

УДК 530.145.1

Метод томографического интеграла Фейнмана в квантовой механике

05, май 2012

Федоров А. К.

*Студент,
кафедра «Защита информации»*

*Научный руководитель: Юрченко С.О.
к.ф.-м.н., доцент кафедры «Физика»*

МГТУ им. Н.Э. Баумана

bauman@bmstu.ru

Введение. На сегодняшний день активно развивается новый подход к описанию квантовых состояний, основанный на использовании симплектических томограмм неотрицательных функций распределения вероятностей [1, 2, 3]. Они представляют большой интерес, поскольку могут быть измерены экспериментально [1, 2]. Вместе с тем, томографическая формулировка квантовой механики эквивалентна другим известным на сегодняшний день формулировкам квантовой механики, а симплектическая томограмма связана с различными функциями квазираспределений, например, W-функцией Вигнера [4], P-функцией Глаубера-Сударшана [5, 6] и Q-функцией Хусими-Кано [7].

В настоящей работе найдено представление для симплектической томограммы через интеграл Фейнмана по траекториям в фазовом пространстве:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = x \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int \int \int D\{x(t)\} \exp \left[iS(x_2, x_1) + \frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \psi(x_1) dx_1 dx_2 \right|^2.$$

Показано, что предлагаемый метод позволяет искать представления решения для эволюционного интегро-дифференциального уравнения Фоккера-Планка в континуальных интегралах. В качестве примера найдены квантовые томограммы гармонического осциллятора.

Также построена томографическая теория возмущений. Показано, что томографический пропагатор подчиняется уравнению, которое аналогично разложению функции Грина. Получено борновское разложение для симплектической томограммы:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int \exp \left[\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \psi(x_2) (P_0(x_2, x_1) + P^{(1)}(x_2, x_1) + P^{(2)}(x_2, x_1) \dots) dx_1 dx_2 \right|^2.$$

Предварительные сведения. Томографическое представление квантовой механики использует линейное каноническое преобразование фазового пространства (q, p) — действие симплектической группы $SP_2(\mathbb{R})$:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon \\ \sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu & \eta \\ \eta' & \mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где q — координата, p — импульс, а μ, μ', η, η' — действительные числа.

Преобразование (1) является каноническим, поэтому оно сохраняет невырожденные ко-симметрические билинейные формы: скобку Пуассона в классическом случае и коммута-

тор в квантовом. Мы будем предполагать, что как для новых, так и для старых переменных выполнены уравнения Гамильтона, следовательно, справедливы вариационные принципы:

$$\delta \int (pdq - H(q, p)dt) = \delta \int (\sigma d\varepsilon - \bar{H}(\varepsilon, \sigma)dt) = 0, \quad (2)$$

где $\bar{H}(\varepsilon, \sigma)$ — гамильтониан системы после преобразования (1).

Частным случаем преобразования (1) является действие матриц группы вращения $SO(R)$. Тогда преобразование (1) является поворотом фазового пространства на некоторый действительный угол. В таком случае симплектическая томограмма превращается в маргинальное распределение гомодинной переменной в квантово-оптических схемах томографии [2].

В общем случае (1) — это поворот фазового пространства с взаимным масштабированием по осям p и q . Симплектическая томограмма $T(\varepsilon, \mu, \eta)$ наблюдаемой ε которая является линейной комбинацией квадратурных компонент

$$\hat{\varepsilon} = \mu \hat{q} + \eta \hat{p}$$

определяется через волновую функцию следующим образом:

$$T(\varepsilon, \mu, \eta) = |\Psi(\varepsilon)|^2 = |\hat{\mathcal{F}}\psi(x)|^2, \quad (3)$$

где $\hat{\mathcal{F}}$ — линейный унитарный оператор.

Можно показать, что таким линейным унитарным оператором является интегральный оператор дробного преобразования Фурье:

$$T(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int \psi(x) \exp \left(\frac{i\mu}{2\eta} x^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x \right) dx \right|^2. \quad (4)$$

Из определения симплектической томограммы (4) следует, что она представляет собой нормированную, положительную и однородную функцию:

$$\int T(\varepsilon, \mu, \eta) d\varepsilon = 1, \quad T(\varepsilon, \mu, \eta) \geq 0, \quad T(\varepsilon, \mu, \eta) = |\lambda| T(\lambda\varepsilon, \varepsilon\lambda\mu, \lambda\eta).$$

Свойство однородности позволяет применять для симплектических томограмм уравнение Эйлера для однородных функций

$$T(\varepsilon, \mu, \eta) = -\mathbf{r} \nabla T(\varepsilon, \mu, \eta), \quad (5)$$

$\mathbf{r}$ — радиус-вектор расслоения фазового пространства после преобразования (1).

