

統計力学(II)

橋爪夏樹 (お茶の水女子大理)

III Kinetic Approach

前章では damping theory の一般論を述べた。一般論の常として、多体系の具体的な性質、すなわちハミルトニアン \hat{H} の構造に殆んど依存しない形で数式が立てられ、多体系の性質は種々の仮定として独立に入れざるを得ない。特に damping theory に特徴的な射影演算子をどう選ぶかということも一般論では仮定として入れざるを得ない。これらの仮定が数式と矛盾しないかどうか、また射影演算子が正しく slowly varying part を拾い出すかどうかは具体的な場合に個々に吟味しなければならない。しかしもう一歩下つて考えてみると、本当はハミルトニアン \hat{H} の構造によつて運動が定まるのであるから、slowly varying part を拾い出す射影演算子もそれに応じて自動的に定まるべきであり、また § 2 に述べた Bogoliubov の idea が適用されるとすれば、適当な初期状態の型もハミルトニアン \hat{H} の構造に応じて定まつてくるべきである。理論をこの方向に進めようとする、射影演算子の形が分からないのであるから前章で展開した方法は使えず、別の技巧を必要とする。この章で述べる技巧は Prigogine 学派による diagram の方法である。Diagram を画くためには問題を多少具体的にしなければならないから、一般論より見通しが悪くなる。

§ 7 Diagram Technique —— 粒子相関の力学

Diagram の方法は本質的に摂動論と結びついている。ハミルトニアンは free quasiparticle の集りを表わす部分 \hat{H}_0 とそれらの相互作用或は外場との相互作用を表わす部分 \hat{H}_1 との和として書ける場合を考える：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1. \quad (7.1)$$

橋爪夏樹

Quasi-particle の free motion を何等かの line を表わし、相互作用の vertex を表わすのが、diagram の方法の基本である。場の理論その他の diagram の方法と異なる点は、前章の damping theory に対応する形に diagram を画くことにある。

Introduction に述べた Bogoliubov の idea に従えば、initial mixing の間に初期状態に含まれている複雑な粒子間の相関の或るものは失われて、kinetic stage では一体分布に含まれているもので十分となる。このように複雑な相関から簡単な相関への崩壊を記述するのに便利なように diagram を作ることが必要である。勿論、全ての相関が崩壊する必要はない。しかし如何なる型の相関が不可逆過程で失われて行くべきであるかということは、未だ十分に議論されていないし、それはハミルトニアンに依存するであろう。従つて試行錯誤の方法で理論を進めているのが現段階である。以下に述べる方法も一つの試みである。

多体系の運動の記述に便利な方法はオ二量子化法であり、occupation number 表示が便利である。Fermi 統計に従う場合について述べるが、Bose 統計の場合についても同様に議論を進めればよい。生成消滅演算子 \hat{a}_k^+ , \hat{a}_k を使つと、

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k,$$

$$\lambda \hat{\mathcal{H}}_1 = \frac{\lambda}{2V} \sum_k \sum_l \sum_{k'} \sum_{l'} u(k, l, k', l') \delta_{k+l, k'+l'} \hat{a}_k^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_{k'} \hat{a}_{l'}, \text{ etc. (7.3)}$$

の形に書ける。k, l, k', l' は波動ベクトルで、 $\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$ の固有値が状態 k の占有数であり、Fermi 統計では $n_k = 0, 1$ のみが許される。 $\hat{\mathcal{H}}_0$ の固有関数も $|n\rangle \equiv |\dots n_k \dots\rangle$ として密度行列 $\hat{\rho}(t)$ の行列要素

$$\rho_\nu(N, t) \equiv \langle N + \frac{\nu}{2} | \hat{\rho}(t) | N - \frac{\nu}{2} \rangle \quad (7.4)$$

を考えてみる。 $\nu_k = 0, \pm 1$, $N_k = 0, 1/2, 1$ のみが許されることは明らかである。

多体系の相関を示す量も簡単な量の一つは二体相関関数 $n_2(r_1, r_2)$ であつ

て、これは量子化された波動関数

$$\hat{\psi}(r) = \sum_k \hat{a}_k \frac{e^{ik \cdot r}}{\sqrt{V}} \quad (7.5)$$

を使つて次式で与えられる：

$$\begin{aligned} n_2(r_1, r_2) &\equiv \text{Tr} \left[\hat{\rho}(t) \hat{\psi}^\dagger(r_1) \hat{\psi}^\dagger(r_2) \hat{\psi}(r_2) \hat{\psi}(r_1) \right] \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_k \sum_l \sum_{k'} \sum_{l'} e^{-i(k-k') \cdot r_1 - i(l-l') \cdot r_2} \sum_{N, \nu} \rho_\nu(N, t) \langle N - \frac{\nu}{2} | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{a}_{k'} | N + \frac{\nu}{2} \rangle \end{aligned} \quad (7.6)$$

これは空間内の二点 r_1, r_2 に於ける quasi-particles の相関を表わすもので、系が並進対称性をもてば $k+l=k'+l'$ なる項のみが寄与し、 $n_2(r_1, r_2)$ は $r_1 - r_2$ のみの関数となり、動径分布関数と結びつけられる量である。 $\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k$ が生成消滅演算子であることを想起すると、行列要素 $\langle N - \nu/2 | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \hat{a}_{k'} | N + \nu/2 \rangle$ は状態 $|N + \nu/2 \rangle$ に比べ状態 $|N - \nu/2 \rangle$ が、 k, l -states で粒子数を一つ増し、 k', l' -states で一つ減つているときのみ零でない。従つて (7.6) の和にきく $\rho_\nu(N, t)$ は $\nu_k = \nu_l = -1, \nu_{k'} = \nu_{l'} = +1, \nu_j = 0$ ($j \neq k, l, k', l'$) なる要素のみである。このような要素が零ならば n_2 は消える。逆に $\nu \neq 0$ なる $\rho_\nu(N, t)$ が零でなければ一般に spacial correlation が存在し得る。詳しくみると、 $k=l', l=k'$ となる特別の項では $\nu=0$ なる要素が相関に寄与するから、相関には $\nu \neq 0$ で表わせる型と、表わせぬ型とがあることになる。前者は不可逆過程で崩壊する型であり、後者はせぬ型であると考えられる。この点に関する研究はないが、恐らく次のような理由によるものであろう。生成消滅演算子は振巾と位相とに分けて書ける：

$$\hat{a}_k^\dagger = \sqrt{\hat{n}_k} e^{-i\hat{\theta}_k}, \quad \hat{a}_k = e^{i\hat{\theta}_k} \sqrt{\hat{n}_k} \quad (7.7)$$

