1983 г. Апрель *Том 139, вып. 4*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

530.145

ВИГНЕРОВСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В. И. Татарский

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ

Предложенное Вигнером [1] в 1932 г. представление квантовой механики при помощи совместных распределений вероятностей (точнее, квазивероятностей) для координаты и импульса до последнего времени сравнительно мало использовалось и обычно даже не упоминается в учебниках по квантовой механике. В последнее время вигнеровское представление находит все более широкое применение в неравновесной квантовой статистической механике (см., например, [2–7]). Между тем это представление может быть с успехом использовано и в чисто квантовомеханических задачах, так что в последнее время число работ, в которых оно применяется, стало нарастать [8–16]. Так, вигнеровское представление оказалось весьма удобным для исследования квантовых систем с квадратичными по координатам и импульсам гамильтонианами [8,10,11,15]. В работе [12] оно используется для исследования стохастичности квантовой динамической системы, в [9] — для приближенного решения нелинейного уравнения Шрёдингера. Как подчеркивалось в работах Широкова [13,14,17], вигнеровское представление содержит лишь такие понятия, которые являются общими как для квантовой, так и для классической механики. Поэтому оно особенно удобно для последовательного обоснования полуклассических методов, в которых, например, одна из взаимодействующих друг с другом систем описывается квантовой, а другая — классической теорией. При помощи вигнеровского представления удобно получать квантовые поправки к классическим результатам. Например, в [14] получено интегральное уравнение, итерации которого приводят к последовательному учету квантовых поправок к классическому решению, а в [13] развит аналогичный формализм для теории рассеяния.

Сравнительно подробное изложение теории вигнеровского представления содержится в работе Мойэла [18]. Затем эта теория была существенно развита в серии работ Широкова, обзор которых опубликован в [17]. Примененный им алгебраический подход позволяет построить строгую и последовательную математическую теорию. Однако именно в силу этого она остается сравнительно мало известной широкому кругу физиков, так как требует использования специального формализма.

Помимо работ, в которых вигнеровское представление используется для решения конкретных задач, значительное число публикаций посвящено исследованию свойств вигнеровского представления, которые в ряде отношений оказываются весьма необычными и нарушают кажущуюся наглядность этого метода. На результатах этих работ мы будем останавливаться в соответствующих местах данного обзора. Здесь же отметим только, что ряд работ посвящен таким обобщениям вигнеровского представления, которых мы не будем касаться. Так, в работе [20] рассмотрена калибровочно-инвариантная функция Вигнера, возникающая при решении задач, включающих электромагнитное поле. В работе [19] рассмотрены более общие, чем вигнеровские, представления квантовой механики при помощи распределений. В частности, в этой работе вводятся отображающие распределения, позволяющие описывать и спиновые переменные. В работе [21] рассматривается обобщение квантового уравнения Лиувилля, описывающее диффузию в фазовом пространстве, и с его помощью рассматривается, в частности, задача об осцилляторе с затуханием. Наконец, в упоминавшихся работах Широкова рассматривается целый класс представлений квантовой механики в фазовом пространстве, включающий вигнеровское представление как частный случай.

Настоящая работа преследует две цели. Во-первых, при помощи общепринятого формализма квантовой механики анализируются те физические соображения, которые приводят к вигнеровскому представлению. При этом мы ограничиваемся только задачами квантовой механики (рассматривая для простоты лишь одномерный случай) и не затрагиваем вопросов квантовой статистической механики. Во-вторых, рассматриваются методические вопросы, связанные с корректным использованием вигнеровского представления. К сожалению, в литературе до сих пор встречаются утверждения, что при помощи функции Вигнера можно находить средние значения не от любых величин, что связано просто с неправильным использованием этой функции. Особое внимание мы уделяем одному важному свойству вигнеровского представления, связанному с тем, что далеко не всякая функция $W(p, q)$, удовлетворяющая всем требованиям теории вероятностей, может являться «совместной плотностью координаты и импульса» для чистого квантового состояния. Это видно хотя бы из того, что чистое состояние однозначно описывается функцией одной переменной $\psi(q)$, тогда как «плотность вероятностей» является функцией двух переменных. Поэтому допустимые квантовые плотности, соответствующие чистым состояниям, могут описываться лишь такими функциями двух переменных, которые могут быть (определенным образом) однозначно выражены через функцию одной переменной. Это накладывает на функцию $W(p, q)$ весьма жесткое условие, содержащее постоянную Планка. Указанное чисто математическое обстоятельство приводит не только к такому общеизвестному ограничению на $W(p, q)$, из которого вытекает соотношение неопределенностей, но и к другим физически весьма существенным выводам. Так, оказывается, что квантовое уравнение для эволюции во времени функции Вигнера описывает, вообще говоря, не только те решения, которые соответствуют квантовой механике, но и «лишние» решения. И лишь в том случае, когда начальное условие к эволюционному уравнению удовлетворяет ограничению, о котором было только что упомянуто, эти лишние решения исключаются и квантовое эволюционное уравнение (квантовое уравнение Лиувилля) становится эквивалентным уравнению Шрёдингера, а волновая функция может быть восстановлена из функции Вигнера с точностью до не зависящего от координат фазового множителя. Указанное обстоятельство особенно отчетливо выступает при рассмотрении квантового осциллятора. Известно (см., например, гл. 4 настоящей статьи), что квантовое уравнение Лиувилля для осциллятора совпадает с классическим. В чем же тогда проявляется их различие? Оказывается, что в данном случае правильное описание квантового осциллятора можно получить именно из общего ограничения на возможный вид квантовых распределений и постоянная Планка входит в описание только из правильно поставленного начального условия.

Таким образом, учет ограничений, накладываемых на возможный вид квантовых распределений, оказывается весьма существенным и снимает трудности, на которые указывалось в [18].

Интересно отметить также, что, помимо стандартного соотношения неопределенностей, являющегося на языке функции Вигнера соотношением между ее вторыми моментами, эта функция удовлетворяет еще одному общему ограничению. Оказывается (см. гл. 5 настоящей работы), что ее модуль ограничен величиной $(\pi\hbar)^{-1}$, и это является другим проявлением соотношения неопределенностей.

Кратко опишем содержание работы. Последующая часть введения посвящена анализу формальных причин, препятствующих введению чисто вероятностного языка в квантовой механике. В гл. 2 анализируется связь между вводимыми в квантовой механике правилами упорядочения некоммутирующих операторов и возможным определением оператора «совместной плотности вероятностей» координаты и импульса. Показано, что вейлевское упорядочение и соответствующая ему функция Вигнера в некотором смысле наиболее приемлемы. В гл. 3 анализируются свойства вигнеровской функции. Показано, как с ее помощью вычислять квантовые средние значения от любых функций координаты и импульса. При этом оказывается, что правила, обеспечивающие совпадение вычисляемых средних с квантовомеханическими не всегда соответствуют стандартным правилам теории вероятностей. Затем рассматривается ограничение на общий вид функций $W(p, q)$, которые могут описывать чистые квантовые состояния. Показано, что из этого ограничения вытекает соотношение неопределенностей. В гл. 4 выводится квантовое уравнение Лиувилля. Показано, что оно может удовлетворяться решениями, не имеющими физического смысла, но наложение отмечавшегося выше ограничения на начальное распределение автоматически «отфильтровывает» эти лишние решения. Далее показывается эквивалентность вигнеровского представления квантовой механики традиционным представлениям. В гл. 5 анализируются вопросы, связанные с возможной неположительностью квазивероятности. Показано, что собственные значения оператора квазивероятности равны $\pm(\pi\hbar)^{-1}$, а сама квазивероятность ограничена условием $|W| \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$. Приводится доказательство того, что единственной неотрицательной вигнеровской функцией, соответствующей чистому состоянию, является совместное гауссовское распределение для координаты и импульса, удовлетворяющее ограничению, вытекающему из соотношения неопределенностей. Далее показано, что усредненная с гауссовским весом по фазовой плоскости сглаженная функция $\overline{W}(p, q)$ удовлетворяет условию $0 \leqslant \overline{W}(p, q) \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$, если размер ячейки усреднения превышает $\pi\hbar$. Гл. 6 посвящена формулировке основных выводов.

Рассмотрим теперь более подробно постановку вопроса. Как известно, вектор состояния $|\psi(t)\rangle$ определяет плотность вероятностей координаты $W(q, t) = |\langle q|\psi(t)\rangle|^2$, импульса, $W(p, t) = |\langle p|\psi(t)\rangle|^2$, а также позволяет находить средние значения функций, зависящих сразу и от $\hat{p}$, и от $\hat{q}$ *)

$$\langle f(\hat{p}, \hat{q})\rangle = \langle\psi(t)|f(\hat{p}, \hat{q})|\psi(t)\rangle.$$

В том случае, когда f зависит только от $\hat{q}$,

$$\langle\psi(t)|f(\hat{q})|\psi(t)\rangle = \int W(q, t) f(q)\, dq.$$

Точно так же

$$\langle\psi(t)|F(\hat{p})|\psi(t)\rangle = \int W(p, t) F(p)\, dp.$$

Однако динамика квантовой системы определяется уравнением Шрёдингера для $|\psi(t)\rangle$, и нет уравнения, определяющего зависимость от времени непосредственно $W(q, t)$ или $W(p, t)$. В то же время, когда $|\psi(t)\rangle$ найдено из уравнения Шрёдингера, мы можем найти любые средние значения от $f(\hat{p}, \hat{q})$.

Возникает вопрос: нельзя ли получить описание квантовой системы непосредственно в терминах вероятностей, не прибегая к волновой функции?

Рассмотрим классическую задачу с гамильтонианом

$$H = (p^2/2m) + V(q).$$

Классические уравнения движения $\dot{q} = p/m$, $\dot{p} = -V'(q)$ вместе с начальными условиями $q(0) = q_0$, $p(0) = p_0$ определяют траекторию в фазовом пространстве $q(t)$, $p(t)$. Если, однако, при $t = 0$ заданы не начальные условия $q(0)$, $p(0)$, а лишь их распределение вероятностей $W_0(p, q)$, то динамика системы будет описываться не уравнениями $\dot{q} = p/m$, $\dot{p} = -V'(q)$, а эволюционным уравнением для совместной плотности вероятности $W(p, q, t)$, или уравнением Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q} + V'(q)\frac{\partial W}{\partial p}, \quad W(p, q, 0) = W_0(p, q). \tag{1.1}$$

Подчеркнем, что (1.1) описывает не систему многих частиц, как в статистической механике, а эволюцию распределения вероятностей координаты и импульса одной частицы, если ее начальное состояние задано лишь вероятностным образом.

Мы видим, что в классической механике нет уравнения для описания эволюции $W(q, t)$ или $W(p, t)$, а имеется лишь уравнение Лиувилля для совместной плотности вероятностей $W(p, q, t)$. Поэтому не может существовать и соответствующее квантовое уравнение для $W(q, t)$ или $W(p, t)$.

*) Мы пользуемся следующими обозначениями: операторы обозначаются значком $\hat{}$, $\hat{q}$ и $\hat{p}$ — операторы координаты и импульса, $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, $|q\rangle$ — собственные векторы оператора $\hat{q}$: $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$, удовлетворяющие условиям $\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q'')$, $\int |q\rangle dq \langle q| = \hat{1}$, где $\hat{1}$ — единичный оператор. $|p\rangle$ — аналогичные собственные векторы оператора $\hat{p}$, причем $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$, $\langle p'|p''\rangle = \delta(p' - p'')$, $\int |p\rangle dp \langle p| = \hat{1}$. Как известно, $\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(iqp/\hbar)$. Волновые функции в q- и p-представлениях будут обозначаться как $\psi(q, t) = \langle q|\psi(t)\rangle$ и $\psi(p, t) = \langle p|\psi(t)\rangle$.

Однако, несмотря на то, что в квантовой механике мы можем найти среднее значение для любой функции $f(\hat{p}, \hat{q})$, совместной плотности вероятностей $W(p, q, t)$ не существует. Действительно, если бы такая функция существовала, то имело бы место соотношение

$$\langle\psi(t) \,|\, f(\hat{p}, \hat{q}) \,|\, \psi(t)\rangle = \iint W(p, q, t) f(p, q)\, dp\, dq. \tag{1.2}$$

Однако, например, $\hat{p}\hat{q}^2\hat{p} = (1/2)(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2) + \hbar^2$. В то же время, если бы формула (1.2) имела место, то для $f_1 = \hat{p}\hat{q}^2\hat{p}$ и $f_2 = (1/2)(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2)$ мы получили бы по ней одинаковые средние значения, тогда как они различаются на $\hbar^2$.

Таким образом, построить совместную плотность вероятностей для координаты и импульса, усреднение по которой функции $f(p, q)$ позволяло бы находить квантовые средние значения $\langle\psi \,|\, f(\hat{p}, \hat{q}) \,|\, \psi\rangle$, невозможно. Непосредственная причина этого заключается в том, что если $f_1(\hat{p}, \hat{q}) \neq f_2(\hat{p}, \hat{q})$, то может оказаться, вообще говоря, что $f_1(p, q) = f_2(p, q)$.

Тем не менее оказывается возможным ввести функцию $W(p, q, t)$ такую, что применение формулы (1.2) для определенным образом упорядоченных функций $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ дает правильное квантовомеханическое среднее и которая удовлетворяет эволюционному уравнению, являющемуся обобщением (1.1) на квантовый случай. Такая функция была впервые введена Вигнером [1] для системы многих частиц с целью исследовать квантовые поправки к термодинамическим функциям. Эта функция во многом аналогична совместной плотности вероятностей для координаты и импульса, хотя и обладает рядом особенностей, не позволяющей трактовать ее таким образом. Мы будем называть ее квазивероятностью или, точнее, квазиплотностью совместного распределения вероятностей q и p.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОВМЕСТНОЙ КВАЗИВЕРОЯТНОСТИ КООРДИНАТЫ И ИМПУЛЬСА

Как мы убедились, формальной причиной, препятствующей введению совместного распределения вероятностей $W(p, q, t)$, является отсутствие однозначного соответствия между функциями операторов и функциями от коммутирующих переменных p, q. При замене операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$ на числа p, q различные функции $f_i(\hat{p}, \hat{q})$ могут перейти в одну и ту же функцию $f(p, q)$. Это — другая сторона известной проблемы квантования — установления правила, по которому функции $f(p, q)$ коммутирующих переменных сопоставляется функция $f(\hat{p}, \hat{q})$ некоммутирующих операторов.

Чтобы устранить эту неоднозначность, примем некоторое правило квантования, т. е. зафиксируем способ, по которому функции $f(p, q)$ от чисел p, q будет однозначно сопоставлена функция $f(\hat{p}, \hat{q})$ некоммутирующих операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$. Если в квантовой теории будут фигурировать функции только такого вида, то неоднозначности не будут возникать. Функции же другого вида всегда можно привести к выбранной форме, используя перестановочные соотношения.

