



Kvantumelektrodinamika és Kvantumoptika

6. ELŐADÁS

Az állapotok szemléltetése a fázistéren, Wigner-függvény és más kvázivalószínűségek

Benedict Mihály

SZTE TTIK Elméleti Fizikai Tanszék, Szeged, 2015



„Ágazati felkészítés a hazai ELI projekttel összefüggő képzési és K+F feladatokra ”

TÁMOP-4.1.1.C-12/1/KONV-2012-0005 projekt



MAGYARORSZÁG
KORMÁNYA

Európai Unió
Európai Strukturális
és Beruházási Alapok



BEFEKTETÉS A JÖVŐBE

Tartalom

- 1 Tartalom
- 2 Bevezetés
- 3 Klasszikus mechanika a fázistéren
- 4 Fázisvalószínűség a kvantummechanikában
- 5 A Wigner-függvény a kvantumoptikában
- 6 További kvázivalószínűségi sűrűségfüggvények
- 7 Ellenőrző kérdések

Bevezetés

Megismerkedünk a kvantummechanikai állapot egy speciális leírási módjával, amelyet Wigner Jenő vezetett be 1932-ben.

Ez a módszer jól mutatja, hogy **a kvantummechanika inkább a klasszikus statisztikus mechanika általánosítása**, mint egyszerűen a klasszikus mechanikáé.

Az itt mutatott bevezetés az irodalomban általában ad-hoc módon megadott definíciónál mélyebben indokolja a Wigner-függvény meghatározásának módját.



6.1. ábra: Wigner Jenő (1902-1995)

A kvantummechanikai tárgyalás után a kvantumoptikai alkalmazásra térünk át, hiszen a módszer ismertetésének fő indoka, hogy éppen ezen a területen használják legelterjedtebben ezt az un. **fázisteres leírást**.

A fázistér és a kanonikus egyenletek

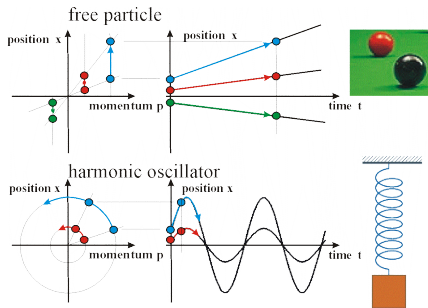
Tekintsünk először az egyszerűség kedvéért egy egyetlen szabadsági fokú klasszikus mechanikai rendszert, amelynek Hamilton függvénye $\mathcal{H}(x, p)$.

A kanonikus mozgásegyenletek alakja:

$$\dot{x} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}.$$

Ezek megoldása valamilyen $\{x_0, p_0\}$ kezdeti érték esetén kijelölik a fázispont mozgását mint az idő függvényét az $\{x, p\}$ fázistérben, ez az $\{x_0, p_0\} \rightarrow \{x(t), p(t)\}$ **fázistrajektória**.

Egyszerű példa: (a fázistér csak 2D) szabad tömegpont, harmonikus oszcillátor egydimenziós mozgása.



A fázispont sebességmező forrásmentes

Jelöljük a fázispont sebességét a fázistéren $\mathbf{u}$ -val: $\mathbf{u} = \{\dot{x}(t), \dot{p}(t)\}$.

A mozgásegyenletek miatt az $\mathbf{u}$ vektor divergenciája a tényleges mozgáshoz tartozó trajektória mentén eltűnik, mert

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial p} \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} \right) = 0. \quad (6.1)$$

Tfh. a részecske helyzetét a fázistérben nem ismerjük pontosan már a kezdeti időpillanatban sem, részecske helyzete $\rightarrow$ egy valószínűségi változó.

Fázisvalószínűség: $f(x, p)$ valószínűségezsűrűség a fázistéren, ami megadja, hogy mekkora valószínűséggel tartózkodik a fázispont a $dx dp$ fázistérbeli térfogatelemben.

Liouville tétele

Egyetlen részecske egydimenziós mozgását vizsgálva, **a rendszer állapotváltozását az $f(x, p, t)$ időfüggő fázisvalószínűség adja meg.**

A fázisvalószínűségre az alábbi

$$f(x, p, t) \geq 0, \quad \text{és} \quad \int f(x, p, t) dx dp = 1.$$

összefüggések minden időpillanatban teljesüljenek. Az utóbbi követelményből következik a **kontinuitási egyenlet**:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) = 0. \quad (6.2)$$

Érvényes továbbá **Liouville tétele**, amely szerint a tényleges pálya mentén:

$$\frac{df(x, p, t)}{dt} = 0.$$

Liouville tételének bizonyítása

Valóban

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial f}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{u}) - f \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6.3)$$

azért mert az első két tag összege a (6.2) kontinuitási egyenlet miatt, a harmadik tag pedig a mozgásegyenletekből következő $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (6.1) miatt tűnik el.

A (6.3) összefüggés a Liouville-egyenlet:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x},$$

ami egy $\mathcal{H} = p^2/2m + V(x)$ alakú Hamilton-függvény esetén f -re az

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p}$$

mozgásegyenletre vezet.

Liouville egyenlet oszcillátorra

Harmonikus oszcillátorra ennek alakja:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + m\omega^2 x \frac{\partial f}{\partial p}$$

és ebben az esetben az explicit megoldást is föl tudjuk írni:

$$f(x, p, t) = f_0(x \cos \omega t - \frac{p}{m\omega} \sin \omega t, p \cos \omega t + m\omega x \sin \omega t), \quad (6.4)$$

ahol $f_0(x, p)$ a $t = 0$ -hoz tartozó kezdeti föltétel.

