

# 6 章

大上由人

2024 年 5 月 5 日

## 1 揺動散逸定理

### 1.1 周波数 0 の場合

前回のゼミで得た、周波数 0 の場合の揺動散逸定理の復習をする。

#### Thm: 揺動散逸定理

IFT を満たす確率的な系で、示量変数  $X$  をもつ二つの熱浴と接触している。平衡状態での  $X$  のカレントの自己相関関数  $\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \rangle_0$  は、 $t$  が大きくなるにつれ、急速に 0 に緩和すると仮定する。

このとき、平衡状態における揺動と、共役変数が変化したときの  $X$  のカレントの応答は、

$$\int_0^\infty dt \langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \rangle_0 = \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{J} \rangle_0 |_{\Delta \Pi_X=0} = T \frac{\partial}{\partial \Delta P_X} \langle \hat{J} \rangle_0 |_{\Delta P_X=0} \quad (1)$$

のように書ける。ただし、 $\langle \rangle_0$  は平衡状態におけるアンサンブル平均を表し、 $\langle \rangle$  は  $\Delta \Pi_X$  により駆動される非平衡定常状態でのアンサンブル平均を表す。

#### Prf

$0 \leq t \leq \tau$  間のエントロピー生成は、

$$\hat{\sigma} = \delta \Pi_X \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \quad (2)$$

により書くことができる。(証明略) これと、IFT により、

$$1 = \langle e^{-\hat{\sigma}} \rangle = 1 - \left\langle \Delta \Pi_X \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \Delta \Pi_X^2 \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle + O(\Delta \Pi_X^3) \quad (3)$$

$$(4)$$

を得る。ここで、

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Delta \Pi_X} = \langle \hat{A} \rangle_0 + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{A} \rangle \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X + O(\Delta \Pi_X^2) \quad (5)$$

と展開できるので、これを上の式に代入し、 $\Delta\Pi_X$  の一次の項と二次の項を比較する。  
 $\Delta\Pi_X$  の一次の項について、

$$\left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle_0 = 0 \quad (6)$$

が成り立つ。また、二次の項について、

$$\left\langle \frac{1}{2} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle_0 = \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \quad (7)$$

が成り立つ。(7) 式の両辺に  $\frac{1}{\tau}$  をかけ、 $\tau \rightarrow \infty$  の極限を取ると、

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left\langle \frac{1}{2} \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle_0 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \quad (8)$$

$$= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\infty dt'' (\tau - t'') \left\langle \hat{J}(t'') \hat{J}(0) \right\rangle_0 \quad (9)$$

$$\simeq \int_0^\infty dt \left\langle \hat{J}(t) \hat{J}(0) \right\rangle_0 \quad (10)$$

また、

$$\int_0^\infty dt \left\langle \hat{J}(t) \hat{J}(0) \right\rangle_0 = \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \quad (11)$$

$$= \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{J}(0) \right\rangle \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \quad (12)$$

が成り立つ (ここで、時間平均がアンサンブル平均に置き換わる、エルゴードの定理を用いている)。

$\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} = T \frac{\partial}{\partial \Delta P_X}$  であることを用いると、

$$\int_0^\infty dt \left\langle \hat{J}(t) \hat{J}(0) \right\rangle_0 = T \frac{\partial}{\partial \Delta P_X} \left\langle \hat{J}(0) \right\rangle \Big|_{\Delta P_X=0} \quad (13)$$

を得る。 □

## 1.2 有限周波数の場合

有限周波数の場合の FDT を扱う。いま、bath1 と bath2 の示強変数が、

$$\Pi_X^2(t) = \Pi_X^1 + \epsilon \sin(\omega t) \quad (14)$$

となっているとする。このとき、エントロピー生成は以下のように書ける。

$$\hat{\sigma} = \epsilon \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \quad (15)$$

