

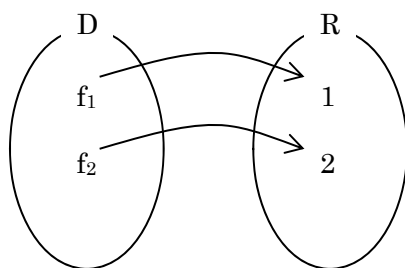
補遺

A1. 汎関数微分(Functional Differentiation)

(1) 汎関数

汎関数とは関数空間 D から数空間 R への写像 Γ を表す。

例 $\Gamma[f] = \int_{-1}^1 f(x) dx$

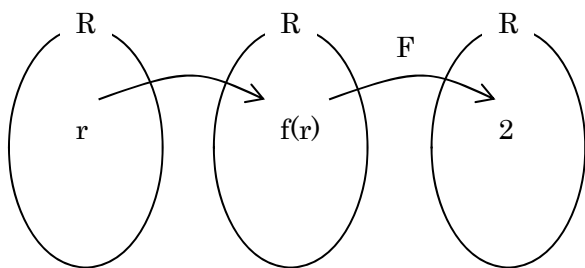


以下取り扱う汎関数は次の形をもつ。

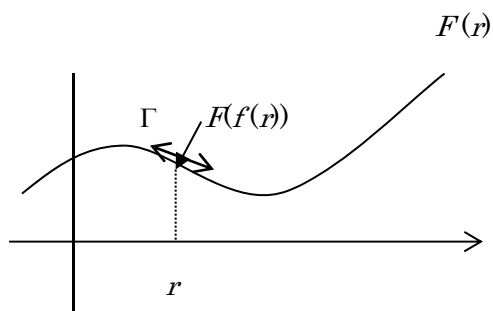
$$\Gamma[f] = \int_D F(f(\mathbf{r}); \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{A1.1})$$

ここで $F(f(\mathbf{r}); \mathbf{r})$ を母関数とよぶ。

注意: $F(f(\mathbf{r}); \mathbf{r})$ はただの関数で、その値を決めるのは1つの $\mathbf{r}$ の値。 Γ はある領域の $\mathbf{r}$ によって決定される。



一方 Γ はある領域の $\mathbf{r}$ によって決定される。



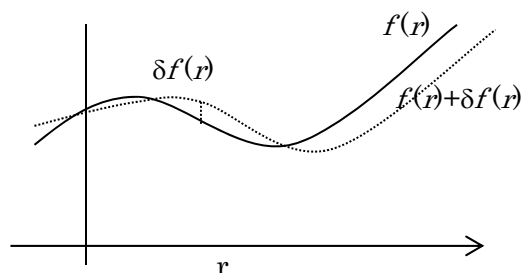
(2) 汎関数微分

$$\frac{\delta \Gamma[f(\mathbf{r})]}{\delta f(\mathbf{r})} \equiv \lim_{\Delta \rightarrow 0} \{ \Gamma[f(\mathbf{r}) + \delta f(\mathbf{r})] - \Gamma[f(\mathbf{r})] \} / \Delta \quad (\text{A1.2})$$

$$\text{ここで } \Delta = \int_D \delta f(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

$$\Delta \rightarrow 0 \text{ は } \begin{cases} D \rightarrow 0 \\ \text{かつ} \\ \delta f(\mathbf{r}) \rightarrow 0 \end{cases}$$

この定義は汎関数が(A1.1)式で表されるとき、次の定義と同等である



$$\delta \Gamma = \int_D \frac{\partial F}{\partial f} \delta f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + O(\delta f(\mathbf{r})^2)$$

$$\frac{\delta \Gamma[f(\mathbf{r})]}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\partial F}{\partial f} \quad (\text{A1.3})$$

と定義する。このとき

$$\delta \Gamma = \int_D \frac{\delta \Gamma}{\delta f(\mathbf{r})} \delta f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + O(\delta f(\mathbf{r})^2) \quad (\text{A1.4})$$

と表せる。

(例)

線形の汎関数 $\Gamma[u(x)]$

$$\Gamma = \int dx k(x) u(x)$$

$$\delta \Gamma = \int dx k(x) (u(x) + \delta u(x) - u(x)) = \int dx k(x) \delta u(x)$$

(A1.4) と比較して

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta u(x)} = k(x)$$

(3) Special Case

δ 関数を用いると $f(\mathbf{r})$ を $f(\mathbf{r}')$ の汎関数で表現できる。すなわち

$$\Gamma[f] = f(x') = \int_D dx \delta(x - x') f(x) \quad (\text{A1.5})$$

ここで母関数は $\delta(x - x') f(x)$ となる。

$$\delta \Gamma = \int_D dx \delta(x - x') \delta f(x) = \delta f(x')$$

よって

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta f(x)} = \frac{\delta f(x')}{\delta f(x)} = \delta(x - x') \quad (\text{A1.6})$$

(4)演算規則

$$\textcircled{1} \frac{\delta(c\Gamma)}{\delta f(\mathbf{r})} = c \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r})} \quad (\text{A1.7})$$

ただし、c は $f(\mathbf{r})$ の汎関数ではない。

$$\textcircled{2} \frac{\delta(\Gamma_1 + \Gamma_2)}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\delta\Gamma_1}{\delta f(\mathbf{r})} + \frac{\delta\Gamma_2}{\delta f(\mathbf{r})} \quad (\text{A1.8})$$

$$\textcircled{3} \frac{\delta(\Gamma_1\Gamma_2)}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\delta\Gamma_1}{\delta f(\mathbf{r})}\Gamma_2 + \frac{\delta\Gamma_2}{\delta f(\mathbf{r})}\Gamma_1 \quad (\text{A1.9})$$

ただし、 Γ_1 と Γ_2 の積分領域は等しくなければならない。

$$\textcircled{4} \frac{\delta\left(\frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}\right)}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\frac{\delta\Gamma_2}{\delta f(\mathbf{r})}\Gamma_1 - \frac{\delta\Gamma_1}{\delta f(\mathbf{r})}\Gamma_2}{\Gamma_1^2} \quad (\text{A1.10})$$

$\textcircled{5} \Gamma = P(\Gamma_1)$; Γ は汎関数 Γ_1 の関数

$$\text{このとき} \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\partial P}{\partial \Gamma_1} \frac{\delta\Gamma_1}{\delta f(\mathbf{r})} \quad (\text{A1.11})$$

