אינטראקציה של פוטונים ואטומים

מרצה: אריק אקרמן

23 במרץ 2010

מחברת זו נכתבה משמיעה בהרצאות של פרופ' אריק אקרמן. המחברת עלולה להכיל חוסרים וטעויות. **אין הטכניון או מי מטעמו ־ ובפרט, הפקולטה לפיזיקה, על מרצה ומתרגליה, אחראים לתוכנו של מסמך זה.**

הערות והארות, אתם מוזמנים לשלוח ל־ronen@tx.tehcnion.ac.il.

תוכן עניינים

1 תיאור קלאסי: אינטראקציה בין אור וחומר[1]

1.1 מודל של לורנץ

רקע היסטורי המקור של ההסתכלות הזו הוא קדום למדי: מחקר של תכונות "אופטיות" בסיסיות של חומרים – צבע, שקיפות, בליעה ופיזור של חומרים, באמצעות גדלים פיזיקאלים כגון אינדקס אופטי $n(\omega)$, מקדים הבליעה, $\alpha(\omega)$ או חתך הפעולה $\sigma(\omega)$. בספקטרוסקופיה, ניתן לראות שתגובה של חומר לקרינה חיצונית היא רזוננטית למערכת נתונה של תדירויות. כמו במכניקה, יש התנהגות רזוננטית של האור – לכל חומר בתדירויות שונות.

1.1.1 מודל לורנץ

המודל של לורנץ מבוסס על העובדה האחרונה: שיש תהודה של החומר בכמה תדירויות שונות. המודל נכתב ב־189*. אז היה ידוע שהשדה האלקטרומגנטי נתון על ידי משוואות מקסוול, והמטען האלמנטרי אינו "נוזל", כי אם ממוקם בחלקיקים בעלי מטען אלמנטרי (לפי ניסויי Thomson ו־Millikan).

[1] 02/03/2010

לפי לורנץ, אלקטרון הוא אוסצילטור הרמוני. השדה החשמלי נתון על ידי (במימד אחד),

$$\mathbf{E} = \hat{\varepsilon} E \cos(\omega t - \varphi)$$

כאשר $\hat{\varepsilon}$ הוא וקטור הקיטוב, ואלקטרון בעל מסה m ומטען q, מקיים את המשוואה (של מתנד הרמוני),

$$m\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = -m\omega_0^2 \mathbf{r} + qE\hat{\varepsilon}\cos(\omega t - \varphi)$$

בעיני לורנץ, לא היה הבדל בין "אטום" ו"אלקרון", אלא פשוט חלקיק נושא־מטען שהיה אחראי על האינטראקציה החשמלית, ו־ω_0 תדירות המתנד הנתונה (תלויה בחומר). המודל, כפי שידוע היום, אינו נכון פיזיקאלית, אבל הוא מספק תוצאות מדויקות למדי.

האטום (אלקטרון) של לורנץ הוא למעשה דיפול המוגד על ידי כיוון: $\mathbf{D} \equiv q\mathbf{r}$. אם נרשום את המשוואה עבור האטום באמצעות מומנט הדיפול,

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\mathbf{D} = -\omega_0^2\mathbf{D} + \frac{q^2 E}{m}\hat{\varepsilon}\cos(\omega t - \varphi)}$$

נחפש פתרונות מהצורה: $\mathbf{D}(t) = \Re\left[\tilde{D}(t)\,\varepsilon e^{-i\omega t}\right]$, כאשר $\tilde{D}(t)$ היא התגובה בזמן קצר, ובזמן ארוך התנודות נתונות על ידי האקספוננטי. אם נגדיר $\tilde{E} \equiv Ee^{i\varphi}$, נוכל לרשום משוואות עבור $\tilde{D}(t)$:

$$-\omega^2\tilde{D} - 2i\omega\frac{\mathrm{d}\tilde{D}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}^2\tilde{D}}{\mathrm{d}t^2} = -\omega_0^2\tilde{D} + \frac{q^2}{m}\tilde{E}$$

בבעיה שלנו יש סקאלת זמן: סקאלת הזמן של השדה החיצוני, $e^{-i\omega t}$, וסקאלת הזמן הדרושה להגעה למצב סטציונארי, שמבוטאת ב־$\tilde{D}(t)$. נניח שסאלת הזמן של $\tilde{D}(t)$ ארוכה בהרבה מסקאלת הזמן של השדה החיצוני, ולכן, האיבר $\frac{\mathrm{d}^2\tilde{D}}{\mathrm{d}t^2}$ הוא זניח יחסית לאיבר $\omega\frac{\mathrm{d}\tilde{D}}{\mathrm{d}t}$. (במצב "רצוי", לאחר זמן מעבר, $\tilde{D}(t)$ הוא קבוע, והתנועה של האטום תהיה תלויה רק ב־$e^{-i\omega t}$). לכן, נקבל

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{D}}{\mathrm{d}t} = i\left(\frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega}\right)\tilde{D} + i\frac{q^2\tilde{E}}{2m\omega}$$

עבור $\omega \simeq \omega_0$, כלומר, קרוב לתדירות התהודה,

$$\frac{\omega^2 - \omega_0^2}{2\omega} = (\omega - \omega_0)\frac{\omega + \omega_0}{2\omega} \simeq \omega - \omega_0$$
$$\implies \frac{\mathrm{d}\tilde{D}}{\mathrm{d}t} = i(\omega - \omega_0)\tilde{D} + i\frac{q}{2m\omega}\tilde{E}$$

ולכן, במצב הסטציונארי,

$$\boxed{\tilde{D} = \frac{q^2\tilde{E}}{2m\omega(\omega_0 - \omega)}} \tag{1}$$

פן אנרגתי: ההספק נתון על ידי $P \equiv -\overline{\mathbf{E}\cdot\frac{\mathrm{d}\mathbf{D}}{\mathrm{d}t}}$ כאשר ה־$\bar{\cdot}$ מזמן ממוצע בזמן. לכן, הספק החלפת האנרגיה בין השדה החיצוני לאוסצילטור יחיד, הוא,

$$P = -\overline{\left[\Re\left(\tilde{E}\cos\omega t\right) + \Im\left(\tilde{E}\sin\omega t\right)\right]\left[-\omega\Re\left(\tilde{D}\sin\omega t\right) + \omega\Im\left(\tilde{D}\cos\omega t\right)\right]}$$
$$= \ldots = \boxed{-\frac{\omega}{2}\Im\left(\tilde{D}\tilde{E}^{\star}\right)}$$

נגדיר את $\tilde{\alpha}$ על ידי

$$\tilde{D} \equiv \varepsilon_0\tilde{\alpha}\tilde{E}$$

כאשר $\tilde{\alpha}(\omega)$ הוא מספר מרוכב, $\tilde{\alpha}(\omega)=\alpha+i\alpha'$. תוך שימוש בהגרה זו, נקבל,

$$\boxed{P=-\frac{\omega}{2}\varepsilon_0\alpha'\left|\tilde{E}\right|^2} \tag{2}$$

ו־$\tilde{\alpha}(\omega)$ הוא ה**פולריזביליות הדינמאית**. מההגדרות הללו, $P\propto\alpha'$, כלומר, ההספק תלוי בחלק המדומה של α. אם נסתכל על α במקרה שלנו, אז α הוא ממשי. לכן, החלק המדומה של α הוא 0, ולכן, $P=0$. כלומר, במודל לורנץ הראשון, אין החלפת אנרגיה בין המתנד לשדה האלקטרומגנטי. זהו מודל לא ריאליסטי – מחד, אין העברת אנרגיה, ומאידך, האמפליטודה מתבדרת בתהודה.

1.1.2 מודל לורנץ עם רלקסציה

ניתן להסיבר רלקסציה על ידי:

- פיזור בין אטומים.
- פיזור עם הפונונים[2].
- פיזור על ידי קרינה.

באופן פנומנולוגי, מוסיפים רלקסציה בתור פרמטר ,ומקבלים את המשוואה:

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}\tilde{D}}{\mathrm{d}t}=i\left(\omega-\omega_0\right)\tilde{D}-\gamma_d\tilde{D}+i\frac{q^2\tilde{E}}{2m\omega}}$$

כאשר γ_d הוא פרמטר פנומנולוגי, $\gamma_d=\gamma_{collisions}+\gamma_{radiations}+\ldots$. עבור תנועה הרמונית של מטען שגורם לקרינה אלקטרומגנטית, ניתן לחשב את $\gamma_{rad}=\frac{q^2}{12\varepsilon_0 mc^3}\omega_0^3$, וניתן להגיע לביטוי הזה על ידי חישוב אלקטרומגנטי קלאסי. במקרה זה, המצב הסטצינארי נתון על ידי:

$$\tilde{D}=\frac{q^2}{2m\omega}\cdot\frac{\tilde{E}}{\omega_0-\omega-i\gamma_d}$$

מהביטוי הזה,

$$\tilde{\alpha}=\frac{q^2}{2m\varepsilon_0\omega}\frac{\omega_0-\omega+i\gamma_d}{\left(\omega_0-\omega\right)^2+\gamma_d^2}$$

כאן, ל־α יש חלק מדומה, חיובי, $\alpha'>0$, ולכן, לפי (2) $P<0$. כלומר, יש בליעה של של אנרגיה מהשדה על ידי האטום, אבל בשום מקרה, אין "החזרה" ,של אנרגיה מהאטום לשדה (שולל, למשל, תופעות כמו לייזר).

1.2 קשר עם חומר דיאלקטרי

בהנתן צפיפות "אטומית" N, נגדיר וקטור פולריזציה

$$\mathbf{P}=N\mathbf{D}=N\varepsilon_0\tilde{\alpha}\left(\omega\right)\mathbf{E}\equiv\chi\left(\omega\right)\varepsilon_0\mathbf{E}$$

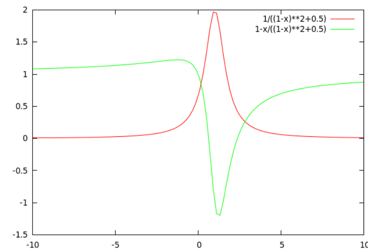
לכן, במודל זה,

$$\boxed{\chi\left(\omega\right)=N\tilde{\alpha}\left(\omega\right)=\frac{Nq^2}{2m\varepsilon_0\omega}\frac{\omega_0-\omega+i\gamma_d}{\left(\omega_0-\omega\right)^2+\gamma_d^2}}$$

נראה איך השדה החשמלי מתנהג מעבר מריק לתוך חומר (המעבר מתבצע ב־$z=0$)

$$\begin{aligned}E\left(z\right)&=E_0e^{ikz}=E_0e^{i\tilde{n}k_0z}\\&=E_0e^{i\Re[\tilde{n}]k_0z}e^{-\Im[\tilde{n}]k_0z}\end{aligned}$$

[2] לורנץ לא ממש ידע מה זה פונונים, הכוונה כאן היא לכל דרגות החופש של החומר שאינם דרגות חופש של מטען.



איור 1: התלות של החלק הממשי (בירוק) והמדומה (באדום) של $\tilde{n}(\omega)$. קשר זה נתון על ידי Kramers-Kronig

זהו תיאור פנומנולוגי של שדה חשמלי שמתקדם בתוך החומר. מכאן, אנחנו מקבלים שיש גל מישורי עם דעיכה אקספוננציאלית. הדעיכה קשורה לבליעה (במידה והיא קיימת) והשינוי במהירות ההתקדמות בתווך קשור בשינוי ב־$n(\omega)=\Re(\tilde{n})$, **האינדקס האופטי**, ו־ $a(\omega)=2k_0\Im[\tilde{n}(\omega)]$, היא **הבליעה**. לבליעה הכנסנו גם את k_0, משום שהבליעה תלויה בעוצמה, $I=|E|^2$, ו־ $\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}z}=-aI$, מגדיר את קבוע הבליעה. עבור $I(z)=I_0e^{-az}$, לכן, המקדם 2 מגיע מריבוע השדה ו־k_0 נכנס לביטוי כדי להתאים להגדרה.

