2005 年度物性物理学特論 授業ノート 3

2005.10.28 担当 吉森 明

## I-4. 久保公式の導出②: 証明

**目標** **久保公式の閉じた系での証明、特に仮定を理解する。**具体的には、次の事を理解する。

- 証明の出発点は、分布関数のリュービル演算子を使った時間変化の式。
- 証明の方針は、分布関数を外場に対して摂動展開して、比例する項だけをとる。
- **久保公式は次の 4 つの仮定が重要。**
  1. **外場 $f(t)$ は充分弱い。**
  2. **外場はハミルトニアンで含まれる。**
  3. **時刻 $-\infty$ で、外場はかかっておらず、その分布は平衡。**
  4. **平衡分布はカノニカル。**
- 証明の流れは、
  ① ハミルトニアンを摂動項 $(-Xf(t))$ と非摂動項 $(H_0)$ に分ける。
  ② 分布関数を外場について展開。仮定 3 を使って変形。
  ③ 物理量 $X$ の平均を計算する。共役を使って変形。
  ④ 仮定 4 で仕上げ
- $e^{iLt}$ をそのまま展開するのは間違え、正しい展開から時間遅れが出てくる。
- 閉じた系での証明は少し変なところがある。

**目次**


### (3) 分布関数の摂動論

○ **$\rho(\{q_l, p_l\}, t)$ を外場 $f(t)$ で展開**

今、$t_0$ という時刻を考え、その時刻から外場をかけるとする。すなわち、

$$f(t) = 0 \qquad t < t_0 \tag{1}$$

後で $t_0 \to -\infty$ にする。これから、$t < t_0$ で $\Delta L(t) = 0$ だから、

$\rho(\{q_l, p_l\}, t_0)$ は、$\Delta L(t)$ を含まない。
$\rho(\{q_l, p_l\}, t)$ は、$t \geq t_0$ で $\Delta L(t)$ を含む。

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 8 参照)。

$$\rho(\{q_l, p_l\}, t) = \underline{e^{\Delta t i L_0} \rho(\{q_l, p_l\}, t_0)} + \int_{t_0}^{t} e^{(t-\tau) i L_0} i\Delta L(\tau) \rho(\{q_l, p_l\}, \tau) d\tau \tag{2}$$

$i\Delta L(\tau)$ によらない

$\tau < t$ の $i\Delta L(\tau)$

ここにも $i\Delta L(\tau)$ が含まれる

(2) 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。

$$\begin{aligned} \rho(\{q_l, p_l\}, t) = {} & e^{\Delta t i L_0} \rho(\{q_l, p_l\}, t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{(t-\tau) i L_0} i\Delta L(\tau) \rho_0(\{q_l, p_l\}, \tau) d\tau \\ & + i\Delta L(\tau) \text{ の 2 次以上の項} \end{aligned} \tag{3}$$

$\rho_0(\{q_l, p_l\}, \tau)$ 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、$\rho_0(\{q_l, p_l\}, \tau) = e^{\Delta\tau i L_0} \rho(\{q_l, p_l\}, t_0)$。ここで $\Delta\tau = \tau - t_0$。

結局、**仮定 1** から、$i\Delta L(\tau)$ の 2 次以上の項 を無視すると、

$$\rho(\{q_l, p_l\}, t) = e^{\Delta t i L_0} \rho(\{q_l, p_l\}, t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{(t-\tau) i L_0} i\Delta L(\tau) e^{\Delta\tau i L_0} \rho(\{q_l, p_l\}, t_0) d\tau \tag{4}$$

が得られる。

## ○ 仮定 3 を使って変形

**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 (4) 式に代入すると、

$$\rho(\{q_l, p_l\}, t) = e^{\Delta t i L_0} \rho_{eq} + \int_{-\infty}^{t} e^{(t-\tau) i L_0} i\Delta L(\tau) e^{\Delta\tau i L_0} \rho_{eq} d\tau \tag{5}$$

平衡分布は時間変化しない。つまり $iL_0 \rho_{eq} = 0$。だから、$e^{t i L_0} \rho_{eq} = \rho_{eq}$。これを使うと、

$$\rho(\{q_l, p_l\}, t) = \rho_{eq} + \int_{-\infty}^{t} e^{(t-\tau) i L_0} i\Delta L(\tau) \rho_{eq} d\tau \tag{6}$$

**(4) 公式の導出**

**③物理量 $X$ の平均**

○ **(6) 式で求めた $\rho(\{q_l, p_l\}, t)$ で平均を取る。**

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

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

○ **共役使って変形する。**

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

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} d\tau \int d\Gamma [e^{-(t-\tau)iL_0} X(\{q_l, p_l\})] i\Delta L(\tau)\rho_{eq} \tag{8}$$

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

$$x(t) = \int_{-\infty}^{t} d\tau \int d\Gamma X(t-\tau) i\Delta L(\tau)\rho_{eq} \tag{9}$$

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

$$\alpha(t) = \int d\Gamma X(t) i\Delta L' \rho_{eq} \tag{10}$$

とかける。$\Delta L'$ の定義から

$$i\Delta L' \rho_{eq} = -[X, \rho_{eq}] \tag{11}$$

**④仮定 4 を使って仕上げ**

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

として、

$$i\Delta L' \rho_{eq} = \beta \dot{X} \rho_{eq} \qquad \text{(宿題 9)} \tag{12}$$

(12) 式を (10) 式に代入すると、

$$\alpha(t) = \int d\Gamma X(t) \beta \dot{X} \rho_{eq} = \beta \int d\Gamma \left[ e^{-tiL\{q_l, p_l\}} X(\{q_l, p_l\}) \right] \dot{X}(\{q_l, p_l\}) \rho_{eq}(\{q_l, p_l\}) \tag{13}$$

これは相関関数の定義そのものだから、結局

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

2 つめのイコールは、宿題 10 参照。

**宿題:**

**8 (10 点)** (2) 式を示しなさい。また、

$$e^{\Delta tiL}\rho(\{q_l,p_l\},t_0) = e^{\Delta tiL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)+\int_{t_0}^{t} e^{\Delta\tau iL} i\Delta L(\tau) e^{(t-\tau)iL_0}\rho(\{q_l,p_l\},t_0)d\tau \tag{15}$$

も証明しなさい。

**9 (10 点)** (12) 式を示しなさい。また、もし仮定 4 が成り立たなくても、ポアッソン括弧 $[\cdots]$ を使って、

$$\alpha(t) = -\langle [X(t), X]\rangle \tag{16}$$

と書けることを示しなさい。ただし、$\{q_l,p_l\}\to\pm\infty$ で、$\rho(\{q_l,p_l\},0)\to 0$ を仮定する。

**10 (5 点)** (14) 式において、定常過程ならば、相関関数について、

$$\beta\langle X(t)\dot{X}(0)\rangle = -\beta\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle \tag{17}$$

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、ここでも、$\{q_l,p_l\}\to\pm\infty$ で、$\rho(\{q_l,p_l\},0)\to 0$ を仮定する。

**11 (20 点)** 授業でやった同じ方法で応答 $x(t) = \langle X\rangle$ を外場 $f(t)$ の 2 次まで展開しなさい。