego pola ( $E_0 = 0.51$  V/nm), por. rys. 4.6(a), współczynnik tunelowania wykazuje wariacje w zakresie  $4\text{--}8 \times 10^{-7}$ , z wyraźnym pikiem w okolicy  $\nu \approx 15$  THz. Przy wzroście amplitudy pola do  $E_0 = 2.57$  V/nm (rys. 4.6(b)) obserwuje się zwiększone prawdopodobieństwa tunelowania w zakresie  $0\text{--}8 \times 10^{-5}$ , przy czym maksimum nadal występuje przy około 15 THz. Dla najsilniejszego pola ( $E_0 = 5.14$  V/nm, rys. 4.6(c)) współczynnik tunelowania osiąga wartości do niemal  $4 \times 10^{-2}$  w okolicy 15 THz, co stanowi wzrost o pięć rzędów wielkości w porównaniu z najsłabszym polem. Uśredniona entropia Wignera-Rényiego (rys. 4.7) wykazuje wariacje z częstotliwością promieniowania IR



Rysunek 4.6: Uśredniony po czasie współczynnik tunelowania  $\langle P \rangle$  jako funkcja częstotliwości promieniowania IR w zakresie 10–18 THz dla trzech amplitud pola elektrycznego: (a)  $E_0 = 0.51$  V/nm (skala  $\times 10^{-7}$ ), (b)  $E_0 = 2.57$  V/nm (skala  $\times 10^{-5}$ ), (c)  $E_0 = 5.14$  V/nm (skala  $\times 10^{-2}$ ).

dla wszystkich rozważanych amplitud pola. Dla  $E_0 = 0.51$  V/nm (rys. 4.7(a)) zakres zmian entropii jest niewielki:  $\langle S_{1/2} \rangle \in (1.841, 1.842)$ . Wzrost amplitudy do  $E_0 = 2.57$  V/nm (rys. 4.7(b)) zwiększa zakres wariacji do  $\langle S_{1/2} \rangle \in (1.86, 1.90)$ . Dla najsilniejszego pola  $E_0 = 5.14$  V/nm (rys. 4.7(c)) entropia wykazuje znaczące zmiany w zakresie  $\langle S_{1/2} \rangle \in (2.0, 2.9)$ , z maksimum przy około 15 THz korelującym z maksimum współczynnika tunelowania. Ta korelacja między zwiększonymi wartościami entropii a zwiększonym współczynnikiem tunelowania potwierdza, że zewnętrzne pola elektromagnetyczne mogą być wykorzystane

do sterowania właściwościami koherencji kwantowej układu pary zasad DNA, a tym samym do kontroli zdolności tunelowych protonów między stanami kanonicznym i tautomerycznym.



Rysunek 4.7: Uśredniona po czasie entropia Wignera-Rényiego  $\langle S_{1/2} \rangle$  jako funkcja częstotliwości promieniowania IR w zakresie 10–18 THz dla trzech amplitud pola elektrycznego: (a)  $E_0 = 0.51$  V/nm, (b)  $E_0 = 2.57$  V/nm, (c)  $E_0 = 5.14$  V/nm.

#### 4.4.4 Wzmocnienie tunelowania i implikacje dla stabilności genetycznej

Dla najsilniejszej badanej amplitudy pola ( $E_0 = 5.14$  V/nm) dynamiczny współczynnik tunelowania osiąga wartości rzędu  $4 \times 10^{-2}$  w okolicy 15 THz. Stanowi to wzrost o kilka rzędów wielkości w porównaniu z wartościami bazowymi  $10^{-9}$ – $10^{-5}$  raportowanymi w poprzednich badaniach bez pól zewnętrznych [52]. Zidentyfikowanie optymalnego wzmocnienia tunelowania przy około 15 THz dla wszystkich badanych amplitud pola sugeruje zachowanie typu rezonansowego, które może być potencjalnie wykorzystane do kontrolowanej manipulacji tautomerizacją DNA. Wynik ten różni się od rezultatów uzyskanych w badaniach wykorzystujących statyczne pola elektryczne [64], co nie jest zaskakujące, ponieważ dynamika protonu w obecności zależnych od czasu pól podczerwonego staje się bardziej złożona ze względu na pojawienie się stanów quasi-energetycznych opisywanych przez formalizm Floqueta. Zdolność do wzmocnienia tunelowania protonów przy specyficznie dobranych częstotliwościach podczerwonych może nieść istotne implikacje dla zrozumienia, w jaki sposób promieniowanie może prowadzić do nieprawidłowego parowania zasad DNA. Podczas gdy promieniowanie podczerwone jest typowo uważane za mniej szkodliwe dla struktury DNA niż promieniowanie o wyższych energiach, prezentowane wyniki sugerują, że specyficzne zakresy częstotliwości mogą wpływać na częstość mutacji poprzez promowanie tautomerizacji.

## Rozdział 5

# Podsumowanie i perspektywy

The function of an expert is not to be more right than other people, but to be wrong for more sophisticated reasons.

---

*David Butler [135]*

Dynamika „małych” układów w skali nanometrowej, gdzie efekty kwantowe odgrywają fundamentalną rolę, wymaga zastosowania formalizmu mechaniki kwantowej. Jednocześnie pożądane jest zachowanie analogii do klasycznego opisu statystycznego, który dostarcza intuicyjnej interpretacji fizycznej. W niniejszej rozprawie wykazano, że formalizm przestrzenno-fazowy oparty na funkcji Wignera stanowi naturalne rozwiązanie tego problemu, umożliwiając ilościową charakterystykę zjawisk kwantowych w języku zbliżonym do mechaniki statystycznej.

W rozdziale 2 przedstawiono systematyczny opis dynamiki kwantowej w przestrzeni fazowej. Wyprowadzono równanie Moyala jako fazowo-przestrzenny odpowiednik równania von Neumanna, pokazując jak nieklasyczna struktura iloczynu Moyala prowadzi do poprawek kwantowych w ewolucji funkcji Wignera. Szczególną uwagę poświęcono metodom numerycznym rozwiązywania równania ewolucji, w tym spektralnej metodzie split-operator oraz algorytmom transformacji między macierzą gęstości a funkcją Wignera opartym na dekompozycji przez macierze ścinania. Przedstawiono również pełny algorytm rozwiązywania samouzgodnionego układu Moyala–Poissona.

W rozdziale 3 wprowadzono entropię Wignera-Rényiego. Wykazano uniwersalność rodziny entropii Wignera-Rényiego jako narzędzia do charakteryzacji topologicznych przejść fazowych w dwuwymiarowych materiałach Diraca na przykładzie silicenu. Zdefiniowana topologiczna liczba kwantowa, oparta na pochodnych całkowitej entropii Wignera-Rényiego, poprawnie identyfikuje punkt przejścia między izolatorem topologicznym a izolatorem pasmowym dla różnych indeksów Rényiego, co potwierdza skuteczność podejścia przestrzenno-fazowego w fizyce ciała stałego. Ponadto, wykazano ścisły związek między entropią połówkową ( $\alpha = 1/2$ ), a parametrem nieklasyczności Kenfacka-Życzkowskiego. Własność tę wykorzystano w obliczeniach numerycznych celem scharakteryzowania rodziny stanów kota Schrödingera oddziałujących z gaussowską barierą potencjału. Przeprowadzona analiza numeryczna ujawniła istotne różnice w zachowaniu stanów kwantowych w zależności od fazy względnej superpozycji. Parzysty stan kota Schrödingera wy-

kazywał największe wartości maksymalne entropii i parametru nieklasyczności podczas interakcji z barierą, zachowując przy tym początkową symetrię niezależnie od parametrów potencjału. Stan nieparzysty charakteryzował się mniejszymi wartościami maksymalnymi obu wielkości, również z zachowaniem symetrii. Jakościowo odmienne zachowanie zaobserwowano dla stanu Yurkego-Stolera ( $\theta = \pi/2$ ), gdzie interakcja z barierą prowadziła do asymetryzacji rozkładu w przestrzeni fazowej i częściowej destrukcji wyrazu interferencyjnego, skutkującej zmniejszeniem nieklasyczności stanu końcowego względem początkowego. Systematyczna analiza wpływu parametrów bariery wykazała, że wysokość i szerokość potencjału można wykorzystać do kontrolowania stopnia nieklasyczności stanów kwantowych, co otwiera możliwości inżynierii stanów kwantowych poprzez odpowiedni dobór geometrii potencjału.

