2003.10.6 担当 吉森 明

I-2. 位相空間と演算子法

目標 久保公式の証明の設定として、閉じた系を理解する。また、そこでの分布関数とその時間変化、およびその演算子を使った表現に慣れる。具体的には、次の事を理解する。

- 閉じた系とは、今ある状態で将来の時間変化が完全に一意的に決まることがポイント。
- 閉じた系の分布は初期状態でしか有り得ない。
- すべての物理量は分布の平均と考える。
- 分布関数の時間変化は、連続の式で書ける。
- 位相空間の関数に作用する演算子が定義でき、行列と同じように共役が考えられる。
- 正準方程式で時間変化する分布関数は、Liouville演算子で書ける。また、物理量の時間変化も同様に書ける。
- 初期値の違いにより軌道に分布が生じるので、違った時間の相関を考えられる。
- 時間相関関数は、Liouville演算子で表せる。

目次 (1) 閉じた系
(2) 分布とその時間変化
(3) Liouville演算子
(4) 時間相関関数

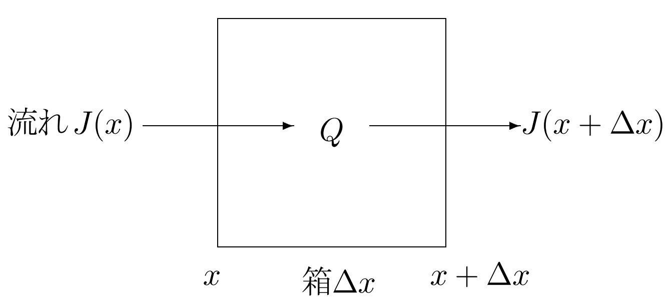
(2) 分布とその時間変化

○ 連続の式

分布は確率(点の濃度)を表す$\Longrightarrow$ 生成消滅しない。

◎「生成消滅しない」ことの意味。

簡単のために1次元で書くと



Q: 箱に入っている点の数$=\rho\Delta x$

生成消滅しないということは、

$$\text{単位時間あたりの}Q\text{の増加} = \text{外から内への流れ} - \text{内から外への流れ} \tag{1}$$

つまり、

$$\frac{dQ}{dt} = J(x) - J(x+\Delta x) \tag{2}$$

$Q = \rho\Delta x$ だから、両辺をΔx で割って、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{J(x) - J(x+\Delta x)}{\Delta x} \Rightarrow -\frac{\partial J}{\partial x} \tag{3}$$

3次元で書くと

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\mathrm{div}\mathbf{J}} --- \text{連続の式 (生成消滅しない)} \tag{4}$$

○ 分布関数の時間変化

位相空間 ($6N$次元) で考えると、点の速度$\mathbf{v} = (\dot{q}_1, \dot{q}_2, \ldots, \dot{q}_{3N}, \dot{p}_1, \dot{p}_2, \ldots, \dot{p}_{3N})$ だから、

$$\frac{\partial \rho(\{q_l, p_l\}, t)}{\partial t} = -\mathrm{div}[\mathbf{v}\rho(\{q_l, p_l\}, t)] \tag{5}$$

正準方程式

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l} \qquad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} \tag{6}$$

から、

$$\mathbf{v} = (\frac{\partial H}{\partial p_1}, \frac{\partial H}{\partial p_2}, \ldots, \frac{\partial H}{\partial p_{3N}}, -\frac{\partial H}{\partial q_1}, -\frac{\partial H}{\partial q_2}, \ldots, -\frac{\partial H}{\partial q_{3N}},) \tag{7}$$

となり、これを (5) 式に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\{q_l, p_l\}, t)}{\partial t} &= -\sum_l^{3N} \frac{\partial}{\partial q_l}[\frac{\partial H}{\partial p_l}\rho(\{q_l, p_l\}, t)] - \sum_l^{3N} \frac{\partial}{\partial p_l}[(-\frac{\partial H}{\partial q_l})\rho(\{q_l, p_l\}, t)] & (8) \\ &= [H, \rho] \qquad (\text{宿題2参照}) & (9) \end{aligned}$$

ここで、$[\cdots]$ は、ポアッソン括弧で、$A = A(\{q_l, p_l\})$、$B = B(\{q_l, p_l\})$ として、

$$[A, B] = \sum_l^{3N} \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_l}\frac{\partial B}{\partial p_l} - \frac{\partial B}{\partial q_l}\frac{\partial A}{\partial p_l} \right\} \tag{10}$$

で定義される。これを使って、結局

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]} \tag{11}$$

(3) Liouville 演算子

○ 共役演算子

<u>$\{q_l, p_l\} \to \pm\infty$ で、$f(\{q_l, p_l\}) \to 0$、あるいは$g(\{q_l, p_l\}) \to 0$ のどちらかが成り立つ任意の関</u>数の組 $f(\{q_l, p_l\})$、$g(\{q_l, p_l\})$ について、

$$\int d\Gamma g(\{q_l, p_l\})[Of(\{q_l, p_l\})] = \int d\Gamma[O^\dagger g(\{q_l, p_l\})]f(\{q_l, p_l\}) \tag{12}$$

