

Leibniz  
Universität  
Hannover

# WIGNER-FUNKTIONEN FÜR BELIEBIGE OPERATORTUPEL

## Bachelorarbeit

vorgelegt am

Institut für Theoretische Physik  
Fakultät für Mathematik und Physik  
Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

von

**Michael Werner**

Prüfer: Prof. Dr. Reinhard F. Werner  
Abgabedatum: 01.09.2016

Diese Arbeit wurde mit  $\text{\LaTeX}$  und der KOMA-Script-Klasse `scrbook` gesetzt.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2. Mathematische Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1. Notation . . . . .	7
2.2. Distributionentheorie . . . . .	7
2.3. Die Joint Numerical Range beliebiger Operator-Tupel . . . . .	11
2.4. Die lineare Algebra hermitescher Matrizen . . . . .	12
2.5. Elemente der Störungstheorie . . . . .	13
2.5.1. Störungen mit trigonometrischen Polynomen . . . . .	14
<b>3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion</b>	<b>21</b>
3.1. Historischer Hintergrund: Weyl-Quantisierung . . . . .	21
3.2. Die Konstruktion einer verallgemeinerten Wignerfunktion . . . . .	23
3.3. Der Träger der Wignerfunktion . . . . .	24
3.4. Die Singularitäten der Wignerfunktion . . . . .	27
3.4.1. Die Methode der stationären Phase . . . . .	27
<b>4. Die Wignerfunktion einiger Beispiele</b>	<b>29</b>
4.1. Linearkombinationen von Orts- und Impulsoperatoren . . . . .	29
4.2. Die Fourier-Transformierte Wignerfunktion für Qubits . . . . .	30
<b>5. Visualisierung der Wignerfunktion</b>	<b>32</b>
5.1. Computeralgorithmus . . . . .	32
5.2. Laufzeitanalyse . . . . .	34
5.3. Fast kommutierende Matrizen . . . . .	36
5.4. Die Drehimpulsalgebra und Qubits . . . . .	37
5.4.1. Die Wignerfunktion für Qubits . . . . .	39
5.4.2. Die Marginalverteilungen im Qubit-Fall . . . . .	44
5.4.3. Systeme mit beliebig hohem Drehimpuls . . . . .	45
<b>6. Zusammenfassung</b>	<b>49</b>
<b>A. Anhang</b>	<b>50</b>
A.1. Topologien und Formeln . . . . .	50
A.2. Mathematica-Code . . . . .	53



# 1. Einleitung

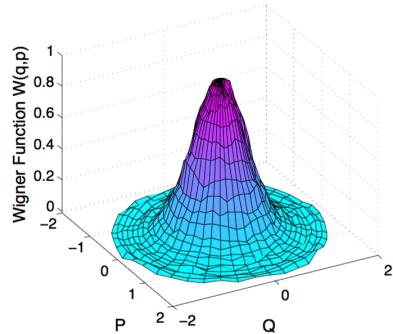
Wignerfunktionen wurden im Jahr 1932 von Eugene Wigner benutzt um Effekte der (gerade aufkommenden) Quantentheorie in der klassischen statistischen Physik zu untersuchen, sie resultierten aus Hermann Weyls Phasenraumformulierung der Quantenmechanik. Weyl selbst hatte bereits ein Jahr zuvor, unabhängig von Wigner, eine Funktion mit den gleichen Eigenschaften gefunden: Eine Wignerfunktion ist eine Pseudowahrscheinlichkeitsdichtefunktion für ein quantenmechanisches System, wobei sich die Wahrscheinlichkeit auf die Messwerte des Systems unter beliebigen Messungen bezieht. Solche Funktionen definieren zwar keine echte Wahrscheinlichkeitsdichte, da sie nicht positiv definit sein müssen, jedoch enthalten sie die korrekten Marginalverteilungen der einzelnen Messungen. Dass es keine vollständige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines quantenmechanischen Systems geben kann, zeigt alleine die Heisenberg'sche Unschärferelation: Die gleichzeitige Kenntnis der korrekten Wahrscheinlichkeitsverteilungen nicht kommutierender Messungen ist nicht möglich, eine von beiden lässt sich jedoch immer scharf betrachten, wenn man jegliche Information der jeweils anderen Verteilung verliert. Aus historischer Sicht waren die Argumente der Wignerfunktion auf den Ort und den Impuls beschränkt.

Mathematisch betrachtet ist eine Wignerfunktion  $W_\rho$  für einen Zustand  $\rho$  also eine reellwertige Funktion der einzelnen Messwerte - bei Orts und Impulsmessung somit Ort  $q$  und Impuls  $p$ . Bezieht man sich zunächst auf diese beiden Variablen, so lassen sich die weiteren Eigenschaften in Formeln angeben. Die Wignerfunktion  $W_\rho(q, p)$  muss die korrekten Marginalverteilungen enthalten und die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten, es muss also gelten:

$$\int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(q, p) dp = \langle q | \rho | q \rangle, \quad \int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(q, p) dq = \langle p | \rho | p \rangle \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(q, p) dp dq = 1$$

Mehr wird im Allgemeinen nicht gefordert und insbesondere nicht die Positivität, die fehlen würde, sodass  $W_\rho$  eine echte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion wäre.

Auch in der modernen Physik spielen Wignerfunktionen eine große Rolle, sei es in der Quantenoptik oder in der Festkörperphysik - die Einsatzmöglichkeiten bieten sich in vielen Teilbereichen heutiger Forschung. Für die theoretische Physik ist es umso wichtiger eine Verallgemeinerung der Wignerfunktion auf andere Observablen zu finden, um mögliche Grenzen der Quantentheorie zu erforschen und sich nicht nur auf diese zwei Messungen zu beschränken. Für die Experimentalphysik spielt dieses nur eine untergeordnete Rolle, da Ort und Impuls die für die makroskopische Welt wichtigsten Observablen sind. Die nebenstehende Grafik zeigt beispielsweise eine typische Wignerfunktion, wie sie in der Quantenoptik Gegenstand aktueller Forschung ist. Sie beschreibt eine optische Mode eines Nd:YAG-Laser im Vakuum (siehe [SSM<sup>+</sup>14]).



In dieser Arbeit werden die Möglichkeiten aufgezeigt, die benötigt werden um das Grundgerüst der Theorie Wigners, mithilfe der Distributionentheorie, auf allgemeinere Observablen

## 1. Einleitung

zu erweitern. Außerdem werden die resultierenden Wignerfunktionen für einige Beispiele errechnet und dargestellt. Für diese Fälle sind die betrachteten Operatoren auf endlich dimensionalen Hilberträumen definiert, um Eigenwertanalysen durchführen zu können, ohne auf Probleme mit kontinuierlichen und Residualspektren im Funktionalkalkül zu stoßen. Da die Distributionentheorie jedoch eine Teildisziplin der Funktionalanalysis ist, wird die mathematische Einführung zunächst auch den unendlich dimensionalen Fall berücksichtigen. Die Erwartungswerttupel von beliebigen Matrizen und Funktionen von Matrizen werden genauer untersucht und ein Einblick in die Störungstheorie gegeben.

Die endliche Dimension der Observablen wird auch zur Visualisierung benötigt, da nur Observablen endlicher Dimension in einem Computeralgebra-System implementiert werden können. Diese Observablen werden dann durch hermitesche Matrizen realisiert und die benötigten Analysemethoden, wie Eigenwertberechnung oder Fourier-Transformationen, sind in den meisten Programmiersprachen bereits enthalten, sodass handhabbare Laufzeiten gewährleistet werden können. Die Theorie wird zunächst für Operator-N-Tupel aufgestellt, die Darstellung wird jedoch nur mit 2-Tupeln diskutiert, um die Wignerfunktion dreidimensional darzustellen. Allen voran wird jedoch die Notation eingeführt.

## 2. Mathematische Grundlagen

Dieses Kapitel ist eine Einführung in die mathematischen Grundlagen der Quantentheorie und enthält die Notation der wichtigsten quantenmechanischen Grundbegriffe. Des Weiteren werden die JNR, bestimmte Resultate der linearen Algebra und die Störungstheorie eingeführt.

### 2.1. Notation

Die Grundlage der Quantenmechanik bildet ein Hilbertraum  $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ . Lineare, beschränkte Operatoren  $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  werden geschrieben als  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  und sind insbesondere stetig. Die Menge der selbstadjungierten Operatoren  $A = A^\dagger$  ist  $\mathcal{R}(\mathcal{H})$ . Die selbstadjungierten Operatoren werden gemeinhin als Observablen bezeichnet.

Oft ist mit der Definition der Observablen auch Projektionswertigkeit verbunden, hier wird die Projektionswertigkeit jedoch getrennt von dieser Definition betrachtet. Der Definitionsbereich eines Operators  $A$  ist  $\text{dom}(A)$ ; im Fall unbeschränkter Operatoren ist der Definitionsbereich  $\text{dom}(A) = \mathcal{H}$  durch den Satz vom abgeschlossenen Graphen nicht möglich.

Das Spektrum eines Operators, also im physikalischen Sinn die Menge der möglichen Messwerte, ist definiert durch  $\sigma(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \mathbb{1} - A \notin \mathcal{L}^{-1}(\mathcal{H})\}$ , wobei  $\mathbb{1}$  das Eins-Element des Hilbertraumes ist und  $\mathcal{L}^{-1}(\mathcal{H})$  die Menge der invertierbaren, stetigen und linearen Operatoren auf  $\mathcal{H}$  ist. Im Falle endlicher Dimension entspricht das Spektrum einer Matrix der Menge ihrer Eigenwerte. Die Unterscheidung in verschiedene Arten eines Spektrums (kontinuierlich, Residual, Punktspektrum, ...) ist in endlichen Dimensionen nicht nötig.

Elemente eines Hilbertraumes werden in der Dirac-Notation als Ket  $|\psi\rangle$  notiert, Elemente des Dualraumes als Bra  $\langle\psi|$ . Ein Operator  $A$  heißt positiv (schreibe  $A \geq 0$ ), wenn  $\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0 \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Des Weiteren ist die Menge der Dichteoperatoren auf  $\mathcal{H}$  mit  $S(\mathcal{H}) := \{\rho \in T(\mathcal{H}) : \rho \geq 0, \text{Tr } \rho = 1\}$  notiert, wobei  $T(\mathcal{H})$  die Menge der Spurklasseoperatoren bezeichnet. Zahlen wie  $\xi$  sind Element des Grundkörpers  $\mathbb{K}$  und hervorgehobene Zahlen  $\xi$  aus  $\mathbb{K}^n$ . In dieser Ausarbeitung gilt weiterhin  $\hbar = 1$ .

### 2.2. Distributionentheorie

Die Distributionentheorie, wie sie im Folgenden beschrieben wird, ist weitestgehend an die Notation von Lars Hörmander (vgl. [Hör90]) angelehnt.

**Definition 2.1.** Eine *Distribution*  $u$  ist ein stetiges, lineares Funktional auf dem Raum der Testfunktionen  $\mathcal{A}$

$$u : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C} \text{ , also } u \in \mathcal{L}(\mathcal{A}, \mathbb{C}) =: \mathcal{A}'.$$

Schränkt man den Definitionsbereich  $X$  auf ein  $Y \subset X$  ein, so geschieht das auf dem Distributionenraum für ein  $u \in \mathcal{A}'(X)$  wie folgt:

$$u_Y \in \mathcal{A}'(Y) : u_Y(\varphi) = u(\varphi) \text{ mit } \varphi \in \mathcal{A}(Y).$$

Dabei kann der Raum der Testfunktionen auf offenem  $X \subseteq \mathbb{R}^n$  beispielsweise aus glatten Funktionen  $\mathcal{E}(X) = C^\infty(X)$ , glatten Funktionen mit kompaktem Träger  $\mathcal{D}(X) = C_c^\infty(X)$ ,

## 2. Mathematische Grundlagen

oder aus Schwartzfunktionen  $\mathcal{S}(X)$  bestehen, welche dadurch charakterisiert sind, dass sie und alle partiellen Ableitungen schneller fallen als jedes Polynom. Formal:

**Definition 2.2.** Der *Schwartz-Raum*  $\mathcal{S}(X)$  ist definiert als

$$\mathcal{S}(X) = \left\{ \varphi \in \mathcal{E}(X) \mid \forall \alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^n, \exists C \geq 0, \forall x \in X : \sup_{x \in X} |x^\alpha D^\beta \varphi(x)| < \infty \right\}. \quad (2.1)$$

Ein stetiges und lineares Funktional, also ein Element aus dem topologischen Dualraum von  $\mathcal{S}(X)$  heißt *temperierte Distribution*. Um von Stetigkeit sprechen zu können wird eine Topologie auf diesen Räumen benötigt, diese werden durch bestimmte Halbnormfamilien erzeugt, die im Anhang A.1 zu finden sind.

Des Weiteren gelten die Inklusionen  $\mathcal{D}(X) \xrightarrow{\text{dicht}} \mathcal{S}(X) \subseteq \mathcal{E}(X)$  und somit für die Dualräume  $\mathcal{E}'(X) \subseteq \mathcal{S}'(X) \subseteq \mathcal{D}'(X)$ . Dabei ist der *Träger* einer Distribution  $u \in \mathcal{D}(X)'$  definiert durch

$$\text{supp}(u) = \left\{ x \in X \mid \forall A \text{ offen } \subseteq X \exists \varphi \in \mathcal{D}(A) \text{ mit } u(\varphi(x)) \neq 0 \right\}.$$

Es ist erwähnenswert, dass der Dualraum der glatten Funktionen mit kompaktem Träger (Träger einer Funktion) der Raum der Distributionen ist, der Dualraum der glatten Funktionen aber der Raum der Distributionen mit kompaktem Träger (Träger einer Distribution) ist<sup>1</sup>. Die Distributionentheorie bietet noch eine weitere Trägerdefinition, die Aufschluss über die Regularität einer Distribution liefert: Der *singuläre Träger*<sup>2</sup>:

$$\text{sing supp}(u) = \left\{ x \in X \mid \nexists A \text{ offen } \subseteq X, \nexists f \in \mathcal{E}(A) \text{ mit } u(\varphi) = \int_A f(x)\varphi(x) dx \forall \varphi \in \mathcal{D}(A) \right\}.$$

Dieses ist die streng mathematische Einführung der Distributionentheorie. Die theoretische Physik verwendet meist eine etwas andere (im Kern jedoch identische) Herangehensweise. Die theoretische Physik bezeichnet als Distribution ein stetiges und lineares Objekt  $u$ , sodass die Zuordnung

$$\mathcal{A} \ni \varphi \mapsto \int dx u(x)\varphi(x) \in \mathbb{R} \quad (2.2)$$

eine Testfunktion auf eine reelle Zahl abbildet. Ist  $u(x)$  integrierbar auf  $X$ , so ist diese Definition mathematisch präzise, obwohl  $u$  außerhalb eines Integrals möglicherweise nicht die Struktur einer Funktion aufweist. In der physikalischen Sichtweise ist es daher legitim wenn eine Distribution reellwertige Argumente hat, insofern sie mit einer Testfunktion in einem Integral steht. Oftmals wird daher auch  $u$  als distribution-erzeugende Funktion bezeichnet und das Funktional  $u(\cdot) = \int_X u(x) \cdot dx$  als Distribution.

Die Konventionen gehen in diesem Bereich stark auseinander (vgl. beispielsweise [Hör90], [Jan71] und [Wer11]), was in dieser Auswertung jedoch nur eine untergeordnete Relevanz haben wird, da Grundzüge der Distributionentheorie bereits ausreichen werden. Die physikalische Sichtweise ist motiviert durch sogenannte *reguläre Distributionen*  $u$  für die immer eine lokal-integrierbare Funktion  $f \in L^1_{\text{loc}}(X)$  existiert, sodass die Distribution von  $f$  erzeugt wird in der Form

<sup>1</sup>Eine genauere Klassifikation der einzelnen topologischen Dualräume findet sich im Anhang A.1.

<sup>2</sup>englisch: „singular support“.

$$u_f(\varphi) = \int_X dx f(x)\varphi(x) = \langle f, \varphi \rangle_{L^2}.$$

Wird also, in der mathematischen Sichtweise, eine Testfunktion als Argument einer Distribution betrachtet, so ist in der physikalischen Sichtweise das  $L^2$ -Skalarprodukt aus Testfunktion und Distribution gemeint. An dieser Stelle wird auch die Bedeutung des singulären Trägers wichtig, denn dieser enthält, anschaulich gesehen, die Menge der Punkte an denen sich eine Distribution nicht wie eine glatte Funktion verhält und somit keine Regularität in diesen Punkten aufweist. An diesen Punkten scheitert also die Integraldarstellung der Distribution.

Betrachtet man jedoch eine beliebige Testfunktion  $\varphi \in \mathcal{D}(X)$ , so lässt sich diese mit der Distribution  $u_\varphi(\phi) = \int_X \varphi(x)\phi(x) dx$  identifizieren. Daraus folgt, dass ein Testfunktionenraum ein Teilraum seines topologischen Duals ist und es kann gezeigt werden, dass diese Inklusion dicht ist (vgl. [Hör90][Th. 4.1.5, p. 89]). Somit lässt sich jede Distribution  $u$  als Grenzwert<sup>3</sup> einer Folge von Testfunktionen  $u_n(x)$  schreiben, was noch nützlich sein wird, wenn eine reine Integraldarstellung weder praktisch noch zulässig ist. Jede Distribution lässt sich also immer darstellen als

$$u(\varphi) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_X u_n(x)\varphi(x) dx.$$

Im Folgenden ist immer, falls nicht anders erwähnt, der Raum der Schwartzfunktionen als Testfunktionenraum gemeint, da die Fourier-Transformation auf diesem Raum einige starke Eigenschaften besitzt:

**Theorem 2.3.** Die Fourier-Transformation  $\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow C_0(\mathbb{R}^n)$

$$\mathcal{F}(f)(\mathbf{t}) =: \hat{f}(\mathbf{t}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{-i\langle \mathbf{t}, \mathbf{x} \rangle} d\mathbf{x}, \quad \mathbf{t} \in \mathbb{R}^n \quad (2.3)$$

bildet eingeschränkt auf  $\mathcal{S}(X)$  einen linearen Automorphismus mit Umkehrfunktion

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{f})(\mathbf{x}) =: f(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\mathbf{t}) e^{i\langle \mathbf{t}, \mathbf{x} \rangle} d\mathbf{t}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n. \quad (2.4)$$

*Beweis.* Der Beweis befindet sich in [DJ69][Part II, Ch. 29, p.138].  $\square$

Man erkennt schnell, dass die obige Formel auch für komplexwertige Vektoren  $\xi \in \mathbb{C}^n$  Sinn ergibt. Ist dieses der Fall spricht man von einer *Fourier-Laplace-Transformation*  $f \mapsto \mathcal{F}(f)(\xi)$ .

Um die Wignerfunktion später richtig beschreiben zu können, werden die Eigenschaften der Fourier-Transformation auf temperierte Distributionen erweitert. Dieses geschieht auf dem Schwartz-Raum durch folgende natürliche Identifikation:

**Definition 2.4.** Sei  $u \in \mathcal{S}'(X)$  eine temperierte Distribution. Dann ist die Fourier-Transformierte  $\mathcal{F}(u)(\varphi)$  für alle  $\varphi \in \mathcal{S}(X)$  definiert als

$$\mathcal{F}(u)(\varphi) =: \hat{u}(\varphi) = u(\mathcal{F}(\varphi)). \quad (2.5)$$

<sup>3</sup>Die benötigte Konvergenz ist bzgl. der schwach-\* Topologie zu verstehen.

## 2. Mathematische Grundlagen

Wie bereits durch die Konvergenzeigenschaften von Distributionen erwähnt, wird  $\mathcal{S}'(X)$  mit der schwach-\* $\text{-Topologie}$  ausgestattet, bezüglich dieser ist die Fourier-Transformation stetig. Wie bereits erwähnt ergibt die Fourier-Transformation auch mit komplexwertigen Argumenten Sinn, wenn man das betrachtete Skalarprodukt dementsprechend modifiziert. Sei  $u \in \mathcal{E}'(X)$  eine Distribution mit kompaktem Träger, dann ist die Fourier-Laplace-Transformation für Distributionen definiert durch

$$\mathcal{F}(u)(\xi) =: \hat{u}(\xi) = u(e^{-i\langle \cdot, \xi \rangle}) = u\left(\mathbf{x} \mapsto e^{-i\langle \mathbf{x}, \xi \rangle}\right) = \langle u, e^{-i\langle \cdot, \xi \rangle} \rangle, \quad \xi \in \mathbb{C}^n, \quad \mathbf{x} \in X. \quad (2.6)$$

Insbesondere kann gezeigt werden, dass  $\hat{u} : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}$  holomorph ist für alle  $\xi \in \mathbb{C}^n$ , beispielsweise in [DJ69][Part II, Ch. 30]. Aufgrund des Satzes von Liouville erkennt man auch, warum die Fourier-Laplace-Transformation nur eingeschränkt auf den Raum der Distributionen mit kompaktem Träger wohldefiniert ist, da holomorphe Funktionen die Eigenschaft haben exponentiell zu steigen - eine Fourier-Transformation wäre in diesem Fall somit nicht möglich. Auch eine Rücktransformation lässt sich auf  $\mathcal{S}'(X)$  definieren: Da für Testfunktionen  $\varphi$  die Identität

$$\hat{\varphi} = (2\pi)^n \check{\varphi}, \quad \text{mit} \quad \check{\varphi}(x) = \varphi(-x)$$

bereits durch elementares Rechnen gezeigt werden kann, folgt für temperierte Distributionen  $u \in \mathcal{S}'(X)$

$$\hat{u}(f) = (2\pi)^n \check{u}(f). \quad (2.7)$$

Weiterhin lässt sich das Faltungstheorem für Funktionen auf folgende natürliche Art verallgemeinern.

**Definition 2.5.** Die Faltung einer temperierten Distribution  $u \in \mathcal{S}'(X)$  mit einer Funktion  $\varphi \in \mathcal{D}(X)$  ist definiert als

$$(u * \varphi)(x) := u(\tau_x \varphi) \quad \text{mit} \quad \tau_x \varphi(y) := \varphi(x - y),$$

wodurch sich auch die Faltung zweier Distributionen  $u_1, u_2$  (mindestens eine mit kompaktem Träger) konstruieren lässt durch

$$(u_1 * u_2) * \varphi = u_1 * (u_2 * \varphi).$$

Somit kann das Faltungstheorem für Distributionen auf analoge Weise geschrieben werden, denn auch auf einem Distributionenraum zerfällt die Fourier-Transformation einer Faltung in die Multiplikation mit den einzelnen Transformierten:

**Theorem 2.6** (Faltungstheorem). Sei  $u \in \mathcal{S}'(X)$  eine temperierte Distribution und  $v \in \mathcal{E}'(X)$  eine Distribution mit kompaktem Träger, dann ist  $u * v \in \mathcal{S}'(X)$  und es gilt das Faltungstheorem

$$\mathcal{F}(u * v) = (2\pi)^{\frac{n}{2}} \mathcal{F}(u) \cdot \mathcal{F}(v).$$

Eine weitere wichtige Definition, die sich in der späteren Untersuchung als nützlich erweisen wird, ist die Träger-Funktion einer Menge.

