

## 1. 講義ノート

# 「最近の統計力学」

久保 亮 五

統計力学が micro なものから macro な観測への橋渡しをするものであるとすればそれが役割をはたす範囲は広い。

統計力学の歴史は Boltzmann, Maxwell 以来既に 100 年になるが、第二次大戦前後までは熱平衡状態の統計力学は Gibbs のわく組みの上になまのつて量子統計力学が出来上り (Tolman, Fowler, Fowler-Guggenheim の教科書にみられる様に) それとは別の流れとして gas kinetics が存在するという状況であつた。そして平衡状態の統計力学と同程度に一般性をもつ非平衡状態の統計力学をつくり上げることの必要性が意識されていた。

戦後、多体問題の流れとして Plasma 理論等を契機として field theoretical な方法の応用がさかんになつてきたが、これと統計力学の流れとが合わさつたのは 10 年程前のことになる。

統計力学の基礎付けという問題になると依然として未解決の点が多い。

以下では現在どの様なことが問題になつているかと概観してみる。

## I Equilibrium の統計力学

### (1) Ergode theory

ergode theory というのは、ergodicity, 即ち time average = ensemble average を証明することである。数学的な ergode theory は von Neumann, Birkoff, Koopman, Halmos などにより展開された Birkoff によると ergodicity は metrical indecomposability と equivalent である。metrical indecomposability とは phase space が 2 つ以上の invariant subspace に分けられないという事である。数学的な ergode theory は measure を conserve する一般的な運動

についてこれを証明するのであるが、それは余りに一般的すぎて現状では物理に役立たない。上の metrical indecomposability についても実際の力学系についてこれを証明することは困難である。(ソ連のシーナイは最近 rigid sphere gas の system が metrically in decomposable である事を証明した由である。)

所で我々が観測する physical quantity やとり扱う system は極めて特殊なものに限られている。観測する量についていえばそれは多くの場合 sum function  $\sum_i f(p_i, x_i)$ ,  $\sum_{ij} f(p_i x_i, p_j x_j)$  であり、また system は普通同種の粒子の集まりであつて対称性が高い。この様な特殊性の上に立つた ergode theorem の証明が必要である。

例えば Khinchin は  $\langle G(0) G(t) \rangle$  が漸近的に decay する時には  $G$  は ergode theorem を満す事を証明している。

また ergode theorem を証明しようとするれば平衡状態の性質だけでなく平衡状態への接近のはやさも問題になるわけだが、これは非平衡状態の統計力学と密接に関係している。

現状のまとめとして Copenhagen の会議における Farquhar の言葉を引用しよう。「数学的 ergode theory は physical solution としては不十分である。限定した physical system について ergodicity を示す事が必要である。興味ある結果がえられてはいるが物理としては不満足である」

例えば一つの問題として classical と quantal と本質的な違いがあるのかないのか、あるとすればどう違うのかという事に対する答がほしい。(参考書: I. E. Farquhar, Ergodic Theory in Statistical Mechanics, Interscience 1964)

## (2) Existence of thermodynamic limit

### Equivalence of different ensembles

existence of thermodynamic limit とは  $N/V = n = \text{finite}$ ,  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$  という limit が存在するかという問題である。non interacting system では明らかであるが、相互作用のあるとき手放しではこれが存在しない事は確かである。最近二体力、classical に限つて研究が進んでいる。

## 講義ノート I

(Mazur, Ruelle, Fisher 等たとえば D. Ruelle, Lectures in Theoretical Physics Univ. of Colorado vol VI, 1963, pp 93- を見よ) この limit の存在のための十分条件として potential に次の条件がつけられる。①底があること。(stability) ②interaction が適当に離れたところでは positiveにならない (strong tempering) 或いは positive になつてもよいが  $\frac{1}{r^{3+\epsilon}}$  ( $\epsilon$  は小さい正の数) 以下であること (weak tempering)。

例えば Fisher は

$$i) \text{ potential } \varphi(r) \geq \frac{D_1}{r^{3+\epsilon}} \quad (r \rightarrow 0)$$

$$ii) |\varphi| < \frac{D_2}{r^{3+\epsilon}} \quad (r \rightarrow \infty)$$

$$iii) \varphi(r) \geq -\omega_0 \quad \text{が}$$

満されているとき thermodynamic limit が存在することを証明している。limit の存在のみでなく limit と微分演算の交換が可能かどうかという更に難しい問題もある。

equivalence of different ensembles とは例えば microcanonical ensemble と canonical ensemble が equivalent になるための条件は何かという問題がある。phase change の場合にはこの問題は簡単でない。microcanonical ensemble では energy の fluctuation は許されないが、canonical ensemble では phase change の場合 fluctuation が大きくなる。

また thermodynamic limit の存在に関係して、極限をとらず最初から  $N = \infty$  の system を扱おうという試みがある。(Verboven, Winnink) Araki-Wood の field theory の方法を応用したものだが、どのような意味があるかは現在のところわからない。

### (3) Convergence of expansion

これは virial 展開、fugacity 展開等の収斂性の問題である。fugacity 展開については、パラメータが小さいときは収斂することが証明出来るが、発散の性質を数学的に吟味することは容易ではない。Ising, Hershberg モデルでは収斂性或いは singularity の性質は Padé approximant の方法などで相当よくしらべてはいるが厳密な証明は極めて限られた場合だけである。

(4) Liquids.