Общий вид решения уравнения (5):

$$T_f(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{|\mu|} f \left(\frac{\varepsilon}{\mu}, \frac{\eta}{\mu} \right),$$

где f — произвольная функция.

Функции, удовлетворяющие уравнению (5), называются томограммами Френеля. Решение уравнения Эйлера для симплектических томограмм позволяет снизить размерность расслоения фазового пространства, на котором рассматривается томограмма. Таким образом, несмотря на то, что томограмма является функцией трех переменных, существует возможность реализовать ее представление через две нормированные переменные.

Целью данной работы является поиск представления для симплектической томограммы через интеграл Фейнмана по траекториям. Предложенный до этого метод классического пропагатора [3] требует знания начального распределения вероятности. Это является существенным усложнением, поскольку такой формализм предполагает измерения как начального, так и конечного состояния системы. Технически, с учетом особенностей экспериментальной реализации [1, 2], это означает ансамблевые измерения начального состояний и ансамблевые измерения конечного состояния. В случае использования некоторой модельной волновой функции и предлагаемого метода необходимо однократное измерение.

Пусть эволюция рассматриваемой квантово-механической системы происходит согласно уравнению Шредингера. Рассмотрим задачу Коши для уравнения Шредингера

$$-\frac{1}{2}\Delta\psi(x, t) + V(x)\psi(x, t) = i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t), \quad \psi(0, 0) = \psi_0(x),$$

Волновые функции будем рассматривать с учетом стандартного условия нормировки:

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

Тогда для произвольных моментов времени t_1 и t_2 справедливо уравнение:

$$\psi(x_2, t_2) = \int G(x_2, x_1, t_2 - t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (6)$$

где $G(x_2, x_1, t_2 - t_1)$ — функция Грина (ядро) уравнения Шредингера.

Физически, функция Грина представляет собой амплитуду вероятности перехода из начального состояния в конечное состояние. Таким образом, задача Коши для дифференциального уравнения Шредингера свелась к интегральному уравнению (6), которое может быть разрешено численно, например, квантовым методом Монте-Карло [8]: вариационным или диффузионным. Прием функция Грина обладает свойством

$$G(x_2, x_1, t_2 - t_1) = 0 \quad \forall t_1 \geq t_2.$$

В работе Фейнмана [9] показано, что при переходе из состояния (x_1, t_1) в состояние (x_2, t_2) функцию Грина (6) можно рассматривать как интеграл по траекториям:

$$G(x_2, x_1, t_2 - t_1) = \int_{\Omega} \exp[iS(x_2, x_1)] \mathcal{D}[x(t)], \quad (7)$$

где $S(x_2, x_1)$ — функционал действия, под $\mathcal{D}[x(t)]$ подразумевается интегрирование по конфигурационному пространству Ω функций $x(t)$.

Нами рассматриваются линейные канонические преобразования в фазовом пространстве. Поэтому будем использовать гамильтонову формулировку интегралов по траекториям [10] — интегралы по фазовому пространству обобщенных координат и импульсов. Будем предполагать, что задан гамильтониан системы в общем виде:

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x).$$

В силу справедливости вариационного принципа (2) интеграл

$$I = \int \{p\dot{x} - H\} dt$$

принимает экстремальное значение. Его можно представить в виде

$$I = \int \left(p\dot{x} - \frac{p^2}{2} - V(x) \right) dt = \sum_{j=1}^N \left(p_j \Delta x_j - \frac{p_j^2}{2} \Delta t_j - \int_{t_{j-1}}^{t_j} V(x) dt \right).$$

Воспользуемся следующим преобразованием:

$$p_j \Delta x_j - \frac{p_j^2}{2} \Delta t_j = -\frac{\Delta t_j}{2} \left(p_j - \frac{\Delta x_j}{\Delta t_j} \right)^2 + \frac{1}{2} \frac{\Delta x_j^2}{\Delta t_j}.$$