### 2.3. Die Joint Numerical Range beliebiger Operator-Tupel

**Definition 2.7.** Für  $\emptyset \neq K \subset \mathbb{R}^n$  abgeschlossen und konvex ist die *Träger-Funktion* definiert durch

$$H_K : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}, \quad H_K(\boldsymbol{\eta}) := \sup_{\mathbf{x} \in K} \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\eta} \rangle, \quad \boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^n.$$

Die Träger-Funktion ist eines der fundamentalsten Hilfsmittel der konvexen Geometrie und hilfreich zur Konstruktion von Halbräumen, weil

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle \leq H_K(\boldsymbol{\xi})\}, \quad \|\boldsymbol{\xi}\| = 1$$

einen Halbraum definiert und die Menge K komplett enthält. Die Träger-Funktion wird nun für einen sehr wichtigen Satz der Distributionentheorie benötigt.

Da die Fourier-Laplace-Transformierten von Distributionen immer holomorph auf  $\mathbb{C}^n$  sind, stellt sich die Frage welche holomorphen Funktionen auf diese Weise von Distributionen „erzeugt“ werden können. Darüber macht der Satz von Paley-Wiener<sup>4</sup> für Distributionen eine Aussage.

**Satz 2.8** (Paley-Wiener-Schwartz). Sei  $K \subset \mathbb{R}^n$  kompakt mit Träger-Funktion  $H_K$ . Ist weiterhin  $u \in \mathcal{E}'(K)$  eine Distribution mit Träger in K, so gilt

$$\exists C > 0, N \in \mathbb{N} : |\hat{u}(\boldsymbol{\xi})| \leq C(1 + |\boldsymbol{\xi}|)^N e^{H_K(\text{Im}(\boldsymbol{\xi}))}, \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{C}^n. \quad (2.8)$$

Umgekehrt ist jede ganze analytische Funktion auf  $\mathbb{C}^n$ , die eine Abschätzung der Form (2.8) erfüllt, die Fourier-Laplace-Transformierte einer Distribution mit Träger in K.

*Beweis.* Der Beweis befindet sich in [Hör90][Theorem 7.3.1 p. 181]. □

Lars Hörmander konnte noch eine stärkere Abschätzung an Fourier-Laplace-Transformierte Distributionen treffen, wenn ausreichend Kenntnis über den singulären Träger der Distribution besteht und umgekehrt, genauer:

**Satz 2.9** (Erweiterung des Satzes von Paley-Wiener-Schwartz). Sei  $u \in \mathcal{E}'(X)$  und  $\emptyset \neq K \subset \mathbb{R}^n$  konvex und kompakt mit Trägerfunktion  $H_K$ , dann sind äquivalent:

- i)  $\text{sing supp}(u) \subset K$
  - ii)  $\exists N \in \mathbb{N}, \exists$  eine Folge  $(C_m)_{m \in \{1, 2, \dots\}}$ , sodass  $|\hat{u}(\boldsymbol{\xi})| \leq C_m (1 + |\boldsymbol{\xi}|)^N e^{H_K(\text{Im}(\boldsymbol{\xi}))}$   
wenn  $|\text{Im}(\boldsymbol{\xi})| \leq m \ln(|\boldsymbol{\xi}| + 1)$ .
- (2.9)

*Beweis.* Zu finden in [Hör90][Theorem 7.3.8. p. 186]. □

### 2.3. Die Joint Numerical Range beliebiger Operator-Tupel

Für  $T_j \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), j \in \{1, \dots, N\}$  definiert man den *gemeinsamen, numerischen Wertebereich*<sup>5</sup> durch

$$G(T_1, \dots, T_N) := \{(\langle T_1\psi, \psi \rangle, \dots, \langle T_N\psi, \psi \rangle) : \|\psi\| = 1\}.$$

<sup>4</sup>In der Version für Distributionen wird der Satz deswegen oft als „Satz von Paley-Wiener-Schwartz“ bezeichnet.

<sup>5</sup>englisch: „Joint Numerical Range“ - kurz: JNR.

## 2. Mathematische Grundlagen

Für den Fall, dass  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$  ist, folgt die äquivalente Formulierung mit  $A_j \in \mathbb{C}^{n \times n}$

$$G(A_1, \dots, A_N) := \left\{ \left( \frac{z^\dagger A_1 z}{z^\dagger z}, \dots, \frac{z^\dagger A_N z}{z^\dagger z} \right) : z \in \mathbb{C} \setminus 0 \right\}.$$

Nun ist diese Definition im physikalischen Sinne nicht immer sehr praktisch. Zunächst einmal würde ein quantenmechanischer Zustand  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  mit  $\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = \|\psi\| = 1$  einem reinen Zustand entsprechen. Reine Zustände sind Idealisierungen, da die Menge der reinen Zustände ein Maß von Null hat und dadurch (in einem Labor) nicht realisierbar sind (siehe [Wer16][Ch. 3]).

Des Weiteren ist die Konvexität eine andere wichtige Eigenschaft bestimmter Mengen. Eine genauere Untersuchung bzgl. der Konvexität der JNR liefert zum Beispiel:

**Satz 2.10** (Hausdorff-Toeplitz). Der numerische Wertebereich eines Operators ist konvex und kompakt.

*Beweis.* Der Beweis wird in dem Short-Paper [Gus69] behandelt.  $\square$

Das Problem ist nun jedoch, dass sich die Eigenschaft der Konvexität der JNR nicht auf beliebig große Operator-Tupel übertragen lässt. Dieser Sachverhalt wird näher untersucht in [GJK03] und [GZ12].

Diese Probleme stellen sich jedoch nicht, wenn man eine (für die Physik natürliche) Modifikation der JNR durchführt in der Form: Die Joint Numerical Range der Operatoren  $T_j \in \mathcal{R}(\mathcal{H})$  ist

$$R(T_1, \dots, T_N) := \{(\operatorname{Tr}(\rho T_1), \dots, \operatorname{Tr}(\rho T_N)) : \rho \in S(\mathcal{H})\}. \quad (2.10)$$

Diese Menge ist nun konvex, da sie das Bild einer affinen Abbildung über dem Raum der Dichteoperatoren ist. Diese sind nach Definition konvex, da jeder Dichteoperator eine Konvexitätskombination eindimensionaler Projektoren ist. In dieser Definition erkennt man auch den Grund der nicht-Konvexität beliebiger Wertebereiche  $G$ . Diese sind lediglich Bilder affiner Abbildungen über dem Raum der reinen Zustände und dieser ist i.A. nicht konvex. Es gilt also:  $\operatorname{conv}(G(T_1, \dots, T_N)) = R(T_1, \dots, T_N)$ , wobei  $\operatorname{conv}$  die konvexe Hülle bezeichnet.

## 2.4. Die lineare Algebra hermitescher Matrizen

Von fundamentaler Bedeutung in dieser Ausarbeitung sind Ausdrücke der Form

$$e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} \text{ mit } A \in \mathbb{C}^{n \times n} \text{ und } A^0 = \mathbb{1}$$

der sogenannten Matrixexponentialfunktion. Seien  $A_1, \dots, A_n \in \mathbb{C}^{n \times n}$  und  $\rho$  eine Dichtematrix auf  $\mathbb{C}^n$ , dann gilt durch die Definition der Matrixexponentialfunktion folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} A_j = A_j^\dagger \text{ hermitesch} &\iff iA_j = i(A_j^\dagger) \text{ schieferhermitesch} \\ &\iff U_j := e^{iA_j} \text{ unitär, also } U^\dagger = U^{-1}. \end{aligned}$$

**Satz 2.11** (Dichtematrizen in  $\mathbb{C}^2$ ). Die Darstellung der komplexwertigen  $2 \times 2$ -Dichtematrizen hat eine besonders einfache Form und findet oft Anwendung, wenn Qubits charakterisiert werden sollen. Man kann jede Dichtematrix  $\rho \in S(\mathbb{C}^2)$  schreiben als

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+r_1 & r_1 - ir_2 \\ r_1 + ir_2 & 1-r_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + r_1\sigma_1 + r_2\sigma_2 + r_3\sigma_3) \quad (2.11)$$

mit den spurfreien Paulimatrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und der Bedingung  $r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 \leq 1$  für  $r_1, r_2, r_3 \in \mathbb{R}$ . In Kurzform werden die Paulimatrizen als  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  notiert.

Die Eigenwerte<sup>6</sup> einer Matrix  $A$  sind die Lösungen  $\lambda$  von  $\det(\lambda \mathbb{1} - A) = 0$ , dem sog. charakteristischen Polynom. Ist die Matrix jedoch als Funktion eines äußeren Parameters veränderlich, so kann die Eigenwertberechnung analog stattfinden, jedoch erhält man als Lösung Eigenwertfunktionen. Besondere Bedeutung werden in dieser Arbeit die Eigenwerte von Matrizen nach Multiplikation mit einer komplexen Zahl haben. Formal also

$$\xi \cdot A \in \mathbb{C}^{n \times n} \implies (\xi \cdot A) \varphi = \lambda(\xi) \varphi.$$

Das charakteristische Polynom ist dann kein Polynom im eigentlichen Sinne mehr, da nun einzelne Matrixelemente innerhalb der Determinante Funktionen sind

$$\det(\lambda(\xi) \mathbb{1} - \xi \cdot A) = 0 \quad \xrightarrow{\text{Lösungen}} \quad \sigma_p(\xi \cdot A) = \{\lambda_1(\xi), \dots, \lambda_n(\xi)\}.$$

Die *Erwartungswerttupel* sind dann definiert als

$$\mathbf{a} = (\nabla \lambda_1(\xi), \dots, \nabla \lambda_n(\xi))^T =: \nabla_\xi \lambda(\xi).$$

Explizite Darstellungen solcher Eigenwertfunktionen und der Erwartungswerttupel werden in den nächsten Kapiteln häufiger auftreten.

## 2.5. Elemente der Störungstheorie

Die Notation der Störungstheorie stammt größtenteils aus [Wer16]. Eine größere Einführung in dieses Themengebiet, der korrekte Umgang mit entarteten Eigenwerten und nicht analytische Störungen werden jedoch in [Kat82][p. 72 ff.] behandelt. Eine komplette Einführung in die Störung von Punktspektra und die Approximation der Grundzustände von sogenannten Schrödingeroperatoren bietet [RS78][Ch. XII]. Die hier verwendeten Methoden werden jedoch zunächst auf Matrizen ohne Entartung angewandt.

Im Allgemeinen betrachtet man Operatoren, die sich schreiben lassen als  $H(\xi) = H_0 + \xi H_1$  mit einem kleinen Parameter  $\xi \in \mathbb{C}$ . Die zu lösende Eigenwertgleichung lautet dann

$$H(\xi) |\Psi\rangle = (H_0 + \xi H_1) |\Psi\rangle = E_n(\xi) |\Psi\rangle. \quad (2.12)$$

Angenommen das Spektrum und die Eigenvektoren von  $H_0$  seien bekannt, dann ist es Aufgabe der Störungstheorie Spektrum und Eigenvektoren von  $H$  in Abhängigkeit von  $\xi$  zu

<sup>6</sup>Im Folgenden mit  $\sigma_p$  für das Punktspektrum bezeichnet.

## 2. Mathematische Grundlagen

ermitteln. Oft wird auch  $\xi = 1$  gesetzt, um  $H_1$  selbst als kleine Störung zu betrachten. Betrachtet man wieder den endlich dimensionalen Fall, so sind Eigenwerte  $E_n(\xi)$  und Eigenvektoren  $|\Psi_n(\xi)\rangle$  gesucht und ein Potenzreihenansatz in Potenzen von  $\xi$  liefert in vielen Fällen gute Näherungen. In endlichen Dimensionen ist die Störungstheorie als Teilgebiet der linearen Algebra vollständig verstanden und alle auftretenden Ausdrücke sind vollständig analytisch<sup>7</sup>. Die Potenzreihen setzt man folgendermaßen an:

$$E_n(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} E_n^{(k)} \xi^n \quad \text{und} \quad |\Psi_n(\xi)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} |\Psi_n^{(k)}\rangle \xi^n.$$

Die hochgestellte Zahl in Klammern bezieht sich dabei auf die Ableitung nach dem Parameter, in Analogie zur Taylorreihe:

$$E_n^{(k)} = \frac{1}{k!} \frac{d^k E_n}{d\xi^k} \quad \text{und} \quad |\Psi_n^{(k)}\rangle = \frac{1}{k!} \frac{d^k |\Psi_n\rangle}{d\xi^k}.$$

Setzt man nun die Potenzreihenansätze in die Eigenwertgleichung (2.12) ein und ordnet die einzelnen Terme in Potenzen von  $\xi$ , so ergeben sich Eigenwerte in erster und zweiter Näherung durch

$$E_n^{(1)} = \langle \Psi_n^{(0)} | H_1 | \Psi_n^{(0)} \rangle \quad (2.13)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_m \frac{|\langle \Psi_m^{(0)} | H_1 - E_n^{(1)} | \Psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)} \quad (2.14)$$

und Eigenvektoren in erster Näherung durch

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{n'} c_{n'} \Psi_{n'}^{(0)} - \sum_m \Psi_m^{(0)} \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | H_1 - E_n^{(1)} | \Psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}, \quad E_{n'}^{(0)} \neq E_n^{(0)}.$$

Höhere Ordnungen lassen sich durch Koeffizientenvergleich der Potenzreihen vollkommen analog gewinnen. Mit diesem Grundgerüst lässt sich nun auch die Auswirkung einer explizit gegebenen Störung errechnen.

### 2.5.1. Störungen mit trigonometrischen Polynomen

Betrachtet wird eine operatorwertige Funktion  $A(t) = \sin(t)A_1 + \cos(t)A_2$ ,  $t \in \mathbb{R}_+$ .

Für diesen Fall wird im Folgenden die Störungstheorie angewandt, um zu analysieren wie sich die Erwartungswerte der einzelnen Matrizen unter einer solchen Störung verhalten - der Einfachheit halber sind die Eigenwerte der Matrizen  $A_1$  und  $A_2$  nicht entartet, sodass ein eindeutiges Orthonormalsystem dieser Matrizen existiert. Stellt man die Eigenwertfunktionen von zwei zufällig generierten, dreidimensionalen, hermiteschen Matrizen mit einer solchen Störung dar, so erkennt man deutlich eine  $2\pi$ -Periodizität, jedoch sonst relativ chaotisches Verhalten:

---

<sup>7</sup>In unendlichen Dimensionen können jedoch bestimmte (pathologische) unbeschränkte Operatoren konstruiert werden, deren Potenzreihe in keinem Punkt konvergiert.

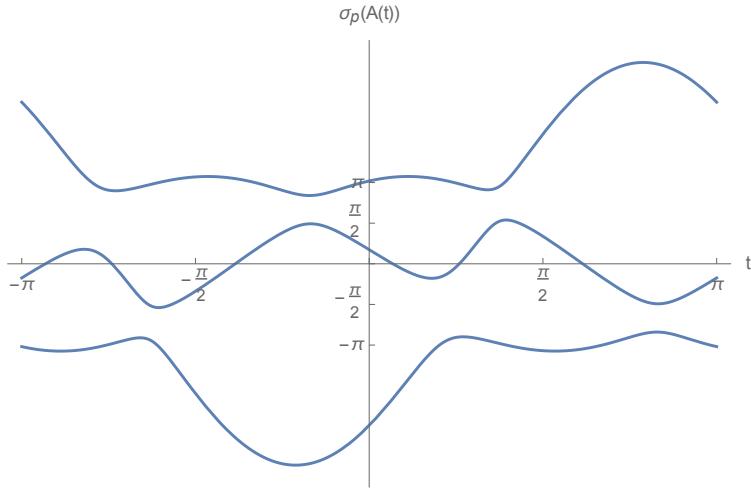


Abbildung 2.1.: Eigenwertkurven von  $A(t)$  für zwei zufällig generierte dreidimensionale Observablen

Formt man die Eigenwertgleichung nach den Eigenwertfunktionen um, so erhält man

$$A(t) |\psi(t)\rangle = \alpha(t) |\psi(t)\rangle \implies \alpha(t) = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t)\rangle.$$

Die Erwartungswerttupel können auch im Formalismus der Störungstheorie angegeben werden. Man erhält diese durch den Erwartungswert der ungestörten Operatoren im Skalarprodukt der Eigenzustände der gestörten Operatoren (vgl. (3.1)):

$$\mathbf{a}(t) = \langle \psi(t) | \mathbf{A} | \psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \langle \psi(t) | A_1 | \psi(t)\rangle \\ \langle \psi(t) | A_2 | \psi(t)\rangle \end{pmatrix}.$$

Möchte man nun Aussagen über die genaue Form und die Eigenschaften dieser Erwartungswerttupel treffen, so muss die Störungstheorie herangezogen werden, damit die Eigenvektoren der gestörten Operatoren sukzessive errechnet werden können:

### 1. Ordnung

Die Eigenwertgleichung (2.12) lässt sich nun, wenn man alle Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\xi^2)$  vernachlässigt und die Kurznotationen  $|\psi^{(0)}(t)\rangle := |\psi(t)\rangle$  und  $|\psi^{(1)}(t)\rangle := |\psi'(t)\rangle$  einführt, folgendermaßen aufstellen:

$$A'(t) |\psi(t)\rangle + A(t) |\psi'(t)\rangle = \alpha'(t) |\psi(t)\rangle + \alpha(t) |\psi'(t)\rangle, \quad (2.15)$$

wobei der Strich die Ableitung nach dem Parameter  $t$  bezeichnet, also

$$A'(t) = -\sin(t) A_1 + \cos(t) A_2 \quad \text{und} \quad \alpha'(t) = \langle \psi(t) | A'(t) | \psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(t) \\ \cos(t) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{a}(t).$$

Durch umformen erhält man die äquivalente Darstellung

## 2. Mathematische Grundlagen

$$(A(t) - \alpha(t)) |\psi'(t)\rangle = (-A'(t) + \alpha'(t)) |\psi(t)\rangle \iff \langle \psi(t) | A'(t) - \alpha'(t) | \psi(t)\rangle = 0. \quad (2.16)$$

Ferner bezeichnet  $|\psi_\mu(t)\rangle$  den Eigenvektor des  $\mu$ -ten Astes, so gilt für  $\nu \neq \mu$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_\nu(t) | A(t) - \alpha_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle &= \langle \psi_\nu(t) | -A'(t) + \alpha'_\mu(t) | \psi_\mu(t)\rangle \\ \langle \psi_\nu(t) | A(t) | \psi'_\mu(t)\rangle - \langle \psi_\nu(t) | \alpha_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle &= -\langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t)\rangle + \langle \psi_\nu(t) | \alpha'_\mu(t) | \psi_\mu(t)\rangle \\ (\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)) \langle \psi_\nu | \psi'_\mu \rangle &= -\langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t)\rangle + \alpha'_\mu(t) \underbrace{\langle \psi_\nu(t) | \psi_\mu(t)\rangle}_{=\delta_{\nu\mu}=0}. \end{aligned}$$

Wodurch die Matrixelemente  $\langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle$  eine explizite Form erhalten

$$\begin{aligned} (\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)) \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle &= -\langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t)\rangle \\ \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle &= -\frac{1}{\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)} \langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Weiterhin gibt es eine Eichfreiheit in der Wahl der Eigenvektoren, da die Phase des Gesamtsystems nicht festgelegt ist. Betrachtet man beispielsweise

$$\operatorname{Re}(\langle \psi_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle) = \frac{d}{dt} \langle \psi_\mu(t) | \psi_\mu(t)\rangle = 0,$$

so führt der Eigenvektor  $|\tilde{\psi}_\mu(t)\rangle := e^{i\beta_\mu(t)} |\psi_\mu(t)\rangle$  zu physikalisch identischen Ergebnissen, wenn  $\beta_\mu(t)$  eine reellwertige Funktion ist. Diese Eichfreiheit wird durch eine Konvention aufgelöst:

$$\langle \tilde{\psi}_\mu(t) | \tilde{\psi}'_\mu(t)\rangle = \operatorname{Im}(i\beta'_\mu(t) \langle \psi_\mu(t) | \psi_\mu(t)\rangle + \langle \psi_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle) = \beta'_\mu(t) + \operatorname{Im}(\langle \psi_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle).$$

$\beta_\mu(t)$  wird nun gerade so gewählt, dass o.B.d.A.  $\operatorname{Im}(\langle \psi_\mu(t) | \psi'_\mu(t)\rangle) = 0$  gilt.

