

有限温度における反応比率のコンパクトな表式

横田 浩*

Compact form of the reaction rate at finite temperature

Hiroshi Yokota

要 旨

過去の論文 [Ann. Phys. (NY) **215** (1992), 315] において、有限温度における反応比率 (reaction rate) をダイアグラマチックに計算するアルゴリズムを提案した。例として、一般化された1粒子可約な自己エネルギー (generalized one-particle reducible self-energy) タイプのグラフ $\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}$ が存在する場合の反応比率を求めた。この反応比率は、複数のパラメータの級数の和で表されているが、コンパクトな表式で表現できると予想されている。しかしながら、今まで厳密な証明がなかった。本論文では、コンパクトな表式で表現できることを直接証明する。

I. はじめに

論文 I で有限温度における反応比率 (reaction rate) をダイアグラマチックに計算するアルゴリズムを提案した¹⁾。それを利用した計算の例として、一般化された1粒子可約な自己エネルギー (generalized one-particle reducible self-energy) タイプのグラフ $\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}$ が存在する場合 (論文 I の図33) を調べた。このタイプのグラフからの反応確率 $W_D = S^*S$ への寄与は、アルゴリズムにしたがって、

$$W_D = \frac{(n - N_{21} + N_{12})! n!}{(n - N_{11} - N_{21})! (n - N_{22} - N_{21})!} \times \prod_{\alpha, \beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [-2\pi i \delta(P^2 - m^2) \theta(p_0) \hat{\Sigma}_{\alpha\beta}(P)]^{N_{\alpha\beta}} \quad (1)$$

で与えられる¹⁾。各変数の物理的意味等は、論文 I を参照のこと。反応比率は(1)で最終状態の和をとり、アンサンブル平均を計算すれば、

$$\langle \sum W_D \rangle = \sum_{\{N_{\alpha\beta}\}} \sum_{\ell=0}^{\ell_{max}} \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})! (\sum_{\alpha, \beta=1}^2 N_{\alpha\beta} - \ell)!}{\ell! (N_{11} + N_{12} - \ell)! (N_{22} + N_{12} - \ell)!} (\bar{e} - 1)^\ell$$

$$\times \prod_{\alpha, \beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (2)$$

$$A_{\alpha\beta} \equiv \frac{-2\pi i \delta(P^2 - m^2) \theta(p_0) \hat{\Sigma}_{\alpha\beta}(P)}{\tilde{e} - 1}, \quad \tilde{e} \equiv e^{\beta|p_0|}$$

$$\sum_{\{N_{\alpha\beta}\}} \equiv \sum_{N_{11}=0}^{\infty} \sum_{N_{12}=0}^{\infty} \sum_{N_{21}=0}^{\infty} \sum_{N_{22}=0}^{\infty}$$

$$\ell_{max} \equiv \text{Min}\{N_{11} + N_{12}, N_{22} + N_{12}\} \quad (3)$$

と求められる (論文 I とは、 $A_{\alpha\beta}$ の定義を若干変えている)。この式は、特別な値での推測から、以下の式のようにコンパクトな表式で書けると予想されている¹⁾。

$$\langle \sum W_D \rangle = \frac{1}{1 - [A_{11} + A_{22} + (\tilde{e} - 1)A_{22}A_{11} + A_{21} + \tilde{e}A_{12} - (\tilde{e} - 1)A_{12}A_{21}]} \quad (4)$$

$$= \frac{1}{1 - [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22} + (\tilde{e} - 1)\{A_{11}A_{22} + A_{12}(1 - A_{21})\}]} \quad (5)$$

これらは、 $A_{\alpha\beta}$ で冪展開したとき、次の 8 つの場合に正しいことが分かっている (論文 I では証明は省略されている)。(i) $N_{11} = 0$ 、(ii) $N_{22} = 0$ 、(iii) $N_{12} = 0$ 、(iv) $\ell = 0$ 、(v) $\ell = 1$ 、(vi) $\ell = 2$ 、(vii) $\ell = 3$ 、(viii) $\ell = 4$ 。なお、それぞれにおいて表記されていない変数は完全に任意である。その他に、 ℓ と $N_{\alpha\beta}$ をランダムに選んだ、いくつかの組み合わせについても確認している。

