2005 年度物性物理学特論 授業ノート 2

2005.10.21 担当 吉森 明

I-3. 久保公式の導出①: 位相空間と演算子法

目標 位相空間の分布関数の時間変化を演算子法で計算し、演算子法に慣れる。時間相関関数を位相空間で表す考え方を理解する。具体的には次のことを理解する。

- 相互作用している全ての粒子を含む系を「閉じている」といって、その系は位相空間中をハミルトニアンで時間変化すること。
- 位相空間上で分布を考えることができ、ハミルトニアンで時間変化が書けること。
- リュウビル演算子で分布関数の時間変化が表せ、形式解も書けること。
- 閉じた系の時間相関関数を位相空間で書くこと、その式の形。

目次 (1) 閉じた系 (孤立系)

(2) 分布とその時間変化

(3) リュービル演算子

(4) 閉じた系の時間相関関数

(2) 分布とその時間変化

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、

$$\frac{\partial \rho(\{q_l, p_l\}, t)}{\partial t} = -\mathrm{div}[\mathbf{v}\rho(\{q_l, p_l\}, t)] \tag{1}$$

正準方程式

$$\dot{q}_l = \frac{\partial H}{\partial p_l} \qquad \dot{p}_l = -\frac{\partial H}{\partial q_l} \tag{2}$$

から、

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

となり、これを (1) 式に代入すると

$$\frac{\partial \rho(\{q_l, p_l\}, t)}{\partial t} = -\sum_{l}^{3N} \frac{\partial}{\partial q_l}[\frac{\partial H}{\partial p_l}\rho(\{q_l, p_l\}, t)] - \sum_{l}^{3N} \frac{\partial}{\partial p_l}[(-\frac{\partial H}{\partial q_l})\rho(\{q_l, p_l\}, t)] \tag{4}$$

$$= [H, \rho] \qquad \text{(宿題 4 参照)} \tag{5}$$

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、

$$[A, B] = \sum_{l}^{3N} \left\{ \frac{\partial A}{\partial q_l}\frac{\partial B}{\partial p_l} - \frac{\partial B}{\partial q_l}\frac{\partial A}{\partial p_l} \right\} \tag{6}$$

で定義される。これを使って、結局

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]} \tag{7}$$

(3) リュービル演算子

○ 共役演算子

$\{q_l, p_l\} \to \pm\infty$ **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、

$$\int d\Gamma g(\{q_l, p_l\})[Of(\{q_l, p_l\})] = \int d\Gamma [O^\dagger g(\{q_l, p_l\})] f(\{q_l, p_l\}) \tag{8}$$

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。

$$iL(\{q_l, p_l\}) \equiv [H, \cdot] \tag{9}$$

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、

$$iL(\{q_l, p_l\}) f(\{q_l, p_l\}) = [H, f] \tag{10}$$

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 5 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。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\{q_l, p_l\}, t) = iL(\{q_l, p_l\})\rho(\{q_l, p_l\}, t) \tag{11}$$

これを形式的に解くと、

$$\rho(\{q_l, p_l\}, t) = e^{tiL(\{q_l, p_l\})}\rho(\{q_l, p_l\}, 0) \tag{12}$$

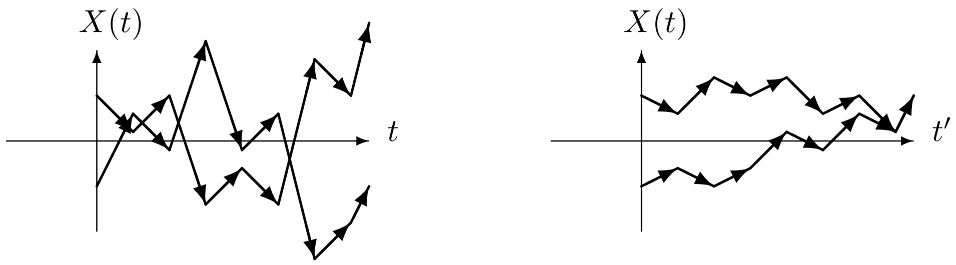
ただし、

$$e^{tiL(\{q_l, p_l\})} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(tiL(\{q_l, p_l\}))^n}{n!} \tag{13}$$