מאחר ו־ $k=\tilde{n}k_0$, כאשר k מספר הגל בתוך התווך, נקבל

$$\boxed{\tilde{n}(\omega)=\sqrt{1+\chi(\omega)}}$$

ועבור צפיפות N קטנה, נוכל לפתח לטור ולקבל

$$\tilde{n}(\omega)\simeq 1+\frac{1}{2}\chi(\omega)$$

ועבור המודל בו אנו דנים, נקבל,

$$n(\omega)=1+\frac{Nq^2}{2m\varepsilon_0\omega}\frac{\omega_0-\omega}{(\omega_0-\omega)^2+\gamma_d^2}$$
$$a(\omega)=\frac{Nq^2}{m\varepsilon_0 c}\frac{\gamma_d}{(\omega_0-\omega)^2+\gamma_d^2}$$

כדי להפוך את המודל לריאליסטי יותר, לורנץ טען שלחומר אין תדירות אופיינית יחידה, כי אם אוסף של תדירויות כאלו, ולכן צריך לסכום על תדירויות שונות המאפיינות את החומר, ω_j, וכל תדירות מקבלת משקל שונה, f_{0j}, לכן,

$$\tilde{\alpha}(\omega)=\sum_j\frac{q^2}{2m\varepsilon_0\omega_j}f_{0j}\frac{\omega_j-\omega}{(\omega_j-\omega)^2+\gamma_{dj}^2}$$
$$\chi(\omega)=\sum_j\frac{Nq^2}{2m\varepsilon_0\omega_j}f_{0j}\frac{\omega_j-\omega+i\gamma_{dj}}{(\omega_j-\omega)^2+\gamma_{dj}^2}$$

ביטויים אלו של לורנץ מסבירים היטב את התוצאות הניסיוניות. למעשה, ביטויים אלו הם נכונים (כביטוי מתמטי), גם עבור מכניקה קוונטית, אך האינטואיציה שבאמצעותה הגענו אליה היא שגויה. הפרמטרים [3] f_{0j} מכונים כח האוסצילטור והם פנמנולוגים לחלוטין.

1.2.1 כח של אוסצילטור וחתך פעולה

חתך הפעולה לבעיה $\sigma(\omega)$ מוגדר על ידי:

$$\sigma(\omega)=\frac{a(\omega)}{N}$$

[3] 07/03/2010

כאשר N צפיפות האטומים, ו־ $a(\omega)$ הוא מקדם הבליעה (שקודם סומן ב־α?). לכן, עבור אטום אחד, עבור תדירות השדה החיצוני בתהודה, ω, נקבל ,

$$\sigma_0 \equiv \sigma(\omega) = \frac{q^2}{m\varepsilon_0 c\gamma_d} \tag{3}$$

הבעיה עם הביטוי הזה עבור חתך פעולה לבליעה, היא שהביטוי הזה שגוי כמותית. במכניקה קוונטית, נחשב בהמשך את הביטוי הנכון, $\sigma_j = \sigma_j(\omega) = \frac{2\pi c^2}{\omega_j^2}$, כאשר $\omega_j \equiv \omega_j - \omega$ [4]. נשתמש בתוצאה ממכניקה קוונטית כדי לדון בכח האוסצילטור, f_{0j}: את הכח הנ"ל, ניתן לכתוב כ־

$$f_{0j} = \frac{\sigma_j}{\sigma_0} = \frac{2\pi\varepsilon_0 mc^3\gamma_{dj}}{e^2\omega_j^2}$$

כאשר σ_{0j} הוא חתך הפעולה הקונטי, המדויק, ואילו σ_0 הוא חתך הפעולה על פי מודל לורנץ.

בגבול $\omega \to \infty$, של השדה החיצוני (בתהודה),

$$\chi(\omega) \to -\frac{Nq^2}{2m\omega^2\varepsilon_0}\sum_j f_{0j}$$

יש לנו אוסף של אלקטרונים, כל אחד מהם במטען q, ובמודל לורנץ, המטענים הללו בתוך בור־פוטנציאל הרמוני, עם רלקסציה. בתדירויות מאוד גבוהות, התנועה של כל מטען היא תנועה מאוד מקומית, כלומר, בתדירויות מאוד גבוהות, האלקטרון לא "רואה" את בור הפוטנציאל ההרמוני, ולא "מרגיש" את הרלקסציה. לכן, בתדירויות מאוד גבוהות, נצפה לתנועה של מטענים "חופשיים" בתוך שדה חשמלי, בתדירות מאוד גבוהה – בלי להתיחס לפוטנציאל ההרמוני ולרלקסציה. במכניקה קלאסית, נצפה שהסוספטביליות של אלקטרונים חופשיים תתנהג כמו "פלספה של אלקטרונים חופשיים", לכן, נצפה ש־ $\chi(\omega) = -\frac{Nq^2}{2m\varepsilon_0\omega^2}$. לכן, מתקיים ש־

$$\boxed{\sum_j f_{0j} = 1}$$

הפרמטרים הללו לא תלויים בתדירות, לכן התוצאה שקיבלנו בגבול ש־$\omega \to \infty$, תקפה לכל תדירות. זהו החוק של Thomas-Raiche-Kuhn. בהמשך, נוכיח את החוק הזה במסגרת של מכניקה קוונטית, אבל כאן אפשר לראות שהחוק הזה הוא הרבה יותר כללי מהמסגרת של מכניקה קוונטית.

הערה 1.1 רימינו קצת, כי כשבנינו את הביטוי ל־$\chi(\omega)$, הנחנו ש־ω קרוב לתהודה, ואנחנו לא בהכרח יכולים להניח את זה כאשר $\omega \to \infty$. בעצם, היינו צריכים לכתוב את הביטוי המלא ל־$\chi(\omega)$, ואז להשאיף ל־∞ , ועדין היינו מקבלים שהסוספטביליות לא תלויה בתדירות. באופן כללי, מניחים ש־ω מספיק גדול כך שהוא יתנהג כמטען חופשי.

במודל לורנץ, להבדיל מבמודל הקוונטי, לחומר יש קבוצה סופית של תדירויות עצמיות, להבדיל מהסידרה האינסופית של תדירויות (מצבים עצמיים) קוונטיות. לכן, השוואה בין המודלים היא לא ממש מדויקת.

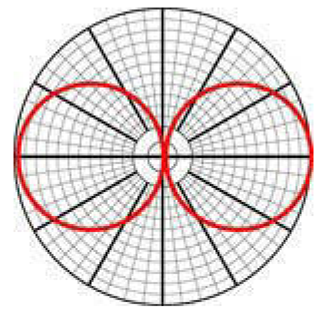
הפרמטרים $f_{0j} > 0$, לכל j. אם סכום הפרמטרים הללו הוא 1, אז $f_{0j} \le 1$, לכל j. כלומר, מהביטוי $f_{0j} = \frac{\sigma_j}{\sigma_0}$, ניתן לראות שחתך הפעולה הקלאסי נותן חסם עליון על חתך הפעולה הקוונטי.

1.3 קרינת דיפול

המטענים שלנו הם דיפולים קלאסיים, שלכל אחד מהם וקטור דיפול $\mathbf{D}$, שתלוי בשדה החיצוני $\mathbf{E}$. השדות החשמליים והמגנטים שדיפול כזה מקרין, רחוק מספיק מהדיפול, נתונים על ידי,

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \simeq \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 c^2}\left[(\hat{\varepsilon}\cdot\hat{r})\hat{r} - \hat{\varepsilon}\right]\frac{D(t_r)}{r}$$
$$\mathbf{B}(\mathbf{r},t) \simeq \frac{1}{4\pi c}(\hat{\varepsilon}\times\hat{r})\frac{D(t_r)}{r}$$

[4] יש כאן הרבה בלאגן לגבי איזה ω צריך להיות ω_0 ואיזה לא.



איור 2: Doughnut Shaped Radiation

כאשר $\hat{\varepsilon}$ הוא וקטור הקיטוב, r המרחק בין הדיפול לנקודת המדידה, בכיוון $\hat{r}'$, D עוצמת הדיפול ו־$t_r = t - \frac{r}{c}$, הזמן המאוחר[5]. כדי לחשב את ההספק, נדרש ל**וקטור Poynting**,

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{S} \rangle &= \mathbf{E} \times \mathbf{H} + \text{C.C.} \\ &= \frac{1}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \frac{|D|^2}{r^2} \left[\left(\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r} \right) \hat{r} - \hat{\varepsilon} \right] \times \left(\hat{\varepsilon} \times \hat{r} \right) + \text{C.C.}\end{aligned}$$

נשתמש וזהות, $\left[\left(\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r} \right) \hat{r} - \hat{\varepsilon} \right] \times \left(\hat{\varepsilon} \times \hat{r} \right) = \left(1 - |\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r}|^2 \right) \hat{r}$, ונקבל

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\hat{r}}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \frac{|D|^2}{r^2} \left(1 - |\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r}|^2 \right)$$

זה נותן לנו שתי אפשרויות עבור הקיטוב של השדה שהדיפול מקרין:

1. קיטוב לינארי – (של השדה החיצוני, $\hat{\varepsilon} = \hat{j}$, עבור ציר כלשהו $\hat{j}$), נקבל

$$1 - |\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r}|^2 = \sin^2 \theta$$

זוהי קרינה מסוג Doughnut shaped.

2. קיטוב סיבובי – ($\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}_\pm = \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}}$), במקרה זה,

$$1 - |\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \cos^2 \theta \right)$$

ונקבל צורת בוטן.

נגדיר את הגודל f_ε:

$$f_\varepsilon \left(\theta, \varphi \right) \equiv \frac{3}{8\pi} \left(1 - |\hat{r} \cdot \varepsilon|^2 \right)$$

באופן כללי, f תלוי בשתי זוויות, θ ו־φ. במקרה הלינארי,

$$f_z \left(\theta, \varphi \right) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta$$

ובמקרה הסיבובי,

$$f_\pm \left(\theta, \varphi \right) = \frac{3}{16\pi} \left(1 + \cos^2 \theta \right)$$

---

[5] ראה רשימות באלקטרודינמיקה, קרינת דיפול

כאשר f היא פונקציה מנורמלת: $\int \mathrm{d}\Omega\, f_\varepsilon(\theta,\varphi)=1$. לכן, ניתן לפרש את הפונקציה הנ"ל כצפיפות הסתברות עבור קרינת "פוטונים".

$$\langle \mathbf{S}\rangle = \frac{\hat{r}}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\frac{|D|^2}{r^2} f_\varepsilon(\theta,\varphi)$$

מוקטור פוינטינג, ניתן לחשב את הספק הקרינה ביחידות זוית מרחבית, $\mathrm{d}\Omega$, על ידי:

$$\frac{\mathrm{d}P_{rad}}{\mathrm{d}\Omega} = r^2\langle \mathbf{S}\rangle\cdot\hat{r} = \frac{|D|^2}{3\pi\varepsilon_0 c^3} f_\varepsilon(\theta,\varphi)$$

וההספק הכולל הוא

$$P_{rad} = \int \mathrm{d}\Omega \frac{\mathrm{d}P_{rad}}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{|D|^2}{3\pi\varepsilon_0 c^3}$$

1.4 תכונות מכניות של האור במסגרת מודל לורנץ

נרצה לקבל תוצאות של אופטיקה־קוונטית באמצעות מודל לורנץ. בפיתוח זה, נרצה לבצע "אופטיקה־אטומית־גיאומטרית". נרצה לקבל ממכניקה קלאסית, ביטויים עבור מניפולציה של קרינה על אטומים.
ישנם שתי דרכים עבור אור להפעיל כח על חומר:

- כח גרדיאנט – נובע מגרדיאנט של אנרגיה פוטנציאלית עקב קרינה משתנה במרחב.
- לחץ קרינה – החומר בולע אור ופולט אור בכיוון הפוך – תלוי בחלק המדומה של α

1.4.1 כח דיפול

אנרגיה פוטנציאלים מוגדרת על ידי:

$$V_d = -\mathbf{D}\cdot\mathbf{E}$$

כאשר נרשום: $\mathbf{D}=\mathbf{D}^{(+)}+\mathbf{D}^{(-)}$, ו־$\mathbf{D}^{(\pm)}\propto e^{\pm i\omega t}$. לכן, נרשום את האנרגיה הפוטנציאלית, בצורה:

$$V_d = -\left(\mathbf{D}^{(+)}+\mathbf{D}^{(-)}\right)\cdot\left(\mathbf{E}^{(+)}+\mathbf{E}^{(-)}\right)$$

בביטוי הזה יש ארבע איברים: $\mathbf{D}^{(+)}\cdot\mathbf{E}^{(+)}\propto e^{2i\omega t}$ ו־$\mathbf{D}^{(-)}\cdot\mathbf{E}^{(-)}\propto e^{-2i\omega t}$ – תדירות זו גדולה בהרבה מתדירות השדה, ולכן השפעתם מועטה, ולכן נזניח את האיברים המעורבים הנ"ל, ונשמור רק על האיברים ה"מעורבים":

$$\begin{aligned} V_d &= -\left(\mathbf{D}^{(+)}\mathbf{E}^{(-)}+\mathbf{D}^{(-)}\mathbf{D}^{(+)}\right)\\ &= -\Re\left(\alpha(\omega)\right)\left|\mathbf{E}^{(+)}\right|^2 \end{aligned}$$

נסתכל על עוצמת השדה:

$$I(r)\equiv |E_0|^2\frac{\varepsilon_0 c}{2} = \varepsilon_0 c\left|E^+\right|^2 \qquad (4)$$

ולכן נקבל

$$V_d = -\frac{1}{\varepsilon_0 c}\Re\left(\alpha(\omega)\right) I(r)$$

נשים לב ש־ $Z_0=\frac{1}{\varepsilon_0 c}=\mu_0 c=\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}=377\Omega$, **"האימפנדנס של הריק הקלאסי"**, לכן,

$$\boxed{V_d = -Z_0\Re\left(\alpha(\omega)\right) I(r)}$$

במסגרת מודל לורנץ,

$$V_d = -\frac{e^2}{2m\varepsilon_0 c\omega}\frac{\omega_0-\omega}{(\omega_0-\omega)^2+\gamma_d}I(r)$$

כאשר ω היא תדירות השדה החיצוני, ו־ω_0 היא תדירות האוסצילטור (כרגע יש לנו רק אוסצילטור אחד, אז אין סכימה) .