従つて摂動展開で $\hat{\rho}(t)$ の運動を追つて行くとき、(7.3) の摂動項が繰返し掛かってくるが、位相因子或は符号因子 $e^{i\hat{\theta}_k}$ が密度行列の位相を変えて行く。この位相変動が表示 (7.4) では ν を変えて行くことに当るから、初期位相の記憶が失われることが相関の崩壊と結びついているとすれば、 $\nu \neq 0$ の型で表わさ

橋爪夏樹

れるであろう。二体相関には零でない ν_k が 4 個ある成分が関係したが、三体相関では 6 個の零でない ν_k をもつ成分が関係してくることは明らかである。従つて零でない ν_k の個数を多くもつ行列要素 $\rho_\nu(N, t)$ はそれだけ複雑な spacial correlation に関係していることが分る。さらに (7.6) で r_1 -依存性は $\rho \dots \nu_k \dots (N, t)$ の k -依存性によつて定まる。すなわち k と僅か異なる k' に対して $\nu_{k'} \neq 0$ となる要素 $\rho \dots \nu_{k'} \dots (N, t)$ の値と比べてみることによつて決められる。Short-range の spacial correlationのみをもつ多体系の状態は、 k -依存性の十分滑らかな要素 $\rho_\nu(N, t)$ のみをもつ密度行列 $\hat{\rho}(t)$ で表わされる。かくして ν によつて相関の複雑さと空間的広がりとを区別できることが分つた。 ν によつて diagram の lines を引くならば、相関の時間的変動、Prigogine 学派の云う dynamics of the spacial correlations を記述できる。

ν によつて lines を引けるためには、非摂動項 $\hat{\mathcal{X}}_0$ に対応する量子力学的 Liouville 演算子 \mathcal{L}_0 が ν について対角化されることが必要である。これを見るために、任意の演算子 \hat{A} の行列要素に対しても (7.4) と同様な記号を導入する：

$$A_\nu(N) \equiv \langle N + \frac{\nu}{2} | \hat{A} | N - \frac{\nu}{2} \rangle. \quad (7.8)$$

すると \mathcal{L} に対応する tetradic (6.5) は次の形に書ける：

$$\begin{aligned} \langle N + \frac{\nu}{2}, N - \frac{\nu}{2} | \mathcal{L} | N' + \frac{\nu'}{2}, N' - \frac{\nu'}{2} \rangle &= \langle \nu | \mathcal{L}(N) | \nu' \rangle \delta_{N, N'}, \\ \langle \nu | \mathcal{L}(N) | \nu' \rangle &= e^{\frac{\nu'}{2} \frac{\partial}{\partial N}} \frac{\mathcal{X}_{\nu - \nu'}(N)}{\pi} e^{-\frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial N}} - e^{-\frac{\nu'}{2} \frac{\partial}{\partial N}} \frac{\mathcal{X}_{\nu - \nu'}(N)}{\pi} e^{\frac{\nu}{2} \frac{\partial}{\partial N}}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

演算子 $f \frac{\partial}{\partial N}$ を使つたのは見掛け上 N について対角形に書くためであるが、これは diagram に N が入つて来なくするためである。Schrödinger 表示で運動量 \hat{p} の行列要素を $\langle q | \hat{p} | q' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q} \delta(q - q')$ の形に書くのと同じ流儀である。 q -表示で $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$ と置き換えるように、 $\mathcal{L} \rightarrow \langle \nu | \mathcal{L}(N) | \nu' \rangle$ と置き換えることができる。(7.2) の $\hat{\mathcal{X}}_0$ に対しては、

$$\mathcal{H}_{0,\nu}(N) = \delta_{\nu,0} \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}, \quad \therefore \langle \nu | \mathcal{L}_0(N) | \nu' \rangle = \delta_{\nu,\nu'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}}{\hbar}, \quad (7.10)$$

すなわち \mathcal{L}_0 は ν について対角化される。ついでに (7.3) の摂動項に対応する演算子 $\lambda \mathcal{L}_1$ を求めると次の形になる：

$$\begin{aligned} \langle \nu | \lambda \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle = & \frac{\lambda}{2V} \sum_{\mathbf{k}} \sum_l \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{l'} u(\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l') \delta_{\mathbf{k}+l, \mathbf{k}'+l'} \delta_{\nu_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}'}+1} \\ & \delta_{\nu_l, \nu_{l'}+1} \delta_{\nu_{\mathbf{k}'}, \nu_{\mathbf{k}'}-1} \delta_{\nu_{l'}, \nu_{l'}-1} \\ & \prod_{j \neq (\mathbf{k}, l, \mathbf{k}', l')} \delta_{\nu_j, \nu'_j} \cdot (\text{an operator including } \frac{\partial}{\partial N_{\mathbf{k}}}, \frac{\partial}{\partial N_l}, \frac{\partial}{\partial N_{\mathbf{k}'}} \text{ and} \\ & \frac{\partial}{\partial N_{l'}}). \end{aligned} \quad (7.11)$$

