

Д. Бондар, Р. Кабрера и Г. Рабиц (США)

Отрицательность функции Вигнера без ореола загадочности

Перевод М.Х. Шульмана (shulman@dol.ru)

arXiv:1202.3628v1 [quant-ph] 16 Feb 2012

Wigner function's negativity demysti_ed

Denys I. Bondar (dbondar@princeton.edu), Renan Cabrera (rcabrera@princeton.edu) и
Herschel A. Rabitz(hrabitz@princeton.edu)

Department of Chemistry, Princeton University, Princeton, NJ 08544, USA

(Dated: February 17, 2012)

Еще в 1932 году Вигнер определил совместное распределение для координаты и импульса квантовой частицы. Несмотря на то, что оно иногда может быть отрицательным, распределение Вигнера выдержало испытание временем и нашло множество применений. Продемонстрировав, что функция Вигнера чистого квантового состояния представляет собой волновую функцию в специально выбранном бра-кет формализме Дирака, в статье показывается, что на самом деле эта функция является амплитудой вероятности для квантовой частицы быть обнаруженной в определенной точке классического фазового пространства. Поскольку амплитуда вероятности не обязана быть положительной, наши результаты проливают свет на старую “загадку отрицательности” волновой функции. Кроме того, устанавливается, что в классическом пределе функция Вигнера преобразуется в классическую волновую функцию Купмана (Коортман) – фон Неймана, а не в классическое распределение вероятностей. Вследствие этого, вопреки широко распространенной точке зрения, объем области отрицательности распределения Вигнера не может давать количественную оценку меры “квантовости” состояния.

В своей исходной работе [1] Вигнер определил комбинированное распределение для координаты и импульса квантовой частицы в терминах волновой функции. С тех пор эта функция, получившая его имя, играет выдающуюся роль в формулировке квантовой механики в фазовом пространстве [2], является стандартным средством построения интерфейса между классической и квантовой областями [3, 4] и имеет широкий диапазон применения в оптике и обработке сигналов [5]. Развиваются также методы экспериментальных измерений функции Вигнера [6 – 8]. Несмотря на такое распространение, функция вызывает беспокойство в силу своей способности принимать отрицательные значения. Вигнер [9] довел эту особенность до уровня загадочности, показав, что только его функция может удовлетворить разумному набору аксиом для совместного распределения вероятностей. Впоследствии отрицательность функции Вигнера мотивировала развитие математического аппарата, описывающего отрицательные вероятности [10, 11]. Более того, широко распространена убежденность в том, что наличие областей отрицательности у распределения Вигнера однозначно характеризует квантовый характер состояния объекта. Даже при наличии сомнений в подобной интерпретации [12], значение подобной отрицательности остается неясным.

В данной статье мы проясняем природу этой отрицательности, выдвигая следующую интерпретацию: функция Вигнера представляет собой амплитуду вероятности для квантовой частицы быть обнаруженной в определенной точке классического фазового пространства, то есть она является волновой функцией, аналогичной волновой функции Купмана – фон Неймана (КН) для классической частицы.

Примерно в то время, когда распределение Вигнера было понято, Купман и фон Нейман [13 – 16] пересмотрели классическую механику в духе, аналогичном квантовой механике, за счет введения классических комплекснозначных волновых функций и представления соответствующих физических наблюдаемых посредством коммутирующих самосопряженных операторов. В частности, было постулировано, что волновая функция $|\Psi(t)\rangle$ классической частицы подчиняется следующему уравнению движения:

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{L}|\Psi(t)\rangle, \quad \hat{L} = \frac{\hat{p}}{m}\hat{\lambda}_x - U'(\hat{x})\hat{\lambda}_p, \quad (1)$$

$$[\hat{x}, \hat{\lambda}_x] = [\hat{p}, \hat{\lambda}_p] = i,$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = [\hat{x}, \hat{\lambda}_p] = [\hat{p}, \hat{\lambda}_x] = [\hat{\lambda}_x, \hat{\lambda}_p] = 0. \quad (2)$$