$\textcircled{6} g(\mathbf{r}) = g(f(\mathbf{r}))$; $g(\mathbf{r})$ は関数 $f(\mathbf{r})$ の関数

$$\text{このとき} \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r})} = \frac{\delta\Gamma}{\delta g(\mathbf{r})} \frac{\partial g}{\partial f} \quad (\text{A1.12})$$

$\textcircled{7}$ Chain Rule

Γ ; $f(\mathbf{r})$ の汎関数 $f(\mathbf{r})$; $g(\mathbf{r}')$ の汎関数
すなわち

$$\Gamma = \int_D F(\mathbf{r}; f(\mathbf{r})) d\mathbf{r}$$

$$f(\mathbf{r}) \equiv \Gamma[g(\mathbf{r}'); \mathbf{r}] = \int_D G(\mathbf{r}', g(\mathbf{r}'); \mathbf{r}) d\mathbf{r}'$$

このとき

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta g(\mathbf{r})} = \int_D \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}')} \frac{\delta f(\mathbf{r}')}{\delta g(\mathbf{r})} d\mathbf{r}' \quad (\text{A1.13})$$

特に

$$\int_D \frac{\delta f(\mathbf{r})}{\delta g(\mathbf{r}'')} \frac{\delta g(\mathbf{r}'')}{\delta f(\mathbf{r}')} d\mathbf{r}'' = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A1.14})$$

(5)n 回汎関数微分

次のような汎関数を考える。

$$\Gamma = \int \cdots \int F\{f(\mathbf{r}_1), \dots, f(\mathbf{r}_N)\} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N$$

$\textcircled{1}$ 一回汎関数微分

$$\delta\Gamma = \int \cdots \int \sum_i \frac{\partial F}{\partial f(\mathbf{r}_i)} \delta f(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_N$$

$$= \int \cdots \int \delta f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial f(\mathbf{r}_i)} \times$$

$$F[f(\mathbf{r}_1), f(\mathbf{r}_2), \dots, f(\mathbf{r}_{i-1}), f(\mathbf{r}_i), f(\mathbf{r}_{i+1}), \dots, f(\mathbf{r}_N)] d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N$$

よって

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)} = \int \cdots \int \frac{\partial}{\partial f(\mathbf{r}_1)} \sum_{i=1}^N F \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_N \quad (\text{A1.15})$$

ここで()内は座標の入れ替えを表す。

$\textcircled{2}$ 二回汎関数微分

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)\delta f(\mathbf{r}_2)} &= \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \times \\ &\int \cdots \int \frac{\partial^2}{\partial f(\mathbf{r}_2)^2} \sum_{i=1}^N F \begin{pmatrix} 1 & 2 & i \\ i & 1 & 2 \end{pmatrix} d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N \\ &+ \int \cdots \int \frac{\partial^2}{\partial f(\mathbf{r}_1)\partial f(\mathbf{r}_2)} \sum_{\substack{k \geq 2 \\ k \neq i}} \sum_{i \geq 1} F \begin{pmatrix} 1 & i & 2 & k \\ i & 1 & k & 2 \end{pmatrix} d\mathbf{r}_3 \cdots d\mathbf{r}_N \end{aligned} \quad (\text{A1.16})$$

(6)汎関数テーラー展開

$$\Gamma = \int \cdots \int F\{f(\mathbf{r}_1), \dots, f(\mathbf{r}_n), \dots\} d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \cdots$$

において母関数 F を $f_0(\mathbf{r})$ のまわりでテーラー展開する。

$$F = F_0 + \sum_i \frac{\partial F}{\partial f(\mathbf{r}_i)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_i)$$

$$+ \frac{1}{2!} \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 F}{\partial f(\mathbf{r}_i)\partial f(\mathbf{r}_j)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_i) \Delta f(\mathbf{r}_j) + \cdots$$

平衡状態

$$\int \cdots \int F_0 d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \cdots = \Gamma_0$$

線形の応答

$$\int \cdots \int \sum_i \frac{\partial F}{\partial f(\mathbf{r}_i)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \cdots$$

$$= \int \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1$$

非線形の応答

$$\int \cdots \int \sum_i \sum_j \frac{\partial^2 F}{\partial f(\mathbf{r}_i)\partial f(\mathbf{r}_j)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_i) \Delta f(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \cdots$$

$$= \iint \frac{\delta^2\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)\delta f(\mathbf{r}_2)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_1) \Delta f(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

以下同様。よって次の汎関数テーラー展開が得られる。

$$\Gamma = \Gamma_0 + \int \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1$$

$$+ \frac{1}{2!} \iint \frac{\delta^2\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}_1)\delta f(\mathbf{r}_2)} \Big|_0 \Delta f(\mathbf{r}_1) \Delta f(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + \cdots$$

(A1.17)

(7)二変数関数の汎関数

$$\Gamma = \Gamma[f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]]$$

$$= \iint F(f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')) d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

$$\delta\Gamma = \iint \frac{\partial F}{\partial f} \delta f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

ここで $f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = f(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ とすれば、

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \equiv \frac{\partial F}{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} \quad (\text{A1.18})$$

$f(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \neq f(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ ならば

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta f} \equiv \frac{1}{2} \left\{ \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} + \frac{\delta\Gamma}{\delta f(\mathbf{r}', \mathbf{r})} \right\} \quad (\text{A1.19})$$

A2. グラフ

(1) 関数とグラフ

$$\textcircled{1} \quad a_1 \bigcirc_{r_1} \Leftrightarrow a_1(r_1)$$

$$\bigcirc_{r_1} \overset{A_\alpha}{-} \bigcirc_{r_2} \Leftrightarrow A_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$$\overset{a_1}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A_\alpha}{-} \overset{a_2}{\bigcirc}_{r_2} \Leftrightarrow a_1(\mathbf{r}_1) a_2(\mathbf{r}_2) A_\alpha(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

$\textcircled{2} \quad a_1 \bigcirc_{r_1}, a_2 \bigcirc_{r_2}, \dots, a_n \bigcirc_{r_n}$ の白丸と $\overset{A_\alpha}{-}, \overset{A_\beta}{-}$ 等の白丸をつなぐボンドからなるグラフ

$$= \prod_{i=1}^n a_i(\mathbf{r}_i) \prod_{i>j} \frac{1}{n(\alpha, ij)!} A_\alpha(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)^{n(\alpha, ij)} \\ \frac{1}{n(\beta, ij)!} A_\beta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)^{n(\beta, ij)} \dots$$