Wendet man von links  $\sum_{\nu \neq \mu} |\psi_\nu(t)\rangle$  auf Gleichung (2.17) an und verwendet die Vollständigkeitsrelation  $\mathbb{1} = \sum_{\nu \neq \mu} |\psi_\nu(t)\rangle \langle \psi_\nu(t)|$ , so ergibt sich

$$|\psi'_\mu(t)\rangle = \sum_{\nu \neq \mu} -\frac{1}{\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)} \langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t)\rangle |\psi_\nu(t)\rangle,$$

wodurch es möglich ist die Dynamik der Erwartungswerttupel zu analysieren. Sei dazu

$$\begin{aligned} \dot{a}_{\mu,k}(t) &= \frac{d}{dt} \langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi_\mu(t)\rangle = 2 \operatorname{Re}(\langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi'_\mu(t)\rangle) \\ &= \sum_{\nu \neq \mu} -\frac{2}{\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)} \operatorname{Re}(\langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi_\nu(t)\rangle \langle \psi_\nu(t) | A' | \psi_\mu(t)\rangle) \end{aligned}$$

für die Werte  $k \in \{1, 2\}$ . Verwendet man schließlich die Identität

$$\sin(t) \langle \psi_\nu(t) | A_2 | \psi_\mu(t)\rangle + \cos(t) \langle \psi_\nu(t) | A_1 | \psi_\mu(t)\rangle = 0,$$

## 2.5. Elemente der Störungstheorie

die aus (2.16) folgt, so lässt sich feststellen, dass

$$\begin{aligned}
\dot{a}_{\mu,1}(t) &= \sum_{\nu \neq \mu} -\frac{2}{\alpha_{\nu}(t) - \alpha_{\mu}(t)} \operatorname{Re}(-\sin(t) \underbrace{\langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle}_{=|\langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2} \langle \psi_{\nu}(t) | A_1 | \psi_{\mu}(t) \rangle \\
&\quad + \cos(t) \langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle \langle \psi_{\nu}(t) | A_2 | \psi_{\mu}(t) \rangle) \\
&= \sum_{\nu \neq \mu} -\frac{2}{\alpha_{\nu}(t) - \alpha_{\mu}(t)} (-\sin(t) |\langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2 \\
&\quad - \sin(t) \underbrace{\langle \psi_{\mu}(t) | A_2 | \psi_{\nu}(t) \rangle \langle \psi_{\nu}(t) | A_2 | \psi_{\mu}(t) \rangle}_{=|\langle \psi_{\mu}(t) | A_2 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2}) \\
&= \sum_{\nu \neq \mu} \frac{2 \sin(t)}{\alpha_{\nu}(t) - \alpha_{\mu}(t)} (|\langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2 + |\langle \psi_{\mu}(t) | A_2 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2)
\end{aligned}$$

gilt und analog für  $\dot{a}_{\mu,2}(t)$ . Insgesamt folgt somit in erster Ordnung:

$$\dot{a}_{\mu,1}(t) = \sin(t) \Delta_{\mu}(t) \quad \text{und} \quad \dot{a}_{\mu,2}(t) = -\cos(t) \Delta_{\mu}(t)$$

$$\text{mit } \Delta_{\mu}(t) = \sum_{\nu} \frac{2}{\alpha_{\mu}(t) - \alpha_{\nu}(t)} (|\langle \psi_{\mu}(t) | A_1 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2 + |\langle \psi_{\mu}(t) | A_2 | \psi_{\nu}(t) \rangle|^2).$$

Nimmt man dieselben Matrizen, die zu Abbildung 2.5.1 gehören und plottet die resultierenden Erwartungswerttupel zweidimensional, so erhält man:

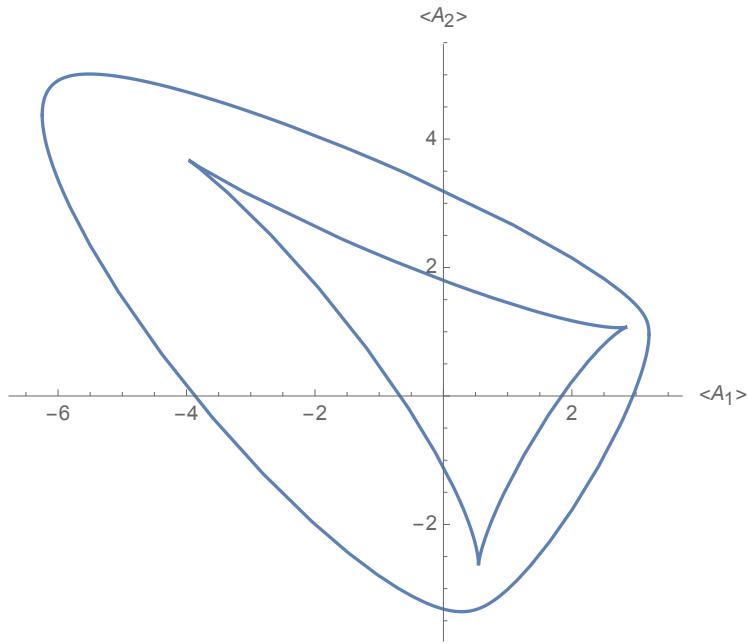


Abbildung 2.2.: Erwartungswerttupel von  $A(t)$  für zwei 3-dim. hermitesche Matrizen

Man erkennt direkt warum die Definition der Erwartungswerttupel herangezogen wurde, da dieses Diagramm dieselben Informationen trägt wie Abbildung 2.5.1, jedoch in einer weniger chaotischen Form. Wählt man nun eine beliebige Steigung und zeichnet alle Geraden

## 2. Mathematische Grundlagen

mit dieser Steigung ein, die Berührpunkte an den Erwartungswerttupeln haben, so werden es immer drei sein. Diese drei Tangenten sind dann die Eigenvektoren zu den jeweiligen drei Eigenwerten aus Abbildung 2.5.1 für einen bestimmten Wert des Parameters. Diese Beobachtung lässt sich in beliebige Dimensionen fortführen. Für zwei vierdimensionale hermitesche Matrizen sehen die Erwartungswerttupel mit rot eingezeichneten Tangenten für eine beliebige Steigung beispielsweise so aus:

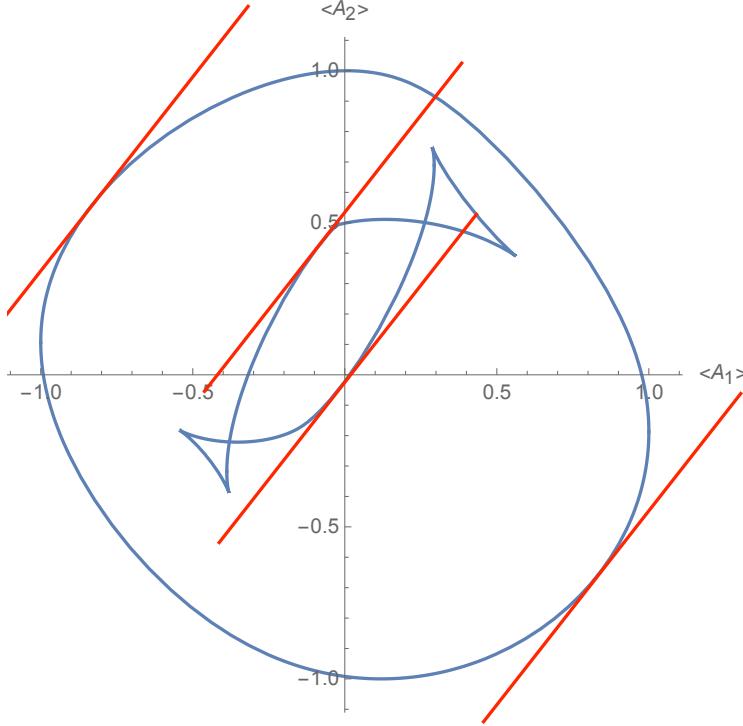


Abbildung 2.3.: Erwartungswerttupel von  $A(t)$  für zwei 4-dim. hermitesche Matrizen

Die soeben errechneten Werte für  $\dot{\alpha}_\mu(t)$  beschreiben dabei die Bewegung dieser Tangenten. Es ist sofort klar, dass diese Funktionen glatt sind und weiterhin zeigen Computersimulationen, dass sich die einzelnen Tangenten nicht schneiden. In höheren Dimensionen ist diese Aussage auch nicht mehr trivial, allein die zunächst unstetig wirkenden „Spitzen“ sehen auf den ersten Blick aus, als würden sie von Entartungen herrühren, jedoch werden die Kurven in ihrer Nähe stetig durch die Tangenten durchlaufen.

Möchte man daher genauere Aussagen über die Dynamik der Tangenten, insbesondere im Inneren dieser Strukturen mit den unstetig wirkenden Ecken treffen, so wird die Störungstheorie in zweiter Ordnung herangezogen.

### 2. Ordnung

Vernachlässigt man nun alle Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\xi^3)$ , so erhält man

$$(A(t) - \alpha(t)) |\psi''(t)\rangle + (A'(t) - \alpha'(t)) |\psi'(t)\rangle - \alpha''(t) |\psi(t)\rangle = 0. \quad (2.18)$$

Löst man dieses nun nach dem  $|\psi''(t)\rangle$ -Term auf und sei wieder  $|\psi_\mu(t)\rangle$  der Eigenvektor des  $\mu$ -ten Astes, so gilt

$$(A(t) - \alpha_\mu(t)) |\psi''_\mu(t)\rangle = -(A'(t) - \alpha'_\mu(t)) |\psi'_\mu(t)\rangle + \alpha''_\mu(t) |\psi_\mu(t)\rangle$$

und nach Multiplikation von links mit  $\langle \psi'_\nu(t) |$  ist für  $\mu \neq \nu$

$$\underbrace{\langle \psi_\nu(t) | A(t) - \alpha_\mu(t) | \psi''_\mu(t) \rangle}_{= \text{i)}} = - \underbrace{\langle \psi_\nu(t) | A'(t) - \alpha'_\mu(t) | \psi'_\mu(t) \rangle}_{= \text{ii)}} + \underbrace{\langle \psi_\nu(t) | \alpha''_\mu(t) | \psi_\mu(t) \rangle}_{= \alpha''_\mu(t) \langle \psi_\nu(t) | \psi_\mu(t) \rangle = 0}.$$

Betrachtet man die beiden Seiten dieser Gleichung getrennt und benutzt die Linearität des Skalarproduktes, so ist

$$\text{i)} = \langle \psi_\nu(t) | A(t) | \psi''_\mu(t) \rangle - \langle \psi_\nu(t) | \alpha_\mu(t) | \psi''_\mu(t) \rangle = (\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)) \langle \psi_\nu(t) | \psi''_\mu(t) \rangle$$

$$\text{ii)} = \langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi'_\mu(t) \rangle - \alpha'_\mu(t) \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t) \rangle = (\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)) \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t) \rangle.$$

Insgesamt gilt damit

$$(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)) \langle \psi_\nu(t) | \psi''_\mu(t) \rangle = (\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)) \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t) \rangle.$$

Benutzt man nun noch (2.17) um die Matrixelemente in ii) weiter zu vereinfachen, so folgt

$$\langle \psi_\nu(t) | \psi''_\mu(t) \rangle = - \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t)} \langle \psi_\nu(t) | \psi'_\mu(t) \rangle = \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} \langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t) \rangle.$$

Nutzt man wieder die Vollständigkeitsrelation  $\mathbb{1} = \sum_\nu |\psi_\nu(t)\rangle \langle \psi_\nu(t)|$ , dann gilt

$$|\psi''_\mu(t)\rangle = \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} \langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t) \rangle |\psi_\nu(t)\rangle.$$

Insbesondere ist damit also

$$\begin{aligned} \ddot{a}_{\mu,k}(t) &= \frac{d}{dt} \langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi'_\mu(t) \rangle = 2 \operatorname{Re} (\langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi''_\mu(t) \rangle) \\ &= 2 \sum_{\nu \neq \mu} \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} \operatorname{Re} (\langle \psi_\nu(t) | A'(t) | \psi_\mu(t) \rangle \langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi_\nu(t) \rangle) \\ &= 2 \sum_{\nu \neq \mu} \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} \operatorname{Re} (-\sin(t) \langle \psi_\nu(t) | A_1(t) | \psi_\mu(t) \rangle \langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi_\nu(t) \rangle \\ &\quad + \cos(t) \langle \psi_\nu(t) | A_2(t) | \psi_\mu(t) \rangle \langle \psi_\mu(t) | A_k | \psi_\nu(t) \rangle). \end{aligned}$$

Im Folgenden am Beispiel von  $k = 1$  gezeigt:

$$\begin{aligned} \ddot{a}_{\mu,1}(t) &= 2 \sum_{\nu \neq \mu} \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} \operatorname{Re} (-\sin(t) \underbrace{\langle \psi_\nu(t) | A_1(t) | \psi_\mu(t) \rangle}_{= |\langle \psi_\mu(t) | A_1 | \psi_\nu(t) \rangle|^2} \langle \psi_\mu(t) | A_1 | \psi_\nu(t) \rangle) \\ &\quad + \underbrace{\cos(t) \langle \psi_\mu(t) | A_1 | \psi_\nu(t) \rangle}_{= -\sin(t) \langle \psi_\mu(t) | A_2 | \psi_\nu(t) \rangle} \langle \psi_\nu(t) | A_2 | \psi_\mu(t) \rangle) \\ &= -2 \sin(t) \sum_{\nu \neq \mu} \frac{\alpha'_\nu(t) - \alpha'_\mu(t)}{(\alpha_\nu(t) - \alpha_\mu(t))^2} (|\langle \psi_\mu(t) | A_1 | \psi_\nu(t) \rangle|^2 + |\langle \psi_\mu(t) | A_2 | \psi_\nu(t) \rangle|^2) \\ &=: -\sin(t) \tilde{\Delta}_\mu(t). \end{aligned}$$

## 2. Mathematische Grundlagen

Es ergibt sich für  $k = 2$  auf analoge Weise

$$\ddot{a}_{\mu,2}(t) = \cos(t) \tilde{\Delta}_{\mu}(t) \quad \text{mit} \quad \tilde{\Delta}_{\mu}(t) = \Delta_{\mu}(t) \frac{\alpha'_{\nu}(t) - \alpha'_{\mu}(t)}{\alpha_{\nu}(t) - \alpha_{\mu}(t)}.$$

Es zeigt sich auch in der zweiten Ableitung eine  $2\pi$ -Periodizität und die Glattheit der Funktion. Diese Funktionen beschreiben nun die „Beschleunigung“ der Eigenvektoren. Die Nullstellen entsprechen damit u.a. den angesprochenen Spitzen, in denen sich die Durchlaufgeschwindigkeit der Eigenvektoren Null annähert.

### 3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion

Um eine graphische Analyse der Wignerfunktion gewährleisten zu können, werden von nun an endlich dimensionale Hilberträume betrachtet. Genauer der Hilbertraum  $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^n, \langle \cdot, \cdot \rangle)$  mit dem Standard-Skalarprodukt

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \longrightarrow \mathbb{C}, \quad \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle := \sum_{k=0}^n a_k \overline{b_k}.$$

Ferner werden die Observablen durch hermitesche Matrizen dargestellt und einige funktionalanalytische Besonderheiten, wie sie in der Einführung bereits erwähnt wurden, können abgeschwächt betrachtet werden.

#### 3.1. Historischer Hintergrund: Weyl-Quantisierung

Die Wignerfunktion in ihrer ersten Form wurde in der Theorie der Weyl-Quantisierung, die 1928 von Hermann Weyl ins Leben gerufen wurde, definiert. Die Weyl-Quantisierung war ein Versuch den Formalismus der Quantenmechanik durch Korrespondenzprinzipien auf den Phasenraum der analytischen Mechanik zu projizieren<sup>1</sup>.

Sei dafür  $\Gamma$  der Phasenraum, der aufgespannt wird von  $(q_1, \dots, q_{3n} ; p_1, \dots, p_{3n}) =: (\vec{q}, \vec{p})$  und  $f$  eine Funktion auf diesem. So war die Idee Weyls einen hermiteschen Operator  $\Phi = \Phi^\dagger$  auf  $f(\vec{q}, \vec{p})$  wie folgt umkehrbar abzubilden: Hier ist diese Weyl-Transformation im Fall für zweidimensionale Phasenraumfunktionen in der Version für Orts- und Impulsoperator angegeben

$$\begin{aligned} \Phi_{Q,P}(f) &:= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\Gamma \times \mathbb{R}^2} f_\Phi(q, p) \rho e^{ia(Q-q)+ib(P-p)} dp dq da db \\ f_\Phi(q, p) &:= 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ipy} \langle q + y | \Phi_{Q,P}(f) | q - y \rangle dy. \end{aligned}$$

Eugene Wigner verwendete solch eine Formulierung 1932 in der statistischen Physik, um thermodynamische Gasmodelle mit  $N$  Atomen und Quantenkorrekturen zu analysieren. (vgl. [Wig32])

Natürlich ist eine solche Phasenraumformulierung der Quantenmechanik ein legitimer Versuch um etwaige Verständnisprobleme und scheinbare Paradoxien (z.B. Unschärfe, Verschränkung, Spin) auf ein klassisches Analogon abzubilden. Jedoch stellt einen die unterschiedliche Struktur von  $\mathcal{H}$  und  $\Gamma$  im Allgemeinen vor große Probleme. Die Operatoren in einem Hilbertraum vertauschen in der Regel nicht und auch die Dimensionen der Räume stimmen meist nicht überein. So ist a priori nicht klar, welche Eigenschaften eine Phasenraumfunktion erfüllen muss. Betrachtet man ein freies quantenmechanisches Teilchen und

---

<sup>1</sup>Weyl benutzte die Gruppentheorie, um Aussagen über die Quantenkinematik zu treffen und entwickelte dabei das Grundgerüst dieser Quantisierung (vgl. [Wey28][§44, p. 196 ff.]).

### 3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion

verlangt von der Phasenraumfunktion einmal stetig differenzierbar zu sein, so sind der Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$  und der Raum  $C^1(\Gamma) \cong C^1(\mathbb{R}^6)$  nicht isomorph. Für andere Phasenraumfunktionenräume gilt natürlich ein analoges Argument.

Eine Wignerfunktion eines Zustandes ist definiert, als die Weyl-Transformation des zugehörigen Dichteoperators. Diese Funktionen erfüllen alle Axiome einer Wahrscheinlichkeitsdichte, bis auf die Positivität, wie es bereits in der Einleitung erwähnt wurde.

Da also die Phasenraumquantisierung oft nicht verwertbare Resultate liefert, wäre anzunehmen, dass auch die Wignerfunktion in der modernen Physik an Bedeutung verloren hat. Dem ist aber nicht so, da vor allem in der Quantenoptik und der Festkörperphysik die Wignerfunktion als approximatives Hilfsmittel verwendet wird um den Aufbau unbekannter Systeme besser zu verstehen. Die wohl wichtigste Eigenschaft liegt in der korrekten Darstellung von Marginalverteilungen einer Variablen, wenn also die jeweils anderen Variablen ausintegriert werden. Ist  $W_\rho(a_1, a_2)$  eine Wignerfunktion, so sind die *Marginalverteilungen*

$$\int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(a_1, a_2) da_1 = \langle a_2 | \rho | a_2 \rangle = \langle \rho \rangle_{a_2} \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} W_\rho(a_1, a_2) da_2 = \langle a_1 | \rho | a_1 \rangle = \langle \rho \rangle_{a_1}$$

die exakten Wahrscheinlichkeiten der jeweiligen Variablen, nur in beiden Variablen gleichzeitig ist dies nicht der Fall. Weiterhin ist die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten

$$\int_{-\infty}^{\infty} da_1 \int_{-\infty}^{\infty} da_2 W_\rho(a_1, a_2) = \text{Tr}(\rho) = 1.$$

Im Folgenden wird dieser historische Gedanke abstrahiert, sodass die resultierende Pseudowahrscheinlichkeitsdichte nichts mehr mit der Weyl-Quantisierung zu tun hat. Der Name „Wignerfunktion“ wird jedoch beibehalten, da das Ergebniss die Arbeiten Wigners verallgemeinert, obwohl die Herangehensweisen komplett unterschiedlich sind.

Die klassische Wignerfunktion lässt sich dreidimensional darstellen, wenn man zum Beispiel den eindimensionalen harmonischen Oszillatoren betrachtet. Die Variablen Ort und Impuls sind dann als  $x$  und  $y$  Komponenten aufgetragen - der Wert der Wignerfunktion als  $z$ -Komponente. So wie die Energieniveaus des Oszillators besitzt auch die Wignerfunktion eine „Quantenzahl“  $n$ . Für  $n = 4$  hat die Wignerfunktion beispielsweise folgende Form:

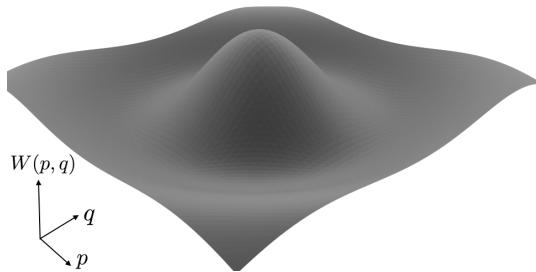


Abbildung 3.1.: Wignerfunktion des harmonischen Oszillators für  $n = 4$

## 3.2. Die Konstruktion einer verallgemeinerten Wignerfunktion

In Anlehnung an das euklidische und das komplexe Standardskalarprodukt werden folgende Kurznotationen eingeführt:

$$(A_1, \dots, A_n)^T =: \mathbf{A}, \quad \sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha} A_{\alpha} =: \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A} \quad \text{und} \quad \sum_{\alpha=1}^n \xi_{\alpha} a_{\alpha} =: \langle \boldsymbol{\xi}, \mathbf{a} \rangle \quad \text{für komplexe Zahlen } \xi_{\alpha}.$$

Als gegeben werden die projektionswertigen Observablen (hermitesche Matrizen)  $A_1, \dots, A_n \in \mathcal{R}(\mathbb{C}^n)$  und der Zustand  $\rho \in S(\mathbb{C}^n)$  vorausgesetzt. Gesucht ist nun eine gemeinsame Pseudowahrscheinlichkeitsverteilung  $W_{\rho}(\mathbf{a})$  für  $\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A}$  mit  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)^T \in \mathbb{C}^n$ . Die Erwartungswertupel der mit  $\boldsymbol{\xi}$  gestörten Operatoren  $\mathbf{A}$  errechnen sich durch

$$\{\mathbf{a} = \langle \varphi | \mathbf{A} | \varphi \rangle \in \mathbb{R}^n \mid \exists \varphi, \boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{A} | \varphi \rangle = \lambda | \varphi \rangle\}, \quad (3.1)$$

wie es bereits im letzten Kapitel gezeigt wurde. Die Menge der Erwartungswertupel ist eine endliche Teilmenge des  $\mathbb{R}^n$  und beschränkt, da die Eigenwerte diskret sind und nach Multiplikation mit (beschränktem)  $\boldsymbol{\xi}$  nicht über alle Grenzen wachsen können. Zur späteren Visualisierung in zwei Dimensionen wird die Störung durch  $\mathbb{R}^2 \ni \boldsymbol{\xi} = (\sin(t), \cos(t))^T$  für  $t \in [0, \infty)$  beschrieben<sup>2</sup>, so wie es im letzten Kapitel bereits störungstheoretisch analysiert wurde.

Zunächst jedoch zu der Idee einer Wahrscheinlichkeitsdichte: Betrachtet man eine Zufallsvariable  $X$  und existiert eine integrierbare Funktion  $f : \mathbb{R} \longrightarrow [0, \infty)$ , sodass

$$\mathbb{P}(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) dx$$

für alle möglichen Werte  $a$  und  $b$  gilt, so nennt man  $f(x)$  die *Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion* zur Verteilung von  $X$ . Als Normierungsbedingung gilt weiterhin  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1$ , da die Wahrscheinlichkeit, dass ein beliebiger Wert angenommen wird genau Eins sein muss. Auch in höheren Dimensionen lässt sich dieses Konzept konstruieren: Die Wahrscheinlichkeit, dass  $X$  in einer Menge  $A$  liegt ist dann

$$\mathbb{P}(X \in A) = \int_A d\mathbf{x} f(\mathbf{x}), \quad d\mathbf{x} = dx_1 \cdots dx_n$$

mit  $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow [0, \infty)^{\times n}$  und Borelmengen  $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^n)$ .