Пусть

$$\beta_j = p_j - \frac{\Delta x_j}{\Delta t_j}.$$

Вычислим интеграл Эйлера—Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[i \left(-\frac{\Delta t_j}{2} \beta_j^2 \right) \right] d^3 \beta_j = \left(-\frac{2\pi i}{\Delta t_j} \right)^{3/2}.$$

Таким образом, интеграл по траекториям (7) понимается в следующем смысле:

$$\begin{aligned} \int \exp \left[i \int (p \dot{x} - H) dt \right] d^3 p_1 \dots d^3 p_N d^3 x_1 \dots d^3 x_{N-1} = \\ = \prod_{j=1}^N \left(-\frac{2\pi i}{\Delta t_j} \right)^{3/2} \int \exp \left(\frac{i}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\Delta x_j^2}{\Delta t_j} - \int_{t_{j-1}}^{t_j} V(x) dt \right) d^3 x_1 \dots d^3 x_{N-1} = \\ = \prod_{j=1}^N \left(-\frac{2\pi i}{\Delta t_j} \right)^{3/2} \int \exp[iS(x)] d^3 x_1 \dots d^3 x_{N-1}, \quad \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \left(-\frac{2\pi i}{\Delta t_j} \right)^{3/2} d^3 x_j. \end{aligned}$$

Томографический интеграл Фейнмана по траекториям. Для решения поставленной задачи будем использовать связь между симплектической томограммой и волновой функцией. Для волновой функции справедливо уравнение (6). Тогда симплектическую томограмму можно представить в виде:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \iint G(x_2, x_1, t_2 - t_1) \exp \left(\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right) \psi(x_1) dx_1 dx_2 \right|^2$$

Или с учетом представления Фейнмана (7) для функции Грина:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \iiint \mathcal{D}\{x(t)\} \exp \left[iS(x_2, x_1) + \frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \psi(x_1) dx_1 dx_2 \right|^2. \quad (8)$$

Уравнение (8) представляет собой основной результат данной работы. Полученный результат диктует следующую физическую интерпретацию. Если мы предполагаем некоторое начальное состояние системы — начальное условие задачи Коши — и знаем гамильтониан системы, то результат гомодинного детектирования (экспериментального измерения томограммы) в экспериментах типа [1, 2] выражается через уравнение (8).

Условие нормировки на функциональный интеграл (8):

$$\frac{1}{2\pi|\eta|} \int \left| \iiint \mathcal{D}\{x(t)\} \exp \left[iS(x_2, x_1) + \frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \psi(x_2) dx_1 dx_2 \right|^2 d\varepsilon = 1.$$

Введем в рассмотрение функцию, которую будем называть *томографическим пропагатором*, следующего типа:

$$\mathcal{P} = \int \mathcal{D}\{x(t)\} \exp \left[iS(x_2, x_1) + \frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] dx_1 = \exp \left[\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \int G(x_2, x_1, t) dx_1.$$

Тогда представление (8) имеет следующую эквивалентную формулировку в терминах томографического пропагатора:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int \mathcal{P}(\varepsilon, \mu, \eta) \psi(x_2) dx_2 \right|^2.$$

Рассмотрим вопрос о представлении решения эволюционного уравнения для томограммы в виде функционального интеграла. Рассмотрим уравнение Фоккера — Планка для различных квантово-механических моделей. Для гамильтониана общего вида

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\hat{q}),$$

уравнение Фоккера — Планка:

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \mu \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \eta} + i \left[-V \left(I_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{i\eta}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) + V \left(I_\varepsilon \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{i\eta}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \right] \mathcal{T}, \quad (9)$$

где I_ε — оператор интегрирования.

Для свободной частицы получается дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} - \mu \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \eta} = 0.$$

Для гармонического осциллятора

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \mu \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \eta} - \eta \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \mu}. \quad (10)$$

Для параметрического осциллятора

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \mu \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \eta} - \omega^2(t) \eta \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \mu}.$$

Симплектическая томограмма представляет собой решение уравнения Фоккера — Планка. Поэтому формула (8) позволяет искать решение уравнения (9) с учетом связи между томограммой и волновой функцией (3). Задачи о представлении решения данного уравнения ранее рассматривались [11], потому как существует его тесная связь с формулировкой Фейнмана интегралов по траекториям и представлением решения задачи Коши для уравнения Шредингера.