Rozdział 4 poświęcono zastosowaniu formalizmu przestrzenno-fazowego do badania biologicznie istotnego procesu tunelowania protonu w parze zasad adenina-tymina struktury DNA. Wykorzystując efektywną energię potencjalną o profilu podwójnej studni, zbadano wpływ zewnętrznego pola elektromagnetycznego w zakresie podczerwieni na prawdopodobieństwo tunelowania między stanem kanonicznym a tautomerycznym pary zasad. Kluczowym wynikiem tej części pracy jest wykazanie, że promieniowanie podczerwone o określonych częstotliwościach może znacząco wzmocnić tunelowanie protonów. Dla najsilniejszej badanej amplitudy pola ( $E_0 = 5,14$  V/nm) współczynnik tunelowania przy częstotliwości około 15 THz osiągnął wartości rzędu  $4 \times 10^{-2}$ , co stanowi wzrost o kilka rzędów wielkości w porównaniu z wartościami bazowymi raportowanymi w literaturze. Zachowanie typu rezonansowego, obserwowane dla wszystkich badanych amplitud pola, wyjaśniono w ramach formalizmu stanów quasi-energetycznych Floqueta. Istotnym aspektem przeprowadzonych badań było wykazanie korelacji między zwiększoną nieklasycznością stanu, mierzoną entropią Wignera-Rényiego, a zwiększoną zdolnością tunelową.

Przedstawione wyniki otwierają szereg kierunków dalszych badań. Naturalnym krokiem jest implementacja pełnego algorytmu samouzgodnionego układu Moyala-Poissona, jako rozszerzenia aktualnego kodu numerycznego (por. Dodatek A.4), co pozwoliłoby na bardziej realistyczny opis układu oddziałującego z polem elektromagnetycznym. W kontekście biologii kwantowej obiecującym kierunkiem jest rozszerzenie analizy na parę zasad guanina-cytosyna oraz uwzględnienie efektów środowiskowych, takich jak fluktuacje termiczne czy dekoherencja, przybliżających model do warunków panujących w żywych komórkach. Wykazana możliwość kontrolowania nieklasyczności stanów kwantowych poprzez dobór parametrów potencjału oraz zewnętrznych pól elektromagnetycznych otwiera perspektywę dla inżynierii stanów kwantowych o pożądanych właściwościach. Z punktu widzenia nauk biologicznych, prezentowane wyniki wskazują na potrzebę rewizji oceny ryzyka związanego z ekspozycją na promieniowanie podczerwone – wykazany mechanizm rezonansowego wzmocnienia tunelowania sugeruje, że określone zakresy częstotliwości mogą wpływać na częstość spontanicznych mutacji, co może stanowić wyzwanie dla przyszłych badań interdyscyplinarnych.

Podsumowując, niniejsza praca pokazuje, że formalizm przestrzenno-fazowy mechaniki kwantowej, oparty na funkcji Wignera i równaniu Moyala, stanowi skuteczne narzędzie do badania dynamiki kwantowej „małych” układów. Połączenie ścisłego opisu teoretycznego z zaawansowanymi metodami numerycznymi pozwala na ilościową charakterystykę zjawisk nieklasycznych czy ich potencjalnych implikacji dla procesów biologicznych.

## Dodatek A

## Dodatek

### A.1 Konwencja transformaty Fouriera

W niniejszej pracy przyjęto symetryczną konwencję transformaty Fouriera z czynnikiem  $\hbar$  w funkcji wykładniczej, dostosowaną do sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej. Dla funkcji  $\varrho(x, p; t)$  określonej na przestrzeni fazowej transformaty Fouriera względem zmiennej położeniowej  $x$  i pędowej  $p$  definiujemy odpowiednio jako

$$\mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda} \varrho(x, p; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \, e^{-\frac{ix\lambda}{\hbar}} \varrho(x, p; t), \quad (\text{A.1})$$

$$\mathcal{F}_{\lambda \rightarrow x}^{-1} \tilde{\varrho}(\lambda, p; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} d\lambda \, e^{\frac{ix\lambda}{\hbar}} \tilde{\varrho}(\lambda, p; t), \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{F}_{p \rightarrow y} \varrho(x, p; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp \, e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \varrho(x, p; t), \quad (\text{A.3})$$

$$\mathcal{F}_{y \rightarrow p}^{-1} \tilde{\varrho}(x, y; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dy \, e^{\frac{ipy}{\hbar}} \tilde{\varrho}(x, y; t). \quad (\text{A.4})$$

Zmienne  $\lambda$  i  $y$  mają odpowiednio wymiar pędu i położenia. Przyjęta konwencja zapewnia symetrię między transformatą prostą i odwrotną oraz naturalne przejście do jednostek atomowych (przy  $\hbar = 1$ ).

### A.2 Podstawy klasycznej mechaniki statystycznej

Rozdział wprowadza formalizm matematyczny niezbędny do opisu dynamiki układów statystycznych w ujęciu klasycznym. Omówiona zostanie struktura klasycznej przestrzeni fazowej oraz równania ruchu w reprezentacji hamiltonowskiej. Szczególną uwagę poświęcono twierdzeniu Liouville'a określającemu ewolucję czasową funkcji rozkładu w przestrzeni fazowej, które stanowi podstawę statystycznego opisu układów dynamicznych.

#### A.2.1 Przestrzeń fazowa i formalizm Hamiltona

Przestrzeń fazowa układu dynamicznego stanowi parzystowymiarową rozmaitość różniczkowalną o strukturze symplektycznej [136, 137]. Ograniczając się do jednego wymiaru dla przejrzystości notacji, jednakże

bez straty ogólności, każdy punkt w dwuwymiarowej przestrzeni fazowej  $\xi = (q(t), p(t))$  reprezentuje położenie  $q(t)$  oraz pęd  $p(t)$  cząstki w chwili  $t$ . Funkcja Hamiltona  $H : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  generuje ewolucję czasową układu poprzez równania kanoniczne

$$\begin{cases} \frac{dq(t)}{dt} = \frac{\partial H(q, p, t)}{\partial p} \\ \frac{dp(t)}{dt} = -\frac{\partial H(q, p, t)}{\partial q} \end{cases} \quad (\text{A.5})$$

Dla układu, który nie wymienia energii z otoczeniem funkcja Hamiltona przyjmuje postać sumy energii kinetycznej i potencjalnej

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + U(q), \quad (\text{A.6})$$

układ taki nazywany jest układem izolowanym [138].

### A.2.2 Nawias Poissona

Dla pary funkcji różniczkowalnych  $f(q, p, t)$  i  $g(q, p, t)$  określonych na przestrzeni fazowej, nawias Poissona to struktura algebraiczna w postaci

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q}. \quad (\text{A.7})$$

Nawias Poissona stanowi bilinową formę różniczkową [136] i charakteryzuje się następującymi własnościami dla funkcji  $f, g, h$  określonych na przestrzeni fazowej:

1. Antysymetria:  $\{f, g\} = -\{g, f\}$
2. Liniowość:  $\{\alpha f + \beta g, h\} = \alpha\{f, h\} + \beta\{g, h\}$  dla dowolnych  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$
3. Reguła Leibniza:  $\{fg, h\} = \{f, h\}g + f\{g, h\}$
4. Tożsamość Jacobiego:  $\{\{f, g\}, h\} + \{\{g, h\}, f\} + \{\{h, f\}, g\} = 0$
5.  $\{f, c\} = 0$  dla dowolnej funkcji  $c$  stałej na przestrzeni fazowej

Nawias Poissona umożliwia zapis równania ruchu równoważnego równaniom Hamiltona dla dowolnej funkcji różniczkowalnej  $f(q, p, t)$ , określonej na przestrzeni fazowej. W szczególności, dla funkcji  $f$  będącej współrzędną kanoniczną ( $q$  lub  $p$ ) otrzymuje się równania Hamiltona

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= \{q, H\} = \frac{\partial H}{\partial p}, \\ \frac{dp}{dt} &= \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

### A.2.3 Gęstość fazowa i równanie Liouville'a

Można zdefiniować funkcję rozkładu gęstości prawdopodobieństwa  $f(q, p, t)$ , która jest nieujemną funkcją rzeczywistą, określoną na przestrzeni fazowej, spełniającą warunek normalizacji

$$\int_{\mathbb{R}^2} dq dp f(q, p, t) = 1. \quad (\text{A.9})$$

W literaturze funkcja ta bywa również nazywana gęstością fazową. Funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa pozwala zdefiniować wartość oczekiwaną dowolnej zmiennej dynamicznej  $O(q, p)$ :

$$\langle O \rangle = \int_{\mathbb{R}^2} dq dp f(q, p, t) O(q, p). \quad (\text{A.10})$$

Ewolucja czasowa funkcji rozkładu gęstości prawdopodobieństwa dana jest równaniem Liouville'a, które zapisane przy pomocy nawiasu Poissona przyjmuje postać

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}. \quad (\text{A.11})$$

Twierdzenie Liouville'a stwierdza natomiast, że gęstość fazowa jest stała wzdłuż trajektorii fazowych układu [136]. Innymi słowy, objętość obszaru w przestrzeni fazowej zajmowanego przez funkcję rozkładu jest zachowana w czasie, niezależnie od zmian kształtu tego obszaru (jego deformacji) podczas ewolucji.

