第 55 卷 第 10 期 2006 年 10 月
1000-3290/2006/55(10)/5014-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.55,No.10,October,2006

一类相空间中的准几率分布函数系

袁通全†
(北京理工大学理学院物理系,北京 100081)

(2005 年 12 月 12 日收到;2006 年 3 月 15 日收到修改稿)

定义了一类相空间中的准几率分布函数系,这个准几率分布函数系直接建立在具有更加广泛意义的量子相空间 Schrödinger 方程解的基础之上,其中定义 $\hat{P}_\alpha = \alpha p - i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$ 和 $\hat{Q}_\alpha = (1-\alpha)q + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$. 发现了两个有趣的关系.(1)建立的量子相空间 Schrödinger 方程的解实际上是对函数 $\varphi(\lambda)\exp[i(1-\alpha)qp]$ 做窗口 Fourier 变换.(2)这个窗口函数 $g(\lambda)$ 起着选择窗口形式的作用,而且不同的窗口对应着不同的分布函数.当 $g(\lambda)$ 是一个代表 Gauss 窗的 Gauss 函数的时候,准几率分布函数就是一个类似于 Husimi 的分布函数 $f_\alpha^{\mathrm{HL}}(q,p)$;当 $g(\lambda)$ 是一个表示椭圆的复函数时,准几率分布函数就是一个椭圆分布函数 $f_\alpha^{\mathrm{E}}(q,p)$;再在 $g(\lambda)$ 为复函数的基础上附加 $\alpha=0$,就可得到标准序分布函数 $f^{\mathrm{S}}(q,p)$、反标准序分布函数 $f^{\mathrm{AS}}(q,p)$ 和 Wigner 分布函数 $f^{W}(q,p)$,此时 $g(\lambda)$ 表示高度为 $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ 而长度为 λ 的矩形窗.

关键词:窗口 Fourier 变换,相空间,Wigner 分布函数
PACC:0365

1. 引　　言

自从著名物理学家 Wigner 于 1932 年[1] 为了修正统计热力学体系的量子效应而提出 Wigner 分布函数以来,已有两种途径发展量子相空间理论.第一种途径是沿着构造 Wigner 函数的思想而利用满足坐标表象或动量表象中的 Schrödinger 方程的波函数来建立分布函数.例如 Husimi[2] 函数和一般量子相空间分布函数类[3,4] 以及标准序和反正标准分布函数[5] 就是沿着这个途径.发展量子相空间理论的另一条途径是直接重新定义坐标算符和动量算符以及假设存在相应的 Schrödinger 方程或量子 Liouville 方程.然后,通过求解相空间中的这两个方程,来确定相空间中的波函数或密度函数.Torres-Vega 和 Frederick 的工作[6,7] 就是沿着这个途径.最近 Li 等人[8] 还找到了 Torres-Vega 和 Frederick 引入的 Schrödinger 方程的一般解的形式.

有两条途径发展量子相空间理论,自然地带来一个问题:这两种途径之间到底有什么联系?本文将回答这个问题.

2. 更广泛意义的量子相空间表示

类似 Torres-Vega 和 Frederick 直接定义的相空间中坐标算符 $\hat{Q} = \frac{q}{2} + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ 和动量算符 $\hat{P} = \frac{p}{2} - i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$ 以及相应的 Schrödinger 方程的方法,还可以定义更具有广泛意义的坐标算符和动量算符,如下:

$$\hat{Q}_\alpha = (1-\alpha)q + i\hbar\frac{\partial}{\partial p},$$

$$\hat{P}_\alpha = \alpha p - i\hbar\frac{\partial}{\partial q},$$

其中 α 是一个参数,其取值范围为 $0 \leqslant \alpha \leqslant 1$,这样定义的算符也满足对易关系式:

$$[Q_\alpha, P_\alpha] = i\hbar.$$

对于任意给定的势能函数 $V(\hat{Q}_\alpha)$,相应量子相空间的定态 Schrödinger 方程为

$$\begin{aligned}\Big\{&\frac{1}{2\mu}\Big(\alpha p - i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\Big)^2 \\ &+ V\Big((1-\alpha)q + i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\Big)\Big\}\psi_\alpha(\Gamma) \\ =\ & E\psi_\alpha(\Gamma).\end{aligned} \tag{1}$$

