

1974)

20. H. Haken, *Synergetics-An Introduction* (Springer-Verlag, Berlin 1978).
21. H. Hasegawa, *Thermodynamics and Transient Dynamics of Simple Optical Systems with Instability* Springer Series in Solid-state Sciences **18** (Springer Verlag 1980); H. Hasegawa, M. Mizuno and M. Mabuchi, Prog. Theor. Phys. **67** (1982) 98.
22. N. Hashitsume, Prog. Theor. Phys. **8** (1952) 461.
23. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 44.
24. H. Hasegawa, Prog. Theor. Phys. **57** (1977) 1523; H. Hasegawa, M. Mabuchi and S. Sawada, Proc. 4th Rochester Conf. on Coherence and Quantum Optics, Rochester (1977) Plenum (1978) 667.
25. E. Nelson, *Dynamical theories of brownian motion* (Princeton University Press 1967).
26. K. Yasue, J. Funct. Anal. **41** (1981) 327.
27. H. Hasegawa, Phys. Rev. D **33** (1986) 2508.
28. Qian, Minping, *The Entropy Production and Reversibility of Markov Processes* pre-print for Intern. Conf. Probability Theory 1985 Nagoya.
29. T. Nakagomi and H. Hasegawa, unpublished.
30. R. Kubo and N. Hashitsume, *Statistical Physics*, (Springer 1985).

後 記

1. Onsager-MachLup 理論に現れる二種の散逸関数 $\phi(J)$ と $\psi(X)$ とは Legendre 変換によって変数 J から変数 X に移れることが散逸極小原理とエントロピー極小原理との間の関係を与える。これを非線形の場合に拡張しようという一柳氏の提案は中野藤生氏のアイディアである(私信および中野氏のプレプリント)。しかし筆者の理解する限り、それは確率過程の理論から導かれるものではないようである。
2. この報告を書いたのち、他のもう一つの研究会「カオスとその周辺」が催された。散逸系のカオスにおいては 'strange attractor' の測度に対する変分原理が確立していて、最近の高橋陽一郎氏の研究によれば、それは熱平衡状態に関する Gibbs の変分原理と同様な形式で書かれる。しかし、散逸系カオスの strange attractor が非平衡系の基本的定常状態であるということから、むしろそれは Onsager の散逸極小原理に対応するものではないかと思われる。今後の解明が期待される問題点の一つであろう。

場の理論における断熱定理と非平衡熱力学

慶大・理工 福田 礼次郎

熱的に isolate されたマクロな系の Hamiltonian を

$$H(\alpha_i(t)) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

に取る。ここで $\alpha_i(t)$ は時間に依存する外部パラメーターで例えば系の体積 V や磁場 H などを表わすものとする。 α_i を無限にゆっくり変化させたときの内部エネルギーの変化は、 $\dot{\alpha}_i \equiv \frac{d}{dt} \alpha_i$ として、

$$\begin{aligned} dE &= -p dv + \dots \\ &\equiv \sum_{i=1}^N X_i(t) d\alpha_i(t) = \sum_{i=1}^N X_i \dot{\alpha}_i dt \end{aligned} \quad (1)$$

と与えられ X_i は時刻 t での平衡分布による期待値である。式(1)は断熱変化の際の公式で、 α_i がゆっくり変化しない場合の最初の補正を考えると、熱力学の第2法則を用いて

$$dE = \sum_i X_i(t) d\alpha_i(t) + \sum_{i,j} Y_{ij}(t) \dot{\alpha}_i(t) \dot{\alpha}_j(t) \quad (2)$$

のようになるはずであり Y_{ij} の symmetric part は正定値行列である。

ここでは、式(2)の展開をミクロな Hamiltonian から導くのを目的とする。方法は Kubo の linear response の時のものと全く同じで外場 $\alpha_i(t)$ のべきで展開する代りに時間微分・(ドット)の数で展開する。つまり仮定と方法を列挙すると、

(i) シュレーディンガー表示の Hamiltonian $H(\alpha_i(t))$ を

$$H(\alpha_i(t)) = H(\alpha_i(-\infty)) + \Delta H(\alpha_i(t))$$

の様に分解し、パラメーターの原点を $\alpha_i(-\infty) = 0$ になるように取る。さらに $\Delta H(\alpha_i(-\infty)) = 0$ である。

(ii) 密度行列の運動方程式

$$\dot{\rho}(t) = i [\rho(t), H(\alpha_i(t))]$$

を積分する。その際 $\rho(-\infty)$ は平衡分布にとる。特に microcanonical 分布にとると計算しやすい。

(iii) $\alpha_n(t)$ を Taylor 展開して、 $\cdot$ の数でまとめる。そして lowest の項に対して断熱定理を用いる。結果は

(i) 式(2)の展開は正しい。例えば $\ddot{\alpha}$ に比例する項は出ない。

(ii) X_i, Y_{ij} は確かに時刻 t での平衡分布による期待値となっており Y_{ij} の exact な表式は Y_{ij} の対称部分は正定値であることを示している。

(iii) $\cdot$ の Higher terms に対する公式も機械的に求まる。それらの符号については何もいえない。

議論は“相互作用表示”で行う。Hamiltonian $H(\alpha_i(t))$ を

$$H(\alpha_i(t)) = H_0 + \Delta H(t),$$

ただし $H_0 = H(\alpha_i(-\infty))$, $\Delta H(t) = \Delta H(\alpha_i(t))$, のように書き H_0 を base に $\Delta H(t)$ を相互作用と見なす。 $t=0$ ですべての表示が一致しているとすれば、シュレーディンガー表示、相互作用表示 (I

と書く), Heisenberg 表示 (H と書く) の関係は任意のオペレーター $A(t)$ に対して次のようになる。

$$\begin{aligned} A^I(t) &= \exp\left(\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) A(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 t\right) \\ &= U(t, 0) A^H(t) U^\dagger(t, 0). \end{aligned}$$

ただし

$$U(t', t) \equiv T \exp -i \int_t^{t'} \Delta H^I(t'', \alpha(t'')) dt''$$

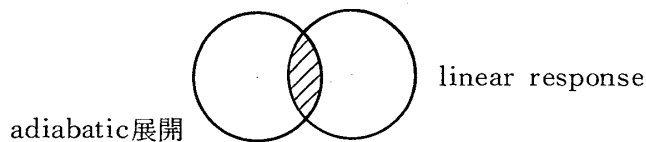
を用いた。密度行列に対しては

$$\begin{aligned} \rho^I(t) &= U(t, 0) \rho^H U^\dagger(t, 0) \\ &= U(t, t') \rho^I(t') U(t', t) \end{aligned}$$

が成り立つ。よって任意の時刻 t での期待値に対する公式は

$$\begin{aligned} \langle A(t) \rangle_t &= \text{Tr} \rho^H A^H(t) = \text{Tr} \rho^I(0) A^H(t) \\ &= \text{Tr} U(0, -\infty) \rho^I(-\infty) U(-\infty, 0) U(0, t) A^I(t) U(t, 0) \\ &= \text{Tr} \rho^I(-\infty) U(-\infty, t) A^I(t) U(t, -\infty). \end{aligned}$$

もし $\Delta H^I(t) = \sum \alpha_i(t) O_i^I(t)$ なら α_i の一次近似で linear response の公式となる。以下の adiabatic 展開と linear response の適用可能範囲の関係は下図のようである。



α_i が小さくてかつ時間変化もゆっくりしている時は両者の公式は一致する。

まず $A(t)$ として total Hamiltonian を取る；

$$\langle H(t) \rangle_t = \text{Tr} \rho^I(-\infty) U^\dagger(t) H^I(t) U(t)$$

ただし $U(t) \equiv U(t, -\infty)$ 。次の様な公式が $U^\dagger(t) H^I(t) U(t)$ に対して導ける。(証略)

$$U^\dagger(t) H^I(t) U(t) = H_0 + U^\dagger(t) L(t) \quad (3)$$

$$U^\dagger(t) L(t) \equiv U^\dagger(t) \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} dt' \dot{\alpha}_i(t') \frac{\partial}{\partial \alpha_i(t')} U(t).$$

これは Gellman-Low の公式の一般化である。一般化力を

$$X_i^I(t') = \left(\frac{\partial \Delta H(\alpha(t'))}{\partial \alpha_i(t')} \right)_I$$

で導入すると

$$U^\dagger(t) L(t) = \sum_i \int_{-\infty}^t dt' U^\dagger(t') X_i^I(t') U(t') \dot{\alpha}_i(t') \quad (4)$$

と書け、これは力(ユニタリー変換を受けているが)と変位の積の $t = -\infty$ から t までの和となっていて外力のなした全仕事の形となっている。これらを用いて、さらに $\rho^I(-\infty) = \delta(H_0 - E_0)$ と仮定すると

$$\begin{aligned} \langle H(t) \rangle_t &= \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) U^\dagger(t) H^I(t) U(t) / \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) \\ &= E_0 + \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) U^\dagger(t) L(t) / \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) \end{aligned}$$

と書ける。さて式(3)において $U(t')$ をくわしく書くと

$$U(t') = T \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \Delta H^I(t'', \alpha(t'')) \right)$$

であるが、ここで $\Delta H^I(t'', \alpha(t''))$ の dynamical な t'' dependence と kinematical な $\alpha(t'')$ を通しての t'' dependence を分離する。つまり次のように adiabatic 展開を定義する。

$$\begin{aligned} \alpha_i(t'') &= \alpha_i(t') + (t'' - t') \dot{\alpha}_i(t') + \dots \\ \Delta H^I(t'', \alpha(t'')) &= \Delta H^I(t'', \alpha(t')) + \sum_i (t'' - t') \frac{\partial \Delta H^I(t'', \alpha(t'))}{\partial \alpha_i(t')} \dot{\alpha}_i(t') + \dots \end{aligned}$$

さらに

$$\begin{aligned} U_0(t', t) &\equiv T \exp -\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt'' \Delta H^I(t'', \alpha(t')), \\ U_0(t') &\equiv U_0(t', -\infty) \end{aligned}$$

を導入すると、次の表式を得る。

$$\begin{aligned} U^\dagger(t) L(t) &= \int_{-\infty}^t dt' U_0^\dagger(t') W(t') U_0(t') \\ W(t') &= \sum_i \hat{X}_i(t', t') \dot{\alpha}_i(t') \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \sum_{ij} \int_{-\infty}^{t'} dt'' (t'' - t') [\hat{X}_i(t'', t'), \hat{X}_j(t'', t')] \dot{\alpha}_i(t') \dot{\alpha}_j(t') \\ &\quad + O(\dot{\alpha})^3, O(\dot{\alpha}\ddot{\alpha}). \end{aligned}$$

ここで

$$\hat{X}_i(t'', t') \equiv U_0^\dagger(t'', t') \frac{\partial \Delta H^I(t'', \alpha(t'))}{\partial \alpha_i(t')} U_0(t'', t')$$

であって $-\infty < t'' < t'$ の間は $\alpha_i(t')$ に fix されたパラメーターで時間発展する表示をとっていることを表わしている。これは adiabatic 展開にとって自然な表示である。さて $\Delta \mathcal{E}(t) \equiv \langle H(t) \rangle_t - E_0$ は

$$\begin{aligned}
\Delta \mathcal{E}(t) &= \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) \int_{-\infty}^t U^\dagger(t') W(t') U(t') dt' / \text{Tr} \delta(H_0 - E_0) \\
&= \text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' \delta(U_0(t') H_0 U_0^\dagger(t') - E_0) W(t') / \text{Tr} \delta(U_0(t') H_0 U_0^\dagger(t') - E_0)
\end{aligned}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}
U_0(t') &= T \exp -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \Delta H^I(t'', \alpha(t')) \\
&= \text{ad-lim} T \exp -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \Delta H^I(t'', \alpha(t'')) \\
&= \text{ad-lim} U(t')
\end{aligned}$$

であることに注意する。ただし ad-lim とは $\alpha(t')$ を fix して $-\infty < t'' < t'$ の間では $\dot{\alpha}_i(t'') \rightarrow 0$ とする limit である。よって式(3)を用いると

$$\delta(U_0(t') H_0 U_0^\dagger(t') - E_0) = \text{ad-lim} \delta(H^I(t') - L(t') U^\dagger(t') - E_0)$$

ここで詳しい断熱定理の結果によると (証略), これは

$$\delta(H^I(t') - \Delta E(E_0, t') - E_0)$$

と書ける。 $\Delta E(E_0, t')$ は $t = -\infty$ で E_0 であった固有状態が $t = t'$ でやはり固有状態にシフトするがエネルギーが $\Delta E(E_0, t')$ だけずれるがその大きさを表わしている。それは E_0 の関数である。 $E(t) = E_0 + \Delta E(E_0, t')$ とおくと, t' での平衡分布 $\delta(H^I(t') - E(t'))$ を得る。これで準備を完了して $\Delta \mathcal{E}(t)$ に対する我々の公式を得る。

$$\begin{aligned}
\Delta \mathcal{E}(t) &= \sum_i \int_{-\infty}^t dt' X_i(t') \ddot{\alpha}_i(t') \\
&= \sum_{ij} \int_{-\infty}^t dt' Y_{ij}(t') \dot{\alpha}_i(t') \dot{\alpha}_j(t') + O(\dot{\alpha})^3, O(\ddot{\alpha} \ddot{\alpha})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
X_i(t') &= \langle \hat{X}_i(t', t') \rangle_{\text{eq. } t'} \\
&= \left\langle \frac{\partial \Delta H^I(t', \alpha(t'))}{\partial \alpha_i(t')} \right\rangle_{\text{eq. } t'},
\end{aligned}$$

$$Y_{ij}(t') = i \int_{-\infty}^{\infty} dt'' (t'' - t') G_{ij}^r(t'' - t', \alpha(t'))$$

$$\begin{aligned}
G_{ij}^r(t'' - t', \alpha(t')) &\equiv \frac{1}{\hbar} \theta(t' - t'') \langle [\hat{X}_i(t'', t'), \hat{X}_j(t', t')] \rangle_{\text{eq. } t'} \\
&\equiv \theta(t' - t'') x_{ij}''(t'' - t', \alpha(t'))
\end{aligned}$$

ここで $\langle \dots \rangle_{\text{eq. } t'}$ とは $\delta(H^I(t') - E(t'))$ による平均を意味する。この結果前述の (i), (ii), (iii) を明らかにすることができる。その為には $x_{ij}''(t'' - t', \alpha(t'))$ の t'' によるフーリエ変換 $x_{ij}''(\omega)$ に対してよく知られた

$$d\chi''_{ij}(\omega)/d\omega|_{\omega=0} \geq 0$$

が成立することに注意すれば充分である。ここで添字 S は対称部分を意味する。エントロピーの増加分も

$$\exp S(t') = \text{Tr} \delta(H^I(t') - E(t'))$$

としてエントロピーを定義すれば

$$\Delta S = S(t') - S(-\infty) = \Delta \mathcal{E}(t')_{n.a.}/T(t')_{ad.} \geq 0$$

と求まる。ここで $\Delta \mathcal{E}(t')_{n.a.}$ は $\Delta \mathcal{E}(t')$ の non-adiabatic な部分, $T(t')_{ad}$ は分布 $\delta(H^I(t') - E(t'))$ に対応する温度であって, δ -関数をパラメーター表示したときのパラメーターの停留点で求まる。

エネルギー以外の operator X_n についても

$$\langle X_n(t) \rangle_t = \text{Tr} \rho^I(-\infty) U^\dagger(t) X_n(t) U(t)$$

$$= X_n(t) + \sum_{n,m} Y_{mn}(t) \dot{\alpha}_m(t) + \dots$$

となり $\langle X_n(t) \rangle_t \equiv \varphi_n(t)$ においてこの式を α について解けば Ginzburg-Landau の Exact な公式を得る；

$$\sum_m D_{n,m}(\varphi(t)) \dot{\varphi}_m(t) + \frac{\partial F(\varphi(t))}{\partial \varphi_n(t)} + \alpha_n(t) = 0$$

$$D_{n,m}(\varphi(t)) \equiv \sum_{m',n'} F_{nn'} Y_{m'n'} F_{m'm}$$

$$F_{nn'} \equiv \partial^2 F(\varphi) / \partial \varphi_n \partial \varphi_m$$

ここで $F(\varphi)$ は平衡系での Free energy で $F_{n,m}$ が正定値ゆえ D_{nm} も正定値である。

その他保存則のある時等いろいろな応用ができるが紙面の関係で割愛させて頂く。

詳しくは “Non-Equilibrium Thermodynamics and Its Corrections to Thermal Equilibrium”

R. Fukuda (Keio University preprint) をご参照下さい。

協力現象の統計力学的理論

— コヒーレント異常法とその応用 —

東大・理 鈴木 増 雄

§1. はじめに

自然現象は、多かれ少なかれ互に相互作用をしている多体系の協力現象である。それを一般的に扱う方法が存在するだろうか。もっとも簡単でよく用いられる方法は、平均場近似である。しかし、臨界視