Без потери общности можно рассмотреть одномерные системы. Поскольку самосопряженные операторы, представляющие классические наблюдаемые координаты $\hat{x}$ и импульса $\hat{p}$, коммутируют, они имеют общий набор ортогональных собственных векторов $|px\rangle$ таких, что $1 = \int dp dx |px\rangle \langle px|$. В классической механике КН все наблюдаемые являются функциями $\hat{x}$ и $\hat{p}$. Математическое ожидание наблюдаемой $\hat{F} = F(\hat{x}, \hat{p})$ в момент t равно $\langle \Psi(t) | \hat{F} | \Psi(t) \rangle$. Амплитуда вероятности $\langle px | \Psi(t) \rangle$ для классической частицы находиться в точке x с импульсом p в момент времени t должна удовлетворять соотношению

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial}{\partial p} \right] \langle px | \Psi(t) \rangle = 0. \quad (3)$$

Это – уравнение эволюции для классической волновой функции в xp -представлении, где $\hat{x} = x$, $\hat{\lambda}_x = -i\partial/\partial x$, $\hat{p} = p$, $\hat{\lambda}_p = -i\partial/\partial p$ с целью удовлетворить коммутационным соотношениям (2). Используя цепочку правил и уравнение (3), мы получаем хорошо известное классическое уравнение Лиувилля для распределения вероятностей в фазовом пространстве $\rho(x, p; t) = |\langle px | \Psi(t) \rangle|^2$,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} - U'(x) \frac{\partial}{\partial p} \right] \rho(x, p; t) = 0. \quad (4)$$

Заметим, что классическая волновая функция и классическое распределение вероятностей удовлетворяют тому же динамическому уравнению, которые отражают физическую несущественность фазы классической волновой функции.

В недавней работе [17] мы предложили квантование по Эренфесту в качестве систематической теоретической парадигмы для вывода уравнений движения, исходя из эволюции средних значений. Во-первых, исходя из теорем

Эренфеста, мы получаем уравнение Шрёдингера, если операторы координаты и импульса подчиняются каноническому коммутационному соотношению, и уравнение КН (1), если операторы координаты и импульса коммутируют. Затем, применяя тот же подход к теоремам Эренфеста,

$$m \frac{d}{dt} \langle \Psi_{\kappa}(t) | \hat{x}_q | \Psi_{\kappa}(t) \rangle = \langle \Psi_{\kappa}(t) | \hat{p}_q | \Psi_{\kappa}(t) \rangle, \\ \frac{d}{dt} \langle \Psi_{\kappa}(t) | \hat{p}_q | \Psi_{\kappa}(t) \rangle = \langle \Psi_{\kappa}(t) | -U'(\hat{x}_q) | \Psi_{\kappa}(t) \rangle, \quad (5)$$

с обобщением $[\hat{x}_q, \hat{p}_q] = i\hbar\kappa$ ($0 \leq \kappa \leq 1$) и требованием гладкого классического предела $\kappa \rightarrow 0$, мы показали, что

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_{\kappa}(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{qc} |\Psi_{\kappa}(t)\rangle, \\ \hat{\mathcal{H}}_{qc} = \frac{\hbar}{m} \hat{p} \hat{\lambda}_x + \frac{1}{\kappa} U \left(\hat{x} - \frac{\hbar\kappa}{2} \hat{\lambda}_p \right) - \frac{1}{\kappa} U \left(\hat{x} + \frac{\hbar\kappa}{2} \hat{\lambda}_p \right), \\ \hat{x}_q = \hat{x} - \hbar\kappa \hat{\lambda}_p / 2, \quad \hat{p}_q = \hat{p} + \hbar\kappa \hat{\lambda}_x / 2, \quad (6)$$

где $\hat{x}_q$ и $\hat{p}_q$ представляют квантовые координату и импульс $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{\lambda}_x$ соответственно, а $\hat{\lambda}_p$ являются теми же классическими операторами что и в уравнении (2), и κ обозначает меру квантовости / коммутативности: $\kappa \rightarrow 1$ соответствует квантовой механике, в то время как $\kappa \rightarrow 0$ отвечает классической механике $\lim_{\kappa \rightarrow 0} \hat{\mathcal{H}}_{qc} = \hbar \hat{L}$. См. рис. 1 для уяснения образного итога этих выводов, полностью изложенных в [17].

