Wigner 表示であそぼう

鳥居 優作

2016 年 4 月 26 日

目次

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．量子の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:

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

もしくは

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

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

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

である．ここで

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

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:

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

ここで式 (2.4) を用いて変形する:

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

exp の肩の変数に着目して A_W,B_W の変数を変形する:

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

これを並進演算子を用いて

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

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

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

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:

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

p'' で積分:

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

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dsdp'\Big(A_W(q,p')e^{\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q\overrightarrow{\partial}_{p'}}e^{i(p-p')s/\hbar}e^{-\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_{p'}\overrightarrow{\partial}_q}B_W(q,p')\Big) \tag{3.12}$$

s で積分:

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

最後に p' で積分:

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

とする. このハミルトニアンの Wigner 表示は

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

である．これを (3.21) に代入:

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

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.

$$\partial_t f_W(q,p,t) = (q\partial_p - p\partial_q)f_W(q,p,t) \tag{4.25}$$

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

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

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.
- $f(q_l,p_m,t_n)\to f$, $f(q_{l+1},p_m,t_n)\to f(q_{l+1})$ 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 初期条件

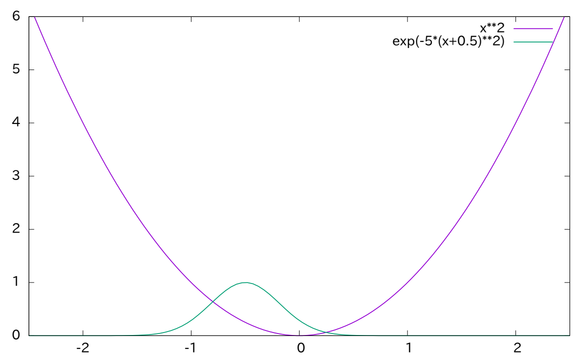
初期関数として

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

を用意する (やる気なさ過ぎ？)．f_0 の Wigner 表示は

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

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.