

2. Stochastic Models of Intermediate State Interaction in Second Order Optical Processes
I. Stationary Response T.Takagahara, E.Hanamura and R.Kubo, to be submitted to J. Phys. Soc. Japan.
3. Stochastic Models of Intermediate State Interaction in Second Order Optical Processes
II. Transient Response T.Takagahara, E.Hanamura and R.Kubo, to be submitted to J. Phys. Soc. Japan.
4. Theory of Light Scattering in a Localized Electron-Phonon System I. Stationary Response T.Takagahara, E.Hanamura and R.Kubo, to be submitted to J. Phys. Soc. Japan.
5. Theory of Light Scattering in a Localized Electron-Phonon System II. Transient Response T.Takagahara, E.Hanamura and R.Kubo, to be submitted to J. Phys. Soc. Japan.

Bogoliubov 理論とキュムラントの手法 による運動方程式の導出

湘北大・電子 落 合 萌

先きの報告¹⁾では, Siegert²⁾による master equation をキュムラントの手法により書き換え, 久保氏ら³⁾の与えた, system size expansion の助けを借りて Boltzmann 方程式およびゆらぎの分散の満すべき運動方程式を求めた。さらに, マルコフ過程の制限を取り除くことによって, drift term のある Boltzmann 方程式を導いた。ここにおいてみられたように, ゆらぎや運動方程式を論ずる際にキュムラントによる方法が, その物理的意味を把握する上に有効な場合が多い。このとき, drift term のある Boltzmann 方程式を導くにあたっては, キュムラントの母関数を見付け出し, それの満す運動方程式を必要とした。これにより, BBGKY 方程式に等価なキュムラントの満す方程式を導いたのだが, これを解くにあたり, Bogoliubov の分布関数を借りてきて, キュムラントとの対応

をつけた。

この報告は、Bogoliubov の統計力学における運動論⁴⁾をキュムラントの方法で組織的に組み立て直してみたもので、Liouville 方程式を出発点として、一貫してキュムラントを取り扱うことにより、Boltzmann 方程式、Vlasov 方程式を導出したものである。

Bogoliubov はモーメントの母関数を用いて、s 体分布関数の従う BBGKY 方程式を求めることから始めているが、いま、これをキュムラントの母関数を見付け出すことにより s 次のキュムラントの満す BBGKY 方程式に等価な方程式をたてることから始める。つぎに、キュムラントに Bogoliubov assumption を適用し、Bogoliubov のいう ϵ 展開、 $1/v$ 展開を行い、境界条件と因果律を導入することにより、1 次のキュムラントの満す運動方程式として Vlasov 方程式と Boltzmann 方程式を得ることができる。

N 個の粒子から成る、体積 V の古典気体を考える。 μ -空間における j-番目の粒子の座標を $\mathbf{x}_j \equiv (\mathbf{q}_j, \mathbf{p}_j)$ とする。 $f(\mathbf{x}) \equiv \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j)$ で 1 体分布を、 $\langle \dots \rangle$ でアンサンブル平均を書けば、 $\xi(\mathbf{x})$ をパラメーターとしてキュムラントの母関数 K は

$$K[i\xi; t] = \ell_n \left\langle \exp \left\{ \frac{V}{N} \int i\xi(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\} \right\rangle$$

と書ける。Liouville 方程式から K に対する運動方程式が導びかれ、これから s 次のキュムラント $\lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t)$ の従う鎖方程式として

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t)}{\partial t} &= \sum_{i=1}^s \left\{ \frac{\partial \phi_e(\mathbf{q}_i)}{\partial \mathbf{q}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_i} - \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}_i} \right\} \lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t) \\ &= \sum_{i=1}^s \frac{N}{V} \int d\mathbf{x} \frac{\partial \varphi(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}|)}{\partial \mathbf{q}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \left\{ \sum_{j=0}^{s-1} \sum_{k(\neq i) \in s} \lambda_{s-1+j}(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}_k\}_j) \right. \\ &\quad \left. \lambda_{s-j}(\mathbf{x}_i, \{\mathbf{x}_\ell\}_{s-1-j}) \right. \\ &\quad \left. + \lambda_{s+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t) \right\}, \quad s = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (1)$$

が得られる。

鎖方程式の解の中に 1 次のキュムラント λ_1 で完全に決まるものが含まれているとすれば λ_s の時間変化が λ_1 の時間変化で決まるような解 $\lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; t) = \lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; \lambda_1(t))$ があるはずで、このとき λ_1 の時間変化は

$$\frac{\partial \lambda_1(\mathbf{x}; t)}{\partial t} = A(\mathbf{x}; \lambda_1(t)) \quad , \quad (2)$$