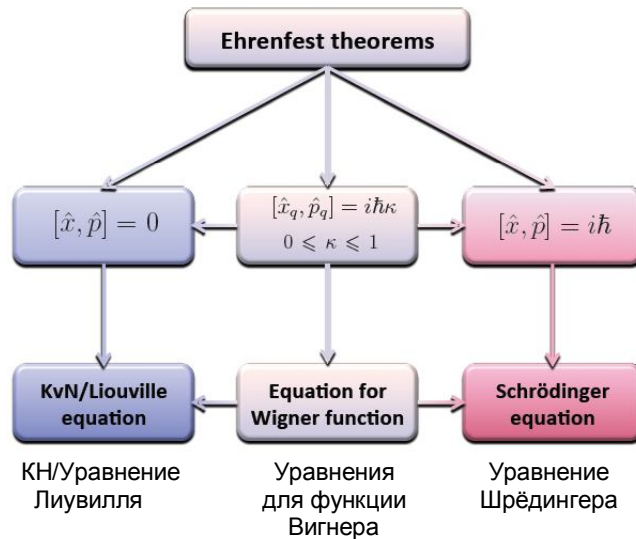


Рисунок 1.

Вывод представлений квантовой механики, классической механики и квантовой механики в фазовом пространстве с помощью квантования по Эренфесту, предложенного в [17].

Основным моментом нашего текущего обсуждения является то, что эта унифицированная волновая функция $|\Psi_\kappa\rangle$ (т здесь и далее опущено) в хр-представлении пропорциональна функции Вигнера W :

$$\langle px|\Psi_\kappa\rangle = \sqrt{2\pi\hbar\kappa}W(x,p),$$

$$W(x,p) = \int \frac{dy}{2\pi\hbar\kappa} \rho_\kappa\left(x - \frac{y}{2}, x + \frac{y}{2}\right) e^{ipy/(\hbar\kappa)}, \quad (7)$$

где ρ_κ обозначает матрицу плотности с $\hbar$, замененной на $\hbar\kappa$ [17]. Прямые вычисления показывают, что условие нормировки для унифицированной волновой функции требует, чтобы эта матрица плотности соответствовала чистому состоянию

$$\langle\Psi_\kappa|\Psi_\kappa\rangle = 1 \iff \hat{\rho}_\kappa^2 = \hat{\rho}_\kappa. \quad (8)$$

Полагая $\hat{\rho}_\kappa = |\phi_\kappa\rangle\langle\phi_\kappa|$, мы можем показать, что все математические ожидания для состояния $|\phi_\kappa\rangle$ совпадают с ожиданиями для $|\Psi_\kappa\rangle$:

$$\langle\Psi_\kappa|G(\hat{x}_q)F(\hat{p}_q)|\Psi_\kappa\rangle = \langle\phi_\kappa|G(\hat{x}_q)F(\hat{p}_q)|\phi_\kappa\rangle, \quad (9)$$

где $G(\hat{x}_q)$ и $F(\hat{p}_q)$ – произвольные функции квантовой координаты и импульса соответственно.

Уравнения (8) и (9) выявляют то обстоятельство, что распределение Вигнера для чистого состояния действительно ведет себя подобно волновой функции. Как показано на рис. 1, динамическое уравнение для функции Вигнера (6) переходит в уравнение эволюции для классической волновой функции КН (1). Следовательно, в классическом пределе функция Вигнера отображает квантовую волновую функцию в соответствующую классическую волновую функцию КН, а не в классическое распределение в фазовом пространстве. Поскольку векторы $|px\rangle$ идентичны в КН и в представлении Вигнера, $W(x,p)$ пропорциональна амплитуде вероятности, с которой квантовая частица оказывается в точке (x,p) классического фазового пространства. Заметим, что важно различать классическое $(\hat{x},\hat{p})$ и квантовое $(\hat{x}_q,\hat{p}_q)$ фазовые пространства, потому что понятие точки в фазовом пространстве естественно вырастает только для коммутативных классических переменных $(\hat{x},\hat{p})$. Можно продолжить это различие дальше и интерпретировать функцию Вигнера как волновую функцию КН классического аналога сходной квантовой системы. В любом случае функция Вигнера, как и любая другая волновая функция, не обязана быть строго положительной, а ее отрицательность не требует обязательной квантовой природы системы или динамики.