#### A.2.4 Funkcja charakterystyczna rozkładu prawdopodobieństwa

W klasycznej teorii prawdopodobieństwa rozkład zmiennej losowej jest jednoznacznie określony przez funkcję charakterystyczną [139]. Dla funkcji gęstości rozkładu prawdopodobieństwa  $f(q, p)$  na przestrzeni fazowej funkcję charakterystyczną definiuje się jako transformatę Fouriera

$$M(\tau, \theta) = \iint_{-\infty}^{\infty} dq dp f(q, p) e^{i(\tau p + \theta q)}, \quad (\text{A.12})$$

gdzie  $\tau, \theta \in \mathbb{R}$  są parametrami sprzężonymi do zmiennych fazowych. Funkcja  $f(q, p)$  jest odwrotną transformatą Fouriera funkcji charakterystycznej:

$$f(q, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} d\tau d\theta M(\tau, \theta) e^{-i(\tau p + \theta q)}. \quad (\text{A.13})$$

Konstrukcja ta stanowi punkt wyjścia dla kwantowego uogólnienia zaproponowanego przez Moyala (por. sekcja A.3).

### A.3 Oryginalne wyprowadzenie równania Moyala

Niniejszy rozdział przedstawia oryginalne podejście J. E. Moyala [12] do sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej, oparte na konstrukcji operatora charakterystycznego i kwantowej funkcji charakterystycznej. Podejście to stanowi alternatywę dla wyprowadzenia przedstawionego w sekcji 2.3.3, gdzie równanie Moyala otrzymano przez bezpośrednie zastosowanie transformaty Weyla do równania von Neumanna. Celem jest wykazanie, że funkcja Wignera (2.19) powstaje naturalnie jako transformata Fouriera kwantowej funkcji charakterystycznej, co uzasadnia interpretację mechaniki kwantowej jako uogólnionej teorii statystycznej na przestrzeni fazowej.

#### A.3.1 Operator charakterystyczny

Wychodząc od klasycznej funkcji charakterystycznej (A.12), Moyal postuluje jej kwantowy odpowiednik poprzez zastąpienie zmiennych fazowych  $(q, p)$  operatorami położenia  $\hat{x}$  i pędu  $\hat{p}$ . Operator charakterystyczny zdefiniowany jest wzorem

$$\hat{M}(\tau, \theta) = \exp[i(\tau \hat{p} + \theta \hat{x})], \quad (\text{A.14})$$

gdzie  $\tau, \theta \in \mathbb{R}$  są parametrami sprzężonymi odpowiednio do pędu i położenia. Ze względu na nieprzemienność operatorów  $\hat{x}$  i  $\hat{p}$  (por. (2.4)), faktoryzacja eksponenty wymaga zastosowania tożsamości BCH [76]. Dla operatorów spełniających  $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$  zachodzi [140]

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]} . \quad (\text{A.15})$$

Podstawiając  $\hat{A} = i\tau\hat{p}$ ,  $\hat{B} = i\theta\hat{x}$  i wykorzystując  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\tau\theta$ , otrzymujemy symetryczną faktoryzację operatora (A.14):

$$\hat{M}(\tau, \theta) = e^{\frac{i\tau\hat{p}}{2}} e^{i\theta\hat{x}} e^{\frac{i\tau\hat{p}}{2}} . \quad (\text{A.16})$$

### A.3.2 Kwantowa funkcja charakterystyczna

Dla układu opisanego znormalizowaną funkcją falową  $\psi(x, t)$  Moyal definiuje kwantową funkcję charakterystyczną jako wartość oczekiwaną operatora charakterystycznego:

$$M_\psi(\tau, \theta, t) = \langle \psi(t) | \hat{M}(\tau, \theta) | \psi(t) \rangle . \quad (\text{A.17})$$

Korzystając z faktoryzacji (A.16) oraz faktu, że w reprezentacji położeniowej operator  $e^{i\alpha\hat{p}}$  działa jako operator przesunięcia:  $e^{i\alpha\hat{p}}\psi(x) = \psi(x + \hbar\alpha)$ , można wykazać, że

$$M_\psi(\tau, \theta, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \psi^*\left(x - \frac{\hbar\tau}{2}, t\right) e^{i\theta x} \psi\left(x + \frac{\hbar\tau}{2}, t\right) . \quad (\text{A.18})$$

Funkcja  $M_\psi$  posiada własności wymagane od funkcji charakterystycznej: jest znormalizowana ( $M_\psi(0, 0, t) = 1$ ), hermitowska ( $M_\psi(-\tau, -\theta, t) = M_\psi^*(\tau, \theta, t)$ ) oraz ciągła.

### A.3.3 Związek kwantowej funkcji charakterystycznej z funkcją Wignera

Analogicznie do klasycznej konstrukcji (A.13), kwantowy quasi-rozkład prawdopodobieństwa w przestrzeni fazowej definiujemy jako odwrotną transformatę Fouriera funkcji charakterystycznej:

$$F_\psi(x, p, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{-\infty}^{\infty} d\tau d\theta \, M_\psi(\tau, \theta, t) e^{-i(\tau p + \theta x)} . \quad (\text{A.19})$$

Podstawiając (A.18) i wykonując całkowanie po  $\theta$ , co daje  $2\pi\delta(x' - x)$ , a następnie wprowadzając zmienną  $\xi = \hbar\tau$ , otrzymujemy

$$F_\psi(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \, \psi^*\left(x - \frac{\xi}{2}, t\right) e^{-\frac{ip\xi}{\hbar}} \psi\left(x + \frac{\xi}{2}, t\right) , \quad (\text{A.20})$$

co jest tożsame z definicją funkcji Wignera dla stanu czystego (2.19). Wynik ten pokazuje, że funkcja Wignera powstaje naturalnie w podejściu Moyala jako transformata Fouriera kwantowej funkcji charakterystycznej — w pełnej analogii do związku między klasyczną funkcją rozkładu a jej funkcją charakterystyczną.

### A.3.4 Ewolucja czasowa

Ewolucja czasowa funkcji charakterystycznej wynika z równania Schrödingera (2.5). Różniczkując (A.17) po czasie i korzystając z równania Schrödingera oraz jego sprzężenia hermitowskiego, otrzymujemy

$$i\hbar \frac{\partial M_\psi}{\partial t} = \langle \psi(t) | [\hat{M}, \hat{H}] | \psi(t) \rangle, \quad (\text{A.21})$$

gdzie  $\hat{H}$  jest hamiltonianem układu. Moyal wykazał [12], że po wykonaniu transformaty Fouriera (A.19) równanie to przechodzi w równanie Moyala (2.49) dla funkcji Wignera, z nawiasem Moyala w postaci (2.38). Tym samym oba podejścia – oryginalne Moyala (przez funkcję charakterystyczną) oraz przez transformatę Weyla (sekcja 2.3.3) – prowadzą do tego samego równania ewolucji, potwierdzając wewnętrzną spójność sformułowania mechaniki kwantowej w przestrzeni fazowej.

## A.4 Omówienie kodu numerycznego

Niniejszy rozdział przedstawia szczegóły implementacyjne algorytmów opisanych w rozdziale 2. Kod numeryczny został zaimplementowany w języku C++ z wykorzystaniem biblioteki FFTW3 [141] do realizacji szybkiej transformaty Fouriera. Poniżej przedstawiono architekturę programu, pseudokod głównych algorytmów oraz wybrane detale implementacyjne istotne dla reprodukowalności obliczeń.

### A.4.1 Architektura programu

Program numeryczny został zorganizowany zgodnie z paradygmatem programowania obiektowego. Centralnym elementem jest klasa symulacji, która zawiera wszystkie zmienne i metody niezbędne do przeprowadzenia ewolucji czasowej funkcji Wignera. Struktura programu obejmuje następujące moduły funkcjonalne:

1. Moduł inicjalizacji – odpowiedzialny za wczytanie parametrów symulacji z pliku konfiguracyjnego w formacie JSON oraz inicjalizację warunków początkowych funkcji Wignera.
2. Moduł ewolucji czasowej – implementujący schematy split-operator pierwszego i drugiego rzędu dla równania Moyala (por. sekcje 2.4.1–2.4.2), w tym warianty dla potencjałów zależnych od czasu (por. sekcja 2.5.2).
3. Moduł transformacji Fouriera – realizujący transformaty  $\mathcal{F}_{x \rightarrow \lambda}$  oraz  $\mathcal{F}_{p \rightarrow \theta}$  (i transformaty odwrotne) z wykorzystaniem biblioteki FFTW3 [141].
4. Moduł obserwacji – obliczający wielkości fizyczne: energię, normę, entropię oraz rozkłady brzegowe.
5. Moduł wejścia/wyjścia – zapisujący wyniki symulacji do plików tekstowych.