と書けねばならない。この λ_s および A は (1) を満しておらねばならないし、(2) は因果律に従うものでなければならない。ここでは、この因果律と境界条件を次の形で導入する。

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \left\{ \lambda_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s; \mathcal{U}_{-\tau}^{(1)} \lambda_1) - v^{s-1} \prod_{j=2}^s \mathcal{U}_{-\tau}^{(1)} \lambda_1(\mathbf{x}_j; t) \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j) \right\} \rightarrow 0 ,$$

$\mathcal{U}_{-\tau}^{(s)}$ は s 体問題で分子間力を無視して τ 時間その運動を過去にさかのぼったときの状態を与える演算子である。これらを用いて λ_s, A の汎関数形を定めるには、粒子間力の性質により計算の手法を選ばねばならない。ここでは、希薄気体を取りあげ、粒子間力が弱い場合と短距離力の場合とを考える。前者は Bogoliubov 理論における ε 展開に、後者は $1/v$ 展開 ($v \equiv \frac{V}{N}$) に相当するもので、 F_s, A はそれぞれ ε あるいは $1/v$ に展開され、低次のものから次々にその汎関数形が定められる。

ε 展開では Vlasov 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \lambda_1(\mathbf{x}; t) = \frac{\partial \Phi(\mathbf{q}; t)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial \lambda_1(\mathbf{x}; t)}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial \lambda_1(\mathbf{x}; t)}{\partial \mathbf{q}}$$

$$\rho(\mathbf{q}; t) = \int_{\mathbf{p}} \lambda_1(\mathbf{x}; t) d\mathbf{p}, \quad \Phi(\mathbf{q}; t) = \frac{1}{v} \int_{\mathbf{q}'} \varphi(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \rho(\mathbf{q}'; t) d\mathbf{q}'$$

が得られ、 $1/v$ 展開では Boltzmann 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} \lambda_1(\mathbf{x}; t) = - \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \lambda_1(\mathbf{x}; t)$$

$$+ \frac{1}{v} \int [\varphi(|\mathbf{q} - \mathbf{q}_1|); \lambda_1(\mathbf{P}^{(2)}, \mathbf{Q}^{(2)}; t) \lambda_1(\mathbf{P}_1^{(2)}, \mathbf{Q}_1^{(2)}; t)] d\mathbf{x}_1$$

が得られる。

求められた結果は、Bogoliubov によって得られた運動方程式と同じ形であり、これは期待されたところである。手法を変えたことにより、運動方程式がとりわけ簡単に得られ

Bogoliubov 理論とキュムラントの手法による運動方程式の導出
たわけではないが、s 次のキュムラントに対する鎖方程式の具体的な形を与えたこと
と、キュムラントの方法に対して導入すべき因果律と境界条件を定めたことはキュムラ
ントで運動論を論ずる際に何らかの役に立つことと思われる。

参 考 文 献

- 1) 橋爪夏樹, 落合 萌, 物性研究 25 (1966) 320
- 2) A. Siegert, Phys. Rev. 76 (1949) 1708
- 3) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Stat. Phys. 9 (1973) 51
- 4) N. N. Bogoliubov, *Problemy Dinamicheskoi Teorii v Statisticheskoi Fiske (Problems of a Dynamical Theory in Statistical Physics)* (Moscow, 1946) (in Russian)

A Generalized Stochastic Theory of Nonequilibrium Systems

お茶の水大・理 柴 田 文 明・橋 爪 夏 樹
東大・理 高 橋 慶 紀

i) 非平衡系を扱う方法論として有効なものの一つに減衰理論がある。これは通常の
Liouville 方程式

$$\dot{W}(t) = -iLW(t), \quad (1)$$

に射影演算子 $\mathcal{P}$ をほどこして必要な情報のみを抜き出すという操作を行うことに対応
する。その結果は,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\dot{W}(t) = & -i\mathcal{P}L\mathcal{P}W(t) - \int_0^t d\tau \mathcal{P}L e^{-iQL\tau} Q_L \mathcal{P}W(t-\tau) \\ & - i\mathcal{P}L e^{-iQL\tau} Q_W(0), \end{aligned} \quad (2)$$

というよく知られた Non-Markoff な式となる。