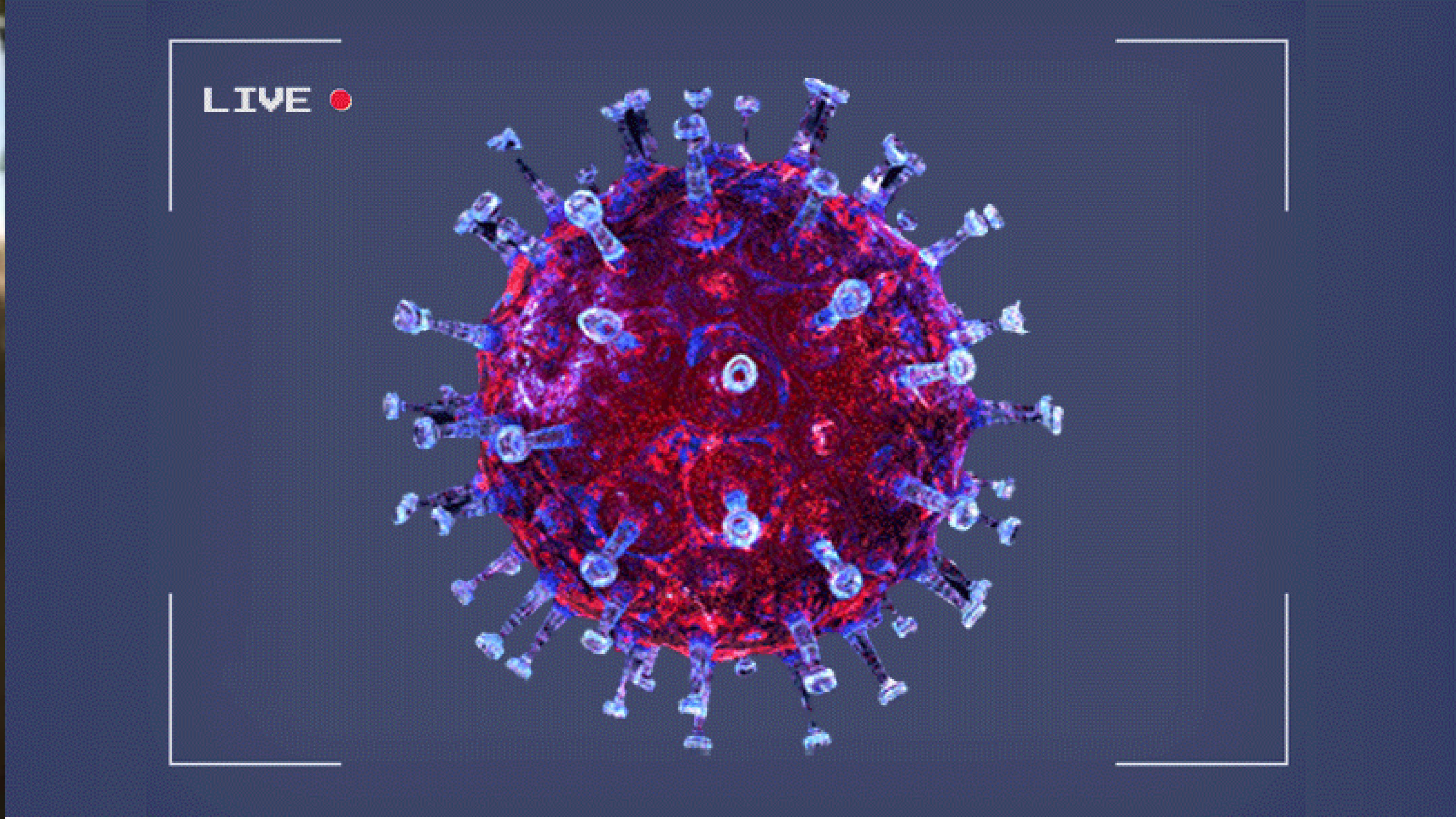


ФДТ, теория линейного отклика, формулы Кубо

Лекция 12

Двухвременные запаздывающие функции Грина и Флуктуационно-диссипативная теорема

Двухвременные запаздывающие функции Грина и Флуктуационно-диссипативная теорема

$$G^{K}_{AB}(t,t') = -i\left\langle \left\{ A(t), B(t') \right\}_{+} \right\rangle, \text{ Keldysh g.f.}$$

$$G^{r}_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\left\langle \left[A(t), B(t') \right]_{-} \right\rangle, \text{retarded g.f.}$$

$$G^{a}_{AB}(t,t') = i\theta(t'-t)\left\langle \left[A(t'), B(t) \right]_{-} \right\rangle. \text{ advanced g.f.}$$

Здесь $A(t), B(t)$ – операторы в представлении Гейзенберга.

Читать учебник Максимова-Полищука...

Двухвременные запаздывающие функции Грина и Флуктуационно-диссипативная теорема

$$G^K_{AB}(t,t') = -i\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left\{A(t),B(t')\right\}_+\right) = -i\left\langle\left\{A(t),B(t')\right\}_+\right\rangle,$$

$$G^r_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left[A(t),B(t')\right]_-\right) =$$

$$= -i\theta(t-t')\left\langle\left[A(t),B(t')\right]_-\right\rangle = \left\langle\left\langle A(t)\,|\,B(t')\right\rangle\right\rangle,$$

$$G^a_{AB}(t,t') = i\theta(t'-t)\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left[A(t),B(t')\right]_-\right).$$

Здесь $A(t), B(t)$ – операторы в представлении Гейзенберга.

Читать учебник Максимова-Полищука…

В классическом пределе:

$$G^{K}_{AB}(t,t') = -i\left\langle\left\{A(t),B(t')\right\}_{+}\right\rangle \to -2i\left\langle A(t)B(t')\right\rangle,$$

$$G^{r}_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\left\langle\left[A(t),B(t')\right]_{-}\right\rangle \to \theta(t-t')\hbar\left\langle\left\{A(t),B(t')\right\}_{P}\right\rangle,$$

Здесь $A(t), B(t)$ – *наблюдаемые*, зависящие от времени.

$$\{f,g\}_P = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right),$$

$$\frac{i}{\hbar}[\hat{f},\hat{g}]_{-} \to \{f,g\}_P.$$

В Гейзенберговском представлении операторы зависят от времени,
а матрица плотности --нет, что очень удобно... См. учебник Белоусова.
Важно, что классический предел Гейзенберговских операторов наблюдаемых --
классические наблюдаемые, зависящие от времени.

Итак, что мы делаем дальше:

1) Напишем функции грина в базисе собственных функций Гамильтониана.

2) Гамильтониан системы будем считать независящим от времени.

3) Будем усреднять по равновесной матрице плотности.

Для любого оператора и произвольного полного ортонормированного базиса:

$$\boxed{A = \sum_{n,m} \left|n\right\rangle\left\langle m\right| A_{nm}, \quad A_{nm} = \left\langle n\right|A\left|m\right\rangle.}$$

$$\boxed{\mathrm{Sp}\ldots = \mathrm{tr}\ldots = \sum_{n} \left\langle n\right|\ldots\left|n\right\rangle.}$$

$$G^{r}_{AB}(t,t') \equiv \langle\langle A(t)\,|\,B(t')\rangle\rangle = -i\theta(t-t')\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left[A(t),B(t')\right]_-\right),$$

$$\mathrm{Sp}\left(\rho\left[A(t),B(t')\right]_-\right) = Z^{-1}\,\mathrm{Sp}\left(e^{-\beta H}\left[e^{iHt}Ae^{-iHt},e^{iHt'}Be^{-iHt'}\right]_-\right) =$$

$$= Z^{-1}\,\mathrm{Sp}\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} - e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n}\langle n|\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} - e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right)|n\rangle =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} - e^{-\beta E_n}e^{iE_nt'}B_{nm}e^{-iE_mt'}e^{iE_mt}A_{mn}e^{-iE_mt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} - e^{-\beta E_m}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_nt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right).$$

$$\boxed{A = \sum_{n,m}|n\rangle\langle m|A_{nm}, \quad A_{nm} = \langle n|A|m\rangle.}$$

Таким образом,

$$G^r_{AB}(t,t') \equiv \langle\langle A(t) \mid B(t') \rangle\rangle = -i\theta(t-t')\,\mathrm{Sp}\Big(\rho\big[A(t),B(t')\big]_-\Big) =$$

$$= G^r_{AB}(t-t') = -i\theta(t-t')Z^{-1}\sum_{n,m} A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right).$$

Далее найдем преобразование Фурье от этой корреляционной функции

$$G^r_{AB}(t-t') \equiv -i\theta(t-t')Z^{-1}\sum_{n,m} A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}\right),$$

$$G^r_{AB}(\omega)=\int G^r_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t')=$$

$$=-iZ^{-1}\sum_{n,m}\int_0^\infty e^{i(E_n-E_m)\tau+i\omega\tau-\delta\tau}d\tau\,A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}\right)=$$

$$=\frac{-iZ^{-1}}{i(E_n-E_m)+i\omega-\delta}e^{i(E_n-E_m)\tau+i\omega\tau-\delta\tau}\Big|_0^\infty A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}\right)=$$

$$=\frac{iZ^{-1}}{i(E_n-E_m)+i\omega-\delta}A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n}-e^{-\beta E_m}\right).$$

$$G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') =$$

$$= \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega + i\delta} A_{nm} B_{mn} \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m} \right).$$

$$G^r_{AB}(\omega) = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0}\,dx$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\Omega) = Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta E_m)\right) A_{nm} B_{mn} \delta\left(\Omega - E_m + E_n\right) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, G^R_{AB}(\Omega),$$

Итак, что мы получили для запаздывающего коррелятора

$$G^r_{AB}(t,t') = -i\theta(t-t')\,\mathrm{Sp}\Big(\rho\big[A(t),B(t')\big]_-\Big) = \big\langle\big\langle A(t)\,|\,B(t')\big\rangle\big\rangle$$

$$G^r_{AB}(\omega) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega + i\delta}\sum_n A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0}\,dx,$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\Omega) = Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta E_m)\right)A_{nm}B_{mn}\delta\left(\Omega - E_m + E_n\right) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,G^R_{AB}(\Omega).$$

Если все это сделать для опережающего коррелятора

$$G^a_{AB}(t,t') = i\theta(t'-t)\,\mathrm{Sp}\Big(\rho\big[A(t),B(t')\big]_-\Big).$$

$$G^a_{AB}(\omega) = \frac{Z^{-1}}{(E_n - E_m) + \omega - i\delta}\sum_n A_{nm}B_{mn}\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right) = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x - i0}dx,$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\Omega) = Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta E_m)\right)A_{nm}B_{mn}\delta\left(\Omega - E_m + E_n\right) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,G^R_{AB}(\Omega).$$