ここで $n(v, ij) (v=\alpha, \beta, \dots)$ は $a_i \bigcirc_{r_i}$ と $a_j \bigcirc_{r_j}$ をつな

ぐ $\overset{A_v}{-}$ のボンドの数。

$$\overset{a_1}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \overset{a_2}{\bigcirc}_{r_2} \quad \overset{a}{\bigcirc}_{r_3} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4}$$

$$= a(\mathbf{r}_2) a(\mathbf{r}_3) a(\mathbf{r}_4) A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{2!} A(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)^2 B(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$$

$\textcircled{3}$ 積分が行われるものについては黒丸●であらわす。

$$a_1 \bigcirc_{r_1}, a_2 \bigcirc_{r_2}, \dots, a_n \bigcirc_{r_n} \text{ の白丸と、 } a_{n+1} \bullet_{r_{n+1}},$$

$a_{n+2} \bullet_{r_{n+2}}, \dots, a_{n+m} \bullet_{r_{n+m}}$ の黒丸と、 $\overset{A_\alpha}{-}, \overset{A_\beta}{-}$ 等の白丸をつなぐボンドからなるグラフ

$$= \int d\mathbf{r}_{n+1} \int d\mathbf{r}_{n+2} \dots \int d\mathbf{r}_{n+m} \{$$

黒丸を白丸に変えたときに $\textcircled{2}$ で得られるグラフ}

$$\overset{a_1}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \quad \bullet_{r_3} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4}$$

$$= \iint d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 a(\mathbf{r}_2) a(\mathbf{r}_3) a(\mathbf{r}_4) A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{1}{2!} A(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)^2 B(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)$$

注：黒丸の numbering は意味がない。

$$\textcircled{4} \quad a_1 \bigcirc_{r_1}, a_2 \bigcirc_{r_2}, \dots, a_n \bigcirc_{r_n} \text{ の白丸と、 } a_{n+1} \bullet,$$

$a_{n+2} \bullet, \dots, a_{n+m} \bullet$ の黒丸と、 $\overset{A_\alpha}{-}, \overset{A_\beta}{-}$ 等の白丸をつなぐボンドからなるグラフ

$$= \frac{1}{m!} \{ \text{黒丸に任意に } \mathbf{r}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+2}, \dots, \mathbf{r}_{n+m} \text{ を}$$

振り分けたときに得られる位相的に異なるあらゆるグラフの和}

$$= \frac{1}{S} \{ \mathbf{r}_{n+1}, \mathbf{r}_{n+2}, \dots, \mathbf{r}_{n+m} \text{ を黒丸に任意につ}$$

けて得られるグラフのひとつ}

S はグラフの対称数：座標のあいだの置換を行ったときに同じグラフを与えるような置換の数。

$$\begin{aligned} \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \quad \bullet_{r_3} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} &= \frac{1}{2!} \left\{ \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \quad \bullet_{r_3} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \right. \\ &+ \left. \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_3} \quad \bullet_{r_2} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \right\} \\ &= \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \quad \bullet_{r_3} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_4} \end{aligned}$$

(a)

(b)

$$\begin{aligned} \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \overset{A}{-} \bullet_{r_3} \overset{A}{-} \bullet_{r_4} &= \frac{1}{3!} \left\{ \begin{array}{ccc} \text{1} & \text{2} & \text{1} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \text{3} & \text{3} & \text{3} \end{array} \quad \begin{array}{ccc} \text{1} & \text{3} & \text{2} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \text{2} & \text{2} & \text{1} \end{array} \quad \begin{array}{ccc} \text{2} & \text{1} & \text{3} \\ \bullet & \bullet & \bullet \\ \text{3} & \text{3} & \text{2} \end{array} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \begin{array}{ccc} \text{1} & \text{2} & \\ \bullet & \bullet & \\ \text{3} & \text{3} & \end{array} \end{aligned}$$

$\textcircled{5}$ グラフの積

$\Gamma_i(\bigcirc_{r_1}, \bigcirc_{r_2}, \dots, \bigcirc_{r_n}; \text{任意の数の } \bullet, \text{一からなるグラフ})$

$\Gamma_j(\bigcirc_{r_1}, \bigcirc_{r_2}, \dots, \bigcirc_{r_m}; \text{任意の数の } \bullet, \text{一からなるグラフ})$

Γ_i と Γ_j の $\bigcirc$ のうちの共通の座標を持った $\bigcirc$ を重ねて書いて得られるグラフを Γ_k とすると

$$\Gamma_k \equiv \Gamma_i * \Gamma_j \quad (\text{一般的に } \Gamma_i * \Gamma_j \neq \Gamma_i \times \Gamma_j)$$

e.g.

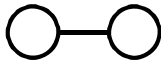
$$\Gamma_1 = \Gamma_2 = \overset{a}{\bigcirc}_{r_1} \overset{A}{-} \bullet_{r_2} \overset{A}{-} \overset{a}{\bigcirc}_{r_2}$$

$$\Gamma_3 \equiv \Gamma_1 * \Gamma_2 = \begin{array}{ccc} \bullet & \overset{a}{\bigcirc} & \bullet \\ \text{A} & & \text{A} \\ \bullet & \overset{a}{\bigcirc} & \bullet \\ \text{A} & & \text{A} \end{array} = \frac{1}{2} \begin{array}{ccc} \text{1} & & \\ \bullet & \bullet & \\ \text{2} & \text{2} & \end{array}$$

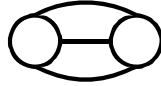
(2) グラフの用語

① simple diagram

任意の二つの丸をつなぐ bond の数はどれも 1 本か 0 本である。



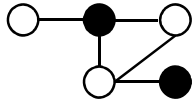
Simple



non-simple

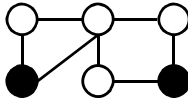
② connected diagram

少なくとも 2 つ以上の丸があって、どの丸からとも任意の 1 つの丸につながる道がある。

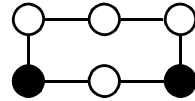


③ independent path

二つの path が独立ということは、途中に共通の丸を持たないものをさす。



Dependent



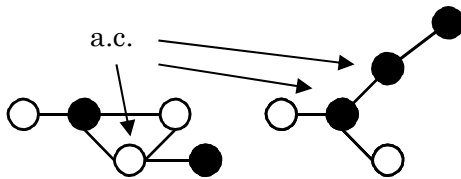
independent

④ at least doubly connected diagram

任意の二つの丸の間に必ず二つ以上の独立な path が存在する。

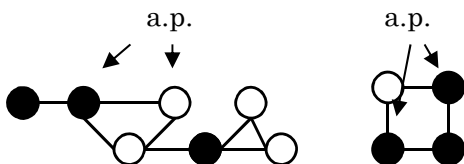
⑤ articulation circle(a.c.)