ただし、 $\Delta\hat{s}$  の項は、後で無視するので消去した。

( $\therefore$ )

bath1 について、

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{\partial S_1}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial t} \quad (16)$$

$$= \frac{\partial S_1}{\partial X} \int dV \frac{\partial x}{\partial t} \quad (17)$$

$$= \frac{\partial S_1}{\partial X} \int d\mathbf{S} \cdot (-\mathbf{j}) \quad (18)$$

$$= -\frac{\partial S_1}{\partial X} \hat{J}(t) \quad (19)$$

$$(20)$$

となる。両辺積分することで、

$$S_1(\tau) - S_1(0) = - \int_0^\tau \frac{\partial S_1}{\partial X} dt \quad (21)$$

$$= - \int_0^\tau \Pi_X^1 \hat{J}(t) dt \quad (22)$$

bath2 についても同様にして、

$$S_2(\tau) - S_2(0) = \int_0^\tau \Pi_X^2 \hat{J}(t) dt \quad (23)$$

を得る。

よって、

$$(S_1(\tau) + S_2(\tau)) - (S_1(0) + S_2(0)) = \int_0^\tau (\Pi_X^2 - \Pi_X^1) \hat{J}(t) dt \quad (24)$$

$$= \epsilon \int_0^\tau \sin(\omega t) \hat{J}(t) dt \quad (25)$$

となる。

□

以下、この式を用いて、有限周波数の場合の FDT を導く。

**Thm: 有限周波数の場合の FDT**

IFT を満たす確率的な系で、周波数  $\omega$  による揺動と、共役変数が変化したときの  $X$  のカレントの応答は、

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left\langle \left( \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \right)^2 \right\rangle_0 = 2 \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\langle \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \right\rangle \Big|_{\epsilon=0} \quad (26)$$

のように書ける。

**Prf**

周波数が 0 のときの証明をまねする。IFT を用いてから、 $\epsilon$  について展開することで、

$$1 = \langle e^{-\hat{\sigma}} \rangle = 1 - \left\langle \epsilon \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\epsilon t) \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle \epsilon^2 \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \sin(\omega t') \sin(\omega t) \right\rangle + O(\epsilon^3) \quad (27)$$

$$(28)$$

を得る。ここで、

$$\langle \hat{A} \rangle_\epsilon = \langle \hat{A} \rangle_0 + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \langle \hat{A} \rangle \Big|_{\epsilon=0} \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (29)$$

と展開して、上の式に代入すると、 $\epsilon$  の二次の項を比較することにより、

$$\frac{1}{2} \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \sin(\omega t') \sin(\omega t) \right\rangle_0 = \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \right\rangle \Big|_{\epsilon=0} \quad (30)$$

であるから、両辺  $\frac{1}{\tau}$  をかけ、 $\tau \rightarrow \infty$  の極限を取ると、

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left\langle \left( \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \right)^2 \right\rangle_0 = 2 \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left\langle \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \sin(\omega t) \right\rangle \Big|_{\epsilon=0} \quad (31)$$

を得る。 □

### 1.3 高次における関係

**Thm: 時間積分されたカレントの高次の関係**

磁場中の  $\hat{\mathcal{J}}$  は、以下の高次における関係を満たす:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (32)$$

**Prf**

FDT を導出する途中の展開をより高次まで行くと、

$$1 = \langle e^{-\hat{\sigma}} \rangle = 1 - \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^B \Delta \Pi_X + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^B \Delta \Pi_X^2 - \frac{1}{6} \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle^B \Delta \Pi_X^3 + O(\Delta \Pi_X^4) \quad (33)$$

$$= 1 - \left( \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle_0^B \Delta \Pi_X + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^3 \right) \quad (34)$$

$$+ \frac{1}{2} \left( \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle_0^B \Delta \Pi_X^2 + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^3 \right) - \frac{1}{6} \left( \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle_0^B \Delta \Pi_X^3 \right) + O(\Delta \Pi_X^4) \quad (35)$$