Для того чтобы ввести соответствие между функциями $f(p, q)$ и $f(\hat{p}, \hat{q})$, достаточно определить операторную функцию $\hat{F}(\lambda, \mu)$, являющуюся обобщением функции $F(\lambda, \mu) = \exp[i(\lambda p + \mu q)]$. Действительно, произвольную аналитическую функцию $f(p, q)$ можно получить из $F(\lambda, \mu)$ при помощи операции

$$f(p, q) = f\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right) F(\lambda, \mu)\,|_{\lambda=\mu=0}.$$

Так как операторы $\partial/\partial\lambda$, $\partial/\partial\mu$ перестановочны, неоднозначностей при написании $f(\partial/i\partial\lambda, \partial/i\partial\mu)$ не возникает. Поэтому, если принять какое-либо операторное обобщение функции F, например

$$\hat{F}_1(\lambda, \mu) = e^{i\lambda\hat{p}}e^{i\mu\hat{q}}, \quad \hat{F}_2(\lambda, \mu) = e^{i\mu\hat{q}}e^{i\lambda\hat{p}}, \quad \hat{F}_3 = \frac{1}{2}(\hat{F}_1 + \hat{F}_2)$$

и т. д., то можно определить операторную упорядоченную функцию $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ при помощи формулы

$$\{f(\hat{p}, \hat{q})\} = f\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\hat{F}(\lambda, \mu)\,|_{\lambda=\mu=0} = \qquad (2.1а)$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int\int\int_{-\infty}^{\infty}\int d\lambda\, d\mu\, dp\, dq\, f(p, q)\exp[-i(\lambda p + \mu q)]\,\hat{F}(\lambda, \mu). \qquad (2.1б)$$

Под $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ в дальнейшем подразумевается упорядоченная функция операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$, сопоставляемая при помощи операции (2.1) функции $f(p, q)$ от чисел p, q. При этом, например, $\{f_1(\hat{p}, \hat{q})\, f_2(\hat{p}, \hat{q})\}$ — функция операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$, сопоставляемая c-числовой функции $\Phi(p, q) = f_1(p, q)\, f_2(p, q)$.

Различным функциям $\hat{F}(\lambda, \mu)$ будут соответствовать различные операторные функции $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$, отличающиеся порядком некоммутирующих сомножителей $\hat{p}$, $\hat{q}$. Если же, используя перестановочные соотношения, привести их к одному и тому же порядку, то возникнут, вообще говоря, дополнительные слагаемые. Не все функции $\hat{F}$ в одинаковой мере пригодны для нашей цели. Чтобы отобрать наиболее подходящие из них, обратимся к свойствам характеристической функции теории вероятностей.

Если числа p, q случайные, то среднее значение функции $F(\lambda, \mu) = \exp[i(\lambda p + \mu q)]$ представляет собой характеристическую функцию совместного распределения вероятностей p, q:

$$\varphi_{pq}(\lambda, \mu) = \langle F(\lambda, \mu)\rangle = \int\int_{-\infty}^{\infty}\exp[i(\lambda p + \mu q)]\, W(p, q)\, dp\, dq. \qquad (2.2)$$

(Здесь угловые скобки $\langle \ldots \rangle$ означают статистическое усреднение по флуктуациям p, q, характеризуемым совместной плотностью вероятностей $W(p, q)$.) Плотность вероятностей выражается через φ_{pq} обратным преобразованием Фурье

$$W(p, q) = \frac{1}{4\pi^2}\int\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_{pq}(\lambda, \mu)\exp[-i(\lambda p + \mu q)]\, d\lambda\, d\mu. \qquad (2.3)$$

Как известно, характеристическая функция обладает следующими свойствами [22]:

а) $\varphi_{pq}(0, 0) = 1$; б) $\varphi_{pq}(0, \mu) = \langle\exp(i\mu q)\rangle = \varphi_q(\mu)$, $\varphi_{pq}(\lambda, 0) = \varphi_p(\lambda)$; в) $\varphi^*_{pq}(\lambda, \mu) = \varphi_{pq}(-\lambda, -\mu)$; г) $|\varphi_{pq}(\lambda, \mu)| \leqslant 1$; д) $\varphi_{pq}(\lambda, \mu)$— положительно определенная функция, в частности $W(p, q) \geqslant 0$.

Подобно тому как $\langle F(\lambda, \mu)\rangle$ определяет характеристическую функцию, квантовое среднее $\langle\psi\,|\,\hat{F}(\lambda, \mu)\,|\,\psi\rangle$, можно принять за определение квантовой характеристической функции в состоянии $|\psi\rangle$, а оператор $\hat{F}(\lambda, \mu)$ — за оператор характеристической функции.

Очевидным обобщением свойств а), б) являются условия

$$\hat{F}(0, \mu) = \exp(i\mu\hat{q}), \quad \hat{F}(\lambda, 0) = \exp(i\lambda\hat{p}). \tag{2.4}$$

Если функция $\hat{F}$ удовлетворяет этим условиям, то при построении функций $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ при помощи (2.1) функции вида $f(\hat{p})$ или $f(\hat{q})$, зависящие лишь от одной переменной, будут получаться из соответствующих функций $f(p)$, $f(q)$ простой заменой $p \to \hat{p}$, $q \to \hat{q}$.

Обобщением свойства в) является условие

$$\hat{F}^{+}(\lambda, \mu) = \hat{F}(-\lambda, -\mu). \tag{2.5}$$

Как следует из формулы (2.1б), при выполнении условия (2.5) действительные функции $f^{*}(p, q) = f(p, q)$ будут переходить в эрмитовы операторы $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}^{+} = \{f(\hat{p}, \hat{q})\}$.

Чтобы обеспечить выполнение условия $|\langle\psi|\hat{F}(\lambda, \mu)|\psi\rangle| \leqslant 1$, являющегося обобщением свойства г), потребуем унитарности оператора $\hat{F}$:

$$\hat{F}^{+}(\lambda, \mu)\hat{F}(\lambda, \mu) = \hat{F}(\lambda, \mu)\hat{F}^{+}(\lambda, \mu) = \hat{1}. \tag{2.6}$$

Что касается условия положительной определенности, то его не удается обобщить на квантовые характеристические функции. Это в ряде случаев приводит к нарушению условия положительности плотности вероятностей, о чем более подробно будет говориться ниже.

Обратимся к функциям $\hat{F}_1$, $\hat{F}_2$. Ясно, что $\hat{F}_1^{+}(\lambda, \mu) = \hat{F}_2(-\lambda, -\mu)$, т. е. для этих операторов не выполняется условие (2.5), в связи с чем действительным функциям $f(p, q)$ будут сопоставляться неэрмитовы операторы. Функция $\hat{F}_3$ удовлетворяет условию (2.5). Однако условие унитарности (2.6) для нее не выполняется. Используя известную формулу (см., например, [23])

$$\exp(\hat{A}+\hat{B}) = \exp(\hat{A})\exp(\hat{B})\exp\left(-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right), \tag{2.7}$$

справедливую в случае, когда коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}]$ является c-числом, легко показать, что $\hat{F}_3(\lambda, \mu)\hat{F}_3^{+}(\lambda, \mu) = \cos^2(\hbar\lambda\mu/2)\cdot\hat{1} \neq \hat{1}$. Поэтому, хотя оператор $\hat{F}_3$ пригоден для построения симметричных операторных функций, он не подходит для роли оператора характеристической функции.

Мы будем использовать поэтому следующий оператор характеристической функции, удовлетворяющий всем сформулированным выше требованиям (2.4)—(2.6):

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \exp[i(\lambda\hat{p} + \mu\hat{q})]. \tag{2.8а}$$

Условия, наложение которых однозначно приводит к выбору оператора $\hat{F}$ в форме (2.8а), анализируются в работе [24]. При этом оказывается, что можно сформулировать различные наборы требований, приводящие к такому выбору.

При помощи (2.7) оператор $\hat{F}_0$ можно представить в таких формах:

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \exp(i\lambda\hat{p}/2)\exp(i\mu\hat{q})\exp(i\lambda\hat{p}/2), \tag{2.8б}$$

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \exp(i\mu\hat{q}/2)\exp(i\lambda\hat{p})\exp(i\mu\hat{q}/2), \tag{2.8в}$$

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \exp(-i\lambda\mu\hbar/2)\exp(i\lambda\hat{p})\exp(i\mu\hat{q}), \tag{2.8г}$$

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \exp(i\lambda\mu\hbar/2)\exp(i\mu\hat{q})\exp(i\lambda\hat{p}). \tag{2.8д}$$

Используя формулу *)

$$\exp(i\lambda\hat{p}) \mid q\rangle = \mid q - \lambda\hbar\rangle \tag{2.9}$$

и действуя оператором $\hat{F}_0$, взятым в форме (2.8г), на разложение единичного оператора по базису $|q\rangle$ (см. сноску на стр. 590), легко получить еще одно полезное представление оператора $\hat{F}_0$:

$$\hat{F}_0(\lambda, \mu) = \int \left| q' - \frac{\lambda\hbar}{2}\right\rangle \exp(i\mu q')\,\mathrm{d}q' \left\langle q' + \frac{\lambda\hbar}{2}\right|. \tag{2.8е}$$

Различные представления $\hat{F}_0$ оказываются удобными в тех или иных случаях. Например, если необходимо вычислить $\partial\hat{F}_0/\partial\lambda$, то удобно использовать (2.8б), а для вычисления $\partial\hat{F}_0/\partial\mu$ удобно взять (2.8в).

Если использовать функцию $\hat{F}_0(\lambda, \mu)$ для определения упорядоченных операторных функций при помощи формул (2.1), то возникает так называемое вейлевское симметричное упорядочение [25]. Заметим, что использование $\hat{F}_3$ также приводит к симметричному упорядочению, однако оно не совпадает с вейлевским. Например, для операторного обобщения функции p^2q^2 будем иметь

$$\{\hat{p}^2\hat{q}^2\}_3 = \left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda}\right)^2\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)^2\hat{F}_3(\lambda, \mu)\,|_{\lambda=\mu=0} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2),$$

$$\{\hat{p}^2\hat{q}^2\}_0 = \frac{1}{4}(\hat{p}^2\hat{q}^2 + 2\hat{p}\hat{q}^2\hat{p}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2) = \frac{1}{2}(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2 + \hbar^2).$$

Во всей последующей части статьи мы будем подразумевать под $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ операторные функции, получаемые из $f(p, q)$ по формулам (2.1) с использованием оператора характеристической функции $\hat{F}_0$, определяемого формулами (2.8).

Весьма существенным является следующее свойство операторных функций, вытекающее из их определения: если $\hat{A} = \{A(\hat{p}, \hat{q})\}$ и $\hat{B} = \{B(\hat{p}, \hat{q})\}$, то $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} \neq \{A(\hat{p}, \hat{q})\,B(\hat{p}, \hat{q})\}$. Вместо этого имеет место равенство $\hat{A}\hat{B} = \{C(\hat{p}, \hat{q})\}$, где $C(p, q)$ выражается через $A(p, q)$ и $B(p, q)$ при помощи следующей формулы [18], которую легко получить, используя (2.1б), (2.7) и (2.8а):

$$C(p, q) = (\pi\hbar)^{-2}\int\int\int\int dp_1dq_1dp_2dq_2\, A(p_1, q_1)\, B(p_2, q_2) \times$$
$$\times \exp((2i/\hbar)\,[q(p_1 - p_2) - p(q_1 - q_2) + q_1p_2 - q_2p_1]). \tag{2.10}$$

В связи с (2.10) следует иметь в виду, что из $\hat{A} \leftrightarrow A(p, q)$ не следует, что $\hat{A}^n \leftrightarrow [A(p, q)]^n$. Пусть, например,

$$H(p, q) = (p^2/2m) + (m\omega^2q^2/2).$$

Тогда

$$\hat{H} = \{H(\hat{p}, \hat{q})\} = (\hat{p}^2/2m) + (m\omega^2\hat{q}^2/2).$$

*) Эту формулу легко получить, вставляя между $\exp(i\lambda\hat{p})$ и $|q\rangle$ разложение единичного оператора по базису $|p\rangle$, а затем снова переходя к базису $|q\rangle$.

Но, используя приводившуюся чуть выше формулу $\{\hat{p}^2\hat{q}^2\} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2 + \hbar^2)$, получаем

$$\{H^2(\hat{p}, \hat{q})\} = \left\{\frac{\hat{p}^4}{4m^2} + \frac{m^2\omega^4\hat{q}^4}{4} + \frac{\omega^2\hat{p}^2\hat{q}^2}{2}\right\} = \frac{\hat{p}^4}{4m^2} + \frac{m^2\omega^4\hat{q}^4}{4} + \\ + \frac{\omega^2}{4}(\hat{p}^2\hat{q}^2 + \hat{q}^2\hat{p}^2 + \hbar^2) = \{H(\hat{p}, \hat{q})\}^2 + \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2. \quad (2.11)$$

Формулы (2.1), (2.8) позволяют сопоставить упорядоченный оператор $\{f(\hat{p}, \hat{q})\}$ c-числовой функции $f(p, q)$. Часто возникает другая задача: представить заданный оператор $\hat{A}$ в вейлевской упорядоченной форме. Это означает, что необходимо найти такую c-числовую функцию $A(p, q)$, называемую вейлевским символом оператора $\hat{A}$, что $\hat{A} = \{A(\hat{p}, \hat{q})\}$. Покажем, что эта задача решается при помощи следующей формулы (см., например, дополнение к работе [25], где приведен целый ряд свойств вейлевских символов):

$$A(p, q) = \int \exp(ip\xi/\hbar)\left\langle q - \frac{\xi}{2}\right| \hat{A} \left| q + \frac{\xi}{2}\right\rangle d\xi. \quad (2.12)$$

Для этого найдем, используя (2.1б), оператор $\{A(\hat{p}, \hat{q})\}$, в котором в качестве функции $A(p, q)$ фигурирует правая часть (2.12):

$$\{A(\hat{p}, \hat{q})\} = \frac{1}{4\pi^2}\int\int\int\int\int d\lambda\, d\mu\, dp\, dq\, d\xi \times \\ \times \exp\left[-i(\lambda p + \mu q) + \frac{ip\xi}{\hbar}\right]\hat{F}_0(\lambda, \mu)\left\langle q - \frac{\xi}{2}\right| \hat{A} \left| q + \frac{\xi}{2}\right\rangle.$$

Выполним интегрирование по p, приводящее к $\delta\left(\lambda - \frac{\xi}{\hbar}\right)$, а затем по λ:

$$\{A(\hat{p}, \hat{q})\} = \frac{1}{2\pi}\int\int\int dq\, d\xi\, d\mu \exp(-i\mu q)\hat{F}_0\left(\frac{\xi}{\hbar}, \mu\right)\left\langle q - \frac{\xi}{2}\right| \hat{A} \left| q + \frac{\xi}{2}\right\rangle.$$

Подставляя представление (2.8е) для $\hat{F}_0$, получим

$$\{A(\hat{p}, \hat{q})\} = \frac{1}{2\pi}\int\int\int\int d\mu\, dq\, d\xi\, dq' \left| q' - \frac{\hbar}{2}\frac{\xi}{\hbar}\right\rangle \times \\ \times \exp[i\mu(q - q')]\left\langle q - \frac{\xi}{2}\right| \hat{A} \left| q + \frac{\xi}{2}\right\rangle \left\langle q' + \frac{\hbar}{2}\frac{\xi}{\hbar}\right|.$$

Интегрирование по μ приводит к $\delta(q - q')$, после чего имеем

$$\{A(\hat{p}, \hat{q})\} = \int\int dq\, d\xi \left| q - \frac{\xi}{2}\right\rangle \left\langle q - \frac{\xi}{2}\right| \hat{A} \left| q + \frac{\xi}{2}\right\rangle \left\langle q + \frac{\xi}{2}\right|.$$

Вводя новые переменные $q \pm \frac{\xi}{2} = q_{1,2}$ и учитывая формулу для разложения единичного оператора по базису $|q\rangle$, окончательно имеем

$$\{A(\hat{p}, \hat{q})\} = \int\int |q_2\rangle dq_2 \langle q_2| \hat{A} |q_1\rangle dq_1 \langle q_1| = \hat{1}\cdot\hat{A}\cdot\hat{1} = \hat{A}. \quad (2.13)$$

Таким образом, формула (2.12) позволяет найти по оператору $\hat{A}$ его вейлевский символ $A(p, q)$, после чего применение формулы (2.1) дает возможность представить этот оператор в вейлевской упорядоченной форме.