Если все это сделать для Келдышевского коррелятора

$$G^K_{AB}(t,t') = -i\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left\{A(t), B(t')\right\}_+\right).$$

$$\boxed{\begin{aligned}G^K_{AB}(\omega) &= \int G^K_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \\ &= -2\pi i\left(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu}\,\delta\left(\omega - E_\mu + E_\nu\right).\end{aligned}}$$

$$G^K_{AB}(t,t') = -i\,\mathrm{Sp}\left(\rho\left\{A(t), B(t')\right\}\right),$$

$$\mathrm{Sp}\left(\rho\left\{A(t), B(t')\right\}\right) = Z^{-1}\,\mathrm{Sp}\left(e^{-\beta H}\left\{e^{iHt}Ae^{-iHt}, e^{iHt'}Be^{-iHt'}\right\}\right) =$$

$$= Z^{-1}\,\mathrm{Sp}\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} + e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_n \left\langle n\right|\left(e^{-\beta H}e^{iHt}Ae^{-iHt}e^{iHt'}Be^{-iHt'} + e^{-\beta H}e^{iHt'}Be^{-iHt'}e^{iHt}Ae^{-iHt}\right)\left|n\right\rangle =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} + e^{-\beta E_n}e^{iE_nt'}B_{nm}e^{-iE_mt'}e^{iE_mt}A_{mn}e^{-iE_mt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}\left(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_mt}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'} + e^{-\beta E_m}e^{iE_mt'}B_{mn}e^{-iE_nt'}e^{iE_nt}A_{nm}e^{-iE_nt}\right) =$$

$$= Z^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}\right).$$

$$G_{AB}^{K}(t,t')=-i\,\mathrm{Sp}\Big(\rho\big\{A(t),B(t')\big\}\Big),$$

$$G_{AB}^{K}(t,t')=-i\,\mathrm{Sp}\Big(\rho\big\{A(t),B(t')\big\}\Big)=$$

$$=-iZ^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}e^{i(E_n-E_m)(t-t')}\left(e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_m}\right),$$

$$G_{AB}^{K}(\omega)=-iZ^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(E_n-E_m)(t-t')+i\omega(t-t')}d(t-t')\left(e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_m}\right)=$$

$$=-i2\pi Z^{-1}\sum_{n,m}A_{nm}B_{mn}\delta(E_n-E_m+\omega)\left(e^{-\beta E_n}+e^{-\beta E_m}\right).$$

Подведем итоги на одном слайде:

$$G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0}\,dx,$$

$$G^a_{AB}(\omega) = \int G^a_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x - i0}\,dx,$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\Omega) = Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta E_m)\right) A_{nm} B_{mn} \delta\left(\Omega - E_m + E_n\right) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, G^R_{AB}(\Omega),$$

$$G^K_{AB}(\omega) = \int G^K_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = -2\pi i\left(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega - E_\mu + E_\nu\right).$$

Докажем
Флуктуационно-Диссипативную теорему
(ФДТ)

$$G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0}dx,$$

$$G^a_{AB}(\omega) = \int G^a_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x - i0}dx,$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\Omega) = Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_n) - \exp(-\beta E_m)\right) A_{nm} B_{mn}\,\delta\left(\Omega - E_m + E_n\right) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,G^R_{AB}(\Omega),$$

$$G^K_{AB}(\omega) = \int G^K_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = -2\pi i\left(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu}\,\delta\left(\omega - E_\mu + E_\nu\right).$$

$$\boxed{\begin{aligned} G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega) = 2i\,\mathrm{Im}\,G^r_{AB}(\omega) = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0} - \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x - i0}dx = \\ = -2\pi i \int \mathcal{A}_{spf}(x)\,\delta(\omega - x)\,dx = -2\pi i\,\mathcal{A}_{spf}(\omega). \end{aligned}}$$

$$G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega) = -2\pi i Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega + E_\mu - E_\nu\right),$$

$$\left(G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = 2i\,\mathrm{Im}\,G^r_{AB}(\omega)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) =$$

$$= 2\pi i Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega + E_\mu - E_\nu\right)\coth\left(\frac{-E_\mu + E_\nu}{2T}\right) =$$

$$= 2\pi i Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega + E_\mu - E_\nu\right)\left(\frac{e^{\beta\left(E_\nu - E_\mu\right)} + 1}{e^{\beta\left(E_\nu - E_\mu\right)} - 1}\right) =$$

$$= 2\pi i Z^{-1}\left(\cancel{\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)}\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega + E_\mu - E_\nu\right)\left(\frac{e^{\beta\left(-E_\mu\right)} + e^{\beta\left(-E_\nu\right)}}{\cancel{e^{\beta\left(-E_\mu\right)} - e^{\beta\left(-E_\nu\right)}}}\right) =$$

$$= 2\pi i Z^{-1}\left(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\right) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \delta\left(\omega + E_\mu - E_\nu\right) = G^K_{AB}(\omega).$$

Итак,
флуктуационно-диссипативная теорема,
это связь между корреляционными функциями:

$$G_{AB}^{K}(\omega)=\left(G_{AB}^{r}(\omega)-G_{AB}^{a}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)=2i\,\mathrm{Im}\left(G_{AB}^{r}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

Итак,
флуктуационно-диссипативная теорема (ФДТ),
это связь между корреляционными функциями:

$$G_{AB}^{K}(t,t') = -iSp\left(\rho\left\{A(t), B(t')\right\}_{+}\right),$$

$$G_{AB}^{r}(t,t') = -i\theta(t-t')Sp\left(\rho\left[A(t), B(t')\right]_{-}\right) = \left\langle\left\langle A(t) \mid B(t')\right\rangle\right\rangle.$$

$$G_{AB}^{K}(\omega) = \left(G_{AB}^{r}(\omega) - G_{AB}^{a}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = 2i\,\mathrm{Im}\left(G_{AB}^{r}(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

Какие предположения мы сделали?

1) Матрица плотности – равновесная.
2) Гамильтониан системы не зависит от времени.

Подведем окончательные итоги. При равновесной матрице плотности:

$$G^r_{AB}(\omega) = \int G^r_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x + i0}\,dx,$$

$$G^a_{AB}(\omega) = \int G^a_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = \int \frac{\mathcal{A}_{spf}(x)}{\omega - x - i0}\,dx,$$

$$\mathcal{A}_{spf}(\omega) = \Big(\exp(-\beta E_\mu) - \exp(-\beta E_\nu)\Big) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu}\,\delta\Big(\omega + E_\mu - E_\nu\Big) = -\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\, G^R_{AB}(\omega),$$

$$G^K_{AB}(\omega) = \int G^K_{AB}(t-t')\,\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\,d(t-t') = -2\pi i\Big(\exp(-\beta E_\mu) + \exp(-\beta E_\nu)\Big) A_{\mu\nu} B_{\nu\mu}\,\delta\Big(\omega - E_\mu + E_\nu\Big).$$

$$\boxed{G^K_{AB}(\omega) = \Big(G^r_{AB}(\omega) - G^a_{AB}(\omega)\Big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).}$$

Зачем нам эта ФДТ нужна?

- См. иллюстративный пример во втором задании, задача 12.

- В облаке есть папка «задание». В ней выложена презентация с решением этой задачи. Там применяется ФДТ.
- Прямая ссылка на эту презентацию: https://cloud.mail.ru/public/5ts7/37guT57tn

Теория линейного отклика

6.2. Представление взаимодействия для матрицы плотности

Для матрицы плотности часто бывает удобным использовать наряду с представлением Шрёдингера также представление *взаимодействия*. Как хорошо известно из курса квантовой механики, представление взаимодействия вводится в теории возмуще-

https://en.wikipedia.org/wiki/Interaction_picture -- представление взаимодействия

Evolution	Picture		
of:	Heisenberg	Interaction	Schrödinger
Ket state	constant	$\lvert\psi_I(t)\rangle = e^{iH_{0,S}\ t/\hbar}\lvert\psi_S(t)\rangle$	$\lvert\psi_S(t)\rangle = e^{-iH_S\ t/\hbar}\lvert\psi_S(0)\rangle$
Observable	$A_H(t) = e^{iH_S\ t/\hbar}A_S e^{-iH_S\ t/\hbar}$	$A_I(t) = e^{iH_{0,S}\ t/\hbar}A_S e^{-iH_{0,S}\ t/\hbar}$	constant
Density matrix	constant	$\rho_I(t) = e^{iH_{0,S}\ t/\hbar}\rho_S(t)e^{-iH_{0,S}\ t/\hbar}$	$\rho_S(t) = e^{-iH_S\ t/\hbar}\rho_S(0)e^{iH_S\ t/\hbar}$

Теория линейного отклика

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

Представление взаимодействия «I» и представление Шредингера «S»

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\,|\psi_S(t)\rangle,$$

$$\hat{A}_I(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\,\hat{A}_S(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}.$$

$$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\hat{V}_S(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar},$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = e^{i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}\,\hat{\rho}_{\mathrm{S}}(t)e^{-i\hat{H}_{0,S}t/\hbar}.$$

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = [\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)].$$

Решим данное уравнение методом последовательных приближений.
Малый параметр – взаимодействие.

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = [\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)],$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0)]\,\mathrm{dt}'.$$

Найдем среднее значение оператора “x”

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t_0) + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(0)] = \hat{\rho}_0 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0]\,\mathrm{dt'},$$

$$\hat{\rho}_0 = Z^{-1}e^{-\hat{H}_0/T}, \text{ при } t_0 \to -\infty.$$

$$\boxed{\left\langle \hat{x} \right\rangle_t = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t)\right) \approx \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\hat{x}_I(t)\right) + \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0]\hat{x}_I(t)\,\mathrm{dt'}\right).}$$

Найдем среднее значение оператора “x”

$$\langle \hat{x} \rangle_t = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t)\right) \approx \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0 \hat{x}_I(t)\right) + \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t} [\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0] \hat{x}_I(t)\, \mathrm{d}t' \right).$$

Из теории возмущений в курсе квантовой механики мы знаем, что большая производная по времени возмущения может вызвать переходы, даже если само возмущение очень мало...

Здесь мы договоримся, что возмущение включается очень медленно, адиабатически. Будем далее считать время включения $t_0 = -\infty$.