הערה 1.2 $\Re(\alpha(\omega)) \propto (n(\omega)-1)$ ולכן $V_d \propto (n(\omega)-1)$, זהו A.C. Stark effect

מהביטוי לאנרגיה הפוטנציאלית, ניתן לראות שהכח על המטען (נגזרת של האנרגיה הפוטנציאלית לפי המיקום), תלוי אך ורק בבניית השדה החיצוני, $I(r)$:

$$\mathbf{F}_d = -\boldsymbol{\nabla} V_d \propto \boldsymbol{\nabla} I(r)$$

הסימן של הכח, האם הוא כח מושך או דוחה, הוא הסימן של $\omega - \omega_0$: בהתאם לסימן זה, ניתן לקבל כח מושך או דוחה. נגדיר: $\Delta \equiv \omega - \omega_0$:

- עבור $\Delta > 0$, $\omega > \omega_0$ (Blue detuning), אז $V_{dipule} > 0$, ולכן, הכח הוא שלילי, ונקבל מחסום פוטנציאל.
- עבור $\Delta < 0$, $\omega_0 > \omega$ (Red detuning), אז $V_{dip} < 0$, וזהו בור פוטנציאל.

קצב פיזור של "פוטונים" חישבנו את הספק הקרינה של דיפול, $P_{rad} = \frac{|\mathbf{D}^{(+)}|^2}{2\pi\varepsilon_0 c^3}$. נשתמש בקשר בין $\mathbf{D}^{(+)} = \alpha\mathbf{E}^{(+)}$, ובקשר בין $\mathbf{E}$ ל־I במשוואה (4) , ונכתוב את ההספק הכולל בצורה:

$$\boxed{P_{rad} = \frac{\omega^4|\alpha(\omega)|^2}{6\pi\varepsilon_0^2 c^4}I} \tag{5}$$

וחתך הפעולה מוגדר על ידי $P = \sigma I$, ולכן,

$$\boxed{\sigma(\omega) = \frac{\omega^4|\alpha(\omega)|^2}{5\pi\varepsilon_0^2 c^4}} \tag{6}$$

זהו חתך הפעולה של Rayligh. חתך פעולה זה מסביר את צבעם הכחול של השמים, ואודם הדימדומים: בכלל החזקה הגבוהה של ω, התדירויות בכחול מתפזרות בקלות, ואילו באדום הן עוברות יותר בקלות. התוצאה הזו היא אוניברסלית מאחר והתלות של $\alpha(\omega)$ נמוכה יחסית, ולכן ניתן לקחת אותו כקבוע ברוב המקרים. בפיזור Mie, לא ניתן לקחת את את $\alpha(\omega)$ כקבוע: ביום חמסין, רואם את השמים בצבע אפור, מאחר ובנוסף לפיזור Rayligh, שמבתצע בתדירויות נמוכות, נוכחות החול באוויר גורמת לכך שהפיזור אינו תקף, והגורם הדומיננטי הוא $\alpha(\omega)$, עבור גרגירי חול – מפזר גדול יחסית לאורך הגל, הספקטרום הוא כאוטי למדי. הפיזור הוא ממוצע של הספקטרום הכאוטי על כל אורכי הגל, כלומר, אפור.

1.4.2 קצב פיזור של "פוטונים"[6]

הפסקה: המשפט האופטי המשפט האופטי הוא ביטוי קלאסי לשימור אנרגיה, שכבר נתקלנו בו בהקשר של מכניקת קוונטים. בבעית פיזור, יש לנו מפזר, וגל שנבלע על ידי המפזר. המפזר "מעבד" את האנרגיה הנפלטת, ופולט אותה בצורות שונות. המשפט האופטי, בעקרון, אומר כי "מה שנכנס זה מה שיוצר". המשפט האופטי הוא נוסחא כללית עבור שימור (שטף) אנרגיה. קיבלנו ביטויים עבור הקשר בין סוספטביליות והפולזרביליות הדינמית, ועבור האינדקס האופטי:

$$\chi(\omega) = \frac{N}{\varepsilon_0}\alpha(\omega)$$
$$\tilde{n}(\omega) \simeq 1 + \frac{1}{2}\chi(\omega) = 1 + \frac{N}{2\varepsilon_0}\alpha(\omega)$$

[6] 9.3.2009

(עבור צפיפות אופטית קטנה). קיבלנו שמקדם הבליעה $a(\omega)$ נתון כ־

$$a(\omega) = \frac{2\omega}{c}\Im(\tilde{n}(\omega)) = \frac{N\omega}{\varepsilon_0 c}\Im(\alpha(\omega))$$

ואילו עוצמת הבליעה היא

$$I_{abs} = \sigma(\omega) I = \frac{a(\omega)}{N} I$$

כאשר I הוא הספק האנרגיה של השדה החיצוני. משימור אנרגיה, ההספק הנבלע שווה להספק המוקרן,

$$P_{abs} = P_{rad}$$

ולכן, נקבל את **המשפט האופטי**

$$\boxed{\Im(\alpha(\omega)) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2\omega^3}{3c^3}|\alpha(\omega)|^2} \tag{7}$$

המשפט עצמו הוא קלאסי לחלוטין, אבל הביטוי הספציפי, $\alpha(\omega)$, הוא תלוי במודל (במודל קוונטי הוא יהיה ביטוי קוונטי). ביטוי זה נכון רק במצב **סטציונארי** (שטף האנרגיה קבוע בזמן), ולא במצב מעבר. במצבי מעבר, יתכן והמערכת עצמה שומרת אנרגיה – היא "עדיין" לא משחררת את כל האנרגיה שנבלעה מהשדה החיצוני.

הערה 1.3 בנוסחא (5), הכוונה ב־P_{rad} היא לקרינה במובן הרחב – כלומר, לאו דווקא קרינה אלמ"ג, אלא כל פליטת האנרגיה של האטום, בכל הערוצים האפשריים. גם המשפט האופטי מתייחס לכל הערוצים הללו.

קצב פיזור "פוטונים" נגדיר את קצב פיזור הפוטונים, R_{sc}, כ־

$$\boxed{R_{sc} \equiv \frac{P_{rad}}{\hbar\omega} = \frac{Z_0\omega^2}{\hbar\omega_0^2}\Im(\alpha(\omega)) I}$$

בשלב זה זוהי הגדרה בלבד, אין כאן שום אלמנט קוונטי. לביטוי זה יש יחידות של $\frac{1}{\text{time}}$.

לחץ קרינה נדון בכח שנובע עקב בליעה ופיזור של החומר מהקרינה. הכח הוא שינות התנע כפול קצב שינוי התנע, והוא נתון על ידי:

$$\mathbf{F}_{rad} = \hbar\mathbf{k}R_{sc}$$

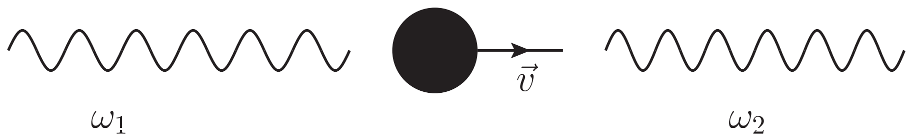
הביטוי אינו ביטוי קוונטי – הוא אינו תלוי ב־$\hbar$. אבל יותר נוח לדבר על "אוסף של פוטונים" שהתנע שלהם הוא $\hbar\mathbf{k}$ שמחליפים תנע עם האטומים, למרות שהתיאור שלנו הוא קלאסי לחלוטין.

$$\boxed{F_{rad} = \frac{Z_0}{c}\frac{\omega^3}{\omega_0^2}(\alpha(\omega)) I(\omega)}$$

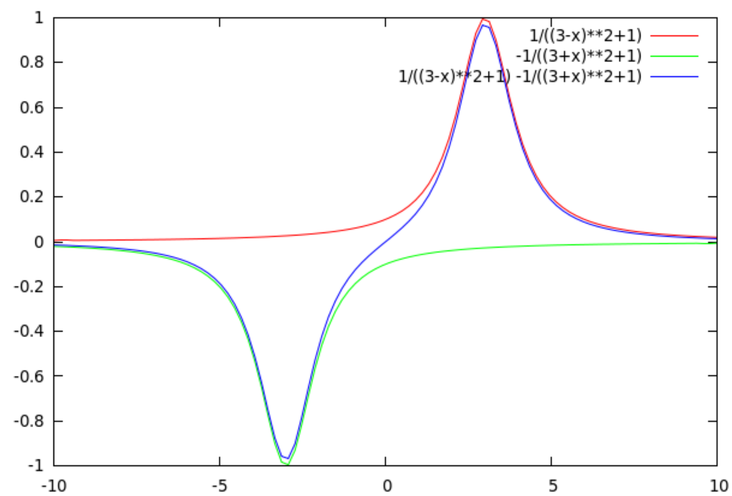
אפשר לקבל את הביטוי הנ"ל בלי לעבור ב"טריק" הקוונטי בדרך, ואנחנו נעשה את זה בתרגיל. נציב את $\alpha(\omega)$ ממודל לורנץ, כדי לחשב את הכח על אטום בודד:

$$F_{rad} = \hbar\mathbf{k}_0\frac{\gamma_d^3}{\Delta^2+\gamma_d^2}\frac{I(\omega_0)}{I_{sat}}$$

כאשר נגדיר $\Delta \equiv \omega - \omega_0$ (כאשר $\omega \simeq \omega_0$), ו־$I_{sat} \equiv \frac{\hbar\omega_0\gamma_d}{2\sigma_0}$, ו־σ_0 הוא חתך הפעולה הקלאסי, שכבר חישבנו בנוסחא (3): $\sigma_0 = \frac{e^2}{m\varepsilon_0 c^2\gamma_d}$. הביטוי הזה הוא דומה לביטוי שנקבל במכניקה קוונטית, עד כדי הביטוי של I_{sat}, ונצטרך להסביר באופן טוב יותר את γ_d.



איור 3: קירור לייזר



איור 4: הכח הפועל על החלקיק (בציר y) כפונקציה של המהירות v(בציר x). זהו סכום של שני לורנציאנים, הנתון על ידי F_{rad}

קירור לייזר (ומולסה אופטית) נסתכל על אטום שנע במהירות **v**, ונרצה לעצור את האטומים באמצעות שדה מגנטי חיצוני, ובאמצעות לחץ הקרינה. נקרין על האטום בשני לייזרים, בתדירות ω_1 ו־ω_2.