При помощи установленной формулы (8), в качестве примера, дано решение уравнения Фоккера — Планка для гармонического осциллятора. Как известно, функция Грина представляет собой

$$G(q_2, q_1, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \sin t}} \exp \left(\frac{i[(x_1^2 + x_2^2) \cos t - 2x_1 x_2]}{2 \sin t} \right).$$

Представление решения уравнения Фоккера — Планка

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int dx_2 \exp \left(\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right) \int \frac{dx_1 \psi(x_1)}{\sqrt{2\pi i \sin t}} \times \right. \\ \left. \times \exp \left(\frac{i[(x_1^2 + x_2^2) \cos t - 2x_1 x_2]}{2 \sin t} \right) \right|^2. \end{aligned}$$

Таким образом, можно получить волновые функции гармонического осциллятора. В общем случае решение выглядит следующим образом:

$$\mathcal{T}(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{2^{-n}}{n! \sqrt{\pi(\mu^2 + \eta^2)}} \exp \left(-\frac{\varepsilon^2}{\mu^2 + \eta^2} \right) H_n^2 \left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\mu^2 + \eta^2}} \right), \quad (11)$$

где $H(x)$ — полиномы Эрмита.

Томограммы основного и первого возбужденного состояния гармонического осциллятора могут быть легко вычислены:

$$\mathcal{T}_0(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{\sqrt{\pi(\mu^2 + \eta^2)}} \exp \left(-\frac{\varepsilon^2}{\mu^2 + \eta^2} \right),$$

$$\mathcal{T}_1(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{2\varepsilon^2}{(\mu^2 + \eta^2) \sqrt{\pi(\mu^2 + \eta^2)}} \exp \left(-\frac{\varepsilon^2}{\mu^2 + \eta^2} \right).$$

Полученные численные решения (10) полностью совпадают с аналитическими решениями. Интересным является тот факт, что в случае определенного соотношения между параметрами системы отсчета томограммы вырождаются в обычные плотности вероятности в координатном представлении, что видно из рис. 1.

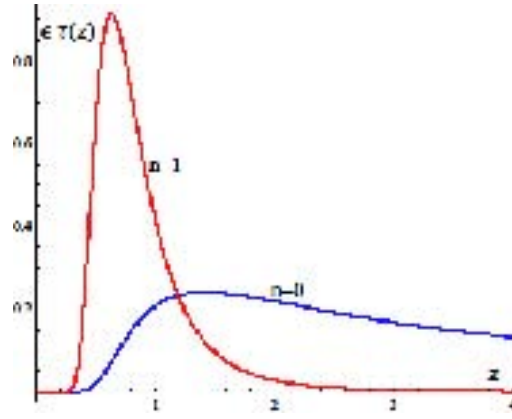


Рис. 1. Томограммы основного и первого возбужденного состояния

Томографическая теория возмущений. Из вышеизложенного следует, как можно описать эволюцию квантово-механической системы с помощью томографического интеграла по траекториям (8). С помощью него можно записать борновское разложение томограммы — ряд теории возмущений, который часто оказывается полезен при малых возмущающих потенциалах.

Пусть волновая функция подчиняется уравнению (6). Рассмотрим томографический пропагатор вида

$$\mathcal{P} = \left[\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \int G(x_2, x_1, t) dx_1.$$

Причем, пусть потенциал, который содержится в функции Грина, достаточно мал. Более строго предположим, что интеграл по времени от потенциала вдоль траектории мал по сравнению с единицей. Тогда часть экспоненциального члена, содержащая потенциал, может быть разложена в ряд, определенный для некоторой траектории. Тогда можно получить разложение для функции Грина [9]:

$$G(x_2, x_1) = G_0(x_2, x_1) + G^{(1)}(x_2, x_1) + G^{(2)}(x_2, x_1) \dots, \quad (12)$$

где элементы (12) определяются:

$$\begin{aligned} G_0(x_2, x_1) &= \int_{x_1}^{x_2} \exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{p^2}{2} dt \right] \mathcal{D}\{x(t)\}; \\ G^{(1)}(x_2, x_1) &= -i \int_{x_1}^{x_2} \exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{p^2}{2} dt \right] \int_{t_1}^{t_2} V[x(s), s] ds \mathcal{D}\{x(t)\}; \\ G^{(2)}(x_2, x_1) &= -i \int_{x_1}^{x_2} \exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{p^2}{2} dt \right] \int_{t_1}^{t_2} V[x(s), s] ds \int_{t_1}^{t_2} V[x(s'), s'] ds' \mathcal{D}\{x(t)\}. \end{aligned}$$