Ez a megoldás azt mutatja, hogy egy oszcillátor esetén az $f(x, p, t)$ függvény időben ω szögsebességgel forog a fázistér fölött, miközben alakját nem változtatja.

A szokásos valószínűségi sűrűségekre nincs mozgásegyenlet

A klasszikus Liouville-egyenlet,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x},$$

az impulzus és a koordináta együttes eloszlásának időfüggésére vonatkozik.

Nincs olyan klasszikus egyenlet, amely csak a koordináta- $w(x, t)$ vagy csak az impulzuseloszlás $w(p, t)$ valószínűségi sűrűségét adná meg, ilyen egyenlet csak az együttes eloszlást jellemző $f(x, p, t)$ -re létezik.

$\Rightarrow$ nem várunk ilyen mozgásegyenletet a megfelelő kvantummechanikai sűrűségfüggvényekre sem.

Valóban nincs is ilyen egyenlet $|\psi(x, t)|^2$ -re, amely a részecske koordinátájának valószínűségi sűrűségét adja meg. De nincs ilyen a $\psi(x, t)$ amplitúdó (inverz) Fourier-transzformáltjaként adódó $\tilde{\psi}(p, t)$ impulzus-amplitúdóból számítható $|\tilde{\psi}(p, t)|^2$ impulzus valószínűségi sűrűségre sem.

Az x és p együttes sűrűségének kérdése

A kvantummechanikában dinamikai egyenlet a $\psi(x, t)$ -re vagy a Fourier-transzformáltjára, $\tilde{\psi}(p, t)$ -re adható meg $\rightarrow$ ez a **Schrödinger egyenlet**

A két szóban forgó függvény közül bármelyik egyszerre kódolja akár az x akár a p szerinti eloszlást.

Kérdés: Van-e olyan függvény a kvantummechanikában, amely egyszerre az x és a p függvényeként, azaz a Fourier-transzformáció nélkül is tartalmazza a mindkét változó szerinti valószínűségeloszlást?

Igen van. $\rightarrow$ Wigner-függvény

Ilyen kvantummechanikai függvényt először **Wigner Jenő** adott meg 1932-ben. Később további ilyen függvényeket definiáltak, de legelterjedtebben ma is a Wigner által megadott konstrukciót használjuk.

Operátorok szimmetrizálása szükséges

Egy részecske egydimenziós mozgására szorítkozunk.

Megjegyzés: Az eljárás egyszerűen kiterjeszthető háromdimenziós mozgásra, vagy arra az esetre ha sokrészecske-rendszerünk van és itt sík fázisteret tekintünk.

$\mathcal{A}(x, p)$ fizikai mennyiség $\longleftrightarrow$ önadjungált operátor

Az $\mathcal{A}(x, p)$ -hez hozzárendelt operátor azonban **nincs egyértelműen meghatározva**. Függ attól, hogy az X és P operátorokat a szorzatukat is tartalmazó tag jelenléte esetén milyen sorrendben helyettesítjük azokat az $\mathcal{A}(x, p)$ megfelelő változói helyére.

Helyes eljárás: szimmetrizált változat használata.

Példa: Az xp szorzat helyére az $(XP + PX)/2$ operátort helyettesítjük.

Jelölés: A szimmetrizált operátort $A_W(X, P)$ -vel fogjuk jelölni, ahol a W index **H. Weyl** nevére utal.

A fizikai mennyiségek Fourier transzformáltja

Tekintsük a klasszikus $\mathcal{A}(x, p)$ függvény (inverz) Fourier-transzformáltját:

$$\alpha(\lambda, \mu) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint dx dp \mathcal{A}(x, p) e^{-i(\lambda x + \mu p)/\hbar}. \quad (6.5)$$

A föllépő integrálok a közönséges értelemben általában divergensek.

Példa:

- $\mathcal{A}(x, p) = 1 \quad \longleftrightarrow \quad \alpha(\lambda, \mu) = \delta(\lambda)\delta(\mu)$ [kettős Dirac-delta]
- $\mathcal{A}(x, p) = x \quad \longleftrightarrow \quad \alpha(\lambda, \mu) = i\hbar\delta'(\lambda)\delta(\mu)$ [„disztribúció”],

Ahol a Dirac-delta deriváltjának értelmezése: $\int \delta'(\lambda)g(\lambda)d\lambda = -g'(\lambda = 0)$.

A (6.5) transzformáció inverze segítségével kapjuk az $\mathcal{A}(x, p)$ klasszikus fizikai mennyiség Fourier-előállítását:

$$\mathcal{A}(x, p) = \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) e^{i(\lambda x + \mu p)/\hbar}.$$

Operátorok Weyl-szimmetrizáltja

Helyettesítsük az exponenciálisban szereplő klasszikus x és p mennyiségeket az X és P operátorokkal, ekkor az integrálás eredménye az X és P operátorok függvénye lesz:

$$A_W(X, P) := \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar}. \quad (6.6)$$

Ezt nevezzük az A **operátor Weyl szimmetrizáltjának**.