לחץ הקרינה על האטום הוא

$$F_{rad} = \hbar k \gamma_d^2 \left[\frac{1}{\Delta_1^2 + \gamma_d^2} - \frac{1}{\Delta_2^2 + \gamma_d^2} \right] \cdot \frac{I}{I_{sat}}$$

כאשר $\begin{cases} \Delta_1 = \Delta - kv \\ \Delta_2 = \Delta + kv \end{cases}$, כאשר החיבור והחיסור הם עקב דופלר. נרצה להגיע למצב שבו

$$\omega_1 \xrightarrow{\text{Doppler}} \omega_1 - kv$$
$$\omega_2 \xrightarrow{\text{Doppler}} \omega_2 + kv$$

נניח ולאטום יש שתי רמות, שההפרש בינהם הוא ω_0. אנחנו רוצים לעצור את האטום שנע ימיני. כדי לעצור את האטום, נרצה שהוא יקבל יותר תנע מ־ω_2 , ופחות מ־ω_1. לכן, נכוון $\omega_2 < \omega_0$, ולכן, כתוצאה מהסחת דופלר, $\omega_2 \to \omega_2 + kv = \omega_0$. אם נכוון את התדירויות כך, האטום יראה את הפוטון בתהודה, ויבלע אותו בצורה מקסימלית. לעומת זאת, את ω_1, הוא לא יראה בתדירות מתאימה. לכן, כאשר נציב את $\Delta = \omega - \omega_0$, נקבל

$$F_{rad} = \hbar k \gamma_d^3 \left[\frac{1}{(\Delta - kv)^2 + \gamma_d^2} - \frac{1}{(\Delta + kv)^2 + \gamma_d^2} \right]$$

נראה שהכח הוא סופרפוזיציה של שני לורנציאנים (כפונקציה של v). נפתח אותו לטור כאשר v קטן :

$$F_{rad} \simeq \frac{\hbar k^2 \gamma_d^2}{2} \frac{\Delta}{[\Delta^2 + \gamma_d^2]} \frac{I}{I_{sat}} \cdot v$$

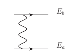
זהו כח חיכוך הפופורציונים למהירות. לכן, השם "מולסה אופטית": האטום נראה כאילו הוא נע בתוך חומר צמיג שיוצר עליו התנגדות.

1.5 מודל אינשטיין – משוואות עבור קצב שינוי אוכלסיות אטומים

מודל לורנץ לא יכול לתאר אפקט של הגברה של שדה חיצוני (כמו למשל לייזר). במודל לורנץ, החומר יכול לבלוע אנרגיה מהשדה, אבל לא יכול לשחרר אנרגיה כך שהשדה החיצוני יקבל יותר ויותר אנרגיה. במודל אינשטיין, זה יתכן.

מודל אינשטיין הוא מודל שהגיע אחרי תיאור בוהר של האטום. תיאור בוהר של האטום הוא תיאור קוונטי, עבל קדם לשרדינגר. התיאור של אינשטיין לא מתיחס למודל בוהר של האטום, עבור מודל אינשטיין, החומר אינו חומר קוונטי. מה שהוא כן לוקח – כאשר יש החלפת אנרגיה בין חומר לקרינה, היא מתבצעת במנות אנרגיה שגודלן $\hbar\omega$. במודל של אינשטיין הוא מתיחס לכך שיש משהו בחומר שגורם לכך שמנות האנרגיה יהיו מקוונטיות ב־$\hbar\omega$.

כשנתאר את המודל, נשתמש בשפה של מכניקה קוונטית ("רמות מעוררות", "אטום שתי רמות") אבל לא חייבים לעשות את זה – אפשר לדון בכך במונחים קלאסיים לחלוטין (עד כדי מנות אנרגיה ב־$\hbar\omega$).

במודל אינשטיין נניח אטום 2־רמות,  , כאשר $\omega_0 \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}$, ו־$N_a$ ו־N_b הם האיכלוסים של שתי הרמות הללו, כאשר

$$N_a + N_b = 1$$

. השדה האלקטרומגנטי מתואר על ידי

$$u(\nu) \equiv \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\nu}$$

הצפיפות הספקטרלית של השדה, כאשר $U(\nu)$ היא האנרגיה ביחדת נפח. המודל מסביר איך האיכלוס של הרמות השונות משתנה בהשפעת השדה, הנתון על ידי צפיפות אנרגיה. משוואות אינשטיין הן:

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}N_b}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}N_a}{\mathrm{d}t} = -AN_b + BN_a u\left(\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}\right) - BN_b u\left(\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}\right)}$$

כאשר A ו־B קבועים. נדון באברי המשוואה השונים:

1. $-AN_b$ – איבר זה אומר שאם אטומים הם במצב המעורער, הם יכולים לחזור למצב היסוד. בניגוד לשני האיברים האחרים, האיבר הזה לא מתאפס גם כשאין שדה חיצוני. איבר זה מתאר **פליטה ספונטנית** – האפשרות של קרינה אלקטרומגנטית של החומר, ללא נוכחות של שדה חיצוני u. המקדם A הוא למעשה $A \propto \gamma_d$, אבל את זה נראה רק כשנעבור למכניקה קוונטית – במודל אינשטין אין אפשרות לחשב אותו.

2. $BN_a u$ – איבר זה פופורציוני לשדה החיצוני, ואומר שניתן להביא חומר למצב מעורער על ידי שדה חיצוני. איבר זה מתאר **בליעה** של קרינה חיצונית על יד יהחומר, כדי לקבל יותר מצבים מעוררים.

3. $-BN_b u$ – איבר זה אומר שניתן להוריד את האוכלוסיה של אטומים מעוררים על ידי שדה חיצוני, **פליטה מאולצת**.

אינשטיין הוסיף את איבר הפליטה המאולצת (עם אותו מקדם B), כדי להגיע להתפלגות של פלאנק עבור קרינת גוף שחור. אחר כך בוזה פיתח את התפלגות פלאנק כהתפלגות של אנרגיות של חלקיקים, והציג את הנושא של התסלגות־בוז עבור פוטונים כדי לפתור את זה, ונעזר באינשטיין לתמיכתו בעבודה, והעיר שלדעתו זה נכון לא רק עבור פוטונים, אלא עבור כל אטום. ההערה של אינשטיין נכונה רק עבור אטומים שהם בוזונים (להבדיל מפרמיונים).

עבור תנאי ההתחלה: $N_a(t=0) = 1$ ו־$N_b = 0$, הפתרון של המשוואה הוא N_b שמתגבר עד לקבוע. במצב הסטציונארי, הנגזרת מתאפסת, ונקבל (נציב $A = \gamma_d$) ,

$$\boxed{N_b(t \to \infty) = \frac{B}{\gamma_d + 2Bu} u}$$

1. בגבול של שדה חלש, $u \ll \gamma_d/B$, נקבל ש־ $N_b \propto u$, תגובה לינארית של האוכלוסיה כפונקציה של השדה החיצוני.
2. בגבול של שדה חזק, $u \gg \gamma_d/B$, נקבל ש־ $N_b \to \frac{1}{2}$.

בכל מקרה, במקרה הסטציונארי, N_b חסום על ידי $\frac{1}{2}$: אין מצב של היפוך אוכלוסיה – לכל היותר חצי מהאטומים הם במצב $|b\rangle$.

העברת אנרגיה בין השדה לאטומים

$$P = -\hbar\omega_0 \left(\frac{\mathrm{d}N_b}{\mathrm{d}t}\right) = \hbar\omega_0 \cdot B\left(N_b - N_a\right) u \left(\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}\right)$$

יש לנו שתי אפשרויות:

- $P < 0$, כלומר, $N_b < N_a$ – זהו המצב הרגיל – החומר בולע אנרגיה מהשדה החיצוני – הקרינה מפסידה אנרגיה – בליעה.
- $P > 0$, כאשר $N_b > N_a$, וזו הגברה של השדה באמצעות היפוך האוכלוסיה. זה נותן אפשרות לאפקט של לייזר. צריך מכניקה קוונטית בשביל פרמטרים מדויקים בלייזר, אבל במודל הקלאסי הזה, יש אפשרות להגברת השדה החיצוני. במודל הזה אין קוהרנטיות של השדה – השדה נכנס אך ורק כצפיפות ספקטרלית. השדה של אינשטיין אינו קוהרנטי.

2 המצב הקוונטי[7]

2.1 יסודות של מכניקה קוונטית

2.1.1 אופרטור צפיפות

מצב מוגד על ידי וקטור, $|\psi(t)\rangle$, מתאר את ההתפתחות בזמן של המצב הקוונטי לפי משוואת שרדינגר. עבור מערכת פתוחה, כלומר, מערכת קוונטית עם אינטראקציה עם שדות, עם מערכת אחרת (קוונטית/ קלאסית), התיאור על ידי מצב קוונטי הוא לא תיאור טוב מפסיק, מאחר ואינו מתאר את הדינמיקה של המערכת החיצונית. אנחנו זקוקים לכלי כללי יותר לתיאור המצב, וכלי זה הוא **מטריצת צפיפות**, $\hat{\rho}$.

למערכת יש מצב קוונטי, אך כתוצאה מהאינטראקציה שלה עם הסביבה, אנחנו מקבלים סופרפוזיציה לא קוהרנטית של מצבים:

$$\hat{\rho} = \sum_a P_a \left|\psi_a\right\rangle \left\langle\psi_a\right|$$

$\{|\psi_a\rangle\}$ היא מערכת של מצבים קוונטיים (הם לא חייבים להיות אורתוגונליים, בסיס, מרחבים עצמיים וכיו"ב). מצבים אלו תלויים בתיאור המערכת, והסופרפוזיצה של המצבים היא סופרפוזיציה לא קוהרנטית בהסתברות P_a למצב $|\psi_a\rangle$. ההסתברות P_a נקבעת עקב גורם שאין לנו שליטה עליו – דינמיקה שיכולה לנבוע, בין השאר, מאינטראקציה חיצונית. ההסתברות P_a לא קשורה (בהכרח) לשום סיבה קוונטית – זו אינה אי ודאות קוונטית כי אם גורם חיצוני. לדוגמא, אטום באינטראקציה עם מערכת קלאסית־כאוטית. הדינמיקה של המערכת הקלאסית מורכבת למדי, והדינמיקה ההסתברותית של המערכת הקלאסית, "נכנסת" לתוך הגורם P_a.

נגדיר **מצב טהור**, כאשר ניתן לכתוב את האופרטור

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

על ידי מצב $|\psi\rangle$ כלשהו. עבור מצב טהור, ניתן לכתוב את ההתפתחות בזמן עבור $\hat{\rho}$,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} &= |\partial_t\psi\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\partial_t\psi| \\ &= -i\hbar\hat{H}\hat{\rho} + i\hbar\hat{\rho}\hat{H} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]\end{aligned}$$

[7] 14/03/2010

ונקבל, עבור התפתחות בזמן של מטריצת צפיפות של מצב טהור, את **משוואת שרדינגר - פון־נוימן**,

$$\boxed{\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]} \tag{8}$$

באופן כללי, תמיד ניתן לרשום את ההתפתחות בזמן של אופרטור צפיפות כללי,

$$\boxed{\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=\mathcal{L}\hat{\rho}}$$

כאשר $\mathcal{L}$ אינו אופרטור במרחב הילברט הקוונטי, כי אם אופרטור־הפועל־על־אופרטורים ($\mathcal{L}:L\left(H\right)\to L\left(H\right)$), כאשר $L\left(H\right)$ הוא מרחב האופרטורים על מרחב הילברט H), ומכונה סופראופרטור. האופרטור במקרה זה, $\mathcal{L}$ הוא ליובליאן (Liouvillian), ומשוואה זו היא משוואת ליוביל־פון נוימן. במקרה זה, עבור מצב טהור,

$$\mathcal{L}\equiv\left[H,\cdot\right]$$

ערך תצפית עבור אופרטור כלשהו $\hat{A}$, נגדיר את העקבה להיות:

$$\mathrm{Tr}\hat{A}=\sum_{\beta}\left\langle \beta|\hat{A}|\beta\right\rangle$$

כאשר $\left\{|\beta\rangle\right\}$ בסיס אורתונורמלי של מרחב הילברט. תכונות העקבה:

1. $\mathrm{Tr}\left[\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right]=\mathrm{Tr}\left[\hat{B}\hat{C}\hat{A}\right]=\mathrm{Tr}\left[\hat{C}\hat{A}\hat{B}\right]$
2. $\mathrm{Tr}\left(\hat{A}\hat{B}\right)=\mathrm{Tr}\left(\hat{B}\hat{A}\right)$

ניתן לחשב את ערך התצפית של אופרטור $\hat{A}$ במצב טהור ψ , על ידי

$$\left\langle \hat{A}\right\rangle =\left\langle \psi|\hat{A}|\psi\right\rangle =\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right)$$

כאשר $\hat{\rho}$ אופרטור הצפיפות, $\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|$. עבור מצב מעורב (לא טהור), ערך התצפית יהיה

$$\left\langle \left\langle \hat{A}\right\rangle \right\rangle =\sum_{a}P_{a}\left\langle \psi_{A}|\hat{A}|\psi_{A}\right\rangle =\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right)$$

כאשר הסימון $\langle\langle\cdot\rangle\rangle$ בא לציין הן ממוצע קוונטי, והן ממוצא לפי ההתפלגות P_a של אופרטור הצפיפות.