Вернемся к оператору характеристической функции $\hat{F}_0(\lambda, \mu)$. Квантовая характеристическая функция $\varphi(\lambda, \mu)$ выражается через него формулой:

$$\varphi(\lambda, \mu) = \langle\psi| \hat{F}_0(\lambda, \mu) |\psi\rangle. \quad (2.14)$$

Рассмотрим среднее значение произвольной функции от операторов $\hat{p}$, $\hat{q}$; используя (2.1а) и (2.14), имеем

$$\langle\psi\mid\{f(\hat{p},\hat{q})\}\mid\psi\rangle=\langle\psi\mid f\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda},\ \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\hat{F}_0(\lambda,\mu)\mid_{\lambda=\mu=0}\mid\psi\rangle=$$
$$=f\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda},\ \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\langle\psi\mid\hat{F}_0(\lambda,\mu)\mid\psi\rangle\mid_{\lambda=\mu=0}=$$
$$=f\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\lambda},\ \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)\varphi(\lambda,\mu)\mid_{\lambda=\mu=0}.$$

Правая часть этой формулы имеет тот же вид, что и соответствующая формула теории вероятностей. Поэтому квантовое среднее $\langle\psi\mid\{f\}\mid\psi\rangle$ выражается через квантовую характеристическую функцию φ при помощи стандартной формулы теории вероятностей.

Если использовать определение (2.1б) для $\{\ldots\}$, то получим

$$\langle\psi\mid\{(f(\hat{p},\hat{q})\}\mid\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\int f(p,q)\,W(p,q)\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q, \tag{2.15}$$

где

$$W(p,q)=\frac{1}{4\pi^2}\int\int\mathrm{d}\lambda\,\mathrm{d}\mu\exp[-i(\lambda p+\mu q)]\langle\psi\mid\hat{F}_0(\lambda,\mu)\mid\psi\rangle. \tag{2.16}$$

Таким образом, функция $W(p,q)$, которую мы будем называть плотностью квазивероятности совместного распределения координаты и импульса или функцией Вигнера, позволяет вычислять квантовомеханические средние по формуле (2.15), также имеющей стандартный для теории вероятности вид. Заметим, что (2.16) можно представить в форме

$$W(p,q)=\langle\psi\mid\hat{W}(p,q)\mid\psi\rangle, \tag{2.17}$$

где оператор плотности квазивероятности, зависящий от c-числовых аргументов p, q, имеет вид

$$\hat{W}(p,q)=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}\int\mathrm{d}\lambda\,\mathrm{d}\mu\exp[-i(\lambda p+\mu q)]\hat{F}_0(\lambda,\mu). \tag{2.18}$$

Как следует из (2.1б), $\hat{W}(p,q)=\{\delta(\hat{p}-p)\,\delta(\hat{q}-q)\}$.

Если воспользоваться представлением (2.8е) для $\hat{F}_0(\lambda,\mu)$ и подставить его в (2.18), то после интегрирования по μ, приводящего к $\delta(q-q')$, получаем оператор $\hat{W}$ в q-представлении:

$$\hat{W}(p,q)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left|q-\frac{\xi}{2}\right\rangle\exp(-ip\xi/\hbar)\,\mathrm{d}\xi\left\langle q+\frac{\xi}{\hbar}\right|. \tag{2.19}$$

Если подставить это представление оператора $\hat{W}$ в формулу (2.17), то получим (заменяя переменную интегрирования ξ на $-\xi$)

$$W(p,q)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\exp(ip\xi/\hbar)\,\psi^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)\psi\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\mathrm{d}\xi. \tag{2.20}$$

Рассмотрим матрицу плотности для чистого состояния $\rho(q_1,q_2)=\psi(q_1)\psi^*(q_2)$ и введем новые координаты $q=(q_1+q_2)/2$, $\xi=q_2-q_1$. Тогда (2.20) можно записать в виде

$$W(p,q)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\rho\left(q-\frac{\xi}{2},\ q+\frac{\xi}{2}\right)\exp(ip\xi/\hbar)\,\mathrm{d}\xi. \tag{2.21}$$

Таким образом, плотность квазивероятности можно рассматривать как преобразование Фурье от матрицы плотности по разностной переменной.

Отметим, что если бы вместо функции $\hat{F}_0(\lambda, \mu)$ мы выбрали какую-либо другую функцию, переходящую в $\exp[i(\lambda p + \mu q)]$ при замене $\hat{p} \to p$, $\hat{q} \to q$, то с ее помощью также можно было бы определить такое упорядочение операторов и такую квазивероятность W, которая приводила бы к правильным квантовым средним значениям. Например, если бы мы выбрали в качестве $\hat{F}$ функцию $\hat{F}_1 = \exp(i\lambda\hat{p})\exp(i\mu\hat{q})$, то пришли бы к такому упорядочению, при котором операторы $\hat{p}$ всегда стояли бы слева от операторов $\hat{q}$, а функция W имела бы вид [26,27]

$$W_1(p, q) = \langle p \mid q\rangle \psi^*(p)\psi(q), \tag{2.22}$$

где

$$\psi(p) = \langle p \mid \psi\rangle, \quad \langle p \mid q\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(-ipq/\hbar).$$

С точки зрения получения правильного формального результата вычислений эта функция ничем не хуже функции Вигнера (2.20). Однако свойства функции W_1 еще более далеки от свойств плотности вероятностей (например, $W_1^* \neq W_1$). В этом отношении функция Вигнера (2.20) в некотором смысле наиболее близка по своим свойствам к плотности вероятностей.

3. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА КВАЗИВЕРОЯТНОСТИ

а) Согласованность с одномерными распределениями

Если проинтегрировать функцию Вигнера, заданную формулой (2.20), по p, то мы получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(p, q)\,dp = |\psi(q)|^2 \equiv W(q), \tag{3.1}$$

т. е. интегрирование совместной квазиплотности вероятностей по p приводит к плотности вероятностей для координаты q. К тому же результату придем, интегрируя по p формулу (2.16). Здесь после интегрирования по p под знаком интеграла возникает функция $\langle\psi|\hat{F}_0(0, \mu)|\psi\rangle$, которая, согласно наложенному на $\hat{F}(\lambda, \mu)$ условию (2.4), дает $\langle\psi \mid \exp(i\mu\hat{q}) \mid \psi\rangle$, т. е. характеристическую функцию распределения вероятностей координаты. Точно так же, интегрируя (2.16) по q, получаем под знаком интеграла $\langle\psi \mid \exp(i\lambda\hat{p}) \mid \psi\rangle$, т. е. характеристическую функцию импульса. Следовательно,

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(p, q)\,dq = |\langle p \mid \psi\rangle|^2 \equiv W(p). \tag{3.2}$$

Таким образом, для вигнеровской плотности квазивероятности, так же как и для всех других плотностей, построенных с учетом требования (2.4), выполняется естественное требование согласованности двумерного распределения с одномерными. Кроме того, из (3.1) видно, что двукратный интеграл от функции Вигнера по p и q равен единице, если волновая функция нормирована к единице.

б) Вычисление высших моментов

Рассмотрим теперь следствия, вытекающие из соотношения (2.10). Пусть мы имеем эрмитов оператор $\hat{A} = f(\hat{p}, \hat{q})$, соответствующий некоторой наблюдаемой A. Этот оператор может и не иметь вейлевской упорядоченной формы, но, пользуясь формулами (2.12), (2.1) или перестановочным соотношением $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$, всегда можно путем тождественных преобразований записать его в принятом стандартном виде: $\hat{A} = \{A(\hat{p}, \hat{q})\}$.

После этого среднее значение наблюдаемой A в состоянии $|\psi\rangle$ можно найти при помощи формулы (2.15):

$$\langle A\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\,\psi\rangle = \int\int A(p,\ q)\ W(p,\ q)\ \mathrm{d}p\ \mathrm{d}q.$$

Нас, однако, могут интересовать и средние значения некоторых степеней наблюдаемой A. Например, средний квадрат квантовых флуктуаций A в состоянии $|\psi\rangle$ выражается, как известно, формулой $\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 = \langle\psi\,|\hat{A}^2\,|\,\psi\rangle - \langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\,\psi\rangle^2$, и для его нахождения необходимо вычислить $\langle\psi\,|\,\hat{A}^2\,|\,\psi\rangle$. Но оператор

$$\hat{A}^2 = \{A(\hat{p},\ \hat{q})\}^2$$

уже не имеет необходимой упорядоченной формы, поэтому к нему формула (2.14) непосредственно неприменима. Если же его привести к этой форме при помощи коммутационных соотношений или при помощи (2.10) найти его вейлевский символ, т. е. такую функцию $C(p,\ q)$, что

$$\hat{A}^2 = \{C(\hat{p},\ \hat{q})\},$$

то, вообще говоря, $C(p,\ q) \neq A^2(p,\ q)$. Поэтому

$$\langle A^2\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{A}^2\,|\,\psi\rangle = \int\int C(p,\ q)\,W\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q \neq \int\int A^2W\ \mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \tag{3.3}$$

Таким образом, несмотря на то, что для $\langle\psi\,|\,\hat{A}\,|\,\psi\rangle$ *мы имеем обычное для теории вероятностей представление через интеграл от* AW, *для* $\langle\psi\,|\,\hat{A}^2\,|\,\psi\rangle$ *такое представление уже не имеет места. Другими словами, интегралы*

$$\int\int A^n(p,\ q)\ W(p,\ q)\ \mathrm{d}p\ \mathrm{d}q$$

при $n = 2,\ 3,\ \ldots$ *не представляют средних значений соответствующих степеней наблюдаемой* A.

В этом (помимо возможности для функции W принимать отрицательные значения, о чем подробнее будет говориться далее) и проявляется одна из существенных трудностей при интерпретации квантовой механики на чисто вероятностном языке. Дело здесь в том, что после того, как в процессе квантования произведено сопоставление операторов динамическим переменным и наблюдаемым, возможные значения наблюдаемых являются собственными значениями соответствующих операторов. При этом, если наблюдаемая принимает значение A_n, так что $\hat{A}\,|\,\psi_n\rangle = A_n\,|\,\psi_n\rangle$ то, естественно, $\hat{A}^2\,|\,\psi_n\rangle = A_n^2\,|\,\psi_n\rangle$, т. е. оператор $\hat{A}^2$ соответствует квадрату наблюдаемой A^2. В то же время закон соответствия между операторами и функциями, представляющими эти операторы в фазовом пространстве $(p,\ q)$, другой, так что из соответствия $\hat{A} = \{A(\hat{p},\ \hat{q})\} \leftrightarrow A(p,\ q)$ не вытекает $\hat{A}^2 \leftrightarrow A^2(p,\ q)$. Например, если

$$H(p,\ q) = (p^2/2m) + (m\omega^2q^2/2),\qquad \hat{H} = \{H(\hat{p},\ \hat{q})\} = (\hat{p}^2/2m) + (m\omega^2\hat{q}^2/2),$$

то, согласно (2.11),

$$\hat{H}^2 = \{H(\hat{p},\ \hat{q})\}^2 = \left\{H^2(\hat{p},\ \hat{q}) - \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right\}.$$

Поэтому, если

$$\langle E\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{H}\,|\,\psi\rangle = \int\int\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2q^2}{2}\right]W(p,\ q)\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q, \tag{3.4а}$$

то

$$\langle E^2\rangle = \langle\psi\,|\,\hat{H}^2\,|\,\psi\rangle = \int\int\left[\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2q^2}{2}\right)^2 - \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right]W(p,\ q)\,\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q. \tag{3.4б}$$

в) Ограничение на допустимый класс квантовомеханических распределений для чистых состояний

Из формулы (2.20) следует, что функция двух переменных $W(p, q)$ однозначно выражается через функцию одной переменной $\psi(q)$. Это обстоятельство значительно ограничивает класс возможных функций $W(p, q)$. Полезно сформулировать это ограничение в терминах самой функции W. Для этого возьмем преобразование Фурье от (2.20) по p, в результате чего получим

$$\int \exp(i\lambda p)\, W(p, q)\, dp = \psi\left(q + \frac{\lambda\hbar}{2}\right) \psi^*\left(q - \frac{\lambda\hbar}{2}\right).$$

Обозначив $q \pm (\lambda\hbar/2) = q_{1,2}$, запишем это равенство в виде

$$\int \exp[ip(q_1 - q_2)/\hbar]\, W\left(p, \frac{q_1+q_2}{2}\right) dp = \psi(q_1)\, \psi^*(q_2). \tag{3.5}$$

Стоящий в левой части (3.5) интеграл должен факторизоваться по переменным q_1, q_2, откуда вытекает, что вигнеровская функция, описывающая чистое квантовое состояние, с необходимостью удовлетворяет условию

$$\frac{\partial^2 \ln \rho(q_1, q_2)}{\partial q_1\, \partial q_2} = 0, \tag{3.6}$$

где

$$\rho(q_1, q_2) = \int \exp[ip(q_1 - q_2)/\hbar]\, W\left(p, \frac{q_1+q_2}{2}\right) dp.$$

Как будет видно из дальнейшего, это условие играет весьма важную роль.

Покажем прежде всего, что ограничение (3.6) на вид функции W вместе с условием $W^* = W$ является не только необходимым, но и достаточным условием, при котором W описывает чистое состояние. Действительно, рассматривая (3.6) как уравнение относительно $\rho(q_1, q_2)$, находим, что его общее решение имеет вид $\rho(q_1, q_2) = f(q_1)\, \varphi(q_2)$. Далее, из представления $\rho(q_1, q_2)$ через W и условия $W^* = W$ следует, что $\rho^*(q_1, q_2) = \rho(q_2, q_1)$. Отсюда получаем, что $f^*(q_1)\, \varphi^*(q_2) = f(q_2)\, \varphi(q_1)$ и, следовательно, $\varphi^*(q_2)/f(q_2) = \varphi(q_1)/f^*(q_1) = \text{const} = A = A^*$. Тогда $\varphi(q) = Af^*(q)$, и если ввести обозначение $F(q) = \sqrt{A} f(q)$, то для функции $\rho(q_1, q_2)$, удовлетворяющей условию (3.6), получаем представление

$$\rho(q_1, q_2) = \int W\left(p, \frac{q_1+q_2}{2}\right) \exp[ip(q_1 - q_2)/\hbar]\, dp = F(q_1)\, F^*(q_2). \tag{3.5a}$$

Таким образом, если функция W удовлетворяет условию (3.6), то она описывает чистое состояние, соответствующее волновой функции $F(q)$.

Переходя в (3.5a) к переменным $q = (q_1 + q_2)/2$, $\lambda = (q_1 - q_2)/\hbar$, записываем это равенство в виде

$$\int \exp(i\lambda p)\, W(p, q)\, dp = F\left(q + \frac{\lambda\hbar}{2}\right) F^*\left(q - \frac{\lambda\hbar}{2}\right).$$

Правая часть этого равенства содержит постоянную Планка $\hbar$, а в левой части ее может содержать только W. Следовательно, если функция W удовлетворяет условию (3.6), то она обязательно содержит постоянную Планка *).