Mint tudjuk, az A_W operátor várható értéke egy $|\psi\rangle$ (tiszta) állapotban az

$$\langle A_W(X, P) \rangle_\psi = \langle \psi | A_W(X, P) | \psi \rangle$$

formulával, számítható ki.

Megjegyzés: A későbbiekben ezen a ponton nem csak tiszta, hanem keverék állapotokat is meg fogunk engedni.

A szimmetrizált operátor várható értékének megfelelő sűrűségfüggvény

Kérdés: Van-e olyan a $|\psi\rangle$ állapothoz tartozó $W_\psi(x, p)$ függvény a fázistéren, amellyel mint valószínűségi sűrűségfüggvénnyel az átlag kiszámítására szolgáló klasszikus valószínűségszámítási szabályt használva éppen a kvantummechanikai átlaggal megegyező eredményt kapjuk?

$$\text{Létezik-e } W_\psi(x, p)? : \boxed{\iint dx dp W_\psi(x, p) \mathcal{A}(x, p) = \langle \psi | A_W(X, P) | \psi \rangle}. \quad (6.7)$$

A bal oldalon a klasszikus szabályt alkalmaztuk: tetszőleges a valószínűségi változótól függő mennyiség várható értéke a sűrűségfüggvény és a kérdéses mennyiség szorzatának teljes térre vett integrálja.

Válasz: Létezik ilyen függvény, ez a $|\psi\rangle$ állapot Wigner-függvénye, amelynek kifejezését alább több formában is megadjuk.

A karakterisztikus függvény

A megkövetelt (6.7) egyenlőség jobb oldala a (6.6) Weyl szimmetrizált segítségével kifejezve:

$$\begin{aligned}\langle\psi| A_W(X, P) |\psi\rangle &= \langle\psi| \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar} |\psi\rangle = \\ &= \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) \chi_\psi(\lambda, \mu),\end{aligned}\tag{6.8}$$

ahol bevezettük a $|\psi\rangle$ állapothoz tartozó $\chi_\psi(\lambda, \mu)$ **karakterisztikus függvényt**.

A karakterisztikus függvény az operátorokat tartalmazó $e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar}$ Fourier operátorbázis várható értéke:

$$\langle\psi| e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar} |\psi\rangle =: \chi_\psi(\lambda, \mu).\tag{6.9}$$

A Wigner-függvény definíciója

Tekintsük most (6.7) baloldalát, ahol a klasszikus $\mathcal{A}(x, p)$ várható értéke szerepel a keresett $W(x, p)$ sűrűségfüggvénnyel a klasszikus szabály szerint számolva. $\mathcal{A}(x, p)$ helyére beírva annak Fourier-előállítását az $\alpha(\lambda, \mu)$ -vel, kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned} \iint dx dp W_\psi(x, p) \mathcal{A}(x, p) &= \iint dx dp W_\psi(x, p) \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) e^{i(\lambda x + \mu p)/\hbar} = \\ &= \iint d\lambda d\mu \alpha(\lambda, \mu) \iint dx dp W_\psi(x, p) e^{i(\lambda x + \mu p)/\hbar}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

Az előírni kívánt (6.7) egyenlőség következik a (6.8) és (6.10) egyenlőségéből, azaz a (6.7) egyenlőség teljesül, ha

$$\iint dx dp W_\psi(x, p) e^{i(\lambda x + \mu p)/\hbar} = \chi_\psi(\lambda, \mu),$$

amiből

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint \chi_\psi(\lambda, \mu) e^{-i(\lambda x + \mu p)/\hbar} d\lambda d\mu.$$

Azaz a $W_\psi(x, p)$ -től elvárt tulajdonság teljesül, ha az a (6.9) alatt definiált $\chi_\psi(\lambda, \mu)$ karakterisztikus függvény inverz Fourier transzformáltja.

A Wigner-függvény további alakjai

Az alábbiakban következő átalakítások alapján a ψ állapot ismeretében W_ψ -t közvetlenül, a karakterisztikus függvény kiszámítása nélkül is meg lehet határozni.

Pl. ha a $\psi(x)$ koordináta hullámfüggvény adott, akkor a karakterisztikus függvény (6.9) definíciója szerint

$$\chi_\psi(\lambda, \mu) = \int \psi^*(x) e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar} \psi(x) dx.$$

Használjuk itt a Baker–Campbell–Hausdorff-formulát a most következő alakban:

$$e^{A+B} = e^{A/2+B+A/2} = e^{\frac{A}{2}} e^B e^{\frac{A}{2}}, \quad (6.11)$$

amely fönnáll, ha $[A, B]$ az egységoperátorral arányos. Ezért

$$\begin{aligned} \chi_\psi(\lambda, \mu) &= \int \psi^*(x) e^{i\mu P/2\hbar} e^{i\lambda X/\hbar} e^{i\mu P/2\hbar} \psi(x) dx = \\ &= \int (e^{-i\mu P/2\hbar} \psi(x))^* e^{i\lambda X/\hbar} e^{i\mu P/2\hbar} \psi(x) dx = \int \psi^*(x - \mu/2) e^{i\lambda x/\hbar} \psi(x + \mu/2) dx. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Megjegyzés: Itt az ismert $e^{i\mu P/2\hbar} \psi(x) = \psi(x + \mu/2)$ összefüggést használtuk, ami azt fejezi ki, hogy az impulzus operátora a térbeli eltolást generálja, és az infinitezimálisan kis $\mu/2$ esetén érvényes $(1 + i\mu P/2\hbar)\psi(x) = (1 + \frac{\mu}{2}\partial_x)\psi(x) = \psi(x + \frac{\mu}{2})$ iterálása alapján bizonyítható véges $\mu/2$ -re is.