となる。ここで、 $\hat{\mathcal{J}}$  は、

$$\hat{\mathcal{J}} = \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \quad (36)$$

である。同様の手順を踏むことで、 $B$  を  $-B$  としたときの展開は、

$$\begin{aligned}
1 = \langle e^{-\hat{\sigma}} \rangle &= 1 - \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^{-B} \Delta \Pi_X + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^{-B} \Delta \Pi_X^2 - \frac{1}{6} \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle^{-B} \Delta \Pi_X^3 + O(\Delta \Pi_X^4) \quad (37) \\
&= 1 - \left( \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle_0^{-B} \Delta \Pi_X + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^3 \right) \quad (38) \\
&\quad + \frac{1}{2} \left( \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle_0^{-B} \Delta \Pi_X^2 + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X^3 \right) - \frac{1}{6} \left( \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle_0^{-B} \Delta \Pi_X^3 \right) + O(\Delta \Pi_X^4) \quad (39)
\end{aligned}$$

となる。

ここで、期待値の時間反転対称性から、

$$\langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle^B = - \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle^{-B} \quad (40)$$

が成り立つことを用いて、上の二式を両辺足して、 $\Delta \Pi_X$  の三次の項を比較すると、

$$\begin{aligned}
0 = & - \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} - \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \\
& + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} - \frac{1}{6} \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle_0^B - \frac{1}{6} \langle \hat{\mathcal{J}}^3 \rangle_0^{-B}
\end{aligned}$$

すなわち、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^B \Big|_{\Delta \Pi_X=0} + \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (41)$$

を得る。新たに、 $\langle \cdot \rangle^+ = \frac{1}{2}(\langle \cdot \rangle^B + \langle \cdot \rangle^{-B})$  と定義すると、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}^2 \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (42)$$

が成り立つ。

□

また、以下も成り立つ。

**Thm: 高次元における関係 (2)**

IFT を満たす系について、以下が成り立つ:

$$2 \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \int_0^\infty dt \langle \Delta \hat{J}(t) \Delta \hat{J}(0) \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \Delta \hat{J} \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (43)$$

**Prf**

$\hat{J}$  を  $J$  を用いて表すことで、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (44)$$

が成り立つ。ここで、左辺の被積分関数について、 $\Delta \hat{J} = \hat{J} - \langle \hat{J} \rangle$  として展開すると、

$$\left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle^+ = \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt (\Delta \hat{J}(t') + J(t')) (\Delta \hat{J}(t) + J(t)) \right\rangle^+ \quad (45)$$

$$= \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \Delta \hat{J}(t') \Delta \hat{J}(t) \right\rangle^+ \quad (46)$$

$$+ 2 \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \Delta \hat{J}(t') J(t) \right\rangle^+ \quad (47)$$

$$+ \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt J(t') J(t) \right\rangle^+ \quad (48)$$

となる。ここで、第二項について、

$$2 \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \Delta \hat{J}(t') J(t) \right\rangle^+ = 2 \int_0^\tau \int_0^\tau dt' dt J(t) \langle \Delta \hat{J}(t') \rangle^+ \quad (49)$$

$$= 0 \quad (50)$$

である。というのも、 $\langle \Delta \hat{J}(t') \rangle^+ = 0$  であるからである。よって、

$$\left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t') \hat{J}(t) \right\rangle^+ = \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt (\Delta \hat{J}(t') + J(t')) (\Delta \hat{J}(t) + J(t)) \right\rangle^+ \quad (51)$$

$$= \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \Delta \hat{J}(t') \Delta \hat{J}(t) \right\rangle^+ \quad (52)$$

$$+ \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt J(t') J(t) \right\rangle^+ \quad (53)$$

$$(54)$$

となる。ここで、この最後の式の第二項は、 $\Delta \Pi_X = 0$  で、 $\Delta \Pi_X$  について微分することで 0 になる。これは、 $(\int_0^\tau dt \langle \hat{J}(t) \rangle^2)$  が、 $\Delta \Pi_X$  についての偶関数であることからわかる。