Mithilfe einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(x)$  einer Zufallsvariable  $X$  lassen sich weiterhin Erwartungswerte berechnen. Diese sind definiert als

$$E(X) = \int_A dx x f(x) \quad \text{und allgemeiner} \quad E(g(X)) = \int_A dx f(x) g(x). \quad (3.2)$$

In der Quantenmechanik ist nun der Erwartungswert eines Operators  $A$  angewandt auf einen Zustand  $\rho$  gegeben durch  $E_{\rho}(A) = \text{Tr}(\rho A)$ , sodass sich (3.2) umschreiben lässt zu

---

<sup>2</sup>Die spezielle Wahl dieser Störung wird in dem Paper [CS85] motiviert.

### 3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion

$$\mathrm{Tr}(\rho g(\xi, \mathbf{A})) = \int d\mathbf{a} f(\mathbf{a}) g(\xi, \mathbf{a}). \quad (3.3)$$

So wie man den Lösungsraum partieller Differentialgleichungen von Funktionen auf Distributionen erweitert hat, um eine größere Anzahl an Lösungen zu erhalten (oder Lösungsfolgen, die in speziellen Topologien gegen Lösungen konvergieren), so wird die Wignerfunktion ganz konkret auf eine Distribution erweitert, um immer ein Objekt  $f$  zu finden, dass (3.3) für beliebige Operatoren erfüllt. Anschaulich bedeutet das: Für die Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(x)$  lässt man nun, in Analogie zur Integraldarstellung von Distributionen (vgl. (2.2)), auch Distributionen zu - die Distribution, die (3.3) erfüllt wird fortlaufend als  $W_\rho$  notiert und als Wignerfunktion des Zustandes  $\rho$  und der Observablen  $\mathbf{A}$  bezeichnet. Dass ein solches Objekt immer existiert wurde in der Einführung der Distributionentheorie bereits erwähnt und selbst an den Punkten eines womöglich nichtleeren singulären Trägers, an denen eine reine Integraldarstellung scheitern wird, ist die Möglichkeit gegeben ein Folge von Testfunktionen zu finden, die im Grenzfall gegen eine solche Distribution konvergiert.

Es stellt sich also nun die Frage, wie man auf eine explizite und eindeutige Form von  $W_\rho$  kommt, da ja noch eine Freiheit in der Wahl von  $g$  liegt. Wählt man  $g$  jedoch geschickt, so lassen sich stärkere Aussagen über  $W_\rho$  treffen. Sei dazu  $g(X) = e^{-iX}$ , bzw.  $g(X, Y) = e^{-i\langle X, Y \rangle}$ , dann vereinfacht sich die Formel für Erwartungswerte mithilfe der Fourier-Laplace-Transformation von  $W_\rho$  zu

$$E_\rho(\xi \cdot \mathbf{A}) = \mathrm{Tr}(\rho e^{-i(\xi \cdot \mathbf{A})}) = \int d\mathbf{a} W_\rho(\mathbf{a}) e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} = \widehat{W}(\xi).$$

Man kann die physikalische Definition von Distributionen benutzen, sodass  $W_\rho$  reellwertige Argumente hat. Würde man dieses Objekt mathematisch korrekt betrachten wollen, so müsste geschrieben werden  $W_\rho(\xi \mapsto e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle})$ . Um die Fourier-Laplace-Transformation durchführen zu können, musste der mögliche Definitionsbereich von  $W_\rho$  eingeschränkt werden auf den Raum der Distributionen mit kompaktem Träger  $W_\rho \in \mathcal{E}'$ .

Auf der Obermenge  $\mathcal{S}'$  ist die Fourier-(Laplace-)Transformation ein Automorphismus, somit ist die Fourier-Laplace-Transformation eine eindeutig bestimmte Zuordnung<sup>3</sup>. Ferner lässt sich  $\widehat{W}(\xi)$  schreiben als

$$\widehat{W}(\xi) = \mathrm{Tr}(\rho e^{-i\xi \cdot \mathbf{A}}) = \int da_1 \cdots da_n W_\rho(\mathbf{a}) e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle}. \quad (3.4)$$

### 3.3. Der Träger der Wignerfunktion

Das Hauptaugenmerk liegt zunächst auf der Fourier-Laplace-Transformierten Wignerfunktion

$$\widehat{W} : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}, \quad \widehat{W}(\xi) = \mathrm{Tr}(\rho e^{-i(\xi \cdot \mathbf{A})}). \quad (3.5)$$

$\widehat{W}$  ist nach (2.6) holomorph und lässt sich anders darstellen, da die Matrizen umgeschrieben werden können zu

$$\xi \cdot \mathbf{A} = \sum_{\alpha=1}^n \xi_\alpha A_\alpha = \sum_{\alpha=1}^n \lambda_\alpha(\xi) P_\alpha(\xi),$$

---

<sup>3</sup>Durch das Integral ist die Eindeutigkeit modulo Lebesguescher Nullmengen und Addition mit Konstanten zu verstehen.

### 3.3. Der Träger der Wignerfunktion

mit Eigenprojektoren  $P_\alpha(\xi)$  und der reellen Eigenwertfunktion  $\lambda_\alpha(\xi)$ , sodass der Exponentialterm die Form

$$e^{-i(\xi \cdot A)} = \sum_{\alpha=1}^n P_\alpha(\xi) e^{-i\lambda_\alpha(\xi)} \quad (3.6)$$

hat. Diese Operationen sind legitim, da hermitesche Matrizen auch nach Multiplikation mit komplexen Zahlen normal sind und somit durch den Spektralsatz in Diagonalform gebracht werden können. Außerdem zerfällt das Matrixexponential eines Projektors wieder in den Projektor. Der Einfachheit halber wird angenommen, dass die Eigenwerte von  $\xi \cdot A$  nicht entartet sind, also  $n$  verschiedene Funktionen  $\lambda_\alpha$  existieren.

Zunächst wird gezeigt, dass diese Distribution ihren Träger innerhalb der JNR der Matrizen  $A_\alpha$  hat.

**Satz 3.1.**  $\widehat{W}$  ist konstruiert als die Fourier-Laplace-Transformierte einer Distribution  $W_\rho \in \mathcal{E}'(\mathbb{R}^n)$ . Ferner ist  $W_\rho$  eine Distribution mit Träger in dem gemeinsamen numerischen Wertebereich  $R = \{(\text{Tr } \rho A_1, \dots, \text{Tr } \rho A_n) : \rho \in S(\mathcal{H})\}$ . Es gilt also  $W_\rho \in \mathcal{E}'(R)$ .

*Beweis.* Nach 2.3 ist  $R$  konvex. Und da aus der Hermitezität der Observablen  $\text{Tr}(\rho A_i) \in \mathbb{R}$  folgt, ist  $R \subseteq \mathbb{R}^n$ . Weiterhin ist  $R$  kompakt, weil  $R$  das Bild einer kompakten Menge unter einer stetigen Abbildung ist.  $R$  ist als kartesisches Produkt kompakter Mengen (vgl. Satz von Hausdorff-Toeplitz) kompakt.

Ferner ist  $\widehat{W}$  holomorph auf  $\mathbb{C}^n$ , da Fourier-Laplace-Transformationen nach (2.6) immer holomorph sind. Folglich fehlt nun noch eine Abschätzung der Form (2.8). Diese wird in zwei Schritten gezeigt:

#### Abschätzung erster Teil:

Teilt man  $\xi$  in seinen Real- und Imaginärteil auf, so lässt sich  $\widehat{W}$  schreiben als

$$\widehat{W}(\xi) = \widehat{W}(\nu + i\eta) = \text{Tr}(\rho e^{-i\nu \cdot A + \eta \cdot A}) \text{ mit } \nu, \eta \in \mathbb{R}^n.$$

Der Exponentialterm kann nun abgeschätzt werden, indem man ihn in die sogenannte Trotter-Form bringt

$$\begin{aligned} \|e^{-i\nu \cdot A + \eta \cdot A}\| &= \left\| \lim_{k \rightarrow \infty} \left( e^{-i\nu \cdot A/k} e^{\eta \cdot A/k} \right)^k \right\| \\ &\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \left\| \left( \underbrace{e^{-i\nu \cdot A/k}}_{\text{unitär}} e^{\eta \cdot A/k} \right) \right\|^k \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \underbrace{\left\| e^{-\nu \cdot A/k} \right\|_1^k}_{=1} \left\| e^{\eta \cdot A/k} \right\|^k \\ &\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \left\| e^{\eta \cdot A/k} \right\|^k \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \left( e^{\mu(\eta \cdot A/k)} \right)^k = \lim_{k \rightarrow \infty} \left( e^{\mu(\eta \cdot A)/k} \right)^k \\ &\leq e^{\|\eta \cdot A\|} = e^{\lambda_{\max}(\eta \cdot A)} \end{aligned}$$

wobei  $\lambda_{\max}(\eta \cdot A)$  der betragsmäßig größte Eigenwert von  $\eta \cdot A$  ist und  $\mu(A)$  die logarithmische Matrixnorm<sup>4</sup>. Außerdem gilt

$$H_R(\eta) = \sup_{\mathbf{x} \in R} \langle \mathbf{x}, \eta \rangle = \sup_{\rho \in S(\mathbb{C}^n)} \text{Tr}(\rho \eta \cdot A) = \lambda_{\max}(\eta \cdot A).$$

<sup>4</sup>Für jede Matrix  $X \in \mathbb{K}^{n \times n}$  ist  $\|e^X\| \leq e^{\mu(X)}$  und  $\mu(X) \leq \|X\|$ . Die Definition findet sich im Anhang A.1.

### 3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion

Das letzte Gleichheitszeichen ist gerechtfertigt, da  $\eta \cdot A$  eine Summe von Operatoren ist, die insbesondere normal sind. Die Operatornorm eines normalen Operators stimmt mit dem Spektralradius und dem betragsmäßig größten Eigenwert überein. Damit folgt zunächst

$$\begin{aligned} |\widehat{W}(\xi)| &= |\widehat{W}(\nu + i\eta)| = |\operatorname{Tr}(\rho e^{-i\nu \cdot A + \eta \cdot A})| \\ &\leq \|\rho\| \|e^{-i\xi \cdot A}\| \leq e^{H_R(\operatorname{Im}(\xi))}. \end{aligned}$$

Die Spur konnte abgeschätzt werden, da dieser Term die Form eines Frobenius-Skalarproduktes hatte und dieses ist durch das Produkt der Normen der Argumente beschränkt<sup>5</sup>.

#### Abschätzung zweiter Teil:

Des Weiteren kann die Integralschreibweise von  $\widehat{W}$  abgeschätzt werden: Innerhalb des Integrals steht die Distribution mit kompaktem Träger  $W_\rho$  und der komplexe Exponentialterm. Da eine temperierte Distribution  $u \in \mathcal{S}'(X) \subset \mathcal{E}'(X)$  abgeschätzt werden kann durch die Halbnormfamilie  $p_{\alpha,\beta}(\cdot)$  ihres Argumentes (vgl. [Wer11][Satz VIII.5.4, p. 430]), gilt

$$\exists d \in \mathbb{N}, C > 0 : |u(\phi)| \leq C p_{\alpha,\beta}(\phi) = C \sup_{x \in X} |x^\alpha D^\beta \phi(x)|.$$

Die genaue Definition der Halbnormfamilie, die den Schwartz-Raum zu einem lokalkonvexen Raum macht, findet sich im Anhang A.1. Da eine Schwartzfunktion (oder Funktion mit komp. Träger)  $\phi \in \mathcal{S}$  schneller fällt als jedes Polynom, erfüllt jede Schwartzfunktion eine polynomiale Abschätzung der Form

$$\exists \tilde{d} \in \mathbb{Z}, \tilde{C} > 0 : |\phi(x)| \leq \tilde{C} \left(1 + \|x\|^2\right)^{\tilde{d}/2},$$

so wie es auch in [DJ69, Ch. 28, p. 134] erläutert wird. Da aber die Multiplikation mit  $x^\alpha$  und beliebige Ableitungen Polynome invariant lassen, folgt daraus auch eine Abschätzung der Fourier-Laplace-Transformation mit (3.4):

$$\begin{aligned} |\widehat{W}(\xi)| &\leq C p_{\alpha,\beta} \left( e^{-i\langle \xi, a \rangle} \right) \\ &= C \sup_{\xi \in \mathbb{C}^n} |\xi^\alpha D^\beta e^{-i\langle \xi, a \rangle}| \leq C \sup_{\xi \in \mathbb{C}^n} |\xi^\alpha D^\beta \tilde{C} \left(1 + \|\xi\|^2\right)^{\tilde{d}/2}| \\ &\leq C' \left(1 + \|\xi\|^2\right)^{d'/2} \quad \text{für geeignete } C', d' \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

Diese Operationen sind legitim, da die alle glatten Funktionen mit kompaktem Träger außerhalb ihres Trägers identisch verschwinden. Man findet also immer, auch wenn die Funktion innerhalb ihres Trägers exponentielles Wachstum zeigt, ein Polynom, dass eine obere Schranke an die Funktion stellt. Kombiniert man nun beide Abschätzungen, so folgt für ein  $\tilde{d} \in \mathbb{Z}$  und ein  $\tilde{C} > 0$

$$\begin{aligned} |\widehat{W}(\xi)| &= \sqrt{|\widehat{W}(\xi)|^2} \leq \sqrt{\tilde{C} \left(1 + \|\xi\|^2\right)^{\tilde{d}} \cdot e^{H_R(\operatorname{Im}(\xi))}} \\ &\leq \underbrace{\sqrt{\tilde{C}} \left(1 + \|\xi\|^2\right)^{\tilde{d}/2}}_{=:C} \cdot \underbrace{\sqrt{e^{H_R(\operatorname{Im}(\xi))}}}_{\leq e^{H_R(\operatorname{Im}(\xi))}} \\ &\leq C(1 + |\xi|)^N e^{H_R(\operatorname{Im}(\xi))} \quad \text{für } N = \tilde{d}/2 \in \mathbb{N}. \end{aligned}$$

<sup>5</sup>vgl. Anhang A.1.

### 3.4. Die Singularitäten der Wignerfunktion

Somit gilt insgesamt:

$$|\widehat{W}(\xi)| \leq C(1 + |\xi|)^N e^{H_R(\text{Im}(\xi))}.$$

Nach dem Satz von Parley-Wiener-Schwartz ist der Träger von  $W_\rho$  enthalten in  $\mathbb{R}$ .  $\square$

Außerhalb der JNR ist die Wignerfunktion also identisch Null. Es stellt sich somit die Frage was im Inneren passiert und ob die Wignerfunktion möglicherweise auch dort in großen Bereichen verschwindet. Mithilfe weiterer Abschätzungen der Form (2.9) lassen sich auch Aussagen über die Größe und die Lage des singulären Trägers treffen. Von diesen Abschätzungen wird an dieser Stelle jedoch abgesehen, da weitere Informationen über Singularitäten in den nächsten Kapiteln durch andere Methoden gewonnen werden. Unter anderem folgende Analyse:

## 3.4. Die Singularitäten der Wignerfunktion

Die Rücktransformation (2.7) gibt eine explizite Form der Distribution an

$$\widetilde{W}_\rho(\mathbf{a}) = W_\rho(-\mathbf{a}) = (2\pi)^{-n} \widehat{\widetilde{W}}_\rho = (2\pi)^{-n} \int d\xi e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} \widehat{W}(\xi),$$

also insgesamt

$$W_\rho(\mathbf{a}) = (2\pi)^{-n} \int d\xi_1 \cdots d\xi_n e^{i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} \widehat{W}(\xi_1, \dots, \xi_n), \quad \mathbf{a} \in \mathbb{R}^n. \quad (3.7)$$

Mithilfe von (3.6) kann die äquivalente Darstellung

$$W_\rho(\mathbf{a}) = (2\pi)^{-n} \sum_\alpha \int d\xi_1 \cdots d\xi_n \text{Tr}(\rho P_\alpha(\xi)) e^{i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle - i\lambda_\alpha(\xi)} \quad (3.8)$$

benutzt werden, um so die *Methode der stationären Phase* für oszillierende Integrale zu verwenden.

### 3.4.1. Die Methode der stationären Phase

Diese Theorie beschäftigt sich mit asymptotischen Integralausdrücken der Form

$$\int_X g e^{i\omega f} dx_1 \cdots dx_n$$

für glatte Funktionen  $f, g \in \mathcal{E}(X)$  mit  $\text{Im}(f) \geq 0$  im Grenzfall  $\omega \rightarrow +\infty$ . Dabei ist  $f$  eine Phasenfunktion, wie zum Beispiel  $f(x) = e^{ix}$ . Wie in [Hör90][VII 7.8] gezeigt wird, konvergiert solch ein Integral, wenn der Gradient von  $\omega f$  nicht verschwindet, oder anders gesagt erhalten solche oszillierenden Integrale ihren führenden Beitrag an den Stellen an denen

$$\nabla(\omega f) = 0$$

### 3. Konstruktion und Eigenschaften einer verallgemeinerten Wignerfunktion

erfüllt ist. Wendet man diesen Formalismus nun auf die Wignerfunktion an, so wird klar, dass die führenden Beiträge von (3.8) genau solche sind mit

$$\begin{aligned}\nabla_{\xi}(\langle \xi, a \rangle - \lambda_{\alpha}(\xi)) = 0 &\iff a - \nabla_{\xi} \lambda_{\alpha}(\xi) = 0 \\ &\iff a = \nabla_{\xi} \lambda_{\alpha}(\xi) \in \mathbb{R}^n.\end{aligned}$$

An diesen Stellen ist also eine Definition als reguläre Distribution formal nicht möglich, da es keine lokal integrierbare Funktion gibt, sodass das Integral über das Produkt aus Funktion und Distribution existiert. Der Gradient der Eigenwertfunktionen ergibt jedoch gerade die Erwartungswerttupel, damit scheint die Wignerfunktion nicht definierte (unendlich hohe Werte) an den Punkten zu haben, die zum Beispiel in Grafik 2.5.1 eingezeichnet wurden. Dieses Problem wird im Folgenden dadurch umgangen, dass jegliche Wignerfunktionen zu einer „echten“ Funktion, durch Faltung mit einer Gaußkurve, geglättet werden. Wenn diese Darstellung nicht erfolgsversprechend ist, wird eine Funktionenfolge verwendet, die gegen die Distribution konvergiert. Näheres zu diesem Sachverhalt wird im Kapitel über die Visualisierung der Wignerfunktion erläutert.

Um oszillierende Integrale mathematisch exakt beschreiben zu können ist die Theorie der Symbolklassen nötig, welche in dieser Abhandlung jedoch nicht weiter ausgeführt wird, da dieses Thema eine ausgiebige Einführung von Pseudodifferentialoperatoren mit sich ziehen würde. Für die hier benötigten Zwecke reichen die angesprochenen Ergebnisse und die Zusammenfassung der Konvergenz oszillierender Integrale vollkommen aus und werden auch in anderen ingenieurs- und naturwissenschaftlichen Teilbereichen so verwendet.

## 4. Die Wignerfunktion einiger Beispiele

Historisch betrachtet waren Orts- und Impulsoperator die ersten Argumente der Wignerfunktion. In diesem Kapitel wird eine bestimmte Linearkombination dieser Operatoren betrachtet. Zunächst sei jedoch zu den einzelnen Operatoren mehr gesagt, die explizite Form in Ortsdarstellung lautet:

Der *Ortsoperator*  $Q_j : \text{dom}(Q_j) \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $Q_j|\psi\rangle = x_j|\psi\rangle$  hat ein kontinuierliches Spektrum  $\sigma(Q_j) = \mathbb{R}$ , wobei  $x_j$  eine reellwertige Koordinatenfunktion ist. Dabei ist außerdem

$$\text{dom}(Q_j) = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : x_j|\psi\rangle \in \mathcal{H} \forall x_j\}$$

der dichte Definitionsbereich von  $Q_j$ , insbesondere ist die Forderung der Reellwertigkeit von  $x_j$  notwendig für die Selbstadjungiertheit von  $Q_j$ .

Der *Impulsoperator* lautet  $P_j : \text{dom}(P_j) \rightarrow \mathcal{H}$ ,  $P_j|\psi\rangle = -i\frac{\partial}{\partial x_j}|\psi\rangle$  und auch sein Spektrum ist ganz  $\mathbb{R}$ . Sein Definitionsbereich

$$\text{dom}(P_j) = \mathcal{H} \cap C^1(\mathcal{H}) = \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} : \exists |\psi'\rangle \text{ und } |\psi'\rangle \text{ sind stetig}\}$$

liegt auch dicht in  $\mathcal{H}$ . Diese beiden Operatoren vertauschen nicht; die kanonischen Kommutatorrelationen lauten

$$[Q_i, P_j] = i \delta_{ij}, \quad [Q_i, Q_j] = 0 = [P_i, P_j].$$

### 4.1. Linearkombinationen von Orts- und Impulsoperatoren

Gegeben sei der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators  $H_1 = P^2 + Q^2$  multipliziert mit dem Faktor 2 und der Ortsoperator  $H_2 = Q$ . Das Eigenwertspektrum von  $H_1$  ist aus den meisten Einführungen in die Quantenmechanik bekannt und lautet  $\sigma(H_1) = 2n+1$ ,  $n \in \mathbb{N}$ . Folgender Zusammenhang folgt durch elementare Umformungen

$$\begin{aligned} \xi H_1 + \eta H_2 &= \xi P^2 + \xi \left( Q^2 + 2\frac{\eta}{2\xi}Q + \left(\frac{\eta}{2\xi}\right)^2 \right) - \frac{\eta^2}{4\xi} \\ &= \xi \left( P^2 + \left( Q + \frac{\eta}{2\xi} \right)^2 \right) - \frac{\eta^2}{4\xi} \quad 1 =: \xi H'_1 - \frac{\eta^2}{4\xi}, \quad \xi, \eta \in \mathbb{C}. \end{aligned}$$

Dabei besitzt der Operator  $H'_1$  identisches Spektrum wie  $H_1$ . So lautet die Eigenwertfunktion

$$\lambda_{H_1+H_2}(\xi, \eta) = \xi(2n+1) - \frac{\eta^2}{4\xi}, \quad n \in \mathbb{N},$$

mit erwarteten Singularitäten im Bild des Gradienten. Dieser lässt sich einfach berechnen durch

#### 4. Die Wignerfunktion einiger Beispiele

$$\nabla \lambda_{H_1+H_2} = \begin{pmatrix} \partial_\xi \lambda_{H_1+H_2} \\ \partial_\eta \lambda_{H_1+H_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\eta^2}{4\xi^2} + 2n + 1 \\ \frac{\eta}{2\xi} \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} h \\ q \end{pmatrix}.$$

Daraus folgt der Zusammenhang  $h = q^2 + 2n + 1$  für die Erwartungswerttupel. Die Erwartungswerttupel sind also in Parabel-Form angeordnet und sind nicht entartet, da sich die einzelnen Parabeln nicht schneiden. Dieses Beispiel zeigt, wie die Wignerfunktion auch in unendlich dimensionalen Räumen (näherungsweise) entwickelt werden kann. Die graphische Darstellung dieses Falles ist jedoch nicht einfach möglich und selbst die Methoden der linearen Algebra können nur teilweise herangezogen werden, wenn versucht wird die Differentialoperatoren approximativ in Matrixform zu schreiben. Wie im späteren noch gezeigt wird, werden große Datenmengen bereits bei kleinen Matrixdimensionen erreicht, sodass dieses Beispiel zwar die Möglichkeit der Darstellung aufzeigt, sie aber in dieser Arbeit nicht durchgeführt wird.

