

Wigner 表示であそぼう

鳥居 優作

2016 年 4 月 20 日

目次

1	はじめに	1
2	Wigner 関数	1
2.1	定義	1
2.2	任意の演算子に対する Wigner 表示	2
2.3	Wigner 関数の性質	2
3	Wigner 分布関数の時間発展	2
3.1	$(\hat{A}\hat{B})_W$ の計算	2
3.2	$f_W(q, p, t)$ の時間発展	3
4	具体的な問題	3
4.1	調和振動子系の Wigner-Moyal 方程式	3
4.2	数値計算	4

1 はじめに

Wigner 関数と呼ばれる表示を用いて運動の様子を見ることにする。量子的世界を古典的な分布関数の世界に置き換えて、直感的に物理を理解することが目的。誤植・間違った記述があるかもしれないので批判的に読んでください。

2 Wigner 関数

2.1 定義

Wigner 関数の定義は以下の通り:

$$f_W(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} ds \left\langle q - \frac{s}{2} \middle| \psi(t) \right\rangle \left\langle \psi(t) \middle| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} \quad (2.1)$$

もしくは

$$f_W(q, p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (2.2)$$

とすることもできる。ここでは $q_{12} = (q_1 + q_2)/2$, $\bar{q}_{12} = q_1 - q_2$ である。

2.2 任意の演算子に対する Wigner 表示

任意の演算子 \hat{A} に対する Wigner 表示は

$$A_W(q_{12}, p) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \hat{A} | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (2.3)$$

である。ここで

$$\langle q_1 | \hat{A} | q_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int dp A_W(q_{12}, p) e^{-ip\bar{q}_{12}} \quad (2.4)$$

が成立している。

2.3 Wigner 関数の性質

3 Wigner 分布関数の時間発展

$f_W(q, p, t)$ の時間発展方程式を導く。その準備として 2 つの演算子同士の積 $(\hat{A}\hat{B})$ の Wigner 変換がどのように計算できるかを考える。

3.1 $(\hat{A}\hat{B})_W$ の計算

今回は式 (2.1) の流儀を採用する:

$$(\hat{A}\hat{B})_W = \int_{-\infty}^{\infty} ds \left\langle q - \frac{s}{2} \right| \hat{A}\hat{B} \left| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ds dq' \left\langle q - \frac{s}{2} \right| \hat{A} \left| q' \right\rangle \left\langle q' \right| \hat{B} \left| q + \frac{s}{2} \right\rangle e^{ips/\hbar} \quad (3.5)$$

ここで式 (2.4) を用いて変形する:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} A_W\left(\frac{q+q'}{2} - \frac{s}{4}, p'\right) B_W\left(\frac{q+q'}{2} + \frac{s}{4}, p''\right) \quad (3.6)$$

exp の肩の変数に着目して A_W, B_W の変数を変形する:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \\ & \times A_W\left(q + \frac{1}{2}\left(q' - q - \frac{s}{2}\right), p'\right) B_W\left(q - \frac{1}{2}\left(q - q' - \frac{s}{2}\right), p''\right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

これを並進演算子を用いて

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \\ & \times \left(e^{\frac{1}{2}(q'-q-\frac{s}{2})\partial_q} A_W(q, p') \right) \left(e^{-\frac{1}{2}(q-q'-\frac{s}{2})\partial_q} B_W(q, p'') \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

と変形。さらに並進変換 $e^{a\partial_q} e^{pq} = e^{(p+a)q}$ を用いて

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int ds dq' dp' dp'' e^{ips/\hbar} \\ & \times \left(A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p''}} e^{-ip''(q'-q-\frac{s}{2})/\hbar} \right) \left(e^{-ip'(q-q'-\frac{s}{2})/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p'') \right) \end{aligned} \quad (3.9)$$

とする。ここで $\overleftarrow{\partial}, \overrightarrow{\partial}$ はそれぞれ左側, 右側に作用する演算子である。次に q' の積分を計算する:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' dp'' e^{ips/\hbar} \\ & \times \left(A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p''}} e^{i(p'-p'')q/\hbar} \delta(p'' - p') e^{-\frac{i}{2}(p''+p')s/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p'') \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

p'' で積分:

