

Wigner 表示であそぼう

鳥居 優作

2016 年 5 月 4 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	4
4.2	数値計算	4
5	課題	5
5.1	Wigner 関数の性質	5
5.2	Wigner-Moyal 方程式の導出	6
5.3	数値解析	6
5.4	発展課題	6

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:

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

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:

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

これを並進変換 $e^{a\partial_q} e^{pq} = e^{p(q+a)}$ より

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

と変形. さらに同様に並進変換を用いて

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

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:

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

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:

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

p' で積分:

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

$$= \{H_W, f_W\} \quad (3.22)$$

これを Moyal 括弧とか一般化 Poisson 括弧とか呼んだりする。

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

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

とする. このハミルトニアンの Wigner 表示は

$$H_W(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (4.24)$$

である. これを (3.21) に代入:

$$i\hbar\partial_t f_W(q, p, t) = \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda}f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t)e^{\frac{i\hbar}{2}\Lambda}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2\right) \quad (4.25)$$

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.

$$\partial_t f_W(q, p, t) = (q\partial_p - p\partial_q)f_W(q, p, t) \quad (4.26)$$

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

$$f(t_{n+1}) = k_1[q_l f(p_{m+1}) - p_m f(q_{l+1})] + [k_1(-q_l + p_m) + 1]f \quad (4.27)$$

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.
- $h_t/h_{qp} = k_1$.

これで数値計算が可能な形になった.

4.2.2 問題点

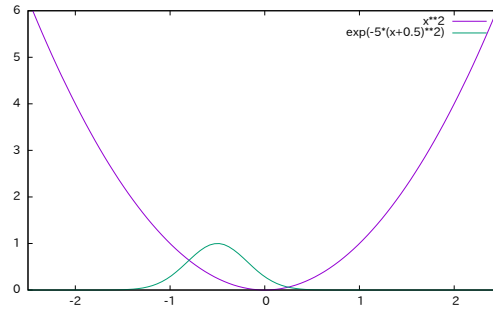
上の差分化は単なる前進差分なので $\mathcal{O}(h_{qp}), \mathcal{O}(h_t)$ の誤差を生じる. これで計算すると, よほど細かく差分化しないとヤバいです. 誤差が累積して襲ってきます. せめて中央差分にしましょう.

4.2.3 初期条件

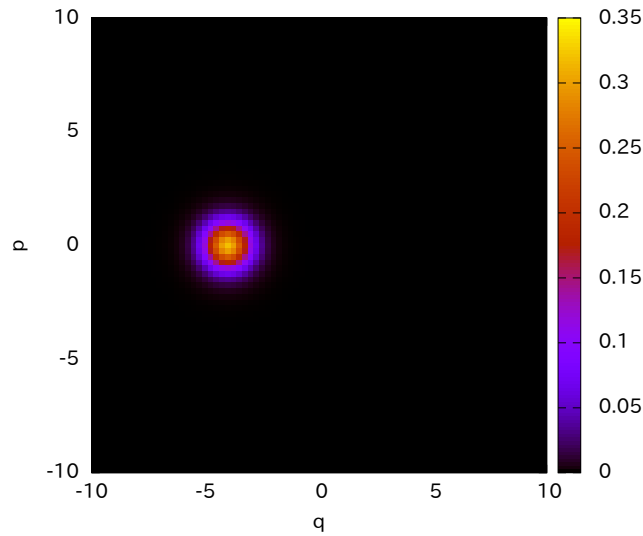
あるガウス波束 f_0 の Wigner 表示として

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

を用意する. f_0 はこんなかんじ:



この波束が調和型トラップによって振動する。古典粒子が調和振動子トラップ内で振動するとき、位相空間上の点は楕円を描くように動くはずであり Wigner 関数も同様の動きをするが、相空間上では q, p 方向の広がりがある。



こんなほんやりした玉みたいなのが位相空間上をぐるぐる回るはず。

5 課題

やってほしいこと・理解してほしいこと。

5.1 Wigner 関数の性質

Wigner 分布関数は位相空間上の確率分布と見なすことができる。その理由として、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp f_W(q, p) = |\psi(q)|^2 \quad (5.29)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq f_W(q, p) = |\tilde{\psi}(p)|^2 \quad (5.30)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq dp f_W(q, p) = 1 \quad (5.31)$$

という性質が挙げられる。

問 1 上式を証明せよ。また、確率分布として理解できる理由を説明せよ。

問 2 (4.28) の f_{0W} について、Wigner 表示する前の f_0 を求めよ。

5.2 Wigner-Moyal 方程式の導出

補題 1 離散基底の直交性

$$\sum_j \langle q_i | q_j \rangle = \delta_{ij} \quad (5.32)$$

を連続に拡張せよ.

補題 2 Taylor 展開を用いて

$$e^{a\partial_q} f(q) = f(q+a) \quad (5.33)$$

を証明せよ.

補題 3 1 のフーリエ変換がデルタ関数になること

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{-ikx} \quad (5.34)$$

を証明せよ.

問 3 (3.5)-(3.15) の計算を追え.

5.3 数値解析

問 4 t, q, p について (4.26) を中央差分で差分化せよ.

問 5 位相空間上の Wigner 関数の時間発展を数値計算し, Gnuplot で可視化せよ.

5.4 発展課題

まずやってほしいことは, 以上の内容について物理的な理由付けをして理解することです. とりあえず数値計算してなんか出てきました, ってのはナシにしてください. それができたら今までの知識を用いて好きなことをやってください. 自由研究です.

とはいえ丸投げも厳しいと思うのでいくつかのテーマを挙げます.

1 Wigner 表示を用いると様々な量子力学的な現象を半古典的な描像で記述できる. 例えば

- ポテンシャル障壁を透過する波束
- q^3 ポテンシャル等における粒子の散逸
- $\Delta q \cdot \Delta p \geq \hbar$ の確認

2 位相空間ではなくて q 空間における動きを追う (Schrödinger 方程式を数値計算する).

3 差分法はダサいので Symplectic 法で攻める.

4 むしろ調和振動子くらいなら Wigner 関数の時間発展も解析的に追えるんじゃないか?

5 コヒーレント状態・コヒーレント変換に関する考察.

6 Wigner 関数の負の値に関する考察.

7 伏見関数でやってみる.

などなど... お好きにどうぞ.