מטריצת צפיפות עבור אופרטור צפיפות, ניתן להגדיר את מטריצת הצפיפות באמצעות אלמנטי מטריצה,

$$\rho_{\alpha\alpha'}\equiv\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha'\rangle$$

עבור מצב טהור, $\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|$, קיימים אלמנטי מטריצה אלכסוניים,

$$\rho_{\alpha\alpha}=\langle\alpha|\hat{\rho}|\alpha\rangle=\left|\langle\alpha|\psi\rangle\right|^{2}\geq0$$

עבור מצב טהור, אלמנטי מטריצה אלכסוניים מכונים אוכלוסיות. את האלמנטים הלא אלכסוניים, $\rho_{\alpha\alpha'}$ ($\alpha\neq\alpha'$), עבור מצב

$$|\psi\rangle=\sum_{\alpha}\left|C_{\alpha}\right|e^{i\varphi_{\alpha}}|\alpha\rangle$$

נכתוב,

$$\rho_{\alpha\alpha'}=\left|C_{\alpha}C_{\alpha'}\right|e^{i\left(\varphi_{\alpha}-\varphi_{\alpha'}\right)}$$

אלמנטים אלו הם מרוכבים, ומציינים את ההתאבכות בין מצבים קוונטים שונים. האלמנטים הלא־אלכסוניים מכונים קוהרנטיות.

טוהר נמצא קריטריון שיגדיר האם מצב קוונטי כלשהו הוא טהור או לא. $\rho_{\alpha\alpha}$ מגדיר צפיפות הסתברות, ולכן, מטריצת צפיפות צריכה להיות מנורמלת:

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}=\sum_{\alpha}\rho_{\alpha\alpha}=1$$

אבל $\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right)$, עבור מצב טהור, $\hat{\rho}=\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$,

$$\hat{\rho}^2=\left|\psi\right\rangle\underbrace{\left\langle\psi|\psi\right\rangle}_{=1}\left\langle\psi\right|=\hat{\rho}$$

$$\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right)=1\qquad\text{(For pure state)}$$

אבל עבור מצב מעורב,

$$\boxed{\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right)<1}\qquad\text{(For mixed state)}$$

לדוגמא, עבור המצב $\hat{\rho}=\sum_{a=1}^{N}P_a\left|\psi_a\right\rangle\left\langle\psi_a\right|$, כאשר $\left\{\left|\psi_a\right\rangle\right\}$ הם מצבים אורתוגונלים. נניח כי $P_a=\frac{1}{N}$, הסתברות שווה לכל מצב,

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2=\sum_{a=1}^{N}P_a^2=\frac{1}{N}$$

כאן, ניתן לראות כי $\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2$ מודד את הערבוב - הסופרפוזיציה הלא־קוהרנטית של המצבים שמגדירים את $\hat{\rho}$.

הוכחה: ($\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^2\right)<1$ לכל מצב מעורב)

$\hat{\rho}$ הוא אופרטור הרמיטי (צמוד לעצמו), $\hat{\rho}^{\dagger}=\hat{\rho}$. לכן, לכל $\hat{S}$ אוניטרי, ניתן לכתוב

$$\hat{\rho}'=\hat{S}\hat{\rho}\hat{S}^{\dagger}$$

כאשר ρ' אלכסוני, ומאחר ודמיון מטריצות שומר על העקבה, מתקיים:

$$\mathrm{Tr}\hat{\rho}^2=\mathrm{Tr}\hat{\rho}'^2\sum_{\alpha}\left(\rho'_{\alpha\alpha}\right)^2\leq\left(\sum_{\alpha}\rho'_{\alpha\alpha}\right)^2=1$$

עבור מצב טהור אלכסוני, קיים רק אלמנט אחד לא אלכסוני, $\rho_{11}=1$, ו־0 $\rho_{\alpha\beta}=0$, לכל $\alpha,\beta\neq1$, $\alpha\neq\beta$.
אם המצב אינו טהור, על האלכסון של מטריצת הצפיפות האלכסונית ρ', ישנים לפחות שני איברים שסכומם הוא 1 , כלומר, כל אחד מהן קטן מ־1, לכן, העלאה בריבוע מקטינה אותם, וסכומן קטן מ־1. ■

2.1.2 הצגות[8]

אופרטור התפתחות הזמן במכניקה קוונטית, אופרטור התפתחות בזמן נתון על ידי משוואת שרדינגר :

$$\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle\rightarrow\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=U\left(t,t_0\right)\left|\psi\left(t_0\right)\right\rangle$$

ההתפתחות הזו היא התפתחות אוניטרית: האופרטור U הוא אונטרי, על מנת שהמצבים ישמרו על נרמול.

$$\left\langle\psi\left(t\right)|\psi\left(t\right)\right\rangle=\left\langle\psi\left(t_0\right)\middle|U^{\dagger}\left(t,t_0\right)U\left(t,t_0\right)\middle|\psi\left(t_0\right)\right\rangle\equiv\left\langle\psi\left(t_0\right)|\psi\left(t_0\right)\right\rangle$$

לכן, $U^{\dagger}\left(t,t_0\right)U\left(t,t_0\right)=1$.

[8] לא מהסוג שהוא הומומורפיזם מחבורה לתת־חבורה של GL_n..

תכונות האופרטור

- $U\left(t_2,t_0\right)=U\left(t_2,t_1\right)U\left(t_1,t_0\right)$, כאשר $t_0<t_1<t_2$. זוהי תכונה של Semi-Group.
- $U\left(t,t'\right)=U^{-1}\left(t',t\right)=U^{\dagger}\left(t',t\right)$

אופרטור ההתפתחות בזמן מקיים את משוואת שרדינגר:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle =-\frac{i}{\hbar}H\left|\psi\right\rangle$$

משוואה זו נונה בצורה אינפינטיסימלית על ידי

$$\left|\psi\left(t+\mathrm{d}t\right)\right\rangle -\left|\psi\left(t\right)\right\rangle =-\frac{i}{\hbar}H\left|\psi\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t$$

לכן,

$$\psi\left(t\right)\rightarrow\left|\psi\left(t+\mathrm{d}t\right)\right\rangle =\left(1-\frac{i}{\hbar}H\mathrm{d}t\right)\left|H\left(t\right)\right\rangle$$

לכן,

$$\boxed{U\left(t+\mathrm{d}t,t\right)=1-\frac{i}{\hbar}H\mathrm{d}t}$$

ניתן להשתמש בתכונה של Semi-group עבור אופרטור התפתחות הזמן, ולכתוב,

$$\begin{aligned}U\left(t+\mathrm{d}t,t_0\right) & =U\left(t+\mathrm{d}t,t\right)U\left(t,t_0\right)\\ & =\left(1-\frac{i}{\hbar}H\mathrm{d}t\right)U\left(t,t_0\right)\end{aligned}$$

ניתן להתייחס לאופרטור U כפונקציה של הזמן, t, בלבד. מכאן, ניתן לראות שההתפתחות בזמן של הפונקציה U , זהה להתפתחות בזמן של המצב. לכן, U מקיים את משוואת שרדינגר:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}U\left(t,t_0\right)=-\frac{i}{\hbar}HU\left(t,t_0\right)}\tag{9}$$

באופן כללי,

$$U\left(t+\mathrm{d}t,t\right)=1-\frac{i}{\hbar}H\mathrm{d}t$$

מכיוון שמשוואת שרדינגר היא משוואה מסדר ראשון בזמן, $\left(\mathrm{d}t\right)^2=0$. לכן, ניתן לכתוב

$$\simeq e^{-\frac{i}{\hbar}H\mathrm{d}t}$$

עקב התכונה של Semi-Group, ניתן לכתוב

$$U\left(t,t_0\right)=\prod_{t_0}^{t}e^{-iH\left(t_\alpha\right)\frac{\mathrm{d}t_\alpha}{\hbar}}$$

כלומר, עבור התפתחות בזמן בטווח בין t_0 ל־t, נקבל את $U\left(t,t_0\right)$ כמכפלה של איברים מהצורה $e^{-iH\left(t_\alpha\right)\frac{\mathrm{d}t_\alpha}{\hbar}}$, כאשר המכפלה מסודרת בזמן.

עבור המילטוניאן $H\left(t\right)$, כך ש־ $\left[H\left(t\right),H\left(t'\right)\right]=0$,עבור $t\neq t'$, נוכל להשתמש בעובדה ש־ $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\hat{A}+\hat{B}}$, ונוכל לכתוב:

$$\begin{aligned}U\left(t,t_0\right) & =\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{t_0}^{t}H\left(t_\alpha\right)\mathrm{d}t_\alpha\right]\\ & =\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H\left(t'\right)\mathrm{d}t'\right]\end{aligned}$$

(בדרך כלל זה לא נכון, ניתן לכתוב את זה רק עבור $[H(t), H(t')] = 0$...). באופן כללי, כותבים

$$U(t,t_0) = \mathcal{P}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,\mathrm{d}t'\right]$$

כאשר $\mathcal{P}$ הוא אופרטור כרונולוגי, שתפקידו לסדר את האיברים בביטוי $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,\mathrm{d}t'\right]$, כדי שיתאימו ל- $\prod_{t_0}^{t} e^{-iH(t_\alpha)\frac{\mathrm{d}t_\alpha}{\hbar}}$ (זוהי פשוט נוטציה).

עבור H לא תלוי בזמן, $H(t) = H$, נוכל לבצע אינטגרציה ולקבל,

$$\boxed{U(t,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]}$$

הצגות Schrödinger ו־Heisenberg עבור אופרטור

$$\left\langle \hat{A}\right\rangle = \left\langle \psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\right\rangle$$

, בהצגת שרדינגר, שבדרך כלל אינו תלוי בזמן, הדינמיקה נתונה על ידי ההתפתחות בזמן של המצב הקוונטי $|\psi\rangle$. בצורה שקולה, ניתן להגדיר

$$\left\langle \hat{A}\right\rangle = \left\langle \psi|\hat{A}(t)|\psi\right\rangle$$

כאשר המצבים $|\psi\rangle$ אינם תלויים בזמן. זוהי הצגת הייזנברג. את שתי ההצגות ניתן לקשור על ידי אופרטור התפתחות בזמן: בהצגת שרדינגר נסמן $\hat{A}_s$,

$$\begin{aligned}\left\langle \psi(t)|\hat{A}_s|\psi(t)\right\rangle &= \left\langle \psi(0)|U^\dagger(t,0)\,\hat{A}_S U(t,0)|\psi(0)\right\rangle \\ &\equiv \left\langle \psi(0)|\hat{A}_H(t)|\psi(0)\right\rangle\end{aligned}$$

כאשר

$$\boxed{\hat{A}_H(t) = U^\dagger(t,0)\,A_S U(t,0)}$$

, הוא אופרטור בהצגת שרדינגר. כמו כן, ניתן להגדיר מציב

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi(0)\rangle_S = U^\dagger(t,0)\,|\psi(t)\rangle_S$$

כלומר, בהצגת הייזנברג האופרטורים אינם תלויים בזמן, ובהצגת שרדינגר האופרטורים תלויים בזמן, והקשר בינהם נתון על ידי אופרטור ההתפתחון בזמן

אופרטור צפיפות בהצגת שרדינגר, נתון על ידי

$$\hat{\rho}_S = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$$

לכן, הצגת שרדינגר, אופרטור הצפיפות תמיד תלוי בזמן. מאחר ומצבים בהצגת הייזנברג אינם תלויים בזמן, אופרטור הצפיפות בהצגת הייזנברג אינו תלוי בזמן, אך באופן כללי, ניתן להציגו בצורה:

$$\boxed{\hat{\rho}_H = U^\dagger(t,t_0)\,\rho_S(t)\,U(t,0)}$$

ואופרטור זה, ללא תלות ב־U, אינו תלוי בזמן.