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega_{fi} t}\, dt \right|^2$$

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t)\right) \approx \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\hat{x}_I(t)\right) + \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'),\hat{\rho}_0]\hat{x}_I(t)\,\mathrm{dt'}\right).$$

$$\mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}[\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'),\hat{\rho}_0]\hat{x}_I(t)\,\mathrm{dt'}\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\right)\hat{x}_I(t)\,\mathrm{dt'}\right) =$$

$$= \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left(\hat{x}_I(t)\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{\rho}_0 - \hat{\rho}_0\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{x}_I(t)\right)dt'\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\rho}_0[\hat{x}_I(t),\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')]_-\,dt'\right) =$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\left\langle [\hat{x}_I(t),\hat{V}_{\mathrm{I}}(t')]_- \right\rangle \mathrm{dt'}.$$

Подведем итоги. В линейном приближении по возмущению:

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \hat{x}_I(t) \right) \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{V=0} + \frac{1}{\hbar} \int\limits_{-\infty}^{t} \left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right\rangle\right\rangle \mathrm{dt}',$$

$$\left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right\rangle\right\rangle = -i\theta(t-t') \left\langle [\hat{x}_I(t), \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')]_- \right\rangle_{\rho_0}.$$

Подведем итоги. В линейном приближении по возмущению:

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\hat{x}_I(t) \right) \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{V=0} + \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right\rangle\right\rangle \mathrm{dt'},$$

$$\left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right\rangle\right\rangle = -i\theta(t-t')\left\langle [\hat{x}_I(t), \hat{V}_{\mathrm{I}}(t')]_- \right\rangle_{\rho_0} .$$

$$\delta\hat{x}(t) = \hat{x}_I(t) - \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\rho_0, V=0}$$

$$\left\langle \delta\hat{x} \right\rangle_t \approx \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \left\langle\left\langle \delta\hat{x}(t) \,|\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t') \right\rangle\right\rangle \mathrm{dt'}.$$

Вернемся к специальному виду гамильтониана взаимодействия

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

Вернемся к специальному виду гамильтониана взаимодействия

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\hat{V}=0} - \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} \left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{x}_I(t') \right\rangle\right\rangle f(t')\,\mathrm{dt}' = \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha(t,t') f(t')\,\mathrm{dt}',$$

$$-\alpha(t,t') = \frac{1}{\hbar} \left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{x}_I(t') \right\rangle\right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t') \left\langle [\hat{x}_I(t), \hat{x}_I(t')]_- \right\rangle_{\rho_0}.$$

$$-\alpha(t,t') = \left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{x}_I(t') \right\rangle\right\rangle = -\alpha(t-t'),$$

если матрица плотности равновесная.

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int\limits_{-\infty}^{t} \alpha(t-t') f(t')\, \mathrm{dt'},$$

Тогда

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\hat{x} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\boxed{\langle \hat{x} \rangle_t \approx \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{dt}'.}$$

$$\boxed{-\alpha(t-t') = \frac{1}{\hbar}\langle\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{x}_I(t')\rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle [\hat{x}_I(t), \hat{x}_I(t')]_- \rangle_{\rho_0}\,.}$$

Напишем эти соотношения в фурье-пространстве

$$\langle \hat{x} \rangle_t \approx \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{d}t',$$

$$\delta\hat{x} = \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0},$$

$$\langle \delta\hat{x} \rangle_t \approx \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{d}t' = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{d}t',$$

$$\langle \delta\hat{x} \rangle_\omega = \alpha(\omega)f(\omega).$$

Напишем эти соотношения в фурье-пространстве...

Подведем итоги:

$$\boxed{\begin{aligned}&\delta\hat{x} = \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_{\hat{V}=0}\,,\\ &\langle \delta\hat{x} \rangle_{\omega} = \alpha(\omega) f(\omega).\end{aligned}}$$

Симметрии функции отклика

$$\alpha(\omega) = \int_0^\infty \alpha(t)\, e^{i\omega t} dt. \tag{123,4}$$

Функция $\alpha(\omega)$, вообще говоря, комплексна. Обозначим ее вещественную и мнимую части посредством α' и α'':

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega). \tag{123,5}$$

Из определения (123,4) сразу видно, что

$$\alpha(-\omega) = \alpha^*(\omega). \tag{123,6}$$

Отделяя здесь вещественную и мнимую части, находим

$$\alpha'(-\omega) = \alpha'(\omega), \quad \alpha''(-\omega) = -\alpha''(\omega), \tag{123,7}$$

т. е. $\alpha'(\omega)$—четная, а $\alpha''(\omega)$—нечетная функция частоты. При $\omega = 0$ функция $\alpha''(\omega)$ меняет знак, проходя через нуль (или в некоторых случаях через бесконечность).

Диссипация энергии

Диссипация энергии

Изменение состояния тела под влиянием «силы» f сопровождается поглощением (диссипацией) энергии; источником этой энергии служит внешнее воздействие, а после поглощения телом она превращается в нем в тепло. Эта диссипация тоже может быть выражена через величину α. Для этого воспользуемся равенством

$$\frac{dE}{dt}=\frac{\overline{\partial H}}{\partial t},$$

Диссипация энергии

Изменение состояния тела под влиянием «силы» f сопровождается поглощением (диссипацией) энергии; источником этой энергии служит внешнее воздействие, а после поглощения телом она превращается в нем в тепло. Эта диссипация тоже может быть выражена через величину α. Для этого воспользуемся равенством

$$\frac{dE}{dt}=\overline{\frac{\partial H}{\partial t}},$$

согласно которому производная по времени от средней энергии тела равна среднему значению частной производной по времени от гамильтониана тела (см. § 11). Поскольку в гамильтониане явно зависит от времени лишь возмущение $\hat{V}$, то имеем

$$\frac{dE}{dt}=-\bar{x}\,\frac{df}{dt}. \tag{123,10}$$

Диссипация энергии

$$\left\langle \hat{x} \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int\limits_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{dt}',$$

$$\left\langle \delta\hat{x} \right\rangle_\omega = \alpha(\omega) f(\omega),$$

$$q(t) = \frac{\partial E}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{V} \right\rangle = -\left\langle \hat{x}\frac{\partial}{\partial t} f(t) \right\rangle = -\left\langle \hat{x} \right\rangle_t \dot{f}(t),$$ *здесь* представл. Шредингера

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} q(t)dt = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta q(t)dt = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} \left\langle \delta\hat{x} \right\rangle_t \dot{f}(t)dt = -\int \left\langle \delta\hat{x} \right\rangle_{-\omega} \dot{f}(\omega)\frac{d\omega}{2\pi} =$$

$$= -\int \alpha(-\omega) f(-\omega)(-\mathrm{i}\,\omega) f(\omega)\frac{d\omega}{2\pi} = -i\int \omega\alpha(\omega)\left|f(\omega)\right|^2 \frac{d\omega}{2\pi} =$$

$$= 2\int\limits_0^{\infty} \omega\left|f(\omega)\right|^2 \mathrm{Im}\,\alpha(\omega)\frac{d\omega}{2\pi}.$$

Диссипация энергии

$$\boxed{Q = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta q(t)dt = 2\int\limits_{0}^{\infty} \omega \left| f(\omega) \right|^2 \operatorname{Im}\alpha(\omega)\frac{d\omega}{2\pi}.}$$

Таким образом,
мнимая часть восприимчивости
определяет диссипацию энергии.

Диссипация энергии

$$\boxed{Q = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta q(t)dt = 2\int\limits_{0}^{\infty} \omega \left| f(\omega) \right|^2 \operatorname{Im} \alpha(\omega) \frac{d\omega}{2\pi}.}$$

Таким образом,
мнимая часть восприимчивости
определяет диссипацию энергии. В устойчивых
процессах энергия поглощается, т.е., Q>0.
Тогда сделаем вывод, что устойчивая система
удовлетворяет условию

$$\operatorname{Im} \alpha(\omega) > 0$$

Обратное неравенство соответствует
«взрывающимся» системам.

Соотношения Крамерса-Кронига

Общие свойства обобщенной восприимчивости в комплексной плоскости ω

$$\boxed{\alpha(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha(\omega) \mathrm{e}^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \propto \theta(t), \qquad \alpha(\omega) = \int_{0}^{\infty} \alpha(t) \mathrm{e}^{i\omega t}\, dt.}$$

- $\alpha(\omega)$ не имеет особенностей в верхней полуплоскости
- $\alpha(-\omega^*) = \alpha^*(\omega)$,
- $\alpha(i\omega'') = \alpha^*(i\omega'')$, на мнимой оси восприимчивость вещественна и монотонна,
- $\alpha(\omega)$ не имеет нулей в верхней полуплоскости
- $\alpha(\omega = 0) = \alpha_0 > 0.$

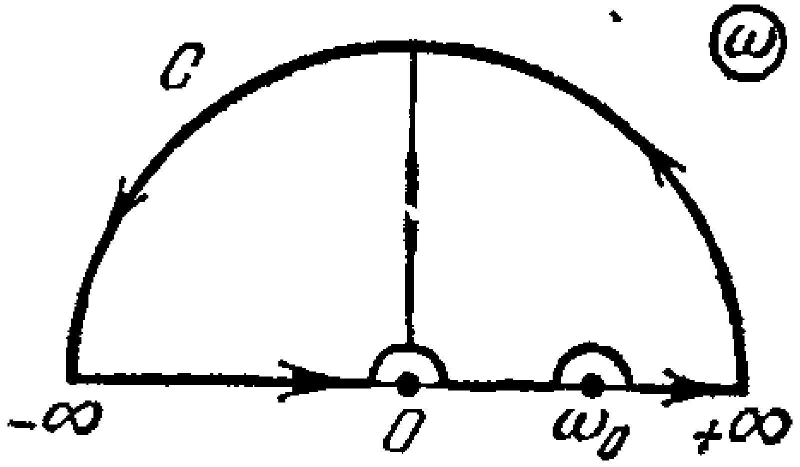
Восприимчивость не имеет особенностей (полюсов, ...) в верхней полуплоскости комплексных частот...

$$G^r_{AB}(\omega) = \int \frac{A_{spf}(x)}{\omega - x + i0} dx$$

$$\boxed{\alpha(t-t') = -\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle \hat{x}_I(t) \,|\, \hat{x}_I(t')\right\rangle\right\rangle = -\frac{1}{\hbar} G^r_{xx}(t-t').}$$

Соотношения Крамерса-Кронига

$$\int_C \frac{\alpha(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega$$



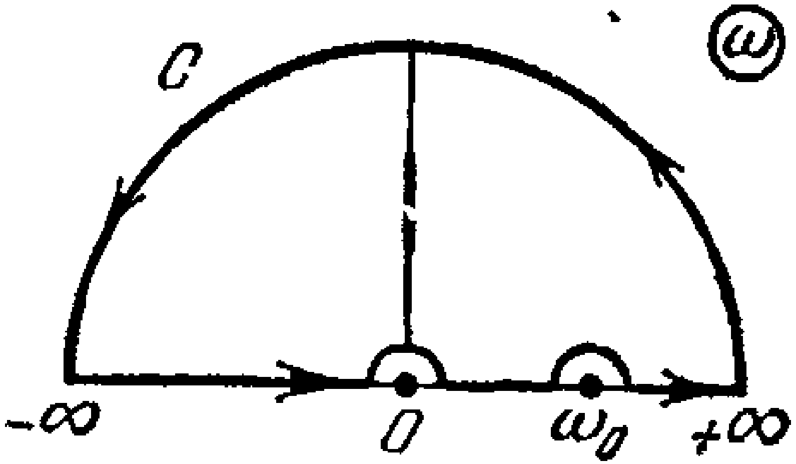
$$\boxed{0 = \int_C \frac{\alpha(\omega)}{\omega - \omega_0 + i0} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha(\omega)}{\omega - \omega_0 + i0} d\omega = -i\pi\alpha(\omega_0) + P\int \frac{\alpha(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega.}$$

$$\alpha'(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha''(\xi)}{\xi - \omega} d\xi,$$

$$\alpha''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha'(\xi)}{\xi - \omega} d\xi.$$

Интегральные тождества

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}\,d\omega = i\pi\alpha(i\omega_0).$$



$$0 = \int_C \frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}\,d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega\alpha(\omega)}{\omega^2+\omega_0^2}\,d\omega = i\pi\alpha(\mathrm{i}\,\omega_0).$$

$$\alpha(i\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{\xi\alpha''(\xi)}{\omega^2+\xi^2}\,d\xi.$$

$$\int_0^{\infty} \alpha(i\omega)\,d\omega = \int_0^{\infty} \alpha''(\omega)\,d\omega.$$