A Wigner-függvény további alakjai

Így $\chi_\psi(\lambda, \mu)$ Fourier transzformáltja vagyis a Wigner-függvény:

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \iint \left(\int \psi^*(y - \mu/2) e^{i\lambda y/\hbar} \psi(y + \mu/2) dy \right) e^{-i(\lambda x + \mu p)/\hbar} d\lambda d\mu.$$

S minthogy itt

$$\int e^{i\lambda(y-x)/\hbar} d\lambda = 2\pi\hbar\delta(y-x)$$

kapjuk, hogy

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \psi^*(x - \mu/2) \psi(x + \mu/2) e^{-i\mu p/\hbar} d\mu.$$

Ez a kívánt formula tiszta állapotra.

Másik alak: Az $y = -\mu/2$, $d\mu = -2dy$ helyettesítéssel, az integrációs határok előjelváltozását azok fölcserélésével kompenzálva kapjuk, hogy

$$W_\psi(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \psi^*(x+y) \psi(x-y) e^{2iyp/\hbar} dy.$$

A Wigner-függvény keverék állapotra

Mint láttuk, tiszta állapotokon a Wigner-függvény az $e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar}$ eltolási operátor várható értékének, azaz a χ_ψ karakterisztikus függvénynek a Fourier transzformáltja.

Keverék állapot esetén a definíció ugyanez, csak a várható értéket a keverék esetén használándó

$$\chi_{\hat{\rho}} = \text{Tr} \left(\hat{\rho} e^{i(\lambda X + \mu P)/\hbar} \right)$$

képlettel kell kiszámítani. Ennek nyomán a Wigner-függvényre az előző fejezetben végrehajtott átalakítások megfelelő módosításával a

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \varrho(x + \mu, x - \mu) e^{2i\mu p/\hbar} d\mu$$

eredmény adódik, ahol $\varrho(x', x)$ a $\hat{\rho} = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ sűrűségoperátornak megfelelő $\varrho(x', x) = \langle x' | \hat{\rho} | x \rangle = \sum_i w_i \psi_i^*(x) \psi_i(x')$ „mátrix”, (valójában kétváltozós függvény) koordinátareprezentációban valamilyen $\psi_i(x)$ -ekkel, ahol $\sum_i w_i = 1$.

A Wigner függvény valós

Állítás: A Wigner-függvény valós.

Bizonyítás: képezzük a függvény komplex konjugáltját

$$W_{\psi}^*(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x+y)\psi^*(x-y)e^{-2iyp/\hbar} dy$$

Végezzünk egy egyszerű változóhelyettesítést $y \rightarrow -y$ majd az integrációs határokat cseréljük át:

$$W_{\psi}^*(x, p) = -\frac{1}{\pi\hbar} \int_{\infty}^{-\infty} \psi(x-y)\psi^*(x+y)e^{+2iyp/\hbar} dy = W_{\psi}(x, p).$$

Tehát valóban $W_{\psi}^*(x, p) = W_{\psi}(x, p)$, azaz a Wigner-függvény valós.

A helyes marginális eloszlásokat adja

Állítás: A helyes marginális eloszlásokat adja.

Bizonyítás: A $W(x, p)$ -t integrálva p szerint kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \int W(x, p) dp &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \varrho(x - \mu/2, x + \mu/2) \int e^{-i\mu p/\hbar} d\mu dp = \\ &= \int \delta(\mu) \varrho(x - \mu/2, x + \mu/2) d\mu = \varrho(x, x) = |\psi(x)|^2 \end{aligned} \quad (6.13)$$

A Wigner-függvény x szerint integrálja:

$$\int W(x, p) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint \psi^*(x - \mu/2) \psi(x + \mu/2) e^{-i\mu p/\hbar} d\mu dx,$$

amiben viszont a $\mu = y - z$ és $x = (y + z)/2$ változótranszformációval áttérhetünk az y és z szerinti integrálokra, ahol az integrál két (inverz) Fourier transzformált szorzataként írható. Mivel a Jacobi-determináns 1 kapjuk, hogy,

$$\int W(x, p) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \psi^*(z) e^{ipz/\hbar} dz \int \psi(y) e^{-iy p/\hbar} dy = |\tilde{\psi}(p)|^2. \quad (6.14)$$

A (6.13) és (6.14) formulák szerint a marginális sűrűségek éppen a megfelelő koordináta és impulzusreprezentációbeli valódi valószínűségi sűrűségek. A fentiekből az is látszik, hogy tiszta állapota:

$$\iint W(x, p) dx dp = 1.$$

Bizonyos tartományokon negatív is lehet

Állítás: Bizonyos tartományokon a Wigner-függvény negatív is lehet.

Bizonyítás: Tekintsük példaként a harmonikus oszcillátor stacionárius $u_n(x)$ állapotaihoz tartozó Wigner-függvények értékét a fázistér $(x = 0, p = 0)$ origójában.

A definícióból és az u_n normáltságából következően

$$W_{u_n}(0, 0) = \frac{1}{\pi\hbar} \int u_n^*(y) u_n(-y) dy = \frac{1}{\pi\hbar} (-1)^n,$$

mivel az u_n állapotok n paritásától függő sajátértékkel a paritás sajátállapotai $u_n(-y) = (-1)^n u_n(y)$.