משוואת התפתחות בזמן של הייזנברג נתונה על ידי הביטוי:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}A_H &= \frac{\partial}{\partial t}\left(U^\dagger A_S U\right)\\ &= \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t}U^\dagger\right)}_{U^\dagger,\text{ by eq(9)}} A_S U + U^\dagger A_S \frac{\partial}{\partial t}U\\ &= \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_S(t)A_s U - \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_s(t)U\end{aligned}$$

לכן,

$$\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{A}_H, U^\dagger H_s(t)U\right]$$

הצגת האינטראקציה[9] הצגת האינטראקציה היא הצגה מעורבת בין הצגת שרדינגר לבין הצגת הייזנברג. אנחנו מתשמשים בהצגת אינטראקציה כאשר ניתן לכתוב את ההמילטוניאן בצורה

$$H = H_0 + V$$

כאשר H_0 הוא המילטוניאן ללא הפרעה, ו־V היא הפרעה. החלוקה הזו היא חלוקה שרירותית לפי דרישות הבעיה. גם H_0 וגם V יכולים להיות תלויים בזמן (אבל לא חייבים להיות כאלו). בהצגת האינטראקציה, למצבים $|\psi(t)\rangle$ יש תלות בזמן של V (שרדינגר), אבל לאופרטורים יש תלות בזמן של H_0 (הייזנברג).

נניח ש־ $[H_0,V]=0$. אז הצגת האינטראקציה, (מסומנת ב־I)

$$\begin{aligned}|\psi\rangle_I &= e^{iVt/\hbar}|\psi\rangle_s\\ \hat{A}_I &= e^{iH_0t/\hbar}\hat{A}_s e^{-iH_0t/\hbar}\\ \hat{\rho}_I &= e^{iVt/\hbar}\hat{\rho}_s(s)e^{-iVt/\hbar}\end{aligned}$$

הערה 2.1 לא בהכרח מתקיים: $\left\langle \psi_I|\hat{A}_I(t)|\psi_I\right\rangle = \left\langle \psi_s(t)|\hat{A}_s|\psi_s(t)\right\rangle$.

משוואות התנועה יהיו:

$$\frac{\partial}{\partial t}A_I \equiv -\frac{i}{\hbar}[A_i, H_0]$$

והמצבים בהצגת האינטראקציה, יהיו

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_I = -\frac{i}{\hbar}V|\psi\rangle_I$$

ומשוואת התנועה עבור מטריצת הצפיפות היא

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_I = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{V}, \hat{\rho}_I\right]$$

---

[9] 16.03.2010

הצגת האינטראקציה – תוספת מאוחרת [10] נרשום את ההמילטוניאן בצורה:

$$H = H_0 + V$$

תחת ההנחות ש־H_0, V לא תלויים בזמן, ו־$[H_0, V] = 0$.

בהצגת האינטראקציה, נגדיר כל אופרטור שתלוי בזמן על ידי טרנספורמציה אוניטרית, כך שהאופרטור הזה מתנהג לפי H_0 בלבד:

$$A_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A_s(0) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

המצבים מתפתחים בזמן לפי V בלבד:

$$|\psi\rangle_I ; \qquad \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = -\frac{i}{\hbar} V_I(t) |\psi(t)\rangle_I$$

בנוטציות הרגיליות, נוכל לכתוב:

$$|\psi(t)\rangle_I = U_I(t,0)|\psi(0)\rangle_s$$

כאשר אופרטור האבולוציה,

$$U_I(t,0) = \mathcal{P}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t' V_i(t')\right]$$

ו־$\mathcal{P}$ אופרטור סידור־בזמן. ובהצגת האינטראקציה, V נתון על ידי

$$V_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V_s(0) e^{-iH_0 t/\hbar}$$

בזמן $t = 0$,

$$V_S(0) \equiv V$$

ומאחר ו־ $[H_0, V] = 0$, נקבל ש־

$$V_I(t) = V \implies U_I(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Vt}$$

ונקבל, את פונקציית הגל בהצגת האינטראקציה:

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{-iiVt/\hbar}|\psi\rangle_s$$

2.1.3 פונקציה (התפלגות) Wigner

ויגנר הציעה דרך לתאר חלקיקים קוונטיים כפונקציות ממשיות, תחת פונקציות־גל מרוכבות.

מרחב פאזה נכתוב המילטוניאן מהצורה:

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

במכניקה קלאסית, ניתן לתאר את התנועה של המערכת כתנועה במרחב פאזה, שניתן לתאר באמצעות שתי קוארדינטות קאנוניות (x,p) (באופן כללי, עבור N דרגות חופש, $2N$ קוארדינטות קאנוניות). במישור $p - x$, נוכל לתאר את ההתפתחות בזמן של המערכת באמצעות ההמילטוניאן. במקרה של שתי קוארדינטות, ההגדרה של **פונקציית ויגנר** היא

$$\boxed{W(x,p) \equiv \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\, e^{-i\frac{px'}{\hbar}}\left\langle x + \frac{x'}{2}\right|\hat{\rho}\left|x - \frac{x'}{2}\right\rangle}$$

[10] 23/03/2010, אבל אני חושב שזה צריך לבוא כאן

זוהי התמרת פורייה, לפי התנע, של אלמנטי מטריצה לא־אלכסונים של מטריצת צפיפות (קוהרנטיות). הפונקציה הזו היא פונקציה ממשית: נסמן

$$\rho_r(x,x') \equiv \left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\hat{\rho}\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle$$

אזי, מכיוון ש־ $\hat{\rho}$ אופרטור הרמיטי,

$$\rho_r(x,x') = \rho_r^{\star}(x,-x')$$

עקב הזהות הזו, ומכיוון שהאינטגרל הוא על כל הישר (סימטרי), אז הפונקציה $W(x,p)$ היא ממשית.
ברור יותר שזו פונקציה ממשית עבור מצבים טהורים: כאן, ניתן לכתוב את $\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$, ואז הפונקציה היא

$$W(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\, e^{-i\frac{px'}{\hbar}}\psi\left(x+\frac{x'}{2}\right)\psi^{\star}\left(x-\frac{x'}{2}\right)$$

התיאור של מערכת באמצעות פונקציית ויגנר שקול לתיאור באמצעות אופרטור צפיפות, ומאחר ו־$\hat{\rho}$ מתאר את המערכת באופן מלא, כך גם $W(x,p)$.

צפיפות הסתברות מותנית פונקציית ויגנר אינה מהווה צפיפות הסתברות (למשל, צפיפות הסתברות במרחב פאזה), מאחר והיא גם שלילית בהרבה מקומות. אבל, כל אינטגרל של W לפי אחד ממשתניה, x או p, היא צפיפות הסתברות שולית (Marginal) של המשתנה השני , אך W עצמה אינה פונקציית הסתברות.
נרצה להראות שמתקיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\, W(x,p) = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle$$

הוכחה: נגדיר

$$\delta(x') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\, e^{ipx'/\hbar}$$

אזי,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\, W(x,p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}x'\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\rho\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p e^{-ipx'/\hbar}\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\rho\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle\delta(x') = \langle x|\rho|x\rangle\end{aligned}$$

באותה מידה, ניתן להוכיח ש־

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ (x,p) = \langle p|\hat{\rho}|p\rangle$$

■

כמו כן, יש נירמול, מתקיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p\, W(x,p) = 1$$

הערה 2.2 ניתן לבצע גם אינטגרל בכל כיוון אחר במרחב הפאזה. אם נעשה אינטגרל על פונקציית ויגנר בכל כיוון אחר במרחב הפאזה, נקבל גם כן צפיפות הסתברות. כמו כן, גם אינטגרל כזה על כל עקום שמוגדר מ־$-\infty$ ל־∞.

חפיפה נתונות שתי פונקציות ויגנר, $W_1(x,p)$ ו־$W_2(x,p)$, אזי נכתוב

$$\begin{aligned}
&\iint_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,W_1(x,p)\,W_2(x,p)\\
&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\int\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}x''\,e^{ip\left(x'+x''\right)/\hbar}\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\rho_1\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle\left\langle x+\frac{x''}{2}\middle|\rho_2\middle|x-\frac{x''}{2}\right\rangle
\end{aligned}$$

אינטגרל על $e^{ip\left(x'+x''\right)/\hbar}$ נותן פונקציית δ , ולכן, מאינטגרציה עליה, נקבל עוד פקטור $\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{-1}$ ונזהה את $x'=-x''$, ולכן,

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}x\mathrm{d}x'\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\rho_1\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle\left\langle x-\frac{x'}{2}\middle|\rho_2\middle|x+\frac{x'}{2}\right\rangle$$

נבצע החלפה, $x\to x+\frac{x'}{2}$ ו־$x'\to x'-x$, ונקבל את האינטגרל,

$$\begin{aligned}
&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)\int\mathrm{d}x\mathrm{d}x'\,\langle x'|\rho_1|x\rangle\,\langle x|\rho_2|x'\rangle\\
&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}x\,\langle x|\rho_1\rho_2|x\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{Tr}\left(\rho_1\rho_2\right)
\end{aligned}$$

שטח עבור אופרטור צפיפות, מתקבל $\mathrm{Tr}\rho^2\le 1$. עבור החפיפה, מצאנו,

$$\mathrm{Tr}\rho^2=2\pi\hbar\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,W^2(x,p)\le 1$$

לכן,

$$\boxed{\left[\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,W^2(x,p)\right]^{-1}\ge 2\pi\hbar}\tag{10}$$

זהו **חוק שטח**, זהו השטח שפונקציית ויגנר תופסת במרחב הפאזה.

דוגמא: פונקציית Gauss נכתוב את פונקציית ויגנר כגאוסיאן בשני משתנים , $z_\alpha=(x,p)$, א זי

$$W(x,p)=\frac{1}{2\pi\sqrt{\det S_\alpha}}\exp\left(-\frac{1}{2}z_\alpha\left(S^{-1}\right)_{\alpha\beta}z_\beta\right)$$

כאשר המטריצה $S_{\alpha\beta}$, מטרית הקו־וריאנס, מתוארת על ידי:

$$\left(S_{\alpha\beta}\right)=\frac{1}{2}\left(\left\langle\left[z_\alpha,z_\beta\right]_+\right\rangle\right)=\begin{pmatrix}V_x & C_{xp}\\ C_{xp} & V_p\end{pmatrix}$$

והאנטי־קומוטטור, $[a,b]_+=ab+ba$, ו־$V_x=\left\langle x^2\right\rangle=\mathrm{Tr}\left(\rho x^2\right)$, $V_p=\left\langle p^2\right\rangle$, ו־$C_{xp}=\frac{1}{2}\langle xp+px\rangle$ ו־

$$\left(S^{-1}\right)_{\alpha\beta}=\frac{1}{V_xV_p-C_{xp}^2}\begin{pmatrix}V_p & -C_{xp}\\ -C_{xp} & V_x\end{pmatrix}$$

עבור הפונקציה הזו,

$$\begin{aligned}
&\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,x^2W(x,p)=\left\langle\hat{x}^2\right\rangle=\mathrm{Tr}\left(\hat{x}^2\rho\right)\\
&\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,p^2W(x,p)=\left\langle\hat{p}^2\right\rangle\\
&\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,xpW(x,p)=C_{xp}=\frac{1}{2}\langle\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\rangle
\end{aligned}$$

כאשר שני הביטויים הראשונים הם זהויות עבור פונקציות ויגנר כלליות, מאחר ואם נבצע אינטגרציה על המשתנה השני, נקבל צפיפות הסתברות. הביטוי השלישי נכון רק עבור גאוסיאן.

נחשב את השטח:

$$\iint \mathrm{d}x\mathrm{d}p\, W^2\left(x,p\right) = \frac{1}{4\pi\sqrt{\det S_{\alpha\beta}}} = \frac{1}{4\pi\sqrt{V_xV_p - C_{xp}^2}}$$

לפי חוק השטח, עבור המצב הגואסיאני,

$$\boxed{V_xV_p - C_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}}$$

זוהי הצגה של עקרון אי הודאות. בדרך כלל, עקרון אי־הודאות היא מהצורה $V_xV_p \geq \frac{\hbar^2}{2}$. כאן, מקבלים אפילו ביטוי חזק יותר מעקרון אי־הודאות, ונקבל שוויון עבור מצב טהור. זה נובע מכך שהמצב הגאוסיאני הוא המצב הכי קרוב למצב קלאסי. ו־

$$\boxed{\mathrm{Tr}\rho^2 = \frac{\hbar/2}{\sqrt{V_XV_p - C_{xp}^2}}} \leq 1$$

סופרפוזיצה של גאוסיאן נקח מצב שהוא סופרפוזיצה של גאוסיאן:

$$\psi\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\left(2\pi\sigma^2\right)^{1/4}}\left[e^{-\frac{\left(x-x_0\right)}{4\sigma^2}} + e^{-\frac{\left(x+x_0\right)^2}{4\pi\sigma^2}}\right]$$

אלו הן שתי חבורות גלים בעלות רוחב זהה, הממוקמות ב־$\pm x_0$. אנחנו יודעים לטפל בחבורות הגלים הללו באמצעות מכניקת קוונטים "רגילה", לראות התאבכות בינהם, וכיו"ב. פונקציית ויגנר של מצב זה היא גאוסיאן,

$$W\left(x,p\right) = \frac{1}{2\pi\hbar^2}e^{-2\sigma^2p^2/\hbar^2}\left[e^{-\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{\left(x+x_0\right)^2}{2\sigma^2}} + 2e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\cos\left(2px_0/\hbar\right)\right]$$

פה, יש לנו פונקציה המוגדרת במרחב פאזה, $x-p$. היא סופרפוזיציה של שתי חבילות גלים גאוסיאניות, עם איבר התאבכון בינהם – ה־$\cos$. פונקציית ויגנר לא ניתנת לפירוש כצפיפות הסתברות, מאחר והיא שלילית חלק מהזמן. היא שלילית לא בגלל ההגדרה, אלא בגלל איבר ההתאבכות – בגלל מכניקה קוונטית.