Yvon-Born-Green, Kirkwood などにより分布函数に対する積分方程式の hierarchy をたててとく事が行われてきた。その近似解として3体の分布函数を2体分布函数の積で近似すれば (superposition approximation) 2体分布函数についてとじた積分方程式が得られる。またこれとは多少ちがった近似として hypernetted chain, Percus-Yevick eq などがある。最近には有限個の粒子系においてモンテカルロ法等で数値的に radial distribution function を計算しているが、これは上のような近似法の精度をしらべるのに役立っている。(参考書: S. A. Rice and P. Gray, The Statistical Mechanics of Simple Liquids, Interscience, 1965)

(5) Long range interaction : plasma

high density limit の様な極限に対しては厳密解が知られているがそうでない場合、classical, quantal共に厳密な解はえられていない。例えば  $H^+e$  の混合系で shielding と bound state の問題も答がえられていない。

(6) Polymer

生物高分子に関係して新たに脚光をあびてきた。古くからの難問としてはたとえば excluded volume のような問題があるが、これも最近かなりの発展を見せている (たとえば M. E. Fisher, J. Chem. Phys. 44 616 (1966) を見よ)。

(7) Phase change

近似的な話は色々出来るが厳密に解くことは困難である。近年実験の精度が上って相転移点近くの singularity がかなり詳しく調べられるようになってきた。

厳密解のわかっているものには次のものがある。

(1) 2次元 Ising model

比熱、magnetization の singularity  
(susceptibility については不明)

講義ノート 1 .

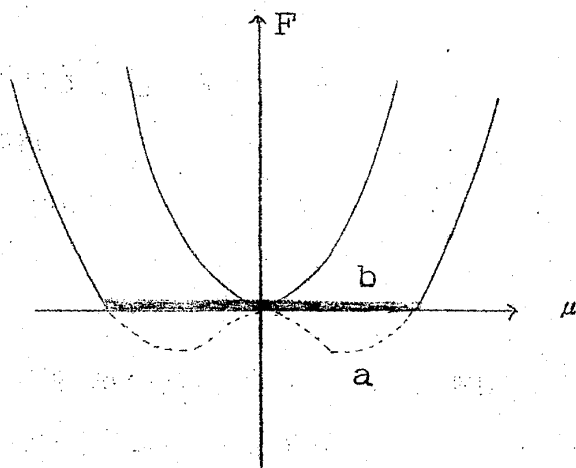
(2) van der Waals gas の model. (long range attraction は無限大の range, 無限小の強さの極限をとる。結晶統計などの他の例でもこのような理想化をすれば最密解は容易に得られるが、Uhlenbeck, Kac, Hemmer の van der Waals gas はそれらよりはずっと複雑である。)

phase change の singularity は理論、実験とも一つの中心問題であるが、熱力学的函数の singularity も実は dynamical な量の singularity と密接な関係にあることに注意しておきたい。

二次の相転移については Landau の現象論である。

$$F(M, T) = A(T) + B(T)M^2 + C(T)M^4 + \dots$$

実験からえられている singularity は上の展開からえられる結論とは合っていない。今迄知られている singularity と上の展開との関係がどうなっているのか調べられていない。(例えば Onsager の解と上の展開との関係すら知られていない。)



更に  $F$  と  $M$  の関係は free energy を具体的に計算する方法に依存する。homogeneity その他の強制条件をおくと a の様になるが、そうでないときは domain が出来て b の様になるであろう。大きい系の極限で homogeneity をどう数学的に表現するかはむづかしい。

○補足：(185頁終より7行目へ挿入) —— 断熱定理について

統計力学及び多体問題の重要な基礎であるが、多体系一般についての証明はない。

classical では ergode theory と断熱定理とは同じだと思う。量子力学での断熱定理と ergode theory の関係は例えば Van Hove の理論の中心にも含まれてはいるが充分明らかではない。