Итак

$$\alpha'(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha''(\xi)}{\xi - \omega} d\xi,$$

$$\alpha''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha'(\xi)}{\xi - \omega} d\xi.$$

Флуктуационно-диссипативная теорема для обобщенной восприимчивости

Флуктуационно-диссипативная теорема для обобщенной восприимчивости

$$G^K_{AB}(t,t') = -\frac{i}{\hbar}\,\mathrm{tr}\Big(\rho_{\mathrm{Gibbs}}\left\{A(t),B(t')\right\}_+\Big) = -\frac{i}{\hbar}\Big\langle\left\{A(t),B(t')\right\}_+\Big\rangle,$$

$$G^R_{AB}(t,t') = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\,\mathrm{tr}\Big(\rho_{\mathrm{Gibbs}}\left[A(t),B(t')\right]_-\Big) = -\theta(t-t')\frac{i}{\hbar}\Big\langle\left[A(t),B(t')\right]_-\Big\rangle = \langle\langle A(t)\,|\,B(t')\rangle\rangle.$$

$$\boxed{G^K_{AB}(\omega) = 2i\,\mathrm{Im}\Big(G^R_{AB}(\omega)\Big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}.$$

$$G^K_{xx}(t-t') = -i\,\mathrm{tr}\Big(\rho_{\mathrm{Gibbs}}\left\{\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}(t')\right\}_+\Big) = -i\Big\langle\left\{\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}(t')\right\}_+\Big\rangle,$$

$$G^R_{xx}(t-t') = -i\theta(t-t')\,\mathrm{tr}\Big(\rho_{\mathrm{Gibbs}}\left[\hat{x}(t),\hat{x}(t')\right]_-\Big) = -\theta(t-t')i\Big\langle\left[\delta\hat{x}(t),\delta\hat{x}(t')\right]_-\Big\rangle = -\hbar\alpha(t-t').$$

$$\boxed{\Big\langle\left\{x(t),x(t')\right\}_+\Big\rangle = 2\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi} = 4\hbar\int_{0}^{\infty}\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)e^{-i\omega(t-t')}\frac{d\omega}{2\pi}.}$$

Флуктуационно-диссипативная теорема для обобщенной восприимчивости

$$\left\langle \left\{ \delta\hat{x}(t), \delta\hat{x}(t') \right\}_+ \right\rangle = 2\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi} = 4\hbar \int_{0}^{\infty} \mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) e^{-i\omega(t-t')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\Downarrow$$

$$\left\langle (\delta x)^2 (t) \right\rangle = 2\hbar \int_{0}^{\infty} \mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Флуктуационно-диссипативная теорема для обобщенной восприимчивости в квазиклассическом пределе

$$\boxed{\left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = 2\hbar \int_0^\infty \mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} = \int_0^\infty \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}.}$$

Квазиклассический предел

$$\boxed{\left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = 4T \int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)}{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega = 0).}$$

$$i\pi\alpha(\omega_0) = \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha}{\omega - \omega_0} d\omega$$

$$\alpha'(\omega) = \frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha''(\xi)}{\xi - \omega} d\xi,$$

$$\alpha''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \fint_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha'(\xi)}{\xi - \omega} d\xi.$$

1) Это выражение можно получить также и прямо из распределения Гиббса в классической статистике. Пусть $x = x(q, p)$ — некоторая классическая величина. Вводя в энергию системы член $-xf$ (с постоянным f), для среднего значения $\bar{x}$ будем иметь

$$\bar{x} = \int x(q, p) \exp\left\{\frac{F - E(q, p) + x(q, p) f}{T}\right\} dq\, dp.$$

По определению $\alpha(0) = d\bar{x}/df$ при $f \to 0$; дифференцируя написанное выражение, находим

$$\alpha(0) = \frac{1}{T} \int x^2 \exp\left(\frac{F - E}{T}\right) dq\, dp = \frac{1}{T} \langle x^2 \rangle$$

(свободная энергия F тоже зависит от f, но член с производной $\partial F/\partial f$ выпадает после того, как будет положено $f = 0$, т. е. $\bar{x} = 0$).

Флуктуации под действием случайных сил

Флуктуации под действием случайных сил

Есть известное изречение: «если вы заглянете в бездну, то и бездна заглянет в вас…». Когда вы включили взаимодействие $V = -f(t)x$, связывающее вашу систему с «внешним миром» , то помимо внешних полей f(t), которые вы контролируете, на систему будут действовать шумовые случайные f(t), используя $V = -f(t)x$. Например, если f(t) внешнее электрическое поле, которое вы приложили, на систему будут действовать еще дополнительно <u>**тепловые флуктуации**</u> электрического поля! Именно они отвечают за:

$$\left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = 4T\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)}{\omega}\frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega = 0).$$

Флуктуации под действием случайных сил

$$\left\langle \delta x(\mathrm{t})\right\rangle = \int \alpha(\mathrm{t}-\mathrm{t'}) f(\mathrm{t'}) dt'$$

$$\overline{\left\langle \delta x(\mathrm{t})\right\rangle^2} = \int \alpha(\mathrm{t}-\mathrm{t'})\alpha(\mathrm{t}-\mathrm{t''}) \overline{f(\mathrm{t'}) f(\mathrm{t''})} dt' dt'',$$

$$\overline{f(\mathrm{t'}) f(\mathrm{t''})} = \int \left(f^2 \right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi},$$

$$\overline{\left\langle \delta x(\mathrm{t})\right\rangle^2} = \int \alpha(\omega_1)\alpha(\omega_2) \left(f^2 \right)_\omega e^{-i\omega_1(\mathrm{t}-\mathrm{t'})} e^{-i\omega_2(t-t'')} e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{d\omega}{2\pi} dt' dt'' =$$

$$= \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2 \right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Флуктуации, индуцируемые термостатом в равновесии должны согласовываться с ФДТ. Тогда…

Флуктуации под действием случайных сил

$$\overline{\langle \delta x(\mathrm{t}) \rangle^2} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Флуктуации, индуцируемые случайными силами в равновесии должны согласовываться с ФДТ. Тогда…

$$\begin{cases} \overline{\langle \delta x(\mathrm{t}) \rangle^2} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \left\langle \delta x^2(t) \right\rangle = \int \hbar \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}, \\ \overline{\langle \delta x(\mathrm{t}) \rangle^2} = \left\langle \delta x^2(t) \right\rangle. \end{cases}$$

$$\boxed{\int \hbar \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi}.}$$

Флуктуации под действием случайных сил

Флуктуации, индуцируемые термостатом в равновесии, должны согласовываться с ФДТ. Тогда…

$$\overline{f(\mathrm{t'})f(\mathrm{t''})} = \int \left(f^2\right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')}\frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\overline{\left\langle \delta x^2 \right\rangle} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar\,\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\boxed{\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar\,\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2} \Rightarrow \frac{2T\,\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)}{\omega|\alpha(\omega)|^2}.}$$

Флуктуации под действием случайных сил

Флуктуации, индуцируемые термостатом в равновесии, должны согласовываться с ФДТ. Тогда…

$$\overline{f(\mathrm{t}')f(\mathrm{t}'')} = \int \left(f^2\right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\overline{\left\langle \delta x^2(\mathrm{t}) \right\rangle} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\boxed{\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}.} \Rightarrow \boxed{\left(f^2\right)_\omega = \frac{2T \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)}{\omega |\alpha(\omega)|^2}.}$$

Вывод:

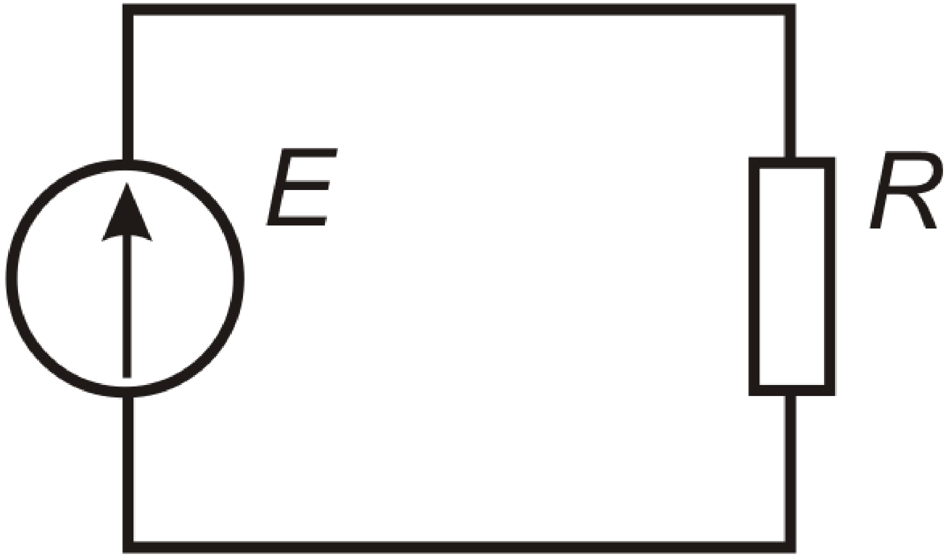
$$\overline{\left\langle \delta x^2(\mathrm{t}) \right\rangle} = \int |\,\alpha(\omega)\,|^2 \left(f^2 \right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar\, \mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\boxed{\left(f^2 \right)_\omega = \frac{\hbar\, \mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big) \coth\left(\dfrac{\hbar\omega}{2T} \right)}{|\,\alpha(\omega)\,|^2}.}$$

$$\overline{f(\mathrm{t}')f(\mathrm{t}'')} = \int \left(f^2 \right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Примеры, иллюстрирующие теорию линейного отклика и ФДТ

Пример 1: Флуктуации тока в линейных цепях. Данный пример можно найти в 9-ом томе Ландау-Лифшица (Стат. физ. Часть 2).



