

Seminar zur Theorie der Atome, Kerne und kondensierten Materie

Unschärfen in klassischen und quantenmechanischen Systemen

Wigner Funktionen und Weyl-Transformation

Christopher Schmoll

13. November 2013



Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	3
2	Einführung der Wigner-Funktion	4
2.1	Weyl-Transformation	4
2.2	Definition der Wigner-Funktion	4
3	Eigenschaften der Wigner-Funktion	5
4	Harmonischer Oszillator	6
4.1	Hamilton-Operator	6
4.2	Eigenzustände	6
4.3	Kohärente Zustände	7
4.4	Zeitentwicklung	8
4.5	Katzenzustände	9

1 Motivation

Die übliche Lehrbuch-Beschreibung der Quantenmechanik geht von der Schrödingergleichung $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$ aus. Die Wellenfunktion $|\Psi\rangle$ kann sowohl im Orts- $[\Psi(x)]$ als auch im Impulsraum $[\Phi(p)]$ dargestellt werden, zwischen beiden Räumen kann ohne Informationsverlust mit Hilfe der Fouriertransformation gewechselt werden. Dabei tragen die Wellenfunktionen die volle Information, mit ihnen lassen sich alle Erwartungswerte berechnen, welche wiederum den Messergebnissen im Experiment entsprechen. Soll nun ein solcher Erwartungswert berechnet werden, ist es notwendig die Wahrscheinlichkeitsdichte zu berechnen. Im Ortsraum ist diese $|\Psi(x)|^2$, im Impulsraum $|\Phi(p)|^2$. In der Wahrscheinlichkeitsdichte geht die Phaseninformation der Wellenfunktionen verloren. Bei Unkenntnis der Wellenfunktion und gegebener Wahrscheinlichkeitsdichte ist es nicht möglich beliebige Erwartungswerte zu berechnen. Soll beispielsweise der Erwartungswert des Impulses berechnet werden, reicht die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum nicht aus:

$$\int \Psi^*(x) \hat{P} \Psi(x) dx = \langle \hat{P} \rangle = \int p |\Phi(p)|^2 dp. \quad (1.1)$$

Existiert eine quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsverteilung, die dieses Problem umgeht und die volle Information trägt? Im klassischen Phasenraum existiert eine solche Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(x, p)$, der Zustand eines klassischen Systems wird als Punkt im Phasenraum beschrieben und ist scharf messbar. Im quantenmechanischen Fall jedoch setzt die Heisenbergsche Unschärferelation im Phasenraum der Messgenauigkeit eine Grenze $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.

Es sind keine scharfen Messergebnisse zu erhalten, die Quantenmechanik ist folglich eine statistische Theorie. Der Erwartungswert des Ortsoperators gibt beispielsweise an, dass im Mittel das System am Ort $\langle \hat{x} \rangle$ zu finden ist. Um diesen Erwartungswert tatsächlich experimentell zu bestätigen sind eine Vielzahl an Messungen nötig, wobei der Erwartungswert dem Mittelwert der Messungen entspricht. Diese Eigenschaft ist mit einem Ensemble von Trajektorien im klassischen Phasenraum zu vergleichen. Eugene Paul Wigner ist es im Jahr 1932 gelungen ein Analogon zur Wahrscheinlichkeitsverteilung im quantenmechanischen Phasenraum herzuleiten. Die Herleitung wird im Folgenden dargestellt; es wird gezeigt, dass eine Beschreibung durch Wigner-Funktionen absolut äquivalent zu der Beschreibung durch die Schrödingergleichung ist.

2 Einführung der Wigner-Funktion

2.1 Weyl-Transformation

Die von Hermann Weyl 1927 eingeführte Weyl-Transformation verknüpft einen Operator im Orts- oder Impulsraum mit dem quantenmechanischen Phasenraum. Betrachtet wird ein Operator \hat{A} , dieser kann in verschiedenen Basen dargestellt werden, im Ortsraum über $\langle x'|\hat{A}|x\rangle$ und im Impulsraum über $\langle p'|\hat{A}|p\rangle$. Die Weyl-Transformierte \tilde{A} des Operators ist dann definiert als:

$$\tilde{A}(x, p) = \int e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \hat{A} | x - \frac{y}{2} \rangle dy. \quad (2.1)$$

Verwendet man die Darstellung des Operators im Impulsraums ergibt sich:

$$\tilde{A}(x, p) = \int e^{ixu/\hbar} \langle p + \frac{u}{2} | \hat{A} | p - \frac{u}{2} \rangle du. \quad (2.2)$$