Látható, hogy a páratlan n -hez tartozó állapotok Wigner-függvénye az origóban negatív, míg páros n esetén ez pozitív.

Így a Wigner-függvény bizonyos tartományokon általában negatív értékű is lehet. Mivel egy szokásos klasszikus valószínűségi sűrűségfüggvény mindig nemnegatív, ezért a W függvényt kvázivalószínűségi-sűrűségfüggvények nevezük.

Két állapot átfedésének mértéke a megfelelő Wigner-függvények szorzatának integráljával arányos

Állítás: Két állapot átfedésének mértéke a megfelelő Wigner-függvények szorzatának integráljával arányos

Bizonyítás: A szorzatintegrál kiszámításához először a p szerinti integrálást hajtjuk végre és használjuk, hogy $\int e^{+i(\mu-\nu)p/\hbar} dp = 2\pi\hbar\delta(\mu - \nu)$:

$$\begin{aligned} \int dx dp W_\psi(x, p) W_\varphi(x, p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dx dp \left[\int \psi(x - \mu/2) \psi^*(x + \mu/2) e^{+i\mu p/\hbar} d\mu \right] \times \\ &\quad \times \left[\int \varphi^*(x - \nu/2) \varphi(x + \nu/2) e^{-i\nu p/\hbar} d\nu \right] = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \int \psi(x - \mu/2) \psi^*(x + \mu/2) \varphi^*(x - \nu/2) \varphi(x + \nu/2) \delta(\mu - \nu) d\nu d\mu = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \int \psi(x - \mu/2) \psi^*(x + \mu/2) \varphi^*(x - \mu/2) \varphi(x + \mu/2) d\mu. \end{aligned}$$

Áttérve az $x - \mu/2 = y$, $x + \mu/2 = z$ változókra, ahol a Jacobi determináns $J(\frac{\partial(yz)}{\partial(x\mu)}) = 1$:

$$\int dx dp W_\psi(x, p) W_\varphi(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \psi(y) \varphi^*(y) dy \int \psi^*(z) \varphi(z) dz = \frac{1}{2\pi\hbar} |\langle \psi | \varphi \rangle|^2.$$

Azaz a két Wigner-függvény szorzatának integrálja a megfelelő két állapot belső szorzatának abszolút érték négyzetét adja az $1/2\pi\hbar = 1/h$ tényezőtől eltekintve.

A Wigner függvény időfüggése

Mint hogy a ψ állapotok általában függenek az időtől, a Wigner-függvény is változik időben az alábbi képletnek megfelelően:

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int \psi^*(x + y, t) \psi(x - y, t) e^{2iy p/\hbar} dy.$$

A $W(x, p, t)$ -re potenciális (konzervatív) erőterben mozgó részecske esetén egy mozgásegyenlet is fölírható, amely W időderiváltját annak x és p változói szerinti parciális deriváltjaival határozza meg.

Általános esetben azonban ez egy rendkívül bonyolult alakú parciális egyenlet, ezért azt a legritkább esetben használjuk. Ehelyett inkább a ψ -re vonatkozó Schrödinger-egyenlet megoldását írjuk be minden időpillanatban a W definícióját adó integrálba.

Megjegyzés: Amikor a potenciális energia x^2 -el arányos, azaz egy szabad harmonikus oszcillátor esetében, meg lehet mutatni, hogy a Wigner-függvény egyszerűen az oszcillátor ω frekvenciájával megegyező szögsebességgel forog körbe a fázistér fölött, miközben alakja változatlan. Ez ugyanaz a tulajdonság, amit a klasszikus Liouville egyenletből is kaptunk, ami a harmonikus oszcillátor kitüntetetten egyszerű kvantummechanikájának a következménye.

A kvadratúrák Wigner-függvénye

A kvantumoptikában különösen kiterjedten használják az állapotok jellemzésére a Wigner-függvényt.

- Egy módus esetén a két kvadratúra az X és az Y ugyanolyan fölcserélési relációnak tesz eleget mint a mechanikai rendszer koordináta és az impulzus operátora.
- A kvantumoptikai esetben a két operátor teljesen egyenrangú, így a fázisteres leírás, amely ezt az egyenrangúságot a maga természetes módján hangsúlyozza, teljesen kézenfekvő.

A következőkben áttekintjük a legfontosabb módusállapotok Wigner-függvényeit és rámutatunk arra, hogyan tükröződnek tulajdonságaik a Wigner-függvényükben.