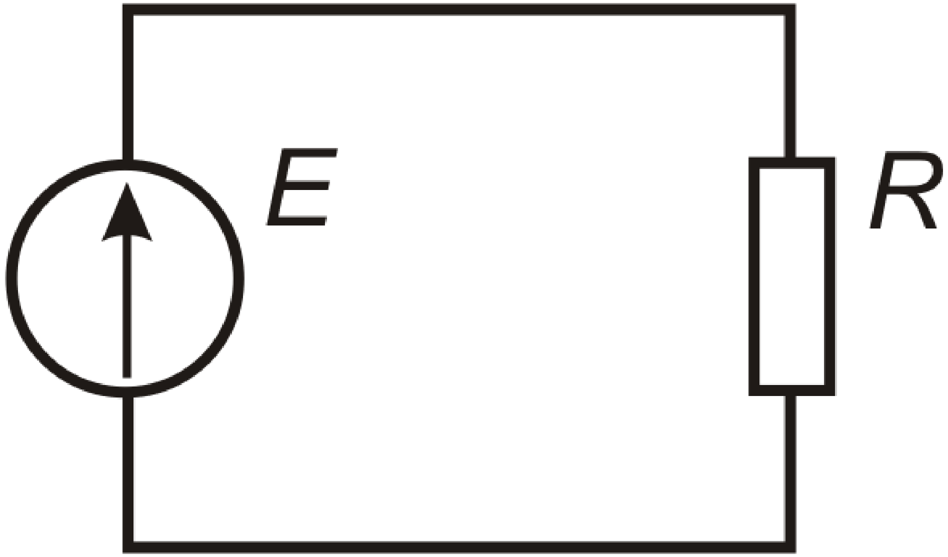
Джоулево тепло: $\boxed{Q = J\mathcal{E} = -\langle\hat{x}\rangle_t\,\dot{f}(t),}$

Это мы знаем из теории линейного отклика

Это мы получили выше в разделе про диссипацию энергии:

$$\boxed{Q(t) = \frac{\partial E}{\partial t} = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{V} \right\rangle = -\left\langle \hat{x}\frac{\partial}{\partial t} f(t) \right\rangle = -\langle\hat{x}\rangle_t\,\dot{f}(t), \text{здесь представл. Шредингера}}$$

Пример 1: Флуктуации тока в линейных цепях. Данный пример можно найти в 9-ом томе Ландау-Лифшица (Стат. физ. Часть 2).



Джоулево тепло $Q = J\mathcal{E} = -\langle \hat{x} \rangle_t \dot{f}(t),$

Это мы знаем из теории линейного отклика

Тогда, можно получается, что $\mathrm{J} = \langle \hat{x} \rangle_t,$

$$\Rightarrow \dot{f}(t) = -\mathcal{E}$$

Флуктуации тока в линейных цепях

$$Q = J\mathcal{E} = -\langle \hat{x} \rangle_t \, \dot{f}(t),$$
$$\mathrm{J} = \langle \hat{x} \rangle_t \,,$$
$$\Rightarrow \dot{f}(t) = -\mathcal{E}$$

$$\mathcal{E}_\omega = i\omega f_\omega = \mathrm{Z}_\omega \mathrm{J}_\omega, \quad \Rightarrow \mathrm{J}_\omega = \frac{i\omega}{Z_\omega} f_\omega.$$

Это мы знаем из теории линейного отклика :

$$\langle \mathrm{x}_\omega \rangle = \alpha_\omega f_\omega \quad \Rightarrow \alpha_\omega = i\omega / Z_\omega.$$

ФДТ

$$\boxed{\overline{\langle \delta x^2 \rangle} = \int \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\frac{d\omega}{2\pi}.}$$

$$\mathrm{Im}\,\alpha_\omega = \mathrm{Im}\frac{i\omega}{Z_\omega} = \frac{\omega}{\left|Z_\omega\right|^2} R_\omega.$$

Флуктуации тока в линейных цепях

$$\operatorname{Im}\alpha_\omega = \operatorname{Im}\frac{i\omega}{Z_\omega} = \frac{\omega}{|Z_\omega|^2}R_\omega .$$

$$\boxed{\begin{gathered}\overline{\langle \delta x^2 \rangle} = \int \left(\delta x^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}\left(\alpha(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)\frac{d\omega}{2\pi} .\\ \left(\delta J^2\right)_\omega = \hbar \operatorname{Im}\left(\alpha(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).\end{gathered}}$$

Это и есть формула Найквиста

Формула Найквиста, классический предел

$$\boxed{\left(\delta J^2\right)_\omega = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow \frac{2TR_\omega}{|Z_\omega|^2} \to \frac{2T}{R}.}$$

§ 78. Флуктуации тока в линейных цепях

Гвгений Михайлович Лифшиц, Лев Петрович Питаевский

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Часть 2

Получим Формулу Найквиста вторым способом: через случайные силы.

Флуктуации, индуцируемые термостатом в равновесии, должны согласовываться с ФДТ.

Получим Формулу Найквиста вторым способом: через случайные силы:

Флуктуации, индуцируемые термостатом в равновесии, должны согласовываться с ФДТ.

$$\overline{f(\mathrm{t}')f(\mathrm{t}'')} = \int \left(f^2\right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi}.$$

$$\overline{\left\langle \delta x^2 \right\rangle} = \int |\alpha(\omega)|^2 \left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int \hbar \operatorname{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \frac{d\omega}{2\pi}.$$

Спектральная плотность случайных сил, которую мы выше нашли из ФДТ в общем случае:

$$\boxed{\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}\left(\alpha(\omega)\right) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\alpha(\omega)|^2}.}$$

Флуктуации тока, как действие случайной ЭДС

$$Q = J\mathcal{E} = -\langle \hat{x} \rangle_t \dot{f}(t), \quad \Rightarrow \dot{f}(t) = -\mathcal{E},$$

$$f_\omega = \mathcal{E}_\omega / i\omega.$$

$$\overline{f(\mathrm{t})f(\mathrm{t'})} = \int \overline{f_\omega f_{\omega'}} e^{-i\omega t - i\omega' t'} \frac{d\omega}{2\pi}\frac{d\omega'}{2\pi} = \int \left(f^2\right)_\omega e^{-i\omega(t'-t'')} \frac{d\omega}{2\pi},$$

$$\overline{f_\omega f_{\omega'}} = 2\pi\delta\left(\omega+\omega'\right)\left(f^2\right)_\omega.$$

$$\boxed{\begin{aligned} &f_\omega = \mathcal{E}_\omega / i\omega, \\ &\left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \omega^2 \left(f^2\right)_\omega. \end{aligned}}$$

Формула Найквиста для ЭДС

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{\hbar \operatorname{Im}\left(\alpha(\omega)\right)\coth\left(\dfrac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\,\alpha(\omega)\,|^2}.$$

$$\boxed{f_\omega = \mathcal{E}_\omega / i\omega, \quad \left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \omega^2\left(f^2\right)_\omega.}$$

$$\alpha_\omega = i\omega / Z_\omega, \qquad \operatorname{Im}\alpha_\omega = \operatorname{Im}\frac{i\omega}{Z_\omega} = \frac{\omega}{\left|Z_\omega\right|^2}R_\omega, \qquad R_\omega = \operatorname{Re} Z_\omega.$$

$$\left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \frac{\hbar\omega^2 \operatorname{Im}\left(\alpha_\omega\right)\coth\left(\dfrac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\,\alpha_\omega\,|^2} = \hbar\omega R_\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2TR_\omega.$$

Формула Найквиста для ЭДС в классическом пределе

$$R_\omega = \operatorname{Re} Z_\omega .$$

$$\left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \hbar\omega R_\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2TR_\omega .$$

Итак:

$$\left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \frac{\hbar\omega^2 \,\mathrm{Im}\left(\alpha_\omega\right)\coth\left(\dfrac{\hbar\omega}{2T}\right)}{|\,\alpha_\omega\,|^2} = \hbar\omega R_\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2TR_\omega.$$

Можно было бы получить этот результат чуть-чуть иначе

$$\boxed{\left(\delta J^2\right)_\omega = \frac{\hbar\omega R_\omega}{|Z_\omega|^2}\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow \frac{2TR_\omega}{|Z_\omega|^2}.}$$

$$\left(\delta J^2\right)_\omega = |\alpha(\omega)|^2\left(f^2\right)_\omega = |\alpha(\omega)|^2\left(\mathcal{E}^2\right)_\omega / \omega^2,$$

$$\Rightarrow \left(\mathcal{E}^2\right)_\omega = \omega^2\left(\delta J^2\right)_\omega / |\alpha(\omega)|^2 = \hbar\omega R_\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right).$$

Пример 2. Уравнения Ланжевена

Пример 2. Уравнения Ланжевена

$$\dot{p} + \gamma \dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}\Big(U(x) - f(t)x\Big) = 0.$$

$$\boxed{\left(f^2\right)_\omega = \frac{2T\,\mathrm{Im}\big(\alpha(\omega)\big)}{\omega\,|\,\alpha(\omega)\,|^2}.}$$

Найдем обобщенную восприимчивость.

Найдем обобщенную восприимчивость. Линеаризуем для этого уравнение:

$$\dot{p}+\gamma\dot{x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(U(x)-f(t)x\right)=0.$$

$$m\delta\ddot{x}+\gamma\delta\dot{x}+\delta x\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x})=f(t).$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}U(\bar{x})=m\Omega^2 \text{ для простоты.}$$

$$m\delta\ddot{x}+\gamma\delta\dot{x}+\delta x m\Omega^2=f(t).$$

Найдем обобщенную восприимчивость.

$$m\delta\ddot{x}+\gamma\delta\dot{x}+\delta x m\Omega^2=f(t),$$

$$-m\omega^2\delta x_\omega-i\gamma\omega\delta x_\omega+\delta x_\omega m\Omega^2=f_\omega,$$

$$\delta x_\omega=\frac{f_\omega}{-m\omega^2-i\gamma\omega+m\Omega^2}\Rightarrow\alpha_\omega=\frac{1}{-m\omega^2-i\gamma\omega+m\Omega^2}.$$

Найдем обобщенную восприимчивость и флуктуацию координаты

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \hbar\,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right) \Rightarrow 2T\,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)/\,\omega,$$

$$\alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2},$$

$$\left(\delta x^2\right)_\omega = \frac{2T\gamma}{m^2\left(\omega^2 - \Omega^2\right)^2 + \left(\gamma\omega\right)^2}.$$

Найдем обобщенную восприимчивость и флуктуацию координаты в классическом пределе

$$\left\langle \delta x^2 \right\rangle = \int \left(\delta x^2 \right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 4T \int\limits_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)}{\omega} \frac{d\omega}{2\pi} = T\alpha(\omega = 0) = \frac{T}{m\Omega^2},$$

$$\alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2},$$

$$\left(\delta x^2 \right)_\omega = \frac{2T\gamma}{m^2 \left(\omega^2 - \Omega^2 \right)^2 + \left(\gamma\omega \right)^2}.$$

Задача для самоконтроля. Найти флуктуацию координаты осциллятора в квантовом пределе при T=0. Рассмотреть два предельных случая: большого и малого затухания.

Найдем спектральную плотность случайных сил в классическом пределе

$$\left(f^2\right)_\omega = \frac{2T\,\mathrm{Im}\left(\alpha(\omega)\right)}{\omega\,|\,\alpha(\omega)\,|^2} = 2T\gamma.$$

$$\Rightarrow \overline{f(t)f(t')} \equiv \int e^{-i\omega t}\left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 2T\gamma\delta(t-t').$$

$$\alpha_\omega = \frac{1}{-m\omega^2 - i\gamma\omega + m\Omega^2},$$

$$\mathrm{Im}\,\alpha_\omega = \gamma\omega\left|\alpha_\omega\right|^2.$$

В итоге,

$$\dot{p} + \gamma \dot{x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(U(x) - f(t)x\right) = 0.$$

Случайная сила (в классическом пределе) обязана удовлетворять данным условиям, если система взаимодействует с термостатом:

$$\left(f^2\right)_\omega = 2T\gamma.$$

$$\Rightarrow \overline{f(t)f(t')} \equiv \int e^{-i\omega t}\left(f^2\right)_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = 2T\gamma\delta(t-t').$$

Найдем проводимость из теории линейного отклика

Теория линейного отклика.
Обобщение.
Многокомпонентная внешняя сила.