## II Non-equilibrium

非平衡状態のとり扱いとしては古典論での典型として気体論があつた。ここでは Boltzmann equation をたててそれを解く事が行なわれてきた。しかし Boltzmann equation には成立の限界がある。それは① 2体衝突に限っているがそれは果して許されるか。② 考えている時間に限界がある。という様な点である。

成立の限界を考慮しつつ Boltzmann equation を導くことは Bogoliubov によりなされ、それに基いて modern な gas theory が展開される様になった。また density matrix の diagonal element に対する master equation (Pauli equation) を導いたものとして van Hove, Prigogine らの仕事がある。van Hove の理論は interaction が diagonal singularity という性質をもつとき適当な time scale で master eq がえられることを示したものである。Prigogine とのちがいは von Hove が  $e^{iHt}$  を扱い Prigogine が  $e^{iH^*t}$  を扱ったという点にある。これらの derivation では前の ergode theory で直面したことが具体的に問題になつている。即ち derivation の条件として 1) どの様な system を扱うか 2) どの様な量を observe するか 3) 考える time range (or frequency range) は何か、が問題になる。1)~3) は昔の言葉でいうと coarse graining ということに関係している。そして 2), 3) は必然的に projection という操作を伴うのである。Liouville equation に対し observe する量に対応した projection をほどこす。例えば sumfunction を observe すると、すると projection は一体あるいは 2 体の density matrix への projection ということになる。この様に projection により information の一部を消すために stochastic equation がえられることになる。

linear response theory の基礎的な定理として fluctuation-dissipation theorem (広義では admittance と fluctuation の間の一般的関係のことである。)が存在する。この定理は多体問題の一般論と密接な関係にある。たとえばいわゆる dielectric formula はその一つの現れである。dielectric formula によれば equilibrium の性質は dynamical respo-

## 講義ノート 1 .

nceがわかればわかるという仕組みになっているが、これはpartition function から計算するのとはまた別な計算方式である。近頃の問題の一つはtransport の量のクラスター展開に関する発散である。参考: A.H.Kritz G.Sandri Physics Today 19 No. 9, 57 (1966) Bogoliubov 理論で示されたように2体衝突、3体衝突と<sup>※</sup>実はその展開はうまくゆかない。これはdiffusion constantや粘性係数のdensity 展開にlog発散の項が現われることから問題になつてきた。もつと簡単な例として2次元でrandomに分布したdisk で粒子が散乱されるという場合 (Lorentzガス)  $m$ にもdisk のdensity についてやはり同種の発散があるといわれている。

熱平衡状態ではdensity についての展開には問題がないがtransport coefficientで発散が出るというこの問題については色々と検討の余地がある様に思う。(例えばpressure broadening のような動的な問題では展開は可能だと思う。)

統計力学、多体問題は形式的にも内容的にもscattering theory と関係が深い。その一つの発展はBrueckner 理論であつた。しかし最近は原子核でこれに代るものとしてseparation method などというものが用いられている由である。これは力をlong range partとshort range partに分けるということのようであるが、そのような方法はliquidで用いられてきた。long range partはsoftであり、絶えず弱い力が汎山作用しているとしてBrownian motion 的にとり扱い、short range partはhard core 的なcollision を与えると考えてとり扱う。この方法に従つてtransport eq.をたてliquidのtransport coefficientについてreasonable な結果がえられている。(Rice-Allcot)

次にBrownian motion についてふれる。

Mori はdynamical eq. からprojection によりgeneralized Langevin eq.と導いた。この方法とGreen 関数の方法とはどのような関係にあるのだろうか。これは一つの問題である。更にMori はrelaxation function を一般的に連分数に書く方法を示した

\*) Boltzman eq. を形式的に拡張することは可能であるが、

$$\frac{A_0}{i(\omega - \Omega_1) + \frac{A_1}{i(\omega - \Omega_2) + \frac{A_2}{\dots}}}$$

これらの収斂性はどうかっているのでしょうか。一般に sum rule expansion (moment exp) の収斂性については漸近展開と私は考えている。M. Dupuis は最近 moment expansion の収斂性と連分数の収斂性の関係を調べているが連分数の収斂性について知りたいと思う。

Brownian motion theory の別な aspect として nonlinear な場合、又は非平衡の定常な場合への拡張は重要であろう。laser, spin 系などでは nonlinear の問題がクローズアップされている。このような場合にも fluctuation-dissipation theorem のある拡張が可能であり、それがあある条件を与える筈であるが、これについては系統的な研究はまだあまりないと思う。最後に critical phenomena に関しては熱平衡量の singularity と dynamical quantity の singularity の間の関係がもつと追求されるべきであると思う。

詳しい reference をつける予定であつたが残念ながら時間の関係で不可能であつた。(久保)

(文責・斬波)

(詳しい reference は、2~3 号先の「物性研究」に掲載の予定です。——編集部註)