以上のように、正しいと予想されるが、現在に至るまで、厳密な証明はなかった²⁾。本論文の目的は、この表式が厳密に正しいこと、すなわち(2)と(4)が等しいこと、を直接証明することである。

証明は、任意の ℓ について成り立つことを、数学的帰納法を用いて行なう。この場合、 $(\tilde{e} - 1)$ の冪を考えるので、(4)の形より、(5)の形を用いる方が便利である。次の II 節で、 $\ell = 0$ の場合を示す。また、III 節では、一般の ℓ を示す前に、 $\ell = 1$ の場合を示す。IV 節で一般の ℓ の場合を示す。

このため、(2)、(5)をそれぞれ、以下のように書き直す。

$$(2) \equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} (\tilde{e} - 1)^{\ell} W_{\ell} \quad (6)$$

$$W_{\ell} = \sum_{\{N_{\alpha\beta}:\ell\}} \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})! (\sum_{\alpha, \beta=1}^2 -\ell)!}{\ell! (N_{11} + N_{12} - \ell)! (N_{22} + N_{12} - \ell)!} \prod_{\alpha, \beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (7)$$

ここで、 $\{N_{\alpha\beta}:\ell\}$ は、 $\text{Min}\{N_{11} + N_{12}, N_{22} + N_{12}\} \geq \ell$ を満たす $N_{\alpha\beta}$ についてのみ和をとることを意味する。

$$(5) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell=0}^n n C_{\ell} [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^{n-\ell} \times (\tilde{e} - 1)^{\ell} [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}]^{\ell} \quad (8)$$

$$\equiv \sum_{\ell=0}^{\infty} (\tilde{\epsilon} - 1)^{\ell} V_{\ell} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} V_{\ell} &= \sum_{n=\ell}^{\infty} n C_{\ell} [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^{n-\ell} [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}]^{\ell} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} n_{+\ell} C_{\ell} [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^n [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}]^{\ell} \end{aligned} \quad (10)$$

II. $\ell = 0$ の場合の証明

まず、 $\ell = 0$ の場合を示す。(2)で、 $\ell = 0$ の式は W_0 であり、 $\{N_{\alpha\beta} : 0\} = \{N_{\alpha\beta}\}$ であるから、

$$W_0 = \sum_{\{N_{\alpha\beta}\}} (N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22})! \prod_{\alpha,\beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (11)$$

となる。一方、(5)を $(\tilde{\epsilon} - 1)$ で展開した 0 次の項 V_0 は、 ${}_n C_0 = 1$ より、

$$\begin{aligned} V_0 &= \sum_{n=0}^{\infty} [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n n C_m \sum_{j=0}^m {}_m C_j [A_{11}]^j [A_{12}]^{m-j} \sum_{k=0}^{n-m} {}_{n-m} C_k [A_{21}]^{n-m-k} [A_{22}]^k \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \frac{n!}{(m-j)!j!(n-m-k)!k!} \\ &\quad \times [A_{11}]^j [A_{12}]^{m-j} [A_{21}]^{n-m-k} [A_{22}]^k \end{aligned} \quad (12)$$

となる。ここで、 $j = N_{11}$ 、 $m - j = N_{12}$ 、 $n - m - k = N_{21}$ 、 $k = N_{22}$ とおいて、 $N_{\alpha\beta}$ の和に直すと、

$$\begin{aligned} V_0 &= \sum_{N_{11}=0}^{\infty} \sum_{N_{12}=0}^{\infty} \sum_{N_{21}=0}^{\infty} \sum_{N_{22}=0}^{\infty} \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22})!}{N_{11}!N_{12}!N_{21}!N_{22}!} \\ &\quad \times [A_{11}]^{N_{11}} [A_{12}]^{N_{12}} [A_{21}]^{N_{21}} [A_{22}]^{N_{22}} \end{aligned} \quad (13)$$

となり、(11)と一致する。 $N_{\alpha\beta}$ の和が、(13)のように書けることは、以下のように考えればよい。

(12)において、まず、 n を固定する。このとき、残りの m 、 j 、 k の和は、合計が n となるように、負でない整数を重複を許して $N_{\alpha\beta}$ に振り分けるすべての場合の可能性について過不足なく足し挙げたものになっていることは、2項展開を2回繰り返し用いたものであるから自明である。例えば、 $n = 0$ のときは、 $N_{11} = N_{12} = N_{21} = N_{22} = 0$ のみ。 $n = 2$ のときは、表1のように、すべての組み合わせを加えることを示している。したがって、 n を0から無限大まで加えれば、 $N_{\alpha\beta}$ を0から無限大まで、過不足なくすべて加え合わせた和になっている。