Зафиксируем в (3.5a) $q_2 = q_0$ и положим $q_1 = q$. Тогда

$$F(q) = [F^*(q_0)]^{-1} \int W\left(p, \frac{q+q_0}{2}\right) \exp[ip(q - q_0)/\hbar]\, dp.$$

*) Автор весьма признателен В. И. Ритусу, который в своей рецензии на статью обратил внимание на возможность такого доказательства вхождения постоянной Планка в функцию Вигнера.

Полагая в (3.5а) $q_1 = q_2 = q_0$, имеем

$$|F(q_0)|^2 = \int W(p, q_0)\,\mathrm{d}p, \quad F^*(q_0) = \sqrt{\int W(p, q_0)\,\mathrm{d}p}\,\exp(-i\varphi).$$

Значение q_0 всегда можно выбрать так, что $F^*(q_0) \neq 0$. Подставляя это выражение в формулу для $F(q)$, получаем соотношение

$$F(q) = \int W\left(p, \frac{q+q_0}{2}\right) \exp[ip(q-q_0)/\hbar]\,\mathrm{d}p \left[\int W(p, q_0)\,\mathrm{d}p\right]^{-1/2} \exp(i\varphi), \tag{3.7}$$

позволяющее восстановить волновую функцию $F(q)$ по функции Вигнера с точностью до постоянного фазового множителя. Легко убедиться в том, что если функция W определяется формулой (2.20) и, следовательно, удовлетворяет условию (3.6), то подстановка этой функции в (3.7) приводит к соотношению $F(q) = \psi(q) \exp(i\alpha)$, $\alpha = \alpha^*$.

Таким образом, условие (3.6) *является необходимым и достаточным признаком того, что функция* W *описывает чистое квантовое состояние и при его выполнении возможно восстановление волновой функции по функции Вигнера с точностью до постоянного фазового множителя.*

Если применить формулу обращения (3.7) к функции W, не удовлетворяющей условию (3.6), то также может быть получена некоторая функция $F(q)$. Однако если подставить эту функцию вместо $\psi(q)$ в формулу (2.20), то восстановленная функция $W(p, q)$ не будет совпадать с исходной. Такое совпадение или несовпадение также можно использовать в качестве необходимого и достаточного признака того, является ли состояние, описываемое функцией W, чистым.

Так как из условия (3.6) вытекает возможность восстановления волновой функции, то квазиплотности, удовлетворяющие этому условию, автоматически удовлетворяют соотношению неопределенностей. Прежде всего проиллюстрируем это на примере. Рассмотрим совместное гауссовское распределение для p и q. Его общий вид таков:

$$W(p, q) = [2\pi\sigma_p\sigma_q\sqrt{1-r^2}]^{-1} \times$$
$$\times \exp\left(-\frac{1}{2(1-r^2)}\left[\frac{(p-\bar{p})^2}{\sigma_p^2} - \frac{2r(p-\bar{p})(q-\bar{q})}{\sigma_p\sigma_q} + \frac{(q-\bar{q})^2}{\sigma_q^2}\right]\right); \tag{3.8}$$

здесь $\bar{q}$, $\bar{p}$ — средние, σ_q, σ_p — среднеквадратичные отклонения, r — коэффициент корреляции координаты и импульса. Из (3.6) вытекает, что параметры распределения должны быть связаны соотношением

$$\sigma_p^2\sigma_q^2(1-r^2) = \hbar^2/4. \tag{3.9}$$

Так как $0 \leqslant r^2 \leqslant 1$, то из (3.8) следует, что $\sigma_p\sigma_q \geqslant \hbar/2$. Таким образом, произвольное гауссовское распределение не может соответствовать чистому квантовомеханическому состоянию. Лишь если его параметры связаны соотношением (3.9), оно может описывать состояние квантовой системы.

В связи с распределением (3.8), (3.9) сделаем несколько замечаний. Во-первых, как показано в работе [28], гауссовское распределение, параметры которого связаны соотношением (3.9), является единственным положительным вигнеровским распределением для чистого состояния (см. гл. 5) — все другие вигнеровские функции, описывающие чистое квантовое состояние, обязательно принимают отрицательные значения при некоторых p, q. Гауссовское распределение (3.8), (3.9) соответствует введенным в работе [29] коррелированным когерентным состояниям. Для этих состояний достигается знак равенства в обобщенном соотношении неопределенностей, справедливом для заданного значения коэффициента корреляции r:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2(1-r^2)\geqslant\frac{1}{4}|\langle[\hat{A},\ \hat{B}]\rangle|^2. \qquad (3.10)$$

Соотношение неопределенностей этого вида первоначально установлено в работах [30, 31] для эрмитовых операторов и чистых состояний и обобщено в статье [29] на случай неэрмитовых операторов и смешанных состояний.

Отметим, что из условия (3.9) можно получить соотношения и для более высоких статистических моментов. Так как для гауссовского распределения вероятностей высшие моменты выражаются через моменты второго порядка, то имеет место соотношение

$$[\langle(p-\bar{p})^{2n}\rangle\langle(q-\bar{q})^{2n}\rangle]^{1/2n}=\frac{[(2n-1)!!]^{1/n}}{\sqrt{1-r^2}}\frac{\hbar}{2}.$$

С ростом n численный коэффициент в правой части этой формулы возрастает приблизительно линейно.

Соотношение (3.6) можно использовать для проверки того, может ли произвольно выбранная функция $W(p,\ q)$ представлять чистое квантовое состояние. Например, легко убедиться, что функция $W(p,\ q)$, равная константе внутри прямоугольной области на плоскости $(p,\ q)$ и равная нулю вне этой области, не может описывать чистое квантовое состояние.

Формальное доказательство того, что квазиплотность $W(p,\ q)$, удовлетворяющая ограничению (3.6), согласуется с соотношением неопределенностей, весьма просто. Действительно, нам требуется доказать, что

$$\left[\int\int(p-\bar{p})^2W(p,\ q)\,dp\,dq\right]\left[\int\int(q-\bar{q})^2W(p,\ q)\,dp\,dq\right]\geqslant\hbar^2/4, \qquad (3.11)$$

где

$$\bar{p}=\int\int pW(p,\ q)\,dp\,dq,\quad \bar{q}=\int\int qW(p,\ q)\,dp\,dq.$$

Но, как следует из (3.7), по функции $W(p,\ q)$, удовлетворяющей условию (3.6), мы восстанавливаем $\psi(q)$ с точностью до постоянного фазового множителя. Далее, уже было доказано, что средние значения $\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$, $\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle$, $\langle\psi|\hat{q}|\psi\rangle$, $\langle\psi|\hat{q}^2|\psi\rangle$ совпадают с соответствующими средними, найденными при помощи W, если эта функция построена по заданному $\psi(q)$. Так как соответствие между $\psi(q)$ и $W(p,\ q)$ при выполнении условия (3.6) взаимно однозначно, то указанные средние значения совпадают и соотношение (3.11) выполняется, так как оно доказано для средних значений, вычисляемых как $\langle\psi|\ \ldots\ |\psi\rangle$.

Отметим еще одно свойство функции $W(p,\ q)$, выполняющееся для чистых состояний. Исходя из формулы (2.20), легко найти, что

$$\int\int W^2(p,\ q)\,dp\,dq=(2\pi\hbar)^{-1}.$$

Это свойство отличает вигнеровскую функцию чистого состояния от вигнеровских функций смешанных состояний. В общем случае имеет место соотношение

$$\int\int W^2(p,\ q)\,dp\,dq\leqslant(2\pi\hbar)^{-1}, \qquad (3.12)$$

причем равенство выполняется лишь в случае, когда W описывает чистое состояние.

Прежде чем вывести соотношение (3.12), приведем полезную формулу, выражающую вероятность перехода из состояния $|\psi_i\rangle$ в состояние $|\psi_k\rangle$ через функции Вигнера этих состояний $W_j(p,\ q)=\langle\psi_j|\hat{W}(p,\ q)|\psi_j\rangle$:

$$2\pi\hbar\int\int W_i(p,\ q)\,W_k(p,\ q)\,dp\,dq=|\langle\psi_i|\psi_k\rangle|^2. \qquad (3.13)$$

Эта формула легко доказывается путем прямого вычисления входящего в нее интеграла, если для функций Вигнера использовать представление (2.20).

Рассмотрим взаимно ортогональные состояния $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... ($\langle\psi_i|\psi_k\rangle = \delta_{ik}$) с соответствующими функциями Вигнера $W_i(p, q)$ и образуем из них смешанное состояние, описываемое функцией

$$W(p, q) = \sum \alpha_i W_i(p, q).$$

Очевидно, что вероятности α_i должны удовлетворять условиям

$$0 \leqslant \alpha_i \leqslant 1, \ \sum \alpha_i = 1. \tag{3.14}$$

Рассмотрим

$$\int\int W^2(p, q)\,dp\,dq = \sum\sum \alpha_i\alpha_k \int\int W_i W_k dp\,dq.$$

Так как в нашем случае $\langle\psi_i|\psi_k\rangle = \delta_{ik}$, то из (3.13) следует, что

$$\int\int W^2(p, q)\,dp\,dq = (2\pi\hbar)^{-1} \sum \alpha_i^2.$$

Но в силу условий (3.14) $\sum \alpha_i^2 \leqslant 1$, так что имеет место соотношение (3.12). Равенство $\sum \alpha_i^2 = 1$ возможно лишь в том случае, когда один из коэффициентов α_k равен единице, а остальные равны нулю, т. е. в чистом состоянии. В связи с этим критерий (3.12) иногда используется для проверки того, является ли состояние чистым. Здесь, однако, следует иметь в виду, что равенство в уравнении (3.12) является необходимым, но отнюдь не достаточным признаком чистого состояния. Его можно использовать лишь в том случае, если уже установлено, что W является линейной комбинацией вигнеровских функций чистых состояний с коэффициентами, удовлетворяющими условиям (3.14). В случае же, когда мы рассматриваем некоторую действительную функцию $\widetilde{W}$, о которой лишь известно, что она удовлетворяет условию нормировки и для нее в (3.12) имеет место знак равенства, мы не вправе утверждать, что она является функцией Вигнера некоторого чистого состояния. Более того, она вообще может не быть функцией Вигнера, так как может приводить к отрицательным средним значениям от заведомо положительных операторов. В качестве примера рассмотрим функцию

$$\widetilde{W}(p, q) = (3\pi\hbar)^{-1}(8\mathscr{E} - 2\mathscr{E}^2 - 1)\exp(-\mathscr{E}), \tag{3.15}$$

где

$$\mathscr{E} = \frac{2}{\hbar\omega}[(p^2/2m) + (m\omega^2 q^2/2)].$$

Легко проверить, что эта функция удовлетворяет условию нормировки и обращает (3.12) в равенство. Однако условие (3.6) для нее не выполняется и функция (3.15) не является функцией Вигнера чистого состояния. В данном случае легко дать объяснение кажущемуся противоречию. Дело в том, что функцию (3.15) можно представить в виде

$$\widetilde{W}(p, q) = \frac{2}{3}W_0(p, q) + \frac{2}{3}W_1(p, q) - \frac{1}{3}W_2(p, q),$$

где $W_i(p, q)$ — вигнеровские функции, соответствующие стационарным состояниям гармонического осциллятора (см. (5.43)). Коэффициенты подобраны здесь так, что $\sum \alpha_k = \sum \alpha_k^2 = 1$, и поэтому в (3.12) имеет место знак равенства. Противоречие связано с тем, что нарушены условия (3.14) и одна из «вероятностей» отрицательна.

При нарушении условий (3.14) вигнеровская функция смешанного состояния не является положительно определенной и это может проявиться в том, что при вычислении с ее помощью среднего значения от заведомо положительного оператора может быть получена отрицательная величина.

Однако такое противоречие может возникнуть не для всякого положительного оператора. Например, если один из коэффициентов (например, α_3) отрицателен, но усредняемый положительный оператор $\hat{A}$ удовлетворяет условию $\hat{A} \mid \psi_3 \rangle = 0$, то для его среднего значения будет получена неотрицательная величина. Поэтому для смешанных состояний проверка положительной определенности функции Вигнера (неотрицательности коэффициентов α_k) обязательно должна предшествовать использованию критерия (3.12). Такая проверка, однако, является весьма сложной задачей.

В то же время критерий (3.6) является как необходимым, так и достаточным условием «чистоты» состояния и его использование не вызывает никаких трудностей.

4. ЭВОЛЮЦИОННОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ КВАЗИВЕРОЯТНОСТИ (КВАНТОВОЕ УРАВНЕНИЕ ЛИУВИЛЛЯ) И НЕКОТОРЫЕ ЕГО СЛЕДСТВИЯ

а) Вывод эволюционного уравнения

Поскольку динамика квантовой системы определяется уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \mid \psi\rangle}{\partial t} = [(\hat{p}^2/2m) + V(\hat{q})] \mid \psi\rangle, \quad \mid \psi(t_0)\rangle = \mid \psi_0\rangle, \tag{4.1}$$

то вигнеровская функция $W(p, q)$, построенная при помощи решения уравнения (4.1), также будет зависеть от времени. Найдем эволюционное уравнение для этой функции.

Проще всего исходить из уравнения для $\rho(q_1, q_2, t) = \psi(q_1, t)\psi^*(q_2, t)$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial q_2^2}\right) + \frac{1}{i\hbar}(V(q_1) - V(q_2))\right]\rho(q_1, q_2, t).$$

В соответствии с формулой (2.21), связывающей ρ и W, положим $q_{1,2} = q \mp (\xi/2)$. Тогда в новых переменных получим уравнение

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left[-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial^2}{\partial q\, \partial \xi} + \frac{1}{i\hbar}\left(V\left(q - \frac{\xi}{2}\right) - V\left(q + \frac{\xi}{2}\right)\right)\right]\rho\left(q - \frac{\xi}{2},\ q + \frac{\xi}{2}\right). \tag{4.2}$$

Продифференцируем теперь (2.21) по t и подставим (4.2):

$$\frac{\partial W(p, q, t)}{\partial t} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int d\xi \exp(ip\xi/\hbar) \times$$
$$\times \left[-\frac{i\hbar}{m}\frac{\partial^2 \rho}{\partial q\, \partial \xi} + \frac{1}{i\hbar}\left(V\left(q - \frac{\xi}{2}\right) - V\left(q + \frac{\xi}{2}\right)\right)\rho\right]. \tag{4.3}$$

Преобразуем первое слагаемое, вынося $\partial/\partial q$ из-под знака интеграла, а по ξ интегрируя по частям:

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int -\frac{i\hbar}{m} e^{ip\xi/\hbar} \frac{\partial^2 \rho}{\partial q\, \partial \xi} d\xi = \frac{i\hbar}{m}\frac{\partial}{\partial q}\frac{1}{2\pi\hbar}\int \rho \frac{\partial}{\partial \xi} e^{ip\xi/\hbar} d\xi = \frac{i\hbar}{m}\frac{ip}{\hbar}\frac{\partial W}{\partial q}.$$

Второе слагаемое преобразуем с учетом формулы

$$\xi^n \exp(ip\xi/\hbar) = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}\right)^n \exp(ip\xi/\hbar),$$

из которой вытекает, что для аналитических в точке q функций V

$$V\left(q \pm \frac{\xi}{2}\right)\exp(ip\xi/\hbar) = V\left(q \pm \frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\right)\exp(ip\xi/\hbar).$$

Тогда

$$\frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2\pi\hbar}\int d\xi\, \rho\left[V\left(q - \frac{\xi}{2}\right) - V\left(q + \frac{\xi}{2}\right)\right]\exp(ip\xi/\hbar) =$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2\pi\hbar}\int d\xi\, \rho\left[V\left(q + \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right) - V\left(q - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\exp(ip\xi/\hbar) =$$
$$= \frac{1}{i\hbar}\left[V\left(q + \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right) - V\left(q - \frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]W(p, q, t)$$

В итоге получаем эволюционное уравнение для функции W, записанное в операторной форме:

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}+\frac{1}{i\hbar}\left[V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)-V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]W. \quad (4.4а)$$

Другую форму этого же уравнения можно записать в виде

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}+\frac{2}{\pi\hbar^2}\int W(p-p',\,q)\,dp'\int V(q-q')\sin\frac{2p'q'}{\hbar}\,dq'. \quad (4.4б)$$

Оно получается, если в правую часть (4.3) подставить обращение формулы (2.21):

$$\rho\left(q-\frac{\xi}{2},\,q+\frac{\xi}{2}\right)=\int W(p',\,q)\exp(-ip'\xi/\hbar)\,dp'.$$

Уравнение (4.4) является квантовым обобщением классического уравнения Лиувилля (1.1). Оно было получено в работе Вигнера [1]. Мы будем называть его квантовым уравнением Лиувилля.