connected diagram で、その丸を取り除くとグラフが 2 つ以上に分離し、しかもそのうち少なくともひとつは○を含まないものになる。



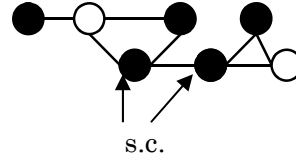
⑥ articulation pair of circles(a.p.)

connected diagram で、その丸の対を取り除くと(さらにその対をつなぐボンドがあればそれも取り除くと)、グラフが 2 つ以上に分離し、しかもそのうち少なくともひとつは○を含まないものになる。



⑦ s-circle

二つの○を含む結合したグラフにおいて、それを取り除くとグラフが二つ以上に分離し、二つの○が別々の部分に含まれるようになる●か○



s.c.

(3) いくつかの補助定理(lemma)

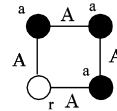
① Lemma 1

Γ を $a_1 \bullet, a_2 \bullet, \dots, a_m \bullet$ とそれらをつなぐボンドからなるグラフとする。

$$b(\mathbf{r}) \frac{\delta \Gamma}{\delta a(\mathbf{r})} = \left\{ \begin{array}{l} \Gamma \text{ に含まれる } a \bullet \text{ を } b \circ_r \text{ にかえて得られる} \\ \text{位相的に異なる全てのグラフの和} \end{array} \right\}$$

例

$\Gamma =$



$$= \frac{1}{2} \iiint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 a(\mathbf{r}_1) a(\mathbf{r}_2) a(\mathbf{r}_3) A(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) A(\mathbf{r}_3, \mathbf{r})$$

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta a(\mathbf{r}')} = \frac{1}{2} \iiint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 A(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) A(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}) \left\{ a(\mathbf{r}_1) a(\mathbf{r}_2) \frac{\delta a(\mathbf{r}_3)}{\delta a(\mathbf{r}')} + a(\mathbf{r}_1) a(\mathbf{r}_3) \frac{\delta a(\mathbf{r}_2)}{\delta a(\mathbf{r}')} + a(\mathbf{r}_2) a(\mathbf{r}_3) \frac{\delta a(\mathbf{r}_1)}{\delta a(\mathbf{r}')} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}_2 \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \circ_{r'} \end{array} & + & \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}' \\ \bullet \quad \circ \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \bullet_{r_3} \end{array} & + & \begin{array}{c} \mathbf{r}' \quad \mathbf{r}_2 \\ \circ \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \bullet_{r_3} \end{array} \end{array} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{cc} \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}_2 \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \circ_{r'} \end{array} & + & \begin{array}{c} \mathbf{r}_2 \quad \mathbf{r}_3 \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \circ_{r'} \end{array} \end{array} \right\} + \frac{1}{2} \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}' \\ \bullet \quad \circ \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \bullet_{r_3} \end{array}$$

$$= \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}' \\ \bullet \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \circ_{r'} \end{array} + \begin{array}{c} \mathbf{r}_1 \quad \mathbf{r}' \\ \bullet \quad \circ \\ | \quad | \\ \circ_r \quad \bullet_{r_3} \end{array}$$

② Lemma 2

Γ を $\bullet$ とそれらをつなぐボンド $\overset{A_\alpha}{-}$, $\overset{A_\beta}{-}$ 等からなるグラフとする。

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta A(\mathbf{r}, \mathbf{r})} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{l} \Gamma \text{に含まれる } \text{---}^A \text{のうち一本を取り除き、} \\ \text{その両端の } \bullet \text{を } \bigcirc_r \text{と } \bigcirc_{r'} \text{にかえて} \\ \text{得られる位相的に異なる全てのグラフの和} \end{array} \right\}$$

$$\frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet - \bullet)^2 = \frac{1}{2} (\bullet_1 - \bullet_2 - \bigcirc - \bullet_3 - \bullet_4)$$

$$= \bullet - \bullet - \bigcirc - \bullet - \bullet$$

$$= (\bigcirc - \bullet - \bullet) * (\bigcirc - \bullet - \bullet)$$

e.g.

$$\Gamma = \begin{array}{c} \text{A} \quad \text{A} \\ \bullet \quad \bullet \\ \text{A} \quad \text{A} \end{array} = \frac{1}{6} \begin{array}{c} \text{A} \quad \text{A} \\ \bullet \quad \bullet \\ \text{A} \quad \text{A} \end{array} \begin{array}{c} 3 \\ 1 \quad 2 \end{array}$$

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta A(r, r')} = \frac{1}{6} \left\{ \begin{array}{c} \text{---}^{r'} \\ \bigcirc_r - \bullet_2 \\ \text{---}^r \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---}^r \\ \bullet_3 - \bigcirc_{r'} \\ \text{---}^r \end{array} \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{array}{c} \bullet_1 \\ \bigcirc_r - \bullet_1 - \bigcirc_{r'} \end{array} = \frac{1}{2} \begin{array}{c} \bullet \\ \bigcirc_r - \bullet - \bigcirc_{r'} \end{array}$$

③Lemma 3

集合 $N = \{\Gamma_i (i=1, 2, \dots)\}$

Γ_i は位相的に異なる結合したグラフでひとつの $\bigcirc$ をもつ。 $\bigcirc$ の関数は 1。 Γ_i の要素は互いに素である。つまりどの Γ_i も N の属する他のグラフの積では表現できない。

集合 $M = \{N \text{ に属する全てのグラフおよび全てのグラフの任意の回数の積}\}$

このとき

$$\{M \text{ に属する全てのグラフの和}\} = \exp\{N \text{ に属する全てのグラフの和}\} - 1$$

(例)

$$\exp\{N \text{ の和}\} - 1 = \exp(\bigcirc - \bullet + \bigcirc - \bullet - \bullet) - 1$$

$$= (\bigcirc - \bullet + \bigcirc - \bullet - \bullet)$$

$$+ \frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet + \bigcirc - \bullet - \bullet)^2 + \dots$$

$$= (\bigcirc - \bullet + \bigcirc - \bullet - \bullet) + \frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet)^2$$

$$+ \bigcirc - \bullet \times \bigcirc - \bullet - \bullet + \frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet - \bullet)^2 + \dots$$