表1: $n = 2$ の場合の組み合わせ ($\ell = 0$ のとき)

m	j	k	N_{11}	N_{12}	N_{21}	N_{22}
0	0	0	0	0	2	0
0	0	1	0	0	1	1
0	0	2	0	0	0	2
1	0	0	0	1	1	0
1	0	1	0	1	0	1
1	1	0	1	0	1	0
1	1	1	1	0	0	1
2	0	0	0	2	0	0
2	1	0	1	1	0	0
2	2	0	2	0	0	0

Ⅲ. $\ell = 1$ の場合の証明

一般の ℓ の場合を示す前に、参考のために $\ell = 1$ の場合の証明を示す。(2)の $\ell = 1$ の項 W_1 は

$$W_1 = \sum_{\{N_{\alpha\beta}:1\}} \frac{(N_{11} + N_{12})!(N_{22} + N_{12})!(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)!}{(N_{11} + N_{12} - 1)!(N_{22} + N_{12} - 1)!} \times \prod_{\alpha,\beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (14)$$

と与えられる。

一方、(5)を $(\tilde{e} - 1)$ で展開した1次の項 V_1 は、

$$\begin{aligned} V_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} n+1 C_1 [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^n [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+1)!}{(m-j)!j!(n-m-k)!k!} \\ &\quad \times [A_{11}]^j [A_{12}]^{m-j} [A_{21}]^{n-m-k} [A_{22}]^k [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}] \end{aligned} \quad (15)$$

となる。まず、 $A_{11}A_{22}$ の項は

$$\begin{aligned} &V_1^{(1)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+1)!}{(m-j)!j!(n-m-k)!k!} [A_{11}]^{j+1} [A_{12}]^{m-j} [A_{21}]^{n-m-k} [A_{22}]^{k+1} \\ &= \sum_{N_{11}=1}^{\infty} \sum_{N_{12}=0}^{\infty} \sum_{N_{21}=0}^{\infty} \sum_{N_{22}=1}^{\infty} \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)!}{(N_{11} - 1)!N_{12}!N_{21}!(N_{22} - 1)!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \end{aligned} \quad (16)$$

$$= \sum_{N_{11}=1}^{\infty} \sum_{N_{12}=0}^{\infty} \sum_{N_{21}=0}^{\infty} \sum_{N_{22}=1}^{\infty} \frac{N_{11}N_{22}(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)!}{N_{11}!N_{12}!N_{21}!N_{22}!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (17)$$

ここで、 $j+1 = N_{11}$ 、 $m-j = N_{12}$ 、 $n-m-k = N_{21}$ 、 $k+1 = N_{22}$ とにおいて、 $N_{\alpha\beta}$ の和に置き換えた。

同様に、 A_{12} 、 $-A_{12}A_{21}$ の項は、

$$\begin{aligned} & V_1^{(2)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+1)!}{(m-j)!j!(n-m-k)!k!} [A_{11}]^j [A_{12}]^{m-j+1} [A_{21}]^{n-m-k} [A_{22}]^k \\ &= \sum_{N_{11}=0}^{\infty} \sum_{N_{12}=1}^{\infty} \sum_{N_{21}=0}^{\infty} \sum_{N_{22}=0}^{\infty} \frac{N_{12}(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22})!}{N_{11}!N_{12}!N_{21}!N_{22}!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、 $j = N_{11}$ 、 $m-j+1 = N_{12}$ 、 $n-m-k = N_{21}$ 、 $k = N_{22}$ とおいた。

$$\begin{aligned} & V_1^{(3)} \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \frac{(n+1)!}{(m-j)!j!(n-m-k)!k!} [A_{11}]^j [A_{12}]^{m-j+1} [A_{21}]^{n-m-k+1} [A_{22}]^k \\ &= - \sum_{N_{11}=0}^{\infty} \sum_{N_{12}=1}^{\infty} \sum_{N_{21}=1}^{\infty} \sum_{N_{22}=0}^{\infty} \frac{N_{12}N_{21}(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)!}{N_{11}!N_{12}!N_{21}!N_{22}!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \end{aligned} \quad (19)$$