Az eltolási operátor és a karakterisztikus függvény

Az X és Y kvadratúra operátorokkal jellemzett kvantumoptikai módus esetén egy tiszta $|\psi\rangle$ állapot karakterisztikus függvényét a (6.9) definíciónak megfelelően a

$$\chi_\psi(\lambda, \mu) = \langle \psi | e^{i(\lambda X + \mu Y)} | \psi \rangle$$

kifejezéssel, általánosabban pedig $\hat{\rho}$ a sűrűségoperátorral megadott keverékekre is érvényes

$$\chi_{\hat{\rho}}(\lambda, \mu) = \text{Tr} \left(\hat{\rho} e^{i(\lambda X + \mu Y)} \right)$$

formulával adjuk meg. Itt az $e^{i(\lambda X + \mu Y)}$ operátor az $X = (a + a^\dagger)/2$, $Y = (a - a^\dagger)/2i$ alapján a koherens állapotok bevezetésénél megismert

$$D(\beta) = \exp(\beta a^\dagger - \beta^* a)$$

eltolási operátorként is írható, a $\beta = (-\mu + i\lambda)/2$ azonosítással. A karakterisztikus függvény ebben a β komplex változóban

$$\chi_{\hat{\rho}}(\beta) = \text{Tr}(\hat{\rho} D(\beta)) = \text{Tr}(\hat{\rho} e^{\beta a^\dagger - \beta^* a}).$$

A módus Wigner-függvénye

Ezután a Wigner-függvény az előzőek szerint, az $\alpha = x + iy$ változóban

$$W_{\hat{\rho}}(x, y) = W_{\hat{\rho}}(\alpha) = \frac{1}{\pi^2} \iint \text{Tr}(\hat{\rho} D(\beta)) e^{-i(\beta\alpha^* - \beta^*\alpha)} d^2\beta =$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \iint \text{Tr}(\hat{\rho} e^{\beta a^\dagger - \beta^* a}) e^{-i(\beta\alpha^* - \beta^*\alpha)} d(\text{Re}\beta) d(\text{Im}\beta)$$

- A $\hbar$ hiánya az $[X, Y] = i/2$ kommutátor következménye,
- az $1/2^2$ prefaktort pedig a $(\mu, \lambda) \rightarrow (\text{Re}\beta, \text{Im}\beta)$ változó-helyettesítéskor föllépő Jacobi determináns tünteti el.

Koherens állapot Wigner függvénye I.

Az $|\alpha_0\rangle$ koherens állapot egy tiszta állapot, amelynek sűrűségoperátora

$$\hat{\rho}_{\alpha_0} = |\alpha_0\rangle\langle\alpha_0|.$$

Számítsuk ki először a $\chi_{\hat{\rho}}(\beta) = \text{Tr}(\hat{\rho}_{\alpha_0} D(\beta)) = \langle\alpha_0| D(\beta) |\alpha_0\rangle$ karakterisztikus függvényt.

A BCH azonosságot használva:

$$\begin{aligned}\chi_{\alpha_0} &= \langle\alpha_0| D(\beta) |\alpha_0\rangle = \langle\alpha_0| e^{\beta a^\dagger - \beta^* a} |\alpha_0\rangle = \\ &= e^{-|\beta|^2/2} \langle\alpha_0| e^{\beta a^\dagger} e^{-\beta^* a} |\alpha_0\rangle = e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta \alpha_0^* - \beta^* \alpha_0}.\end{aligned}$$

Ebből a Wigner-függvényre:

$$W_{\alpha_0}(\alpha) = \frac{1}{\pi^2} \iint \chi_{\alpha_0}(\beta) e^{-(\beta \alpha^* - \beta^* \alpha)} d^2\beta = \frac{1}{\pi^2} \iint e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta \alpha_0^* - \beta^* \alpha_0} e^{-\beta \alpha^* + \beta^* \alpha} d^2\beta. \quad (6.15)$$

Az ilyen típusú integrálok kiszámításához használjuk az

$$\frac{1}{\pi} \iint e^{-\gamma|\beta|^2} e^{\beta^* \alpha - \beta \alpha^*} d^2\beta = \frac{1}{\gamma} e^{-|\alpha|^2/\gamma} \quad (6.16)$$

integrálformulát, ami tulajdonképpen az $e^{-\gamma|\beta|^2}$ kétváltozós Gauss sűrűség kettős Fourier-transzformáltja, s erről tudjuk, hogy az maga is egy Gauss függvény.

Koherens állapot Wigner-függvénye II.

A fenti (6.16) formulával a (6.15)-ből a **koherens állapot Wigner-függvényére** a

$$W_{\alpha_0}(\alpha) = \frac{2}{\pi} e^{-2|\alpha - \alpha_0|^2}$$

eredményt nyerjük.

Látható, hogy ez a függvény sehol sem negatív, és be lehet bizonyítani, hogy **a tiszta állapotok közül** ez a nemnegativitás csak az oszcillátor intelligens állapotaira érvényes, azaz azokra, amelyek minimalizálják a két kvadratúra szorzatára vonatkozó bizonytalansági relációt, tehát az intelligens állapotok részhalmazát képező koherens állapotokra is. Ez utóbbiakat neveztük kváziklasszikus állapotoknak.

Megjegyzés: A következőkben tárgyalandó préselt koherens állapotokat, amelyekre a Wigner-függvény még szintén mindenütt pozitív, már nemklasszikus állapotoknak szokás nevezni. A préselt állapotok szemléltetésére a Wigner-függvény egyébként különösen alkalmasnak bizonyul majd. Azokat az állapotokat viszont, amelyeken a Wigner-függvény negatív értéket is fölvesz itt erősen nemklasszikus állapotoknak fogjuk nevezni.

Fotonszám sajátállapotok Wigner-függvénye

Erősen nemklasszikus állapotokra példa egy fotonszám sajátállapot (a vákuumot kivéve), amelynek Wigner-függvényét itt részletes levezetés nélkül közöljük. A karakterisztikus függvény alakja

$$\chi_{|n\rangle}(\beta) = \langle n| D(\beta) |n\rangle = \langle n| e^{\beta a^\dagger - \beta^* a} |n\rangle = e^{-|\beta|^2/2} \langle n| e^{\beta a^\dagger} e^{-\beta^* a} |n\rangle$$

ami az a és $a^\dagger$ operátorok $|n\rangle$ -re való hatásából kiértékelhető.