ここで

$$\frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet)^2 = \frac{1}{2} (\bullet_1 - \bigcirc - \bullet_2)$$

$$= \bullet - \bigcirc - \bullet = (\bigcirc - \bullet) * (\bigcirc - \bullet)$$

$$\bigcirc - \bullet \times \bigcirc - \bullet - \bullet$$

$$= \bullet_1 - \bigcirc - \bullet_2 - \bullet_3 = \bullet - \bigcirc - \bullet - \bullet$$

④Lemma 4

集合 $N = \{\bigcirc_r, \bigcirc_{r'}\}$ を白丸として含む結合したグラフで、a.c.をもたず、かつ $\bigcirc_r$ と $\bigcirc_{r'}$ の間のボンドをもたず、この二つの白丸が a.p.でないものの集合

集合 $M = \{N \text{ に属するグラフおよびその任意のグラフの積の集合}\}$

このとき

$$\{M \text{ に属する全てのグラフの和}\} = \exp\{N \text{ に属する全てのグラフの和}\} - 1$$

e.g.

$$N = \{\bigcirc_r - \bigcirc_{r'}, \bigcirc_r - \bullet - \bigcirc_{r'}\}$$

$$M = \{\bigcirc - \bigcirc, \bigcirc - \bullet - \bigcirc, \text{---}, \text{---}, \text{---}, \dots\}$$

$$\exp\{N \text{ の和}\} - 1$$

$$= \exp(\bigcirc - \bigcirc + \bigcirc - \bullet - \bigcirc) - 1$$

$$= (\bigcirc - \bigcirc + \bigcirc - \bullet - \bigcirc)$$

$$+ \frac{1}{2} (\bigcirc - \bigcirc + \bigcirc - \bullet - \bigcirc)^2 + \dots$$

$$= (\bigcirc - \bigcirc + \bigcirc - \bullet - \bigcirc)$$

$$+ \frac{1}{2} (\bigcirc - \bigcirc)^2 + \bigcirc - \bigcirc \times \bigcirc - \bullet - \bigcirc$$

$$+ \frac{1}{2} (\bigcirc - \bullet - \bigcirc)^2 + \dots$$

$$=$$

$$\bigcirc - \bigcirc + \bigcirc - \bullet - \bigcirc + \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots$$

⑤Lemma 5

集合 $M = \{^a \bigcirc_r \text{ をひとつ含む位相的にことなる結合したグラフの集合}\}$

$b(\mathbf{r}) = \{M \text{ に属する全てのグラフの和}\}$

あるグラフ Γ (●の関数は1) を考え、

集合 $N=\{\Gamma$ の●に集合 M の○を重ねるようにして
ひっつけてできる位相的に異なる全てのグラフ
の集合}

このとき N に属するどのグラフも、そこから M
に属するグラフを取り除くことによって唯一通
り Γ になるとすれば

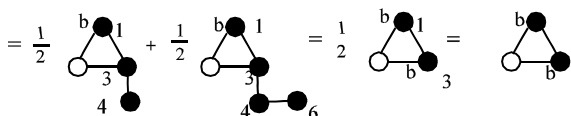
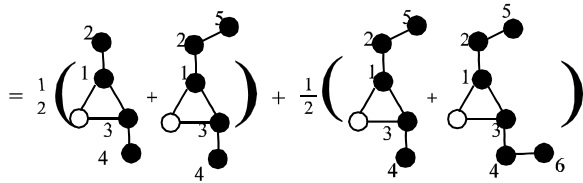
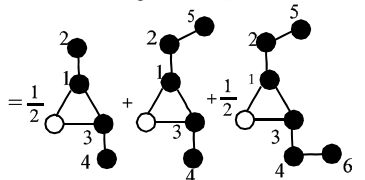
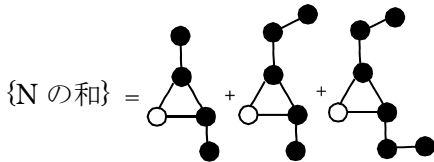
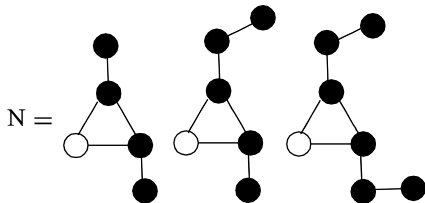
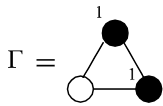
$\{N$ に属する全てのグラフの和}

$$= \{\Gamma \text{ の } \bullet \text{ を全て } b \bullet \text{ にしたグラフ}\}$$

(例)

$$M = \{\bigcirc_r -^a \bullet, \bigcirc_r -^a \bullet -^a \bullet\}$$

$$b(r) = \bigcirc_r -^a \bullet + \bigcirc_r -^a \bullet -^a \bullet$$



(6)Lemma 6

集合 $M=\{\bigcirc_r, \bigcirc_{r'} \text{ を白丸として含む位相的にこ
となる結合したグラフの集合}\}$

$$A(r, r') = \{M \text{ に属する全てのグラフの和}\}$$

あるグラフ Γ {—(関数は1)を含む} を考え

集合 $N=\{\Gamma$ の●—●に集合 M の $\bigcirc_r, \bigcirc_{r'}$ を重ねる
ようにしてひっつけてできる位相的に異なる全
てのグラフの集合}

このとき N に属するどのグラフも、そこから M
に属するグラフを取り除くことによって唯一通
り Γ になるとすれば

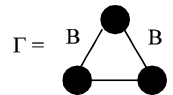
$\{N$ に属する全てのグラフの和}

$$= \{\Gamma \text{ の } \text{---} \text{ を全て } \text{---}^A \text{ にしたグラフ}\}$$

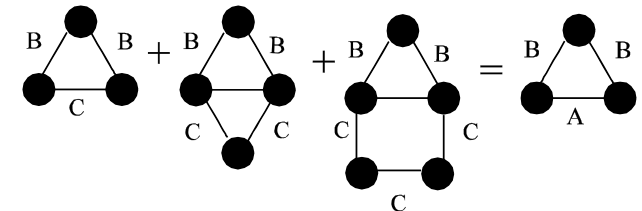
(例)

$$M = \{\bigcirc_r \text{---}^C \bigcirc_{r'}, \bigcirc_r \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bigcirc_{r'}, \bigcirc_r \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bigcirc_{r'}\}$$

$$A(r, r') = \bigcirc_r \text{---}^C \bigcirc_{r'} + \bigcirc_r \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bigcirc_{r'} + \bigcirc_r \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bullet \text{---}^C \bigcirc_{r'}$$