Следующее утверждение, доказанное в [17], служит в качестве иллюстрации вышеуказанной интерпретации: уравнение $\hat{\mathcal{H}}_{qc} = \hbar\hat{L}$ справедливо только для квадратичного потенциала; именно, квантовые и классические гармонические осцилляторы с идентичным коэффициентом упругости имеют одни и те же собственные состояния. Следовательно, волновые функции Вигнера и КН этих собственных состояний совпадают.

Благодарности. Авторы благодарят за финансовую поддержку DARPA QuBE, NSF и ARO.

Ссылки:

- [1] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40(5):749-759, 1932. [doi:10.1103/PhysRev.40.749].
- [2] C. Zachos, D. Fairlie, and T. Curtright. *Quantum Mechanics in Phase Space*. World Scientific, Singapore, 2005.
- [3] A. Ö. Bolivar. *Quantum-classical correspondence: dynamical quantization and the classical limit*. Springer, Berlin; New York, 2004.
- [4] W. H. Zurek. Sub-Planck structure in phase space and its relevance for quantum decoherence. *Nature*, 412(6848):712-717, 2001. [doi:10.1038/35089017].
- [5] D. Dragoman. Applications of the Wigner Distribution Function in Signal Processing. *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*, 2005(10):1520-1534, 2005. [doi:10.1155/ASP.2005.1520].
- [6] S. Deleglise, I. Dotsenko, C. Sayrin, J. Bernu, M. Brune, J.-M. Raimond, and S. Haroche. Reconstruction of non-classical cavity field states with snapshots of their decoherence. *Nature*, 455(7212):510-514, 2008. [doi:10.1038/nature07288].
- [7] A. Ourjoumtsev, H. Jeong, R. Tualle-Brouri, and P. Grangier. Generation of optical 'Schrödinger cats' from photon number states. *Nature*, 448(7155):784-786, 2007. [doi:10.1038/nature06054].
- [8] Ch. Kurtsiefer, T. Pfau, and J. Mlynek. Measurement of the Wigner function of an ensemble of helium atoms. *Nature*, 386(6621):150-153, 1997. [doi:10.1038/386150a0].
- [9] R.F. O'Connell and E.P. Wigner. Quantum-mechanical distribution functions: Conditions for uniqueness. *Phys. Lett. A*, 83(4):145-148, 1981. [doi:10.1016/0375-9601(81)90870-7].
- [10] W. Muckenheimer, G. Ludwig, C. Dewdney, P.R. Holland, A. Kyprianidis, J.P. Vigiér, N. Cufaro Petroni, M.S. Bartlett, and E.T. Jaynes. A review of extended probabilities. *Physics Reports*, 133(6):337-401, 1986. [doi:10.1016/0370-1573(86)90110-9].
- [11] P.T. Landsberg. Can a negative quantity be deemed a probability? *Nature*, 326(6111):338-338, 1987. [doi:10.1038/326338b0].
- [12] C. Ferrie. Quasi-probability representation of quantum theory with applications to quantum information science. *Reports on Progress in Physics*, 74(11):116001, 2011. [doi:10.1088/0034-4885/74/11/116001].
- [13] B. O. Koopman. Hamiltonian systems and transformation in hilbert space. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 17(5):315-318, 1931. [<http://www.pnas.org/content/17/5/315.html>].
- [14] J. von Neumann. Zur Operatorenmethode in der klassischen Mechanik. *Ann. Math.*, 33(3):587-642, 1932. [<http://www.jstor.org/stable/1968537>].
- [15] J. von Neumann. Zusätze zur Arbeit "Zur Operatorenmethode...". *Ann. Math.*, 33(4):789-791, 1932. [<http://www.jstor.org/stable/1968225>].
- [16] Danilo Mauro. *Topics in Koopman-von Neumann Theory*. PhD thesis, Università degli Studi di Trieste, 2002. arXiv:quant-ph/0301172.
- [17] D. I. Bondar, R. Cabrera, R. R. Lompay, M. Yu. Ivanov, and H. A. Rabitz. The Ehrenfest quantization: The derivation of quantum, classical, and unified mechanics from observable data. arXiv:1105.4014, 2011.