УДК 621.373

ПЕРЕХОДЫ В ДВУХМОДОВЫХ СИСТЕМАХ И ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

К. В. Вершинин, В. И. Манько

Получена формула для вероятности перехода между уровнями двухмодовой системы в виде интеграла перекрытия положительных вероятностей, описывающих квантовые состояния в методе симплектической томографии. Рассмотрен пример двумерного осциллятора.

В [1 – 3] было введено вероятностное представление в квантовой механике, являющееся обобщением работы [4], при котором функция Вигнера [5] заменяется распределением вероятности координат частицы в ансамбле систем отсчета, повернутых с изменением масштаба в фазовом пространстве системы (подобная классической формулировка квантовой механики). В [3] обсуждалась проблема вычисления вероятностей перехода между квантовыми состояниями для одномодовых систем в рамках предложенной классической формулировки.

Целью настоящей работы является обобщение формулы для вероятностей перехода, полученной для одномодовых систем, на случай двухмодовых (многомодовых) систем. Мы рассмотрим, как пример, двумерный осциллятор, частоты которого меняются скачком. Эта модель может описывать вибронный переход в трехатомной молекуле, генерирующий сжатые состояния [6].

Как известно, вероятность перехода системы из чистого состояния 1 с функцией Вигнера $W_1(\vec{q},\vec{p})$ в некоторое другое чистое состояние 2 с функцией Вигнера $W_2(\vec{q},\vec{p})$ задается формулой

$$P_{12} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} W_1(\vec{q},\vec{p}) W_2(\vec{q},\vec{p}) d\vec{q} d\vec{p}. \qquad (1)$$

Найдем теперь связь этой вероятности перехода с распределениями вероятностей начального $w_1(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$ и конечного $w_2(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$ состояний, написанными для случайной величины $x=\vec{\mu}\vec{q}+\vec{\nu}\vec{p}$, которые полностью задают квантовые состояния [1 – 3]. Поскольку распределения вероятностей зависят от дополнительных параметров, их называют маргинальными распределениями. Маргинальное распределение $w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$ величины x задается формулой

$$w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int W(\vec{q},\vec{p})\exp[-ik(x-\vec{\mu}\vec{q}-\vec{\nu}\vec{p})]dkd\vec{q}d\vec{p}, \tag{2}$$

причем маргинальное распределение $w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$ положительно и удовлетворяет условию нормировки в виде

$$\int w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})dx=1.$$

Нам необходимо выразить функцию Вигнера $W(\vec{q},\vec{p})$ через маргинальное распределение $w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$. Для этого применим преобразование Фурье к уравнению (2) и после несложных преобразований получим

$$W(-\vec{m}/z,-\vec{n}/z)=(2\pi)^3z^4w_f(z,\vec{m},\vec{n}), \tag{3}$$

где $w_f(z,\vec{m},\vec{n})$ – преобразование Фурье маргинального распределения $w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$, задаваемое формулой

$$w_f(z,\vec{m},\vec{n})=\frac{1}{(2\pi)^5}\int w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})exp(ixz+i\vec{\mu}\vec{m}+i\vec{\nu}\vec{n})dxd\vec{\mu}d\vec{\nu}.$$

Положив в формуле (3) $\vec{m}=\vec{q}$, $\vec{n}=\vec{p}$ и $z=-1$, получим выражение функции Вигнера $W(\vec{q},\vec{p})$ через маргинальное распределение $w(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$.

Подставив выражение для функций Вигнера $W_1(\vec{q},\vec{p})$, $W_2(\vec{q},\vec{p})$, выраженных через соответствующие маргинальные распределения $w_1(x,\vec{\mu},\vec{\nu})$, $w_2(y,\vec{\mu},\vec{\nu})$ по формуле (3), в уравнение для вероятности перехода (1) и проинтегрировав по $\vec{q},\vec{p}$, после несложных преобразований получим выражение для вероятности перехода системы P_{12} из состояния 1 в состояние 2 через соответствующие маргинальные распределения

$$P_{12}=\frac{1}{(2\pi)^2}\int w_1(x,\vec{\mu},\vec{\nu})w_2(y,-\vec{\mu},-\vec{\nu})\exp(-ix-iy)dxdyd\vec{\mu}d\vec{\nu}. \tag{4}$$

Как пример рассмотрим двумерный осциллятор, частоты которого меняются скачком, то есть в моменты времени $t<0$ система имеем гамильтониан

$$H^{нач} = \frac{q_1^2}{2} + \frac{q_2^2}{2} + \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2}, \tag{5}$$

а при $t \geq 0$ имеет гамильтониан в виде

$$H^{кон} = \frac{q_1^2}{2} + \frac{q_2^2}{2} + \lambda q_1 q_2 + \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2}. \tag{6}$$

Нас будет интересовать вероятность перехода системы, вызванного скачком частот мод в момент времени $t = 0$, из основного $\mid 00, i >$ состояния для гамильтониана $H^{нач}$ также в основное $\mid 00, f >$ состояние для гамильтониана $H^{кон}$. Эту вероятность сначала посчитаем через маргинальные распределения по формуле (4), а затем, для проверки, через интеграл от произведения соответствующих волновых функций.

Для нахождения соответствующих маргинальных распределений будем исходить из функций Вигнера. Зная соответствующую функцию Вигнера $W(\vec{q}, \vec{p})$, найдем маргинальное распределение $w(x, \vec{\mu}, \vec{\nu})$ по формуле (2). Затем, зная маргинальные распределения в начальном и конечном состояниях, найдем вероятность перехода P_{12} по формуле (4).