### A.4.2 Reprezentacja danych

Funkcja Wignera  $\varrho(x, p; t)$  jest reprezentowana jako dwuwymiarowa tablica liczb zespolonych o wymiarach  $N_x \times N_p$ , gdzie  $N_x$  i  $N_p$  oznaczają liczbę punktów siatki odpowiednio w kierunku położeniowym

i pędownym. Mimo że funkcja Wignera jest funkcją rzeczywistą, reprezentacja zespolona jest konieczna ze względu na naturę algorytmu split-operator, w którym mnożenie przez czynniki fazowe wprowadza składową urojoną. Tablica jest alokowana w sposób ciągły w pamięci. Schemat alokacji można przedstawić następującym pseudokodem:

---

**Algorytm 1** Alokacja ciągłej tablicy dwuwymiarowej
 

---

```

1: procedure ALLOCATE2DARRAY( $N_x, N_p$ )
2:   Alokuj ciągły blok pamięci o rozmiarze  $N_x \times N_p$  elementów zespolonych
3:   Utwórz tablicę wskaźników do  $N_x$  wierszy
4:   for  $i = 0$  to  $N_x - 1$  do
5:     Wskaźnik[ $i$ ]  $\leftarrow$  adres elementu  $(i \cdot N_p)$  w bloku ciągłym
6:   end for
7:   return Tablica wskaźników
8: end procedure

```

---

Ciągła alokacja pamięci umożliwia wykorzystanie funkcji `fftw_plan_many_dft` do wykonania wielu jednowymiarowych transformacji FFT w pojedynczym wywołaniu, co znacząco zwiększa wydajność obliczeń przez lepsze wykorzystanie pamięci podręcznej procesora [141].

### A.4.3 Implementacja transformaty Fouriera

Transformaty Fouriera zdefiniowane w Dodatku A.1 są implementowane z wykorzystaniem biblioteki FFTW3. Biblioteka ta realizuje dyskretną transformatę Fouriera (DFT), która dla ciągu  $N$  wartości  $\{f_n\}_{n=0}^{N-1}$  zdefiniowana jest wzorem:

$$\hat{f}_k = \sum_{n=0}^{N-1} f_n \exp\left(-\frac{2\pi i k n}{N}\right), \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (\text{A.22})$$

Związek między DFT a ciągłą transformatą Fouriera (A.1) wymaga odpowiedniego przeskalowania i przesunięcia indeksów. Dla siatki o  $N$  punktach z krokiem  $\Delta x$  i zakresem  $[-L_x, L_x]$  transformata względem  $x$  do zmiennej sprzężonej  $\lambda$  jest realizowana następująco:

---

**Algorytm 2** Transformata Fouriera  $x \rightarrow \lambda$  dla całej siatki
 

---

```

1: procedure FFT_XTOLAMBDA( $\varrho, N_x, N_p, \text{znak}$ )
2:   Utwórz plan FFTW dla  $N_p$  transformacji 1D o długości  $N_x$  każda
3:   Krok wejściowy (stride)  $\leftarrow N_p$  ▷ elementy wzdłuż kolumn
4:   Odległość między kolejnymi transformacjami  $\leftarrow 1$ 
5:   Wykonaj plan z kierunkiem określonym przez  $\text{znak}$ 
6: end procedure

```

---

Parametr *znak* określa kierunek transformacji:  $-1$  dla transformacji prostej ( $x \rightarrow \lambda$ ),  $+1$  dla transformacji odwrotnej ( $\lambda \rightarrow x$ ). Analogiczna procedura dla transformacji  $p \rightarrow \theta$  różni się jedynie parametrami stridu i odległości:

**Algorytm 3** Transformata Fouriera  $p \rightarrow \theta$  dla całej siatki

- 
- ```

1: procedure FFT_PTOTHETA( $\varrho, N_x, N_p, \text{znak}$ )
2:   Utwórz plan FFTW dla  $N_x$  transformacji 1D o długości  $N_p$  każda
3:   Krok wejściowy (stride)  $\leftarrow 1$  ▷ elementy wzdłuż wierszy
4:   Odległość między kolejnymi transformacjami  $\leftarrow N_p$ 
5:   Wykonaj plan z kierunkiem określonym przez  $-\text{znak}$ 
6: end procedure

```
- 

Zmiana znaku w algorytmie 3 wynika z odmiennej konwencji znaku w transformacie względem pędu (A.3). Siatka zmiennych sprzężonych  $\lambda$  i  $\theta$  jest generowana zgodnie ze wzorem (2.70), który uwzględnia specyficzne uporządkowanie częstotliwości w standardzie FFTW (*fftfreq ordering*). Procedura generowania siatki przedstawiona jest w algorytmie 4.

**Algorytm 4** Generowanie siatki częstotliwości (fftfreq)

- 
- ```

1: procedure GENERATEFREQUENCYGRID( $N, \Delta$ )
2:   for  $k = 0$  to  $N - 1$  do
3:     if  $k \leq N/2 - 1$  then
4:        $\lambda_k \leftarrow \frac{2\pi k}{N \cdot \Delta}$ 
5:     else
6:        $\lambda_k \leftarrow -\frac{2\pi(N - k)}{N \cdot \Delta}$ 
7:     end if
8:   end for
9:   return  $\{\lambda_k\}$ 
10: end procedure

```
-

#### A.4.4 Iloczyn Hadamarda

Mnożenie funkcji Wignera przez czynniki fazowe realizowane jest jako iloczyn Hadamarda (element po elemencie) dwóch tablic zespolonych. Dla tablic  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{B}$  o wymiarach  $N_x \times N_p$  wynik  $\mathbf{C} = \mathbf{A} \circ \mathbf{B}$  obliczany jest zgodnie z algorytmem 5.

---

**Algorytm 5** Iloczyn Hadamarda tablic zespolonych

---

```

1: procedure HADAMARDPRODUCT( $\mathbf{A}, \mathbf{B}, N_x, N_p$ )
2:   for  $i = 0$  to  $N_x - 1$  do
3:     for  $j = 0$  to  $N_p - 1$  do
4:        $a_r \leftarrow \text{Re}(A_{ij}), a_i \leftarrow \text{Im}(A_{ij})$ 
5:        $b_r \leftarrow \text{Re}(B_{ij}), b_i \leftarrow \text{Im}(B_{ij})$ 
6:        $A_{ij} \leftarrow (a_r b_r - a_i b_i) + i(a_r b_i + a_i b_r)$ 
7:     end for
8:   end for
9: end procedure

```

---

#### A.4.5 Implementacja schematu split-operator

Schemat split-operator drugiego rzędu (faktoryzacja Stranga) (2.62) został zaimplementowany zgodnie z algorytmem 6. Algorytm realizuje pojedynczy krok czasowy  $\Delta t$  ewolucji funkcji Wignera.

---

**Algorytm 6** Krok czasowy – schemat Stranga

---

```

1: procedure TIMESTEPORDER2( $\varrho, \mathbf{E}_T, \mathbf{E}_U, N_x, N_p$ )
2:   FFT_XTOLAMBDA( $\varrho, N_x, N_p, -1$ )  $\triangleright \varrho(x, p) \rightarrow \tilde{\varrho}(\lambda, p)$ 
3:   HADAMARDPRODUCT( $\varrho, \mathbf{E}_T, N_x, N_p$ )  $\triangleright \times \exp(-i\Delta t \lambda p / 2m)$ 
4:   FFT_XTOLAMBDA( $\varrho, N_x, N_p, +1$ )  $\triangleright \tilde{\varrho}(\lambda, p) \rightarrow \varrho(x, p)$ 
5:   FFT_PTOTHETA( $\varrho, N_x, N_p, -1$ )  $\triangleright \varrho(x, p) \rightarrow \tilde{\varrho}(x, \theta)$ 
6:   HADAMARDPRODUCT( $\varrho, \mathbf{E}_U, N_x, N_p$ )  $\triangleright \times \exp(i\Delta t U_\Delta / \hbar)$ 
7:   FFT_PTOTHETA( $\varrho, N_x, N_p, +1$ )  $\triangleright \tilde{\varrho}(x, \theta) \rightarrow \varrho(x, p)$ 
8:   FFT_XTOLAMBDA( $\varrho, N_x, N_p, -1$ )  $\triangleright \varrho(x, p) \rightarrow \tilde{\varrho}(\lambda, p)$ 
9:   HADAMARDPRODUCT( $\varrho, \mathbf{E}_T, N_x, N_p$ )  $\triangleright \times \exp(-i\Delta t \lambda p / 2m)$ 
10:  FFT_XTOLAMBDA( $\varrho, N_x, N_p, +1$ )  $\triangleright \tilde{\varrho}(\lambda, p) \rightarrow \varrho(x, p)$ 
11:  RESCALE( $\varrho, 1/(N_x^2 N_p), N_x, N_p$ )  $\triangleright$  normalizacja FFT
12: end procedure

```

---

Macierze  $\mathbf{E}_T$  i  $\mathbf{E}_U$  zawierają prekompilowane wartości czynników fazowych:

$$(\mathbf{E}_T)_{mn} = \exp\left(-\frac{i\Delta t}{2m\hbar} \lambda_m p_n\right), \quad (\text{A.23})$$

$$(\mathbf{E}_U)_{mn} = \exp\left(\frac{i\Delta t}{\hbar} U_\Delta(x_m, \theta_n)\right), \quad (\text{A.24})$$

gdzie  $U_\Delta$  jest różnicą potencjałów zdefiniowaną w (2.63). Schemat pierwszego rzędu jest implementowany analogicznie, z pominięciem jednego z kroków kinetycznych i odpowiednią modyfikacją czynnika w macierzy  $\mathbf{E}_T$  (pełny krok  $\Delta t$  zamiast  $\Delta t/2$ ).