אם מישהו במקרה צייר את הגאוסיאנים הללו ויכול לסרוק ולשלוח לי, אני ronen@tx.technion.a

אם נחשב את האוכלוסיה,

$$\begin{aligned}\left\langle x\right|\rho\left|x\right\rangle &= \int \mathrm{d}p\, W\left(x,p\right)\\ &\cong \frac{1}{2\sqrt{2\pi\sigma^2}}\left[e^{-\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2}} + e^{-\frac{\left(x-x_0\right)^2}{2\sigma_0}}\right]\\ \left\langle p\right|\rho\left|p\right\rangle &= \int \mathrm{d}x\, W\left(x,p\right) = \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}\hbar}e^{-\frac{2\sigma^2p^2}{\hbar^2}}\cos^2\left(2px_0/\hbar\right)\end{aligned}$$

כל אחד מהביטויים הללו הוא צפיפות הסתברות. אם נסתכל על צפיפות הסתברות בהצגת־מקום, נקבל סופרפוזיציה של שני גאוסיאנים, ללא התאבכות. אם נסתכל על האוכלוסיה בהצגת תנע, נקבל את איבר ההתאבכות בין שתי חבילות הגלים.

בעיה שנשארה בתמונה הזו: איך ניתן להציג ערך תצפית של אופרטור באופן כללי, בשפת־ויגנר.

2.1.4 התאמת Weyl וסידור של אופרטורים[11]

כללי Weyl: במרחב פאזה, (x,p),

$$e^{i\left(\Pi_xx+\Pi_pp\right)/\hbar}$$

[11] 21/03/2010

נרצה לדעת אם ניתן להגדיר לפונקציה זו אופרטור, המוגדר על ידי

$$\hat{M}\left(\Pi_x,\Pi_p\right)\equiv e^{i\left(\Pi_x\hat{x}+\Pi_p\hat{p}\right)/\hbar}$$

זהו האופרטור אופייני (Characteristic operator) . התמרת פורייה תהיה

$$F\left(x,p\right)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\Pi_x\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\Pi_p\,\tilde{F}\left(\Pi_x,\Pi_p\right)e^{i\left(\Pi_x x+\Pi_p p\right)/\hbar}$$

מהתמרת הפורייה הקלאסית, נרצה להגדיר אופרטור על ידי אינטגרציה מול הקרקטר,

$$\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\equiv\frac{1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}\Pi_x\mathrm{d}\Pi_p\tilde{F}\left(\Pi_x,\Pi_p\right)e^{i\left(\Pi_x\hat{x}+\Pi_p\hat{p}\right)/\hbar}$$

זוהי **התאמת Weyl**. ברגע שהגדרנו התאמה מהסוג הזה, ניתן לתאר באופן חד־חד ערכי כל פונקציה במרחב פאזה קלאסי, לפונקציה קוונטית – פונקציה של אופרטורים:

$$\begin{aligned}&F\left(x,p\right)\mapsto\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\\&\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2\int\mathrm{d}\Pi_x\mathrm{d}\Pi_p\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{d}pF\left(x,p\right)e^{i\left[\Pi_x\left(\hat{x}-x\right)+\Pi_p\left(\hat{p}-p\right)\right]/\hbar}\end{aligned}$$

חישוב ערך התצפית של אופרטור נרצ לחשב את ערך התצפית של אופרטור כללי, $\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)$ עבור מצב כלשה והמתואר בהצגת וויל,

$$\left\langle\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^2}\int\mathrm{d}\Pi_x\mathrm{d}\Pi_p\int\mathrm{d}x\mathrm{d}p\,F\left(x,p\right)M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)e^{-i\left(\Pi_x x+\Pi_p p\right)/\hbar}$$

כאשר

$$M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)\equiv\left\langle\hat{M}\left(\Pi_x,\Pi_p\right)\right\rangle=\left\langle e^{i\left(\Pi_x\hat{x}+\Pi_p\hat{p}\right)/\hbar}\right\rangle$$

זוהי הפונקציה האופיינית (Characteristic function). נשתמש בזהות ..BGCH[12],

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}\left[\hat{A},\hat{B}\right]}$$

כאשר עבור הקומוטטור, נתונות הזהויות, $\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\left[\hat{B},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0$ ועבור $\left[\hat{x},\hat{p}\right]=i\hbar$. נשתמש בזהויות הנ"ל

$$e^{i\left(\Pi_x\hat{x}+\Pi_p\hat{p}\right)}=e^{i\Pi_p\frac{\hat{p}}{2\hbar}}e^{i\Pi_x\frac{\hat{x}}{\hbar}}e^{i\Pi_p\frac{\hat{p}}{2\hbar}}$$

לכן,

$$M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)=\mathrm{Tr}\left(e^{i\Pi_p\hat{p}/2\hbar}e^{i\Pi_x\hat{x}/\hbar}e^{i\Pi_p\hat{p}/2\hbar}\hat{\rho}\right)$$

היות ובתוך ה־Tr ניתן להחליף באין האופרטורים, נוציא מקדמים מספריים ונחשב את העקבה:

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x e^{i\Pi_x x/\hbar}\left\langle x\left|e^{i\pi_p\hat{p}/2\hbar}\hat{\rho}e^{i\Pi_p\hat{p}/2\hbar}\right|x\right\rangle$$

נשתמש בכך ש־ $e^{i\hat{p}x_0/\hbar}\left|x\right\rangle=\left|x-x_0\right\rangle$, כלומר, אקספוננט של התנע פועל על $\hat{x}$ כהזזה. לכן,

$$M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)=\int\mathrm{d}x\,e^{i\Pi_x x/\hbar}\left\langle x+\frac{\Pi_p}{2}\left|\hat{\rho}\right|x-\frac{\Pi_p}{2}\right\rangle$$

[12] ראה רשימות ב"חבורות לי"

לכן, נוכל לעשות טרנספורם הפוך, ולקבל

$$\left\langle x+\frac{\Pi_p}{2}\middle|\hat{\rho}\middle|x-\frac{\Pi_p}{2}\right\rangle=\int \mathrm{d}\Pi_x\, M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)e^{-i\Pi_x x/\hbar}$$

נפעיל טרנספורם פורייה על שני האגפים: $\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}\Pi_p e^{-i\Pi_p/\hbar}$, ונקבל משמאל את ההגדרה של פונקציית ויגנר:

$$W\left(x,p\right)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2\int \mathrm{d}\Pi_p\int \mathrm{d}\Pi_p\, M\left(\Pi_x,\Pi_p\right)e^{-i\left(\Pi_x x+\Pi_p p\right)/\hbar}$$

וביטאנו את פונקציית ויגנר כהתמרת פורייה של הפונקציה האופיינית של וויל. לכן, נקבל נוסחא לחישוב ערכי תצפית באמצעות פונקציית ויגנר:

$$\boxed{\left\langle \hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\,F\left(x,p\right)W\left(x,p\right)}\tag{11}$$

התאמת וייל הפוכה נראה כיצד ניתן לבטא את הפונקציה הקלאסית $F\left(x,p\right)$, באמצעות אלמנטי המטריצה של האופרטור $\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)$. נרצה לחשב את ערך התצפית של $\hat{F}$ "ישירות":

$$\begin{aligned}\left\langle \hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle&=\mathrm{Tr}\left(\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\hat{\rho}\right)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{d}x'\,\mathrm{Tr}\left(\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\left|x'\right\rangle\left\langle x'\right|\hat{\rho}\left|x\right\rangle\left\langle x\right|\right)\\&=\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}x'\left\langle x\middle|\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\,|\,\hat{\rho}\,|\,x\right\rangle\end{aligned}$$

נשתמש בטרנספורמציה $x'\mapsto x+x'$, ו־ $x\mapsto x-\frac{x'}{2}$, ונקבל,

$$\left\langle \hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\left\langle x-\frac{x'}{2}\middle|\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\middle|x+\frac{x'}{2}\right\rangle\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\hat{\rho}\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle$$

מ־(11), נקבל, על ידי כתיבה של W כהתמרת פורייה של $\hat{\rho}$את הביטוי:

$$\left\langle \hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\right\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}p\int \mathrm{d}x'\,F\left(x,p\right)\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\hat{\rho}\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle e^{-ipx'/\hbar}$$

לכל ρ. אם שני הביטויים האחרונים עבור $\left\langle\hat{F}\right\rangle$ שווים לכל $\hat{\rho}$, אז גם יתר האינטגרנד שווה:

$$\left\langle x-\frac{x'}{2}\middle|\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\middle|x+\frac{x'}{2}\right\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,F\left(x,p\right)e^{-ipx'/\hbar}$$

נבצע התמרת פרויה הפוכה, ונחליף $x'\mapsto -x'$, ונקבל

$$\boxed{F\left(x,p\right)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\left\langle x+\frac{x'}{2}\middle|\hat{F}\left(\hat{x},\hat{p}\right)\middle|x-\frac{x'}{2}\right\rangle e^{-ipx'/\hbar}}\tag{12}$$

וזוהי **התאמת וויל**.
ביטויים (11) ו־(12) מאפשרים לנו לבצע כל חישוב קוונטי באמצעות פונקציית ויגנר.

2.1.5 דרגות חופש רבות – שזירות קוונטית

נסתכל על "שני חלקיקים" כלומר, דרגות חופש שונות. לדוגמא,

- ספין + מרכז מסה של אטום.
- ספין + התנהגות מרחבית של פוטון.

כלומר, לא בהכרח מדובר על שני חלקיקים נפרדים באמת.

עבור שני חלקיקים כאלו, (A,B) , עם מרחבי הילברט מתאימים, ניתן לתאר כל מצב של המערכת על ידי מצבים מסוג

$$|\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \equiv |\psi\rangle_A |\psi\rangle_B \equiv |\psi_A, \psi_B\rangle$$

נוכל להשתמש בבסיס של מרחב הילברט עבור כל אחד מהוקטורים הללו, ולכתוב

$$|\psi\rangle_A = \sum_\alpha c_\alpha^{(A)} |\alpha\rangle_A$$
$$|\psi\rangle_B = \sum_\beta c_\beta^{(B)} |\beta\rangle_B$$

עבור כל מצב דו־חלקיקי ψ , ניתן לכתוב:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\alpha_A \beta_b\rangle$$
$$c_{\alpha\beta} = c_\alpha^{(A)} c_\beta^{(B)}$$

כאשר בסימון זה, $[\alpha\beta]$ הוא אינדקס־רץ יחיד, ולכן, בנוטציה זו, $|\psi\rangle$ הוא וקטור ולא טנזור.

הערה 2.3 אופרטור הצפיפות ניתן לרישום כמכפלה טנזורית של שני אופרטורי צפיפות, למעשה,

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^{(A)} \otimes \hat{\rho}^{(B)}$$

$$\rho_{\alpha\mu\beta\mu} \equiv \rho_{\alpha\beta}^{(A)} \rho_{\mu\nu}^{(B)}$$

אבל נרצה להתייחס אל $\hat{\rho}$ כאל מטריצה יחידה: $(ab) \to [\alpha\mu\beta\nu]$, עם שני אינדקסים בלבד.

שזירות נרשום במערכת שני חלקיקים,

$$|\psi\rangle = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B$$

אם נוכל לרשום את המצב שלנו בצורה כזו, כמכפלה טנזורית של שני מצבים ממרחבי הילברט שונים, המצבים שלנו בלתי תלויים (או פריקים). כאשר לא ניתן לכתוב מצב של שני חלקיקים כמכפלה טנזורית של שני מצבים חד־חלקיקים, המצב נקרא שזור.