2.2 Definition der Wigner-Funktion

Die Definition der Wigner-Funktion ergibt sich aus der sogenannten Weyl-Transformation des Projektionsoperators der Zustandswellenfunktion, auch Dichteoperator $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ genannt. Die Wigner-Funktion ist dann definiert als:

$$\begin{aligned} W(x, p) &= \tilde{\rho}/\hbar = \frac{1}{\hbar} \int e^{-ipy/\hbar} \langle x + \frac{y}{2} | \Psi \rangle \langle \Psi | x - \frac{y}{2} \rangle dy \\ &= \frac{1}{\hbar} \int e^{-ipy/\hbar} \Psi(x + \frac{y}{2}) \Psi^*(x - \frac{y}{2}) dy. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Für die Berechnung des Erwartungswertes eines Operators \hat{A} ergibt sich direkt

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{\hbar} \iint \tilde{\rho}(x, p) \tilde{A}(x, p) dx dp = \iint W(x, p) \tilde{A}(x, p) dx dp. \quad (2.4)$$

Aus der Wigner-Funktion lassen sich dann Wahrscheinlichkeitsdichten durch die Integration über eine der Phasenraumvariablen

$$\begin{aligned} \int W(x, p) dp &= \int \frac{1}{\hbar} \int e^{-ipy/\hbar} \Psi(x + \frac{y}{2}) \Psi^*(x - \frac{y}{2}) dy dp \\ &= \int \delta(y) \Psi(x + \frac{y}{2}) \Psi^*(x - \frac{y}{2}) dy = \Psi^*(x) \Psi(x) = |\Psi(x)|^2 \end{aligned} \quad (2.5)$$

reproduzieren. Die Integration der Wigner-Funktion über p entspricht einer Projektion auf die x -Achse, selbiges kann auch für die Integration über x gezeigt werden:

$$\int W(x, p) dx = \Phi^*(p) \Phi(p) = |\Phi(p)|^2. \quad (2.6)$$

3 Eigenschaften der Wigner-Funktion

- Wahrscheinlichkeitsdichten, die aus der Schrödinger-Gleichung erhalten werden, sind normiert, dies gilt auch für die Wigner-Funktion im gesamten Phasenraum. Direkt aus Gleichung (2.5) zu ersehen

$$\iint W(x, p) dx dp = \int \Psi^*(x) \Psi(x) dx = 1. \quad (3.1)$$

- Bei der Wigner-Funktion spricht man von einer Pseudowahrscheinlichkeit, da die Funktion auch negative Werte annehmen kann.
- Die Wigner-Funktion ist beschränkt. Es lässt sich zeigen, dass gilt:

$$|W(x, p)| \leq \frac{1}{\pi \hbar}. \quad (3.2)$$

Aus dieser Gleichung lässt sich erkennen, dass die Wigner-Funktion die Heisenbergsche Unschärferelation erfüllt. Sie ist normiert im Phasenraum und zudem beschränkt, daraus folgt unmittelbar, dass eine minimale aber endliche Breite der Wignerfunktion existiert. Im klassischen Fall existiert eine solche Einschränkung nicht. Dort ist die Wahrscheinlichkeitsdichte ein Produkt aus Delta-Distributionen

$$W_{\text{klassisch}}(x, p) = \delta(x - x_0) \cdot \delta(p - p_0). \quad (3.3)$$

- Es wurde gefordert, dass die Wigner-Funktion die gesamte Information der Wellenfunktion enthalten soll, dies ist nur gegeben, falls sich die Wellenfunktion aus ihr rekonstruieren lässt, da auch sie die volle Information trägt. Es ergibt sich

$$\Psi(x) = \frac{1}{\Psi^*(0)} \int W(x/2, p) e^{ipx/\hbar} dp. \quad (3.4)$$

Es ist also allgemein möglich, im speziellen Fall allerdings nicht einfach, die ursprüngliche Wellenfunktion zu rekonstruieren.

4 Harmonischer Oszillator

4.1 Hamilton-Operator

Im Folgenden wird der quantenmechanische harmonische Oszillator betrachtet, dabei werden die Wigner-Funktionen einiger Eigenzustände betrachtet, sowie einige weitere spezielle Zustände. Auch die Zeitentwicklung im Phasenraum wird beleuchtet. Der Hamilton Operator des harmonischen Oszillators lautet

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}'^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}'^2, \quad (4.1)$$

wobei m die Masse des Teilchens und ω die Stärke des Potentials darstellt. Wir wählen für die weitere Berechnung nun dimensionslose Variablen