したがって、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \Delta \hat{J}(t') \Delta \hat{J}(t) \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (55)$$

が成り立つ。ここで、両辺  $\frac{1}{\tau}$  をかけ、 $\tau \rightarrow \infty$  の極限を取ると、前回のゼミと同様の変形をすることで、

$$2 \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \int_0^\infty dt \langle \Delta \hat{J}(t) \Delta \hat{J}(0) \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \langle \Delta \hat{J} \rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \quad (56)$$

を得る。

□

## 1.4 従来の線形応答理論との違い

なんかいろいろ書いてる。

## 2 Onsager の相反定理

二つの示量変数  $X$  と  $Y$  をもつ系を考える。対応する流れをそれぞれ  $J_X$  と  $J_Y$  とする。系が四つの bath と接触しているとする。そのうち二つが、 $\Pi_X$  に対応するものとし、残り二つが、 $\Pi_Y$  に対応するものとする。このとき、一般に、もし  $\Pi_X$  が 0 でないならば、 $\Pi_Y = 0$  であっても、 $J_Y = 0$  であるとは限らない。

**Def:Onsager 行列**

Onsager 行列  $L$  は、

$$L_{ij} = \left. \frac{\partial J_i}{\partial \Delta \Pi_j} \right|_{\Delta \Pi_X = \Delta \Pi_Y = 0} \quad (i, j = X, Y) \quad (57)$$

で定義される。

このとき、

$$J_X = L_{XX} \Delta \Pi_X + L_{XY} \Delta \Pi_Y \quad (58)$$

$$J_Y = L_{YX} \Delta \Pi_X + L_{YY} \Delta \Pi_Y \quad (59)$$

と書ける。

**Thm:Onsager の相反定理**

時間反転対称性を破るような場がないとする。このとき、 $\Delta \Pi_Y$  に対する  $J_X$  の応答は、 $\Delta \Pi_X$  に対する  $J_Y$  の応答と等しい。すなわち、

$$L_{XY} = L_{YX} \quad (60)$$

が成り立つ。

**Prf**

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle = \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y) \quad (61)$$

$$= \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y (\hat{\mathcal{J}}_X P(-\hat{\mathcal{J}}_X, -\hat{\mathcal{J}}_Y)) \exp(\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X + \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y) \quad (62)$$

$$= - \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y) \exp(-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y) \quad (63)$$

$$= - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\langle \hat{\mathcal{J}}_X (-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y)^{k-1} \rangle}{(k-1)!} \quad (64)$$

となる。ここで、

$$\frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} = - \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_Y} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\langle \hat{\mathcal{J}}_X (-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y)^{k-1} \rangle}{(k-1)!} \quad (65)$$

$$= - \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y (-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y)^{k-2} \rangle}{(k-2)!} \quad (66)$$

となる。 $\Delta \Pi_Y$  の 0 次の項を比較することで、

$$\frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} = - \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} + \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0 \quad (67)$$

を得る。整理して、

$$2 \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle}{\partial \Delta \Pi_Y} = \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0 \quad (68)$$

を得る。同様に、

$$2 \frac{\partial \langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle}{\partial \Delta \Pi_X} = \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0 \quad (69)$$

を得る。これらを比較することで、

$$L_{XY} = L_{YX} \quad (70)$$

を得る。 □

**Thm: 時間反転対称性を破る場があるときの Onsager の相反定理**

例えば、磁場中の系を考えると、Onsager の相反定理は以下のように拡張される:

$$L_{XY}(B) = L_{YX}(-B) \quad (71)$$

**Prf**

磁場が時間反転対称性を破ることを考えると、DFT は、

$$P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y; B) = P(-\hat{\mathcal{J}}_X, -\hat{\mathcal{J}}_Y; -B) \exp(\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X + \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y) \quad (72)$$



となる。このとき、

$$L_{XY}(B) + L_{XY}(-B) = \frac{1}{\tau} \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0^{-B} \quad (73)$$