これは ν に関して off diagonal であり、 $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{l'}$ に対応して $\nu_{\mathbf{k}}, \nu_l$ を 1 だけ増し、 $\nu_{\mathbf{k}'}, \nu_{l'}$ を 1 だけ減らす項のみが残る。摂動 (7.11) では quasi-particle の総数および wave vector の総和は保存されるが、これらの保存則は ν のみで書ける：

$$\sum_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} = 0, \quad \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \nu_{\mathbf{k}} = 0. \quad (7.12)$$

以上では occupation number 表示について述べたが、他の表示、例えば運動量表示についても同様な議論ができる。歴史的には Wigner の位相空間分布

$$F(R, P; t) = \int dp e^{ip \cdot R / \hbar} \langle P + \frac{p}{2} | \hat{\rho}(t) | P - \frac{p}{2} \rangle \quad (7.13)$$

についての議論が出発点であった。これから二体分布を作ってみると、座標 R について積分される部分については $p=0$ となり、 $p \neq 0$ となる自由度が相関に関係することになる。古典的には p/\hbar が分布関数のフーリエ成分の波数になる。

Note Diagram technique は, I. Prigogine-R. Balescu: Physica 25 (1959) 281, 302 により古典論で導入され, Prigogine-S. Ono:

橋爪夏樹

Physica 25 (1959) 171 が Wigner 分布との対応をつけ、P. Ré'sibois: Physica 27 (1961) 541 により occupation number 表示に拡張される。

§ 8 Diagram の構造

前節では (7.8) の表示の ν を使えば quasi-particle 間の相関の変動を記述するのに都合なことをみた。この節では摂動展開の公式を作り、展開の各項に対応する diagram を画く。問題は diagram から、Introduction に述べた initial mixing と kinetic stage との区別をつけることにある。

さて前節に述べたように、 $\mathcal{L} \rightarrow \langle \nu | \mathcal{L}(N) | \nu' \rangle$ なる対応がつくから、Landau-von Neumann 方程式 $\partial \hat{\rho}(t) / \partial t = -i \mathcal{L} \hat{\rho}(t)$ は次の形に書ける：

$$\frac{\partial \rho_{\nu}(N, t)}{\partial t} = -i \sum_{\nu'} \langle \nu | \mathcal{L}(N) | \nu' \rangle \rho_{\nu'}(N, t), \quad (8.1)$$

或は $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \lambda \mathcal{L}_1$ で、 \mathcal{L}_0 は (7.10) のように対角化されるから、

$$\frac{\partial \rho_{\nu}(N, t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nu \rho_{\nu}(N, t) = -i \sum_{\nu'} \langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle \rho_{\nu'}(N, t), \quad (8.2)$$

ただし、 $\mathbf{E} \cdot \nu \equiv \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}}$. 積分方程式の形になおせば、

$$\rho_{\nu}(N, t) = e^{-it\mathbf{E} \cdot \nu / \hbar} \rho_{\nu}(N, 0) + \int_0^t ds \frac{\lambda}{i} \sum_{\nu'} e^{-i(t-s)\mathbf{E} \cdot \nu / \hbar} \langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle \rho_{\nu'}(N, t) \quad (8.3)$$

摂動論はこれを逐次代入法によつて解くことであつて、

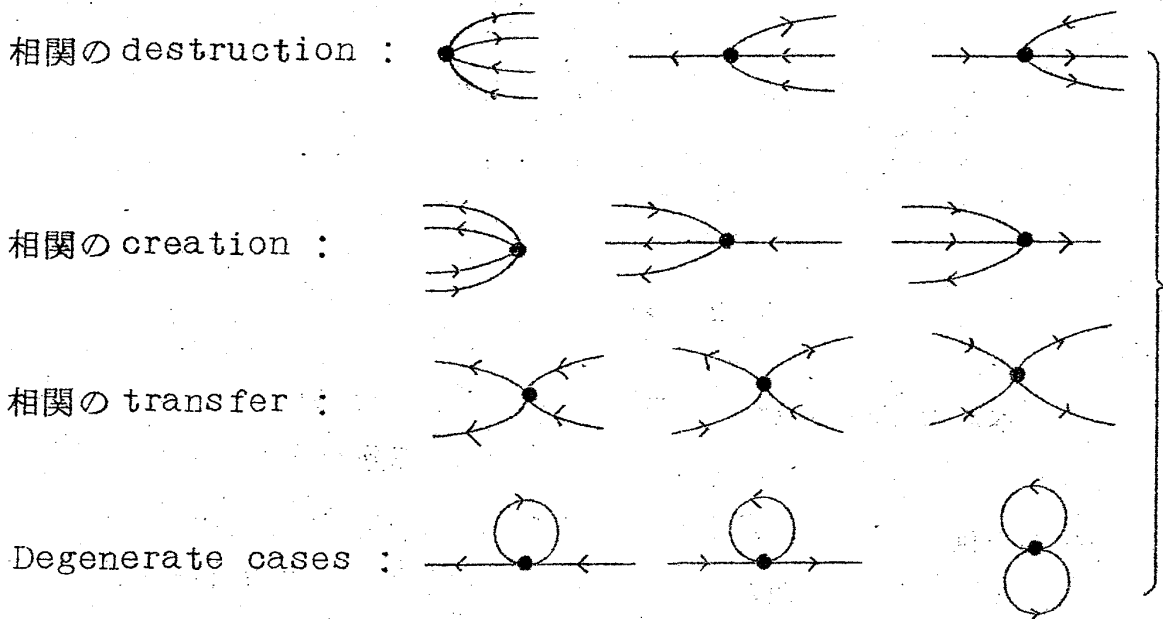
$$\begin{aligned} \rho_{\nu}(N, t) = & e^{-it\mathbf{E} \cdot \nu / \hbar} \rho_{\nu}(N, 0) + \sum_{n=1} \left(\frac{\lambda}{i}\right)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \sum_{\nu_{n-1}} \cdots \\ & \sum_{\nu_2} \sum_{\nu_1} \sum_{\nu'} e^{-i(t-t_n)\mathbf{E} \cdot \nu / \hbar} \\ & \cdot \langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu_{n-1} \rangle e^{-i(t_n-t_{n-1})\mathbf{E} \cdot \nu_{n-1} / \hbar} \langle \nu_{n-1} | \mathcal{L}_1(N) | \nu_{n-2} \rangle \\ & \cdots e^{-i(t_2-t_1)\mathbf{E} \cdot \nu_1 / \hbar} \langle \nu_1 | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle e^{-it_1\mathbf{E} \cdot \nu' / \hbar} \rho_{\nu'}(N, 0) \end{aligned} \quad (8.4)$$