#### A.4.6 Schemat dla potencjałów zależnych od czasu

Dla hamiltonianów z energią potencjalną jawnie zależną od czasu  $U(x; t)$ , opisanych w sekcji 2.5.1, zaimplementowano zmodyfikowany schemat Stranga (2.79). Kluczowa różnica w stosunku do schematu stacjonarnego polega na konieczności przeliczania macierzy czynników fazowych  $\mathbf{E}_U$  w każdym kroku czasowym. Zgodnie z teorią przedstawioną w sekcji 2.5.3, operator potencjalny jest ewaluowany w punkcie środkowym przedziału czasowego  $t_m = t_n + \Delta t/2$ . Algorytm 7 przedstawia pełną procedurę kroku czasowego dla potencjału zależnego od czasu.

---

#### Algorytm 7 Krok czasowy – schemat Stranga z potencjałem zależnym od czasu

---

```

1: procedure TIMESTEPTIMEDEPENDENT( $\varrho$ ,  $\mathbf{E}_T$ ,  $t_n$ ,  $\Delta t$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ )
2:    $t_m \leftarrow t_n + \Delta t/2$  ▷ punkt środkowy
3:   UPDATEPOTENTIALMATRIX( $\mathbf{E}_U$ ,  $t_n$ ) ▷  $U_\Delta(x, \theta; t_n)$ 
4:   FFT_PTOTheta( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , -1)
5:   HADAMARDPRODUCT( $\varrho$ ,  $\mathbf{E}_U$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ ) ▷  $\times \exp(i \frac{\Delta t}{2\hbar} U_\Delta)$ 
6:   FFT_PTOTheta( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , +1)
7:   RESCALE( $\varrho$ ,  $1/N_p$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ )
8:   FFT_XTOLambda( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , -1)
9:   HADAMARDPRODUCT( $\varrho$ ,  $\mathbf{E}_T$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ ) ▷  $\times \exp(-i \frac{\Delta t}{m\hbar} \lambda p)$ 
10:  FFT_XTOLambda( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , +1)
11:  RESCALE( $\varrho$ ,  $1/N_x$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ )
12:  UPDATEPOTENTIALMATRIX( $\mathbf{E}_U$ ,  $t_n + \Delta t$ ) ▷  $U_\Delta(x, \theta; t_n + \Delta t)$ 
13:  FFT_PTOTheta( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , -1)
14:  HADAMARDPRODUCT( $\varrho$ ,  $\mathbf{E}_U$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ ) ▷  $\times \exp(i \frac{\Delta t}{2\hbar} U_\Delta)$ 
15:  FFT_PTOTheta( $\varrho$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ , +1)
16:  RESCALE( $\varrho$ ,  $1/N_p$ ,  $N_x$ ,  $N_p$ )
17: end procedure

```

---

Procedura aktualizacji macierzy potencjału oblicza różnicę potencjałów dla zadanej chwili czasowej zgodnie z algorytmem 8

---

**Algorytm 8** Aktualizacja macierzy potencjału zależnego od czasu

---

```

1: procedure UPDATEPOTENTIALMATRIX( $\mathbf{E}_U, t$ )
2:   Wygeneruj siatkę  $\{\theta_n\}$  zgodnie z algorytmem 4
3:   for  $m = 0$  to  $N_x - 1$  do
4:     for  $n = 0$  to  $N_p - 1$  do
5:        $U_+ \leftarrow U(x_m + \hbar\theta_n/2; t)$ 
6:        $U_- \leftarrow U(x_m - \hbar\theta_n/2; t)$ 
7:        $\phi \leftarrow \frac{\Delta t}{2\hbar}(U_- - U_+)$ 
8:        $(\mathbf{E}_U)_{mn} \leftarrow \cos(\phi) + i \sin(\phi)$ 
9:     end for
10:  end for
11: end procedure

```

---

Należy zauważyć, że w schemacie 7 zastosowano kolejność operatorów  $\hat{U}-\hat{T}-\hat{U}$  (por. równanie (2.79)), w odróżnieniu od schematu stacjonarnego 6, gdzie użyto kolejności  $\hat{T}-\hat{U}-\hat{T}$ . Obie faktoryzacje są równoważne z dokładnością do drugiego rzędu w  $\Delta t$ , jednak dla potencjałów zależnych od czasu układ  $\hat{U}-\hat{T}-\hat{U}$  pozwala na naturalne uwzględnienie wartości potencjału na krańcach przedziału czasowego.

W implementacji zrealizowano również wariant ze schematem China czwartego rzędu (2.83), który wymaga dodatkowej ewaluacji zmodyfikowanego potencjału  $W(x, \theta; t)$  zawierającego poprawkę różniczkową (2.84). Koszt obliczeniowy schematu zależnego od czasu jest wyższy niż schematu stacjonarnego ze względu na konieczność przeliczania macierzy  $\mathbf{E}_U$  w każdym kroku.

#### A.4.7 Warunki początkowe

Program umożliwia inicjalizację funkcji Wignera w postaci dla kilku rodzajów stanów kwantowych. Podstawowym stanem jest gaussowski pakiet falowy. Zaimplementowano również rodzinę stanów kota Schrödingera, celem przeprowadzenia symulacji, których wyniki zostały omówione w rozdziale 3. Architektura kodu została zaprojektowana w sposób modularny, umożliwiając łatwe rozszerzanie o nowe warunki początkowe. Dodanie nowego stanu wymaga jedynie implementacji funkcji obliczającej wartość funkcji Wignera  $\varrho(x_m, p_n)$  w punktach siatki, bez konieczności modyfikacji pozostałych części programu – w szczególności modułu ewolucji czasowej i modułu obserwabli. Dzięki temu kod może być adaptowany do badania innych układów kwantowych.

#### A.4.8 Implementacja potencjałów

W schematach dla potencjałów niezależnych od czasu, funkcja  $U_\Delta(x, \theta) = U(x - \hbar\theta/2) - U(x + \hbar\theta/2)$  jest obliczana dla każdego punktu siatki  $(x_m, \theta_n)$  przed rozpoczęciem symulacji. W programie zaimplementowano kilka standardowych profili, w tym potencjał swobodny, liniowy, oscylatora harmonicznego czy

barierę gaussowską. Analogicznie do warunków początkowych, architektura kodu numerycznego umożliwia łatwe rozszerzanie o nowe postaci  $U(x)$ . Dodanie nowego potencjału wymaga zdefiniowania funkcji  $U(x)$  – obliczenie różnicy  $U_\Delta$  oraz konstrukcja macierzy fazowej  $\mathbf{E}_U$  są realizowane automatycznie przez istniejący kod. Implementację schematów dla potencjałów zależnych od czasu, w których macierz  $\mathbf{E}_U$  jest przeliczana w każdym kroku czasowym, opisano szczegółowo w sekcji A.4.6.

#### A.4.9 Obliczanie obserwabli

Wartości oczekiwane obserwabli są obliczane przez całkowanie numeryczne funkcji Wignera. Całki dwuwymiarowe realizowane są metodą trapezów, która dla funkcji  $f(x, p)$  na siatce prostokątnej daje:

$$\iint dx dp f(x, p) \approx \Delta x \Delta p \sum_{m,n} w_{mn} f(x_m, p_n), \quad (\text{A.25})$$

gdzie wagi  $w_{mn}$  wynoszą: 1 dla punktów wewnętrznych,  $1/2$  dla punktów na krawędziach i  $1/4$  dla punktów narożnych. Zaimplementowane obserwabli obejmują normę, energię, średnie położenie i pęd oraz entropię Wignera-Renyiego rzędu  $\alpha$ . Rozkłady brzegowe obliczane są przez całkowanie jednowymiarowe.

#### A.4.10 Stabilność numeryczna i walidacja

Poprawność implementacji została zweryfikowana przez porównanie wyników numerycznych z rozwiązaniami analitycznymi dla cząstki swobodnej, potencjału liniowego oraz oscylatora harmonicznego. Zachowanie normy  $\mathcal{N}(t) = 1$  stanowi podstawowy test stabilności numerycznej. Dla poprawnie dobranego kroku czasowego  $\Delta t$  względna zmiana normy nie przekracza  $10^{-12}$  w ciągu  $10^4$  kroków czasowych.