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f_i(t)\hat{y}_i = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\boxed{\left\langle \hat{x}_i \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x}_i \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha_{ij}(t-t')f_j(t')\,\mathrm{dt}'.}$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = -\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle \hat{x}_i(t) \,|\, \hat{y}_j(t') \right\rangle\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(t')]_- \right\rangle_{\rho_0},$$

$$\alpha_{ij}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_0^{\infty}\left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t}dt.$$

Формула Друде из формулы Кубо?

$$\hat{V}(t) = -\mathbf{E}\cdot\hat{\mathbf{P}}\cos(\omega\,\mathrm{t})\,\mathrm{e}^{\varepsilon t}, \quad \varepsilon,\omega \to 0,$$
$$\hat{\mathbf{J}} = \dot{\mathbf{P}}.$$

$$\alpha_{ij}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty}\left\langle[\hat{x}_i(t),\hat{y}_j(0)]_-\right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t-\varepsilon t}dt,$$

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty}\left\langle[\hat{\mathrm{J}}_i(t),\hat{P}_j(0)]_-\right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t-\varepsilon t}dt.$$

Далее следуем учебнику Максимова... Ток и поляризацию считаем в «единичном объеме».

$$\left\langle [\hat{\mathrm{J}}_i(t), \hat{P}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} \approx \left\langle [\hat{\mathrm{J}}_i(0), \hat{P}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} e^{-t/\tau},$$

$$\left\langle [\hat{\mathrm{J}}_i(0), \hat{P}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} = \left\langle \left[\sum_a \frac{e_a}{m_a} \hat{\mathrm{p}}_{i,a}, \sum_b e_a \hat{\mathrm{x}}_{i,a} \right]_- \right\rangle_{\rho_0} = -i\hbar\delta_{ij} \frac{e^2}{m} n,$$

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty \left\langle [\hat{\mathrm{J}}_i(t), \hat{P}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t - \varepsilon t} dt = \delta_{ij} \frac{e^2}{m} n \int_0^\infty e^{i\omega t} e^{-t/\tau} dt = \delta_{ij} \frac{ne^2}{m} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau}.$$

.

Формулы Кубо-Гринвуда

Если открыть википедию по «формулам кубо» https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A4%D0%BE%D1%80%D0%BC%D1%83%D0%BB%D1%8B_%D0%93%D1%80%D0%B8%D0%BD%D0%B0_%E2%80%94_%D0%9A%D1%83%D0%B1%D0%BE

То найдется что-то такое (это все, очевидно, в классическом высокотемпературном пределе):

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = \lim_{\varepsilon \to +0} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon\tau} \left\langle J_Q^x(0) J_Q^x(\tau) \right\rangle \mathrm{d}\tau,$$

x-компонента потока тепла

Коэффициент сдвиговой вязкости

$$\eta = \lim_{\varepsilon \to +0} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^{\infty} e^{-\varepsilon\tau} \left\langle \pi^{xy}(0) \pi^{xy}(\tau) \right\rangle \mathrm{d}\tau,$$

компоненты тензора потока полного импульса.

Все это мало похоже на наши «коммутаторы» для обобщенной восприимчивости:

$$\alpha_{ij}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty \left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t} dt.$$

Коэффициент теплопроводности

$$\lambda = \lim_{\varepsilon\to+0}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{Vk_BT}\int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau}\left\langle J_Q^x(0)J_Q^x(\tau)\right\rangle \mathrm{d}\tau,$$

x-компонента потока тепла

Коэффициент сдвиговой вязкости

$$\eta = \lim_{\varepsilon\to+0}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{Vk_BT}\int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau}\left\langle \pi^{xy}(0)\pi^{xy}(\tau)\right\rangle \mathrm{d}\tau,$$

компоненты тензора потока полного импульса.

Тождество Кубо позволяет избавится от коммутаторов.

Тождество Кубо

$$[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_0] = -\hat{\rho}_0 \int_0^{\beta} \left[\hat{A}_{\mathrm{I}}(t - i\lambda), \hat{H}_0 \right] d\lambda = -i\hbar \hat{\rho}_0 \int_0^{\beta} \dot{\hat{A}}_{\mathrm{I}}(t - i\lambda) d\lambda,$$

$$\hat{\rho}_0 = Z^{-1} e^{-\hat{H}_0/T}, \quad \dot{\hat{A}}_{\mathrm{I}} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{A}_{\mathrm{I}}, \hat{H}_0 \right].$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) = [\hat{V}_{\mathrm{I}}(t), \hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t)],$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} [\hat{V}_{\mathrm{I}}(t'), \hat{\rho}_0] \mathrm{dt'},$$

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_0 - \int_0^{\beta} \int_{-\infty}^{t} \dot{\hat{V}}_{\mathrm{I}}(t' - i\lambda) \hat{\rho}_0 \, \mathrm{dt'd}\lambda.$$

Альтернативная форма записи формулы Кубо, удобная для перехода к квазиклассическому пределу.

$$\hat{\rho}_{\mathrm{I}}(t) \approx \hat{\rho}_0 - \int_0^{\beta} \int_{-\infty}^{t} \dot{\hat{V}}_{\mathrm{I}}(t'-i\lambda)\hat{\rho}_0 \,\mathrm{dt'd}\,\lambda.$$

$$\dot{V}_{\mathrm{I}} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{V}_{\mathrm{I}}, \hat{H}_0\right].$$

$$\left\langle \delta\hat{x} \right\rangle_t \approx -\int_0^{\beta} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0 \dot{V}_{\mathrm{I}}(t'-i\lambda)\hat{x}_I(t)\right)\mathrm{dt'd}\,\lambda =$$

$$= -\int_0^{\beta} \int_{-\infty}^{t} \left\langle \dot{V}_{\mathrm{I}}(t'-i\lambda)\hat{x}_I(t)\right\rangle \mathrm{dt'd}\,\lambda = -\int_0^{\beta} \int_{-\infty}^{t} \left\langle \dot{V}_{\mathrm{I}}(t')\hat{x}_I(t+i\lambda)\right\rangle \mathrm{dt'd}\,\lambda.$$

Тождества Кубо

$$\frac{i}{\hbar}\left[X_H(t),\rho\right]=\rho\int_0^{\beta}d\lambda\dot{X}_H(t-i\lambda\hbar),$$

$$\dot{X}_H(t)=-\frac{i}{\hbar}\left[X_H(t),H\right],$$

$$\rho=Z^{-1}\exp\left(-\beta H\right),\quad X_H(t)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right)X\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right).$$

Тождества Кубо

$$\frac{i}{\hbar}\left[X_H(t),\rho\right]=\rho\int_0^\beta d\lambda\dot{X}_H(t-i\lambda\hbar),\quad \dot{X}_H(t)=-\frac{i}{\hbar}\left[X_H(t),H\right],$$

$$\rho=Z^{-1}\exp\left(-\beta H\right),\quad X_H(t)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right)X\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right),$$

Доказательство тождества Кубо

$$\rho\int_0^\beta d\lambda\dot{X}_H(t-i\lambda\hbar)=-\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[X_H(t-i\lambda\hbar),H\right]=$$

$$=-\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}(t-i\lambda\hbar)H\right)X\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-i\lambda\hbar)H\right),H\right]=$$

Доказательство тождества Кубо

$$\rho\int_0^\beta d\lambda \dot{X}_H(t-i\lambda\hbar) = -\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[X_H(t-i\lambda\hbar),H\right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}(t-i\lambda\hbar)H\right)X\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(t-i\lambda\hbar)H\right),H\right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[\exp\left(\frac{i}{\hbar}(-i\lambda\hbar)H\right)X_H(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(-i\lambda\hbar)H\right),H\right] =$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\left[\exp(\lambda H)X_H(t)\exp(-\lambda H),H\right] = \frac{i}{\hbar}\rho\int_0^\beta d\lambda\frac{\partial}{\partial\lambda}\left(\exp(\lambda H)X_H(t)\exp(-\lambda H)\right) =$$

$$= \frac{i}{\hbar}\rho\exp(\beta H)X_H(t)\exp(-\beta H) - \frac{i}{\hbar}\rho X_H(t) = X_H(t)\frac{i}{\hbar}\rho - \frac{i}{\hbar}\rho X_H(t) = \frac{i}{\hbar}\left[X_H(t),\rho\right].$$

Доказательство вспомогательного тождества:

$$\mathrm{tr}\left(\rho_0 \dot{V}_{\mathrm{I}}(t'-i\lambda)\hat{x}_I(t)\right) =$$

$$= Z^{-1}\,\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0}\;\mathrm{e}^{iH_0(t'-i\lambda)/\hbar}\,\dot{V}\;\;\mathrm{e}^{-iH_0(t'-i\lambda)/\hbar}\;\mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar}\,\hat{x}\;\mathrm{e}^{-iH_0 t/\hbar}\right) =$$

$$= Z^{-1}\,\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0}\;\mathrm{e}^{iH_0 t'/\hbar}\,\dot{V}\;\;\mathrm{e}^{-iH_0 t'/\hbar}\;\mathrm{e}^{iH_0(t+i\lambda)/\hbar}\,\hat{x}\;\mathrm{e}^{iH_0(t-i\lambda)/\hbar}\right) =$$

$$= \mathrm{tr}\left(\rho_0 \dot{V}_{\mathrm{I}}\,(t')\hat{x}_I(t+i\lambda)\right).$$

Таким образом, мы доказали:

$$\frac{i}{\hbar}[X_I(t),\rho]=\rho\int_0^\beta d\lambda\,\dot{X}_I(t-i\lambda\hbar),\quad \dot{X}_I(t)=-\frac{i}{\hbar}[X_I(t),H],$$

$$\rho=Z^{-1}\exp\left(-\beta H\right),\quad X_I(t)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right)X\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right),$$

$$\mathrm{tr}\left(\rho_0\dot{V}_{\mathrm{I}}(t'-i\lambda)\hat{x}_I(t)\right)=\mathrm{tr}\left(\rho_0\dot{V}_{\mathrm{I}}\ (t')\hat{x}_I(t+i\lambda)\right).$$

Высокотемпературный предел $\beta \to 0$

$$\boxed{\begin{aligned}&\langle\hat{x}\rangle_t - \langle\hat{x}\rangle_{\rho_0, V=0} \approx -\int_0^\beta \int_{-\infty}^t \left\langle \dot{V}_\mathrm{I}(t')\hat{x}_I(t+i\lambda)\right\rangle \mathrm{d}t'\mathrm{d}\lambda \to \\ &\to -\beta \int_{-\infty}^t \left\langle \dot{V}_\mathrm{I}(t') x_I(t)\right\rangle \mathrm{d}t' = -\frac{1}{k_B T}\int_0^\infty \left\langle \dot{V}_\mathrm{I}(0) x_I(\tau)\right\rangle \mathrm{d}\tau.\end{aligned}}$$

$$\kappa = \lim_{\varepsilon \to +0} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau} \left\langle J_Q^x(0) J_Q^x(\tau)\right\rangle \mathrm{d}\tau,$$

$$\eta = \lim_{\varepsilon \to +0} \lim_{V \to \infty} \frac{1}{V k_B T} \int_0^\infty e^{-\varepsilon\tau} \langle \pi^{xy}(0) \pi^{xy}(\tau)\rangle \mathrm{d}\tau.$$

Теория линейного отклика. Обобщение. Многокомпонентная внешняя сила.