Обсудим некоторые свойства уравнения (4.4).

б) Классический предел

Если разложить потенциал V в ряд в точке q, то уравнение (4.4а) можно записать в виде следующего разложения:

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}-V'(q)\frac{\partial W}{\partial p}=-\frac{\hbar^2}{24}V'''(q)\frac{\partial^3 W}{\partial p^3}+\ldots \quad (4.5)$$

Таким образом, при пренебрежении величинами порядка $\hbar^2$ квантовое уравнение Лиувилля переходит в классическое.

Переход к классическому пределу можно исследовать подробнее. Для этого представим уравнение (4.4а) в форме

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}-V'(q)\frac{\partial W}{\partial p}=$$
$$=\left[\frac{1}{i\hbar}\left(V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)-V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right)-V'(q)\frac{\partial}{\partial p}\right]W. \quad (4.6)$$

Введем обозначение

$$\Phi(p,\,q,\,t)=\left[\frac{1}{i\hbar}\left(V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)-V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right)-V'(q)\frac{\partial}{\partial p}\right]W \quad (4.7)$$

и запишем уравнение (4.6) в виде неоднородного классического уравнения Лиувилля

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial q}-V'(q)\frac{\partial W}{\partial p}=\Phi(p,\,q,\,t). \quad (4.8)$$

Решение уравнения (4.8) с начальным условием $W(p,\,q,\,0)=W_0(p,\,q)$ можно записать как

$$W(p,\,q,\,t)=\iint G(p,\,q,\,t;\,p_0,\,q_0,\,0)\,W_0(p_0,\,q_0)\,dp_0\,dq_0+$$
$$+\int_0^t dt_0\iint G(p,\,q,\,t;\,p_0,\,q_0,\,t_0)\,\Phi(p_0,\,q_0,\,t_0)\,dp_0\,dq_0; \quad (4.9)$$

здесь G — функция Грина классического уравнения Лиувилля, имеющая вид

$$G(p,\,q,\,t;\,p_0,\,q_0,\,t_0)=\delta(p-\bar p(t;\,t_0,\,p_0,\,q_0))\,\delta(q-\bar q(t;\,t_0,\,p_0,\,q_0)), \quad (4.10)$$

а $\bar p$, $\bar q$ — решения классических уравнений движения

$$\frac{d\bar q}{dt}=\bar p/m,\quad \frac{d\bar p}{dt}=-V'(\bar q)$$

с начальными условиями

$$\bar{p}(t_0;\ t_0,\ p_0,\ q_0)=p_0,\quad \bar{q}(t_0;\ t_0,\ p_0,\ q_0)=q_0.$$

Подставим (4.7) в правую часть (4.9).

В результате приходим к уравнению:

$$W(p,\ q,\ t)=W^{(0)}(p,\ q,\ t)+\int_0^t \mathrm{d}t_0 \iint \mathrm{d}p_0\,\mathrm{d}q_0 G(p,\ q,\ t;\ p_0,\ q_0,\ t_0)\times$$

$$\times\left[\frac{1}{i\hbar}\left(V\left(q_0+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p_0}\right)-V\left(q_0-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p_0}\right)\right)-V'(q_0)\frac{\partial}{\partial p_0}\right]W(p_0,\ q_0,\ t_0). \tag{4.11а}$$

Здесь введено обозначение

$$W^{(0)}(p,\ q,\ t)=\iint G(p,\ q,\ t;\ p_0,\ q_0,0)\ W_0(p_0,q_0)\ \mathrm{d}p_0\mathrm{d}q_0. \tag{4.12}$$

Если воспользоваться фурье-представлением по p_0 для функции $W(p_0,\ q_0,\ t_0)$ в правой части (4.11а) и выполнить действие операторов $\partial/\partial p_0$, то это уравнение можно представить в форме чисто интегрального уравнения

$$W(p,\ q,\ t)=W^{(0)}(p,\ q,\ t)+$$

$$+\frac{1}{2\pi}\int_0^t dt'\iint \mathrm{d}p'\,\mathrm{d}q'\left\{\iint \mathrm{d}\lambda\,\mathrm{d}p_0\lambda G(p,\ q,\ t;\ p_0,\ q',\ t')\sin\left[\lambda(p_0-p')\right]\times\right.$$

$$\left.\times\left[V'(q')-\frac{1}{\lambda\hbar}\left(V\left(q'+\frac{\lambda\hbar}{2}\right)-V\left(q'-\frac{\lambda\hbar}{2}\right)\right)\right]\right\}W(p',\ q',\ t'). \tag{4.11б}$$

Уравнение (4.11) было получено Широковым [14]. Поясним его смысл. Функция $W^{(0)}(p,\ q,\ t)$ определяемая формулой (4.12), формально представляет собой решение классического уравнения Лиувилля, соответствующее начальному распределению $W_0(p,\ q)$. Поэтому, если рассмотреть решение уравнения (4.11б) в виде итерационного ряда, то его последующие члены будут вносить квантовые поправки к классическому решению. Однако следует иметь в виду, что при рассмотрении с помощью уравнения Широкова чистых квантовомеханических состояний функция $W_0(p_0,\ q_0)$ в (4.12), а следовательно, и функция $W^{(0)}(p,\ q,\ t)$ уже будет содержать (в силу ограничения (3.6)) постоянную Планка. Поэтому $W^{(0)}(p,q,t)$ правильнее было бы назвать не классическим решением, а развивающимся по законам классической механики исходным квантовым распределением.

в) Наличие посторонних решений и их фильтрация

Если потенциал $V(q)$ имеет вид $V(q)=V_0+V_1q+V_2q^2$, то

$$\frac{1}{i\hbar}\left[V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)-V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]=V'(q)\frac{\partial}{\partial p}.$$

Таким образом, для задачи об осцилляторе классическое и квантовое уравнения Лиувилля совпадают, а правая часть уравнения (4.5) тождественно обращается в нуль. Однако, как известно, решение задачи о квантовом осцилляторе существенно отличается от классического решения. Поэтому *в вигнеровском представлении различие между классической и квантовой механикой не сводится только к различию между квантовым и классическим уравнениями Лиувилля.* На этом примере мы убеждаемся в том, что *уравнение (4.4) удовлетворяется не только теми решениями, которые* *соответствуют квантовой механике, но содержит и некоторые «лишние» решения.* Так, для задачи об осцилляторе квантовому уравнению Лиувилля удовлетворяет любое решение классического уравнения.

В силу линейности квантового уравнения Лиувилля «лишние» решения могут описывать эволюцию линейных комбинаций функций Вигнера, соответствующих различным чистым состояниям. При этом, если коэффициенты этой линейной комбинации удовлетворяют условиям (3.14), то мы имеем дело с эволюцией смешанного состояния, если же эти условия не выполняются (как в примере (3.15)), то «лишние» решения вообще не имеют физического смысла.

Для квантовомеханических задач начальное условие к уравнению (4.4) должно удовлетворять соотношению (3.6), т. е.

$$\frac{\partial^2}{\partial q_1 \partial q_2} \ln \left[\int W_0 \left(p, \frac{q_1+q_2}{2} \right) \exp \left[ip \left(q_1 - q_2 \right) / \hbar \right] \mathrm{d}p \right] = 0. \qquad (4.13)$$

В то же время начальное условие к классическому уравнению Лиувилля может быть произвольной положительной функцией. Как уже отмечалось, в силу условия (4.13) *постоянная Планка входит не только в квантовое уравнение Лиувилля, но и в начальное услвие к нему.* Поэтому квантовые особенности задачи могут быть связаны и со специфически квантовыми начальными условиями. Например, в случае квантового осциллятора дело обстоит именно так.

Покажем, что если условие (4.13) выполняется для начального распределения, то оно будет выполняться и во все последующие моменты. Действительно, при выполнении этого условия мы можем по $W(p, q, 0)$ восстановить волновую функцию начального состояния. Так как в силу уравнения Шрёдингера чистое начальное состояние остается с течением времени чистым, то и функция Вигнера, вычисленная по решению уравнения Шрёдингера при $t > 0$ будет описывать чистое состояние и, следовательно, удовлетворять условию (3.6).

Таким образом, если начальное распределение квазивероятностей относится к классу допустимых квантовых распределений, то оно будет оставаться таким и с течением времени.

г) Об эквивалентности вигнеровского и шрёдингеровского представлений квантовой механики

До сих пор мы исследовали вигнеровское представление квантовой механики, исходя из шрёдингеровского представления. Покажем теперь, что если взять за основу вигнеровское представление, то из него можно получить представление Шрёдингера. Ясно, что, помимо квантового уравнения Лиувилля, мы должны включить в формулировку вигнеровского представления и условие (4.13), так как в противном случае, как мы убедились выше, этому уравнению могут удовлетворять решения, не имеющие отношения к квантовой механике, и даже лишенные физического смысла.

Итак, пусть функция $W(p, q, t)$ удовлетворяет уравнению (4.4), а начальное распределение $W(p, q, 0) = W_0(p, q)$ удовлетворяет условию (4.13). Покажем, что в этом случае волновая функция, восстановленная по $W(p, q, t)$ при помощи формулы (3.7), будет удовлетворять уравнению Шрёдингера и нужному начальному условию к нему. Тем самым мы покажем, что между обоими рассматриваемыми представлениями имеется взаимно однозначное соответствие.

Как было установлено выше, если условие (4.13) выполняется в начальный момент времени, то оно выполняется и во все последующее время. Но в этом случае, как было показано, функция Вигнера представима в виде

$$W(p, q, t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{ip\xi/\hbar}F^*\left(q+\frac{\xi}{2},\, t\right)F\left(q-\frac{\xi}{2},\, t\right)d\xi. \qquad (4.14)$$

Подставив (4.14) в уравнение (4.4а), после очевидных преобразований запишем его в виде

$$\int d\xi \exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right)\frac{\partial}{\partial t}\left[F^*\left(q+\frac{\xi}{2},\, t\right)F\left(q-\frac{\xi}{2},\, t\right)\right]+$$
$$+\int d\xi\left[\frac{\hbar}{im}\frac{\partial}{\partial\xi}\exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right)\right]\frac{\partial}{\partial q}\left[F^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)F\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\right]+$$
$$+\frac{1}{i\hbar}\int d\xi F^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)F\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\left[V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{i\xi}{\hbar}\right)-V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{i\xi}{\hbar}\right)\right]\exp\left(\frac{ip\xi}{\hbar}\right)=0.$$

Интегрируя второе слагаемое по частям и учитывая, что суммарный интеграл равен нулю при произвольных p, приравниваем нулю подынтегральное выражение:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[F^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)F\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\right]-\frac{\hbar}{im}\frac{\partial^2}{\partial q\,\partial\xi}\left[F^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)F\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\right]+$$
$$+\frac{1}{i\hbar}\left[V\left(q+\frac{\xi}{2}\right)-V\left(q-\frac{\xi}{2}\right)\right]F^*\left(q+\frac{\xi}{2}\right)F\left(q-\frac{\xi}{2}\right)=0.$$

После перехода к переменным $q\pm(\xi/2)=q_{1,2}$; $2\,(\partial^2/\partial q\,\partial\xi)=(\partial^2/\partial q_1^2)-(\partial^2/\partial q_2^2)$ получаем

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[F^*(q_1)F(q_2)]-\frac{\hbar^2}{2m}\left[F(q_2)\frac{\partial^2F^*(q_1)}{\partial q_1^2}-F^*(q_1)\frac{\partial^2F(q_2)}{\partial q_2^2}\right]+$$
$$+[V(q_1)-V(q_2)]\,F^*(q_1)F(q_2)=0.$$

Разделив это равенство на $F^*(q_1)F(q_2)$, запишем его в виде

$$\frac{1}{F(q_2)}\left[i\hbar\frac{\partial F(q_2)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2F(q_2)}{\partial q_2^2}-V(q_2)F(q_2)\right]=$$
$$=\frac{1}{F^*(q_1)}\left[-i\hbar\frac{\partial F^*(q_1)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2F^*(q_1)}{\partial q_1^2}-V(q_1)F^*(q_1)\right]=\Phi(t)=\Phi^*(t);$$

здесь $\Phi(t)$ — произвольная не зависящая от координат функция времени.

Таким образом, уравнение для $F(q)$ записывается в форме

$$i\hbar\frac{\partial F}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2F}{\partial q^2}-[V(q)+\Phi(t)]\,F(q, t)=0. \qquad (4.15\text{а})$$

Если ввести функцию

$$\psi(q, t)=F(q, t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_0^t\Phi(t')\,dt'\right],$$

отличающуюся от F лишь не зависящим от координат фазовым множителем, то она удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2}+V(q)\,\psi. \qquad (4.15\text{б})$$

Очевидно также, что при $t=0$ волновая функция удовлетворяет начальному условию, соответствующему начальному распределению квазивероятностей.

Итак, мы показали, что из квантового уравнения Лиувилля, начальное условие к которому удовлетворяет ограничению (4.13) на допустимый вид чистых квантовых распределений, вытекает уравнение Шрёдингера. В частности, если начальное распределение $W_0(p, q)$, помимо условия (4.13), удовлетворяет условию стационарности

$$-\frac{p}{m}\frac{\partial W_0}{\partial q}+\frac{1}{i\hbar}\left[V\left(q+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)-V\left(q-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]W_0=0, \qquad (4.16)$$

то в уравнении (4.15а) будет отсутствовать член $i\hbar\, \partial F/\partial t$, а функция $\Phi = -E$ не будет зависеть от времени. В этом случае (4.15а) принимает вид уравнения на собственные значения энергии:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 F}{\partial q^2}+V(q)\,F=EF. \tag{4.15в}$$

Другой способ описания стационарных состояний, основанный на подчинении функции W второму уравнению того же типа, что и уравнение Лиувилля, описан в работе [15]. В этой работе, так же как и в [34], кроме того, исследуются собственные функции квантового уравнения Лиувилля.