#### A.4.11 Jednostki atomowe

Obliczenia numeryczne są prowadzone w układzie jednostek atomowych (a.u.), w którym  $\hbar = m_e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$  [76]. Podstawowe relacje przeliczeniowe przedstawiono w tabeli A.1.

Tabela A.1: Przeliczniki między jednostkami atomowymi a jednostkami SI.

| Wielkość         | Symbol | Wartość w SI               |
|------------------|--------|----------------------------|
| Energia          | 1 a.u. | 27.211 eV                  |
| Długość          | 1 a.u. | 0.05292 nm                 |
| Czas             | 1 a.u. | $2.419 \times 10^{-17}$ s  |
| Pole elektryczne | 1 a.u. | $5.142 \times 10^{11}$ V/m |

Użycie jednostek atomowych eliminuje stałe fizyczne z równań, upraszczając implementację i redukując błędy zaokrągleń. Konwersja wyników do jednostek SI jest realizowana przez odpowiednie przeskalowanie wyników.

#### A.4.12 Format pliku konfiguracyjnego

Parametry symulacji są wczytywane z pliku w formacie JSON [142], co zapewnia czytelność i łatwość modyfikacji. Przykładowa struktura pliku konfiguracyjnego obejmuje następujące sekcje:

- **Parametry siatki:**  $L_x, L_p, N_x, N_p$
- **Parametry czasowe:**  $\Delta t, N_t$ , lista kroków w których następuje zapis wyników
- **Warunek początkowy:** typ, parametry stanu
- **Potencjał:** identyfikator typu, parametry potencjału
- **Opcje symulacji:** rząd schematu, flaga zależności czasowej

Wykorzystanie formatu JSON umożliwia również prostą automatyzację serii symulacji przez programowe generowanie plików konfiguracyjnych.

# Bibliografia

- [1] F. Ritort. Single-molecule experiments in biological physics: methods and applications. *J. Phys. Condens. Matter*, 18:R531, 2006.
- [2] F. Ritort. Nonequilibrium fluctuations in small systems: From physics to biology. *Adv. Chem. Phys.*, 137:31, 2008.
- [3] C. Bustamante, J. Liphardt, and F. Ritort. The Nonequilibrium Thermodynamics of Small Systems. *Phys. Today*, 58:43, 2005.
- [4] Y. K. Tovbin. *Small Systems and Fundamentals of Thermodynamics*. CRC Press, Boca Raton, 2018.
- [5] H. W. Turnbull, editor. *The Correspondence of Isaac Newton: Volume I 1661–1675*. Cambridge University Press, 1959.
- [6] T. L. Curtright, D. B. Fairlie, and C. K. Zachos. *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*. World Scientific Publishing, Singapore, 2014.
- [7] D. K. Ferry and M. Nedjalkov. *The Wigner Function in Science and Technology*. IOP Publishing, Bristol, 2018.
- [8] H. Weyl. Quantenmechanik und Gruppentheorie. *Z. Phys.*, 46:1, 1927.
- [9] J. von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, Berlin, 1932.
- [10] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40(5):749, 1932.
- [11] H. J. Groenewold. On the principles of elementary quantum mechanics. *Physica*, 12:405, 1946.
- [12] J. E. Moyal. Quantum mechanics as a statistical theory. *Math. Proc. Camb. Philos. Soc.*, 45:99, 1949.
- [13] M. de Gosson. *Symplectic Geometry and Quantum Mechanics*. Birkhäuser, Basel, 2006.
- [14] R. L. Hudson. When is the Wigner quasi-probability density non-negative? *Rep. Math. Phys.*, 6:249, 1974.
- [15] A. Kenfack and K. Życzkowski. Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality. *J. Opt. B*, 6:396, 2004.

- [16] M. G. Benedict and A. Czirják. Wigner functions, squeezing properties, and slow decoherence of a mesoscopic superposition of two-level atoms. *Physical Review A*, 60:4034, 1999.
- [17] J. Weinbub and D. K. Ferry. Recent advances in Wigner function approaches. *Appl. Phys. Rev.*, 5:041104, 2018.
- [18] A. M. Ozorio de Almeida. *Entanglement in Phase Space*, page 157. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [19] M. Jachura, M. Karpiński, K. Banaszek, D. Bharadwaj, J. Lugani, and K. Thyagarajan. Generation and characterization of discrete spatial entanglement in multimode nonlinear waveguides. *Phys. Rev. A*, 95:032322, 2017.
- [20] W. R. Frensley. Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 62:745, 1990.
- [21] M. Nedjalkov, H. Kosina, S. Selberherr, C. Ringhofer, and D. K. Ferry. Unified particle approach to Wigner-Boltzmann transport in small semiconductor devices. *Phys. Rev. B*, 70:115319, 2004.
- [22] H. Goto. Bifurcation-based adiabatic quantum computation with a nonlinear oscillator network. *Sci. Rep.*, 6:21686, 2016.
- [23] M. A. Taylor and W. P. Bowen. Quantum metrology and its application in biology. *Phys. Rep.*, 615:1, 2016.
- [24] W. P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 2001.
- [25] T. Tilma, M. J. Everitt, J. H. Samson, W. J. Munro, and K. Nemoto. Wigner functions for arbitrary quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 117:180401, 2016.
- [26] R. P. Rundle and M. J. Everitt. An informationally complete Wigner function for the Tavis–Cummings model. *J. Comput. Electron.*, 20:2180, 2021.
- [27] M. N. Chernodub and M. A. Zubkov. Scale magnetic effect in quantum electrodynamics and the Wigner-Weyl formalism. *Phys. Rev. D*, 96, 2017.
- [28] J. Rosato. Phase space formulation of radiative transfer in optically thick plasmas. *Ann. Phys.*, 383:130, 2017.
- [29] D. Ferraro, T. Jonckheere, J. Rech, and T. Martin. Electronic quantum optics beyond the integer quantum Hall effect. *Phys. Status Solidi B Basic Res.*, 254:1600531, 2017.
- [30] X. Gu, A. F. Kockum, A. Miranowicz, Y. Liu, and F. Nori. Microwave photonics with superconducting quantum circuits. *Phys. Rep.*, 718-719:1, 2017.
- [31] M. Rashki and S. Jalalzadeh. Holography from quantum cosmology. *Phys. Rev. D*, 91:023501, 2015.

- [32] M. Mariño and S. Zakany. Quantum curves as quantum distributions. *J. High Energ. Phys.*, 2019:106, 2019.
- [33] A. Y. Kamenshchik, A. Tronconi, and G. Venturi. Born–Oppenheimer meets Wigner–Weyl in quantum gravity. *Class. Quantum Grav.*, 38:185006, 2021.
- [34] G. Lechner. Deformations of Quantum Field Theories and Integrable Models. *Commun. Math. Phys.*, 312:265, 2012.
- [35] C. Bäuerle, D. C. Glattli, T. Meunier, F. Portier, P. Roche, P. Roulleau, S. Takada, and X. Waintal. Coherent control of single electrons: a review of current progress. *Rep. Prog. Phys.*, 81:056503, 2018.
- [36] J. Lee, W. J. Jeong, J. Seo, and M. Shin. Wigner transport simulation of (core gate) silicon-shell nanowire transistors in cylindrical coordinates. *Solid-State Electron.*, 139:101, 2018.
- [37] T. J. H. Hele, M. J. Willatt, A. Muolo, and S. C. Althorpe. Boltzmann-conserving classical dynamics in quantum time-correlation functions: Matsubara dynamics. *J. Chem. Phys.*, 142:134103, 2015.
- [38] W. Xie, W. Domcke, S. C. Farantos, and S. Y. Grebenshchikov. State-specific tunneling lifetimes from classical trajectories: H-atom dissociation in electronically excited pyrrole. *J. Chem. Phys.*, 144:104105, 2016.
- [39] L. Slocombe, M. Sacchi, and J. Al-Khalili. An open quantum systems approach to proton tunnelling in DNA. *Comm. Phys.*, 5:109, 2022.
- [40] H. Warman, L. Slocombe, and M. Sacchi. How proton transfer impacts hachimoji DNA. *RSC Adv.*, 13:13384, 2023.
- [41] J. S. Ben-Benjamin, L. Cohen, and P. J. Loughlin. A phase space approach to wave propagation with dispersion. *J. Acoust. Soc. Am.*, 138:1122, 2015.
- [42] J. G. Hoskins and J. C. Schotland. Acousto-optic effect in random media. *Phys. Rev. E*, 95:033002, 2017.
- [43] Y. Wen, Y. Chen, Y. Zhang, H. Chen, and S. Yu. Tailoring accelerating beams in phase space. *Phys. Rev. A*, 95:023825, 2017.
- [44] G. W. Delius and A. Hüffmann. On quantum Lie algebras and quantum root systems. *J. Phys. A*, 29:1703, 1996.
- [45] L. Castellani. Non-commutative geometry and physics: a review of selected recent results. *Class. Quantum Grav.*, 17:3377, 2000.
- [46] H. García-Compeán, J. F. Plebanski, M. Przanowski, and F. J. Turrubiates. Deformation quantization of geometric quantum mechanics. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 35(19):4301, 2002.
- [47] M. W. Wong. *The Weyl Transform*. Springer-Verlag, New York, 1998.

