Wariacje na temat funkcji Wignera

Iwo Białynicki-Birula

Centrum Fizyki Teoretycznej

Warszawa

Zjazd PTF Kielce 2015

Klasyczna mechanika statystyczna

Funkcję Wignera najlepiej można zrozumieć zaczynając od klasycznej mechaniki statystycznej W teorii tej stan układu opisuje nieujemna funkcja

$$f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) \geq 0$$

wyznaczająca gęstość prawdopobieństwa znalezienia cząstek wokół punktu $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$

Średnie wartości wielkości fizycznych

Funkcja $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ musi spełniać warunek unormowania

$$\int d^3r \int d^3p \, f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = 1$$

Wartość średnią wielkości $A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ określa całka

$$\langle A \rangle = \int d^3r \int d^3p \, A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$$

Dwie gęstości prawdopodobieństwa

Z funkcji $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$ możemy skonstruować dwie odrębne gęstości prawdopodobieństwa

Gęstość prawdopodobieństwa w położeniach

$$\rho(\boldsymbol{r}, t) = \int d^3p\, f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$$

oraz gęstość prawdopodobieństwa w pędach

$$\tilde{\rho}(\boldsymbol{p}, t) = \int d^3r\, f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$$

Ewolucja czasowa rozkładu prawdopodobieństwa

W najprostszym przypadku, gdy cząstki poruszają się zgodnie z prawami dynamiki Newtona pod wpływem zewnętrznej siły $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ to funkcja $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ spełnia równanie ewolucji postaci

$$\partial_t f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) + \left[\frac{1}{m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\nabla}_r + \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{\nabla}_p\right] f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = 0$$

wynikające z zasady zachowania prawdopodobieństwa

Opis stanu w mechanice kwantowej

Mechanika kwantowa jest również teorią statystyczną

W teorii tej stan opisuje funkcja falowa $\psi(\boldsymbol{r}, t)$

Równoważny opis daje też transformata Fouriera

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t) = \int \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\psi(\boldsymbol{r}, t)$$

Obie te funkcje mają interpretację probabilistyczną

Gęstości prawdopodobieństwa w mechanice kwantowej

Z dwóch funkcji otrzymujemy dwie gęstości:

Gęstość prawdodobieństwa w przestrzeni położeń

$$\rho(\boldsymbol{r}, t) = |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$$

oraz gęstość prawdodobieństwa w przestrzeni pędów

$$\tilde{\rho}(\boldsymbol{p}, t) = |\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)|^2$$

Funkcja Wignera

Czy istnieje jedna funkcja $W(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$

która tak jak w klasycznej mechanice statystycznej

daje po wycałkowaniu obie kwantowe gęstości?

Tak! Jest to funkcja Wignera dana wzorami

$$W(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) = \int \frac{d^3\xi}{(2\pi\hbar)^3}\, \psi(\boldsymbol{r} - \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, t) e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\xi}/\hbar} \psi^*(\boldsymbol{r} + \frac{\boldsymbol{\xi}}{2}, t)$$

$$= \int \frac{d^3\eta}{(2\pi\hbar)^3}\, \tilde{\psi}(\boldsymbol{p} - \frac{\boldsymbol{\eta}}{2}, t) e^{-i\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\eta}/\hbar} \tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p} + \frac{\boldsymbol{\eta}}{2}, t)$$

Zasada nieoznaczoności

Dokładny odpowiednik klasycznej funkcji rozkładu
w teorii kwantowej nie może istnieć
ze względu na zasadę nieoznaczoności
Funkcja Wignera może jednak służyć jako namiastka
klasycznej funkcji rozkładu ponieważ
spełnia kilka podstawowych warunków

“Klasyczne” własności funkcji Wignera

Funkcja Wignera ma sporo własności wspólnych z klasyczną gęstością prawdopodobieństwa $f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$

1. $W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ jest unormowana do jedności

2. Dwie kwantowe gęstości mają “klasyczną” postać
$\rho(\boldsymbol{r},t)=\int d^3\boldsymbol{p}\, W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$ i $\tilde{\rho}(\boldsymbol{p},t)=\int d^3\boldsymbol{r} W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$

