2003.10.20 担当 吉森 明

お知らせ: wwwにホームページをつくりました。
http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/bsbtrtk03.htm
授業中に配るプリント、お知らせ、質問の回答と採点結果等を載せます。ご利用ください。

I-3. 久保公式の証明

目標 久保公式の証明、特に仮定を理解する。具体的には、次の事を理解する。

- **久保公式は主に次の4つが仮定されている。**
  1. **外場は充分弱い。**
  2. **外場はハミルトニアンで含まれる。**
  3. **初期の時間は、$-\infty$ で、その分布は平衡。**
  4. **平衡分布はカノニカル。**
- これらの仮定の元で、おおまかには分布関数を摂動展開して、比例する項だけをとれば久保公式が得られる。
- さらに、分布関数の時間発展の演算子 (iL) に対する共役演算子 $(-iL)$ が、物理量の時間発展を表すことも使う。
- 久保公式の証明には不可逆性は関係しない。

目次 (1) はじめに
(2) ハミルトニアン
(3) 分布関数の摂動論
(4) 公式の証明
(5) まとめ

(3) 分布関数の摂動論

分布関数$\rho(\{q_l,p_l\},t)$ を$i\Delta L(\tau)$ で展開するのは、次の恒等式(厳密) を使う (宿題6参照)。

$$\rho(\{q_l,p_l\},t)=\underbrace{e^{\Delta tiL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)}_{i\Delta L(\tau)\text{ によらない}}+\int_{t_0}^{t}e^{(t-\tau)iL_0}\underbrace{i\Delta L(\tau)}_{\tau<t\text{ の }i\Delta L(\tau)}\underbrace{\rho(\{q_l,p_l\},\tau)}_{\boxed{\text{ここにも }i\Delta L(\tau)\text{ が含まれる}}}d\tau \tag{1}$$

(1) 式で、右辺1項目は、$i\Delta L(\tau)$ を含んでいない。2項目は$i\Delta L(\tau)$ に比例しているが、実は被積分関数 $\rho(\{q_l,p_l\},\tau)$ の中にも$i\Delta L(\tau)$ が含まれている。だから、$i\Delta L(\tau)$ で展開して、1次の項だけ取るには、右辺の $\rho(\{q_l,p_l\},\tau)$ の中の、$i\Delta L(\tau)$ の寄与を無視すれば良い。

$$\begin{aligned}\rho(\{q_l,p_l\},t) &= e^{\Delta tiL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)+\int_{t_0}^{t}e^{(t-\tau)iL_0}i\Delta L(\tau)\rho_0(\{q_l,p_l\},\tau)d\tau\\ &\quad + i\Delta L(\tau)\text{ の2次以上の項}\end{aligned} \tag{2}$$

$\rho_0(\{q_l,p_l\},\tau)$ は、時刻 t_0 以降、$i\Delta L(\tau)=0$ として時間発展した分布関数だから、$\rho_0(\{q_l,p_l\},\tau)=e^{\Delta\tau iL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)d\tau$。ここで $\Delta\tau=\tau-t_0$。また、**仮定1**から、$i\Delta L(\tau)$ の2次以上の項を無視すると、

$$\rho(\{q_l,p_l\},t)=e^{\Delta tiL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)+\int_{t_0}^{t}e^{(t-\tau)iL_0}i\Delta L(\tau)e^{\Delta\tau iL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)d\tau \tag{3}$$

仮定3 $t_0\to-\infty$ **で、かつ** $\rho(\{q_l,p_l\},t_0)=\rho_{eq}$**:** $f(t)=0$ **での平衡分布**

この仮定を(3)式に代入すると、

$$\rho(\{q_l,p_l\},t)=e^{\Delta tiL_0}\rho_{eq}+\int_{-\infty}^{t}e^{(t-\tau)iL_0}i\Delta L(\tau)e^{\Delta\tau iL_0}\rho_{eq}d\tau \tag{4}$$

平衡分布は時間変化しない。つまり $iL_0\rho_{eq}=0$。だから、$e^{tiL_0}\rho_{eq}=\rho_{eq}$。これを使うと、

$$\rho(\{q_l,p_l\},t)=\rho_{eq}+\int_{-\infty}^{t}e^{(t-\tau)iL_0}i\Delta L(\tau)\rho_{eq}d\tau \tag{5}$$