- [48] E. Cordero and L. Rodino. Wigner analysis of operators. Part I: Pseudodifferential operators and wave fronts. *Appl. Comput. Harmon. A.*, 58:85, 2022.
- [49] L. Slocombe, J. Al-Khalili, and M. Mayke. Quantum and classical effects in DNA point mutations: Watson–Crick tautomerism in AT and GC base pairs. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23:4141, 2021.
- [50] N. Lambert, Y. Chen, Y. Cheng, C. Li, G. Chen, and F. Nori. Quantum biology. *Nature Physics*, 9:10, 2012.
- [51] Y. Kim, F. Bertagna, E. M. D’Souza, D. J. Heyes, L. O. Johannissen, E. T. Nery, A. Pantelias, A. Sanchez-Pedreño Jimenez, L. Slocombe, M. G. Spencer, J. Al-Khalili, G. S. Engel, S. Hay, S. M. Hingley-Wilson, K. Jeevaratnam, A. R. Jones, D. R. Kattnig, R. Lewis, M. Sacchi, N. S. Scrutton, S. R. P. Silva, and J. McFadden. Quantum biology: An update and perspective. *Quantum Reports*, 3(1):80, 2021.
- [52] A. D. Godbeer, J. Al-Khalili, and P. D. Stevenson. Modelling Proton Tunnelling in the Adenine–Thymine Base Pair. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17:13034, 2015.
- [53] L. Slocombe, M. Winokan, J. Al-Khalili, and M. Sacchi. Proton transfer during DNA strand separation as a source of mutagenic guanine-cytosine tautomers. *Comm. Chem.*, 5:109, 2022.
- [54] J. D. Watson and F. H. C. Crick. Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid. *Nature*, 171:737, 1953.
- [55] R. E. Franklin and R. G. Gosling. Molecular configuration in sodium thymonucleate. *Nature*, 171:740, 1953.
- [56] M. Cobb. What Rosalind Franklin truly contributed to the discovery of DNA’s structure. *Nature*, 616:657, 2023.
- [57] P. Löwdin. Proton Tunneling in DNA and its Biological Implications. *Rev. Mod. Phys.*, 35:724, 1963.
- [58] O. O. Brovarets’ and D. M. Hovorun. Quantum-chemical investigation of tautomerization ways of the Watson-Crick DNA base pairs. *Chem. Phys. Lett.*, 707:190, 2018.
- [59] M. Winokan, L. Slocombe, J. Al-Khalili, and M. Sacchi. Multiscale simulations reveal the role of PcrA helicase in protecting against spontaneous point mutations in DNA. *Sci. Rep.*, 13:21749, 2023.
- [60] B. King, M. Winokan, P. Stevenson, J. Al-Khalili, L. Slocombe, and M. Sacchi. Tautomerisation Mechanisms in the Adenine-Thymine Nucleobase Pair during DNA Strand Separation. *J. Phys. Chem. B*, 127:4220, 2023.
- [61] A. Gheorghiu, P. V. Coveney, and A. A. Arabi. The Influence of Base Pair Tautomerism on Single Point Mutations in Aqueous DNA. *Interface Focus*, 10:20190120, 2020.
- [62] K. Umesaki and K. Odai. A Kinetic Approach to Double Proton Transfer in Watson–Crick DNA Base Pairs. *J. Phys. Chem. B*, 124:1715, 2020.

- [63] A. Gheorghiu, P. V. Coveney, and A. A. Arabi. Proton Transfer Pathways in Biological Systems. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23:6252, 2021.
- [64] A. A. Arabi and C. F. Matta. Effects of Electric Fields on the Physicochemical Properties of DNA Base Pairs. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20:18146, 2018.
- [65] J.-L. Ravanat and T. Douki. UV and ionizing radiations induced DNA damage, differences and similarities. *Radiat. Phys. Chem.*, 128:92, 2016.
- [66] M. Spothem-Maurizot and M. Davidkova. Radiation damage to DNA in DNA-protein complexes. *Mutat. Res. - Rev. Mutat. Res.*, 711:41, 2011.
- [67] J. Cadet, T. Douki, and J.-L. Ravanat. Oxidatively generated base damage to cellular DNA. *Free Radic. Biol. Med.*, 49:9, 2010.
- [68] K. Megha, P. S. Deshmukh, B. D. Banerjee, A. K. Tripathi, R. Ahmed, and M. P. Abegaonkar. Low intensity microwave radiation induced oxidative stress, inflammatory response and DNA damage in rat brain. *NeuroToxicology*, 51:158, 2015.
- [69] S. Sarkar, B. Kumari, and S. Ali. Effect of Radiofrequency Electromagnetic Field on Human DNA. *Def. Sci. J.*, 56:199, 2006.
- [70] S. Kimeswenger, A. Schwarz, D. Födinger, S. Müller, H. Pehamberger, T. Schwarz, and C. Jantschitsch. Infrared A radiation promotes survival of human melanocytes carrying ultraviolet radiation-induced DNA damage. *Exp. Dermatol.*, 25:447, 2016.
- [71] M. Kalka, B. J. Spisak, D. Woźniak, M. Wołoszyn, and D. Kołaczek. Dynamical entropic measure of nonclassicality of phase-dependent family of Schrödinger cat states. *Sci. Rep.*, 13:16266, 2023.
- [72] M. Kalka, P. Pigoń, and B. J. Spisak. Phase-Space Approach for Topological Phase Transitions in Silicene. *Entropy*, 27:857, 2025.
- [73] J. C. Baez. Categories, quantization and much more, 2006. Available at: <https://math.ucr.edu/home/baez/categories.html>.
- [74] M. de Gosson. *The Wigner Transform*. World Scientific, Singapore, 2017.
- [75] I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, and J. Kamiński. *Teoria Kwantów. Mechanika falowa*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2001.
- [76] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2nd edition, 2017.
- [77] P. Boggiatto, G. De Donno, and A. Oliaro. Hudson's theorem for  $\tau$ -Wigner transforms. *Bull. Lond. Math. Soc.*, 45:1131, 2013.
- [78] D. Chruściński and K. Młodawski. Wigner function and Schrödinger equation in phase-space representation. *Phys. Rev. A*, 71:052104, 2005.

- [79] D. I. Bondar, R. Cabrera, D. V. Zhdanov, and H. A. Rabitz. Wigner phase-space distribution as a wave function. *Phys. Rev. A*, 88(5):052108, 2013.
- [80] B. J. Spisak, D. Woźniak, and D. Kołaczek. Dynamics of the  $\tau$ -Wigner distribution function. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 55:504003, 2022.
- [81] C. K. Zachos, D. B. Fairlie, and T. L. Curtright. *Quantum Mechanics in Phase Space: An Overview with Selected Papers*. World Scientific, Singapore, 2005.
- [82] M. Hillery, R. F. O’Connell, M. O. Scully, and E. P. Wigner. Distribution functions in physics: Fundamentals. *Phys. Rep.*, 106:121, 1984.
- [83] F. Bayen, M. Flato, A. Fronsdal, C. and Lichnerowicz, and D. Sternheimer. Quantum mechanics as a deformation of classical mechanics. *Lett Math Phys*, 1:521, 1977.
- [84] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, and D. Sternheimer. Deformation theory and quantization. I. Deformations of symplectic structures. *Ann. of Phys.*, 111:61, 1978.
- [85] M. de Gosson. *Symplectic Methods in Harmonic Analysis and in Mathematical Physics*. Birkhäuser, Basel, 2011.
- [86] K. Y. Kim. A discrete formulation of the Wigner transport equation. *J. Appl. Phys.*, 102:113705, 2007.
- [87] O. Muscato and W. Wagner. A class of stochastic algorithms for the Wigner equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 38:A1483, 2016.
- [88] A. Thomann and A. Borzi. Stability and accuracy of a pseudospectral scheme for the Wigner function equation. *Numer. Methods Partial Differ. Equ.*, 33:62, 2017.
- [89] M. D. Feit, J. A. Fleck, Jr., and A. Steiger. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *J. Comput. Phys.*, 47:412, 1982.
- [90] G. Torres-Vega and J. H. Frederick. Numerical method for the propagation of quantum-mechanical wave functions in phase space. *Phys. Rev. Lett.*, 67:2601, 1991.
- [91] G. Dattoli, L. Giannessi, P. L. Ottaviani, and A. Torre. Split-operator technique and solution of Liouville propagation equations. *Phys. Rev. E*, 51:821, 1995.
- [92] R. Cabrera, D. I. Bondar, K. Jacobs, and H. A. Rabitz. Efficient method to generate time evolution of the Wigner function for open quantum systems. *Phys. Rev. A*, 92:042122, 2015.
- [93] D. Kołaczek, B. J. Spisak, and 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.
- [94] D. Kołaczek, B. J. Spisak, and M. Wołoszyn. Phase-space studies of backscattering diffraction of defective Schrödinger cat states. *Sci. Rep.*, 11:11619, 2021.