## 4.2. Die Fourier-Transformierte Wignerfunktion für Qubits

Eine genaue Einführung in die Drehimpulsalgebra folgt im nächsten Kapitel, jedoch ist die Matrixdarstellung für Qubit-Zustände und Observablen durch  $\mathbb{C}^2$ -Matrizen anschaulich genug um einige interessante Beobachtungen bereits jetzt festzustellen. Die Fourier-Laplace-Transformierte Wignerfunktion lässt sich schreiben als

$$\begin{aligned} \widehat{W}(\xi) &= \text{Tr} \left( \rho e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right) \stackrel{(2.11)}{=} \underbrace{\frac{1}{2} \text{Tr} \left( \mathbb{1} e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right)}_{=: 2\hat{\varphi}} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^3 r_\alpha \underbrace{\text{Tr} \left( \sigma_\alpha e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right)}_{=: -2i \frac{d}{d\xi_\alpha} \text{Tr} \left( e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right)} \\ &= \hat{\varphi} - i \sum_{\alpha=1}^3 r_\alpha \frac{d}{d\xi_\alpha} \hat{\varphi}, \end{aligned}$$

wobei  $\hat{\varphi}$  dem halben Erwartungswert  $\left\langle e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right\rangle_\rho$  für  $\rho = \mathbb{1}$  entspricht. Dieser lässt sich noch vereinfachen:

$$2\hat{\varphi} = \left\langle e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right\rangle_{\rho=\mathbb{1}} = \text{Tr} \left( e^{-\frac{i}{2}\xi \cdot \vec{\sigma}} \right) = \text{Tr} \left( e^{-\frac{i}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \xi_\alpha \sigma_\alpha} \right) = \text{Tr} \left( \prod_{\alpha=1}^3 e^{-\frac{i}{2}\xi_\alpha \sigma_\alpha} \right).$$

Die  $\xi_\alpha$ ,  $\alpha \in \{1, 2, 3\}$  sind die Störparameter, an die somit auch keine Konvexitätsbedingung gestellt wird, wie in (2.11). Wie jedoch in dem Kapitel über Störungstheorie erwähnt, wird für die Darstellung der Wignerfunktion eine reellwertige Störung aus Sinus und Kosinus verwendet ( $\xi = (\sin(t), \cos(t))$ ,  $t \in \mathbb{R}$ ), sodass sich die Fourier-Laplace-Transformation zu einer Fourier-Transformation vereinfacht.

Aufgrund der einfachen Struktur der Paulimatrizen in der Matrixexponentialfunktion fallen viele Terme weg, wenn man die Spur auswertet<sup>1</sup>. Multipliziert man alle erhaltenen Matrizen aus und führt die Abkürzung  $|\xi| = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2}$  ein, so reduziert sich der Ausdruck zu

$$\hat{\varphi} = \frac{1}{2} \text{Tr} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) - \frac{i \sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right) \xi_3}{|\xi|} & \frac{\sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right) (-i \xi_1 - \xi_2)}{|\xi|} \\ \frac{\sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right) (-i \xi_1 + \xi_2)}{|\xi|} & \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) + \frac{i \sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right) \xi_3}{|\xi|} \end{pmatrix} = \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right).$$

<sup>1</sup>Die Ergebnisse der Matrixexponentialfunktion für Paulimatrizen befinden sich im Anhang A.1.

#### 4.2. Die Fourier-Transformierte Wignerfunktion für Qubits

Dieser ermöglicht es nun die Fourier-Transformierte auf eine exakte Form zu bringen:

$$\begin{aligned}
 \widehat{W}(\xi) &= \hat{\varphi} - i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \frac{d}{d\xi_{\alpha}} \hat{\varphi} = \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) - i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \frac{d}{d\xi_{\alpha}} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) \\
 &= \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) + i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \frac{\xi_{\alpha} \sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right)}{2|\xi|} = \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) + \frac{i \sin\left(\frac{|\xi|}{2}\right)}{2|\xi|} \underbrace{\sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \xi_{\alpha}}_{=\langle \mathbf{r}, \xi \rangle}.
 \end{aligned}$$

Dass solche Fourier-Transformationen der Schlüssel zur Analyse der Wignerfunktion sind wird im Folgenden Kapitel erläutert. Kein Computerprogramm geht leicht mit Distributionen um, jedoch sind holomorphe Funktionen und Matrizen gut implementierbar. Aus diesem Grund versucht man zunächst immer solche Funktionen für ein bestimmtes Problem herzuleiten, um dann die Wignerfunktion daraus zu entwickeln und darzustellen.

Ferner erkennt man schnell, dass trigonometrische Funktionen wie Sinus und Kosinus im Qubit-Fall nicht quadratintegrabel sind und die Fourier-Transformation nicht durchführbar ist. Dieses Problem wird jedoch durch die Gaußglättung der Wignerfunktion umgangen, wie es im Folgenden Kapitel Thema sein wird.

# 5. Visualisierung der Wignerfunktion

Zur Visualisierung wurde `Wolfram Mathematica 10.4.0.0 – Student Edition`<sup>1</sup> verwendet.

## 5.1. Computeralgorithmus

Da viele Distributionen praktisch nicht graphisch darstellbar sind, wird der Bildbereich mit einer Gaußkurve  $f(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2\varepsilon}}$  gefaltet. Die Distribution wird also, anschaulich gesehen, zu einer Funktion geglättet. Dabei ist  $\varepsilon$  ein reellwertiger Parameter und im Grenzfall  $\lim_{\varepsilon \rightarrow \infty}$  konvergiert die Gaußkurve gegen die Einsfunktion. Ferner ist die Gaußkurve der Fixpunkt der Fourier-Transformation, der Parameter  $\varepsilon$  skaliert nur das Ergebnis.

Die Multiplikation mit einer Gaußkurve sorgt außerdem für die Integrierbarkeit, die für die Fourier-Transformation benötigt wird. In dem folgenden `Mathematica`-Code wird der Algorithmus mit der Fourier-Transformierten  $\widehat{W}(\xi)$  initialisiert und mit solchen Gaußkurven multipliziert. Dieser Ausdruck ist analytisch und konkret durch Funktionen und Matrizen implementierbar; auch die Multiplikation mit einer Gaußkurve  $f(\xi)$  funktioniert analytisch und ausreichend schnell.

Fourier-(Rück)-Transformationen stellen durch ihre Komplexität jedoch ein Hindernis dar, wenn es um handhabbare Laufzeiten geht, denn selbst die schnelle Fourier-Transformation (FFT = „Fast Fourier Transform“) skaliert mit einer Laufzeit von  $\mathcal{O}(N \log(N))$  für  $N$  Diskretisierungspunkte (vgl. [OW12][p. 19]), was bei einer Anzahl von mehreren hundert Punkten bereits zu signifikant höheren Laufzeiten führen kann. Die Fourier-Transformation wird zudem in zwei Richtungen durchgeführt, daher verdoppelt sich die Laufzeit<sup>2</sup>. Die Inverse schnelle Fourier-Transformation IFFT ist analog aufgebaut, mit praktisch gleicher Laufzeit. Die Laufzeit der FFT ist jedoch eine untere Schranke für die Laufzeit des Programms, wie in der späteren Analyse gezeigt wird. Die internen Speichervorgänge in den Zwischenschritten, das Initialisieren der Arrays und viele weitere Arbeitsschritte skalieren oft linear in  $N$ , wenn nicht sogar quadratisch.

Die Diskretisierung ist in diesem Fall notwendig, da analytische Fourier-Transformationen von Computern nicht immer berechenbar sind<sup>3</sup>. Wenn der Computer also für jeden der diskreten Raumpunkte die FFT durchgeführt hat, so wird dieser in einem Array gespeichert. Schlussendlich wird eine Liste mit  $512 \times 512$  Einträgen erstellt, jeweils mit den Koordinaten der Raumgitterpunkte und dem Wert der FFT an dieser Stelle. `Mathematica` ist dann in der Lage diese Punkte zu plotten, sodass die Rohdaten folgende Form haben:

---

<sup>1</sup>ff. als `Mathematica` bezeichnet.

<sup>2</sup>Die Laufzeit des implementierten Codes wurde noch durch weitere Mittel versucht zu senken. Diese zu erläutern würde jedoch eine zu tiefe Einführung in den Grund-Kernel von `Mathematica` erfordern.

<sup>3</sup>Es stellt sich als Effizient heraus, eine Diskretisierung in Potenzen von zwei zu verwenden, also  $N = 2^m$  – die Bilder, die in dieser Arbeit zu finden sind, wurden mit  $512 \times 512$ -Punkten diskretisiert.

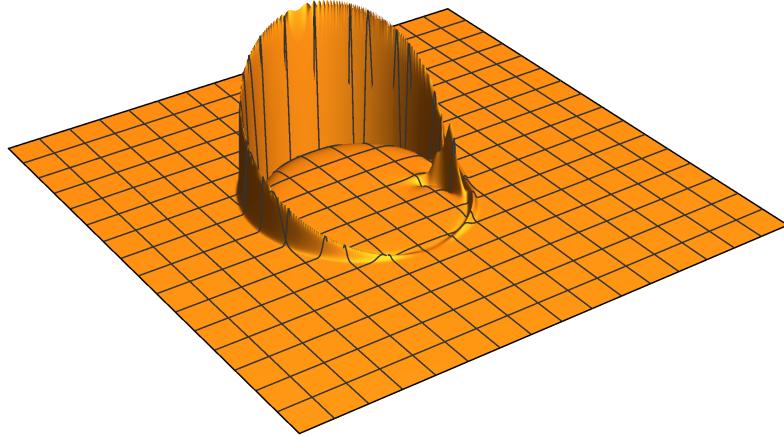


Abbildung 5.1.: Rohdaten einer Wignerfunktion zweier zufällig generierter Observablen

Diese Daten werden dann als 3D-Objekt gespeichert und mit dem Bildbearbeitungs- und 3D-Programm **Blender** bearbeitet und mit Schatten versehen, um einzelne Details besser erkennen zu können. Es gehen dabei keinerlei Informationen der Bilddatei verloren, die physikalisch relevant sind. Die gerenderte Wignerfunktion sieht dann so aus:

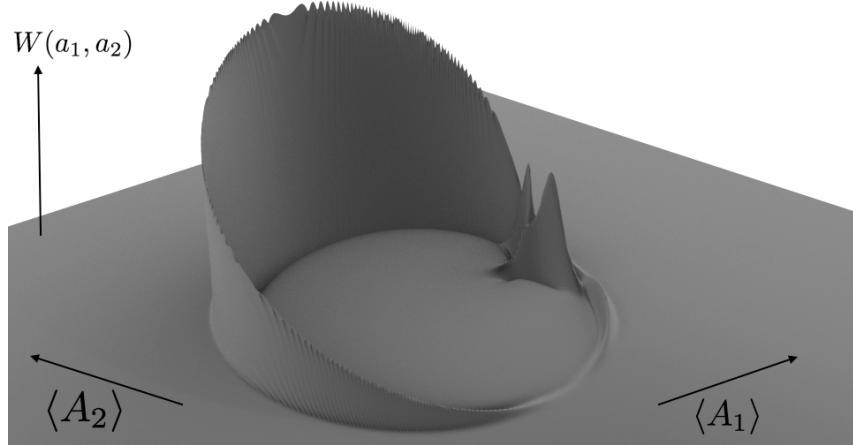


Abbildung 5.2.: Gerenderte Rohdaten von zuvor

Da solche Wignerfunktionen auch für Observablen dargestellt werden können die keine Messung repräsentieren, wird künftig auf ein Koordinatensystem, so wie es angedeutet wird, verzichtet und somit wird es auch keine Achsenbeschriftung geben. Bis auf die Drehimpulsoperatoren folgen keine Wignerfunktionen mehr, die sich auf ein konkretes physikalisches Problem beziehen und damit keine physikalischen Variablen als Erwartungswerte besitzen, deren konkreter Zahlenwert eine Bedeutung trüge. Durch die gegebene Einführung sollte jegliche Information, die eine solche Wignerfunktion zeigt - auch ohne Achsenbeschriftung -

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

verständlich sein, da es viel mehr um die qualitative Form der Verteilung geht.

### 5.2. Laufzeitanalyse

Eine Zusammenfassung des Grundcodes findet sich im Anhang A.2. Im Folgenden werden die einzelnen Schritte des Codes auf ihre Laufzeit untersucht und im Hinblick auf verschiedene Diskretisierungen analysiert. Sieht man von den Grunddefinitionen ab und initialisiert diese, so verbleiben für jede Wignerfunktion 8 Schritte (bzw. 12 Schritte, wenn die Erwartungswerttupel mit eingezeichnet werden sollen). Diese 8 Schritte lauten:

- **maxx**: Errechnet den größten Eigenwert der gewählten Matrizen. Es gibt also ein Maß für die Mindestgröße der JNR an und somit die Breite der Diskretisierung.
- $\psi$ : Konstruiert den kleinsten normierten Eigenvektor der ersten Matrix.
- **rho**: Ist der Ketbra (das dyadische Produkt) von  $\psi$ . Es ist damit der Zustand, auf die sich die Wignerfunktion bezieht.
- **setFourier**[ $N, x$ ]: Initialisiert die Fourier-Transformation. Es diskretisiert auf einem Quadrat mit Kantenlänge  $x$  ein Gitter mit  $N^2$ -Punkten und packt diese in ein Array. Als Kantenlänge  $x$  wird dann 2 **maxx** verwendet.
- **wh**[ $eps, rho$ ]: Ist die Implementierung von  $\widehat{W}$ . In dieser Arbeit wird **eps** = 0.001 verwendet.
- **Fou2** ist dann die eigentliche Fourier-Transformation des Arrays von **wh** in Bezug auf **setFourier**.
- **wwpoints** kombiniert dann die Gitterpunkte des Arrays mit dem jeweiligen Wert der Fourier-Transformation aus dem Array **Fou2**.
- **pic** erstellt einen ListPlot von **wwpoints**, um die Wignerfunktion dreidimensional darzustellen.

Die einzigen Algorithmen, die nennenswerte Laufzeiten hervorrufen, sind **setFourier**, **wh**, **Fou2** und **pic**. Alle anderen liegen in einem Bereich von  $8 \cdot 10^{-6}$  Sekunden, oder weniger, da es sich nur um das interne Speichern und Initialisieren einfacher Daten handelt. Sie sind weiterhin unabhängig von der Diskretisierung  $N$ . **pic** ist ein Befehl, der zwar eine Laufzeit von nur tausendstel Sekunden beansprucht, jedoch ist die Darstellungen eines ListPlots mit 1024 Punkten und mehr auf handelsüblichen Rechnern oft nicht möglich.

Die verbleibenden drei Befehle werden nun genauer untersucht: Sie skalieren nicht linear in  $N$ . Jedoch ist auch die (gewünschte) Laufzeit von  $\mathcal{O}(N \log(N))$  für die FFT nicht erreicht. Alle drei Schritte skalieren ungefähr quadratisch in  $N$ , wie die folgenden Graphen mit quadratischen Fitkurven zeigen.

## 5.2. Laufzeitanalyse

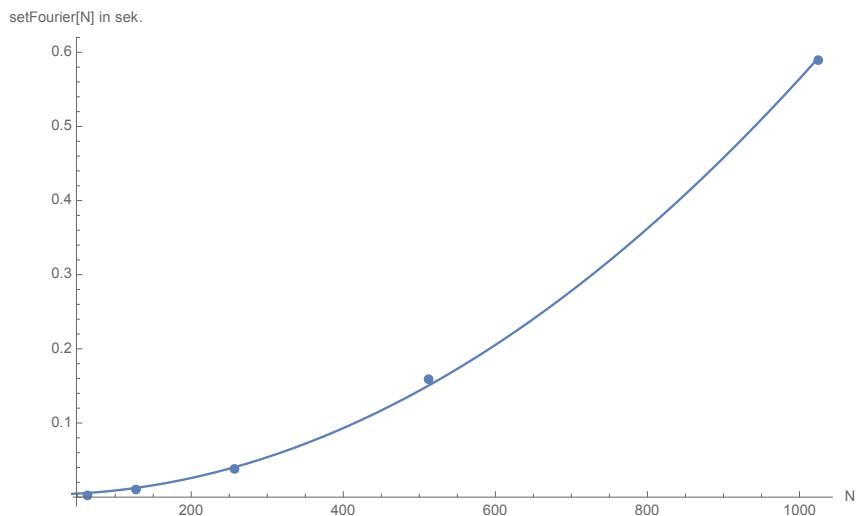


Abbildung 5.3.: Laufzeit des **setFourier**-Befehls in abh. von N

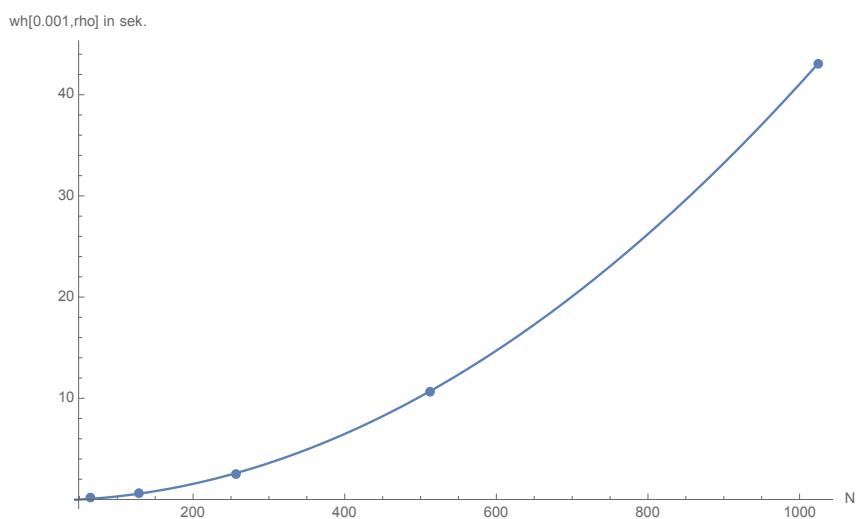


Abbildung 5.4.: Laufzeit des **wh**-Befehls in abh. von N

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

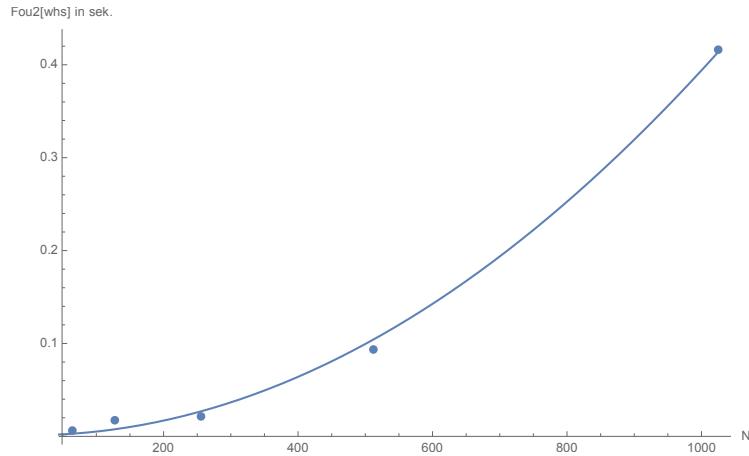


Abbildung 5.5.: Laufzeit des Fou2-Befehls in abh. von N

### 5.3. Fast kommutierende Matrizen

Die gesamte Betrachtung bezog sich bis jetzt auf nicht kommutierende Matrizen, da diesen kein gemeinsames System aus Eigenvektoren zugeordnet werden kann, dass beide simultan diagonalisiert. Natürlich funktioniert der gezeigte Algorithmus auch für kommutierende Matrizen und das Ergebnis stimmt mit den Erwartungen überein: Man erhält separate  $\delta$ -Peaks (geglättet also Gaußkurven) an den jeweiligen Erwartungswerttupeln, wie zum Beispiel hier gezeigt für die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_p(A, B) = \{1, 0, -1\}$$

mit einer trivialen Wignerfunktion

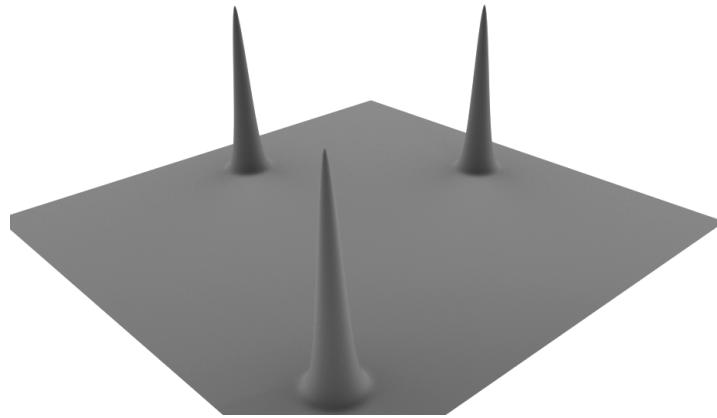


Abbildung 5.6.: Wignerfunktion zweier kommutierender Matrizen

die Erwartungswerttupel liegen auf beiden Achsen, jeweils bei 1, 0 und -1. Eine interessante Beobachtung macht man jedoch, wenn man fast kommutierende Matrizen betrachtet. Das sind Matrix-Tupel der Form

$$[A, B] = 0, \quad B' := B + \varepsilon C \implies [A, B'] = [A, B] + [A, \varepsilon C] = \varepsilon [A, C], \quad A, B, C \in \mathcal{R}(\mathbb{C}^n),$$

also kommutierende Matrizen mit einer kleinen Störung, sodass der Kommutator beliebig klein gewählt werden kann. Im Folgenden dargestellt für die Werte  $\varepsilon = 0.01, 0.05, 0.1$  und  $0.2$ :

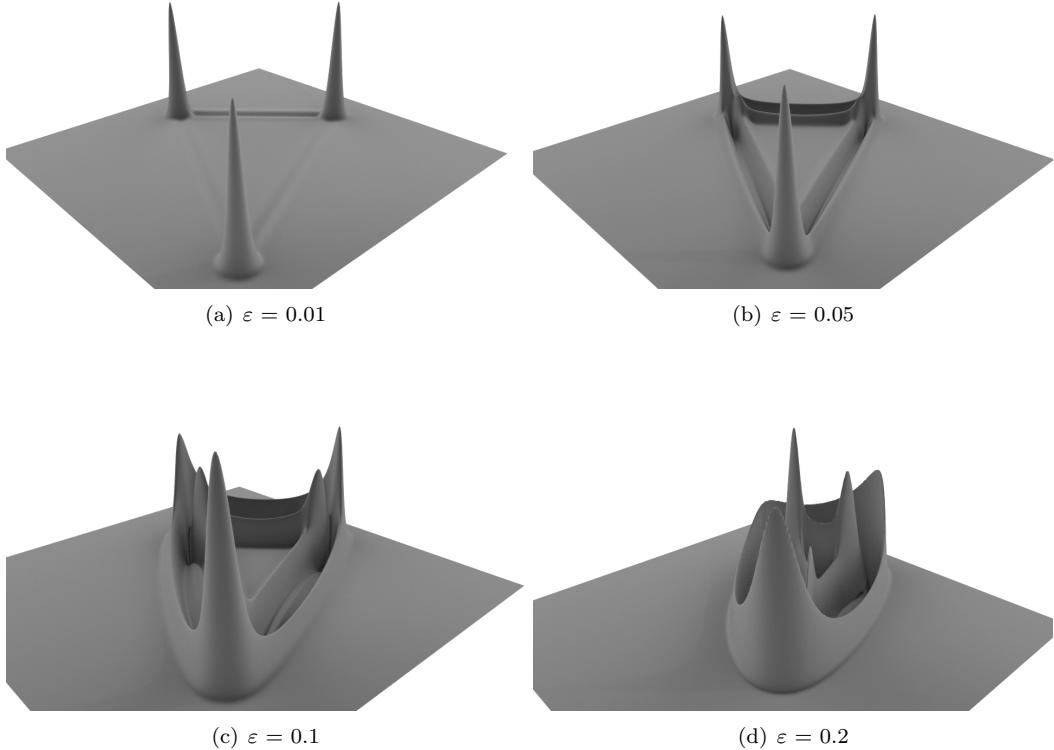


Abbildung 5.7.: Wignerfunktion fast-kommutierender Matrizen

Man erkennt sehr anschaulich, wie sich die inneren Strukturen ausbauen, wenn die Störung zunimmt. Der Störparameter hebt die Entartung des Systems langsam auf, dadurch entstehen diese nicht-trivialen Erwartungswerttupel.