Проиллюстрируем роль условия (4.13) на примере осциллятора. Если $V(q) = m\omega^2 q^2/2$, то решение уравнения (4.16) имеет вид

$$W_0(p,\ q)=f\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right),$$

т. е. произвольная функция от гамильтониана является стационарным решением уравнения Лиувилля. Однако произвольное решение этого вида не удовлетворяет условию (4.13), выделяющему допустимые квантовые распределения. Предположим для простоты, что $f(H)$ имеет вид

$$W_0(p,\ q)=N\exp\left[-\alpha\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)\right] \tag{4.17}$$

с неизвестным коэффициентом α. Подставляя (4.17) в (4.13) и вычисляя интеграл, легко убедиться, что он факторизуется по переменным q_1, q_2 лишь при условии

$$\alpha = 2/\hbar\omega, \tag{4.18}$$

т. е. стационарное распределение вероятностей для осциллятора может иметь вид

$$W_0(p,\ q)=\frac{1}{\pi\hbar}\exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)\right]. \tag{4.19}$$

Среднее значение энергии осциллятора в этом состоянии равно

$$\langle E\rangle=\frac{1}{\pi\hbar}\iint\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)\exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)\right]\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q=\frac{\hbar\omega}{2}.$$

Однако, чтобы найти $\langle E^2\rangle$, мы должны усреднить по распределению $W_0(p, q)$ не функцию $H^2(p, q)$, а функцию $H^2(p, q) - (\hbar\omega/2)^2$, которая, согласно формуле (3.4б), соответствует оператору $\hat{H}^2$ в вигнеровском представлении. Нетрудно убедиться, что

$$\langle E^2\rangle=\frac{1}{\pi\hbar}\iint\left[\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)^2-\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right]\times$$
$$\times\exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)\right]\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q=\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2. \tag{4.20}$$

Мы сталкиваемся здесь с важной особенностью вигнеровского представления. С одной стороны, мы видим, что $\langle E^n\rangle = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^n$ при $n = 1, 2, \ldots$ Если бы мы имели дело с обычной плотностью вероятностей, то очевидно, что в этом случае она должна была бы иметь вид

$$W_{\text{кл}}(p,\ q)=\frac{\omega}{2\pi}\,\delta\left(H(p,\ q)-\frac{\hbar\omega}{2}\right),$$

т. е. должна была бы быть сосредоточена на линиях равной энергии. Однако мы видим, что квазиплотность вероятности, соответствующая фиксированному значению энергии $E = \hbar\omega/2$, тем не менее, «размазана» по всей фазовой плоскости и отлична от нуля там, где $H(p, q) \neq \hbar\omega/2$.

Второе важное обстоятельство, на которое мы хотим обратить внимание, заключается в том, что условие квантования энергии осциллятора мы получили не из уравнения движения для $W(p, q)$ (квантового уравнения Лиувилля), а из дополнительного условия, выделяющего вигнеровские распределения, соответствующие чистым квантовым состояниям. На этом примере отчетливо видно, что в вигнеровском представлении постоянная Планка может войти в теорию не только из эволюционного уравнения (являющегося следствием уравнения Шредингера) но из начального условия, которое в квантовой задаче обязано удовлетворять дополнительному уравнению (4.13), обеспечивающему, в частности, выполнение соотношения неопределенностей в начальном состоянии.

5. ОБ УСЛОВИЯХ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОСТИ КВАЗИВЕРОЯТНОСТИ И СГЛАЖЕННОЙ КВАЗИВЕРОЯТНОСТИ

Мы уже упоминали, что вигнеровская квазивероятность $W(p, q)$ не удовлетворяет условию положительности. Здесь мы исследуем этот вопрос подробнее. Для этого найдем собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{W}(p, q)$. Воспользовавшись формулой (2.19), запишем его в виде

$$\hat{W}(p, q)=\frac{1}{\pi\hbar}\hat{J}(p, q), \tag{5.1}$$

где

$$\hat{J}(p, q)=\frac{1}{2}\int\left|q-\frac{\xi}{2}\right\rangle \exp(-ip\xi/\hbar)\,d\xi\left\langle q+\frac{\xi}{2}\right|. \tag{5.2}$$

Рассмотрим оператор $\hat{J}^2(p, q)$:

$$\hat{J}^2(p, q)=\frac{1}{4}\iint\left|q-\frac{\xi_1}{2}\right\rangle e^{-ip\xi_1/\hbar}\,d\xi_1\left\langle q+\frac{\xi_1}{2}\right|\left.q-\frac{\xi_2}{2}\right\rangle e^{-ip\xi_2/\hbar}\,d\xi_2\left\langle q+\frac{\xi_2}{2}\right|.$$

Так как $\left\langle q+\frac{\xi_1}{2}\right|\left.q-\frac{\xi_2}{2}\right\rangle=\delta\left(\frac{\xi_1+\xi_2}{2}\right)=2\delta(\xi_1+\xi_2)$, то

$$\hat{J}^2(p, q)=\frac{1}{2}\int\left|q-\frac{\xi}{2}\right\rangle d\xi\left\langle q-\frac{\xi}{2}\right|=\int|q'\rangle\,dq'\langle q'|=\hat{1}.$$

Таким образом, квадрат оператора $\hat{J}$ равен $\hat{1}$:

$$\hat{J}^2(p, q)=\hat{1}. \tag{5.3}$$

Следовательно, собственные значения оператора $\hat{J}$ могут быть равными ±1, а собственные значения оператора $\hat{W}$, связанного с $\hat{J}$ формулой (5.1), равны $\pm(\pi\hbar)^{-1}$.

Рассмотрим действие оператора $\hat{J}$ на некоторый вектор $|\psi\rangle$:

$$|\tilde{\psi}_{pq}\rangle=\hat{J}(p, q)|\psi\rangle. \tag{5.4}$$

Умножив это уравнение слева на $\langle q'|$ и обозначая $\langle q'|\tilde{\psi}_{pq}\rangle=\tilde{\psi}_{pq}(q')$, запишем преобразование (5.4) в координатном представлении:

$$\tilde{\psi}_{pq}(q')=$$
$$=\frac{1}{2}\int\delta\left(q'-q+\frac{\xi}{2}\right)\exp(-ip\xi/\hbar)\,\psi\left(q+\frac{\xi}{2}\right)d\xi=\psi(2q-q')\exp\left[-\frac{2ip}{\hbar}(q-q')\right].$$

Как мы уже выяснили, собственные значения оператора $\hat{J}$ равны ±1. Поэтому, чтобы найти собственные функции этого оператора, следует найти решения уравнения $\tilde{\psi}_{pq}(q')=\pm\psi(q')$ или, если воспользоваться полученным выражением для $\tilde{\psi}_{pq}$,

$$\psi(q')=\pm\exp\left[\frac{-2ip(q-q')}{\hbar}\right]\psi(2q-q'). \tag{5.5}$$

Введем вместо $\psi(q')$ новую искомую функцию $\alpha(q')$ согласно равенствам

$$\psi(q') = \exp(ipq'/\hbar)\,\alpha(q'-q),\quad \alpha(q') = \exp\left[-\frac{ip}{\hbar}(q'+q)\right]\psi(q'+q). \tag{5.6}$$

Тогда, выразив ψ в (5.5) через α, получим уравнение

$$\alpha(q'-q) = \pm\,\alpha(q-q'). \tag{5.7}$$

Решением уравнения (5.7), соответствующим собственному значению $+1$ оператора $\hat{J}$, является произвольная четная функция $\alpha(q')$, а собственному значению -1 соответствует произвольная нечетная функция $\alpha(q')$. В соответствии с этим оператор J может быть назван [25] оператором отражения *) (parity operator). Его свойства более подробно описаны в работах [25,32,33].

Произвольную четную (нечетную) функцию $\alpha(q')$ можно записать в виде

$$\alpha^{\pm}(q') = \int_0^{\infty} \Phi^{\pm}(\varkappa;\ p,\ q)\,{}^{\cos}_{\sin}(\varkappa q')\,d\varkappa. \tag{5.8}$$

Функции $\Phi^{\pm}$ здесь могут зависеть как от параметров от p, q, поскольку от них зависит оператор $\hat{J}(p,\ q)$. Подставив полученные значения $\alpha^{\pm}(q')$ в (5.6), найдем, что

$$\psi^{\pm}(q') \equiv \langle q' \,|\, p,\ q,\ \pm\rangle = \exp(ipq'/\hbar)\int_0^{\infty}\Phi^{\pm}(\varkappa;\ p,\ q)\,{}^{\cos}_{\sin}(\varkappa(q'-q))\,d\varkappa.$$

Тогда для собственных векторов $|\,p,\ q,\ \pm\rangle$ легко получаем

$$|\,p,\ q,\ \pm\rangle = \int |q'\rangle\,dq'\,\langle q'\,|\,p,\ q,\ \pm\rangle =$$

$$= \int_0^{\infty}\Phi^{\pm}(\varkappa;\ p,\ q)\,d\varkappa\int |q'\rangle \exp(ipq'/\hbar)\,{}^{\cos}_{\sin}(\varkappa(q'-q))\,dq'. \tag{5.9}$$

Мы видим, что произвольный собственный вектор оператора $\hat{J}$ разлагается по векторам

$$|\,p,\ q;\ \pm,\ \varkappa\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int |q'\rangle\exp(ipq'/\hbar)\,{}^{\cos}_{\sin}(\varkappa(q'-q))\,dq'. \tag{5.10а}$$

Нормировочный коэффициент $\pi^{-1/2}$ подобран здесь так, что при $\varkappa,\ \varkappa' \geqslant 0$ выполняются условия нормировки

$$\langle p,\ q;\ \pm,\ \varkappa\,|\,p,\ q;\ \pm,\ \varkappa'\rangle = \delta(\varkappa-\varkappa'),\quad \langle p,\ q;\ \pm,\ \varkappa\,|\,p,\ q;\ \mp,\ \varkappa'\rangle = 0 \tag{5.11}$$

(здесь берутся одновременно или два верхних, или два нижних знака). Учитывая формулу

$$|p'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q'\rangle\exp(ipq'/\hbar)\,dq',$$

связывающую базисные векторы координатного и импульсного представлений, можно выполнить интегрирование в (5.10а), представив синус и косинус в виде комбинации экспонент. Тогда приходим к формулам

$$\begin{aligned}
|\,p,\ q;\ +,\ \varkappa\rangle &= \sqrt{\hbar/2}\,[\exp(-i\varkappa q)\,|p+\hbar\varkappa\rangle + \exp(i\varkappa q)\,|p-\hbar\varkappa\rangle],\\
|\,p,\ q;\ -,\ \varkappa\rangle &= \frac{\sqrt{\hbar/2}}{i}\,[\exp(-i\varkappa q)\,|p+\hbar\varkappa\rangle - \exp(i\varkappa q)\,|p-\hbar\varkappa\rangle].
\end{aligned} \tag{5.10б}$$

---

*) Легко показать, что оператор $\hat{J}$ удовлетворяет уравнениям [32,33]

$$\hat{J}(p,\ q)(\hat{q}-q)\hat{J}(p,\ q) = -(\hat{q}-q),\quad \hat{J}(p,\ q)(\hat{p}-p)\hat{J}(p,\ q) = -(\hat{p}-p).$$

Используя эти формулы, легко проверить, что найденные собственные функции образуют полную систему:

$$\int_0^\infty [|p, q; +, \varkappa\rangle\langle p, q; +, \varkappa| + |p, q; -, \varkappa\rangle\langle p, q; -, \varkappa|]\, d\varkappa = \int_{-\infty}^{\infty} |p'\rangle\, dp'\, \langle p'| = \hat{1}. \quad (5.12)$$

Согласно (5.1) имеют место соотношения

$$\hat{W}(p, q)\, |p, q; \pm, \varkappa\rangle = \pm(\pi\hbar)^{-1}\, |p, q; \pm, \varkappa\rangle. \quad (5.13)$$

Произвольный вектор состояния $|\psi\rangle$ можно разложить по собственным векторам оператора W. Используя (5.12), получим разложения

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle,$$
$$|\psi_\pm\rangle = \int_0^\infty |p, q; \pm, \varkappa\rangle\, d\varkappa\, \langle p, q; \pm, \varkappa|\psi\rangle. \quad (5.14)$$

$|\psi_+(p, q)\rangle$ и $|\psi_-(p, q)\rangle$ можно интерпретировать, как проекции вектора состояния на подпространства состояний, дающих положительный и отрицательный вклад в квазивероятность в точке (p, q). Следует иметь в виду, что эти разложения различны при разных p, q. Из (5.11) следует, что $\langle\psi_+|\psi_-\rangle = 0$, а из и (5.13) и (5.14) — что

$$\hat{W}(p, q)\, |\psi_\pm\rangle = \pm(\pi\hbar)^{-1}\, |\psi_\pm\rangle. \quad (5.15)$$

Пользуясь разложением (5.14), формулой (5.15) и ортогональностью $\langle\psi_+|\psi_-\rangle = 0$, можно записать функцию Вигнера $W = \langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle$ в виде [32]:

$$W(p, q) = (\pi\hbar)^{-1}[\langle\psi_+|\psi_+\rangle - \langle\psi_-|\psi_-\rangle]. \quad (5.16)$$

Таким образом, $W(p, q)$ можно представить как разность двух неотрицательных величин и знак W будет зависеть от их соотношения.

Найдем величины $\langle\psi_\pm|\psi_\pm\rangle$. Если ввести обозначение

$$\psi(p, q; \pm, \varkappa) = \langle p, q; \pm, \varkappa|\psi\rangle,$$

то на основании (5.14) будем иметь

$$\langle\psi_\pm|\psi_\pm\rangle = \int_0^\infty |\psi(p, q; \pm, \varkappa)|^2\, d\varkappa, \quad (5.17)$$

а из (5.10а)

$$\psi(p, q; \pm; \varkappa) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-ipq'/\hbar]{}_{\sin}^{\cos}(\varkappa(q-q'))\, \psi(q')\, dq'. \quad (5.18)$$

Подставив (5.18) в (5.17) и выполнив интегрирование по $\varkappa$, легко получить формулы

$$\langle\psi_+(p, q)|\psi_+(p, q)\rangle = 2^{-1}[1 + \pi\hbar W(p, q)], \quad (5.19а)$$
$$\langle\psi_-(p, q)|\psi_-(p, q)\rangle = 2^{-1}[1 - \pi\hbar W(p, q)]. \quad (5.19б)$$

Поскольку $\langle\psi_\pm|\psi_\pm\rangle \geqslant 0$, из этих формул вытекает ограничение [32]

$$|W(p, q)| \leqslant (\pi\hbar)^{-1}. \quad (5.20)$$

Ограниченность $|W|$ можно интерпретировать как другое проявление соотношения неопределенностей, сказывающееся не на вторых моментах функции W, а на ее виде в целом. Из формул (5.19) следует, что так как

$W(p, q) \to 0$ при $|p| \to \infty$, $|q| \to \infty$, то при этом

$$\langle\psi_+ | \psi_+\rangle \approx \langle\psi_- | \psi_-\rangle \approx 2^{-1}.$$

Таким образом, даже если функция Вигнера положительна, вклад в нее от состояний с отрицательной вероятностью всегда отличен от нуля.