Аналогичные соотношения, в силу свойства аддитивности интеграла, можно написать и для томогатора

$$\mathcal{P}(x_2, x_1) = \mathcal{P}_0(x_2, x_1) + \mathcal{P}^{(1)}(x_2, x_1) + \mathcal{P}^{(2)}(x_2, x_1) \dots, \quad (13)$$

где элементы разложения определяются при помощи соотношения

$$\mathcal{P}(x_2, x_1) = \left[\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \int (G_0(x_2, x_1) + G^{(1)}(x_2, x_1) + G^{(2)}(x_2, x_1) \dots) dx_1.$$

Используя соотношение (13), можно получить разложение для томограммы, аналогичное борновскому разложению волновой функции:

$$T(\varepsilon, \mu, \eta) = \frac{1}{2\pi|\eta|} \left| \int \exp \left[\frac{i\mu}{2\eta} x_2^2 - \frac{i\varepsilon}{\eta} x_2 \right] \psi(x_2) (\mathcal{P}_0(x_2, x_1) + \mathcal{P}^{(1)}(x_2, x_1) + \mathcal{P}^{(2)}(x_2, x_1) \dots) dx_1 dx_2 \right|^2.$$

Выводы. Таким образом, в работе предлагается представление для симплектических томограмм через интегралы Фейнмана по траекториям в фазовом пространстве (8), (9). Показан метод получения решения интегро-дифференциального уравнения Фоккера-Планка (10) в томографическом представлении квантовой механики, который основан на использовании связи между симплектической томограммой и волновой функцией, а также метода интегралов по траекториям. В качестве примера найдены томограммы различных состояний гармонического осциллятора.

С использованием соотношения, определяющего функцию Грина (12), получен аналог разложения для томографического пропагатора (13), а также получено борновское разложение томограммы. Следовательно сформулированы основные положения томографической теории возмущений.

Найденный в данной работе томографический интеграл по траекториям (8) закладывает основу для применения разнообразных методов численного интегрирования в квантовой томографии, позволяющих проводить численные эксперименты для различных типов квантовых систем. Поскольку задача сводится к вычислению многомерных интегралов, может быть применен вариационный алгоритм Монте-Карло [8], который имеет огромное преимущество по сравнению с другими методами численного интегрирования в задачах квантовой механики.

Литература

1. Beck M., Smithey D.T., Raymer M.G. Experimental Determination of Quantum-phase Distributions Using Optical Homodyne Tomography // *Phys. Rev. A*, 48 (1993), 890–893.
2. Smithey D.T., Beck M., Raymer M.G., Faridani A. Measurement of the Wigner distribution and the density matrix of a light mode using optical homodyne tomography: Application to squeezed states and the vacuum // *Phys. Rev. Lett.*, 70 (1993), 1244–1247.
3. Ibrat A., Man'ko V.I., Marmo G., Simonini A., Ventriglia F. An Introduction to the Tomographic Picture of Quantum Mechanics // arXiv:0904.4439v1[quant-ph], (2009).
4. Wigner E.P. On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium // *Phys. Rev.*, 40 (1932), 749–759.
5. Glauber R.J. Photon Correlation // *Phys. Rev. Lett.*, 10 (1963), 84–86.
6. Sudarshan E.C.G. Equivalence of Semiclassical and Quantum Mechanical Descriptions of Statistical Light Beams // *Phys. Rev. Lett.*, 10 (1963), 227–279.
7. Husimi E. Some Formal Properties of the Density Matrix // *Proc. Phys. Math. Soc. Jpn*, 23 (1940), 264–314.
8. Pollock E.L., Ceperley D.M. Path-Integral Computation of Superfluid Densities // *Phys. Rev. B*, 66 (1987), 8343–8352.
9. Feynman R.P., Hibbs A.R. Quantum Mechanics and Path Integrals. N.Y.: McGraw-Hill – (1965).
10. Garrod C. Hamiltonian Path-Integral Methods // *Rev. of Mod. Phys.*, 38 (1966), № 3, 483–494.
11. Морозов В.Г. О континуальных интегралах для обобщенного уравнения Фоккера — Планка // *ТМФ*, 58 (1984), № 1, 79.