## 5.4. Die Drehimpulsalgebra und Qubits

Die Drehimpulsalgebra beschäftigt sich mit dem Drehimpulsoperator  $L = Q \times P$ , seinen Komponenten  $L_x, L_y, L_z$ , dem Operatorquadrat  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$  und den jeweiligen Kommutatorrelationen. Die einzelnen Komponenten des Drehimpulsoperators vertauschen nicht, es gilt  $[L_x, L_y] = -iL_z$  modulo zyklischer Permutation der Menge  $\{x, y, z\}$ . Ziel dieses Unterkapitels ist es also nun eine Wignerfunktion für zwei Drehimpulskomponenten zu entwickeln. Zeichnet man die z-Richtung aus, so definiert man die Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} J_{\pm} &= J_x \pm J_y = -i \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \mp i \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{mit} \quad J_-^\dagger = J_+ \\ &\implies J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad \text{und} \quad J_y = \frac{-i}{2}(J_+ - J_-). \end{aligned}$$

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

$J^2$  kommutiert mit  $J_z$ , sodass eine gemeinsame Basis aus Eigenvektoren gewählt werden kann. Der Darstellungsraum der irreduziblen Darstellungen der Drehimpulsalgebra  $SU(2l+1)$  ist  $\mathbb{C}^{2l+1}$ , sodass  $\{|j, m\rangle\}_{j, m \in \mathbb{N}} \in \mathbb{C}^{2l+1}$  als die Menge der gemeinsamen Basiszustände von  $J^2$  und  $J_z$  gewählt werden kann. Sie erfüllen die folgenden Eigenwertgleichungen

$$J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle, \quad J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle \quad \forall j \in \mathbb{N}/2, \quad m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\},$$

wodurch sich die Matrixelemente der einzelnen Operatoren wie folgt berechnen lassen:

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_z | j', m' \rangle &= m \delta_{j, j'} \delta_{m, m'} \\ \langle j, m | J^2 | j', m' \rangle &= j(j+1) \delta_{j, j'} \delta_{m, m'}. \end{aligned}$$

Beispielsweise sind die beiden Matrixdarstellungen von  $J_z$  und  $J^2$  für die Quantenzahl  $j = 3/2$  gegeben durch

$$J_z = \begin{pmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{pmatrix}, \quad J^2 = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Eine ähnliche, aber etwas aufwändigere Rechnung,<sup>4</sup> liefert die Matrixelemente der Leiteroperatoren und dadurch eine explizite Form von  $J_x$  und  $J_y$ :

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_+ | j', m' \rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m-1)} \delta_{j, j'} \delta_{m+1, m'} \\ \langle j, m | J_- | j', m' \rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)} \delta_{j, j'} \delta_{m-1, m'}. \end{aligned}$$

Für das Beispiel  $j = 3/2$  also

$$J_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = J_-^\dagger$$

und somit für die Drehimpulskomponenten

$$J_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{-i}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}.$$

---

<sup>4</sup>siehe z.B. [Wer16][Kapitel 5] und [HW03][p. 161 ff.].

### 5.4.1. Die Wignerfunktion für Qubits

Betrachtet man nun den Fall eines Spin 1/2 Teilchens, so untersucht man den Fall eines Qubits mit den möglichen Zuständen  $|\uparrow\rangle$  und  $|\downarrow\rangle$ . Durch die Darstellung der Drehimpulsalgebra sind die Spin-1/2 Observablen gegeben durch:

$$J_x = \frac{1}{2}\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad J_y = \frac{1}{2}\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte beider Matrizen sind  $\pm\frac{1}{2}$  mit den Eigenvektoren

$$|\uparrow_1\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |\uparrow_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

Um zu zeigen, dass die Wignerfunktion tatsächlich die exakten Marginalien ergibt, eignet sich der Qubit-Fall besonders gut, weil es nur zwei mögliche Messergebnisse gibt. Im Folgenden sind die Wignerfunktionen für die Zustände  $\rho_1 = |\uparrow_1\rangle\langle\uparrow_1|$  und  $\rho_2 = |\uparrow_2\rangle\langle\uparrow_2|$  gezeigt.

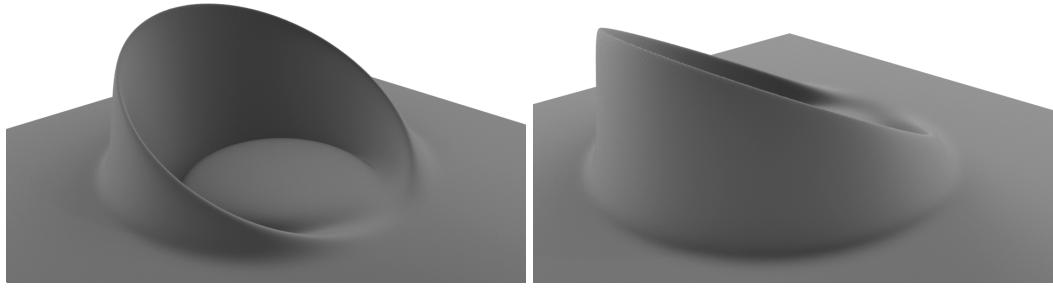


Abbildung 5.8.: Wignerfunktionen eines Qubits für unterschiedliche Zustände

Die Marginalverteilungen erhält man nun, wenn eine der beiden Variablen ausintegriert wird. Bei der diskreten Fourier-Transformation die verwendet wurde entspricht das der Summe der einzelnen diskreten Werte in einer bestimmten Richtung. Im Folgenden dargestellt durch die Messung  $J_x$  in blau und  $J_y$  in rot<sup>5</sup>:

---

<sup>5</sup>Die Einteilung der Abzisse ist dabei, für alle Marginalverteilungen, durch die Diskretisierungspunkte gegeben und somit physikalisch nicht aussagekräftig. Die Umrechnung erfolgt durch den größten Eigenwert: Die 512 Punkte entsprechen dem größten Eigenwert der beiden Matrix mal vier.

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

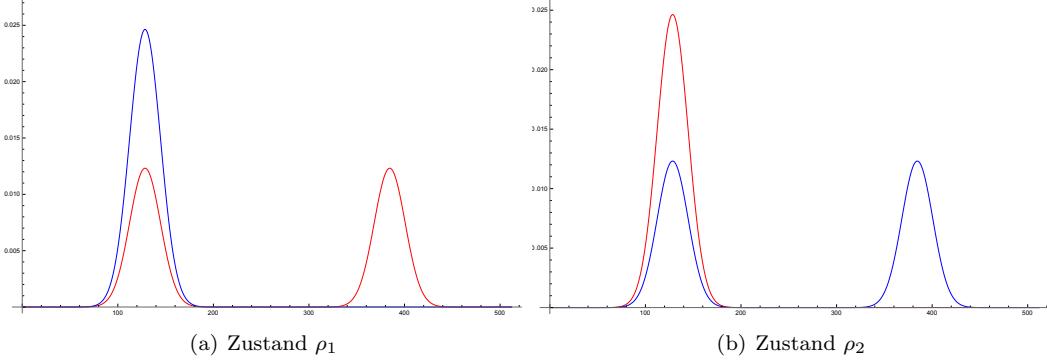


Abbildung 5.9.: Marginalverteilungen der Messungen  $J_x$  (blau) und  $J_y$  (rot)

Diese Verteilungen sind physikalisch sinnvoll, da die Messung  $J_x$  im Zustand  $\rho_1$  scharf und  $J_y$  vollständig unbestimmt ist. Umgekehrt ist  $J_x$  im Zustand  $\rho_2$  vollständig unbestimmt, während  $J_y$  scharf ist. Die Peaks befinden jeweils bei einem Erwartungswert von  $1/2$ , was man dadurch erkennt, dass die gesamte Abzisse einer Länge von  $2 \max_{\alpha} = 2 \cdot 1/2 = 1$  in positive und in negative Richtung entspricht. Der Wert  $N = 256$  entspricht also einem Erwartungswert von Null,  $N = 128$  und  $N = 384$  entsprechen damit analog  $1/2$ . Dass es sich hier tatsächlich um Gaußkurven handelt, die im Falle  $\varepsilon \rightarrow 0$  gegen die Dirac'sche  $\delta$ -Distribution gehen, ist noch zu zeigen. Die Fourier-Transformation wurde im vorigen Kapitel bereits berechnet:

$$\widehat{W}(\xi) = \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) - i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \frac{d}{d\xi_{\alpha}} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right).$$

Benutzt man nun die Rücktransformationsformel, so ist die doppelt-transformierte Wignerfunktion im Qubit-Fall:

$$\begin{aligned} \widehat{\widehat{W}}_{\rho}(\mathbf{a}) &= (2\pi)^3 W_{\rho}(-\mathbf{a}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\xi \left[ \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) - i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \frac{d}{d\xi_{\alpha}} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) \right] e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d\xi e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right) - i \sum_{\alpha=1}^3 r_{\alpha} \int_{\mathbb{R}^3} d\xi e^{-i\langle \xi, \mathbf{a} \rangle} \frac{d}{d\xi_{\alpha}} \cos\left(\frac{|\xi|}{2}\right). \end{aligned}$$

Tauscht man nun die Variable  $-\mathbf{a} \mapsto \mathbf{a}$  und multipliziert mit  $(2\pi)^{-3}$ , so werden die Integrale zu Fourier-Rücktransformationen. Ferner wird die fundamentale Identität  $(\widehat{D^{\alpha} f(x)})(t) = (it)^{\alpha} \hat{f}(t)$  (vgl. [Wer11][Lemma V.2.4]) benutzt; somit gilt

$$\begin{aligned}
W_\rho(\mathbf{a}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{\xi} e^{i\langle \boldsymbol{\xi}, \mathbf{a} \rangle} \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) - \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha=1}^3 r_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{\xi} e^{i\langle \boldsymbol{\xi}, \mathbf{a} \rangle} \frac{d}{d\xi_\alpha} \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) \\
&= \mathcal{F}^{-1} \left( \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) \right) (\mathbf{a}) - i \sum_{\alpha=1}^3 r_\alpha \mathcal{F}^{-1} \left( \frac{d}{d\xi_\alpha} \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) \right) (\mathbf{a}) \\
&= \underbrace{\mathcal{F}^{-1} \left( \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) \right) (\mathbf{a})}_{=: \mathcal{I}(\mathbf{a})} - i \sum_{\alpha=1}^3 r_\alpha (ia_\alpha) \mathcal{F}^{-1} \left( \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) \right) (\mathbf{a}) \\
&= \mathcal{I}(\mathbf{a}) (1 + \langle \mathbf{r}, \mathbf{a} \rangle) = \mathcal{I}(\mathbf{a}) \left( 1 + a_1 \langle \sigma_1 \rangle_\rho + a_2 \langle \sigma_2 \rangle_\rho + a_3 \langle \sigma_3 \rangle_\rho \right). \tag{5.1}
\end{aligned}$$

Es wurde dabei verwendet, dass sich  $\widehat{W}(\boldsymbol{\xi})$  durch den Koeffizientenvektor  $\mathbf{r}$  in direkte Beziehung zu den Erwartungswerten der einzelnen Spin-Messungen setzen kann, durch

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle_\rho &= \text{Tr}(\rho \sigma_i) = \text{Tr} \left( \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{2} \sigma_j \sigma_i \right) = \sum_{j=1}^3 \frac{r_j}{2} \text{Tr}(\sigma_j \sigma_i) \\
&= \frac{r_i}{2} \text{Tr} \underbrace{(\sigma_i \sigma_i)}_{= \mathbb{1} \forall i} + \sum_{j=1 \neq i}^3 \frac{r_j}{2} \text{Tr} \underbrace{(\sigma_j \sigma_i)}_{\pm i \sigma_k}, \quad k \neq i, j \in \{1, 2, 3\} \\
&= \frac{r_i}{2} \text{Tr}(\mathbb{1}) \pm i \frac{r_j}{2} \underbrace{\text{Tr}(\sigma_k)}_{=0} = r_i.
\end{aligned}$$

Der Faktor mit dem Skalarprodukt aus  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{a}$  ist dabei auch physikalisch notwendig. Stünde dieser dort nicht, so wären die Wignerfunktionen aller Qubits - also unabhängig ihrer Koeffizienten in der Dichtematrix - gleich. Physikalisch relevant ist nur der Winkel zwischen Erwartungswertupeln und dem Koeffizientenvektor: Hat also der Qubit eine gewisse Symmetrie bzgl. dieser Größe, so trägt auch die Wignerfunktion diese Symmetrie, da sich das Skalarprodukt aus  $\mathbf{r}$  mit der jeweiligen Variable sowohl in der Wignerfunktion, als auch in der Fourier-Transformation findet.

Die komplette Auswertung der Qubit-Wignerfunktion reduziert sich also auf die Berechnung von  $\mathcal{I}(\mathbf{a})$ . Da dieses Integral nur von dem Betrag von  $\boldsymbol{\xi}$  abhängt, scheint es sinnvoll zu sein Kugelkoordinaten zu verwenden:

$$\begin{aligned}
\xi_1 &= r \sin(\theta) \cos(\phi), \\
\xi_2 &= r \sin(\theta) \sin(\phi), \\
\xi_3 &= r \cos(\theta).
\end{aligned}$$

Somit transformiert sich das Integral zu

$$\mathcal{I}(\mathbf{a}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta r^2 \sin(\theta) \cos\left(\frac{r}{2}\right) e^{ir(a_3 \cos(\theta) + \sin(\theta)(a_1 \cos(\phi) + a_2 \sin(\phi)))}.$$

Dieses Integral ist nun jedoch nicht trivial zu lösen, in der Tat stellt sich selbst die Konvergenz als fragwürdig heraus. Der folgende Satz über die Fourier-Transformation sphärisch-symmetrischer Funktionen erweist sich als hilfreich:

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

**Proposition 5.1.** Sei  $f \in \mathcal{S}(X)$  eine radiale Funktion, sprich  $f(\mathbf{x}) = f(|\mathbf{x}|)$ . Dann ist Fourier-Transformierte  $\hat{f}(\boldsymbol{\xi})$  auch eine radiale Funktion und es gilt

$$\hat{f}(\boldsymbol{\xi}) = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{-2\pi i \langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} d\mathbf{x} = \int_0^\infty \varphi(r) \frac{J_{(n-2)/2}(2\pi r |\boldsymbol{\xi}|)}{(r |\boldsymbol{\xi}|)^{(n-2)/2}} r^{n-1} dr, \quad (5.2)$$

wobei die  $J_n(\mathbf{x})$  die Bessel-J-Funktionen erster Gattung sind. Es wird folgende Konvention verwendet:

$$J_n(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{(\frac{\mathbf{x}}{2})^{2j+n}}{j!(j+n)!}, \quad n > -1. \quad (5.3)$$

Ist  $n$  keine natürliche Zahl, so wird für  $n! = \Gamma(n+1) = n \Gamma(n)$  die Gammafunktion benutzt.

*Beweis.* Der Beweis wird in [Pin02][Ch. 2, Prop. 2.6.8, p. 157] gezeigt.  $\square$

Man erkennt schnell die unterschiedliche Konvention der Fourier-Parameter. Dieser Umstand wird durch das Multiplizieren mit einer Eins der Form  $\frac{-2\pi}{2\pi}$  umgangen.

Wendet man diesen Satz auf  $f(\tilde{r}) = \cos(\tilde{r})$ , mit  $\tilde{r} = \frac{r}{2}$  an, so gilt:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\mathbf{a}) &= (2\pi)^{-3} \int_{\mathbb{R}^n} \cos\left(\frac{|\boldsymbol{\xi}|}{2}\right) e^{-2\pi i \langle \boldsymbol{\xi}, \frac{\mathbf{a}}{2\pi} \rangle} d\boldsymbol{\xi} \stackrel{(5.2)}{=} (2\pi)^{-3} \int_0^\infty f(\tilde{r}) \frac{J_{\frac{1}{2}}(2\pi \tilde{r} |\frac{\mathbf{a}}{2\pi}|)}{(\tilde{r} |\frac{\mathbf{a}}{2\pi}|)^{\frac{1}{2}}} \tilde{r}^2 d\tilde{r} \\ &= (2\pi)^{-3} \sqrt{2\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{r}{2}\right) \frac{J_{\frac{1}{2}}(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)}{\sqrt{\frac{r}{2} |\mathbf{a}|}} \frac{r^2}{4} \frac{dr}{2} = (2\pi)^{-3} \sqrt{2\pi} \frac{\sqrt{2}}{8} \int_0^\infty \cos\left(\frac{r}{2}\right) \frac{J_{\frac{1}{2}}(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)}{\sqrt{r |\mathbf{a}|}} r^2 dr. \end{aligned}$$

Die Berechnung der Bessel-J Funktion erfolgt separat:

$$\begin{aligned} J_{\frac{1}{2}}\left(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|\right) &= \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{\left(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|\right)^{2j+\frac{1}{2}}}{j! (j + \frac{1}{2})!} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)^{2j+\frac{1}{2}}}{2^{2j} \sqrt{2} j! \Gamma(j + \frac{1}{2} + 1)} \frac{\sqrt{\frac{r}{2} |\mathbf{a}|}}{\sqrt{\frac{r}{2} |\mathbf{a}|}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2 \frac{r}{2} |\mathbf{a}|}} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)^{2j+1}}{2^{2j} j! (j + \frac{1}{2})(j - \frac{1}{2}) \cdots \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2} \Gamma(\frac{1}{2})}; \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi r |\mathbf{a}|}} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \underbrace{\frac{(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)^{2j+1}}{2^{2j} (j(j-1)(j-2) \cdots 1) \left(\left(j + \frac{1}{2}\right) \left(j - \frac{1}{2}\right) \cdots \frac{3}{2}\right)}}_{2^{2j} \text{ Faktoren}} \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi r |\mathbf{a}|}} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)^{2j+1}}{(2j+1)!} = 2 \frac{\sin(\frac{r}{2} |\mathbf{a}|)}{\sqrt{\pi r |\mathbf{a}|}}. \end{aligned}$$

Dieses ergibt eingesetzt in die obere Gleichung:

$$\begin{aligned}\mathcal{I}(\mathbf{a}) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}|\mathbf{a}|} (2\pi)^{-3} \sqrt{2\pi} \frac{\sqrt{2}}{8} \int_0^\infty \cos\left(\frac{r}{2}\right) \sin\left(\frac{r}{2}|\mathbf{a}|\right) r \, dr \\ &= (2\pi)^{-3} \frac{1}{2|\mathbf{a}|} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial|\mathbf{a}|} \left( -2 \cos\left(\frac{r}{2}\right) \cos\left(\frac{r}{2}|\mathbf{a}|\right) \right) \, dr.\end{aligned}$$

Dieses Integral divergiert. Es wird die folgende Eins verwendet  $\lim_{\varepsilon' \rightarrow \infty} e^{-\frac{r^2}{\alpha\varepsilon'}} = 1 \ \forall \alpha, r \in \mathbb{R}$ , um das Integral in eine Folge konvergenter Integrale zu schreiben, die gegen ein divergentes Integral konvergieren.