で定義される演算子。(12) 式は、(11) 式に代入すれば、すぐに確かめられる。

(4) 時間相関関数

○ 時間相関関数は、t と t' での相関を表す。$\langle X(t) \rangle = 0$ とすると、



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

○ **物理量の時間変化 $X(t)$ もリュービル演算子で表せる。**

$X = X(\{q_l(t), p_l(t)\})$ だから、チェーンルールを使うと

$$\frac{d}{dt}X(t) = \frac{d}{dt}X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{14}$$

$$= \sum_l^{3N} \frac{dq_l(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial q_l(t)}X(\{q_l(t), p_l(t)\}) + \sum_l^{3N} \frac{dp_l(t)}{dt}\frac{\partial}{\partial p_l(t)}X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{15}$$

正準方程式 (2) 式を代入、

$$\frac{d}{dt}X(t) = \sum_l^{3N} \frac{\partial H}{\partial p_l(t)}\frac{\partial}{\partial q_l(t)}X(\{q_l(t), p_l(t)\}) - \sum_l^{3N} \frac{\partial H}{\partial q_l(t)}\frac{\partial}{\partial p_l(t)}X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{16}$$

$$= -iL(\{q_l(t), p_l(t)\})X(\{q_l(t), p_l(t)\}) \tag{17}$$

ここで、

$$iL(\{q_l(t), p_l(t)\}) \equiv [H(\{q_l(t), p_l(t)\}), \cdot] = \sum_l^{3N} \frac{\partial H}{\partial q_l(t)}\frac{\partial \cdot}{\partial p_l(t)} - \frac{\partial \cdot}{\partial q_l(t)}\frac{\partial H}{\partial p_l(t)} \tag{18}$$

(17) 式を形式的に解くと、

$$X(t) = e^{-tiL\{q_l(0), p_l(0)\}}X(\{q_l(0), p_l(0)\}) \tag{19}$$

が導ける。(宿題 7 参照)

○ (19) 式は、初期値 $\{q_l(0), p_l(0)\}$ を与えると、$X(t)$ が完全に決まることを表している。位相空間の軌跡を考えると、軌跡は初期値と対応しているので、i 番目の軌跡の物理量の値を $X_i(t)$ と書けば、

$$X_i(t) = e^{-tiL\{q_l(0),p_l(0)\}} X(\{q_l(0), p_l(0)\}) \tag{20}$$

ここで、$\{q_l(0), p_l(0)\}$ は、i 番目の軌跡の初期値に対応するとした。i 番目と別の j 番目の軌跡に対しては、$\{q'_l(0), p'_l(0)\}$ という初期値を対応させると、

$$X_j(t) = e^{-tiL\{q'_l(0),p'_l(0)\}} X(\{q'_l(0), p'_l(0)\}) \tag{21}$$

これらのことから、初期値の分布 $\rho(\{q_l, p_l\})$ を使って、時間相関関数を表すことができる。

$$\langle X(t)X(t')\rangle = \int \left[e^{-tiL\{q_l,p_l\}} X(\{q_l, p_l\})\right] \left[e^{-t'iL\{q_l,p_l\}} X(\{q_l, p_l\})\right] d\Gamma \tag{22}$$

ここで、$d\Gamma = \prod_l dq_l dp_l$ とした。$X(t)$ と $X(t')$ は、同じ初期値で平均を取ることに注意しなさい。

宿題:

4 (5 点) (5) 式を示しなさい。

5 (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。

さらに、共役の演算子の定義 (8) 式を周期的境界条件に拡張することを考えよう。つまり、$f(\{q_l, p_l\})$、$g(\{q_l, p_l\})$ について q_1 を $q_1 + L$ としても値が変わらないとして、(8) 式の q_1 の積分範囲を 0 から L に変えたものを共役とする。今、一定の力 f がかかっている時、すなわちハミルトニアン $H(\{q_l, p_l\})$ に fq_1 が含まれている時、$iL(\{q_l, p_l\})$ と $-iL(\{q_l, p_l\})$ の共役関係がどうなるかを考えよ。

6 (10 点) 相関関数の (22) 式と同じように、$\langle X(t)\rangle$ も $X(t)$ を初期値で平均することと考えることもできる。この初期値で平均した式を書き、時刻 t の分布関数の平均

$$\langle X(t)\rangle = \int X(\{q_l, p_l\})\rho(\{q_l, p_l\}, t) d\Gamma \tag{23}$$

と同じになることを示せ。ただし、$d\Gamma = \prod_l dq_l dp_l$ とした。

7 (20 点) (19) 式の様な形式解を持つことは、自明ではない。なぜなら、(17) 式の $iL(\{q_l(t), p_l(t)\})$ は、$\{q_l(t), p_l(t)\}$ に作用するが、(19) 式は、$\{q_l(0), p_l(0)\}$ に作用するからである。(19) 式が形式解であることを証明せよ。