Az eredményből Fourier transzformációval kiszámítható a számállapot Wigner-függvénye:

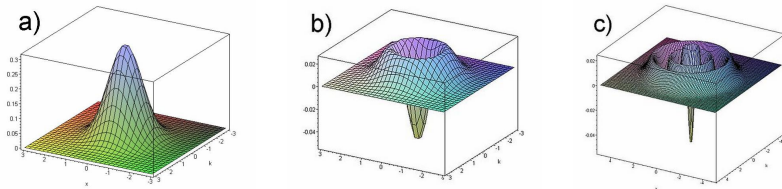
$$W_n(\alpha) = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-2|\alpha|^2} L_n(4|\alpha|^2),$$

ahol L_n az n -edik Laguerre polinom.

Mivel a polinomnak n zéróhelye van, és az azt szorzó exponenciális mindig pozitív, ez a Wigner-függvény n -szer metszi az α síkot, csúcsa az $\alpha = 0$ helyen van, értéke pedig ott n paritásának megfelelően pozitív vagy negatív (lásd korábban is)

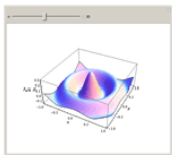
Meg lehet mutatni, hogy a $W_n(\alpha)$ függvény legkülső inflexiós pontja éppen $|\alpha|^2 = n$ -nél van azaz ott, ahol a függvény értéke a fotonszám várható értékével egyezik meg. Ennek a függvénynek az α síkon megjelenő hengerszimmetriája azt jelzi, hogy a számállapotban az állapot fázisa teljesen határozatlan mivel az eloszlás az $\arg \alpha$ szerint teljesen egyenletes.

Fotonszám sajátállapotok Wigner-függvénye



6.2. ábra: Néhány számállapot Wigner-függvénye. *a)* Vákuum állapot, *b)* Az $|1\rangle$ számállapot. *c)* Az $|5\rangle$ számállapot

Animáció:

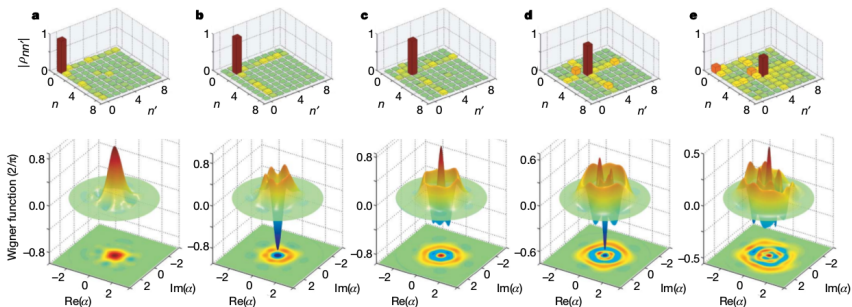


Az alábbi linkről elérhető animációban az egyes számállapotok Wigner-függvényét ábrázoltuk. A forgatható 3D ábrákon figyeljük meg, hogy mely n -ekre vesz fel a Wigner-függvény negatív értékeket.

<http://titan.physx.u-szeged.hu/~mmquantum/demos/>

WignerFunctionOfHarmonicOscillator-dp.html

Fotonszám sajátállapotok Wigner-függvénye



6.3. ábra: Az alsó ábrason az S. Haroche (Párizs) csoportja által végzett kísérletek során előállított számállapotok mérési eredmények alapján rekonstruált Wigner-függvénye látható. Míg a felső ábrán az állapot redukált sűrűségmátrixának elemeit követhetjük. Lásd majd a 11. fejezetben.

Termikus állapot Wigner-függvénye

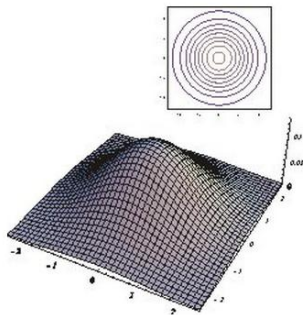
A termikus állapot Wigner-függvényéhez a $\text{Tr}(\hat{\rho}_T D(\alpha))$ karakterisztikus függvényt kell Fourier-transzformálni. Számítsuk a spurt a számállapotok bázisán.

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_T D(\alpha)) = \sum_{n=0}^{\infty} (1-x) \langle n | x^n D(\alpha) | n \rangle.$$

Az eredmény:

$$W_T(\alpha) = \frac{2}{\pi} \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) e^{-2|\alpha|^2 \tanh(\hbar\omega/2kT)},$$

ami a $T = 0$ helyen visszaadja az $|n = 0\rangle$ alap-állapot, illetve ami ugyanaz, az $|\alpha_0 = 0\rangle$ kohe-rens állapot Wigner-függvényét.

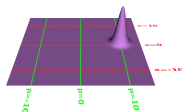


6.4. ábra:
Wigner-függvénye

Termikus állapot Wigner-függvénye

További példák Wigner-függvényre

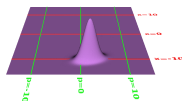
Animáció:



Ez a gif animáció **koherens állapot** Wigner-függvényének időfejlődését szemlélteti.