ここで、 $j = N_{11}$ 、 $m-j+1 = N_{12}$ 、 $n-m-k+1 = N_{21}$ 、 $k = N_{22}$ とおいた。

$N_{11} + N_{12} + N_{22} + N_{12} \geq 1$ を満たすように、 $N_{\alpha\beta}$ の和をとることにすると、3つの式をまとめることができる³⁾ (このことを、 $[N_{\alpha\beta} : 1]$ と表記する)。結果は、

$$\begin{aligned} V_1' &= \sum_{[N_{\alpha\beta}:1]} \frac{(N_{11} + N_{12})(N_{22} + N_{12})(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)!}{N_{11}!N_{12}!N_{21}!N_{22}!} \\ &\quad \times \prod_{\alpha,\beta=1}^2 [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \end{aligned} \quad (20)$$

となる。ここで、 V_1' の $[N_{\alpha\beta} : 1]$ は、(14)の $\{N_{\alpha\beta} : 1\}$ には含まれない $N_{\alpha\beta}$ を含んでいる。すなわち、 $(N_{11}, N_{12}, N_{21}, N_{22}) = (1, 0, 0, 0), (0, 0, 1, 0), (0, 0, 0, 1)$ の3組である。しかしながら、(20)の表式では、この場合の寄与は0であるから、 $[N_{\alpha\beta} : 1]$ を $\{N_{\alpha\beta} : 1\}$ としてよい。したがって、 $W_1 = V_1' = V_1$ が成り立つ。

IV. 一般の ℓ の場合の証明

次に一般の ℓ の場合を示す。(2)の ℓ 次の項 W_ℓ は、

$$W_\ell = \sum_{\{N_{\alpha\beta}:\ell\}} \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})! (\sum_{\alpha,\beta=1}^2 N_{\alpha\beta} - \ell)!}{\ell! (N_{11} + N_{12} - \ell)! (N_{22} + N_{12} - \ell)!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \quad (21)$$

一方、(5)の ℓ 次の項 V_ℓ は、

$$\begin{aligned} V_\ell &= \sum_{n=0}^{\infty} n+\ell C_\ell [A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22}]^n [A_{11}A_{22} + A_{12} - A_{12}A_{21}]^\ell \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \sum_{j=0}^m \sum_{k=0}^{n-m} \sum_{r=0}^{\ell} \sum_{s=0}^r \frac{(\sum_{\alpha,\beta=1}^2 N_{\alpha\beta} - \ell + r - s)! N_{11}! N_{12}! N_{21}! N_{22}!}{\ell! (N_{11} - \ell + r)! (N_{12} - r)! (N_{21} - s)! (N_{22} - \ell + r)!} \\ &\quad \times \frac{(-1)^s \ell!}{(\ell - r)! (r - s)! s!} \prod_{\alpha,\beta=1}^2 \frac{1}{N_{\alpha\beta}!} [A_{\alpha\beta}]^{N_{\alpha\beta}} \end{aligned} \quad (22)$$

ここで、 $j + r = N_{11}$ 、 $m - j + \ell - r = N_{12}$ 、 $n - m - k + \ell - s - r = N_{21}$ 、 $k + r = N_{22}$ とおいた。 n 、 m 、 j 、 k の和を $N_{\alpha\beta}$ の和にすると、 $N_{11} \geq \ell - r$ 、 $N_{12} \geq r$ 、 $N_{21} \geq s$ 、 $N_{22} \geq \ell - r$ の条件がつく。この場合、 $N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} \geq \ell$ の条件を満たす $N_{\alpha\beta}$ の和をとるものとみなすことができる (これを、 $[N_{\alpha\beta} : \ell]$ と表記する)。さらに、

$$\begin{aligned} &\frac{N_{11}! N_{12}! N_{21}! N_{22}!}{(N_{11} - \ell + r)! (N_{12} - r)! (N_{21} - s)! (N_{22} - \ell + r)!} \\ &= N_{11}(N_{11} - 1) \cdots (N_{11} - \ell + r + 1) N_{12}(N_{12} - 1) \cdots (N_{12} - r + 1) \\ &\quad \times N_{21}(N_{21} - 1) \cdots (N_{21} - s + 1) N_{22}(N_{22} - 1) \cdots (N_{22} - \ell + r + 1) \end{aligned} \quad (23)$$