נרצה לבטא את ההבדלה הזו עבור מטריצת צפיפות: המצב הוא פריק כאשר ניתן לכתוב את מטריצת הצפיפות בצורה:

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha P_\alpha \rho_\alpha^{(A)} \otimes \rho_\alpha^{(B)}$$

(כאשר P_α היא ההסתברות למצוא את המערכת במצב α). עבור מטריצת צפיפות נתונה $\hat{\rho}$ של שני חלקיקים, כיצד ניתן לדעת האם היא מתאימה למצב שזור או פריק? השאלה הזו, האם המצב הנתון הוא פריק או לא, היא בעיה ב־$N-P$, כלומר, אינה ניתנת לחישוב בזמן פולינומיאלי.

2.1.6 שיבוט של מצבים קוונטים

משפט 2.4 (No-cloning)

בהנתן מערכת קוונטית יחידה במצב נתון. לא ניתן, על ידי טרנספורמציה אוניטרית, להעתיק את מצב המערכת לחלקיק אחר.

דוגמא חלקיק מוגדר על ידי מערכת של שתי רמות אנרגיה: $\left|0\right\rangle$ו־$\left|1\right\rangle$. חלקיק A יכול להיות במצב $\left|0\right\rangle_A$או $\left|1\right\rangle_A$. חלקיק B במצב $\left|0\right\rangle_B$. אזי, נרצה שטרנספורמציה אוניטרית U תבצע:

$$U\left|0\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B=\left|0\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B$$
$$U\left|1\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B=\left|1\right\rangle_A\left|1\right\rangle_B$$

בהנתן מצב של חלקיק A , בסופרפוזיצה של שתי הרמות:

$$\left|\psi\right\rangle_A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|0\right\rangle_A+\left|1\right\rangle_B\right]$$

נרצה להעתיק את המצב של A לחלקיק B:

$$U\left|\psi\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|0\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B+\left|1\right\rangle_A\left|1\right\rangle_B\right]$$

זהו מצב שזור (נקרא מצב בל או "החתול של שרדינגר"). אבל המצב הרצוי הוא

$$\begin{aligned}U\left|\psi\right\rangle_A\left|0\right\rangle_B&=\left|\psi\right\rangle_A\left|\psi\right\rangle_B\\&=\frac{1}{2}\left(\left|0\right\rangle_A+\left|1\right\rangle_A\right)\otimes\left(\left|0\right\rangle_B+\left|1\right\rangle_B\right)\end{aligned}$$

שהוא מצב פריק. הבעיה היא שכל טרנספורמציה אוניטרית מסוג זה, היא טרנספורמציה אוניטרית לא־מקומית. הטרנספורמציה U שהצגנו (זו שקיבלנו, לא זו שרצינו..) היא שער CNOT.

בהנתן אוסף אינסופי של חלקיקים באותו מצב $\left|\psi\right\rangle_A$, ניתן למדוד אותו במדויק, ולכן להעתיק אותו לחלקיק אחר כלשהו. המשפט נכון רק עבור עותק אחד של החלקיק. עבור מספר סופי של מצבים $\left|\psi\right\rangle_A$, נוכל לקבל אינפורמציה חלקית אודות המצב, ועבור מספר גדול מספיק של מצבים נוכל לומר שהמצב המתקבל הוא "קרוב מספיק". אבל המשפט מדבר על שכפול מדויק של מצב אחד – וזה לא יתכן.

2.1.7 קריטריון Peres-Horodecki[2]

הקריטריון מכונה גם קריטריון PPT , Partial Positive Transpose.

בהנתן אופרטור צפיפות, נרצה לדעת האם הוא מתאר מזב פריק, או מצב שזור. באופן כללי, אין קריטריון כזה, אך קריטריון פרס־הורודצקי הוא תנאי הכרחי למצב פריק. התברר, שעבור מצבים גאוסיאנים, קריטריון פרס־הורודצקי הוא תנאי הכרחי **ומספיק** לפריקות של מצב.

עבור מצב פריק, ניתן לכתוב את אופרטור הצפיפות כמכפלה טרנזורית של שני אופרטורי צפיפות של כל אחד מהחלקיקים:

$$\rho=\rho^{(A)}\otimes\rho^{(B)}$$

עבור אחת מהמערכות, נבצע שיחלוף על המצב (B), ונגדיר את:

$$\tilde{\rho}\equiv\rho^{(A)}\otimes\left(\rho^{(B)}\right)^T$$

מאחר ו־$\rho^{(B)}$ אופרטור הרמיטי, מתקיים,

$$\left(\rho^{(B)}\right)^T=\left(\rho^{(B)}\right)^\star$$

האם $\tilde{\rho}$ הוא אופרטור צפיפות? אופרטור צפיפות צריך לקיים את תכונת ה־Semi-Group, $\mathrm{Tr}\tilde{\rho}=1$, והערכים העצמיים שלו צריכים להיות אי־שליליים. הצמדה קומפלקסית של מטריצה (הרמיטית) לא משנה את הספקטרום של המטריצה, ולכן אם $\rho^{(B)}$ אופרטור צפיפות, אז גם $\left(\rho^{(B)}\right)^T$ אופרטור צפיפות, ולכן גם $\tilde{\rho}$. אם נקיים את התהליך ליצירת $\tilde{\rho}$ ולבסוף נקבל ש־$\tilde{\rho}$ אינו אופרטור צפיפות, אזי המצב בהכרח שזור.

כל הדברים נכונים גם עבור מצב־פריק כללי יותר:

$$\rho=\sum_\alpha P_\alpha\rho_\alpha^{(A)}\otimes\rho_\alpha^{(B)}$$

אופרטור צפיפות ניתן לתאר על ידי האינדקסים,

$$\rho_{\alpha\mu\beta\nu}=\rho_{\alpha\beta}^{(A)}\rho_{\mu\nu}^{(B)}\implies\tilde{\rho}_{\alpha\mu\beta\nu}=\rho_{\alpha\beta}^{(A)}\rho_{\nu\mu}^{(B)}$$

ונרצה לבדוק האם למטריצה המתקבלת יש ערכים עצמיים חיוביים בלבד.

דוגמא נקח מצב שזור:

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|0_A0_B\rangle+|1_A1_B\rangle\right]$$

את מטריצת הצפיפות המתאימה למצב, לא ניתן לכתוב כמכפלה של שתי מטריצות צפיפות חד־חלקקיות. אזי,

$$\rho=\frac{1}{2}\left(|00\rangle\langle 00|+|11\rangle\langle 11|+|00\rangle\langle 11|+|11\rangle\langle 00|\right)$$
$$\tilde{\rho}=\frac{1}{2}\left(|00\rangle\langle 00|+|11\rangle\langle 11|+|01\rangle\langle 10|+|10\rangle\langle 01|\right)$$

נרצה לבנות את המטריצה כדי לחשב את הספקטרום שלה: זוהי מטריצה 4×4, ונצטרך להגדיר את האינדקסים שלה:

$$\tilde{\rho}=\frac{1}{2}\left(\begin{array}{c|cccc} & (00) & (01) & (10) & (11)\\ \hline (00) & 1 & 0 & 0 & 0\\ (01) & 0 & 0 & 1 & 0\\ (10) & 0 & 1 & 0 & 0\\ (11) & 0 & 0 & 0 & 1\end{array}\right)$$

למטריצה יש שני ערכים עצמיים: $\pm\frac{1}{2}$. במקום הספקטרום, אפשר לחשב את הדטרמיננטה: $\det\tilde{\rho}=-\left(\frac{1}{2}\right)^4$, ולכן יש לפחות ערך עצמי 1 לא חיובי, ולכן $\tilde{\rho}$ אינה מטריצת צפיפות, והמצב המתואה על ידי $|\psi\rangle$ אינו מצב פריק.

בהצגת ויגנר נבחן האם יש פירוש מעניין של PPT בהצגת ויגנר? עבור פונקציית ויגנר פשוטה, $W\left(x,p\right)$, נבחן השפעת הטרנספורמציה:

$$PPT:\psi\left(x\right)\to\psi^{\star}\left(x\right)$$

במכניקת קוונטים, הצמדה קומפלקסית היא היפוך זמן. כיצד היפוך זמן משפיע על פונקציית ויגנר?

$$PPT:W\left(x,p\right)\to W\left(x,-p\right)$$

כלומר, הופך את כיוון התנע וקובע את המקום.

עבור מערכת מסובכת יותר, PPT יחליף את הכיוון רק עבור אחת מהמערכות:

$$W\left(x_1,x_2,p_1,p_2\right)\xrightarrow{PPT}\tilde{W}\left(x_1,x_2,p_1,-p_2\right)\tag{13}$$

ונרצה לבחון האם $\tilde{W}$ היא פונקציית ויגנר. פונצית ויגנר מקיימת משפט שטח, מנוסחא (10):

$$\left[\int\mathrm{d}x^N\int\mathrm{d}p^N W^2\left(x_\alpha,p_\alpha\right)\right]^{-1}\geq\left(2\pi\hbar\right)^N$$

עבור מצב גאוסיאני,

$$W\left(z_\alpha\right)=\frac{1}{\left(2\pi\right)^N\sqrt{\det S_{\alpha\beta}}}\exp\left[-\frac{1}{2}z_\alpha S_{\alpha\beta}z_\beta\right]$$

כאשר $z_\alpha=\left(x_1,x_2,\ldots,x_N,p_1,p_2,\ldots,p_N\right)$ ו־$S_{\alpha\beta}\equiv\frac{1}{2}\left\langle\left[\hat{z}_\alpha,\hat{z}_\beta\right]_+\right\rangle$, ומשפט השטח שקול ל־$\det\left(S_{\alpha\beta}\right)\geq\left(\frac{\hbar^2}{4}\right)^N$.

נבחן האם זה מתקיים עבור מצב גאוסיאני של שני חלקיקים, מביטוי (13). נכתוב את $S_{\alpha\beta}$ עם $+$ ו־$-$ בלבד:

$$S_{\alpha\beta}=\begin{pmatrix}+&+&+&+\\+&+&+&+\\+&+&+&+\\+&+&+&+\end{pmatrix}\xrightarrow[p_2\to-p_2]{PPT}\tilde{S}_{\alpha\beta}=\begin{pmatrix}+&+&+&-\\+&+&+&-\\+&+&+&-\\-&-&-&+\end{pmatrix}$$

הטרנספורמציה הזו לא שינתה את הדטרמיננטה של המטריצה, ולכן, משפט השטח אינו מאפשר לברור בין מצב פריק למצב שאינו פריק.

עקרון אי־הודאות המוכלל ממכניקה אנליטית, עבור $2N$ קוארדינטות קאנוניות, (z_α) , באופן כללי, מתקיים

$$[z_\alpha, z_\beta] = i\hbar\Omega_{\alpha\beta}$$

והמטריצה $\Omega_{\alpha\beta} \equiv \begin{pmatrix} 0 & I_N \\ -I_N & 0 \end{pmatrix}$, מכונה Co-Symplectic two-form. המטריצה הזו מקיימת, $-(\Omega_{\alpha\beta}) = (\Omega_{\alpha\beta})^T = (\Omega_{\alpha\beta})^{-1}$. באמצעות מבנה זה, ניתן להגדיר את עקרון אי־הודאות המוכלל, על ידי:

$$\boxed{S_{\alpha\beta} + i\frac{\hbar}{2}\left(\Omega_{\alpha\beta}\right) \geq 0} \tag{14}$$

(כאשר מטריצה אי־שלילית היא מטריצה שכל הערכים העצמיים שלה הם אי־שליליים).

דוגמא עבור הקוארדינטות (x,p) , נבל את המטריצה:

$$S_{\alpha\beta} + i\frac{\hbar}{2}\Omega_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} V_x & C_{Xp} + i\frac{\hbar}{2} \\ C_{xp} - i\frac{\hbar}{2} & V_p \end{pmatrix}, \qquad V_x \equiv \left\langle x^2 \right\rangle, V_p \equiv \left\langle p^2 \right\rangle$$

כאשר הערכים העצמיים של המטריצה צריכים להיות חיוביים, כלומר,

$$\frac{1}{2}\left(V_x + V_p \pm \sqrt{\left(V_x - V_p\right)^2 + 4C_{xp}^2 + \hbar^2}\right) \geq 0$$

לכן, הדרישה היא

$$\boxed{V_xV_p - C_{xp}^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}}$$

עבור המקרה הגיאוסיאני, זה מתקבל כמשפט שטח, אך תוצאה זו תקפה למקרה כללי יותר. במקרה והמטריצה S היא אלכסונית, האיברים $C_{xp} = 0$, ונקבל את עקרון אי־הודאות ה"רגיל".