

線形応答理論

時間変動する外場に対する応答

平衡状態

密度行列

$$P_{eq} = e^{-\beta H}$$

物理量 B の期待値

$$\langle B \rangle = \frac{\text{Tr}\{P_{eq} B\}}{\text{Tr}\{P_{eq}\}} = \frac{\text{Tr}\{e^{-\beta H} B\}}{Z}$$

分配関数

$$Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\}$$

一般の状態
(非平衡状態)

密度行列の定義

$$P = \sum_s |s\rangle P(s) \langle s|$$

物理量 B の期待値

$$\langle B \rangle = \frac{\text{Tr}\{P B\}}{\text{Tr}\{P\}}$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |s\rangle = H |s\rangle$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m| = \langle m| H$$

非平衡状態

$$i\hbar \frac{\partial P}{\partial t} = \sum_s H |s\rangle P(s) \langle s| - \sum_s |s\rangle P(s) \langle s| H = [H, P]$$

密度行列は変化する

平衡状態

$$i\hbar \frac{\partial P_{eq}}{\partial t} = [H, P_{eq}] = 0$$

密度行列は不変

線形応答理論

時間変動する摂動に対する密度行列の変化

ハミルトニアン

$$H = H_0 + H' \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{時間に依存する摂動} \\ \uparrow \\ \text{時間に依存しない部分} \end{array}$$

密度行列

$$P = P_{eq} + P' \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{平衡状態からのずれの部分} \\ \uparrow \\ \text{平衡状態の密度行列} \end{array}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial P_{eq}}{\partial t} + i\hbar \frac{\partial P'}{\partial t} \\ &= [H, P] = [H_0 + H', P_{eq} + P'] \\ &= [H_0, P_{eq}] + [H_0, P'] + [H', P_{eq}] + [H', P'] \\ &\cong [H_0, P_{eq}] + [H_0, P'] + [H', P_{eq}] \end{aligned}$$



$$i\hbar \frac{\partial P'}{\partial t} \cong [H_0, P'] + [H', P_{eq}]$$

$$P' = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [H', P_{eq}] e^{iH_0(t-t')/\hbar} dt'$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P'}{\partial t} &= e^{-iH_0 \times 0 / \hbar} [H', P_{eq}] e^{iH_0 \times 0 / \hbar} \\ &\quad + \frac{-i}{\hbar} H_0 \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [H', P_{eq}] e^{iH_0(t-t')/\hbar} dt' \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [H', P_{eq}] e^{iH_0(t-t')/\hbar} dt' H_0 = [H', P_{eq}] + H_0 P' - P' H_0 \end{aligned}$$

久保公式

時間変動する摂動に対する応答

摂動ハミルトニアン $H' = Ae^{-i\omega t}$ に応答する物理量 B を考える

ただし 平衡状態での期待値は0とする $\langle B \rangle = \text{Tr}\{P_{eq} B\} / Z = 0$

摂動に応答する物理量 B

$$\langle B \rangle = \frac{\text{Tr}\{P B\}}{\text{Tr}\{P\}} = \frac{\text{Tr}\{P_{eq} B + P' B\}}{Z} = \frac{\text{Tr}\{P' B\}}{Z} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{-i\omega t'} \text{Tr}\left\{e^{-iH_0(t-t')/\hbar} [A, e^{-\beta H_0}] e^{iH_0(t-t')/\hbar} B\right\} dt' / Z$$

$$\langle B \rangle = B(\omega) e^{-i\omega t} \quad t' = t - s \quad B(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega s} \text{Tr}\left\{e^{-iH_0 s/\hbar} [A, e^{-\beta H_0}] e^{iH_0 s/\hbar} B\right\} ds / Z$$

久保公式

$$B(\omega) = \chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega s} \langle [A, B(s)] \rangle_0 ds$$

$$B(s) = e^{iH_0 s/\hbar} B e^{-iH_0 s/\hbar}$$

動的帯磁率

$$A = g\mu_B B_z S_z \quad B = M = g\mu_B S_z$$

$$\chi(\omega) = \frac{i(g\mu_B)^2}{\hbar} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} \langle [S_z(0), S_z(t)] \rangle_0 dt$$

平衡系の相関関数によって非平衡系の応答係数が決まる