† E-mail:ytquan@sohu.com

其中 q 和 p 是经典的坐标和动量，E 是能量本征值，$\psi_\alpha(\Gamma)$ 是相空间中属于能量本征值为 E 的本征函数．$\psi_\alpha(\Gamma)$ 可表示为

$$\psi_\alpha(\Gamma)=\langle\Gamma|\psi_\alpha\rangle. \tag{2}$$

受启发于文献[8,9]，可设

$$\psi_\alpha(\Gamma)=\exp(-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar)\phi(q,p). \tag{3}$$

利用下面变换等式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}=\left(\alpha q+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n, \tag{4}$$

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}=\left(\alpha q-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n, \tag{5}$$

以及(3)式，(1)式化为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+V\left(q+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right\}\phi(q,p)=E\phi(q,p). \tag{6}$$

如果将 $V\left(q+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)$ 展开

$$V\left(q+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)=\sum_n V^{(n)}(q)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n, \tag{7}$$

方程(6)变成为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+\sum_n V^{(n)}(q)\times\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\right\}\phi(q,p)=E\phi(q,p). \tag{8}$$

利用局部的 Fourier 变换

$$\phi(p,q)=\int\chi(q,\lambda)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda p}\mathrm{d}\lambda. \tag{9}$$

并将(8)式方程两边同时乘以 $\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda' p}$，且对 p 积分有

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+V(q+\lambda)\right\}\chi(q,\lambda)=E\chi(q,\lambda) \tag{10}$$

做变量代换 $\xi=q+\lambda$，方程(10)变为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+V(\xi)\right\}\chi(\xi,\lambda)=E\chi(\xi,\lambda). \tag{11}$$

满足方程(11)的解

$$\chi(\xi,\lambda)=g(\lambda)\varphi(q+\lambda), \tag{12}$$

其中 $g(\lambda)$ 是任意的平方可积的非零函数，φ 是坐标空间中的 Schrödinger 方程的解．因此

$$\phi(p,q)=\int g(\lambda)\varphi(q+\lambda)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda p}\mathrm{d}\lambda, \tag{13}$$

则相空间中定态 Schrödinger 方程的解为

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(\Gamma)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}\int g(\lambda)\varphi(q+\lambda)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda p}\mathrm{d}\lambda\\&=\int g(\lambda-q)\varphi(\lambda)\\&\quad\times\exp[\mathrm{i}(1-\alpha)qp/\hbar]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda.\end{aligned} \tag{14}$$

其中 $g(\lambda-q)$ 实际上是一个窗口函数，$\psi_\alpha(\Gamma)$ 可看作是对函数 $\varphi(\lambda)\exp[\mathrm{i}(1-\alpha)qp]$ 做窗口 Fourier 变换，在下面的讨论中将看到这个性质．

3．准几率密度分布函数系

利用 $\psi_\alpha(\Gamma)$，可以直接定义准几率密度分布函数系：

$$\begin{aligned}f_\alpha(q,p)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\langle\psi_\alpha|\Gamma\rangle|_{p=p'}\langle\Gamma|\psi_\alpha\rangle\mathrm{d}p'\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int g(\lambda)g^*(\lambda')\varphi(q+\lambda)\varphi^*(q+\lambda')\\&\quad\times\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\lambda p-\lambda' p')/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha q(p-p')/\hbar}\mathrm{d}p'\mathrm{d}\lambda'\mathrm{d}\lambda.\end{aligned} \tag{15}$$

对 p' 和 λ' 直接积分后有

$$\begin{aligned}f_\alpha(q,p)&=\int g^*(-\alpha q)g(\lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}\varphi^*[(1-\alpha)q]\\&\quad\times\varphi(q+\lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda.\end{aligned} \tag{16}$$

这个函数系很有意思，它包括了所有可能的准几率分布函数．更为重要的是

$$\begin{aligned}\int f_\alpha(q,p)\mathrm{d}p&=2\pi\hbar g(-\alpha q)g^*(-\alpha q)\\&\quad\times\varphi[(1-\alpha)q]\varphi^*[(1-\alpha)q].\end{aligned} \tag{17}$$

若选择窗口函数

$g(-\alpha q)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$，则

$$\begin{aligned}\int f_\alpha(q,p)\mathrm{d}p&=\varphi^2[(1-\alpha)q]\\&=\rho[(1-\alpha)q].\end{aligned} \tag{18}$$

下面具体讨论 $g(\lambda)$ 在窗口 Fourier 变换中的作用．

选择

$$g(\lambda)=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{g^*(-\alpha q)}\exp(-\lambda^2/\hbar),$$