が成り立つような$O^\dagger$をOの共役演算子という。

○ Liouville 演算子

次の演算子を定義する。

$$iL(\{q_l, p_l\}) \equiv [H, \cdot] \tag{13}$$

これは、$iL(\{q_l, p_l\})$ をある $f = f(\{q_l, p_l\})$ について作用させると、

$$iL(\{q_l, p_l\})f(\{q_l, p_l\}) = [H, f] \tag{14}$$

を意味する。また、$iL(\{q_l,p_l\})$ の共役演算子 $(iL(\{q_l,p_l\}))^\dagger$は、$-iL(\{q_l,p_l\})$ である。(宿題3参照)

$iL(\{q_l,p_l\})$ を分布関数に作用させると、時間変化を表す事が出来る。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\{q_l,p_l\},t) = iL(\{q_l,p_l\})\rho(\{q_l,p_l\},t) \tag{15}$$

これを形式的に解くと、

$$\rho(\{q_l,p_l\},t) = e^{tiL(\{q_l,p_l\})}\rho(\{q_l,p_l\},0) \tag{16}$$

ただし、

$$e^{tiL(\{q_l,p_l\})} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(tiL(\{q_l,p_l\}))^n}{n!} \tag{17}$$

で定義される演算子。(16) 式は、(15) 式に代入すれば、すぐに確かめられる。

また、位相空間の関数として定義されている物理量 $X = X(\{q_l,p_l\})$ に対しては、チェーンルールを使うと

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}X(t) &= \frac{d}{dt}X(\{q_l(t),p_l(t)\}) && (18)\\
&= \sum_l^{3N}\frac{dq_l(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial q_l(t)}X(\{q_l(t),p_l(t)\}) + \sum_l^{3N}\frac{dp_l(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial p_l(t)}X(\{q_l(t),p_l(t)\}) && (19)
\end{aligned}$$

正準方程式 (6) 式を代入、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}X(t) &= \sum_l^{3N}\frac{\partial H}{\partial p_l(t)}\frac{\partial}{\partial q_l(t)}X(\{q_l(t),p_l(t)\}) - \sum_l^{3N}\frac{\partial H}{\partial q_l(t)}\frac{\partial}{\partial p_l(t)}X(\{q_l(t),p_l(t)\}) && (20)\\
&= -iL(\{q_l(t),p_l(t)\})X(\{q_l(t),p_l(t)\}) && (21)
\end{aligned}$$

ここで、

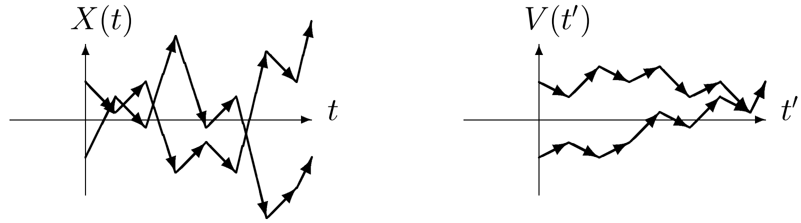
$$iL(\{q_l(t),p_l(t)\}) \equiv [H(\{q_l(t),p_l(t)\}),\cdot] = \sum_l^{3N}\frac{\partial H}{\partial q_l(t)}\frac{\partial \cdot}{\partial p_l(t)} - \frac{\partial \cdot}{\partial q_l(t)}\frac{\partial H}{\partial p_l(t)} \tag{22}$$

(21) 式を形式的に解くと、

$$X(t) = e^{-tiL\{q_l(0),p_l(0)\}}X(\{q_l(0),p_l(0)\}) \tag{23}$$

が導ける。(宿題4参照)

(4) 時間相関関数



$\langle X(t)X(t')\rangle \sim 0$(小さい)　　$\langle X(t)X(t')\rangle > 0$(正に大きい)

宿題:

1(20 点) 線形応答理論の歴史を久保公式を中心にまとめなさい。久保公式及びそれに関連する研究の発表年を調べ、それぞれの研究について簡単に説明しなさい。

2(10 点) (9) 式を示しなさい。

3(10 点) $iL(\{q_l, p_l\})$ の共役演算子 $(iL(\{q_l, p_l\}))^\dagger$ は、$-iL(\{q_l, p_l\})$ である事を示せ。また、$e^{tiL(\{q_l, p_l\})}$ の共役演算子は、$e^{-tiL(\{q_l, p_l\})}$ である事を示せ。

4(40 点) (23) 式の様な形式解を持つことは、自明ではない。なぜなら、(21) 式の $iL(\{q_l(t), p_l(t)\})$ は、$\{q_l(t), p_l(t)\}$ に作用するが、(23) 式は、$\{q_l(0), p_l(0)\}$ に作用するからである。(23) 式が形式解であることを証明せよ。