Теория линейного отклика: обобщение пройденного

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f(t)\,\hat{\mathrm{y}} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\boxed{\left\langle \hat{x} \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x} \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha(t-t')f(t')\,\mathrm{dt}'.}$$

$$\boxed{-\alpha(t,t') = \frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle \hat{x}(t) \mid \hat{y}(t') \right\rangle\right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\left\langle [\hat{x}(t), \hat{y}(t')]_- \right\rangle_{\rho_0}.}$$

$$\hat{x}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar},$$

Теория линейного отклика. Обобщение. Многокомпонентная внешняя сила.

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f_i(t)\hat{y}_i = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\boxed{\langle \hat{x}_i \rangle_t \approx \langle \hat{x}_i \rangle_{\hat{V}=0} + \int\limits_{-\infty}^{t} \alpha_{ij}(t-t')f_j(t')\,\mathrm{dt}'.}$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\alpha_{ij}(t-t') = -\frac{1}{\hbar}\langle\langle \hat{x}_i(t) \,|\, \hat{y}_j(t')\rangle\rangle = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(t')]_- \rangle_{\rho_0},\\ &\alpha_{ij}(\omega) = \frac{i}{\hbar}\int\limits_0^{\infty} \langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(0)]_- \rangle_{\rho_0} e^{i\omega t} dt.\end{aligned}}$$

Теория линейного отклика.
Эквивалентные формы записи восприимчивости.

$$\alpha_{ij}(t-t') = -\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle \hat{x}_i(t) \,|\, \hat{y}_j(t')\right\rangle\right\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\theta(t-t')\left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(t')]_- \right\rangle_{\rho_0},$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = -\theta(t-t')\int_0^\beta \left\langle \dot{x}_i(t-i\lambda)\hat{y}_j(t')\right\rangle_{\rho_0} d\lambda,$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = \theta(t-t')\int_0^\beta \left\langle \hat{x}_i(t)\dot{y}_j(t'-i\lambda)\right\rangle_{\rho_0} d\lambda.$$

$$\mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\left(\hat{x}_i(t)\hat{y}_j(t') - \hat{y}_j(t')\hat{x}_i(t)\right)\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\hat{x}_i(t)\hat{y}_j(t') - \hat{y}_j(t')\hat{x}_i(t)\hat{\rho}_0\right) =$$

$$= \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\hat{x}_i(t)\hat{y}_j(t') - \hat{x}_i(t)\hat{\rho}_0\hat{y}_j(t')\right) = \mathrm{tr}\left([\hat{\rho}_0, \hat{x}_i(t)]_- \,\hat{y}_j(t')\right) =$$

$$= i\hbar\int_0^\beta \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_0\dot{x}_i(t-i\lambda)\hat{y}_j(t')\right) d\lambda,$$

$$[\hat{x}_i(t), \hat{\rho}_0] = -\hat{\rho}_0\int_0^\beta \left[\hat{x}_i(t-i\lambda), \hat{H}_0\right] d\lambda = -i\hbar\hat{\rho}_0\int_0^\beta \dot{x}_i(t-i\lambda) d\lambda.$$

Формулы Кубо, предварительные итоги:

$$\boxed{\hat{H} = \hat{H}_0 - f_i(t)\hat{y}_i = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).}$$

$$\boxed{\left\langle \hat{x}_i \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x}_i \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int\limits_{-\infty}^{t} \alpha_{ij}(t-t')f_j(t')\,\mathrm{dt}'.}$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = -\frac{1}{\hbar}\left\langle\left\langle \hat{x}_i(t) \,|\, \hat{y}_j(t') \right\rangle\right\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\theta(t-t')\left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(t')]_- \right\rangle_{\rho_0},$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = -\theta(t-t')\int\limits_0^{\beta}\left\langle \dot{x}_i(t-i\lambda)\hat{y}_j(t') \right\rangle_{\rho_0} d\lambda = -\theta(t-t')\int\limits_0^{\beta}\left\langle \dot{x}_i(t)\hat{y}_j(t'+i\lambda) \right\rangle_{\rho_0} d\lambda,$$

$$\alpha_{ij}(t-t') = \theta(t-t')\int\limits_0^{\beta}\left\langle \hat{x}_i(t)\,\dot{\mathrm{y}}_j(t'-i\lambda) \right\rangle_{\rho_0} d\lambda = \theta(t-t')\int\limits_0^{\beta}\left\langle \hat{x}_i(t+i\lambda)\,\dot{\mathrm{y}}_j(t') \right\rangle_{\rho_0} d\lambda.$$

Формулы Кубо, предварительные итоги, Фурье преобразование восприимчивости:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - f_i(t)\hat{y}_i = \hat{H}_0 + \hat{V}(t).$$

$$\left\langle \hat{x}_i \right\rangle_t \approx \left\langle \hat{x}_i \right\rangle_{\hat{V}=0} + \int_{-\infty}^{t} \alpha_{ij}(t-t')f_j(t')\,\mathrm{dt}'.$$

$$\alpha_{ij}(\omega) = -\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty} \left\langle [\hat{x}_i(t), \hat{y}_j(0)]_- \right\rangle_{\rho_0} e^{i\omega t-\varepsilon t}dt,$$

$$\alpha_{ij}(\omega) = -\int_0^{\infty}\int_0^{\beta} \left\langle \dot{x}_i(t)\hat{y}_j(i\lambda) \right\rangle_{\rho_0} d\lambda e^{i\omega t-\varepsilon t}dt = \ldots$$

Формула Кубо для проводимости в пределе нулевой частоты. Учебники: Максимов, Mahan…

The dc conductivity is obtained by taking the limit $\mathbf{q} \to 0$ and then the limit $\omega \to 0$. The wrong answer may be obtained if the order of these limits is reversed, which may be understood on physical grounds. The limit $\omega = 0$, $\mathbf{q} \neq 0$ describes a static electric field, which is periodic in space. Here the charge will seek a new equilibrium, after which no current will flow. Thus it is usually important to first take the limit of $\mathbf{q} \to 0$:

Формула Кубо для **проводимости**. Учебники: Максимов, Mahan…

$$\hat{V}(t) = -\mathbf{E}(t)\cdot\hat{\mathbf{P}},$$

$$\hat{x}_i = \hat{\mathbf{J}} = \dot{\mathbf{P}}, \quad \mathrm{y}_j = \hat{\mathbf{P}}.$$

$$\alpha_{ij}(\omega\to 0) = \int_0^\infty\int_0^\beta \left\langle \hat{x}_i(t+i\lambda)\,\dot{\mathrm{y}}_j(0)\right\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t}\,d\lambda\,dt,$$

$$\sigma_{ij}(\omega\to 0) = \int_0^\infty\int_0^\beta \left\langle \hat{J}_i(t+i\lambda)\hat{J}_j(0)\right\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t}\,d\lambda\,dt.$$

Теорема Онзагера для тензора проводимости

$$\boxed{\begin{aligned}&\sigma_{ij}(\omega\to 0)=\int_0^\infty\int_0^\beta\left\langle \hat{J}_i(t+i\lambda)\hat{J}_j(0)\right\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t}\,d\lambda\,dt=\int_0^\infty I_{ij}(t)e^{-\varepsilon t}dt,\\&I_{ij}(t)=\int_0^\beta\left\langle \hat{J}_i(t+i\lambda)\hat{J}_j(0)\right\rangle_{\rho_0} d\lambda.\end{aligned}}$$

Симметрии в квантовой механике
https://en.wikipedia.org/wiki/T-symmetry

Eugene Wigner showed that a symmetry operation S of a Hamiltonian is represented, in quantum mechanics either by a unitary operator, $S = U$, or an antiunitary one, $S = UK$ where U is unitary, and K denotes complex conjugation. These are the only operations that act on Hilbert space so as to preserve the *length* of the projection of any one state-vector onto another state-vector.

Consider the parity operator. Acting on the position, it reverses the directions of space, so that $PxP^{-1} = -x$. Similarly, it reverses the direction of *momentum*, so that $PpP^{-1} = -p$, where x and p are the position and momentum operators. This preserves the canonical commutator $[x, p] = i\hbar$, where $\hbar$ is the reduced Planck constant, only if P is chosen to be unitary, $PiP^{-1} = i$.

On the other hand, the *time reversal* operator T, it does nothing to the x-operator, $TxT^{-1} = x$, but it reverses the direction of p, so that $TpT^{-1} = -p$. The canonical commutator is invariant only if T is chosen to be anti-unitary, i.e., $TiT^{-1} = -i$.

Симметрии в квантовой механике
https://en.wikipedia.org/wiki/T-symmetry

$$\hat{T} = \hat{U}\hat{K}$$

А. С. Давыдов

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

3-е издание, стереотипное

Санкт-Петербург
«БХВ-Петербург»
2011

а) Оператор Гамильтона H описывает частицы без спина в отсутствие электромагнитного поля. В координатном представлении оператор Гамильтона действителен, т. е. $H = H^*$. Легко убедиться, что оператор обращения времени в координатном представлении равен $\Theta = \hat{K}$. Действительно, $\hat{O} = 1$ удовлетворяет условию (119,4), если $H = H^*$.

Согласно общему правилу, преобразование функций (119,5) должно сопровождаться преобразованием операторов $\hat{F}_{-a} = \Theta F_a \Theta^{-1}$.

Следовательно, при $\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}$ и $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$,

$$\hat{\boldsymbol{r}}_{-a} = \hat{K}\boldsymbol{r}_a\hat{K}^{-1} = \boldsymbol{r}_a, \quad \hat{\boldsymbol{p}}_{-a} = \hat{K}\,(-i\hbar\nabla)\,\hat{K}^{-1} = i\hbar\nabla = -\hat{\boldsymbol{p}}_a.$$

Таким образом, как и следовало ожидать, оператор координаты остается неизменным, а оператор импульса изменяет знак при преобразовании, соответствующем обращению времени.