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\hat{x}', \quad \text{und} \quad \hat{p} = \sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}}\hat{p}', \quad (4.2)$$

die die Wigner Funktion symmetrisch werden lassen. Diese neuen Variablen werden wir nun im Weiteren benutzen. Aus ihnen ergeben sich neue Auf- und Absteigeoperatoren, für diese fordern wir die bekannte Kommutatorrelation:

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2}(\hat{x} - i\hat{p}) \quad \text{und} \quad \hat{a} = \frac{1}{2}(\hat{x} + i\hat{p}) \quad \text{mit} \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (4.3)$$

Mit den neuen Variablen ergibt sich der Hamilton Operator in der Form

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{4}(\hat{x}^2 + \hat{p}^2) = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}). \quad (4.4)$$

Der Kommutator des neuen Orts- und Impulsoperators ergibt sich zu:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = 2i. \quad (4.5)$$

Dies kann verwendet werden, um die allgemeine Heisenbergsche Unschärferelation zu berechnen:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle| = 1. \quad (4.6)$$

4.2 Eigenzustände

In einem ersten Schritt werden nun die Eigenzustände des harmonischen Oszillators berechnet. Die ersten beiden Eigenzustände erhalten wir aus den Auf- und Absteigeoperatoren:

$$\hat{a}|0\rangle = 0|0\rangle \quad (4.7)$$

$$\hat{a}^\dagger|0\rangle = |1\rangle. \quad (4.8)$$

Die sich ergebenden Differentialgleichungen müssen dann gelöst werden, man findet

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{4}} \quad (4.9)$$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} x e^{-\frac{x^2}{4}}. \quad (4.10)$$

Die hergeleiteten Wellenfunktionen können nun dazu verwendet werden, die Wigner-Funktionen zu berechnen. Dazu verwenden wir die Definition nach Gleichung (2.4).

Die Wigner Funktionen ergeben sich zu

$$W_0(x, p) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}(x^2+p^2)} \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} W_1(x, p) &= \frac{1}{2\pi} (x^2 + p^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}(x^2+p^2)} \\ &= (x^2 + p^2 - 1) W_0(x, p). \end{aligned} \quad (4.12)$$

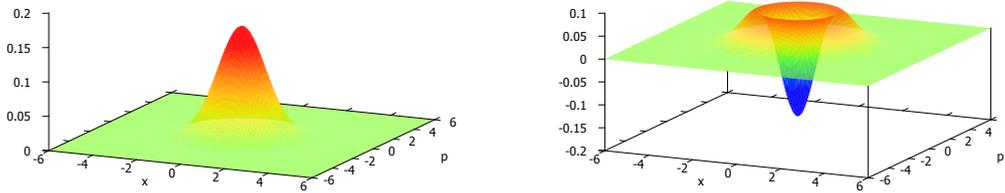


Abbildung 4.1: Wigner Funktion zum Grundzustand(links) und 1. angeregten Eigenzustand(rechts) des harmonischen Oszillators

Das Unschärfeprodukt für den Grundzustand ergibt sich zu

$$\Delta x \cdot \Delta p = 1.$$

Für den Vakuumzustand ergibt sich folglich eine minimale Unschärfe. Für den 1. angeregten Eigenzustand hingegen findet man

$$\Delta x \cdot \Delta p = 3.$$

Eigenzustände des harmonischen Oszillators sind stationäre Zustände, stationäre Zustände existieren im klassischen Fall nicht, sind also ein rein quantenmechanisches Phänomen. Die Wigner-Funktion des 1. Eigenzustands weist Negativitäten auf, dies ist im klassischen Fall für eine Wahrscheinlichkeitsdichte nicht möglich. Solche Negativitäten deuten typischerweise auf quantenmechanische Eigenschaften hin, wie sie eben bei den Eigenzuständen zu finden sind. Eine Ausnahme bildet der Vakuumzustand, er ist der einzige Eigenzustand, der keine Negativitäten aufweist.

4.3 Kohärente Zustände

Die Definition eines kohärenten Zustands ist, dass das Unschärfeprodukt $\Delta x \Delta p$ zu allen Zeiten minimal ist, im Falle der neu gewählten Variablen also 1 mit $\Delta x = \Delta p$. Der Grundzustand erfüllt diese Bedingung und ist der einfachste kohärente Zustand. Alle anderen Eigenzustände sind keine kohärenten Zustände, wie gesehen verletzt der 1. Eigenzustand die Bedingung der minimalen Unschärfe. Man findet, dass kohärente Zustände durch verschieben des Vakuumzustandes im Phasenraum erzeugt werden können. Eine andere Definition geht von den Leiteroperatoren aus,

dabei werden die kohärenten Zustände als Eigenzustände des Absteigeoperators dargestellt. Die Gleichung erfüllt natürlich auch der Grundzustand $n = 0$ zum Eigenwert $\alpha = 0$ [2]:

$$\begin{aligned}\hat{a}|\alpha\rangle &= \alpha|\alpha\rangle \\ \hat{a}|0\rangle &= 0|0\rangle.\end{aligned}$$