$\{N \text{ の和}\} =$



A3. フーリエ変換など

(1)フーリエ変換の定義

ある関数 $f(x)$ のフーリエ級数展開を考えよう。

すなわち

$$f(x) = \frac{1}{2a} \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n e^{in\pi/a}$$

$$c_n = \int_{-a}^a e^{-in\pi/a} f(x) dx$$

このとき、固有値は $k_n^2 \equiv \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$ である。隣り合

う k_n の差は a を大きくすればいくらかでも小さくなる。
いまこの極限ではあたかも連続のように考えて

$$dk = k_{n+1} - k_n = \frac{\pi}{a}$$

と書くことにする。 $\pi/a \rightarrow 0$ の極限を考えると

$$\frac{\pi}{a} \sum f_n \rightarrow \int dk f(k)$$

となる。したがって

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{K \rightarrow \infty} \int_{-K}^K c(k) \exp(ikx) dk$$

$$c(k) = \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-a}^a f(x) \exp(-ikx) dx$$

つまり

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \lim_{K \rightarrow \infty} \lim_{a \rightarrow \infty} \int_{-K}^K dk \exp(ikx)$$

$$\int_{-a}^a dx' \exp(-ikx') f(x')$$

よってフーリエ変換を次式で定義すると

$$\tilde{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-ikx) dx$$

その逆変換は

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) \exp(ikx) dk$$

で与えられる。

(2) デルタ関数とフーリエ変換。

フーリエ変換の定義により

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \exp\{ik(x-x')\}$$

積分の順序を入れ替えて

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\{ik(x-x')\}$$

一方でデルタ関数を用いると

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') \delta(x'-x)$$

ゆえに

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx \quad 1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \delta(x) dx$$

(3) 畳み込み積分とフーリエ変換

たとえばデルタ関数的な入力に対する出力 $h(t)$ がわかっているような場合、一般の入力

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) \delta(t-\tau) d\tau$$

に対する出力は

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) h(t-\tau) d\tau \equiv f * h(t)$$

であらわされる。このような形の積分を畳み込みと呼ぶ。 $f * h(t) \equiv g(t)$ のフーリエ変換は

$$\begin{aligned} \tilde{g}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) h(t-\tau) d\tau e^{-ikt} dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) e^{-ik\tau} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} h(t-\tau) e^{-ik(t-\tau)} d(t-\tau) \\ &= \tilde{f}(k) \tilde{h}(k) \end{aligned}$$

と積の形で表現でき、計算が非常に簡単になる。

(4) 3次元空間でのフーリエ変換

全相関関数 $h(r)$ のような3次元空間で等方的な関数のフーリエ変換を考えると、便宜上 k の方向を極座標系での z 軸方向にとる。このとき

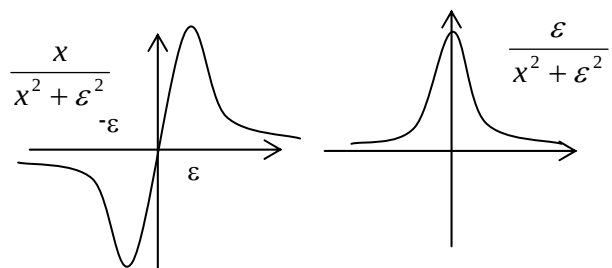
$$\begin{aligned} \tilde{h}(k) &= \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) h(r) \\ &= \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} 2\pi r^2 \exp(-ikr \cos \theta) h(r) \sin \theta d\theta dr \\ &= \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 2\pi r^2 \exp(-ikrx) h(r) dx dr \\ &= \int_0^{\infty} 4\pi r^2 h(r) \frac{\sin kr}{kr} dr \\ &= \int_0^{\infty} 4\pi r^2 h(r) j_0(kr) dr \end{aligned}$$

$$\text{ただし } j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$$

(5) 主値積分について

次のような関数を考える。

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \mp i \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}$$



$\varepsilon \rightarrow 0$ で $\frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} \rightarrow \frac{1}{x}$ で近似。 $x=0$ のごく近傍で急激な変化をする関数となる。したがって $x=0$ の近くで緩やかに変化する関数 $f(x)$ に対して

$$\int_{-\xi}^{\eta} f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx$$

$$= \int_{-\xi}^{-\delta} f(x) \frac{1}{x} dx + \int_{\delta}^{\xi} f(x) \frac{1}{x} dx + \int_{-\delta}^{\delta} f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx$$

最後の項は

$$f(0) \int_{-\delta}^{\delta} \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx = 0$$

と近似できる。したがって

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\xi}^{\eta} f(x) \frac{x}{x^2 + \varepsilon^2} dx$$

$$= \int_{-\xi}^{-0} f(x) \frac{1}{x} dx + \int_{+0}^{\xi} f(x) \frac{1}{x} dx = P\left(\frac{1}{x}\right)$$

一方で $x = \varepsilon \tan \theta$ とおくと

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} dx = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 (1 + \tan^2 \theta)} \frac{dx}{d\theta} d\theta$$

$$= \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta = \pi$$

したがって

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(x)$$

A4. 静電気学の復習

単位系：CGS。SI にするには $\varepsilon \rightarrow \varepsilon/\varepsilon_0; q^2 \rightarrow q^2/4\pi\varepsilon_0$

charge q_1 から q_2 に作用する力 $\mathbf{F}_2$

$$\mathbf{F}_2 = \frac{q_1 q_2}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad \hat{\mathbf{r}} \equiv \frac{\mathbf{r}}{r} \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

$$= q_2 \mathbf{E}(\mathbf{r})$$

(A4.1)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{q_1}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (\text{A4.2})$$

この式より次の関係式を導くことができる。

(Maxwell の方程式)

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (\text{A4.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0 \quad (\text{A4.4})$$

ここで $\rho(\mathbf{r}) = q_1 \delta(\mathbf{r})$

(証明)

(A3.2)は次のように書き換えられる。

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \left(\frac{q_1}{r} \right)$$

一般に

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(\mathbf{r})$$

が成り立つので(A3.3)式が成立する。一般に、任意の関数 ϕ について $\nabla \times \nabla \phi = 0$ 。つまり $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ は回転を持たないのでスカラーポテンシャル $\phi(\mathbf{r})$ を用いて