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_{\varepsilon'}(\mathbf{a}) &:= (2\pi)^{-3} \frac{1}{2|\mathbf{a}|} \frac{\partial}{\partial|\mathbf{a}|} \int_0^\infty \left( -2 \cos\left(\frac{r}{2}\right) \cos\left(\frac{r}{2}|\mathbf{a}|\right) e^{-\frac{r^2}{4\varepsilon'}} \right) \, dr, \quad \varepsilon' > 0 \\ &= (2\pi)^{-3} \frac{1}{2|\mathbf{a}|} \frac{\partial}{\partial|\mathbf{a}|} \sqrt{\pi\varepsilon'} (1 + e^{|\mathbf{a}|\varepsilon'}) \left( -e^{-\frac{\varepsilon'}{4}(|\mathbf{a}|+1)^2} \right) \\ &= (2\pi)^{-3} \frac{1}{2|\mathbf{a}|} \frac{1}{2} \sqrt{\pi\varepsilon'}^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\varepsilon'}{4}(|\mathbf{a}|+1)^2} (1 + |\mathbf{a}| + (|\mathbf{a}| - 1) e^{|\mathbf{a}|\varepsilon'}), \quad \varepsilon := \varepsilon'^{-1} \\ &= (2\pi)^{-3} \frac{\sqrt{\pi}}{4|\mathbf{a}|} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^3}} (1 + |\mathbf{a}| + (|\mathbf{a}| - 1) e^{\frac{|\mathbf{a}|}{\varepsilon}}) e^{-\frac{(|\mathbf{a}|+1)^2}{4\varepsilon}}.\end{aligned}$$

Die  $\delta$ -Distribution besitzt mehrere eindimensionale Repräsentationen durch Funktionenfolgen<sup>6</sup>. Die folgende erweist sich als hilfreich:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\sqrt{\pi\varepsilon}} e^{-\frac{x^2}{4\varepsilon}}.$$

Um diese Funktionenfolge nun auch dreidimensional, also für einen Vektor  $\mathbf{x}$ , korrekt beschreiben zu können wird folgende Rechnung angewendet, die durch den Betrag des Argumentvektors  $|\mathbf{x}| = r$  vereinfacht werden kann<sup>7</sup>:

$$\delta(\mathbf{x}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{(2\sqrt{\pi\varepsilon})^3} e^{-\frac{x^2}{4\varepsilon}} e^{-\frac{y^2}{4\varepsilon}} e^{-\frac{z^2}{4\varepsilon}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{8\sqrt{(\pi\varepsilon)^3}} e^{-\frac{r^2}{4\varepsilon}}.$$

Damit lässt sich der Grenzwert ausführen zu

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon' \rightarrow \infty} \mathcal{I}_{\varepsilon'}(\mathbf{a}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathcal{I}_{\varepsilon}(\mathbf{a}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi|\mathbf{a}|} \frac{1}{8\sqrt{\pi^3\varepsilon^3}} \left[ (|\mathbf{a}| + 1) e^{-\frac{(|\mathbf{a}|+1)^2}{4\varepsilon}} + (|\mathbf{a}| - 1) e^{-\frac{(|\mathbf{a}|-1)^2}{4\varepsilon}} \right] \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi|\mathbf{a}|} \frac{1}{8\sqrt{\pi^3\varepsilon^3}} \left[ (|\mathbf{a}| + 1) e^{-\frac{(|\mathbf{a}|+1)^2}{4\varepsilon}} + (|\mathbf{a}| - 1) e^{-\frac{(|\mathbf{a}|-1)^2}{4\varepsilon}} \right] \\ &= \frac{1}{4\pi|\mathbf{a}|} \underbrace{\left[ (|\mathbf{a}| + 1) \delta(|\mathbf{a}| + 1) + (|\mathbf{a}| - 1) \delta(|\mathbf{a}| - 1) \right]}_{=0, \text{ weil } |\mathbf{a}|+1 \neq 0}.\end{aligned}$$

<sup>6</sup> siehe <http://functions.wolfram.com/GeneralizedFunctions/DiracDelta/09/> (Stand: 28.07.2016).

<sup>7</sup> Dass es sich bei dieser Funktion tatsächlich um eine Folge handelt, die in Kugelkoordinaten gegen die  $\delta$ -Distribution konvergiert, wird im Anhang A.1 gezeigt.

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

Insgesamt folgt damit für die Wignerfunktion:

$$W_\rho(\mathbf{a}) = \frac{(|\mathbf{a}| - 1)\delta(|\mathbf{a}| - 1)}{4\pi|\mathbf{a}|} \left( 1 + a_1 \langle \sigma_1 \rangle_\rho + a_2 \langle \sigma_2 \rangle_\rho + a_3 \langle \sigma_3 \rangle_\rho \right). \quad (5.4)$$

Dieser Term mag zunächst verwundern, da es so aussieht, als wäre die Funktion identisch Null. Plottet man jedoch die Funktionenfolge, die gegen diese Funktion (Distribution) konvergiert in Abhängigkeit des Betrages  $|\mathbf{a}|$ , so erkennt man schnell die Form einer Gaußkurve, die gegen eine  $\delta$ -Distribution konvergiert, die jedoch - je nach Richtung in der man sich der Singularität nähert - unterschiedliche Vorzeichen besitzt. Hier gezeigt für  $\varepsilon = 10^{-3}$ :

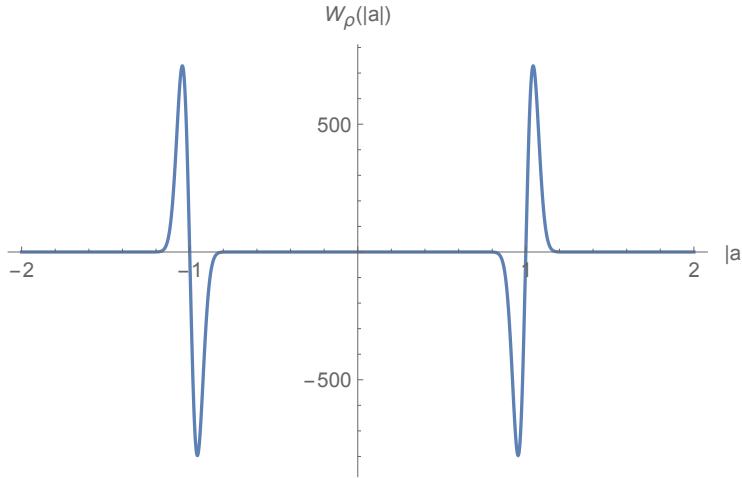


Abbildung 5.10.: Qubit-Wignerfunktion in Abhängigkeit des Argumentbetrages

Der distributionelle Charakter der Wignerfunktion wird an dieser Stelle besonders deutlich. Nichtsdestotrotz erhält man die korrekten Marginalverteilungen aus dieser Distribution:

### 5.4.2. Die Marginalverteilungen im Qubit-Fall

Um die Marginalien, beispielsweise für die Variable  $a_1$ , aus diesen Funktionen zu errechnen gibt es zwei Wege: Entweder man setzt bereits in (5.1) die jeweils anderen Variablen gleich Null und führt das Integral aus, oder man integriert sie zukzessive aus (5.4) aus. Im Folgenden wird der erste Weg gezeigt:

Werden die Variablen  $a_2 = a_3 = 0$  gesetzt und die Vorfaktoren einer eindimensionalen Fourier-Transformation gewählt, so folgt bereits in (5.1) die Formel:

$$\mathbb{P}_\rho(a_1) = \frac{(1 + a_1 r_1)}{(2\pi)} \int_{\mathbb{R}} d\xi_1 e^{i\xi_1 a_1} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right). \quad (5.5)$$

Die Fourier-Transformation ist im distributionellen Sinn für den Kosinus definiert durch die Identität

$$\int_{\mathbb{R}} \cos(at) e^{\pm i\omega t} dt = 2\pi \left( \frac{\delta(\omega + a) + \delta(\omega - a)}{2} \right).$$

Damit lässt sich die Marginalverteilung schreiben als

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}_\rho(a_1) &= \frac{(1 + a_1 r_1)}{(2\pi)} \int_{\mathbb{R}} d\xi_1 e^{i\xi_1 a_1} \cos\left(\frac{\xi_1}{2}\right) \\
 &= \frac{1}{2}(1 + a_1 \langle \sigma_1 \rangle) \left( \delta\left(a_1 + \frac{1}{2}\right) + \delta\left(a_1 - \frac{1}{2}\right) \right), \tag{5.6}
 \end{aligned}$$

welches die korrekte Form der Verteilung ist. Die Rechnung kann analog für  $a_2$  und  $a_3$  durchgeführt werden. Die zweite Variante wird an dieser Stelle nicht gezeigt, weil die Integrationen nicht analytisch lösbar sind.

### 5.4.3. Systeme mit beliebig hohem Drehimpuls

Der zuvor besprochene Fall lässt sich nun auf den Fall  $j \geq 1$  anwenden. Die Wignerfunktion liefert in jeder Richtung die exakten Marginalverteilungen - nur ist das bei hohen Drehimpulsen nicht mehr trivial zu erkennen. Aus diesem Grund werden die Wignerfunktionen sowohl für einen bosonischen, als auch für einen fermionischen Fall aufgezeigt und die Marginalien für beide Beispiele angegeben.

#### Bosonischer Teil

Für  $j = 1$  betrachtet man ein bosonisches System. Die irreduziblen Darstellungen der  $j = 1$ -Drehimpulsalgebra sind durch  $\mathbb{C}^{3 \times 3}$  Matrizen gegeben. Die Wignerfunktion und die Marginalverteilungen haben folgende Form:

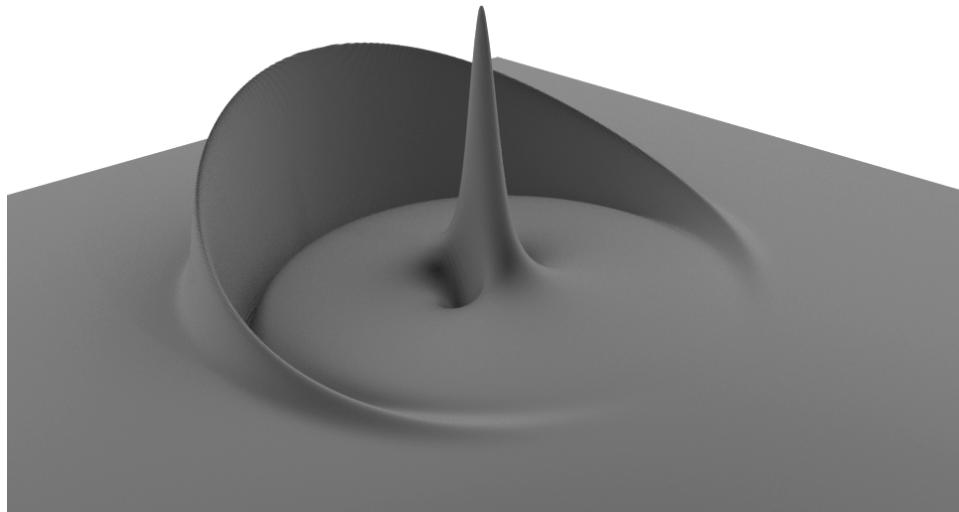


Abbildung 5.11.: Wignerfunktion für  $j = 1$

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

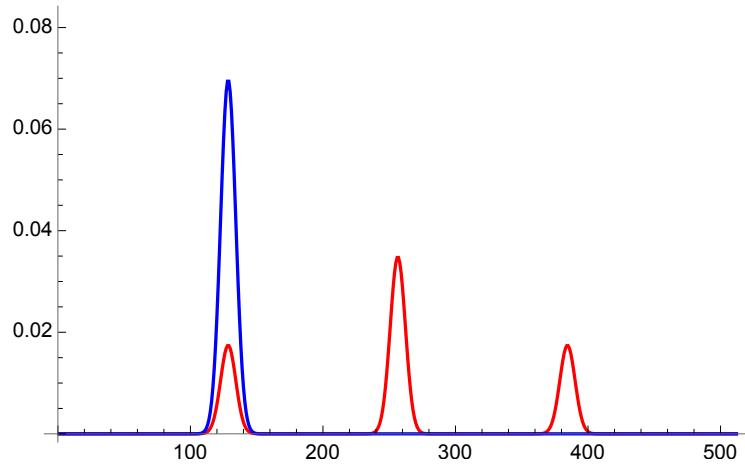


Abbildung 5.12.: Marginalien für  $j = 1$

Man erkennt drei mögliche Erwartungswerte durch die rote Messung  $J_y$  und einen Erwartungswert durch die blaue Messung  $J_x$ , was physikalisch korrekt ist, da die Wignerfunktion im Eigenzustand von  $J_x$  präpariert wurde. Die Marginalien sind im Grenzfall  $\varepsilon \rightarrow 0$  wieder, analog zum Qubit-Fall, Dirac'sche  $\delta$ -Distributionen und integriert man mit **Mathematica** numerisch über diese Kurven, so erhält man den Flächeninhalt Eins mit Abweichungen unterhalb von einem Prozent. Die Peaks befinden sich bei den Werten  $\pm 1$  und 0, die Abzisse entspricht dem Intervall  $[-2, 2]$ .

### Fermionischer Teil

Die gleiche Analyse wird nun noch für  $j = \frac{9}{2}$ , also ein Fermion, durchgeführt. Die darstellenden Matrizen sind  $2j + 1 = 10$  dimensional und enthalten dementsprechend viele Erwartungswerte. Diese erkennt man auch (wenn auch an den Seiten sehr schwach) durch die rote Messung. Die blaue Messung ist dagegen wieder scharf:

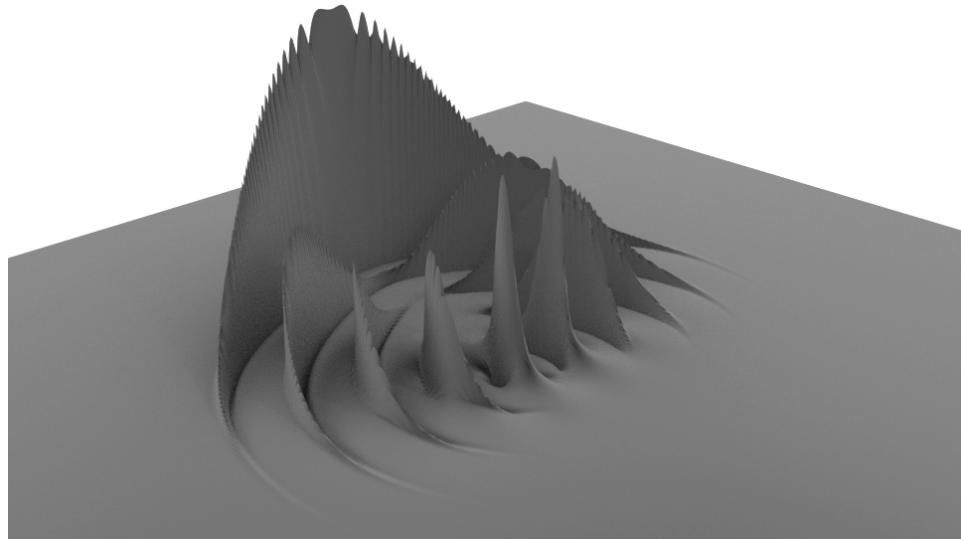


Abbildung 5.13.: Wignerfunktion für  $j = 9/2$

#### 5.4. Die Drehimpulsalgebra und Qubits

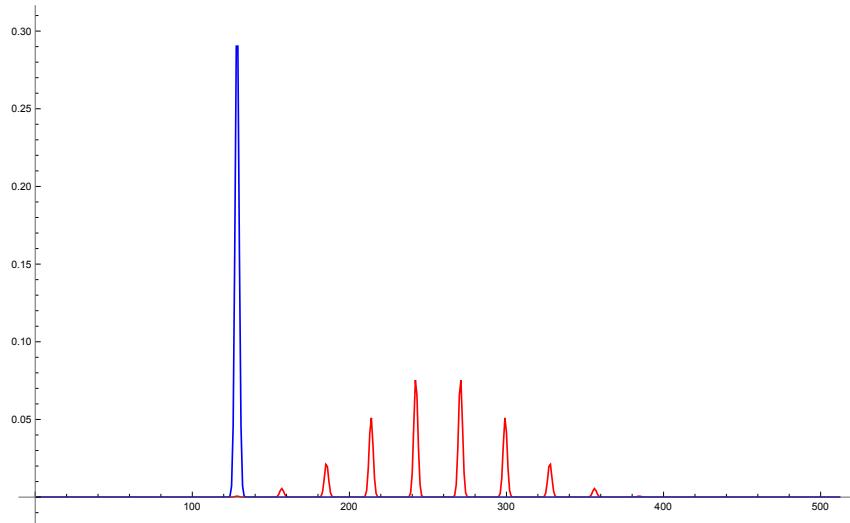


Abbildung 5.14.: Marginalien für  $j = 9/2$

Es lassen sich natürlich auch Linearkombinationen dieser Messungen durchführen. In der folgenden Draufsicht sind die Messungen der vorigen Marginale eingezeichnet (blau und rot) und zudem eine grüne Messung  $\frac{1}{\sqrt{2}} (J_x + J_y)$ , die eine Superposition der beiden darstellt. Die Marginale dieser Messung werden dazu angegeben:

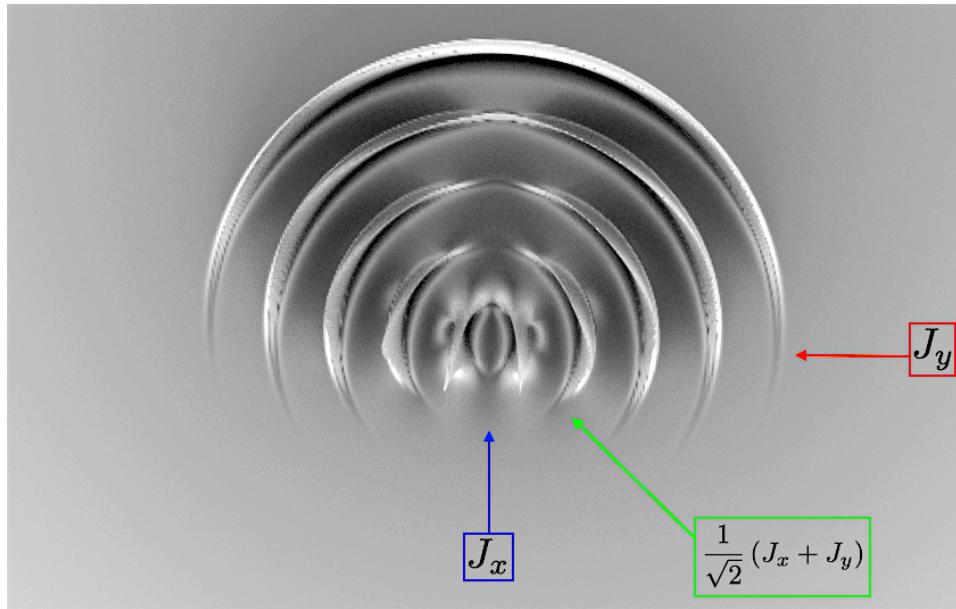


Abbildung 5.15.: Draufsicht der  $j = 9/2$  Wignerfunktion mit Messrichtungen

## 5. Visualisierung der Wignerfunktion

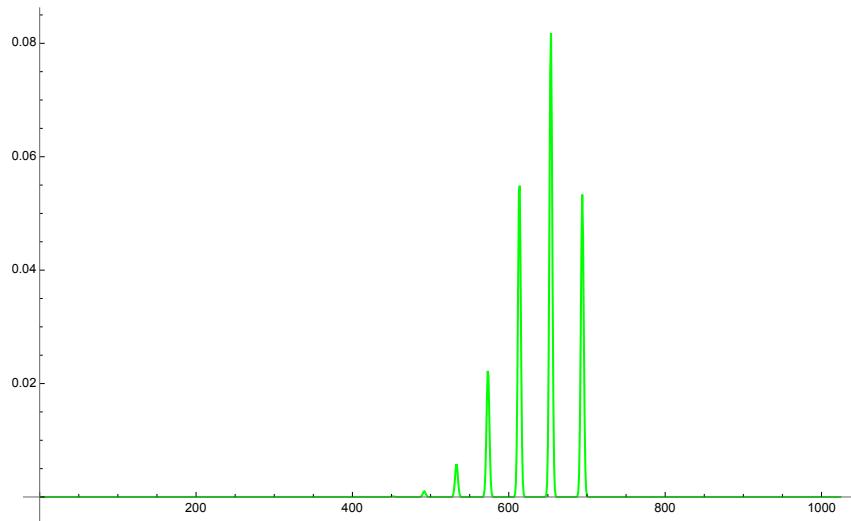


Abbildung 5.16.: Marginalverteilung der Superpositionsmeßung

Je höher die Drehimpulsquantenzahl  $j$  jedoch gesetzt wird, desto höher muss die Auflösung der FFT sein, um einzelne Details zu erkennen. Im Vergleich der Qubit-Wignerfunktion mit der Spin-9/2-Wignerfunktion erkennt man diesen Sachverhalt besonders gut: Die Marginalien erscheinen, in einzelnen Punkten, für den letzteren Fall nicht einmal mehr glatt. Der nächsthöhere fermionische Spin,  $j = 11/2$ , würde mit  $512 \times 512$  Diskretisierungspunkten zwar ähnlich aussehen, jedoch würden die Marginalien in den äußeren Bereichen sowohl viel zu klein (im Vergleich zu den Hauptpeaks) sein, als auch „kantig“, wie man es in folgendem Bildausschnitt erkennen kann.

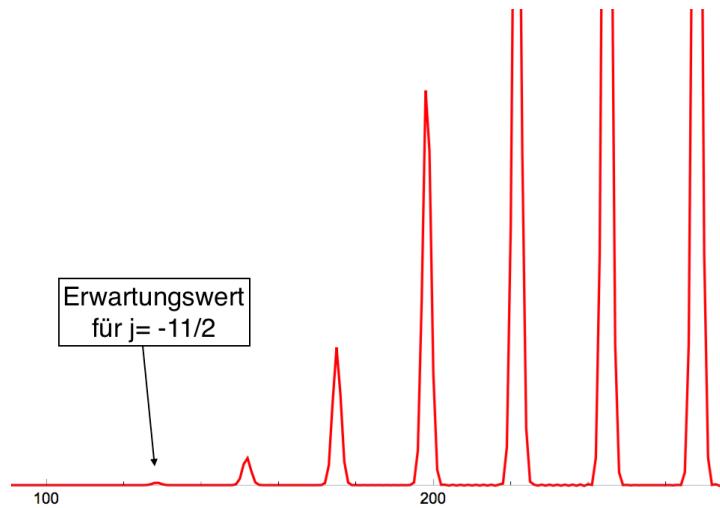


Abbildung 5.17.: Seitenausschnitt der  $j = 11/2$ -Marginalien nach  $J_y$ -Messung

Die gezeigte Wignerfunktion stellt also das Ende der Darstellbarkeit dieses Algorithmus dar, die mithilfe nicht professioneller Rechner errechnet werden und die der Anschauung halber nützlich sind. Für rechenstarke Computer-Cluster ist die Darstellungsgrenze natürlich beliebig hoch zu setzen.