Die Eigenwerte $\alpha \in \mathbb{C}$ bestimmen die Erwartungswerte von \hat{x} und \hat{p} gemäß

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{a} + \hat{a}^\dagger \rangle = \alpha + \alpha^* = 2\text{Re}(\alpha) \qquad \langle \hat{p} \rangle = 2\text{Im}(\alpha). \quad (4.13)$$

Die wichtigste Eigenschaft der kohärenten Zustände ist die Erhaltung der Unschärfe:

$$\Delta x_\alpha = \Delta x_0 \qquad \Delta p_\alpha = \Delta p_0. \quad (4.14)$$

Die Wigner Funktion eines kohärenten Zustands ergibt sich dann zu:

$$W_\alpha(x, p) = \frac{1}{2\pi} \exp \left[-\frac{1}{2} \left((x - 2\text{Re}(\alpha))^2 + (p - 2\text{Im}(\alpha))^2 \right) \right]. \quad (4.15)$$

Warum man hier vom verschobenen Vakuumzustand für $\alpha \neq 0$ spricht, wird durch die Darstellung der Wigner-Funktion in Abbildung 4.2 verdeutlicht.

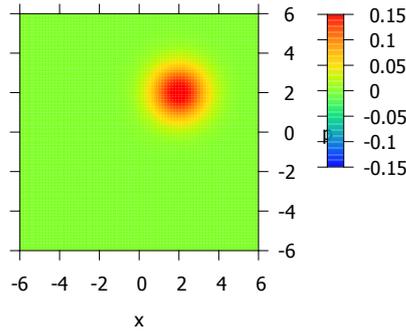


Abbildung 4.2: Wigner-Funktion zum kohärenten Zustand mit Eigenwert $\alpha = 1 + i$ dargestellt.

4.4 Zeitentwicklung

Bis jetzt wurden lediglich die stationären Gleichungen betrachtet, in diesem Schritt wird nun die Zeitabhängigkeit mit einbezogen.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{h} \int e^{-ipy/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} [\Psi^*(x - y/2)\Psi(x + y/2)] dy \quad (4.16)$$

Die Ableitungen der Wellenfunktionen lassen sich nun durch die zeitabhängige Schrödingergleichung darstellen, dadurch ergeben sich Summen in der Zeitableitung, wobei die einzelnen Terme entweder von der kinetischen oder der potentiellen Energie abhängen. Als Ergebnis ergibt sich die DGL zu

$$\frac{\partial W(x, p)}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial W(x, p)}{\partial x} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial W(x, p)}{\partial p}. \quad (4.17)$$

Das Ergebnis entspricht der klassischen Liouville Gleichung. Die Zeitentwicklung des kohärenten Zustands des quantenmechanischen Oszillators im Phasenraum ist damit rein klassisch. Die zeitliche Entwicklung der Wigner-Funktion kann aufgrund der rein klassischen DGL durch die klassische Zeitabhängigkeit beschrieben werden.

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) + \frac{p_0}{m\omega} \sin(\omega t) \quad (4.18)$$

$$p(t) = p_0 \cos(\omega t) - m\omega x_0 \sin(\omega t) \quad (4.19)$$

Dieses Ergebnis ist allerdings nur für lineare und quadratische Potentiale exakt gültig. Für Potentiale höherer Ordnung ergeben sich zusätzliche Ableitungen des Potentials und die obige DGL stellt lediglich eine Näherung dar. Insbesondere verlässt die Gleichung dann den klassischen Gültigkeitsbereich, da diese dann zusätzlich abhängig von \hbar ist. Als Beispiel wird im Folgenden die Wigner-Funktion für den Spezialfall $x_0 = 2, p_0 = 0$ dargestellt.

$$W(x, p; t) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{1}{2}(x - 2 \cos(\omega t))^2\right] \times \exp\left[-\frac{1}{2}(p + 2 \sin(\omega t))^2\right] \quad (4.20)$$

Die soeben berechnete Bewegung im quantenmechanischen Fall ist in der folgenden Abbildung dargestellt:

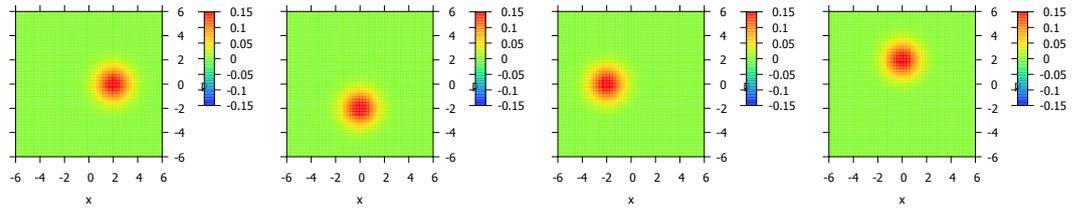


Abbildung 4.3: Zeitentwicklung des kohärenten Zustands.