展開の各項は、初期状態 ν' を $t=0$ に出発し、時刻 t_1 に遷移 $\nu' \rightarrow \nu_1$ 、時刻

t_2 に遷移 $\nu_1 \rightarrow \nu_2, \dots$, 時刻 t_n に遷移 $\nu_{n-1} \rightarrow \nu$ をなし、その中間および t_n, t 間は free motion をしていることを表わしている。そこで次のように diagram を画く。零でない ν_k のみが崩壊する相関を表わしていたから、free motion の状態を表わすのに、Fermi 統計の場合は、 $\nu_k = \pm 1$ に対する lines のみを引けばよい。 $\nu = 0$ は vacuum と見、 $\nu_k = \pm 1$ を excitation と見るわけである：

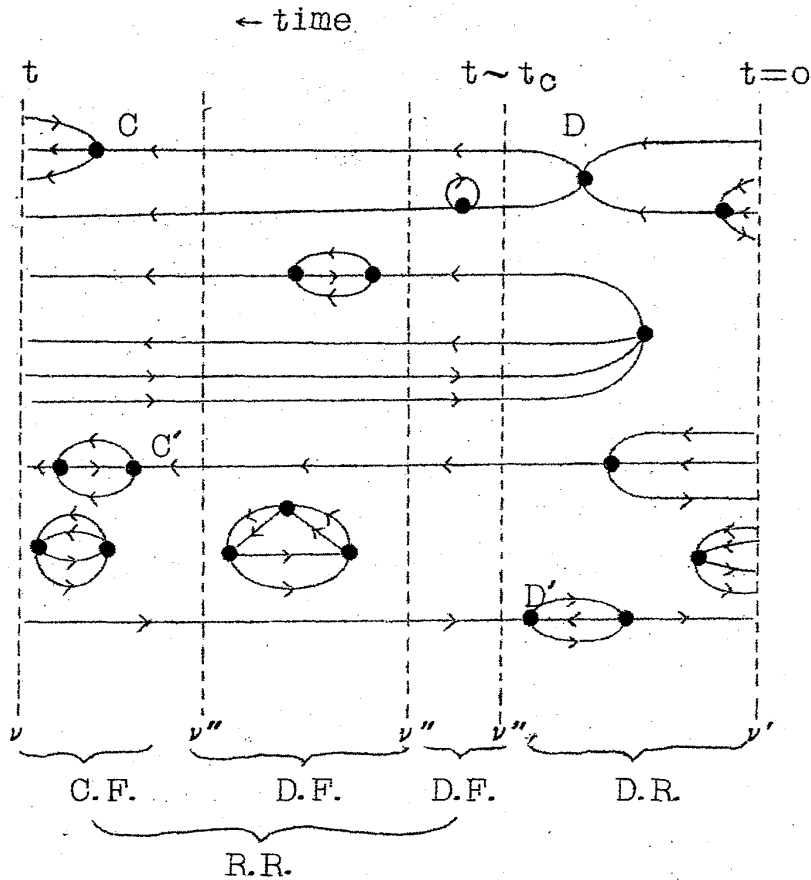
$$\overleftarrow{k} : \nu_k = +1, \quad \overrightarrow{k} : \nu_k = -1. \quad (8.5)$$

Line 上の矢印で ν_k の符号を区別した。次に遷移を表わす vertex は、摂動項が (7.11) で表わされる場合には、 $\langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle$ の ν, ν' の値に応じて 12 個の形があるが、次の 4 種に分類できる：



(8.6)

各 vertex には、(7.11) の構造により、入る lines と出る lines が 2 本ずつなければならぬ。かくして (8.5) (8.6) を摂動展開 (8.4) の和の各項に対応して、右から左へ連結してゆくことにより、diagram を求めることができる。Lines の上下の並べ方は任意であるが、摂動項に対応する演算子 $\langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle$ は θ/N を含むから、vertices の左右の順序は変えられないことに注意。典型的な diagram を才 2 図に示す。




才 2 図

Lines の本数が相関の複雑さに対応していることを想起すれば、次のようにして initial mixing に対応する diagram の部分を分離できる。Diagram を時間軸の方向、すなわち右から左へ見て行くと、各 initial lines 或はそれとつながる line が他の initial lines と始めて相互作用をする vertex がいくつかある。それらのうちで時間的に最後に起る vertex を D とする。D 点の直後の lines を見て、この lines 同志でまた始めて相互作用をする vertices のうち最後のものを D' とする。D' を含め、D' より右にある diagram の部分を destruction region と呼ぶ。D' の直後の状態に対応する ν を ν'' とすると、 ν'' を表わす lines のうち初期状態とつながるものの本数は初期状態 ν の lines の本数より少い筈である。これは初期相関の記憶が失われたことに対応するから、destruction region を initial mixing に対応させることが考えられる。この考えは destruction region が