它实际上是一个 Gauss 窗，可得到一个类似于 Husimi 的分布函数，即

$$\begin{aligned}f_\alpha^{\mathrm{HL}}(q,p)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi^*[(1-\alpha)q]\varphi(q+\lambda)\\&\quad\times\exp(-\lambda^2/\hbar)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha qp/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda,\end{aligned} \tag{19}$$

选择

$$g(\lambda)=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{g^*(-\alpha q)}\exp(\mathrm{i}\alpha qp/\hbar),$$

它是一个表示椭圆的函数,两个半轴分别为 $l(q)=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{g^*(-\alpha q)}$和 $l(p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{g^*(0)}$,可得到椭圆分布函数

$$f_\alpha^E(q,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi^*[(1-\alpha)q]\times\varphi(q+\lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar)}\mathrm{d}\lambda. \tag{20}$$

再在 $g(\lambda)$为复函数的基础上附加 $\alpha=0$,可得到

$$f^{\mathrm{S}}(q,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi^*(q)\varphi(q+\lambda)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda, \tag{21}$$

即标准序分布函数 $f^{\mathrm{S}}(q,p)$和反标准序分布函数

$$f^{\mathrm{AS}}(q,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi(q)\varphi^*(q+\lambda)\times\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda. \tag{22}$$

此时 $g(\lambda)=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{g^*(0)}$,表示高度为$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$而长度为$\lambda$ 的矩形窗.

又在(20)中用 $q-\frac{\lambda}{2}$代替 q,可得到 Wigner 分布函数

$$f^{\mathrm{W}}(q,p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\varphi^*\left(q-\frac{\lambda}{2}\right)\times\varphi\left(q+\frac{\lambda}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda p/\hbar}\mathrm{d}\lambda. \tag{23}$$

4. 结 论

总之,从量子相空间 Schrödinger 方程的解((14)式),我们自然地得到了准几率分布函数系 $f_\alpha(q,p)$,其中的窗口函数 $g(\lambda)$起着选择窗口形式的作用,而且不同的窗口对应着不同的分布函数.参数 α 对应着一大类分布函数.当 $\alpha=0$ 时,准几率分布函数对应着标准序、反标准序分布函数、Wigner 函数等等.更有意思的是,通过分析,我们知道隐藏于 Wigner 函数后面的信息.

[1] Wigner E P 1932 *Phys. Rev.* **40** 749
[2] Husimi K 1940 *Prog. Phys. Math. Soc. Jpn.* **22** 264
[3] Cohen L 1966 *J. Math. Phys.* **7** 781
[4] Cohen L, Zaparovanny Y I 1980 *J. Math. Phys.* **21** 794
[5] Kirkwood J G 1933 *Phys. Rev.* **44** 31
[6] Torres-Vega G, Frederick J H 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 8862
[7] Torres-Vega G, Frederick J H 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 3103
[8] Li Q S, Wei G M, Lü L Q 2004 *Phys. Rev*, A **70** 022105
[9] Chrusciňski D, Młodawski K 2005 *Phys. Rev.* A **71** 052104

A family quasi-distribution function representation in phase space

Yuan Tong-Quan†

(*Department of Physics*, *Beijing Institute of Technology*, *Beijing* 100081, *China*)

(Received 12 December 2005; revised manuscript received 15 March 2006)

Abstract

A family quasi-distribution function representation is defined in this article. This family quasi-distribution function representation is constructed from the family wave function of the Schrödinger equation in phase space in which the definitions of the operators are $\hat{P}_\alpha = \alpha p - \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial q}$ and $\hat{Q}_\alpha = (1-\alpha) q + \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p}$. Two interesting relationships are found. The first one is that the family wave function of the Schrödinger equation in phase space is a "Window" Fourier transform of the function $\varphi(\lambda)\exp[\mathrm{i}(1-\alpha)qp/\hbar]$. The second one is that different choices of the window functions result in different distribution functions. When the window function $g(\lambda)$ is a Gaussian function the distribution function is the Husimi-like distribution function. When the window function $g(\lambda)$ is a plural function representing an ellipse, the quasi-distribution function is the Ellipse distribution function; and finally when the plural function $g(\lambda)$ is supplemented with the additional condition $\alpha = 0$, it will result in the standard ordering, anti-standard ordering distribution function and Wigner function. In this case $g(\lambda)$ is a function depieting a rectangular window with width λ and height $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

Keywords: "Window" Fourier transform, phase space, Wigner function

PACC: 0365

† E-mail: ytquan@sohu.com