In der Reihenfolge der Bilder: $t = 0, t = T/4, t = T/2, t = 3T/4$

Man sieht, dass sich die Wigner-Funktion kreisförmig und formstabil im Phasenraum bewegt. Bei den kohärenten Zuständen spricht man auch von quasi klassischen Zuständen, betrachtet man die vorgestellten Ergebnisse, wird leicht der Grund ersichtlich. Die Unschärfe ist minimal und somit am ehesten mit der klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte zu identifizieren, die Phasenraumdynamik der kohärenten Zustände ergibt sich analog zur klassischen Beschreibung. Sowohl die Wigner-Funktion, als auch die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte bewegen sich kreisförmig im Phasenraum.

4.5 Katzenzustände

Katzenzustände sind nach dem berühmten Gedankenexperiment von Erwin Schrödinger benannt, indem die Katze gleichzeitig als tot und lebendig betrachtet werden kann. Katzenzustände sind Superpositionen aus zwei kohärenten Zuständen, durch die Tensor Darstellung des Dichteoperators ergeben sich Interferenzterme. Das System befindet sich dann in einer quantenmechanischen Superposition zweier quasi-klassischer Zustände.

Das Superpositionsprinzip ist für Lösungen der Schrödingergleichung anwendbar. Auch im klassischen Phasenraum ist diese Linearität gegeben. Die Interferenzterme des Dichteoperators führen jedoch dazu, dass die Wigner-Funktion eines Katzenzustandes nicht gegeben ist durch die Summe der Wigner-Funktionen der einzelnen Zustände, sondern Mischterme der beiden Wigner-Funktionen enthält. Exemplarisch ist in Abbildung 4.4 ein solcher Katzenzustand dargestellt:

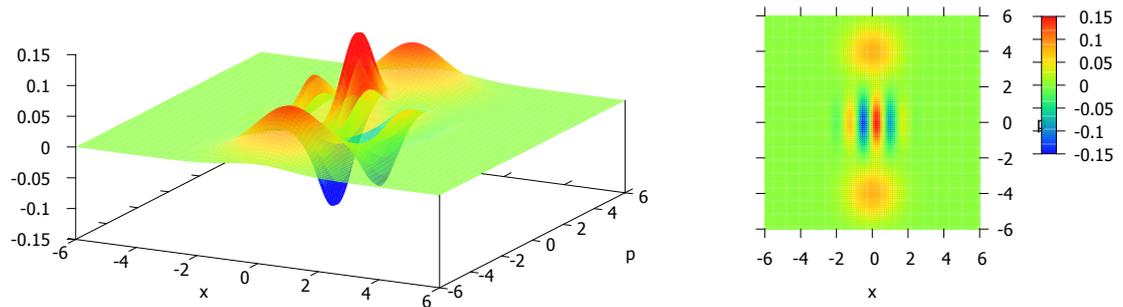


Abbildung 4.4

Deutlich zu erkennen sind die beiden kohärenten Zustände die überlagert werden, sie haben die typische Gaußform und liegen an den äußeren Enden. Zwischen beiden ist eine Streifenstruktur zu finden, diese stammt aus den Interferenztermen und sorgt für die quantenmechanischen Eigenschaften des Systems, in ihr ist die gesamte Phaseninformation des Systems zu finden.

Literaturverzeichnis

- [1] William B. Case. *Wigner functions and Weyl transforms for pedestrians*. American Journal of Physics **76**, 937. 2008
- [2] Wolfgang P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Auflage: 1. Auflage
- [3] Daniel Wigger. *Gequetschte Phonon-Zustände in optisch angeregten Halbleiter-Quantenpunkten*. Diplomarbeit. Arbeitsgruppe von Prof. Dr. T. Kuhn, Institut für Festkörpertheorie, Universität Münster. 2012
- [4] Serge Haroche and Jean-Michel Raimond. *Exploring the Quantum Atoms, Cavities, and Photons*. Oxford University Press. First Published 2006
- [5] Serge Haroche, Jean-Michel Raimond. *Reconstruction of non-classical cavity field states with snapshots of their decoherence*. Nature **455**, 510. 2008