<http://titan.physx.u-szeged.hu/~mmquantum/demos/glauber-movie.gif>

Animáció:

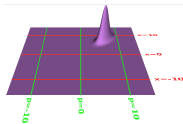


Ez a gif animáció **amplitúdó préselt állapot** Wigner-függvényének időfejlődését szemlélteti.

<http://titan.physx.u-szeged.hu/~mmquantum/demos/glauber-movie-squeezed.gif>

További példák Wigner-függvényre

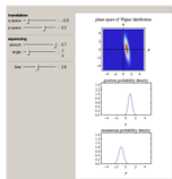
Animáció:



Ez a gif animáció **fázis préselt állapot** Wigner-függvényének időfejlődését szemlélteti.

<http://titan.physx.u-szeged.hu/~mmquantum/demos/glauber-movie-squeezed-90.gif>

Animáció:



Ezen az animáción az un. préselt állapot Wigner-függvényének időfejlődését követhetjük nyomon. Az egyes változókra való kiintegrálással kapjuk a másik változó valószínűségi-sűrűségfüggvényét, amelyet szintén ábrázoltunk.

<http://titan.physx.u-szeged.hu/~mmquantum/demos/>

TimeEvolutionOfSqueezedQuantumStatesOfTheHarmonicOscillator-dp.html

A Husimi-féle Q-függvény

A Wigner-függvényen kívül más kvázivalószínűségi sűrűségfüggvények is használatosak.

Megemlítendő a Wigner-függvényen kívül leggyakrabban használt ún. **Husimi-féle** (vagy a japán nevet helyesebben átírva Fusimi-féle) $Q_{\hat{\rho}}(\alpha)$ sűrűségfüggvényt.

Definíció szerint ez a kérdéses állapot sűrűségoperátorának várható értéke az $|\alpha\rangle$ koherens állapotokon mint az α paraméter függvénye:

$$Q_{\hat{\rho}}(\alpha) := \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \hat{\rho} | \alpha \rangle ,$$

ahol az $1/\pi$ faktor az $\int Q_{\hat{\rho}}(\alpha) d^2\alpha = 1$ normálást biztosítja.

Minthogy a $\hat{\rho}$ nemnegatív operátor, a $Q_{\hat{\rho}}(\alpha)$ a Wigner-függvénnyel ellentétben sehol sem negatív. Egy $|\psi\rangle$ tiszta állapotban, amikor $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ a függvény alakja

$$Q_{|\psi\rangle}(\alpha) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \psi \rangle \langle \psi | \alpha \rangle = \frac{1}{\pi} |\langle \psi | \alpha \rangle|^2 .$$

A Glauber–Sudarshan-féle P-függvény

Egy további kvázivalószínűségi sűrűségfüggvény a **R. Glauber és E. Sudarshan** által bevezetett úgynevezett **P függvény**. Mint tudjuk, egy normálható $\hat{\rho}$ sűrűségoperátor ($\text{Tr}\hat{\rho} = 1$) egy $|u_k\rangle$ tetszőleges valódi ortonormált bázisban általában nem diagonális:

$$\hat{\rho} = \sum_{k,l} \rho_{kl} |u_k\rangle\langle u_l|,$$

de szigorúan diagonalizálható. Érdekes módon azonban a koherens állapotok túlteljes rendszerén **minden $\hat{\rho}$ sűrűségoperátor** formálisan diagonális alakúvá tehető egy alkalmasan választott $P_{\hat{\rho}}(\alpha)$ „függvénnyel”, ami azt jelenti, hogy teljesül a

$$\hat{\rho} = \int P_{\hat{\rho}}(\alpha) |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha$$

egyenlőség. A függvény szó idézőjelét az indokolja, hogy a $P_{\hat{\rho}}(\alpha)$ általában erősen szinguláris kifejezés. Egy $|\alpha_0\rangle$ koherens állapotra láthatólag

$$P_{|\alpha_0\rangle}(\alpha) = \delta^2(\alpha - \alpha_0),$$

azaz már a legklasszikusabbnak tekinthető tiszta állapotokra, tehát a koherens állapotokra sem egy valódi függvény. Még inkább így van ez pl. egy számállapot esetén, ahol a megfelelő P -függvény a Dirac-delta deriváltjaival adható meg. (A részleteket illetően az irodalomra utalunk.) A P -függvény csak bizonyos keverék állapotok esetén válik a szokásos értelemben függvénnyé, pl. termikus állapotok esetén, ezért használata is leginkább azok leírásánál hasznos.

Ellenőrző kérdések

- ❶ Mire vonatkozik a Liouville egyenlet?
- ❷ Mit jelent a Weyl szimmetrizálás a kvantummechanikában?
- ❸ Mit nevezünk karakterisztikus függvénynek?
- ❹ Milyen előírás vezet egy kvantumállapot Wigner-függvényéhez?
- ❺ Soroljuk föl a Wigner-függvény tulajdonságait?
- ❻ Hogyan definiáljuk egy módus állapotának Wigner-függvényét?
- ❼ Mik a jellegzetességei egy koherens állapot Wigner-függvényének?
- ❽ Mik a jellegzetességei egy számállapot Wigner-függvényének?
- ❾ Mik a jellegzetességei egy termikus állapot Wigner-függvényének?
- ❿ Milyen további kvázivalószínűségi sűrűségfüggvényeket szokás használni a mező állapotainak jellemzésére?