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' e^{ips/\hbar} \left(A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} e^{-ip's/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (3.11)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int ds dp' \left(A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} e^{i(p-p')s/\hbar} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (3.12)$$

s で積分:

$$\int dp' \left(A_W(q, p') e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_{p'}} \delta(p - p') e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_{p'} \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p') \right) \quad (3.13)$$

最後に p' で積分:

$$\left(A_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p} e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q} B_W(q, p) \right) \quad (3.14)$$

つまり, $e^{\frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)} = e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda}$ とおくと,

$$(\hat{A}\hat{B})_W = A_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda} B_W(q, p) \quad (3.15)$$

3.2 $f_W(q, p, t)$ の時間発展

以上の結果を基に $f_W(q, p, t)$ の時間発展方程式を導く. Schrödinger 方程式

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.16)$$

を用いて, 式 (2.2) の時間微分は以下のようにまとめられる:

$$i\hbar \partial_t f_W(q, p, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | i\hbar \partial_t (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | i\hbar \partial_t (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \langle q_1 | \psi(t) \rangle i\hbar \partial_t (\langle \psi(t) |) | q_2 \rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{q}_{12} \left\langle q_1 \left| \left[\hat{H}, |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \right] \right| q_2 \right\rangle e^{-ip\bar{q}_{12}/\hbar} \quad (3.19)$$

$$= (\hat{H} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|)_W - (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \hat{H})_W \quad (3.20)$$

$$= H_W(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda} f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t) e^{\frac{i\hbar}{2} \Lambda} H_W(q, p) \quad (3.21)$$

4 具体的な問題

以上の定式化を具体的なモデルに落とし込み, 数値計算で相空間上の運動を見る.

4.1 調和振動子系の Wigner-Moyal 方程式

ハミルトニアンを

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}^2 \quad (4.22)$$

とする. このハミルトニアンの Wigner 表示は

$$H_W(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \quad (4.23)$$

である。これを (3.21) に代入:

$$i\hbar\partial_t f_W(q, p, t) = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t) e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right) \quad (4.24)$$

これを計算する。面倒なので以下では $m = \omega = \hbar = 1$ の単位系を採用。

$$\partial f_W(q, p, t) = (q\partial_p - p\partial_q) f_W(q, p, t) \quad (4.25)$$

のような偏微分方程式が導出される。これを数値的に解きたい。

4.2 数値計算

4.2.1 差分化

今回は簡単のため、普通に差分化する。差分化した方程式は Moyal 方程式は

$$f(t_{n+1}) = k_1[q_l f(p_{m+1}) - p_m f(q_{l+1})] + [k_1(-q_l + p_m) + 1]f \quad (4.26)$$

となる。ここでいくつかの記号の省略ルールを示す:

- Wigner 表示の添字 W は省略
- $f(q_l, p_m, t_n)$ のように差分化しており, q, p の幅は h_{qp} , t の幅は h_t .
- $f(q_l, p_m, t_n) \rightarrow f$, $f(q_{l+1}, p_m, t_n) \rightarrow f(q_{l+1})$ などの表記を用いている.
- $h_t/h_{qp} = k_1$, $h_t/4h_{qp}^2 = k_2$.

これで数値計算が可能な形になった。

4.2.2 初期条件

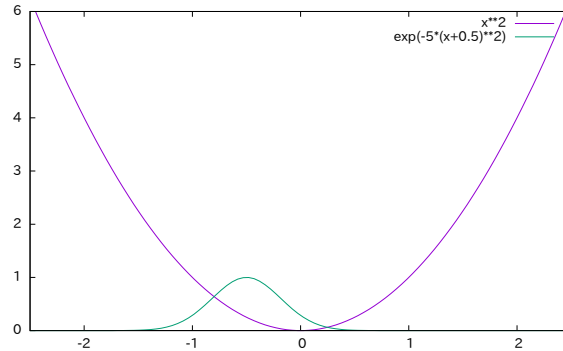
初期関数として

$$f_0 = \sqrt{\frac{5}{\pi}} e^{5(q+\frac{1}{2})^2} \quad (4.27)$$

を用意する (やる気なさ過ぎ?). f_0 の Wigner 表示は

$$f_{0W} = \sqrt{\frac{2}{5\pi}} e^{-10(q^2+q+\frac{p^2}{16}-\frac{1}{4})} \quad (4.28)$$

である。



この波束が調和型トラップによって振動するイメージ。もちろん、相空間上では p 方向の広がりもある。