- [95] G. Strang. On the Construction and Comparison of Difference Schemes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 5:506, 1968.
- [96] S. A. Chin. Symplectic integrators from composite operator factorizations. *Phys. Lett. A*, 226:344, 1997.
- [97] S. A. Chin and C. R. Chen. Gradient symplectic algorithms for solving the Schrödinger equation with time-dependent potentials. *J. Chem. Phys.*, 117:1409, 2002.
- [98] M. Suzuki. General decomposition theory of ordered exponentials. *Proc. Jpn. Acad. B: Phys. Biol. Sci.*, 69:161, 1993.
- [99] A. A. Vlasov. The vibrational properties of an electron gas. *Sov. Phys. Usp.*, 10:721, 1968. Originally published in 1938.
- [100] D. J. S. Robinson. *A Course in the Theory of Groups*, volume 80 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer New York, NY, 2 edition, 1996.
- [101] J. Gleick. *The Information: A History, a Theory, a Flood*. Pantheon Books, New York, NY, United States, 2011.
- [102] G. Manfredi and M. R. Feix. Entropy and Wigner functions. *Phys. Rev. E*, 62:4665, 2000.
- [103] Z. Van Herstraeten and N. J. Cerf. Quantum Wigner entropy. *Phys. Rev. A*, 104:042211, 2021.
- [104] N. C. Dias, M. A. de Gosson, and J. N. Prata. A refinement of the Robertson-Schrödinger uncertainty principle and a Hirschman-Shannon inequality for Wigner distributions. *J. Fourier Anal. Appl.*, 25:210, 2019.
- [105] N. C. Dias and J. N. Prata. On a recent conjecture by Z. Van Herstraeten and N. J. Cerf for the quantum Wigner entropy. *Ann. Henri Poincaré*, 24:2341, 2023.
- [106] A. Wehrl. General properties of entropy. *Rev. Mod. Phys.*, 50:221, 1978.
- [107] S. Gnutzmann and K. Życzkowski. Rényi-Wehrl entropies as measures of localization in phase space. *J. Phys. A*, 34:10123, 2001.
- [108] A. Wobst, G.-L. Ingold, P. Hänggi, and D. Weinmann. From ballistic motion to localization: a phase space analysis. *Eur. Phys. J. B*, 27(1):11, 2002.
- [109] D. Woźniak, M. Kalka, D. Kołaczek, M. Wołoszyn, and B. J. Spisak. Wignerian symplectic covariance approach to the interaction-time problem. *Sci. Rep.*, 14:31294, 2024.
- [110] D. Woźniak, B. J. Spisak, M. Kalka, M. Wołoszyn, M. Wleklińska, P. Pigoń, and D. Kołaczek. Interaction time of Schrödinger cat states with a periodically driven quantum system: Symplectic covariance approach. *Phys. Rev. A*, 110:022416, 2024.

- [111] M. Ezawa. A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field. *New J. Phys.*, 14:033003, 2012.
- [112] M. Tahir and U. Schwingenschlögl. Valley polarized quantum Hall effect and topological insulator phase transitions in silicene. *Sci. Rep.*, 3:1, 2013.
- [113] C. J. Tabert and E. J. Nicol. Magneto-optical conductivity of silicene and other buckled honeycomb lattices. *Phys. Rev. B*, 88:085434, 2013.
- [114] J. C. Bolivar and R. Elvira. Rényi entropies and topological quantum numbers in 2D gapped Dirac materials. *Phys. Lett. A*, 381:1753, 2017.
- [115] E. Lieb. Integral bounds for radar ambiguity functions and Wigner distributions. *J. Math. Phys.*, 31:594, 1990.
- [116] P. Sadeghi, S. Khademi, and A. H. Darooneh. Tsallis entropy in phase-space quantum mechanics. *Phys. Rev. A*, 86:012119, 2012.
- [117] S. Kullback and R. A. Leibler. On information and sufficiency. *Ann. Math. Statist.*, 22:79, 1951.
- [118] E. Cordero, M. de Gosson, and F. Nicola. On the reduction of the interferences in the Born-Jordan distribution. *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, 44:230–245, 2018.
- [119] W. Schleich, M. Pernigo, and F. Le Kien. Nonclassical state from two pseudoclassical states. *Phys. Rev. A*, 44:2172, 1991.
- [120] C. C. Gerry. Generation of optical macroscopic quantum superposition states via state reduction with a Mach-Zehnder interferometer containing a Kerr medium. *Phys. Rev. A*, 59:4095, 1999.
- [121] A. Ourjoumtsev, R. Tualle-Brouiri, J. Laurat, and P. Grangier. Generating Optical Schrodinger Kittens for Quantum Information Processing. *Science*, 312:83, 2006.
- [122] B. Yurke and D. Stoler. Generating quantum mechanical superpositions of macroscopically distinguishable states via amplitude dispersion. *Physical Review Letters*, 57:13, 1986.
- [123] P. Jordan. *Die Physik und das Geheimnis organischen Lebens*. Friedrich Vieweg & Sohn, Braunschweig, Germany, 1941.
- [124] C. Jantschitsch, S. Majewski, A. Maeda, T. Schwarz, and A. Schwarz. Infrared Radiation Confers Resistance to UV-Induced Apoptosis Via Reduction of DNA Damage and Upregulation of Antiapoptotic Proteins. *J. Investig. Dermatol.*, 129:1271, 2009.
- [125] K. Szyborska-Małek, M. Komorowska, and M. Gąsior-Głogowska. Effects of Near Infrared Radiation on DNA. DLS and ATR-FTIR Study. *Spectrochim. Acta A*, 188:258, 2018.
- [126] J. Mineroff, J. Y. Wang, R. Philip, E. Austin, and J. Jagdeo. Near-infrared light does not induce DNA damage in human dermal fibroblasts. *J. Biophotonics*, 17, 2023.

- [127] J. F. Ward. DNA Damage Produced by Ionizing Radiation in Mammalian Cells: Identities, Mechanisms of Formation, and Reparability. *Prog Nucleic Acid Res Mol Biol.*, page 95, 1988.
- [128] H. Nikjoo, P. O'Neill, W. E. Wilson, and D. T. Goodhead. Computational Approach for Determining the Spectrum of DNA Damage Induced by Ionizing Radiation. *Radiat. Res.*, 156:577, 2001.
- [129] J. Cadet, S. Mouret, J. Ravanat, and T. Douki. Photoinduced Damage to Cellular DNA: Direct and Photosensitized Reactions. *Photochem. Photobiol.*, 88:1048, 2012.
- [130] M. D. Sevilla, D. Becker, A. Kumar, and A. Adhikary. Gamma and ion-beam irradiation of DNA: Free radical mechanisms, electron effects, and radiation chemical track structure. *Radiat. Phys. Chem.*, 128:60, 2016.
- [131] A. P. Schuch, N. C. Moreno, N. J. Schuch, C. F. M. Menck, and C. C. M. Garcia. Sunlight damage to cellular DNA: Focus on oxidatively generated lesions. *Free Radic. Biol. Med.*, 107:110, 2017.
- [132] Y. L. Lin and O. C. O. Dahlsten. Necessity of negative Wigner function for tunneling. *Phys. Rev. A*, 102:062210, 2020.
- [133] H. Sambe. Steady states and quasienergies of a quantum-mechanical system in an oscillating field. *Phys. Rev. A*, 7:2203, 1973.
- [134] M. Grifoni and P. Hänggi. Driven Quantum Tunneling. *Phys. Rep.*, 304:229, 1998.
- [135] M. A. de Gosson and B. Hiley. *The Principles of Newtonian and Quantum Mechanics: The Need for Planck's Constant,  $h$* . WORLD SCIENTIFIC, 2016.
- [136] V.I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer, New York, NY, 1978.
- [137] V.I. Arnold. *Ordinary Differential Equations*. Springer Berlin, Heidelberg, 1992.
- [138] R. Abraham and J. E. Marsden. *Foundations of Mechanics: Second Edition*. AMS Chelsea Publishing, 1978.
- [139] W. Feller. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. J. Willey and Sons, New York, 1971.
- [140] W. O. Kermack and W. H. McCrea. On Professor Whittaker's solution of differential equations by definite integrals: Part II: Applications of the methods of non-commutative Algebra. *Proc. Edinb. Math. Soc.*, 2:220, 1931.
- [141] M. Frigo and S.G. Johnson. The Design and Implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93:216, 2005.
- [142] ECMA International. ECMA-404: The JSON Data Interchange Syntax. Technical report, ECMA International, 2017.