Linear Response Theory

1　応答関数

演算子 A の時間に依存する外場

$$H_{\mathrm{ext}}(t) = -\int A(\vec{r})F(\vec{r},t) \tag{1.1}$$

に対する演算子 B の応答を考える．まず, 外場がパルスの場合

$$F(\vec{r},t) = \delta(\vec{r})\delta(t) \tag{1.2}$$

における演算子 B の平均値の変化を

$$< \Delta B(\vec{r},t) >= \chi_{AB}(\vec{r},t) \tag{1.3}$$

とする．この $\chi_{AB}(\vec{r},t)$ が応答関数である. 因果律より,$\chi_{AB}(\vec{r},t<0)=0$
外場はパルスの重ね合わせで表せる.

$$F(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r'}dt'F(\vec{r'},t')\delta(\vec{r}-\vec{r'})\delta(t-t') \tag{1.4}$$

線形応答を考えているので, 応答は

$$\begin{aligned} < \Delta B(\vec{r},t) > &= \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\vec{r'}\chi_{AB}(\vec{r}-\vec{r'},t-t')F(\vec{r'},t') \\ &= \int_{0}^{\infty} dt' \int d\vec{r'}\chi_{AB}(\vec{r'},t')F(\vec{r}-\vec{r'},t-t') \end{aligned} \tag{1.5}$$

Fourier 変換

$$F(\vec{q},\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{r}e^{i(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega t)}F(\vec{r},t) \tag{1.6}$$

より,

$$< \Delta B(\vec{q},\omega) >= \chi_{AB}(\vec{q'},\omega')F(\vec{q'},\omega') \tag{1.7}$$

2　久保公式

線形応答における応答関数 χ_{AB} は外場のないときの A と B の相関で与えられる.

$$\chi_{AB}(\vec{r}-\vec{r'}, t-t') = \frac{i}{\hbar}\Theta(t-t') < [B(\vec{r}, t), A(\vec{r'}, t')] >_0 \tag{2.1}$$

ここで $A(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}A(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

3　Kramers-Kronig の関係式

応答関数 χ_{AB} の実部, 虚部の関係式

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\vec{q}, \omega')}{\omega' - \omega} \tag{3.1}$$

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\vec{q}, \omega')}{\omega' - \omega} \tag{3.2}$$

4　揺動散逸定理

外場に対する応答と熱平衡状態の自発的なゆらぎに対する応答と同じである.

$$C_{B^\dagger B}(\vec{q}, \omega) = \frac{2\hbar}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\,\mathrm{Im}\,\chi_{B^\dagger B}(\vec{q}, \omega) \tag{4.1}$$

$S(\vec{q}, \omega) = C_{B^\dagger B}(\vec{q}, \omega)$ は揺動スペクトル, $C_{AB}(\vec{r}-\vec{r'}, t-t') =< B(\vec{r}, t)A(\vec{r'}, t') >_0$

$$< |B(\vec{q})|^2 >_0 = \frac{\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)\mathrm{Im}\,\chi_{B^\dagger B}(\vec{q}, \omega) \tag{4.2}$$