

ブラウン運動論と量子力学 (補足)

佐賀大・理工・化学 竹山 尚賢

本シリーズ (I)* に対して補足させていただきます。今後の演算子の関係に関連しますので。

次のことは容易に示すことができる。

いま, q, r を平均時間微分 (前及び後向き) が存在する量とする。その時,

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} \right) \langle q(t) r(t) \rangle &= \langle D_f q(t) \cdot r(t) \rangle \\ &+ \langle q(t) D_b r(t) \rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

が成立する。ただし, D_f 及び D_b はそれぞれ前向き及び後向きの平均時間微分演算子である。 D_f, D_b を時間, 位置 (時間のみの関数) の関数 $f(q(t), t)$ に作用させると

$$\begin{aligned} D_f f(q(t), t) &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla + D^{(f)} \Delta \right) f(q(t), t), \\ D_b f(q(t), t) &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v}^{(b)} \cdot \nabla - D^{(b)} \Delta \right) f(q(t), t) \end{aligned} \quad (2)$$

となる。ここに $D^{(f)}, D^{(b)}$ は前向き及び後向きの拡散係数 (両者が等しいことはその物理的内容からすぐいえることである)。

ここで $f(q(t), t), g(q(t), t)$ が時間についてコンパクトな集合の閉包をなすもの

$$\int d \langle f g \rangle = 0 \quad (3)$$

とすると, (1) は

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle D_f f \cdot g \rangle = - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle f D_b g \rangle, \quad (4 \cdot a)$$

となる。これに位置空間における密度 (分布) 関数 $\rho(q(t), t)$ を用いて陽に

* 物性研究 12, No. 6 (1969) 419

書くと

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\Omega} dq (D_f f) g \rho \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\Omega} dq f D_f^+ (g \rho) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\Omega} dq f (D_f^* g) \rho \\
 &= - \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{\Omega} dq f (D_b g) \rho
 \end{aligned} \tag{4.b}$$

と変形される。ただし,

$$D_f^+ = -(\partial/\partial t + \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla + \text{div } \vec{v}^{(f)} - D^{(f)} \Delta) \tag{4.c}$$

は D_f の随伴 (=転置) 演算子であり, また

$$D_f^* \equiv \rho^{-1} D_f^+ \rho \tag{4.d}$$

を定義, 導入した。

われわれの目的は, (4.b) により, すなわち, (4.c & d) を用いて

$$\rho^{-1} D_f^+ \rho g = -D_b g \tag{5}$$

の演算子関係により, 後向き演算子を前向き演算子によって表現することである。

(5) に (4.c) を用いて具体的に計算すると次式となる。

$$\begin{aligned}
 \rho^{-1} D_f^+ \rho g &= -(\partial/\partial t + \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla \\
 &\quad - 2D^{(f)} \nabla \ell_n \rho \cdot \nabla - D^{(f)} \Delta) g \\
 &= -(\partial/\partial t + \vec{v}^{(b)} \cdot \nabla - D^{(b)} \Delta) g,
 \end{aligned} \tag{5'}$$

ただし, 前向き拡散方程式からの関係

竹山尚賢

$$\rho^{-1} \partial \rho / \partial t = - \operatorname{div} \vec{v}^{(f)} - \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla \ln \rho \\ + D^{(f)} \rho^{-1} \Delta \rho$$

を用いた。

従って (5') の両辺の各項を等置して次式がえられる。

$$\vec{v}^{(b)} = \vec{v}^{(f)} - 2 D^{(f)} \nabla \ln \rho, \quad (6)$$

$$\text{or } \vec{u} \equiv (1/2) (\vec{v}^{(f)} - \vec{v}^{(b)}) \\ = D \nabla \ln \rho, \quad (6 \cdot a)$$

$$\text{with } D \equiv D^{(f)} = D^{(b)} \quad (6 \cdot b)$$

(6・a) は純拡散速度とよんで使ってきた関係である。(I) における導き方では、次のように考えるべきであろう。本来の連続の式は時間反転 $t \rightarrow -t$ に対して不変であらねばならぬ。(I・22・a & b) で $\vec{v}_d^{(+)} = (1/2) (\vec{v}^{(f)} + \vec{v}^{(b)}) \equiv \vec{v}$ のみが、 $t \rightarrow -t$ に対して $\vec{v} \rightarrow -\vec{v}$ となり (22・a) は不変に止る。一方 (22・b) は明らかに不変性が保たれず、(22'・b) は消え、結局上記 (6・a) を与える。