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (\text{A4.5})$$

と書ける。今の場合は明らかに

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{q_1}{r} \quad (\text{A4.6})$$

(A3.3)と(A3.5)から Poisson 方程式

$$\nabla^2 \phi = -4\pi \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{A4.7})$$

が得られる。

参考文献

- Hansen, J. P. and McDonald, I. R. “*Theory of Simple Liquid*”, 2nd Ed. Academic Press, 1986.
- Gray, C. G. and Gubbins, K. E., “*Theory of Molecular Fluids*” Vol. 1. Calarendon Press. 1984.
- 誘電率の内容等については現在、名城大学の教授の大場正春先生が 1986 年と 1988 年に京都大学でおこなったセミナーの内容が基本となっており、それを今回のセミナー用に加筆・削除等をおこなったものである。
- Adams, J. E. (1998). *J. Phys. Chem. B*, **102**, 7455.
- Adelmann, S. A., Muralidhar, R. and Stote, R. H. (1991) *J. Chem. Phys.* **95**, 2738.
- Arzhantsev, S., Ito, N., Heitz, M., Maroncelli, M., (2003). *Chem. Phys. Lett.* **381**, 278.
- Arzhantsev, S., Jin, H., Baker, G. A., Maroncelli, M., (2007). *J. Phys. Chem. B* **111**, 4978.
- Bagchi, B. (1994). *J. Chem. Phys.* **100**, 6658.
- Asami, N., Takaya, T., Yabumoto, S., Shigeto, S., Hamaguchi, H., Iwata, K., (2010). *J. Phys. Chem. A* **114**, 6351.
- Biggerstaff, D. R. and Wood, R. H. (1988). *J. Phys. Chem.* **92**, 1988.
- Biswas, R., Bhattacharyya, S. and Bagchi, B. (1998). *J. Chem. Phys.* **108**, 4963.
- Biswas, R. and Bagchi, B. (1999). *J. Phys. Chem. A* **103**, 2495.
- Biswas, R., Lewis, J. E and Maroncelli, M. (1999) *Chem. Phys. Lett.* **310**, 485.
- Chandler, D. Hsu, C. and Street, W. B. (1977). *J. Chem. Phys.* **66**, 5231.
- Cherayil, B. J. and Fayer, M. D. (1997). *J. Chem. Phys.* **107**, 7642.
- Chesnoy, J. and Weis, J. J. (1986). *J. Chem. Phys.* **84**, 5378.
- Copley, J. R. and Rowe, J. M. (1974). *Phys. Rev. Lett.* **32**, 49.
- Dahl, K., Sando, G. M., Fox, D. M., Sutto, T. E., Owrutsky, J. C., (2005). *J. Chem. Phys.* **123**, 084504.
- Eckert, C. A., Zigar, D. H. Johnston, K. P. and Kim, S. (1986). *J. Phys. Chem.*, **90**, 2738.
- Egorov S. A. and Skinner, J. L. (2000). *J. Chem. Phys.* **112**, 275.
- Fries, P. H. and Patey, G. N. (1985). *J. Chem. Phys.* **82**, 429.
- Fujisawa, T., Fukuda, M., Terazima, M., Kimura, Y., (2006). *J. Phys. Chem. A* **110**, 6164.
- Goodyear, G., Larsen, R. E. and Stratt, R. M. (1996). *Phys. Rev. Lett.* **76**, 243
- Goodyear, G. and Stratt, R. M. (1997). *J. Chem. Phys.* **107**, 3098.
- Groot, R. D., van der Erden, J. P. and Faber, N. M. (1987). *J. Chem. Phys.* **87**, 2263.
- Heidelberg, C., Vikharenko, V. S., Schwarzer, D. and Schroedar, J. (1999). *J. Chem. Phys.* **110**, 5286.
- Heyes, D. M. (1984). *J. Chem. Soc. Faraday Trans. II* **79**, 1741.
- Hirata, F., Munakata, T., Rainer, F. and Friedman, H. L. (1995). *J. Mol. Liq.* **65/66**, 15.
- Holian, B. L. and Evans, D. J. (1983). *J. Chem. Phys.* **78**, 5147.
- Horng, M. L., Gardecki, J. A., Papazyan, A. and Maroncelli, M. (1995). *J. Phys. Chem.* **99**, 17311.
- Hu, Z., Margulis, C. J., *J. Proc. Natl. Acad. Sci.* **103**, 831 (2006).
- Ingram, J. A., Moog, R.S., Ito, N., Biswas, R., Maroncelli, M., (2003). *J. Phys. Chem. B* **107**, 5926.
- Ito, N., Arzhantsev, S., Heitz, M., Maroncelli, M., (2004). *J. Phys. Chem. B* **108**, 5771.
- Iwata, K. and Hamaguchi, H. (1997). *J. Chem. Phys.* **101**, 632.
- Iwata, K., Yoshida, K., Takada, Y., Hamaguchi, H., (2007). *Chem. Lett.* **36**, 504.
- Iwata, K., Okajima, H., Saha, S., Hamaguchi, H., (2007). *Acc. Chem. Res.* **40**, 1174.
- Iyetomi, H. (1984). *Prog. Theor. Phys.* **71**, 427.