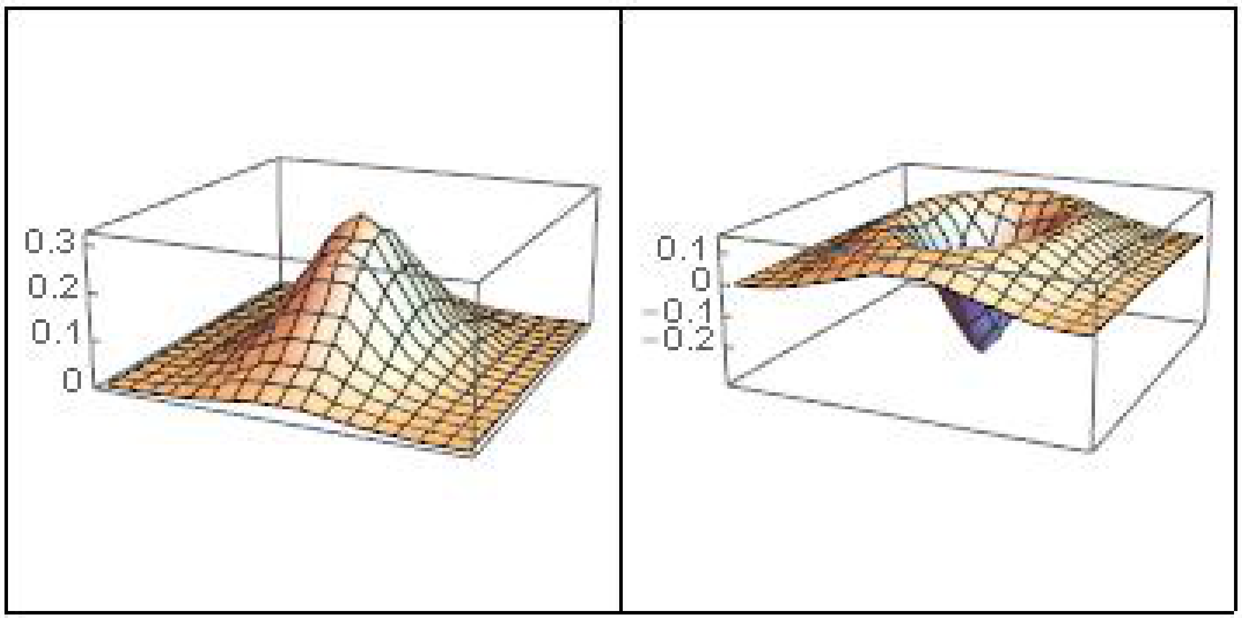
3. Średnie wartości też mają taką postać
$$\langle A\rangle = \int d^3r \int d^3p\, A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$$

$$\mathbf{W(r,p,t) \neq f(r,p,t)}$$

Funkcji Wignera nie można utożsamiać z $f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t)$

gdyż przyjmuje ona na ogół wartości ujemne!

Stan podstawowy   Stan wzbudzony



Równanie ewolucji dla funkcji Wignera

Kwantowe własności są widoczne wyraźnie
w równaniu ewolucji

$$\partial_t W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = \left[\frac{1}{m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\nabla}_r - V(\boldsymbol{r})\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}}_r\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\nabla}}_p\right] W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) +$$

$$V(\boldsymbol{r})\left[\frac{\hbar^2}{24}(\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}}_r\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\nabla}}_p)^3 - \frac{\hbar^4}{1920}(\overleftarrow{\boldsymbol{\nabla}}_r\cdot\overrightarrow{\boldsymbol{\nabla}}_p)^5 + \ldots\right] W(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$$

Oscylator harmoniczny o temperaturze T

Funkcja Wignera doskonale nadaje się

do opisu stanów mieszanych

Ważnym stanem mieszanym jest stan

układu kwantowego w równowadze z otoczeniem

Funkcja Wignera jest sumą z wagami $e^{-E_n/k_b T}$

Dla oscylatora harmonicznego otrzymujemy

$$W^T = \frac{\tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \exp\left[-2 \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \frac{H(x,p)}{\hbar\omega}\right]}{\pi\hbar}$$

Stan podstawowy i granica klasyczna

Stan podstawowy otrzymujemy dla $T = 0$

$$\boldsymbol{W_0(x,p) = \frac{\exp\left[-2\,\frac{H(x,p)}{\hbar\omega}\right]}{\pi\hbar}}$$

Granica klasyczna to oczywiście $\hbar \to 0$

$$\boldsymbol{W_{\mathrm{cl}}(x,p) = \frac{\exp\left[-\,\frac{H(x,p)}{k_B T}\right]}{2\pi k_B T/\omega}}$$

Pole elektromagnetyczne=Zbiór oscylatorów

$$\boldsymbol{W_{EM}^T = \exp[-2N_{EM}^T]}$$

$$\boldsymbol{N_{EM}^T = \frac{1}{4\pi\hbar c}\int d^3r\int d^3r'}$$

$$\boldsymbol{\times\frac{\epsilon_0 E(r)\cdot E(r') + B(r)\cdot B(r')/\mu_0}{\ell_Q|r-r'|\,\mathrm{sinh}(\pi|r-r'|/\ell_Q)}}$$

Kwantowa długość termiczna

$$\boldsymbol{\ell_Q = \frac{\hbar c}{k_B T}} = 2.3\times 10^{-3}\,\mathrm{m}/T[\mathrm{kelvin}]$$

Pole grawitacyjne=Zbiór oscylatorów

$$W_G^T = \exp[-2N_G^T]$$

$$N_G^T(R) = -\int d^3r \int d^3r' f_G(|r - r'|)$$

$$\times \sum_{ij} (\mathcal{E}_{ij}(r)\mathcal{E}_{ij}(r') + \mathcal{B}_{ij}(r)\mathcal{B}_{ij}(r'))$$

$$\mathcal{E}_{ij} = R_{i0j0} \text{ and } \mathcal{B}_{ij} = \frac{1}{2}\epsilon_{ikl}R_{j0}{}^{kl}$$

Energia pola grawitacyjnego

W granicy $T \to \infty$ otrzymujemy wzór Boltzmanna

Energia pola grawitacyjnego dana jest wzorem

$$\boldsymbol{E_G = \frac{c^4}{32\pi^2 G} \int d^3r \int d^3r'}$$

$$\times \sum_{ij} \frac{\boldsymbol{\mathcal{E}_{ij}(r)\mathcal{E}_{ij}(r') + \mathcal{B}_{ij}(r)\mathcal{B}_{ij}(r')}}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}$$