## 6. Zusammenfassung

Durch die Annahme, dass die Wignerfunktion auch eine Distribution sein kann, haben sich neue Möglichkeiten aufgetan, die verschiedene Analysemethoden nach sich gezogen haben. Eine verallgemeinerung der Wignerfunktion ist jedoch nicht neu, denn viele andere Wissenschaftler haben bereits Artikel zu dieser Fragestellung veröffentlicht. In den Papern [CS85], [SC05], [LP97] und [SW93] ist eine ähnliche Herangehensweise geschildert, jedoch werden den Wignerfunktionen in diesen Arbeiten nie Eigenschaften von Distributionen zugewiesen. Im ersten dieser Paper wird auch der Fall einer Wignerfunktion für ein Spin-1/2 Teilchen berechnet. Die Rechnung erfolgt insofern analog, als dass der selbe Ansatz für die Wignerfunktion gewählt wurde und die Berechnung über die Fourier-Transformation erfolgte, jedoch wurden nur zwei Freiheitsgrade zugelassen. In dieser Arbeit wurde dieses Problem mit einer Dimension mehr gelöst. Über beide Wege errechnen sich die gleichen Marginalverteilungen, wie sie für die Qubits bekannt sind.

Die Tatsache, dass jegliche Distributionen, insofern sie nicht gänzlich singulär sind, durch Gaußglättung zu Funktionen werden, ermöglicht es analytische Ausdrücke für Wignerfunktionen in Bezug auf alle möglichen hermiteschen Matrizen, ob sie eine physikalische Messung darstellen oder nicht, zu errechnen. Auch die endliche Anzahl der betrachteten Observablen, die man an einem Zustand betrachtet, kann beliebig hoch sein. Nur lassen sich die Ergebnisse im Falle von drei und mehr Observablen nicht mehr in Form von Graphen darstellen. In [SC05] wird sogar eine Methode angesprochen, mithilfe derer man unendlich viele Operatoren betrachten kann.

Insgesamt lässt sich also zusammenfassen: Auch wenn die Quantenmechanik die gleichzeitige Messung mancher Aspekte eines Systems verbietet und somit als statistische Theorie bekannt ist, so erhält man trotzdem oftmals exakte Ergebnisse, wenn andere Aspekte unbeobachtet bleiben. Die Wignerfunktion zeigt diesen Zusammenhang der Unschärfe sehr anschaulich und die bloße Tatsache, dass sie sich für beliebige Systeme und beliebige Messungen konstruieren lässt, hebt einmal mehr hervor wie erfolgsversprechend die Quantentheorie ist und dass sie Zurecht einen der Grundpfeiler der modernen Physik bildet.

# A. Anhang

## A.1. Topologien und Formeln

### Der Raum der glatten Funktionen $\mathcal{E}$

Auf dem Raum der glatten Funktionen  $C^\infty(X)$  erzeugen die Halbnormen

$$p_{K,m}(\varphi) = \sup_{x \in K, |\alpha| \leq m} |D^\alpha \varphi(x)|, \quad m \in \mathbb{N}, \alpha \in \mathbb{N}^n$$

für  $K \subseteq X$  kompakt, eine lokalkonvexe Topologie. Zusammen mit dieser Topologie wird der Raum als  $\mathcal{E}(X)$  notiert. (siehe [Jan71][§11, p. 49])

### Der Schwartz-Raum $\mathcal{S}$

Der Schwartzraum  $\mathcal{S}(X)$  wird durch die Halbnormfamilie

$$p_{\alpha,\beta}(\varphi) = \sup_{x \in X} |x^\alpha D^\beta \varphi(x)|, \quad \alpha \in \mathbb{N}^n,$$

oder vollkommen analog mit einem Polynom  $Q(x)$

$$p_{\alpha,Q}(\varphi) = \sup_{x \in X} |Q(x)(D^\alpha \varphi)(x)|,$$

zu einem lokalkonvexen, metrisierbaren Raum - einem Fréchet-Raum. (siehe [Hör90][Ch. 7, p. 160])

### Der Raum der glatten Funktionen mit kompaktem Träger $\mathcal{D}$

Durch die Topologie, die von den Halbnormen

$$p_{K,m}(\varphi) = \sup_{x \in K, |\alpha| \leq m} |D^\alpha \varphi(x)|, \quad m \in \mathbb{N}$$

induziert wird, wird der Raum  $C_c^\infty(X)$  zu  $\mathcal{D}(X)$ . (siehe [Jan71][§12, p.51])

### Abschätzung von Distributionen

Betrachtet man nun die topologischen Duale dieser Räume, so ist eine Bemerkung für alle Räume analog: Eine stetige Linearform auf jedem dieser drei Testfunktionenräume, kann betragsweise durch die Halbnorm des Argumentes und einer positiven Konstante abgeschätzt werden. Ist zum Beispiel  $u \in \mathcal{S}'(X)$ , so gilt

$$|u(\varphi)| \leq C p_{\alpha,\beta}(\varphi), \quad \text{mit } C > 0.$$

*Beweis.* Der Beweis findet sich für die einzelnen Räume in [Jan71][§14, Satz 14.1, p. 60] und [Jan71] [§37, Satz 37.7, p. 174]  $\square$

Die Topologie der Dualräume lässt sich (je nach nötigem Konvergenzgrad, der in der Theorie partieller Differentialgleichungen wichtig wird) durch die *starke Topologie*, oder die *Topologie der schwach-\*Konvergenz* definieren. Diese werden im Folgenden charakterisiert.

### Operator- und Dualraumtopologien

Sei  $\mathcal{H}$  ein normierter Raum und  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$  ein linearer, beschränkter Operator. So kann man  $\mathcal{H}$  und  $\mathcal{H}'$  mit verschiedenen Topologien austatten, die durch (Halb-)Normen erzeugt werden. Jede der folgenden Topologien besitzt eine lokalkonvexe Struktur:

- Die *Normtopologie* wird von der Operatornorm  $\|A\| = \sup_{x \in \mathcal{H}, \|x\|=1} \|Ax\|$  auf  $\mathcal{H}$  induziert.
- Die Halbnormen  $p_x(A) := \|Ax\|$  induzieren die *starke Operatortopologie* auf  $\mathcal{H}'$ .
- Die *schwache Operatortopologie* wird von den Halbnormen  $p_{x,y}(A) := |\langle Ax, y \rangle|$  induziert und topologisiert  $\mathcal{H}$ .
- Die *schwach-\*Topologie* wird durch das Halbnormensystem  $p_{x_1, \dots, x_n}(f) = \max(|f(x_1)|, \dots, |f(x_n)|)$  definiert und macht  $\mathcal{H}'$  zu einem lokalkonvexen Raum.

### Der Raum der Distributionen $\mathcal{D}'$

Eine Distribution  $u$  auf  $X$  ist eine lineare Abbildung von  $\mathcal{D}(X)$ , sodass für jedes kompakte  $K \subset X$  Konstanten  $C$  und  $m$  existieren mit

$$|u(\phi)| \leq C p_{K,m}(\varphi) = C \sup_{x \in K, |\alpha| \leq m} |D^\alpha \varphi(x)| \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(K).$$

Die kleinste Konstante  $m$ , für die diese Gleichung für alle kompakten  $K$  gilt, heißt *Ordnung der Distribution*.

### Der Raum der Distributionen mit kompaktem Träger $\mathcal{E}'$

Der Raum der Distributionen mit kompaktem Träger (also die Menge der Distributionen, deren Träger ein kompakter Raum ist) ist nach [Hör90][Theorem 2.3.1 p. 44] isomorph zu  $\mathcal{E}'(X)$ .

### Die logarithmische Norm

Die *logarithmische Norm* einer quadratischen Matrix ist keine Norm im strengen Sinn. Sei  $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$  und  $\|\cdot\|$  die induzierte Matrixnorm, so ist

$$\mu(A) := \lim_{h \rightarrow +0} \frac{\|\mathbb{1} + hA\| - 1}{h}$$

die logarithmische Norm von  $A$ .

### Frobenius-Skalarprodukt

Das *Frobenius-Skalarprodukt* zweier quadratischer, komplexwertiger Matrizen  $A$  und  $B$  ist

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(A^\dagger B).$$

Es gilt die fundamentale Abschätzung

$$|\langle A, B \rangle| \leq \|A\| \|B\|.$$

## A. Anhang

### Das Matrixexponential der Paulimatrizen

Um unnötigen Rechenaufwand zu vermeiden ist es hilfreich die Matrixexponentialfunktion der Paulimatrizen direkt auszuwerten. Diese lauten:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad e^{x \cdot \sigma_1} &= \begin{pmatrix} \cosh(x) & \sinh(x) \\ \sinh(x) & \cosh(x) \end{pmatrix} \\ \text{ii)} \quad e^{x \cdot \sigma_2} &= \begin{pmatrix} \cosh(x) & -i \sinh(x) \\ i \sinh(x) & \cosh(x) \end{pmatrix} \\ \text{iii)} \quad e^{x \cdot \sigma_3} &= \begin{pmatrix} e^x & 0 \\ 0 & e^{-x} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

### Die $\delta$ -Distribution in Kugelkoordinaten

Um zu zeigen, dass eine Folge von Funktionen  $f_n(\mathbf{x})$  gegen die  $\delta$ -Distribution konvergiert, müssen zwei Identitäten erfüllt sein:

$$\text{i)} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^N} f_n(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1 \quad \text{und} \quad \text{ii)} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^N} f_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) d\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{x}_0) \quad \forall \varphi \in \mathcal{E}(\mathbb{R}^N)$$

Da sich jede glatte Funktion durch ihre Taylorreihe approximieren lässt, ist der zweite Teil äquivalent dazu, dass das Integral über die Funktionenfolge mit jedem Polynom verschwindet, wenn als Entwicklungsstelle  $\mathbf{x}_0 = 0$  gewählt wird. Wählt man die Kugelkoordinaten ( $N = 3$ ) und die Funktionenfolge, wie sie im Qubit-Kapitel eingeführt wurde, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \text{ii)} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr \sin(\theta) r^2 r^k \frac{1}{8\sqrt{(\pi\varepsilon)^3}} e^{-\frac{r^2}{4\varepsilon}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{4\pi}{8\sqrt{(\pi\varepsilon)^3}} \int_0^\infty dr r^{k+2} e^{-\frac{r^2}{4\varepsilon}} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{\varepsilon^3}} 2^{k+2} \varepsilon^{\frac{3+k}{2}} \Gamma\left(\frac{3+k}{2}\right) \propto \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon^{\frac{3+k}{2} - \frac{3}{2}} = 0 \quad \forall k \in \mathbb{N}^+. \end{aligned}$$

Für den Fall  $k = 0$  ergibt sich die Frage der Normierung - sprich i). Wertet man die soeben erhaltene Gleichung für  $k = 0$  aus, so erhält man:

$$\text{i)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sqrt{\varepsilon^3}} 2^2 \varepsilon^{\frac{3}{2}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{2\sqrt{\pi}\sqrt{\varepsilon^3}}{2\sqrt{\pi}\sqrt{\varepsilon^3}} = 1.$$

Es sind also beide Voraussetzungen erfüllt.

## A.2. Mathematica-Code

# Mathematica-Code zur Bachelorarbeit “Wignerfunktion für beliebige Operatortupel”

### Grunddefinitionen

```
Needs["Developer`"];
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
<< "qimaph.m";
srange[n_] := Range[-(n - 1)/2, (n - 1)/2];
NCh = N@Chop[#1, 2 $MinMachineNumber] &;
SetAttributes[NCh, Listable];
tpa = ToPackedArray[NCh[#], Complex] &

setFourier[n_, pmax_] := (nn = n;
  δx = N[π/pmax]; xs = δx * srange[n];
  δp = 2 π/(nn * δx); ps = δp * srange[n];
  faseIn = tpa@Exp[i π (1 - 1/n) * Range[0, n - 1]];
  faseOut = tpa@ (Exp[-i π (n/2 - 1 + 1/(2 n))] * faseIn);
  fase2In = tpa@Outer[Times, faseIn, faseIn];
  fase2Out = tpa@Outer[Times, faseOut, faseOut];
  );

Fou1[list_] := faseOut * Fourier[tpa[faseIn * list], FourierParameters → {-1, -1}];
Fou2[array_] :=
  fase2Out * Fourier[tpa[fase2In * array], FourierParameters → {-1, -1}];
make[dim_, n_] := (aas = Table[randomH[dim], {n}]);
make[dim_] := make[dim, 2];
wh[eps_] := whs =
  tpa@Outer[Exp[-eps * (#1^2 + #2^2)] * Tr[MatrixExp[i (#1, #2).aas]] &, xs, xs, 1];
wh[eps_, ρ_] := whs = tpa@
  Outer[Exp[-eps * (#1^2 + #2^2)] * Tr[ρ.MatrixExp[i (#1, #2).aas]] &, xs, xs, 1];

angles = Range[0, π, .01];
dirvecs = Transpose[{Cos[angles], Sin[angles]}];
evpoints[mats_, vec_] := Module[{evs = Normalize /@ Eigenvectors[vec.mats]},
  Outer[Chop[Conjugate[#1].#2.#1] &, evs, mats, 1]];
evcurves[mats_] := Flatten[evpoints[mats, #] & /@ dirvecs, 1];
to3D[points_, z_] := Point[Append[#, z]] & /@ points;
viz[mats_, z_] := Graphics3D[to3D[evcurves[mats], z]]
```

## Mögliche Wahl der Matrixtupel

```
randomAas := make[3];
angmom :=
  (aas = {{{0, 0, 0}, {0, 0, I}, {0, -I, 0}}, {{0, I, 0}, {-I, 0, 0}, {0, 0, 0}}});
quadri = (a1 = .1 * DiagonalMatrix[{1, 0, -1}]);
a2 = {{0, randomC, randomC}, {0, 0, randomC}, {0, 0, 0}};
aas = {a1 + a2 + a2†, -a1 + I a2 - I a2†});
```

## Konkrete Form der gewählten Matrizen

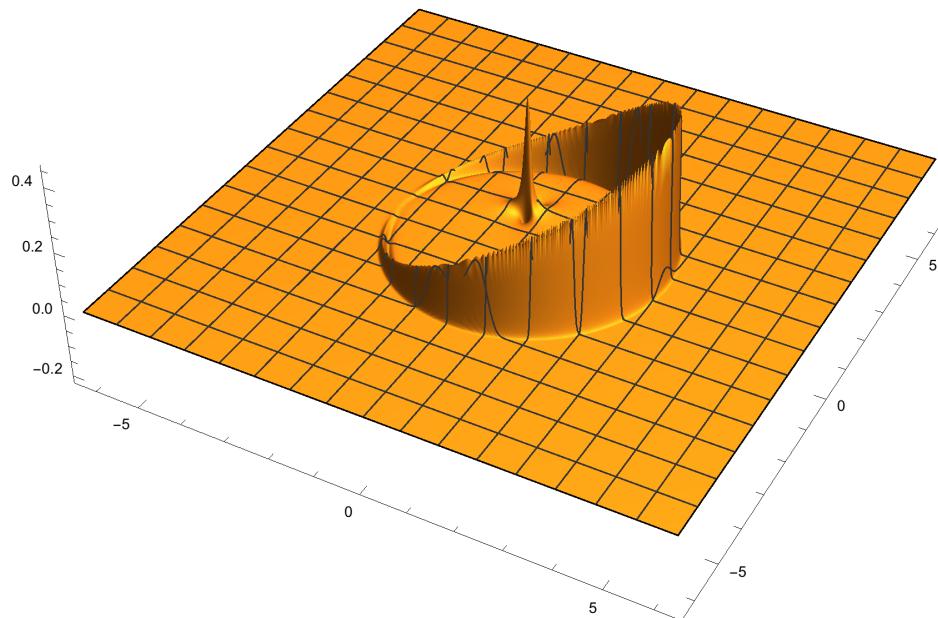
```
{aas[[1]] // MatrixForm, aas[[2]] // MatrixForm}

{ \left( \begin{array}{ccc} 0.1 & 0.997978+0.510225\, \text{\textit{i}} & -0.131231-1.2218\, \text{\textit{i}} \\ 0.997978-0.510225\, \text{\textit{i}} & 0. & 1.03932-2.08745\, \text{\textit{i}} \\ -0.131231+1.2218\, \text{\textit{i}} & 1.03932+2.08745\, \text{\textit{i}} & -0.1 \end{array} \right) , \left( \begin{array}{ccc} -0.1 & -0.510225+0.997978\, \text{\textit{i}} & 1.2218-0.131231\, \text{\textit{i}} \\ -0.510225-0.997978\, \text{\textit{i}} & 0. & 2.08745+1.03932\, \text{\textit{i}} \\ 1.2218+0.131231\, \text{\textit{i}} & 2.08745-1.03932\, \text{\textit{i}} & 0.1 \end{array} \right) }
```

---

## Visualisierung der Wignerfunktion (ohne Erwartungswerttupel)

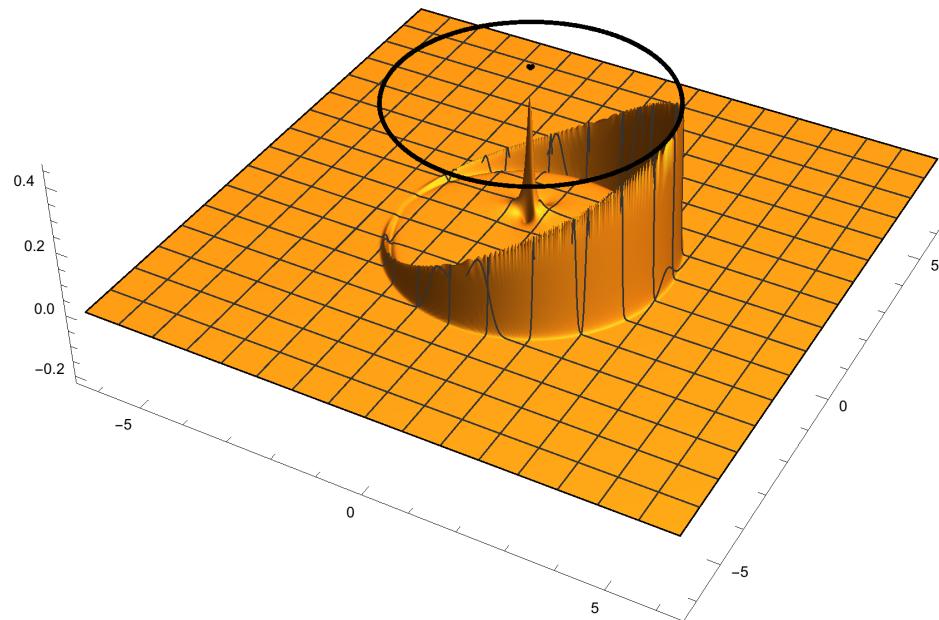
```
maxx = Max[Norm /@ aas];
ψ = Eigenvectors[aas[[1]]][[1]] // Normalize;
rho = ketbra[ψ];
setFourier[512, 2 * maxx];
wh[.001, rho];
ww = Fou2[whs];
wwpoints =
  Flatten[Table[{ps[[i]], ps[[j]], 100 * Chop[ww[[i, j]]]}, {i, nn}, {j, nn}], 1];
pic1 = Show[ListPlot3D[wwpoints, PlotRange -> All,
  ImageSize -> Large, Boxed -> False]]
```



---

## Visualisierung der Wignerfunktion (mit Erwartungswerttupel)

```
maxx = Max[Norm /@ aas];
ψ = Eigenvectors[aas[[1]]][[1]] // Normalize;
rho = ketbra[ψ];
setFourier[512, 2 * maxx];
wh[.001, rho];
ww = Fou2[whs];
maxz = Max@Flatten@Chop@ww;
wwpoints =
  Flatten[Table[{ps[[i]], ps[[j]], 100 * Chop[ww[[i, j]]]}], {i, nn}, {j, nn}], 1];
pic2 = Show[ListPlot3D[wwpoints, PlotRange → All,
  ImageSize → Large, Boxed → False], viz[aas, 100 maxz]]
```



# Literaturverzeichnis

- [CS85] Leon Cohen and Marlan O. Scully. Joint Wigner Distribution for Spin-1/2 Particles, 1985.
- [DJ69] William F. Donoghue Jr. *Distributions and Fourier Transforms*. Academic Press Inc. London Ltd., 1969.
- [GJK03] Eugene Gutkin, Edmond A. Jonckheere, and Michael Karow. Convexity of the Joint Numerical Range: Topological and Differential Geometric Viewpoints, 2003.
- [Gus69] Karl Gustafson. The Toeplitz-Hausdorff Theorem for Linear Operators. 1969.
- [GZ12] Eugene Gutkin and Karol Zyczkowski. Joint numerical ranges, quantum maps, and joint numerical shadow, 2012.
- [Hör90] Lars Hörmander. *The Analysis of Linear Partial Differential Operators I*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990.
- [HW03] Hermann Haken and Hans Christoph Wolf. *Atom- und Quantenphysik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [Jan71] Lothar Jantscher. *Distributionen*. Walter de Gruyter & Co., 1971.
- [Kat82] Tosio Kato. *A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer-Verlag New York Inc., 1982.
- [LP97] A. Luks and V. Perinová. Wigner Functions For Two Arbitrary Operators And Spectrum Perturbation, 1997.
- [OW12] Thomas Ottmann and Peter Widmayer. *Algorithmen und Datenstrukturen*. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2012.
- [Pin02] Mark A. Pinsky. *Introduction to Fourier Analysis and Wavelets*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2002.
- [RS78] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators*. Academic Press Inc., 1978.
- [SC05] Marlan O. Scully and Leon Cohen. Quasi-Probability Distributions for Arbitrary Operators, 2005.
- [SSM<sup>+</sup>14] N. Sridhar, R. Shahrokhsahi, A. Miller, B. Calvins, T. Gerrits, A. Lita, S. Nam, and O. Pfister. Direct measurement of the Wigner function by photon-number-resolving detection, 2014.
- [SW93] Marlan O. Scully and K. Wódkiewicz. Spin Quasi-distribution Functions, 1993.
- [Wer11] Dirk Werner. *Funktionalanalysis*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011.
- [Wer16] Reinhard Werner. Vorlesungsmanuskript Quantenmechanik, 2016.
- [Wey28] Hermann Weyl. *Gruppentheorie und Quantenmechanik*. Verlag von S. Hirzel Leipzig, 1928.
- [Wig32] Eugene Paul Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. 1932.

# **Erklärung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift