

ブラウン運動論と量子力学 (VI)

佐賀大・理工・化学 竹 山 尚 賢

(2月23日受理)

§ 1. その意味し志向する運動像は？

不完全なるが故の統計的立場ではなく、完全にして固有の統計的・確率的主張を有する量子力学であることは論をまつまでもない。それ故に、それは運動する体系の ensemble を対象とし、さらに causality を無分散性に求めるとき、それが統計的であることの支えである統計演算子が causal たりうることは否定される。この意味での causal interpretation は幻想にすぎない。このような von Neumann の定理の主張に対し、Bohm が主張するように、分散まで制御してしまうような観測はありえず、分散を生ぜしめる“ゆらぎ”の原因は知りえず、もともと何もないのだとして進むのも、また、何かひつかかるものを感じる。

Langevin の基本的立場は、混沌の中にも力学的精神を貫こうとした点にあったのであろうし、Fluctuation-Dissipation Theorem に伺えるように、分散に対する原因力の導入であったととれる。

『力学的精神』を貶しむものとしての確率論ではなく、賦活し豊かにするものとしての stochastics もまた幻想であろうか？

Einstein のつぶやき「神々のサイコロ遊び云々」が気になりながらも、Planck がエントロピーのエネルギーに関する 2 次微係数の執拗なまでの追究から h を割り出し、Einstein 自身もまたサイコロ遊びの法則から光子の 2 重性を明るみに出した手法に、例えそこにマクロの中でという大義名分があるとしても、何か深い真理性があるのではないかと思われる。

Chebyshev の不等式が示すように、物理量 x がその平均値 $\langle x \rangle$ から任意の正数 ϵ (> 0) よりも大きくずれる確率は

$$P(|x - \langle x \rangle| > \epsilon) \leq \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{\epsilon^2}$$

により分散によって抑えられている。

竹山尚賢

可測集合を対象にして測度空間の中で確率空間をとって、確率密度 ρ の拡がりの方は確率論的に分散の幅の中で規則性をとらえよう。としても、これだけでは不備である。

時刻 t ，位置 $\vec{q}$ での集合密度 $\rho(\vec{q}, t)$ は，時間 τ の間の遷移確率 $W(\vec{q}'/\vec{q}, \tau)$ により，Chapman-Kolmogorov の式

$$\rho(\vec{q}, t+\tau) = \int d\vec{q}' \rho(\vec{q}', t) W(\vec{q}'/\vec{q}, \tau) \quad (1)$$

で結ばれている場合，拡散方程式

$$\partial \rho / \partial t = - \operatorname{div} (\vec{v}_d \rho), \quad (2)$$

$$\vec{v}_d = -D \operatorname{grad} \ln \rho \quad (2')$$

によって支配されることとなり，遷移確率は

$$W(\vec{q}'/\vec{q}, \tau) = \exp(\tau D \Delta) \times \delta(\vec{q} - \vec{q}') \quad (3)$$

で与えられる。

外場のポテンシャル $U(\vec{q})$ が存在する場合は (2') を次のようにとればよい。

$$\begin{aligned} \vec{v}_d &= -D \operatorname{grad} \ln \{ \rho \exp(U/kT) \} \\ &= -D \operatorname{grad} \ln \rho - (D/kT) \operatorname{grad} U \end{aligned} \quad (2'')$$

いま，純拡散速度として，これ迄通り，

$$\vec{u} = D \nabla \ln \rho \quad (4)$$

を導入し， ρ の時間変化の式を (2) にとるのでは，次式となるにすぎない。

$$\partial \vec{u} / \partial t = D \Delta \vec{u} + \nabla (\vec{u} \cdot \vec{u}) \quad (5)$$

(2), (2' or 2'') は Kolmogorov の前向き方程式であって，その時間は $0 \leq t < +\infty$ に限られる。この時間を二方向性の力学的時間と調和させることは許されない。確かに (2) も一つの連続の式であるが，時間反転に関する対称性はない。この対称性を備えている連続の式は

$$\partial \rho / \partial t = - \operatorname{div} (\vec{v} \rho), \quad (6)$$

$$\vec{v} = \nabla S / m \quad (6')$$

で、 $\vec{v}$ は力学的速度である。時間スケールを (6) のそれにとりかえて、(4) の時間変化の式

$$\partial \vec{u} / \partial t = - D \Delta \vec{v} - \nabla (\vec{v} \cdot \vec{u}) \quad (7)$$

が成立する。

問題の本質は、stochastics の時間反転に対する対称化（これを力学化とよぶことにする）と、stochastics の中から力学的速度に従って系統的に流れる流れ密度をいかにして浮き上げるといふ相互に関連した二つの問題に集約される。

Doob が指摘しているように、一方向の時間軸上で $q(t)$ が Markoffian であると、 $q(-t)$ もまた逆向きの Markoffian である。

さらに Kolmogorov が示していたように遷移確率が遷移前後の 2 時空点に関する限り、前向き及び後向きの拡散方程式が同等に成立するのであり、従来の物理の問題では前向きの式を Fokker-Planck の方程式とよんでいたことになる。裏返していえば後向きの Kolmogorov の式の活躍舞台が見出せずにいたことになる。ここに着目して stochastics の力学化を試みようというのが目的であった。

位置空間における Langevin の式

$$dq(t) = \vec{v}_{\text{drift}} dt + dQ(t) \quad (8)$$

$$dQ(t) = \sigma dx(t) \quad (8')$$

で微小増分 $dq(t)$ は平均 $\vec{v}_{\text{drift}} dt$ 、分散 $\sigma^2 dt$ の Gaussian をなし、ゆらぎ項を (8') のようにとるとき $x(t)$ が

$$\langle x(t_2) - x(t_1) \rangle = 0,$$

$$\langle \{x(t_2) - x(t_1)\}^2 \rangle \equiv |t_2 - t_1|,$$

竹山尚賢

すなわち、変分パラメータ1のブラウン運動をなすことになる。ここで自由拡散の場合、ドリフト速度 $\vec{v}_{\text{drift}} = 0$, $\sigma = \sigma(t)$ とすると,

$$q(t) - q(t_0) = \int_{t_0}^t \sigma(t') dx(t') \quad (9)$$

のように“Wiener 積分”の形に書かれる。

この簡単な場合は、 $q(t)$ が時間パラメータによる変数の変化を伴ったブラウン運動をなし、遷移確率は、次式で与えられる。

$$W(q_0, t_0 | q, t) = (2\pi\beta)^{-1/2} \times \int_{-\infty}^{(q-q_0)} \exp(-\lambda^2/2\beta) d\lambda, \quad (10)$$

$$\beta = \int_{t_0}^t \sigma(t')^2 dt'; \quad t_0 < t.$$

また、“拡散方程式”は次の2式となる。

前向き拡散方程式;

$$\partial W / \partial t = (\sigma(t)^2 / 2) \partial^2 W / \partial q^2, \quad (11 \cdot a)$$

後向き拡散方程式;

$$\partial W / \partial t_0 = -(\sigma(t_0)^2 / 2) \partial^2 W / \partial q_0^2. \quad (11 \cdot b)$$

ところで自由粒子の場合でさえ自由拡散に対応するのではなく、(量子過程を拡散過程としてみると)ドリフト速度が存在し、これを純拡散項に加えたとき、力学的速度が回復することを既にみた。マクロの観点からいえば、(2")で $U=0$ であるから、右辺第2項の $\vec{v}_{\text{drift}}$ も存在しえないのであるが、

これが問題の第2点であり、確率空間におけるブラウン運動に加えて力学空間を補わねばならぬ。両者は相互に独立たりえず、前述の力学化とも無関係ではありえない。

§ 2. 運動像の具体化と力学化

いま位相空間から超曲面を切り出し、この超曲面を状態とよぶことにする。

運動する系がこの状態に止まる限り，すなわち，超曲面上で断熱的に運動する限り，その運動は無分散に定まり，古典力学の支配する処となろう。ところがこの状態から別な状態に遷移し，超曲面上から“垂直方向”の空間に推移する運動のモードがある場合には，系の集合密度は拡散していくこととなり，状態の推移を位置座標の変化としてとらえるものとする，位置空間のみにおける拡散が問題となる。

超曲面外への運動を確率過程としてとらえようとする限り，曲面上における運動もまた確率論的な意味での力学過程ならざるをえない。運動系としての拡散子は，時間経過とともに運動の空間体積を増していくが，遷移が2時空点に関する非局所的運動である限り，その前後の時間，位置に対して対称的に進行していくであろう。

いま前向き拡散を考えると，その遷移確率は(3)であり， δ 関数に Fourier 積分を使って

$$\begin{aligned} W(\vec{q}'/\vec{q}, \tau) &= (2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3k \exp \{-\tau D k^2 + i \vec{k} \cdot (\vec{q} - \vec{q}')\} \\ &= (4\pi D \tau)^{-3/2} \exp \{-(\vec{q} - \vec{q}')^2 / 4 D \tau\} \end{aligned} \quad (12)$$

がえられる。これは，偏微分方程式

$$-2D \nabla \ln W = (\vec{q} - \vec{q}')/\tau = \Delta \vec{q}/\tau \quad (12')$$

と同等であり， W に対する微分変形演算子 $(-2D \nabla)$ は W に差分商の速度演算子 $(\Delta \vec{q}/\Delta t)$ を作用させることと等価であることを示す。系統的ドリフトが存在する場合には，これによる系統的変位の項 $\vec{v}^{(f)} \tau$ を差し引いて

$$\begin{aligned} -2D \nabla \ln W &= (\vec{q} - \vec{q}' - \vec{v}^{(f)} \tau)/\tau \\ &= \Delta \vec{q}/\tau - \vec{v}^{(f)} \end{aligned} \quad (12'')$$

となるだけである。要するに前向き過程に対しては， $0 \leq s \leq t < +\infty$ の時間パラメータ上で差分 $\vec{q}(t) - \vec{q}(s)$ が Gauss 分布をなし，共変量として

$$\begin{aligned} & \langle \{ \vec{q}(t) - \vec{q}(s) \} \{ \vec{q}(t') - \vec{q}(s') \} \rangle \\ & = 2D | [s, t] \cap [s', t'] | \end{aligned} \quad (13)$$

をとるのである。ここに $| \quad |$ は Lebesgue 測度。また、初期条件、 $\delta(\vec{q} - \vec{q}_0)$ の下で W と ρ の差異はない。

“系統的変位”の項は、拡散子の全変位の着目する状態への射影成分に当り、“ゆらぎの変位”の項は直交補空間（他のすべての状態）への射影成分に当る。Langevin 的観点に立って、前向き及び後向きの微小変位それぞれを恒等的に次のように分割する。

$$d\vec{q}(t) = \vec{v}^{(f)} dt + dQ(t), \quad (14.a)$$

$$d\vec{q}(t) = \vec{v}^{(b)} dt + dQ'(t) \quad (14.b)$$

ここで直交補空間に属するゆらぎ成分 $Q(t)$, $Q'(t)$ が“遷移”をもたらす拡散の変位に関連し、一方向性時間上での全変位速度は、それぞれ

$$\vec{v}_d^{(f)} = \vec{v}^{(f)} - D \nabla \ln \rho, \quad (15.a)$$

$$\vec{v}_d^{(b)} = \vec{v}^{(b)} + D \nabla \ln \rho \quad (15.b)$$

となる。

(14.a & b) で直交補空間に属する成分が登場したために、微分係数もまた確率収束の意味で定義せざるをえない。すなわち、任意の $\epsilon > 0$ に対し、

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} P \left[\left| \frac{\vec{q}(t+\Delta t) - \vec{q}(t)}{\Delta t} - D_f \vec{q}(t) \right| > \epsilon \right] \\ & \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (16.a)$$

によって $\vec{q}(t)$ の前向き時間微分 $D_f \vec{q}(t) = \vec{v}_d^{(f)}$ が定義される。後向き時間微分 $D_b \vec{q}(t)$ も同様であり

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} P \left[\left| \frac{\vec{q}(t) - \vec{q}(t-\Delta t)}{\Delta t} - D_b \vec{q}(t) \right| > \epsilon \right] \\ & \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (16.b)$$

により, $D_b \vec{q}(t) = \vec{v}^{(b)}$ が定義される。

この前向き及び後向きの平均時間微分演算子 D_f, D_b は, 位置座標について 2 次微分まで連続, 有界な任意関数に対して “生成作用素” として働き,

$$D_f = \partial / \partial t + \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla + D \Delta, \quad (17 \cdot a)$$

$$D_b = \partial / \partial t + \vec{v}^{(b)} \cdot \nabla - D \Delta \quad (17 \cdot b)$$

の演算子関係が成立する。

“拡散方程式” は, (15・a & b) に対する

$$\begin{aligned} \partial \rho / \partial t &= - \operatorname{div} (\vec{v}_d^{(\alpha)} \rho), \\ (\text{for } \alpha &= f, b) \end{aligned} \quad (18)$$

である。

ところで, $\vec{v}_d^{(\alpha)}$ を対称化すると,

$$\begin{aligned} \vec{v} &= (1/2) (\vec{v}_d^{(f)} + \vec{v}_d^{(b)}) \\ &= (1/2) (\vec{v}^{(f)} + \vec{v}^{(b)}) \end{aligned} \quad (19)$$

となり, “拡散項” が消え, (18) は対称化されて

$$\partial \rho / \partial t = - \operatorname{div} (\vec{v} \rho) \quad (20)$$

となる。直交補空間への拡散速度の成分が時間に関する対称化によって失なわれることは重要で, (20) は, 流れ系に対する断熱的運動を記述しており, 作用関数 S が存在する力学系に対しては, 正しく

$$\partial \rho / \partial t + \partial / \partial \vec{q} \{ (\vec{dq} / dt) \rho \} = 0, \quad (21 \cdot a)$$

$$\vec{v} = \vec{dq} / dt = \nabla S / m, \quad (21 \cdot b)$$

を意味するものと考えられる。このような意味である種の断熱定理の存在が予想され, 系の運動が分散を伴って拡っていく雲をまもっていても, その重心挙動は, 断熱的に超曲面上に束縛された運動となることを示すのであろう。ただ

竹山尚賢

し、現在の処、上述のことを合理化できる論理はないように思われる。しかしながら、それ程、常軌を逸した像ではないように思われるし、stochasticsの力学化にとって不可避な要請であることは確かである。時間の対称化が平均を伴った射影操作と類似の性質を示すことは興味深い。この点、マクロのE-S過程にそのモデルがある訳ではない。

§ 3. 系統的な前向き速度と後向き速度との関係

いま、 $\vec{q}$ に関して2回連続微分可能な関数 $f_1(\vec{q}, t)$, $f_2(\vec{q}, t)$ をとり

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle f_1(q, t) f_2(q, t) \rangle \\ \equiv \frac{d}{dt} \left[\int f_1(q, t) f_2(q, t) \rho(q, t) dq \right] \end{aligned}$$

を考えよう。 $\rho(\vec{q}, t)$ は集合密度関数。

時間間隔 Δt の閉区間 $[t_0, t_0 + \Delta t]$ を n 等分し分点系列

$$\begin{aligned} t_k = t_0 + k(\Delta t/n), \\ (k=0, 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (22')$$

をとり、まず次の関係が成立することを示す。

$$\begin{aligned} & \langle f_1(q, t_0 + \Delta t) f_2(q, t_0 + \Delta t) - f_1(q, t_0) f_2(q, t_0) \rangle \\ &= \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} dt \langle D_f f_1(q, t) \cdot f_2(q, t) + f_1(q, t) D_b f_2(q, t) \rangle \end{aligned} \quad (22)$$

ここで簡単化の為に、 $\vec{q}$ は q と書き、

$$f_j(q(t_k), t_k) = f_j(q, t_k)$$

と記した。

(22) の左辺

$$\begin{aligned} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{n-1} \langle f_1(q, t_{k+1}) f_2(q, t_k) - f_1(q, t_k) f_2(q, t_{k-1}) \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{n-1} \left\langle \frac{f_1(q, t_{k+1}) - f_1(q, t_k)}{(\Delta t/n)} \cdot \frac{f_2(q, t_k) + f_2(q, t_{k-1}))}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\{f_1(q, t_{k+1}) + f_1(q, t_k)\}}{2} \\
 & \times \frac{\{f_2(q, t_k) - f_2(q, t_{k-1})\}}{(\Delta t/n)} > \left(\frac{\Delta t}{n}\right) \\
 & = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^{n-1} \langle D_f f_1(q, t_k) \cdot f_2(q, t_k) \\
 & \quad + f_1(q, t_k) \cdot D_b f_2(q, t_k) \rangle > (\Delta t/n) \\
 & = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} \langle D_f f_1(q, t) \cdot f_2(q, t) \\
 & \quad + f_1(q, t) \cdot D_b f_2(q, t) \rangle dt
 \end{aligned}$$

= (22) の右辺。

従って,

$$\left(\frac{d}{dt}\right) \langle f_1 f_2 \rangle = \langle D_f f_1 \cdot f_2 \rangle + \langle f_1 \cdot D_b f_2 \rangle, \quad (23 \cdot a)$$

あるいは積分形で

$$\begin{aligned}
 \left[\langle f_1 f_2 \rangle \right]_{-\infty}^{+\infty} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \langle D_f f_1 \cdot f_2 \rangle dt \\
 &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f_1 \cdot D_b f_2 \rangle dt. \quad (23 \cdot b)
 \end{aligned}$$

の公式がえられる。ここで f_1, f_2 が時間の $+\infty, -\infty$ で消える有界集合をなすものとする、完全に積分された (23・b) の左辺は零となるから、結局次式となる。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle D_f f_1 \cdot f_2 \rangle dt = - \int_{-\infty}^{+\infty} \langle f_1 \cdot D_b f_2 \rangle dt \quad (24)$$

ここに、 f_i は、 t がずれ、それにつれて $\vec{q}(t)$ もずれるのであるから、 D_f, D_b は、それぞれ (17・a, b) である。(24) に基いて、 D_f と D_b との相互関係を求めて、前向き及び後向きの拡散定数が等しいこと、さらに

$$\vec{v}^{(f)} = \vec{v}^{(b)} + 2 D \nabla \ln \rho \quad (25)$$

の関係を結論したのであった。すなわち、生成作用素 D_f の随伴（もしくは転置）作用素 D_f^+ — ただし D_f は定係数の偏微分作用素には限られない — を導入すると、定義により、(24) の左辺から、

$$(D_f f_1, f_2 \rho) = (f_1, D_f^+ f_2 \rho), \quad (24 \cdot a)$$

ここで右辺を

$$= (\rho f_1, \rho^{-1} D_f^+ \rho f_2) = (\rho f_1, \hat{D}_f f_2)$$

と書き直して、(24) の右辺と等置する。

$$- (\rho f_1, D_b f_2) = (\rho f_1, \hat{D}_f f_2),$$

演算子関係として

$$- D_b = \hat{D}_f = \rho^{-1} D_f^+ \rho \quad (24 \cdot b)$$

が成立する。この右辺は

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

によって計算して、 $-\partial \ln \rho / \partial t$ に拡散方程式からの $\{\operatorname{div} \vec{v}^{(f)} + \vec{v}^{(f)} \times \nabla \ln \rho - D \rho^{-1} \Delta \rho\}$ を使って

$$\begin{aligned} \rho^{-1} D_f^+ \rho \cdot &= - \partial / \partial t - \vec{v}^{(f)} \cdot \nabla \\ &+ 2 D \nabla \ln \rho \cdot \nabla + D \Delta \end{aligned}$$

の演算子となり、(17・b) 及び (24・b) により、(25) の関係がえられた。

(19) と (25) とをまとめると、次式となる。

$$\vec{v} = (1/2) (\vec{v}^{(f)} + \vec{v}^{(b)}), \quad (26 \cdot a)$$

$$\vec{u} = D \nabla \ln \rho = (1/2) (\vec{v}^{(f)} - \vec{v}^{(b)}). \quad (26 \cdot b)$$

ところで、この関係は (15・a & b) に戻ると、

$$\begin{aligned} \vec{v}_d^{(f)} &= \vec{v}_d^{(b)} = \vec{v}, \\ (\vec{v}^{(f)} &\neq \vec{v}^{(b)}) \end{aligned} \quad (27)$$

であり, (18) は $\alpha = f \& b$ の両式ともに, (20) の連続の式に等しいこととなる。

このことは最初から問題であったし, 自由粒子の場合には, その波群に対する波動関数について実際にチェックされていた事柄である。

Stochastics としては, (25) の関係を確認してから始めて言えたことである。

(7) は (26・a & b) に基いて成立する関係である。(26・a) は非常に強い関係であることがわかる。

まず (26・b) に対して

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} &= D \nabla \left(\frac{\partial}{\partial t} \right) \ln \rho = -D \nabla \rho^{-1} \operatorname{div} (\vec{v} \rho) \\ &= -D \nabla (\operatorname{div} \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla \ln \rho) \\ &= -D \Delta \vec{v} - \nabla (\vec{v} \cdot \vec{u}) \end{aligned} \quad (28 \cdot a)$$

が成立し, 加速度ベクトルを対称和の形

$$\vec{a} \equiv \left(\frac{1}{2} \right) (D_f \vec{v}^{(b)} + D_b \vec{v}^{(f)})$$

に定義しておいて, 右辺に (17・a & b) を用いて変形し, いま一つの基礎式

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \vec{a} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} - \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} + D \Delta \vec{u} \quad (28 \cdot b)$$

が成立する。

量子力学過程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \Delta \psi + U\psi \quad (29)$$

に対し,

$$\psi = \exp\left(\frac{R}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) \quad (29 \cdot a)$$

とおき,

竹山尚賢

$$\vec{v} \equiv \nabla S / m, \quad \vec{u} \equiv \nabla R / m \quad (29 \cdot b)$$

を導入してえられる連立式

$$\partial \vec{u} / \partial t = - (\hbar / 2m) \Delta \vec{v} - \nabla (\vec{v} \cdot \vec{u}), \quad (30 \cdot a)$$

$$\partial \vec{v} / \partial t = - \nabla U / m + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} - \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} + (\hbar / 2m) \Delta \vec{u} \quad (30 \cdot b)$$

とを比較して、対応関係

$$D = \hbar / 2m \quad (31)$$

および Newton の運動方程式

$$m \vec{a} = - \nabla U \quad (32)$$

のもとで、

$$\left. \begin{aligned} (28 \cdot a) &\longleftrightarrow (30 \cdot a) \\ (28 \cdot b) &\longleftrightarrow (30 \cdot b) \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

を結論していたのである。

§ 3. 考 察

いま、一つの部分空間 $\mathcal{M}$ への射影演算子 P を導入すると、 $(1 - P)$ はその直交補空間 $\mathcal{M}^\perp$ への射影演算子であるが、 $\vec{q}$ 空間は恒等的に

$$\vec{q} = P \vec{q} + (1 - P) \vec{q} \quad (34)$$

と分解される。これに左から時間微分演算子 $d/dt \equiv D_t$ を作用させて

$$D_t \vec{q} = D_t P \vec{q} + D_t (1 - P) \vec{q}, \quad (34 \cdot a)$$

左辺は確率 1 で微分可能であり、従って

$$D_t \vec{q} = D_f \vec{q} = D_b \vec{q} = \vec{v} \quad (34 \cdot b)$$

である。それに対して

$$D_f P \vec{q} \neq D_b P \vec{q} \quad (34 \cdot c)$$

$$(\vec{v}^{(f)} \neq \vec{v}^{(b)})$$

が示されるならば、 $\vec{v}$ は前向き過程と後向き過程とに分岐し、次式が成立する。

$$\vec{v} = \begin{cases} D_f P \vec{q} + D_f (1-P) \vec{q}, & (35 \cdot a) \\ D_b P \vec{q} + D_b (1-P) \vec{q}. & (35 \cdot b) \end{cases}$$

そこで、(34・c)の意味を考えてみよう。時間微分演算子自体に時間に関する向きの判定機能があるのではなく P 操作の機能としてそれがなされるものと考えられる。

$$P = P_{(\Delta t)} \text{ or } P_{(-\Delta t)}, (\Delta t \geq 0)$$

$$P_{(\pm \tau)} \vec{q}(t) = ((\vec{q}(t \pm \tau), \vec{q}(t))) \vec{q}(t \pm \tau) \\ \times ((\vec{q}(t \pm \tau), \vec{q}(t \pm \tau)))^{-1} (\tau \geq 0) \quad (36)$$

ここに内積として、

$$((\vec{q}(t \pm \tau), \vec{q}(t))) = \int dq \rho(q, t) \{ \vec{q}(t + \tau) \vec{q}(t) \}, \quad (36 \cdot a)$$

を定義した。これによって、

$$P_{(\pm 0)} \vec{q}(t) = \delta \cdot \vec{q}(t)$$

であるから (δ は単位テンソル) ,

$$\vec{v}^{(f)} \equiv D_f P \vec{q}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta t)^{-1} \{ E(t + \Delta t) \\ \times \vec{q}(t + \Delta t) - \delta \cdot \vec{q}(t) \}, \quad (37 \cdot a)$$

$$\vec{v}^{(b)} \equiv D_b P \vec{q}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\Delta t)^{-1} \{ \delta \cdot \vec{q}(t) \\ - E(t - \Delta t) \vec{q}(t - \Delta t) \}. \quad (37 \cdot b)$$

ただし、

$$E(s) = ((\vec{q}(s), \vec{q}(s)))^{-1} \cdot ((\vec{q}(s), \vec{q}(t))), \quad (37 \cdot c)$$

によって、それぞれ $\vec{v}^{(f)}$, $\vec{v}^{(b)}$ が定義される。(34・c)は、我々の足場には“力学”はなく、従って一般に

$$E(t+\Delta t) \neq E(t-\Delta t) \quad (37 \cdot d)$$

としておけばよい。(35・a & b)において, $(\vec{v} - \vec{v}^{(f)}) \Delta t$, $(\vec{v} - \vec{v}^{(b)}) \Delta t$ がそれぞれ前向き, 後向き過程を形成し, 有限な2次モーメントをもつものとして, Stochastics の立場で $\vec{q}(t)$ から $\mathcal{M}$ 部分空間への“垂線”の成分を処理しようというわけである。一般的に言えば,

$$\left| \left(\frac{\Delta \vec{q}}{\Delta t} \right) \rho(\vec{q}, t) \pm \frac{\langle \Delta \vec{q}^2 \rangle}{2 \Delta t} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} \rho(\vec{q}, t) \right|^2 \geq 0$$

(+ ; 前向き, - ; 後向き)

は自明の関係であるが, これを極小, 従って等号で見積ることにして, $\mathcal{M}$ 部分空間への垂線を,

$$\begin{aligned} \Delta \vec{q}^{(f)} &= (\vec{v} - \vec{v}^{(f)}) \Delta t \\ &= -\{D \nabla \ln \rho\} \Delta t, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta \vec{q}^{(b)} &= (\vec{v} - \vec{v}^{(b)}) \Delta t \\ &= +\{D \nabla \ln \rho\} \Delta t \end{aligned}$$

($D = \langle \Delta q^2 \rangle / 2 \Delta t$) ととり, これらが (15・a & b) にそれぞれ対応する。

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

$$\vec{v} = \vec{v}^{(b)} + D \nabla \ln \rho$$

が, (27) とともに成立していることがわかる。すなわち,

$$\vec{v} = \vec{v}^{(f)} - \vec{u} = \vec{v}^{(b)} + \vec{u}$$

が示される。かくて, (25),

$$\vec{v}^{(f)} = \vec{v}^{(b)} + 2\vec{u}$$

もまた明らかである。予測の問題としては, $\vec{v}$ の最良予測量として $\vec{v}^{(f)}$, $\vec{v}^{(b)}$ が存在していることになる。

以上により，位置空間におけるブラウン運動論と量子力学との関係，とくにその物理像が，かなりはっきりしてきたものと考えたい。

(文献は本シリーズ I に記しましたので，省かせていただきます。途中で D. Bohm, 村田訳, 「現代物理学における因果性と偶然性」, 東京図書, が出ました。)

物性研究 2 月号 (1970) 掲載の「液晶の理論」(小林謙二) に関する付加訂正

1 体分布関数 f は以下のように purely orientational order parameter η を含む項をつけ加えて

$$\lambda \cdot f = \exp \{ 2 (\alpha_1 \cdot \sigma + \beta_1 \cdot \tau \cdot P_2 (\cos \theta)) (\cos 2\pi x + \cos 2\pi y + \cos 2\pi z) + \beta_0 \cdot \eta \cdot P_2 (\cos \theta) \}.$$

と訂正され，従って

$$\lambda = \int_0^1 dz [e^{\beta_0 \cdot \eta \cdot P_2 (z)} \cdot I_0^3 (2\alpha_1 \cdot \sigma + 2\beta_1 \cdot \tau \cdot P_2 (z))]$$

となる。そこでの τ は orientational と translational な order の mix したものを表わしている。また，dipole moment の影響も $P_1(\cos \theta)$ の項をつけ加えれば容易に議論できる。