Легко выяснить, когда функция Вигнера принимает значения $\pm (\pi\hbar)^{-1}$. Для этого разложим волновую функцию на сумму четной и нечетной частей $\psi(q) = \psi_{\text{чет}}(q) + \psi_{\text{неч}}(q)$, $\psi_{\text{чет}}(-q) = \psi_{\text{чет}}(q)$, $\psi_{\text{неч}}(-q) = -\psi_{\text{неч}}(q)$. Тогда, используя (2.20), получим

$$\pi\hbar W(0, 0) = \int \psi^*(q)\, \psi(-q)\, dq = \int [|\psi_{\text{чет}}(q)|^2 - |\psi_{\text{неч}}(q)|^2]\, dq.$$

Складывая и вычитая с этим равенством нормировочный интеграл

$$1 = \int [|\psi_{\text{чет}}(q)|^2 + |\psi_{\text{неч}}(q)|^2]\, dq,$$

будем иметь

$$+\pi\hbar W(0, 0) = 2\int |\psi_{\text{чет}}|^2\, dq, \quad 1 - \pi\hbar W(0, 0) = 2\int |\psi_{\text{неч}}|^2\, dq. \tag{5.21}$$

Отсюда следует, что если $\psi_{\text{чет, неч}} = 0$, то $W(0, 0) = \mp (\pi\hbar)^{-1}$ и наоборот, из $W(0, 0) = \pm (\pi\hbar)^{-1}$ вытекает, что почти всюду $\psi_{\text{чет, неч}}(q) = 0$.

Покажем теперь, следуя работе [28], что *для того, чтобы функция Вигнера чистого состояния была неотрицательна, необходимо и достаточно, чтобы это состояние описывалось волновой функцией вида*

$$\psi_{a, b}(q) = \exp\left[-\frac{1}{2}(aq^2 + 2bq + c)\right], \quad \operatorname{Re} a > 0. \tag{5.22}$$

Доказательство достаточности этого условия тривиально: вычисляя по формуле (2.20) функцию $W_{a,b}(p, q)$, соответствующую состоянию $\psi_{a,b}(q)$, и обозначая $\operatorname{Re} a = a_1$, $\operatorname{Im} a = a_2$, $\operatorname{Re} b = b_1$, $\operatorname{Im} b = b_2$, легко находим, что $W_{a,b}(p, q)$ *является совместным гауссовским распределением координаты и импульса вида* (3.8) *с параметрами*

$$\begin{gathered} \bar{q} = -\frac{b_1}{a_1}, \quad \bar{p} = \frac{\hbar}{a_1}(a_2 b_1 - a_1 b_2), \\ \sigma_q^2 = (2a_1)^{-1}, \quad \sigma_p^2 = \frac{\hbar^2 (a_1^2 + a_2^2)}{2a_1}, \quad r = -a_2/\sqrt{a_1^2 + a_2^2}, \end{gathered} \tag{5.23}$$

которые, разумеется, удовлетворяют равенству (3.9). Полученная функция $W_{a,b} > 0$ при любых a, b, p, q.

Покажем теперь необходимость условия (5.22). Пусть функция $W(p, q)$, соответствующая некоторой нормированной волновой функции $\psi(q)$, удовлетворяет условию $W(p, q) \geqslant 0$. Наряду с этой функцией рассмотрим функцию Вигнера, соответствующую волновой функции вида (5.22), в которой $a_2 = 0$, а $b = z$ — произвольное комплексное число. Эта функция имеет вид (3.8) и всюду строго положительна. Рассмотрим теперь интеграл от произведения этих функций и воспользуемся формулой (3.19):

$$2\pi\hbar \int\int W(p, q)\, W_{a_1 z}(p, q)\, dp\, dq = |\langle\psi | \psi_{a_1 z}\rangle|^2. \tag{5.24}$$

Так как функция гауссовского вида $W_{a_1 z} > 0$ (строго положительна), а $W(p, q) \geqslant 0$, то при любых z подынтегральное выражение неотрицательно и всегда найдется такая (может быть, многосвязная) область, в которой оно строго положительно (так как W не может тождественно обращаться в нуль в силу условия нормировки). Поэтому интеграл в левой части (5.24) строго положителен и не обращается в нуль ни при каких значениях комплексной переменной z. Отсюда следует, что функция

$$F(z) = \exp\left(\frac{c}{2}\right) \langle\psi | \psi_{a_1 z}\rangle = \int \psi^*(q) \exp\left[-\frac{1}{2} a_1 q^2 - zq\right] dq. \tag{5.25}$$

является целой аналитической функцией комплексного переменного z, не имеющей нулей. Оценим $|F(z)|^2$, применяя неравенство Шварца:

$$|F(z)|^2 \leqslant \int |\psi(q)|^2\,dq \int \exp[-a_1 q^2 - (z+z^*)q]\,dq = \sqrt{\frac{\pi}{a_1}}\exp\left[\frac{(\mathrm{Re}\,z)^2}{a_1}\right].$$

Из этого неравенства следует, что порядок роста *) функции $F(z)$ не превышает 2. Таким образом, $F(z)$ является целой аналитической функцией, не имеющей нулей, с порядком роста не более 2. Тогда, согласно известной теореме Адамара (см., например, [35]), $F(z)$ имеет вид

$$F(z) = \exp(\alpha z^2 + \beta z + \gamma).$$

Подставляя это выражение в (5.25) и полагая $z = i\varkappa$, имеем

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\varkappa q)\,\psi^*(q)\exp(-a_1 q^2/2)\,dq = \exp(-\alpha\varkappa^2 + i\beta\gamma + \gamma).$$

Таким образом, преобразование Фурье заведомо интегрируемой функции $\psi^*(q)\exp(-a_1q^2/2)$ представляет собой функцию гауссовского вида. Отсюда следует, что и функция $\psi^*(q)\exp(-a_1q^2/2)$ является гауссовской, а следовательно, и сама функция $\psi(q)$ имеет вид (5.22).

Отметим, что при $a^* = a$ (т. е. $a_2 = 0$) волновая функция (5.22) описывает когерентное состояние $|z\rangle$, являющееся собственной функцией оператора уничтожения $\hat a = \hat q/2l + (il/\hbar)\hat p$, где $l = (2a_1)^{-1/2}$. В общем случае, когда $a_2 \neq 0$, состояние, описываемое волновой функцией (5.22), не является когерентным. Однако, как показано в работе [29], можно ввести операторы рождения и уничтожения,

$$\hat a = \frac{e^{-i\varphi}}{2l}\hat q + \frac{il}{\hbar\cos\varphi}\hat p, \quad \hat a^+ = \frac{e^{i\varphi}}{2l}\hat q - \frac{il}{\hbar\cos\varphi}\hat p, \quad |\varphi| < \frac{\pi}{2}, \tag{5.26}$$

удовлетворяющие обычному условию $[\hat a, \hat a^+] = \hat 1$, но такие, что собственные функции оператора $\hat a$ (названные авторами коррелированными когерентными состояниями)

$$\hat a\,|z, \varphi\rangle = z\,|z, \varphi\rangle \tag{5.27}$$

будут описываться волновой функцией общего вида (5.22) с $a_2 \neq 0$. Функция Вигнера, построенная при помощи коррелированных когерентных состояний, является гауссовской и имеет параметры

$$\sigma_q^2 = l^2/\cos^2\varphi, \quad \sigma_p^2 = \hbar^2/4l^2, \quad r = \sin\varphi,$$
$$\bar q = -\frac{2l}{\cos\varphi}\mathrm{Re}\,z, \quad \bar p = \frac{\hbar}{l}\mathrm{Im}(ze^{i\varphi}). \tag{5.28}$$

При этом координата и импульс оказываются коррелированными (с коэффициентом корреляции r), а в обобщенном соотношении неопределенностей (3.10) достигается равенство.

В общем случае, *если начальное состояние квантовой системы описывается функцией (5.22), так что* $W(p, q, t = 0) > 0$, *то с течением времени функция* $W(p, q, t)$ *не остается гауссовской, и, следовательно, обязательно начинает принимать отрицательные значения.* Исключением является случай, когда гамильтониан системы квадратичен. В этом случае свойство неотрицательности функции Вигнера сохраняется со временем [33].

Покажем теперь, что некоторым загрублением описания всегда можно добиться положительности квазивероятности. Для этого следует рассмотреть не плотность $W(p, q)$, а «вероятность» попадания фазовой точки

---

*) Порядком роста ρ функции $F(z)$ называется предел $\rho = \overline{\lim\limits_{|z|\to\infty}}[\ln\ln M(|z|)/\ln|z|]$, где $M(|z|) = \max\limits_{\varphi}|F(|z|e^{i\varphi})|$, $\varphi^* = \varphi$.

в конечную область $\Delta p \Delta q$ фазовой плоскости, т. е. рассмотреть величину

$$P_{\Delta p\Delta q}(p, q) = \iint\limits_{\Delta p \Delta q} W(p+p_1, q+q_1)\, dp_1\, dq_1, \tag{5.29а}$$

где интегрирование распространено на область $(p_1, q_1) \in \Delta p \Delta q$. Для упрощения рассмотрим вместо области $\Delta p \Delta q$ с резкой границей область с несколько «размазанной» границей, введя в рассмотрение величину

$$P_{\Delta p\Delta q}(p, q) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\!\!\int \exp\left(-\frac{p_1^2}{2\Delta_p^2} - \frac{q_1^2}{2\Delta_q^2}\right) W(p+p_1, q+q_1)\, dp_1\, dq_1. \tag{5.29б}$$

Эквивалентная площадь ячейки на фазовой плоскости равна

$$(\Delta p \Delta q)_э = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\!\!\int \exp\left(-\frac{p_1^2}{2\Delta_p^2} - \frac{q_1^2}{2\Delta_q^2}\right) dp_1\, dq_1 = 2\pi \Delta_p \Delta_q. \tag{5.30}$$

Следуя работе [36], подставим в (5.30) представление (2.20) функции Вигнера. Выполнив интегрирование по p_1, получим

$$P_{\Delta p\Delta q} = \frac{\Delta_p}{\sqrt{2\pi}\,\hbar} \iint dq'\, d\xi\, \psi^*\left(q+q'+\frac{\xi}{2}\right) \psi\left(q+q'-\frac{\xi}{2}\right) \times \\ \times \exp\left(-\frac{\Delta_p^2 \xi^2}{2\hbar^2} - \frac{q'^2}{2\Delta_q^2} + \frac{ip\xi}{\hbar}\right).$$

Если ввести здесь новые переменные интегрирования $q + q' \pm (\xi/2) = q_{1,2}$, то после простых преобразований получаем формулу

$$P_{\Delta p\Delta q} = \frac{\Delta_p}{\sqrt{2\pi}\,\hbar} \exp(-q^2/2\Delta_q^2) \iint f^*(q_1) f(q_2) \exp(\gamma q_1 q_2)\, dq_1\, dq_2,$$

где введены следующие обозначения:

$$\gamma = \frac{4\Delta_p^2\Delta_q^2 - \hbar^2}{4\hbar^2\Delta_q^2}, \quad f(q_2) = \psi(q_2) \exp\left(-\frac{4\Delta_p^2\Delta_q^2+\hbar^2}{8\hbar^2\Delta_q^2} q_2^2 + \frac{qq_2}{2\Delta_q^2} - \frac{ipq_2}{\hbar}\right).$$

Разложив $\exp(\gamma q_1 q_2)$ в ряд Тейлора, получаем

$$P_{\Delta p\Delta q} = \frac{\Delta_p}{\sqrt{2\pi}\,\hbar} \exp(-q^2/2\Delta_q^2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\gamma^n}{n!} |C_n|^2, \tag{5.31}$$

где введено обозначение

$$C_n = \int q_1^n f(q_1)\, dq_1.$$

Из формулы (5.31) видно, что при $\gamma \geqslant 0$ все члены ряда неотрицательны и, следовательно, $P_{\Delta p\Delta q} \geqslant 0$ при

$$\Delta_p \Delta_q \geqslant \frac{\hbar}{2}, \quad (\Delta p \Delta q)_э \geqslant \pi\hbar. \tag{5.32}$$

Наиболее простым является случай $\gamma = 0$, т. е. $\Delta_p\Delta_q = \hbar/2$. Тогда в (5.31) остается лишь член с $n = 0$, и мы получаем (обозначая $P_{\Delta p\Delta q}|_{\gamma=0} = P_0$)

$$P_0(p, q) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\,\Delta_q} \left| \int \psi(q_1) \exp\left[-\frac{ipq_1}{\hbar} - \frac{(q-q_1)^2}{4\Delta_q^2}\right] dq_1 \right|^2. \tag{5.33}$$

Тот же результат можно получить, исследуя спектр оператора

$$\hat{P}_{\Delta p\Delta q} = \int\limits_{\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{p_1^2}{2\Delta_p^2} - \frac{q_1^2}{2\Delta_q^2}\right] \hat{W}(p+p_1, q+q_1)\, dp_1\, dq_1, \tag{5.34}$$

т. е. рассматривая задачу на собственные значения

$$\hat{P}_{\Delta p\Delta q}(p, q)|p, q\rangle = \mathscr{P}|p, q\rangle. \tag{5.35}$$

Тогда, если искать собственные векторы в виде разложения по $|q'\rangle$, то уравнение для $\langle q' | p, q\rangle$ путем подстановки

$$\langle q' | p, q\rangle = \exp\left[\frac{i(q'-q)p}{\hbar} - \frac{\Delta p (q'-q)^2}{2\hbar\Delta_q}\right]\Phi(q'-q)$$

сводится к интегральному уравнению

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(q'')\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta p}{\hbar}+\frac{1}{2\Delta_q}\right)^2 (q''-\alpha q')^2\right] dq'' = Q\Phi(q'). \tag{5.36}$$

Здесь введены обозначения

$$\alpha = \frac{\Delta p\Delta_q - (\hbar/2)}{\Delta p\Delta_q + (\hbar/2)}, \qquad Q = \frac{\sqrt{2\pi}\,\hbar}{\Delta p}\mathscr{P}. \tag{5.37}$$

Используя известную формулу [37] для полиномов Эрмита

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\nu x)\exp[-(x-y)^2]\,dx = \sqrt{\pi}\,(1-\nu^2)^{n/2} H_n\left(\frac{\nu y}{\sqrt{1-\nu^2}}\right),$$

получаем решение уравнения (5.36) в виде

$$\Phi_n(q') = H_n\left(q'\sqrt{\Delta p/\hbar\Delta_q}\right), \quad Q_n = Q_0\alpha^n, \quad Q_0 = \frac{\sqrt{2\pi}\,\hbar\Delta_q}{\Delta p\Delta_q + (\hbar/2)},$$

$n = 0, 1, 2, \ldots$ Отсюда для собственных значений оператора $\hat{P}_{\Delta p\Delta q}$ получаем, используя (5.37):

$$\mathscr{P}_n = \mathscr{P}_0\alpha^n, \quad \mathscr{P}_0 = \frac{\Delta p\Delta_q}{\Delta p\Delta_q + (\hbar/2)}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.38}$$

При $\alpha \geqslant 0$ все собственные значения неотрицательны. Из (5.37) видим, что условие $\alpha \geqslant 0$ совпадает с (5.32). При $\alpha = 0$ в разложении оператора $\hat{P}_{\Delta p\Delta q}$ по своим собственным векторам остается единственное слагаемое с $n=0$ и это приводит к той же формуле (5.33), полученной иным способом.