となる。

(73) の証明

上で証明した Onsager の相反定理の証明を参考にとると、

$$\left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle^B = \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y; B) \quad (74)$$

$$= \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(-\hat{\mathcal{J}}_X, -\hat{\mathcal{J}}_Y; -B) \exp(\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X + \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y) \quad (75)$$

$$= - \int d\hat{\mathcal{J}}_X \int d\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y; -B) \exp(-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y) \quad (76)$$

$$= - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left\langle \hat{\mathcal{J}}_X (-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y)^{k-1} \right\rangle^{-B}}{(k-1)!} \quad (77)$$

となる。ここで、

$$\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle^B}{\partial \Delta \Pi_Y} = - \frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle^{-B}}{\partial \Delta \Pi_Y} - \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y (-\hat{\mathcal{J}}_X \Delta \Pi_X - \hat{\mathcal{J}}_Y \Delta \Pi_Y)^{k-2} \right\rangle^{-B}}{(k-2)!} \quad (78)$$

となる。 $\Delta \Pi_Y$  の 0 次の項を比較することで、

$$\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle^B}{\partial \Delta \Pi_Y} + \frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle^{-B}}{\partial \Delta \Pi_Y} = \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0^{-B} \quad (79)$$

を得る。したがって、

$$L_{XY}(B) + L_{XY}(-B) = \frac{1}{\tau} \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0^{-B} \quad (80)$$

を得る。

また、

$$L_{XY}(-B) + L_{YX}(-B) = \frac{1}{\tau} \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0^{-B} \quad (81)$$

となる。

(81) 式の証明

磁場が  $-B$  のときの系について、IFT を用いることにより、

$$1 = \left\langle e^{-\hat{\sigma}} \right\rangle^{-B} = \left\langle \exp(-\mathcal{J}_X \Delta \Pi_X - \mathcal{J}_Y \Delta \Pi_Y) \right\rangle^{-B} \quad (82)$$

$$= 1 - \left\langle \mathcal{J}_X \right\rangle^{-B} \Delta \Pi_X - \left\langle \mathcal{J}_Y \right\rangle^{-B} \Delta \Pi_Y \quad (83)$$

$$+ \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{J}_X^2 \right\rangle^{-B} \Delta \Pi_X^2 + \left\langle \mathcal{J}_X \mathcal{J}_Y \right\rangle^{-B} \Delta \Pi_X \Delta \Pi_Y \quad (84)$$

$$+ \frac{1}{2} \left\langle \mathcal{J}_Y^2 \right\rangle^{-B} \Delta \Pi_Y^2 + O(\Delta \Pi^3) \quad (85)$$

を得る。ここで、

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle^{-B} = \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle_0 + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_Y} \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle \Big|_{\Delta \Pi_Y=0} \Delta \Pi_Y + O(\Delta \Pi^2) \quad (86)$$

と、

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle^{-B} = \langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0 + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle \Big|_{\Delta \Pi_X=0} \Delta \Pi_X + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_Y} \langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle \Big|_{\Delta \Pi_Y=0} \Delta \Pi_Y + O(\Delta \Pi^2) \quad (87)$$

および、

$$\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle^{-B} = \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0^{-B} + O(\Delta \Pi) \quad (88)$$

であるから、(76) 式に代入して、 $\Delta \Pi_X \Delta \Pi_Y$  の項を比較することで、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_Y} \langle \hat{\mathcal{J}}_X \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_X=0} + \frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \langle \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle^{-B} \Big|_{\Delta \Pi_Y=0} = \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0^{-B} \quad (89)$$

を得る。よって、

$$L_{XY}(-B) + L_{YX}(-B) = \frac{1}{\tau} \langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \rangle_0^{-B} \quad (90)$$

を得る。

この二式から、

$$L_{XY}(B) = L_{YX}(-B) \quad (91)$$

を得る。 □