と書きなおす⁴⁾と、Ⅲ節と同様に、和をとるとき N_{11} 等に対する条件 $[N_{\alpha\beta} : \ell]$ は $\{N_{\alpha\beta} : \ell\}$ と同じになることが分かる。なぜなら、 $\text{Min}\{N_{11} + N_{12}, N_{22} + N_{12}\} \geq \ell$ の条件を満足しない $N_{\alpha\beta}$ では、(23)の右辺の値が0となり⁵⁾、和には影響しないためである。

したがって、(21)と(22)が等しい、すなわち、 $W_\ell = V_\ell$ が成り立つことを示すためには、

$$\begin{aligned} &\sum_{r=0}^{\ell} \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s \ell!}{(\ell - r)! (r - s)! s!} \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - \ell + r - s)! N_{11}! N_{12}! N_{21}! N_{22}!}{(N_{11} - \ell + r)! (N_{12} - r)! (N_{21} - s)! (N_{22} - \ell + r)!} \\ &= \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})! (N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - \ell)!}{(N_{11} + N_{12} - \ell)! (N_{22} + N_{12} - \ell)!} \end{aligned} \quad (24)$$

が、成り立つことを示せばよい。

$\ell = 0$ のときは、 $r = s = 0$ のみであり、両辺とも $(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22})!$ となり、一致する。

$\ell = 1$ のとき、左辺は $(r, s) = (0, 0)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(1, 1)$ の3通りの和であるから、

$$\begin{aligned}
& (N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)! [N_{11}N_{22} + (N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22})N_{12} - N_{12}N_{21}] \\
= & (N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - 1)! (N_{11} + N_{12})(N_{22} + N_{12})
\end{aligned} \tag{25}$$

となり、右辺と一致する。これは、Ⅲ節そのものである。

次に、 $\ell \geq 2$ の場合を示す。このために、以下の等式を用いる（証明は附録Aで行なう）。

$$\sum_{s=0}^r (-1)^s {}_r C_s \frac{(n+r-s)!m!}{(m-s)!} = \frac{n!(n-m+r)!}{(n-m)!} \tag{26}$$

26を用いると、24の左辺は、

$$\frac{(N_{11} + N_{12} + N_{21} + N_{22} - \ell)!}{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - \ell)!} \sum_{r=0}^{\ell} {}_{\ell} C_r \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - \ell + r)! N_{11}! N_{12}! N_{22}!}{(N_{11} - \ell + r)! (N_{12} - r)! (N_{22} - \ell + r)!} \tag{27}$$

となるから、24の右辺と比較して、

$$\begin{aligned}
& \frac{N_{11}! N_{12}! N_{22}!}{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - \ell)!} \sum_{r=0}^{\ell} {}_{\ell} C_r \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - \ell + r)!}{(N_{11} - \ell + r)! (N_{12} - r)! (N_{22} - \ell + r)!} \\
= & \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})!}{(N_{11} + N_{12} - \ell)! (N_{22} + N_{12} - \ell)!}
\end{aligned} \tag{28}$$

を示せばよい。

$\ell = 0$ のとき、 $r = 0$ のみであるから、両辺は1となり、成り立つ。

また、 $\ell = 1$ のときは、 $r = 0$ と $r = 1$ であるから、

$$\begin{aligned}
& \text{28の左辺} \\
= & \frac{N_{11} N_{22} (N_{11} + N_{12} + N_{22} - 1)! + N_{12} (N_{11} + N_{12} + N_{22})!}{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - 1)!} \\
= & N_{11} N_{22} + N_{12} (N_{11} + N_{12} + N_{22}) \\
= & (N_{11} + N_{12})(N_{22} + N_{12}) = \text{右辺}
\end{aligned} \tag{29}$$

となり、成り立つ。

$\ell = k$ のとき、成り立つとする。すなわち、

$$\begin{aligned}
& \frac{N_{11}! N_{12}! N_{22}!}{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - k)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - k + r)!}{(N_{11} - k + r)! (N_{12} - r)! (N_{22} - k + r)!} \\
= & \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})!}{(N_{11} + N_{12} - k)! (N_{22} + N_{12} - k)!}
\end{aligned} \tag{30}$$