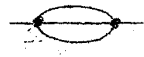

橋爪夏樹

range spacial correlation をもてば、 u 及び ρ_v は十分滑らかで、Cauchy 積分は存在し、病的な特異点は現れないであろう。(8.8)の z -積分は、 $t > 0$ では積分路 Γ を下半平面にずらして、無限遠へもつて行くと、下半平面中の特異点のまわりの積分に帰着される。Cauchy 積分が $\sim z^{-1}$ なる極をいくつかもつと、(8.8)への寄与は e^{-t/t_0} の程度の因子によつて、 $t \gg t_0$ では消える。Coulomb 力のような長距離力では実軸上に分岐点を生ずることがあるが、この場合でも高々振動型の寄与であつて、 t と共に増大する項を与えない。 $t \rightarrow \infty$ と共に増大する寄与は、(8.8)の一番左の propagator に由来する $z=0$ の極から来るが、(8.8)では Cauchy 積分が留数になりそれが存在する限り、有限値しか与えない。このことは、摂動展開の高次の項まで含む適当な部分和をとれば示されるように、 $t=0$ の後、有限の時間しか寄与をもたぬことを示す。かくして initial mixing は destruction region に対応することが分る。勿論高次近似まで確かめられているわけではない。

各 diagram で、上述の destruction region を除いた部分を reducible region と呼ぶ。この部分はその名の通り一般にいくつかの部分に分割される。力学は可逆であるから、摂動展開の一つの項に対応する diagram を左右ひっくりかえした diagram が展開の他の項に対応する筈である。したがつて diagram を左から右に向つて、すなわち時間軸を逆にたどるとき、destruction part に相当する部分がある筈である。これを creation fragment と呼ぶ。才 2 図では vertex C' (D' に対応する定義による)を含めて、 C' より左の部分がこれである。Reducible region が状態 ν'' で始まるとし、時刻 t の最終状態 ν が ν'' と一致する diagram に対しては、creation fragment は存在しない。Destruction の定義により、 ν は ν'' より簡単な相関を表わす状態ではあり得ない。Reducible region から creation fragment を取去つた部分を見ると、状態 ν'' が一般に中間に何回か現われる。相隣る状態 ν'' ではさまれる部分を diagonal fragment と呼ぶ。一つの diagonal fragment を見ると、中間状態は ν'' より複雑な相関を表わす状態になつてゐる。すなわち ν'' より複雑な相関が生長し、それが崩壊して ν'' にもどる相関のゆらぎの一過程に対応する。Diagonal fragments がつながつてゐる

ことは、ゆらぎが繰返されることを表わし、creation fragment に到つてゆらぎが生長するのである。かくしてreducible region が kinetic stage に対応することはもつともらしいが、その継続時間を調べてみよう。最も簡単なdiagonal fragment  の形のもので、摂動展開の二次の項である。 ρ'' を初期状態と見て(8.7)を適用すると、

$$\begin{aligned}
 & \rho_{0\dots 010\dots 0}^{(k)}(N, t) \\
 &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} \frac{1}{E_k/\pi - z} \cdot \left(\frac{\lambda}{2V}\right)^2 \sum_l \sum_{k'} \sum_{l'} |u(k, l, k', l')|^2 \delta_{k, -l+k'+l'} \\
 & \quad \cdot (\text{an operator including } \frac{\partial}{\partial N}) \frac{1}{(E_{k'+E_{l'}-E_l})/\pi - z} \cdot \frac{1}{E_k/\pi - z} \rho_{0\dots 010\dots 0}^{(k)}(N, 0) \\
 &= -e^{iE_k t/\pi} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz' e^{-iz't} \frac{1}{z'^2} \left(\frac{\lambda}{2V}\right)^2 \sum_l \sum_{k'} \sum_{l'} \frac{\delta_{k+l, k'+l'} |u(k, l, k', l')|^2}{(E_{k'+E_{l'}-E_k-E_l})/\pi - z'} \\
 & \quad \cdot (\text{an operator including } \frac{\partial}{\partial N}) \rho_{0\dots 010\dots 0}^{(k)}(N, 0) \quad (8.9)
 \end{aligned}$$

ただし $z' \equiv z - E_k/\pi$ 。 $V \rightarrow \infty$ とすると和はCauchy 積分になるから、先の議論と同様に $z'=0$ の極のみが時間と共に増大する寄与をする。今度は二次の極であるから t に比例する寄与がある。この二次の極は  の両端の直線部の propagator $1/(E_k/\pi - z)$ に由来した。  なる部分のみの寄与はCauchy積分で、有限時間で切れる。 t に比例する寄与は、この部分を時間軸方向にずらせ得ることからきている。これは(8.4)を使つて議論してみれば確かめられる。

Note この節の議論は P. Résibois: Physica 27 (1961) 541 による。Bose 統計の場合については N. I. Muskhelishvili: Singular Integral Equations, P. Noordhoff N. V., Groningen-Holland (原書は 1946 年版) 或はその新版 Н.И.Муохелишвили: Сингулярные Интегральные Уравнения, физматгиз, москва 1962 参照

§ 9 General Kinetic Equations (Master Equation)

Diagram technique の有利な点は簡単に恆等式を作れるということにある。前節では摂動展開 (8.4) 或は (8.7) の各項に対応する diagram が次の構造をもつことを見た： 右端に destruction region があり、次に何個かの diagonal fragment が続き、左端に creation fragment が来る。どの部分かを欠く diagram もある。そこで先ず展開の和を、creation fragment を欠く diagram に対応する項の部分 $\rho_{\nu'}(N, t)$ と、creation fragment を含む項の部分 $\rho_{\nu}''(N, t)$ とに分けることができる：

$$\rho_{\nu}(N, t) = \rho_{\nu'}(N, t) + \rho_{\nu}''(N, t). \quad (9.1)$$

$\rho_{\nu}''(N, t)$ と $\rho_{\nu'}(N, t)$ との関係は容易に求まる。 $\rho_{\nu}''(N, t)$ の部分和に入る各 diagram から creation fragment を取除いたものは $\rho_{\nu'}(N, t)$ の部分和に現れるものと一対一の対応がつく (同じものが一つずつある)。したがって $\rho_{\nu}''(N, t)$ の部分和を、共通の creation fragment をもつ diagram の部分 (これは $\rho_{\nu}''(N, t)$ を与える。 t' は才 2 図の C' なる vertex に対応する時刻) に分け、次に全ての可能な creation fragment の形について加え合せ最後に許される中間状態 ν'' の和と時刻 t' についての積分 (展開 (8.4) のとき) を行うことによつて求められる：

$$\rho_{\nu}''(N, t) = \int_0^t dt' \sum_{\nu'' < \nu} \langle \nu | C(t-t') | \nu'' \rangle \rho_{\nu}''(N, t'), \quad (9.2)$$