В работе [16] рассматриваются сглаженные функции Вигнера и анализируются некоторые примеры, в том числе для атома водорода. В работе [38] приведен целый ряд весовых функций $G(p, q)$, для которых

$$\int\int G(p, q)\,W(p, q)\,dp\,dq \geqslant 0$$

(следует обратить внимание, что здесь не производится сдвиг аргументов p', q', т. е. положительность сглаженной функции устанавливается только для точки $p = 0$, $q = 0$).

Ограничение (5.20) на $|W(p, q)|$ после усреднения принимает следующий вид (используем (5.29б), (5.30) и (5.32)):

$$\begin{aligned} P_0(p, q) = |P_0(p, q)| &\leqslant \\ \leqslant \left|\int\int \exp[-(q_1^2/2\Delta_q^2) - (p_1^2/2\Delta_p^2)]\,W(p+p_1, q+q_1)\,dp_1\,dq_1\right| &\leqslant \\ \leqslant \int\int_{-\infty}^{\infty} \exp[-(q_1^2/2\Delta_q^2) - (p_1^2/2\Delta_p^2)]\,(\pi\hbar)^{-1}\,dp_1\,dq_1 &= 1, \end{aligned}$$

т. е.

$$0 \leqslant P_0(p, q) \leqslant 1. \tag{5.39}$$

Следовательно, допустимо, чтобы вся «вероятность» была сосредоточена в одной ячейке фазового пространства. Заметим, что нормированную величину $P_0(p, q)/\pi\hbar$ можно трактовать как сглаженную плотность квазивероятностей:

$$\overline{W}(p, q) = [(2\pi)^{3/2}\hbar\Delta_q]^{-1}\left|\int \psi(q')\exp\left[-\frac{ipq'}{\hbar} - \frac{(q-q')^2}{4\Delta_q^2}\right]dq'\right|^2. \tag{5.40}$$

Как следует из (5.39), сглаженная плотность $\overline{W}$ ограничена условием $\overline{W} \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$. Кроме того, так как $\overline{W} \geqslant 0$, то

$$0 \leqslant \overline{W}(p, q) \leqslant (\pi\hbar)^{-1}. \tag{5.41}$$

Следует отметить, что, несмотря на то, что усредненная квазиплотность $\overline{W}$ уже не может принимать отрицательные значения, ее все же нельзя считать обычной плотностью вероятностей, усреднение по которой приводит к истинным квантовым средним. Это связано, во-первых, с тем, что точные квантовые средние можно получить лишь с использованием квазиплотности W, которая может принимать и отрицательные значения. Вычисления же со сглаженной плотностью $\overline{W}$ приводят, вообще говоря, к ошибкам. Во-вторых, остаются в силе те правила соответствия между операторами и представляющими их в фазовом пространстве функциями, которые приводят к соотношениям, противоречащим обычным правилам теории вероятностей при вычислении высших моментов (см. стр. 598). Поэтому даже после усреднения положительная вигнеровская квазиплотность продолжает существенно отличаться по своим свойствам от обычной вероятности.

Рассмотрим в качестве примера вигнеровские функции для осциллятора. Волновая функция n-го стационарного состояния равна

$$\psi_n(q) = (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}\right) H_n\left(q\sqrt{m\omega/\hbar}\right). \tag{5.42}$$

Соответствующая плотность квазивероятности вычисляется точно и имеет вид

$$W_n(p, q) = \frac{(-1)^n}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right)\right] L_n\left(\frac{4}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right)\right); \tag{5.43}$$

здесь $L_n(x)$ — полиномы Лагерра ($L_0 = 1$, $L_1 = 1 - x$, $L_2 = 1 - 2x + (x^2/2), \ldots$). При $n = 0$ имеем совместное гауссовское распределение, в котором координата и импульс статистически независимы. Оно совпадает с распределением (4.19), которое было получено выше из других соображений. При $n = 1$ имеем

$$W_1(p, q) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{2}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right)\right] \cdot \left[\frac{4}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right) - 1\right].$$

Здесь мы сталкиваемся со случаем отрицательных плотностей квазивероятности, так как $W_1(p, q) < 0$ при

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} < \frac{\hbar\omega}{4}.$$

С ростом номера уровня n первые нули полинома Лагерра уменьшаются по абсолютной величине, в связи с чем области, где $W_n(p, q) < 0$, принимают на плоскости (p, q) вид все более и более узких эллиптических полос.

Рассмотрим теперь сглаженную квазивероятность (5.40). Вычисление по этой формуле приводит к выражению

$$\overline{W}_n(p, q) = (2\pi\hbar n!)^{-1} \left[\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right)\right]^n \exp\left[-\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}\right)\right] \tag{5.44}$$

(такое сравнительно простое выражение для $\overline{W}_n$ получается лишь в том случае, когда параметр усреднения Δ_q^2 в (5.40) выбран равным $\hbar/2m\omega$; во всех других случаях усредненная квазиплотность не является функцией только от энергии осциллятора). Максимум функции $\overline{W}_n$ располагается при $(p^2/2m)+(m\omega^2q^2/2)=n\hbar\omega$. Для больших n это значение аргумента приходится на ту область, где неусредненная вигнеровская функция изменяется наиболее плавно.

Если рассчитать средние значения различных степеней энергии в n-м состоянии, пользуясь неусредненной функцией Вигнера и приводя различные степени оператора энергии к вейлевской упорядоченной форме, то мы, естественно, получим точные значения $\langle (E_n)^m \rangle = [(n+{}^1/_2)\hbar\omega]^m$.

Если же использовать для расчета сглаженную квазиплотность, то легко найти, что вычисленные с ее помощью средние значения энергии равны $\overline{E}_n = (n+1)\hbar\omega$, т. е. отличаются от истинных средних на $\hbar\omega/2$. При этом расстояния между уровнями энергии оказываются правильными. Найдем также величину $\overline{E_n^2}$. Если воспользоваться формулой

$$\overline{E_n^2}=\int\int \overline{W}_n(p,q)\left[\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{m\omega^2q^2}{2}\right)^2-\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2\right]dp\,dq,$$

то получим $\overline{E_n^2} = \left(\hbar\omega\right)^2\left(n^2+3n+\frac{7}{4}\right)$. Для среднего квадрата «флуктуаций» энергии тогда найдем

$$\overline{E_n^2}-(\overline{E}_n)^2=(\hbar\omega)^2\left(n+\frac{3}{4}\right),$$

а для относительных «флуктуаций»

$$[\overline{E_n^2}-(\overline{E}_n)^2]/(\overline{E}_n)^2=\frac{n+\frac{3}{4}}{(n+1)^2}.$$

При $n\to\infty$ относительные «флуктуации» стремятся к нулю, так что сглаженное распределение вероятностей для величины (E/n) в n-м стационарном состоянии при $n\to\infty$ стремится к δ-функции.

Разумеется, истинные значения $\langle E_n^2\rangle - \langle E_n\rangle^2 \equiv 0$, так что отличие этой величины от нуля характеризует лишь ту ошибку, которая допускается при замене W_n на $\overline{W}_n$.

На рассмотренном примере видно, как происходит в вигнеровском представлении переход к классическому пределу. Сама квазиплотность $W_n(p,q)$ при $n\to\infty$ не стремится к пределу $\delta\left(H(p,q)-\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right)$, а становится все более часто осциллирующей функцией. В то же время сглаженная квазивероятность $\overline{W}_n$ сильно искажает результаты расчетов для небольших n, но становится асимптотически точной (если пренебречь сдвигом всех уровней на $\hbar\omega/2$) при $n\to\infty$.

6. ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Вигнеровское представление квантовой механики эквивалентно традиционному, но для правильного использования требует соблюдения некоторых специфических правил и учета ряда свойств, отличающих вигнеровскую квазиплотность от истинной плотности вероятностей.

Вместо уравнения Шредингера в вигнеровском представлении выступает квантовое уравнение Лиувилля для вигнеровской совместной плотности квазивероятности координаты и импульса. Решения этого уравнения могут и не соответствовать квантовомеханическим задачам, если на начальные условия к нему не наложено дополнительное ограничение, выделяющее допустимый класс квантовых распределений, описывающих чистые состояния. При выполнении этого условия возможно восстановить волновую функцию по функции Вигнера. Это дополнительное условие содержит постоянную Планка и, помимо соотношения неопределенностей, влечет за собой весьма жесткие ограничения на возможный вид вигнеровской квазиплотности: далеко не всякое распределение, согласующееся с соотношением неопределенностей, может соответствовать какой-либо квантовой задаче. Если вигнеровская квазиплотность не зависит от времени и удовлетворяет указанному ограничению, то это приводит к обычному стационарному состоянию квантовой механики. Для квантового осциллятора квантовое уравнение Лиувилля совпадает с классическим и условия квантования энергии стационарных состояний возникают именно из ограничения на допустимый вид чистых квантовых распределений.

Сама вигнеровская квазиплотность $W(p, q)$ в совокупности с правилами, по которым производится вычисление средних значений, обладает рядом специфических свойств, отличающих ее от истинной плотности вероятностей. Прежде всего, она может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Ее модуль ограничен условием $|W(p, q)| \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$. Второе существенное отличие квазивероятности от обычной вероятности связано с тем, что интегралы от различных степеней функции $A(p, q)$, умноженных на $W(p, q)$, не представляют собой квантовых средних от соответствующих степеней оператора $\hat{A}$; последние должны вычисляться по более сложным формулам. Отсюда вытекает, например, такая особенность квазиплотности, что для стационарных состояний с фиксированной энергией она не сосредоточена на линиях равной энергии в плоскости (p, q). Таким образом, «размазанность» квазиплотности еще не свидетельствует о соответствующем разбросе описываемых этой плотностью «случайных величин», так как правила вычисления средних значений по W не совпадают с правилами теории вероятностей, если речь идет о статистических моментах высших порядков.

Сглаженная с гауссовским весом квазиплотность $\overline{W}$ становится неотрицательной, если эквивалентная площадь осреднения $(\Delta p\, \Delta q)_э \geqslant \pi\hbar$. При этом для нее выполняется условие $0 \leqslant \overline{W} \leqslant (\pi\hbar)^{-1}$. Однако сглаженная плотность приводит к ошибкам при вычислении средних значений по сравнению с точными квантовомеханическими средними.

Сглаженная плотность $\overline{W}$ приобретает более важную роль при переходе к классическому пределу. Как видно на примере квантового осциллятора, для высоких возбужденных состояний вигнеровская квазиплотность W_n становится чрезвычайно изрезанной функцией, принимающей в близких точках плоскости (p, q) положительные и отрицательные значения. В то же время неотрицательная сглаженная квазиплотность $\overline{W}_n$ с ростом n сосредоточивается вокруг линии $H(p, q) = E_n$ и приобретает δ-образный вид. так что при вычислении средних значений с ее помощью относительные ошибки стремятся к нулю. Таким образом, при переходе к классическому пределу именно $\overline{W}$, а не W начинает играть основную роль.

Подводя окончательный итог, можно сказать, что при корректном использовании вигнеровское представление может служить в целом ряде квантовомеханических задач удобным инструментом. С помощью функции Вигнера можно вычислять средние значения любых интересующих нас физических величин. Однако сама по себе функция Вигнера лишена физического смысла, и наглядность вигнеровского представления в значительной степени является кажущейся. Во всяком случае, излишне буквальная трактовка квазивероятности как истинной вероятности может привести к неверным заключениям даже в том случае, когда квазивероятность неотрицательна.

Автор выражает свою искреннюю признательность В. В. Додонову, Д. А. Киржницу и В. И. Манько, обсуждение с которыми оказалось весьма полезным для него при написании окончательного варианта статьи.

Институт физики атмосферы АН СССР

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Wigner E.— Phys. Rev., **1932**, v. 40, p. 749.
2. Климонтович Ю. Л., Силин В. П.— УФН, **1962**, т. 70, с. 749.
3. Гуров К. П. Основания кинетической теории.— М.: Наука, 1966.
4. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов.— М.: Наука, 1971.
5. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы.— М.: Наука, 1975.
6. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов.— М.: Наука, 1980.
7. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1.— М.: Мир, 1978.
8. Sasonov V. N.. Stuchebrukhov A. A.— Chem. Phys., **1981**, v. 56, p. 391.
9. Коробкин В. В., Сазонов В. Н.,— ЖЭТФ, **1981**, т. 81, с. 1195.
10. Додонов В. В., Манько В. И., Руденко В. Н.— Квант. электрон., **1980**, т. 7, с. 2124.
11. Achundova E. A., Dodonov V. V., Man'ko V. I. Wigner Functions of Quadratic Systems.— P. N. Lebedev Physical Institute, Preprint № 119.— Moscow, 1981.
12. Korsch H. J., Berry M. V.— Physica, Ser. D, **1981**, v. 3, p. 627.
13. Широков Ю. М.— ТМФ, **1979**, т. 38, с. 313.
14. Широков Ю. М.— ТМФ, **1977**, т. 31, с. 327.
15. Климонтович Ю. Л.— ДАН СССР, **1956**, т. 108, с. 1033.
16. Soto F., Claverie P.— Physica, Ser. A, **1981**, v. 109, p. 193.
17. Широков Ю. М.— Пробл. физ. ЭЧАЯ, **1979**, т. 10, вып. 1, с. 5.
18. Moyal J. E.— Proc. Cambr. Phil. Soc., **1949**, v. 45, p. 99.
19. Стратонович Р. Л.— ЖЭТФ, **1956**, т. 31, с. 1012.
20. Стратонович Р. Л.— ДАН СССР, **1956**. т. 109, с. 72.
21. Dodonov V. V., Man'ko V. I.— Physica, Ser. A, **1978**, v. 94, p. 403.
22. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей.— М.: Гостехиздат, 1954,— Гл. 7.
23. Киржниц Д. А. Полевые методы теории многих частиц.— М.: Госатомиздат, 1963, Приложение Б.
24. Krüger J. G., Poffyn A.— Physica. Ser. A, **1976**, v. 85, p. 84.
25. Березин Ф. А.— УФН, **1980**, т. 132, с. 497.
26. Терлецкий Я. П.— ЖЭТФ, **1937**, т. 7, с. 1290.
27. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика.— М.: Наука, 1976,— Ч. 1, § 5.
28. Hudson R. L.— Rept. Math. Phys., **1974**, v. 6, p. 249.
29. Dodonov V. V., Kurmyshev E. V., Man'ko V. I.— Phys. Lett., Ser. A, **1980**, v. 79, p. 150.
30. Schrödinger E.— Sitzungsber. Preuss. Acad. Wiss., **1930**, S. 296.
31. Robertson H. P.— Phys. Rev., **1930**, v. 35, p. 667; **1934**, v. 46, p. 794.
32. Royer A.— Ibid. Ser. A, **1977**, v. 15, p. 449.
33. Canivell V., Seglar P.— Physica, Ser. A, **1978**, v. 94, p. 254.
34. Krüger J. G., Poffyn A.— Ibid., **1977**, v. 87, p. 132.
35. Маркушевич А. И. Теория аналитических функций.— М.: Физматгиз, 1968. т. 2, гл. 7, с. 282.
36. Cartwright N. D.— Physica. Ser. A, **1976**, v. 83, № 1, p. 210.
37. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений.— М.: Физматгиз, 1962.—7.374.8.
38. Janssen A. J. E. M.— SIAM J. Math. Anal., **1981**. v. 12, p. 752.