が、成り立つとする。このとき、 $\ell = k + 1$ を考える。30を用いて、

$$\begin{aligned}
& \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})!}{(N_{11} + N_{12} - k - 1)! (N_{22} + N_{12} - k - 1)!} \\
= & (N_{11} + N_{12} - k)(N_{22} + N_{12} - k) \frac{(N_{11} + N_{12})! (N_{22} + N_{12})!}{(N_{11} + N_{12} - 1)! (N_{22} + N_{12} - k)!} \\
= & \frac{(N_{11} + N_{12} - k)(N_{22} + N_{12} - k)}{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - k)!} \\
& \times \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(N_{11} + N_{12} + N_{22} - k + r)! N_{11}! N_{12}! N_{22}!}{(N_{11} - k + r)! (N_{12} - r)! (N_{22} - k + r)!}
\end{aligned} \tag{31}$$

$(N_{11}+N_{12}-k)(N_{22}+N_{12}-k) = (N_{11}-k+r)(N_{22}-k+r) + (N_{12}-r)(N_{11}+N_{12}+N_{22}-2k+r)$
と書けるから (簡単のため以下では $n \equiv N_{11} + N_{12} + N_{22}$ 、 $N! \equiv N_{11}!N_{12}!N_{22}!$ と記す)、

$$\begin{aligned} & \frac{(N_{11} + N_{12})!(N_{22} + N_{12})!}{(N_{11} + N_{12} - k - 1)!(N_{22} + N_{12} - k - 1)!} \\ = & \frac{N!}{(n - k)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(n - k + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ & + \frac{N!}{(n - k)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(n - k + r)!(n - 2k + r)}{(N_{11} - k + r)!(N_{12} - r - 1)!(N_{22} - k + r)!} \end{aligned} \quad (32)$$

ここで、右辺第1項を F_1 、第2項を F_2 と表わすことにする。

まず、 F_1 において、 $n - k - 1 > 0$ より、 $(n - k + r)! = (n - k + r) \cdot (n - k - 1 + r)!$ と書けるから、 $n - k$ の部分 $F_1^{(1)}$ と r の部分 $F_1^{(2)}$ に分けて考える。

$$\begin{aligned} F_1^{(1)} &= \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(n - k - 1 + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ &= \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^k {}_{k+1} C_r \frac{(n - k - 1 + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ &\quad - \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=1}^k {}_k C_{r-1} \frac{(n - k - 1 + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ &= \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^{k+1} {}_{k+1} C_r \frac{(n - k - 1 + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ &\quad - \frac{N!}{(n - k - 1)!} \frac{n!}{N_{11}!(N_{12} - k - 1)!N_{22}!} \\ &\quad - \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^{k-1} {}_k C_r \frac{(n - k + r)!}{(N_{11} - k + r)!(N_{12} - r - 1)!(N_{22} - k + r)!} \\ &= \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^{k+1} {}_{k+1} C_r \frac{(n - k - 1 + r)!}{(N_{11} - k - 1 + r)!(N_{12} - r)!(N_{22} - k - 1 + r)!} \\ &\quad - \frac{N!}{(n - k - 1)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(n - k + r)!}{(N_{11} - k + r)!(N_{12} - r - 1)!(N_{22} - k + r)!} \end{aligned} \quad (33)$$

ここで、 ${}_k C_r = {}_{k+1} C_r - {}_k C_{r-1}$ の関係式を用いた。第2項では、 $r=0$ での寄与は0だから、 $r \geq 1$ のみの和をとればよいので、 $r-1 \rightarrow r$ と変換を行なった (後述の(4)を参照)。