(4) 公式の導出

$x(t)=\langle X(t)\rangle=\int d\Gamma X(\{q_l,p_l\})\rho(\{q_l,p_l\},t)$ を考えて、$\langle X(t)\rangle_{eq}=0$ を仮定すれば、

$$x(t)=\int_{-\infty}^{t}d\tau\int d\Gamma X(\{q_l,p_l\})e^{(t-\tau)iL_0}[i\Delta L(\tau)\rho_{eq}] \tag{6}$$

共役の定義から $(\{q_l,p_l\}\to\pm\infty$ で、$\rho_{eq}\to 0)$

$$x(t)=\int_{-\infty}^{t}d\tau\int d\Gamma[e^{-(t-\tau)iL_0}X(\{q_l,p_l\})]i\Delta L(\tau)\rho_{eq} \tag{7}$$

$iL_0=iL_0(\{q_l,p_l\})$ で、$\{q_l,p_l\}=\{q_l(0),p_l(0)\}$ と考えれば、授業ノート(23)式から、$e^{-(t-\tau)iL_0}X(\{q_l,p_l\})=X(t-\tau)$ だから、

$$x(t)=\int_{-\infty}^{t}d\tau\int d\Gamma X(t-\tau)i\Delta L(\tau)\rho_{eq} \tag{8}$$

$x(t)=\int_{-\infty}^{t}d\tau\alpha(t-\tau)f(\tau)$ で、$i\Delta L(t)=f(t)i\Delta L'$ とすると $(i\Delta L'\equiv-[X,\cdot])$、

$$\alpha(t)=\int d\Gamma X(t)i\Delta L'\rho_{eq} \tag{9}$$

とかける。$\Delta L'$ の定義から

$$i\Delta L'\rho_{eq}=-[X,\rho_{eq}] \tag{10}$$

仮定4 ρ_{eq}**は、カノニカル分布:** $\rho_{eq}\propto e^{-\beta H(\{q_l,p_l\})}$

として、

$$i\Delta L'\rho_{eq}=\beta\dot{X}\rho_{eq}\qquad(\text{宿題}7) \tag{11}$$

(11)式を(9)式に代入すると、

$$\alpha(t)=\int d\Gamma X(t)\beta\dot{X}\rho_{eq}=\beta\int d\Gamma f(\{q_l,p_l\},t)\dot{X}(\{q_l,p_l\})\rho_{eq}(\{q_l,p_l\}) \tag{12}$$

これは相関関数の定義そのものだから、結局

$$\boxed{\alpha(t)=\beta\langle X(t)\dot{X}(0)\rangle=-\beta\langle\dot{X}(t)X(0)\rangle} \tag{13}$$

2つめのイコールは、宿題8参照。

宿題:

5 (40 点) まったく相互作用していない 3 次元の N 個の粒子系 $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}$ を考える。運動方程式は、相互作用が無く、その他の力も働かないとすると、$\dot{\mathbf{p}}_i = 0$。この時、カノニカル分布を仮定すると、$\langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i \rangle = 3mk_BT$ となるが、Liouville 演算子 iL を使って、$\langle \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i \rangle = \langle m[-iL\mathbf{r}_i] \cdot \mathbf{p}_i \rangle$ とも書ける。$-iL$ の共役演算子が iL である事を使うと、$\langle m[-iL\mathbf{r}_i] \cdot \mathbf{p}_i \rangle = \langle m\mathbf{r}_i \cdot iL\mathbf{p}_i \rangle = \langle m\mathbf{r}_i \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \rangle = 0$ となり、矛盾する。この議論のどこがおかしいか説明せよ。

6 (15 点) (1) 式を示しなさい。

7 (10 点) (11) 式を示しなさい。

8 (30 点) (13) 式において、定常過程ならば、相関関数について、

$$\beta\langle X(t)\dot{X}(0)\rangle = -\beta\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{14}$$

が成り立つことを示しなさい。ただし、$\dot{X}(0) = iLX(\{q_l, p_l\})$、$\dot{X}(t) = iLX(\{q_l(t), p_l(t)\})$ とし、相関関数は、初期値で平均する定義を使いなさい。初期分布は、平衡とし、また、$\{q_l, p_l\} \to \pm\infty$ で、$\rho(\{q_l, p_l\}, 0) \to 0$ を仮定する。

9 (30 点) 2 変数の久保公式: ハミルトニアンが $H = H_0 - Xf(t)$ で書ける時、別の物理量 Y に対して、

$$Y(t) = \int_{-\infty}^{t} \alpha_{YX}(t-t')f(t')dt' \tag{15}$$

が成り立つ時、

$$\alpha_{YX}(t) = -\beta\langle \dot{Y}(t)X(0)\rangle \tag{16}$$

を証明しなさい。