Функция Вигнера в начальном состоянии $W_{00}^{нач}(\vec{q}, \vec{p})$ имеет вид

$$W_{00}^{нач}(\vec{q}, \vec{p}) = 4\exp(-q_1^2 - q_2^2 - p_1^2 - p_2^2). \tag{7}$$

Здесь и в дальнейшем полагаем $\hbar = 1$.

По формуле (2) соответствующее маргинанальное распределение $w_{00}^{нач}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu})$ имеем в виде

$$w_{00}^{нач}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu}) = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \exp(-\frac{x^2}{\alpha}), \tag{8}$$

где

$$\alpha = \mu_1^2 + \mu_2^2 + \nu_1^2 + \nu_2^2.$$

Аналогично для конечного состояния функция Вигнера $W_{00}^{кон}(\vec{q}, \vec{p})$ имеет вид

$$\begin{aligned} W_{00}^{кон}(\vec{q}, \vec{p}) &= 4\exp(-\tfrac{\Omega_1+\Omega_2}{2}(q_1^2 + q_2^2) - (\Omega_1 - \Omega_2)q_1 q_2)\times \\ &\times \ \exp(-\tfrac{\Omega_1+\Omega_2}{2\Omega_1\Omega_2}(p_1^2 + p_2^2) - \tfrac{\Omega_2-\Omega_1}{\Omega_1\Omega_2} p_1 p_2), \end{aligned} \tag{9}$$

где

$$\Omega_1 = \sqrt{1+\lambda}\,,\ \Omega_2 = \sqrt{1-\lambda},$$

а маргинальное распределение $w_{00}^{кон}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu})$:

$$w_{00}^{кон}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}}\exp(-\frac{x^2}{4\beta}), \tag{10}$$

где

$$\beta = \frac{\Omega_1+\Omega_2}{8\Omega_1\Omega_2}(\mu_1^2+\mu_2^2) + \frac{\Omega_2-\Omega_1}{4\Omega_1\Omega_2}\mu_1\mu_2 + \frac{\Omega_1+\Omega_2}{8}(\nu_1^2+\nu_2^2) + \frac{\Omega_1-\Omega_2}{4}\nu_1\nu_2.$$

Теперь, найдя маргинальные распределения для начального $w_{00}^{нач}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu})$ и конечного $w_{00}^{кон}(x, \vec{\mu}, \vec{\nu})$ состояний по формуле (4), найдем вероятность перехода P_{00}^{00} из начального в конечное состояние

$$P_{00}^{00} = \frac{4\sqrt{\Omega_1\Omega_2}}{1+\Omega_1+\Omega_2+\Omega_1\Omega_2}. \tag{11}$$

Для проверки полученного результата найдем вероятность перехода P_{00}^{00}, как квадрат интеграла перекрытия соответствующих волновых функций. Выпишем соответствующие волновые функции для начального $\psi_{00}^{нач}(\vec{q})$ и конечного $\psi_{00}^{кон}(\vec{q})$ состояний:

$$\psi_{00}^{нач}(\vec{q}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\exp(-\frac{q_1^2+q_2^2}{2}), \tag{12}$$

$$\psi_{00}^{кон}(\vec{q}) = \frac{\sqrt[4]{\Omega_1\Omega_2}}{\sqrt{\pi}}\exp(-\frac{\Omega_1}{4}(q_1+q_2)^2 - \frac{\Omega_2}{4}(q_1-q_2)^2). \tag{13}$$

Зная волновые функции и вычисляя гауссов интеграл, найдем квадрат интеграла перекрытия и тем самым вероятность перехода P_{00}^{00}:

$$P_{00}^{00} = \left(\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi_{00}^{нач}(\vec{q})\psi_{00}^{кон}(\vec{q})d\vec{q}\right)^2 = \frac{4\sqrt{\Omega_1\Omega_2}}{1+\Omega_1+\Omega_2+\Omega_1\Omega_2}, \tag{14}$$

которая оказывается идентичной выражению (11).

В заключение отметим, что, как мы показали, в случае двух мод квантовое состояние может быть описано положительным нормированным распределением, зависящим от дополнительных параметров, аналогично случаю одной моды, обсуждавшемуся в [1 – 3]. Таким образом, можно использовать аппарат классической теории вероятностей для изучения квантовых процессов. В случае двух мод вероятность перехода между двумя квантовыми состояниями выражается через интеграл перекрытия двух положительных функций распределения, причем интегрирование производится как по случайной переменной, так и по параметрам маргинального распределения. Таким образом, возможна альтернативная формулировка стандартной квантовой механики многомодовых систем, использующая распределения вероятностей для описания состояний вместо матриц плотности.

К. В. В. благодарен поддержке фонда, представляемого проф. Т. Селигманом.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Mancini S., Man'ko V. I., and Tombesi P. Quantum Semiclass. Opt., **7**, 615 (1995); Found. Phys., **27**, 801 (1997).

[2] D'Ariano G. M., Mancini S., Man'ko V. I., and Tombesi P. Quantum Semiclass. Opt., **8**, 1017 (1996).

[3] Man'ko V. I. J. Russ. Laser Research, **17**, 579 (1996).

[4] Moyal J. E. Proc. Cambridge Philos. Soc., **45**, 99 (1949).

[5] Wigner E. Phys. Rev., **40**, 749 (1932).

[6] Додонов В. В., Манько В. И. Инварианты и эволюция нестационарных квантовых систем, Труды ФИАН, **183**, Наука, Москва, 1987.

Поступила вредакцию 30 октября 1997 г.