次に、 $F_1^{(2)}$ を変形する。ここでも、 $r=0$ のとき0だから、 $r=1 \sim k$ の和とできるので、 $r-1 \rightarrow r$ と変換を行ない、 ${}_k C_{r+1}(r+1) = (k-r) {}_k C_r$ の関係式を用いると、

$$\begin{aligned} F_1^{(2)} &= \frac{N!}{(n - k)!} \sum_{r=0}^{k-1} {}_k C_{r+1} (r+1) \frac{(n - k + r)!}{(N_{11} - k + r)!(N_{12} - r - 1)!(N_{22} - k + r)!} \\ &= \frac{N!}{(n - k)!} \sum_{r=0}^{k-1} (k - r) {}_k C_r \frac{(n - k + r)!}{(N_{11} - k + r)!(N_{12} - r - 1)!(N_{22} - k + r)!} \end{aligned}$$

$$= \frac{N!}{(n-k)!} \sum_{r=0}^k (k-r) {}_k C_r \frac{(n-k+r)!}{(N_{11}-k+r)!(N_{12}-r-1)!(N_{22}-k+r)!} \quad (34)$$

最後に、 $k-r$ の係数があるので、 r の和は k まで実行しても変わらないことを用いた。

F_2 においても同様に、 $n-2k+r = n-k - (k-r)$ から、 $n-k$ の部分 $F_2^{(1)}$ と、 $-(k-r)$ の部分 $F_2^{(2)}$ に分けて考えると、

$$F_2^{(1)} = \frac{N!}{(n-k-1)!} \sum_{r=0}^k {}_k C_r \frac{(n-k+r)!}{(N_{11}-k+r)!(N_{12}-r-1)!(N_{22}-k+r)!} \quad (35)$$

$$F_2^{(2)} = -\frac{N!}{(n-k)!} \sum_{r=0}^k (k-r) {}_k C_r \frac{(n-k+r)!}{(N_{11}-k+r)!(N_{12}-r-1)!(N_{22}-k+r)!} \quad (36)$$

となる。これら③③~③⑥を加えると、 $F_1^{(1)}$ の第2項と $F_2^{(1)}$ がcancelし、 $F_1^{(2)}$ と $F_2^{(2)}$ がcancelするから、③②、すなわち③①の右辺は、 $N!$ と n を元へ戻して、

$$\frac{N_{11}!N_{12}!N_{22}!}{(N_{11}+N_{12}+N_{22}-k-1)!} \sum_{r=0}^{k+1} {}_{k+1} C_r \frac{(N_{11}+N_{12}+N_{22}-k-1+r)!}{(N_{11}-k-1+r)!(N_{12}-r)!(N_{22}-k-1+r)!} \quad (37)$$

となる。これは、②⑧の左辺の $\ell = k+1$ の場合の式に他ならない。よって、②⑧は $\ell = k+1$ でも成り立つ。

以上より、数学的帰納法により任意の ℓ で成り立つ。

これで、すべての証明が完了した。

附録A. ②⑥の証明

ここでは、②⑥の証明を与える。

$r=0$ のとき、 $s=0$ のみだから、両辺とも $n!$ で成り立つ。

$r=1$ のとき、 $s=0$ と $s=1$ であるから、

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= (-1)^0 {}_1 C_0 \frac{(n+1)!m!}{m!} + (-1)^1 {}_1 C_1 \frac{n!m!}{(m-1)!} \\ &= n! [(n+1) - m] = \frac{n!(n-m+1)!}{(n-m)!} = \text{右辺} \end{aligned} \quad (38)$$

となり、成り立つ。

$r=k$ のとき、

$$\sum_{s=0}^k (-1)^s {}_k C_s \frac{(n+k-s)!m!}{(m-s)!} = \frac{n!(n-m+k)!}{(n-m)!} \quad (39)$$

が成り立つとする。このとき、 $r=k+1$ を考える。

$$\begin{aligned}
\frac{n!(n-m+k+1)!}{(n-m)!} &= (n-m+k+1) \frac{n!(n-m+k)!}{(n-m)!} \\
&= (n+k+1-s-m+s) \sum_{s=0}^k (-1)^s {}_k C_s \frac{(n+k-s)!m!}{(m-s)!} \\
&= \sum_{s=0}^k (-1)^s {}_k C_s \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} \\
&\quad - \sum_{s=0}^k (-1)^s {}_k C_s \frac{(m-s)(n+k-s)!m!}{(m-s)!}
\end{aligned} \tag{40}$$

ここで、

$${}_k C_s = \frac{k!}{(k-s)!s!} = \frac{k+1-s}{k+1} \frac{(k+1)!}{(k+1-s)!s!} = {}_{k+1} C_s - {}_k C_{s-1} \tag{41}$$