ただし $\nu'' < \nu$ なる記号は、 ν と ν'' との関係が前節に述べた destruction region で ν の相関が ν'' までで失われてしまうことに当つていることを示す。creation fragment があり得ない場合、例えば $\nu = 0$ のとき、 $\rho_{\nu}''(N, t) = 0$ となる。また (9.2) の積分核は、 ν'' , ν を結ぶ creation fragment の可能な全ての形についての和であつて、

$$\langle \nu | C(t) | \nu'' \rangle \equiv -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} \langle \nu | \tilde{C}(z) | \nu'' \rangle, \quad (9.3)$$

$$\langle \nu | \tilde{C}(z) | \nu'' \rangle \equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^n \langle \nu | \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0(N) - z} \mathcal{L}_1(N) \right\}^n | \nu'' \rangle_{\text{C.F.}} \quad (9.4)$$

で与えられる。

次に $\rho'_\nu(N, t)$ の満す式を求めよう。 $\rho'_\nu(N, t)$ の部分和に入る各 diagram を考えると、少くとも一個の diagonal fragment を含むものと含まぬものとに分類できる。ただし摂動展開の零次の項は除く。展開(8.7)で左端の propagator 一個は別にすると、diagonal fragment を一つも含まぬ diagrams の部分和は、destruction region (ただし左端は vertex D' まで) を作る diagrams の部分和

$$\langle \nu | \tilde{\mathcal{D}}(z) | \nu' \rangle \equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^n \langle \nu | \{ \mathcal{L}_1(N) \frac{1}{\mathcal{L}_0(N) - z} \}^n | \nu' \rangle_{D.R.} \quad (9.5)$$

を $\rho_{\nu'}(N, 0)$ に掛け、 ν' で和をとつたものにする。同様に diagonal fragment を一個以上含む diagrams は、左端の diagonal fragment の形によつて分類できる。この分類にしたがつて部分和をとりなおす。すなわち左端に同一の diagonal fragment をもつ diagram の部分和をとると、これは $\rho'_\nu(N, t)$ の Laplace 変換に今固定されている diagonal fragment を掛けたものになることは明らかであるから、次に全ての可能な diagonal fragment の形について和をとればよい。かくして次式を得る：

$$\rho'_\nu(N, t) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} \frac{1}{E_\nu - \hbar - z} [\rho_\nu(N, 0) + \langle \nu | \tilde{\mathcal{D}}(z) | \nu \rangle \int_0^{\infty} dt' e^{izt'} \rho'_\nu(N, t') + \sum_{\nu'(>\nu)} \langle \nu | \tilde{\mathcal{D}}(z) | \nu' \rangle \rho_{\nu'}(N, 0)], \quad (9.6)$$

或は時間 t について微分して、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho'_\nu(N, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} \left(i - \frac{i}{\hbar} E_\nu \frac{1}{E_\nu - \hbar - z} \right) [\rho_\nu(N, 0) + \dots] \\ &= -\frac{i}{\hbar} E_\nu \rho'_\nu(N, t) - \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} i [\rho_\nu(N, 0) + \dots], \end{aligned}$$

$$\therefore \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} E_\nu \right) \rho'_\nu(N, t) = \int_0^t dt' \langle \nu | \mathcal{D}(t-t') | \nu \rangle \rho'_\nu(N, t') + \sum_{\nu'(>\nu)} \langle \nu | \mathcal{D}(t) | \nu' \rangle \rho_{\nu'}(N, 0). \quad (9.7)$$

橋爪夏樹

ここに

$$\left. \begin{aligned} \langle \nu | \mathcal{G}(t) | \nu \rangle &\equiv -\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} i \langle \nu | \tilde{\mathcal{G}}(z) | \nu \rangle, \\ \frac{1}{i} \langle \nu | \tilde{\mathcal{G}}(z) | \nu \rangle &\equiv \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^{n+1} \langle \nu | \mathcal{L}_1(N) \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0(N) - z} \mathcal{L}_1(N) \right\}^n | \nu \rangle_{D.F.} \end{aligned} \right\} \quad (9.8)$$

は diagonal fragment で両端を vertex とするものの和であり、前節の議論で Cauchy 積分となつたものである。また

$$\langle \nu | \mathcal{Q}(t) | \nu \rangle \equiv -\frac{i}{2\pi i} \int_{\Gamma} dz e^{-izt} i \langle \nu | \tilde{\mathcal{D}}(z) | \nu \rangle. \quad (9.9)$$

上に得られた generalized kinetic equations (9.1)(9.2)(9.7) は、§ 4 に damping theory の一般論から導いた (4.3)(4.7)(4.8) に対応する式である。詳しく調べてみると、 $\nu = 0$ すなわち (7.4) から分かるように密度行列の対角部分 $\rho_0(N, t)$ については、(9.7)(4.7) の両者が一致する (射影演算子 \mathcal{P} は対角部分を捨り (6.2) が、他の場合には簡単な一致は見られない。これは実際には射影演算子 \mathcal{P} が複雑なものになつてゐることを暗示する。(9.8) の演算子 $\tilde{\mathcal{G}}(z)$ を見ても、中間状態は ν よりも複雑な相関をもつようになつてゐるという意味で dynamical irreducibility の条件が課されてゐて、(5.6) のように射影演算子 $(1 - \mathcal{P})$ を途中にはさむ形にするには \mathcal{P} を簡単な形 (例えば ν 状態への射影) にとつたのではだめである。(9.5) の $\tilde{\mathcal{D}}(z)$ では中間状態に ν と ν' との両者が現われてはならない。