- Jin, H., Baker, G. A., Arzhantsev, S., Dong, J., Maroncelli, M., (2007). *J. Phys. Chem. B* **111**, 7291.
- Jin, H., Xiang, L., Maroncelli, M., (2007). *J. Phys. Chem. B*, **111**, 13473.
- Joo, T., Jia, Y., Yu, J.-Y., Lang, M. J. and Fleming, G. R., (1996). *J. Chem. Phys.*, **104**, 6059.
- Kang, T. J., Kahlow, M. A., Giser, D., Swallen, S., Nagarajan, V., Jarzeba, W., Barbara, P. F., (1988). *J. Phys. Chem.* **92**, 6800.
- Karmakar, R., Samanta, A., (2002). *J. Phys. Chem. A* **106**, 4447.
- Karmakar, R., Samanta, A., (2003). *J. Phys. Chem. A* **107**, 7340.
- Kashyap, H. K., Biswas, R., (2008). *J. Phys. Chem. B* **112**, 12431.
- Kashyap, H. K., Biswas, R., (2010). *J. Phys. Chem. B* **114**, 254.
- Kajimoto, O., Futakami, M., Kobayashi, T. and Yamasaki, L. (1988). *J. Phys. Chem.*, **92** 1374.
- Kimura, Y., Fukuda, M., Suda, K., Terazima, M., (2010). *J. Phys. Chem. B* **114**, 11847.
- Kimura, Y., Hamamoto, T., Terazima, M., (2007). *J. Phys. Chem. A*, **111**, 7081.
- Kobrak, M. N., (2006). *J. Chem. Phys.* **125**, 064502.
- Kofke, D. A. (1993). *J. Chem. Phys.* **98**, 4143.
- Ladanyi, B. M. and Maroncelli, M. (1998). *J. Chem. Phys.* **109**, 3204.
- Lado, F., Foiles, S. M. and Ashcroft, N. W. (1983). *Phys. Rev. A* **28**, 2374.
- Larsen, R. E., David, E. F., Goodyear, G. and Stratt, R. M. (1997) *J. Chem. Phys.* **107**, 524.
- Laren D. S., Ohta, K. and Fleming, G. R. (1999). *J. Chem. Phys.* **111**, 8970.
- Litovitz, T. A. (1956). *J. Chem. Phys.* **26**, 469.
- Lue, L. and Blankschtein, D. (1995). *J. Chem. Phys.* **102**, 4203.
- Madigosky, W. and Litovitz, T. A. (1961). *J. Chem. Phys.* **34**, 489.
- Mandal, P. K., Sarkar, M., Samanta, A., (2004). *J. Phys. Chem. A* **108**, 9048.
- McRae, E. G. (1957). *J. Phys. Chem.*, **61**, 569.
- Morita, T. and Hiroike, K. (1961). *Prog. Theor. Phys.* **25**, 537
- Myers D. J., Motoyuki, S., Fayer, M. D. and Cherayil, B. J. (2000). *J. Phys. Chem. B* **104**, 2402.
- Nagasawa, Y., Itoh, T., Yasuda, M., Ishibashi, Y., Ito, S., Miyasaka, H., (2008). *J. Phys. Chem. B*, **112**, 15758.
- Nagasawa, Y., Oishi, A., Itoh, T., Yasuda, M., Muramatsu, M., Ishibashi, Y., Ito, S., Miyasaka, H., (2009). *J. Phys. Chem. C*, **113**, 11868.
- Nisikawa, K. and Morita, T. (2000). *Chem. Phys. Lett.* **316**, 238.
- Nishiyama, K. and Okada, T., (1997). *J. Phys. Chem.* **101**, 5729.
- Okazaki, S., Matsumoto, M., Okada, I., Maeda, K. and Kataoka, Y. (1995). *J. Chem. Phys.* **103**, 8594.
- Okazaki, T., Hirota, N. and Terazima, M. (1999). *J. Chem. Phys.* **110** 11399.
- Ooe, H., Kimura, Y., Terazima, M. and Hirota, N. (1999). *J. Phys. Chem. A*, **103**, 7730.
- Ornstein, L. S. and Zernike, F. (1914). *Proc. Akad. Sci. (Amsterdam)*, **17**, 793.
- Otto, B., Schroeder, J. and Troe, J. (1984). *J. Chem. Phys.* **81**, 202
- Paige, M. E. and Harris, C. B. (1990). *Chem. Phys.* **149**, 37.
- Paul, A., Samanta, A., (2007). *J. Phys. Chem. B* **111**, 4724.
- Percus, J. K. and Yevick, G. J. (1958). *Phys. Rev.* **110**, 1.
- Reynolds, L., Gardecki, J. A., Frankland, S. J. V., Horng, M. L. and M. Maroncelli, (1996). *J. Phys. Chem.* **100**, 10337.
- Rips, I., Klafter, J. Jortner, J. (1988a). *J. Chem. Phys.*, **88**, 3246; (1988b). *ibid*, **89**, 4288.
- Samanta, A., (2010). *J. Phys. Chem. Lett.* **1**, 1557.

- Sando, G. M., Dahl, K., Owrutsky, J. C., (2006). *Chem. Phys. Lett.* **418**, 402.
- Schwarzer, D., Troe, J., Votsmeier, M. and Zerezke, M. (1996). *J. Chem. Phys.* **105**, 3121.
- Schwarzer, D., Troe, J. and Zerezke, M. (1997). *J. Chem. Phys.* **107**, 8380.
- Seth, D., Chakraborty, A., Setua, P., Sarkar, N., (2007). *J. Phys. Chem. B* **111**, 4781.
- Shim, Y., Duan, J. S., Choi, M. Y., Kim, H. J., (2003). *J. Chem. Phys.* **119**, 6411.
- Shim, Y., Choi, M. Y., Kim, H. J., (2005) *J. Chem. Phys.* **122**, 044511 (2005).
- Shin, Y., Jeong, D., Manjari, S., Choi, M. Y., Kim, H. J, (2007). *Acc. Chem. Res.* **40**, 1130.
- Singer, S. J. and Chandler, D. (1985). *Mol. Phys.* **55**, 621.
- Sjögren, L. and Sjölander, (1979). A. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12**, 4369.
- Stell, G., Patey, G. N. and Høye, J. S. (1981). *Adv. Chem. Phys.* **48**, 183.
- Stratt, R. M. and Maroncelli, (1996). *J. Phys. Chem.* **100**, 12981.
- Tahara, T. and Kayama, M. (1999). 化学反応討論会要旨集 **42**.
- Tucker, S. C. (1998). *J. Phys. Chem. B* **102**, 2437.
- Thiele, E. (1963). *J. Chem. Phys.* **39**, 474.
- Verlet, L. (1968). *Phys. Rev.* **163**, 201.
- Verlet, L. and Weis, J. J. (1972). *Phys. Rev.* **A5**, 939.
- Weeks, J. D., Chandler, D. and Andersen, H. C, (1971). *J. Chem. Phys.* **54**, 5237.
- Wertheim, M. S. (1963). *Phys. Rev. Lett.*, **10**, 321.
- Wolynes, P. G. (1987), *J. Chem. Phys.* **86**, 5133.
- Yamaguchi, T., Kimura, Y. and Hirota, N. (1998). *Mol. Phys.* **94**, 527.
- Yamaguchi, T., Kimura, Y., and Hirota. N. (1999). *J. Chem. Phys.* **111**, 4169.
- Yamaguchi, T., Kimura, Y., and Hirota. N. (2000). *J. Chem. Phys.* **113**, 4340.
- Yamaguchi, T. and Kimura, Y. (2000) *Mol. Phys.* **98**, 1553.
- Zwanzig, R. (1961). *J. Chem. Phys.* **34**, 931.