だから (第2項は分子に s があるため、 $s=0$ のときの寄与は0となるので、 $s \geq 1$ をとるものとする)、(40)の右辺第1項は、

$$\begin{aligned}
&\sum_{s=0}^k (-1)^s {}_{k+1} C_s \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} - \sum_{s=1}^k (-1)^s {}_k C_{s-1} \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} \\
&= \sum_{s=0}^{k+1} (-1)^s {}_{k+1} C_s \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} - (-1)^{k+1} \frac{n!m!(m-k)}{(m-k)!} \\
&\quad - \sum_{s=0}^{k-1} (-1)^{s+1} {}_k C_s \frac{(m-s)(n+k-s)!m!}{(m-s)!} \\
&= \sum_{s=0}^{k+1} (-1)^s {}_{k+1} C_s \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} + \sum_{s=0}^k (-1)^s {}_k C_s \frac{(m-s)(n+k-s)!m!}{(m-s)!}
\end{aligned} \tag{42}$$

となる。(40)の右辺第2項は、(42)の右辺第2項と cancel するから、

$$\frac{n!(n-m+k+1)!}{(n-m)!} = \sum_{s=0}^{k+1} (-1)^s {}_{k+1} C_s \frac{(n+k+1-s)!m!}{(m-s)!} \tag{43}$$

となる。したがって、 $r = k+1$ でも、成り立つ。

以上より、数学的帰納法により任意の r で成り立つ。

注および参考文献

- 1) N. Ashida, H. Nakkagawa, A. Niégawa and H. Yokota, "Diagrammatic Algorithm for Evaluating Finite-Temperature Reaction Rates", Ann. Phys. (NY) **215** (1992), 315–371 [Errata: **230** (1994), 161]. 本論文では、“論文 I” と引用する。
- 2) 下記の論文の中で、間接的に正しいことを指摘しているが、直接的な証明はない。A. Niégawa, "Finite-temperature reaction-rate formula: Finite volume system, detailed balance, $T \rightarrow 0$ limit, and cutting

rules", Phys. Rev. D **57** (1998), 1379–1393.

- 3) $N_{\alpha\beta}$ がすべての負でない整数をとっても問題がないように思えるが、最終的な式（例えば、(20)など）の分子の $(\sum_{\alpha,\beta=1}^2 N_{\alpha\beta} - \ell)!$ が発散してしまうため、 $[N_{\alpha\beta} : \ell]$ は最低限の条件として必要である。
- 4) ℓ 、 r や s の値によっては、右辺に $(N_{\alpha\beta} + 1)$ が現れるが、これは左辺の分子分母が、ともに $N_{\alpha\beta}!$ となっているためである。実際は cancel して 1 となるので、右辺には $N_{\alpha\beta}$ の項は現れないとして処理する。(19)の $(N_{11} + N_{12} + 1)$ などの場合も同じで、この場合は右辺に $N_{11} + N_{12}$ の項はないものとする。
- 5) 分母に現れる $(-n)!$ は、ガンマ関数 $\Gamma(x)$ 用いて、 $(-n)! = \Gamma(1 - n)$ と書くことができる。 x が 0 および負の整数のとき、 $\Gamma(x)$ は発散するので、 n を自然数とすると、分母の $(-n)!$ は発散し、この項の寄与を 0 とみなすことも可能である。なお、分子の $(\sum_{\alpha,\beta=1}^2 N_{\alpha\beta} - \ell)!$ は、 $[N_{\alpha\beta} : \ell]$ の条件のため、発散しない。注 3) を見よ。いずれにしても、 $[N_{\alpha\beta} : \ell]$ は $\{N_{\alpha\beta} : \ell\}$ とみなして和をとることができる。

Summary

In the previous paper [Ann. Phys. (NY) **215** (1992), 315], we established a diagrammatic algorithm to evaluate finite-temperature reaction rates. For example, we presented a complete analysis of the "bead diagram" of the above generalized self-energy type diagrams, i.e., the one-particle reducible diagram constructed by linking an arbitrary number of the generalized self-energy type diagrams. In this case, we would like to guess that the reaction rate takes the compact form. However, we have not yet succeeded to prove it. The purpose of this paper is to prove that the reaction rate is expressed as the closed compact form.