相互作用の一部を self-consistent field として (9.7) 式の左辺に移すようにするには、上述の diagram の部分和のとり方を多少変更しなければならないが、一般的な議論はされていないようである。

Note この節の議論は P. Résibois: Physica 27 (1961) 541 による。Dynamical irreducibility については P. Résibois: Physica 29 (1963) 721 参照。Self-consistent field を分離する議論は P. Résibois-R. Dagonnier: Physica 29 (1963) 1057 に少しある。

§ 10 平衡状態への接近

前節に得られた方程式 (9.1)(9.2)(9.7) に基いて密度行列 $\hat{\rho}(t)$ が熱平衡状態でのものへ接近する仕方を調べておくことは教訓的である。Kinetic stage ($t \gg t_c$) では、damping theory の一般論の場合と同様に、(9.7) の右辺才二項は、初期分布が short-range spacial correlation のみを持ち、また相互作用が短距離力であれば、落すことができ、(9.7) の右辺才一項および (9.2) の右辺に現れる時間積分の上限 t は $+\infty$ で近似してよい。この場合には (5.9)(5.10) の場合と同様な変形によつて次式を得る：

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\nu}\right) \rho'_{\nu}(N, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle \nu | \tilde{\mathcal{L}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + i\epsilon\right) | \nu \rangle \rho'_{\nu}(N, t), \quad (10.1)$$

$$\rho''_{\nu}(N, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \sum_{\nu' (< \nu)} \langle \nu | \tilde{\mathcal{L}} \left(i \frac{\partial}{\partial t} + i\epsilon\right) | \nu' \rangle \rho'_{\nu'}(N, t). \quad (10.2)$$

これらが kinetic stage を支配する基本方程式である。(10.1) は $\rho'_{\nu}(N, t)$ が密度行列の他の成分 (異なる ν をもつ ρ'_{ν} および ρ''_{ν}) とは独立に、一つの mode として運動することを示す。射影演算子が多数ある場合の式 (4.11) のように連立方程式とはなっていない。

先ず平衡分布に対応する密度行列 $\hat{\rho}^{\text{eq}}$ の満たす性質を調べておく。 $\hat{\rho}^{\text{eq}}$ は勿論 Landau-von Neumann 方程式 $\partial \hat{\rho} / \partial t = -i \mathcal{L} \hat{\rho}$ 式は (8.2) の定常解である：

$$\frac{i}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\nu} \rho^{\text{eq}}_{\nu}(N) = -i \lambda \sum_{\nu'} \langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle \rho^{\text{eq}}_{\nu'}(N). \quad (10.3)$$

この解は普通の境界条件の下では total Hamiltonian $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \lambda \hat{\mathcal{H}}_1$ の任意の関数であつてよいが、多くの場合は canonical ensemble に対応する関数形

$$\hat{\rho}^{\text{eq}} = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} / \text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}) \equiv e^{\beta (F - \hat{\mathcal{H}})} \quad (10.4)$$

をとると便利である。そのためには (10.3) の解を求めるとき、 $\lambda \rightarrow 0$ での関数形

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \hat{\rho}^{\text{eq}} = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0} / \text{Tr}(e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0}) \equiv e^{\beta (F_0 - \hat{\mathcal{H}}_0)} \equiv \hat{\rho}^0 \quad (10.5)$$

橋爪夏樹

を指定すればよい。上式を (7.4) の記法で書くと次の条件になる：

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \rho_{\nu}^{\text{eq}}(N) = \rho_{\nu}^0(N) = \delta_{\nu,0} e^{\beta(E_0 - EN)}, \quad (10.6)$$

ただし $E \cdot N \equiv \sum_k E_k N_k$ 。 $\rho_{\nu}^0(N)$ は上式に見られるように $\nu = 0$ のときのみ値をもつから、 $(i/\hbar) E \cdot \nu \rho_{\nu}^0(N) = 0$ を (10.3) の右辺に加えてもよい：

$$\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N) = \rho_{\nu}^0(N) - \lambda \sum_{\nu'} \frac{\langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle}{E \cdot \nu / \hbar} \rho_{\nu'}^{\text{eq}}(N).$$

この形にすると条件 (10.6) は自動的に含まれた形になるが、 $\nu \rightarrow 0$ の極限を考えると全ての計算を終了して $\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N)$ が求まってから行はねばならない。

この不便を避けるには、上式の右辺の分母に微小な虚数を加えておけばよい：

$$\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N) = \rho_{\nu}^0(N) - \lambda \sum_{\nu'} \frac{\langle \nu | \mathcal{L}_1(N) | \nu' \rangle}{E \cdot \nu / \hbar - i\epsilon} \rho_{\nu'}^{\text{eq}}(N), \quad (\epsilon \rightarrow +0) \quad (10.7)$$

$\epsilon \rightarrow +0$ は全ての計算が終了してから行う。(10.7) は微分方程式 (10.3) に対応する散乱理論で良く知られた積分方程式に相当する。分母に $-i\epsilon$ を入れたのは、入射波が $\rho_{\nu}^0(N)$ であるとき、 $t \rightarrow \infty$ で出てくる散乱波が $\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N)$ となるようにすることを意味する。分母に $+i\epsilon$ を入れれば $t \rightarrow \infty$ で $\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N)$ が得られるであろう。前者を選ぶことは以下の計算の便宜による。(10.7) を逐次代入法で解けば、 $\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N)$ に対する摂動展開の式が得られる：

$$\rho_{\nu}^{\text{eq}}(N) = \rho_{\nu}^0(N) + \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda)^n \langle \nu | \left\{ \frac{1}{\mathcal{L}_0(N) - i\epsilon} \mathcal{L}_1(N) \right\}^n | 0 \rangle \rho_0^0(N). \quad (10.8)$$

この摂動展開の各項に対して、(8.7) の場合と同様に diagram を画くことができる。初期状態は $\nu' = 0$ であるから、destruction region は現われない。