В импульсном представлении $\hat{\boldsymbol{r}} = i\hbar\nabla_p$ и $\hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{p}$. В этом случае оператор обращения времени Θ не сводится только к оператору $\hat{K}$, а необходимо положить $\Theta = \hat{O}_p\hat{K}$, где $\hat{Q}_p$ — оператор, заменяющий $\boldsymbol{p}$ на $-\boldsymbol{p}$; в этом случае $\hat{O}_p H^* = H\hat{Q}_p$ (в импульсном представлении $H^* \neq H$) и

$$\hat{\boldsymbol{r}}_{-a} = \hat{O}_p\hat{K}\,(i\hbar\nabla_p)\,(\hat{O}_p\hat{K})^{-1} = i\hbar\nabla_p = \hat{\boldsymbol{r}}_a,$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}_{-a} = \hat{O}_p\hat{K}\,(\hat{\boldsymbol{p}})\,(\hat{O}_p K)^{-1} = -\hat{\boldsymbol{p}}_a.$$

Свойства оператора обращения времени

Введем обозначение для обращенного по времени оператора:

$$\hat{X}^{\times} = \hat{T}^{-1}\hat{X}\hat{T}$$

Докажем, что:

$$\boxed{\operatorname{tr}\left(\hat{X}^{\times}\hat{Y}^{\times}\right) = \left(\operatorname{tr}\left(\hat{X}\hat{Y}\right)\right)^{*}.}$$

Доказательство тождества

Проблема, что оператор T (и K) антилинейный. Например,

$\hat{K}\left(\alpha\left|\psi_m\right\rangle+\beta\left|\psi_n\right\rangle\right)=\alpha^*\hat{K}\left|\psi_m\right\rangle+\beta^*\hat{K}\left|\psi_n\right\rangle\neq\alpha\hat{K}\left|\psi_m\right\rangle+\beta\hat{K}\left|\psi_n\right\rangle$. Поэтому нужна осторожность...

Такие операторы "нарушают" интуицию, наработанную в стандартной линейной алгебре,

для линейных операторов в линейных пространствах...

в линейных пространствах.

$$\left\langle\psi_n\right|\hat{T}^{-1}\hat{A}\hat{T}\left|\psi_m\right\rangle=\left\langle\psi_n\right|\left(\hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\right)^*\left|\psi_m\right\rangle=\left(\left\langle\psi_n^*\right|\hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\left|\psi_m^*\right\rangle\right)^*=\left(\left\langle\hat{U}\psi_n^*\right|\hat{A}\left|\hat{U}\psi_m^*\right\rangle\right)^*=\left(\left\langle\hat{T}\psi_n\right|\hat{A}\left|\hat{T}\psi_m\right\rangle\right)^*$$

Таким образом доказано, что

$$\left\langle\psi_n\right|\hat{T}^{-1}\hat{A}\hat{T}\left|\psi_m\right\rangle=\left(\left\langle\hat{T}\psi_n\right|\hat{A}\left|\hat{T}\psi_m\right\rangle\right)^*.$$

только теперь (может быть) очевидно, что

для операторов X,Y

$$\mathrm{tr}\left(\hat{X}^\times\hat{Y}^\times\right)=\left(\mathrm{tr}\left(\hat{X}\hat{Y}\right)\right)^*,$$

$\mathrm{tr}\left(\hat{X}\hat{Y}\right)=\mathrm{tr}\left(\hat{Y}^{+\times}\hat{X}^{+\times}\right)$. Вспомните, что $\left(A_{nm}\right)^*=A^+_{mn}$.

Нам потребуется еще одно тождество:

$$\hat{A}(t-i\lambda)=\exp\left(\frac{\lambda\hat{H}+it\hat{H}}{\hbar}\right)\hat{A}\exp\left(\frac{-\lambda\hat{H}-it\hat{H}}{\hbar}\right),$$

$$\left(\hat{A}(t-i\lambda)\right)^{+}=\exp\left(\frac{-\lambda\hat{H}-it\hat{H}}{\hbar}\right)^{+}\hat{A}^{+}\exp\left(\frac{\lambda\hat{H}+it\hat{H}}{\hbar}\right)^{+}=$$

$$=\exp\left(\frac{-\lambda\hat{H}+it\hat{H}}{\hbar}\right)\hat{A}^{+}\exp\left(\frac{\lambda\hat{H}-it\hat{H}}{\hbar}\right)=\hat{A}^{+}(t+i\lambda).$$

$$\operatorname{tr}\left(\hat{X}\hat{Y}\right) = \operatorname{tr}\left(\hat{Y}^{+\times}\hat{X}^{+\times}\right)_{\text{time-reversed basis}}$$

$$\Downarrow$$

$$I_{ij}(t) = \int_0^\beta \left\langle \hat{J}_i(t+i\lambda)\hat{J}_j(0)\right\rangle_\rho \, d\lambda = \int_0^\beta \operatorname{tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{J}_i(t+i\lambda)\hat{J}_j(0)\right) d\lambda =$$

$$= \int_0^\beta \operatorname{tr}\left(\hat{J}_j^{+\times}(0)\hat{J}_i^{+\times}(t+i\lambda)\hat{\rho}^{+\times}\right) d\lambda =$$

$$= \int_0^\beta \operatorname{tr}\left(\left(-\hat{J}_j(0)\right)\left(-\hat{J}_i(-t-i\lambda)\right)\hat{\rho}^{\times}\right) d\lambda = \int_0^\beta \left\langle \hat{J}_j(0)\hat{J}_i(-t-i\lambda)\right\rangle_{\hat{\rho}^\times} d\lambda =$$

$$= \int_0^\beta \left\langle \hat{J}_j(t+i\lambda)\hat{J}_i(0)\right\rangle_{\hat{\rho}^\times} d\lambda = I_{ji}(t),\ \text{если нет магнитного поля...}$$

$$\sigma_{ij}(\omega \to 0) = \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\beta \left\langle \hat{J}_i(t + i\lambda)\hat{J}_j(0) \right\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t} d\lambda dt = \int\limits_0^\infty I_{ij}(t) e^{-\varepsilon t} dt,$$

$$I_{ij}(t) = \int\limits_0^\beta \left\langle \hat{J}_i(t + i\lambda)\hat{J}_j(0) \right\rangle_{\rho_0} d\lambda.$$

$$I_{ij}(t, B) = I_{ji}(t, -B).$$

$$\sigma_{ij}(\omega \to 0, B) = \sigma_{ji}(\omega \to 0, -B).$$

Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, стр.330
Х. М. Биккин, И. И. Ляпилин. – Екатеринбург : УрО РАН, 2009.

Теорема Онзагера (общий случай)

$$\mathbf{I} = \begin{pmatrix} J \\ J_Q \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathcal{E} \\ -\nabla T / T \end{pmatrix}.$$

$\langle \mathbf{I} \rangle = L\mathbf{X}$, где L -- блочная матрица кинетических коэффициентов.

$$L_{ij} = \int_0^\infty \int_0^\beta \Big\langle I_i(t + i\lambda) I_j(0) \Big\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t} d\lambda dt \to \frac{1}{T} \int_0^\infty \Big\langle I_i(t) I_j(0) \Big\rangle_{\rho_0} e^{-\varepsilon t} dt,$$

$$\dot{Q} = T\dot{S} = \langle \mathbf{I} \rangle \mathbf{X}.$$

Далее применяем доказательство, использованное для изучения симметрии тензора проводимости.

Теорема Онзагера (общий случай)

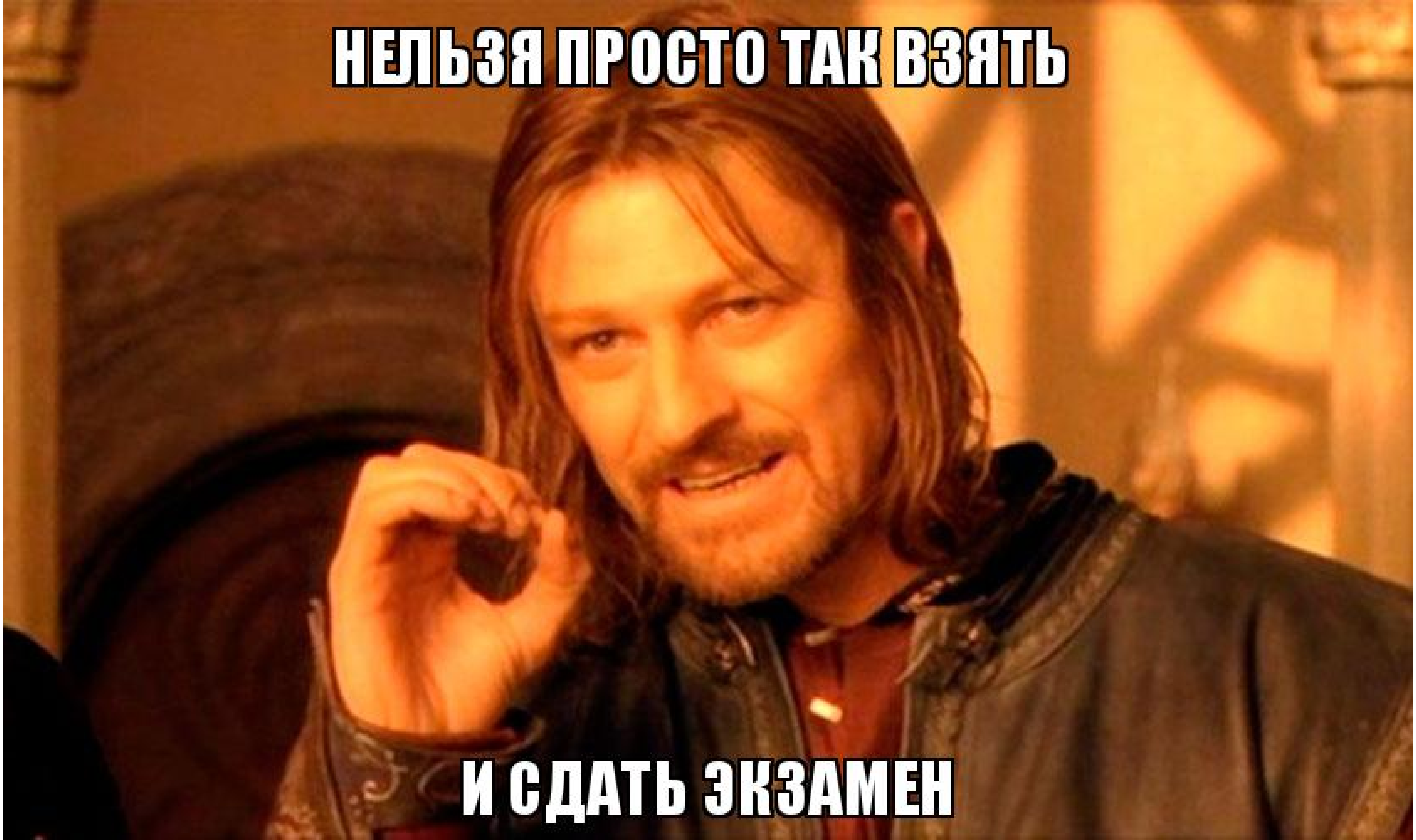
$$\sigma_{\mu\nu}(H) = \sigma_{\nu\mu}(-H). \tag{5.193}$$

Обобщая этот результат, для компонент обобщенной восприимчивости χ_{AB}, получаем

$$\chi_{AB}(H) = \varepsilon_A \varepsilon_B \chi_{BA}(-H), \tag{5.194}$$

где величины ε_A и ε_B равны ± 1 в зависимости от четности операторов A и B при операции обращения времени.

Неравновесная термодинамика и физическая кинетика, стр. 332,
Х. М. Биккин, И. И. Ляпилин. – Екатеринбург : УрО РАН, 2009


НЕЛЬЗЯ ПРОСТО ТАК ВЗЯТЬ
И СДАТЬ ЭКЗАМЕН

Спасибо за внимание!