先づ (10.8) で $\nu = 0$ と置く場合を調べる。最終状態が $\nu = 0$ であるから creation fragment も存在しない。したがって (10.8) の和に現われる diagram は $0 \rightarrow 0$ なる diagonal fragment を連結したものである。(9.8) の演算子 $\mathcal{G}(z)$ を使うと、

$$\begin{aligned} \rho_0^{\text{eq}}(N) &= \rho_0^0(N) + \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{-i\epsilon} \frac{1}{i} \langle 0 | \tilde{\mathcal{G}}(i\epsilon) | 0 \rangle \right\}^m \rho_0^0(N) \\ &= \frac{\epsilon}{\epsilon - \langle 0 | \tilde{\mathcal{G}}(i\epsilon) | 0 \rangle} \rho_0^0(N), \end{aligned} \quad (10.9)$$

$$\therefore \left\{ \epsilon - \langle 0 | \tilde{\mathcal{G}}(i\epsilon) | 0 \rangle \right\} \rho_0^{\text{eq}}(N) = \epsilon \rho_0^0(N),$$

或は

$$\boxed{\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle 0 | \tilde{\mathcal{G}}(i\epsilon) | 0 \rangle \rho_0^{\text{eq}}(N) = 0.} \quad (10.10)$$

上式で $\epsilon \rightarrow +0$ 極限は、 $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ が $\epsilon \rightarrow 0$ で存在すると考えられるから、演算子 $\tilde{\mathcal{G}}(i\epsilon)$ の方に対して行うものと見做してよい。次に (10.8) で $\nu \neq 0$ の場合を考えると、対応する diagram には必ず creation fragment がついていなければならない。この creation fragment を固定して、diagram の残りの部分についての和を先にとると $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ になることは明らかである。Creation fragment の可能な全ての形について集めると、(9.4) を想起して、次式を得る：

$$\boxed{\rho_\nu^{\text{eq}}(N) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle \nu | \tilde{\mathcal{C}}(i\epsilon) | 0 \rangle \rho_0^{\text{eq}}(N), \quad (\nu \neq 0).} \quad (10.11)$$

(9.3) の逆は

$$\langle \nu | \tilde{\mathcal{C}}(z) | \nu'' \rangle = \int_0^\infty dt e^{izt} \langle \nu | \mathcal{C}(t) | \nu'' \rangle \quad (10.12)$$

であるから、(10.11) はまた次の形に書いてもよい：

$$\rho_\nu^{\text{eq}}(N) = \int_0^\infty dt \langle \nu | \mathcal{C}(t) | 0 \rangle \rho_0^{\text{eq}}(N), \quad (\nu \neq 0). \quad (10.13)$$

さて、本題にもどつて、kinetic equations (10.1)(10.2) を考える。これらの式と上に求めた (10.10)(10.11) とを比べてみる。(10.10) は $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ すなわち平衡密度行列の対角要素が (10.1) の定常解であることを示す。そして積分方程式 (10.7) の解が一義的であれば、すなわち (10.4) が物理的に許さ

橋爪夏樹

れる唯一つの平衡分布を表わす場合は、 $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ は(10.10)の唯一の解、したがって(10.1)の唯一の定常解(条件(10.5)の下での)になるであろう。他方、 $\lambda \rightarrow 0$ として $\tilde{\mathcal{C}}(z)$ を λ^2 までに止める近似では(10.1)はPauli型の方程式になるから、 λ を大きくして行くとき病的なことが起らぬとすれば、(10.1)は一般に減衰振動型の方程式である。故に(10.1)の解は $\nu \neq 0$ なら零に向つて $\nu = 0$ なら $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ に向つて減衰振動をする筈である：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \rho'_\nu(N, t) = \delta_{\nu, 0} \rho_0^{\text{eq}}(N). \quad (10.14)$$

次に(10.2)で $t \rightarrow +\infty$ とすると、右辺の $\rho'_\nu(N, t)$ は上式によつて $\delta_{\nu, 0} \rho_0^{\text{eq}}(N)$ で置換えてよい。これは t には依存しないから、(10.2)の演算子 $\tilde{\mathcal{C}}$ 中の時間微分を落してよく、すると(10.11)が使えて、結局次式を得る：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \rho''_\nu(N, t) = \rho_\nu^{\text{eq}}(N), \quad (\nu \neq 0). \quad (10.15)$$

$\rho''_0(N, t) \equiv 0$ であつた。

以上の結果によれば、密度行列の各成分が $t \rightarrow +\infty$ が如何に行動するかの大略が分かる。 $\rho'_\nu(N, t)$ はいわば減衰振動部であつて、 $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ に向つて崩壊して行く。この $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ は(10.10)に見られるように、collision integralの固有値0の固有関数であつて、Boltzmann方程式でいえばlocal equilibrium分布の役割(上の話では空間依存性を考えるhydrodynamical stageの終りの方になつているので、Maxwell分布というべきであるが)を演じている。 $\rho''_\nu(N, t)$ はいわば生長部であつて、(10.13)に見られるように、 $\rho_0^{\text{eq}}(N)$ から平衡分布の残りの部分へと生長する。Initial mixingの段階で初期分布 $\rho_\nu(N, 0)$ が壊れるところまで入れると、初期分布が平衡分布に向つて、ゆらぎながら変形して行く描像が得られよう。力学の可逆性にもかかわらず、平衡分布に向つて一方交通であるのは、Cauchy積分の議論の所で多体系の自由度を無限大にしているため(この種の議論は減衰振動型になるというような判定に使われた)、再帰時間(Poincaré cycle)が無限大となつているためである。

この節の論法は次章で、Kubo formulaeを導く際に利用されるであろう。

Note この節の議論は P. Résibois: Physica 27 (1961) 541 による。
古典論の場合の議論は I. Prigogine-R. Balescu: Physica 25 (1959)
281, 302; Prigogine-F. Henin: J. math. Phys. 1 (1960) 349;
Henin-Résibois-F. Andrews: J. math. Phys. 2 (1961) 68 参照。