# 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 $\left\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \right\rangle_0$ 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、

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \right\rangle_0 = \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{J} \right\rangle_0 |_{\Delta\Pi_X=0} = T\frac{\partial}{\partial \Delta P_X} \left\langle \hat{J} \right\rangle_0 |_{\Delta P_X=0} \tag{1}$$

のように書ける。ただし、$\langle \quad \rangle_0$ は平衡状態におけるアンサンブル平均を表し、$\langle \quad \rangle$ 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**

$o \le t \le \tau$ 間のエントロピー生成は、

$$\hat{\sigma} = \delta\Pi_X \int_0^\tau \mathrm{d}t\hat{J}(t) \tag{2}$$

により書くことができる。(証明略) これと、IFT により、

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

$$\tag{4}$$

を得る。ここで、

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

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、

$$\left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t \hat{J}(t) \right\rangle_0 = 0 \tag{6}$$

が成り立つ。また、二次の項について、

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

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

$$\begin{aligned}
\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\left\langle \frac{1}{2}\int_0^\tau dt' \int_0^\tau dt \hat{J}(t')\hat{J}(t) \right\rangle_0 &= \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \int_0^\tau dt \hat{J}(t) \right\rangle \Bigg|_{\Delta\Pi_X=0} &(8)\\
&= \lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\infty dt''(\tau - t'') \left\langle \hat{J}(t'')\hat{J}(0) \right\rangle_0 &(9)\\
&\simeq \int_0^\infty dt \left\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \right\rangle_0 &(10)
\end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \right\rangle_0 &= \frac{1}{\tau}\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t \hat{J}(t) \right\rangle \Bigg|_{\Delta\Pi_X=0} &(11)\\
&= \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{J}(0) \right\rangle \Bigg|_{\Delta\Pi_X=0} &(12)
\end{aligned}$$

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、

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}(t)\hat{J}(0) \right\rangle_0 = T\frac{\partial}{\partial \Delta P_X} \left\langle \hat{J}(0) \right\rangle \Bigg|_{\Delta P_X=0} \tag{13}$$

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、

$$\Pi_X^2(t) = \Pi_X^1 + \epsilon \sin(\omega t) \tag{14}$$

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。

$$\hat{\sigma} = \epsilon \int_0^\tau \mathrm{d}t \hat{J}(t)\sin(\omega t) \tag{15}$$

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

bath1 について、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial S_1}{\partial t} &= \frac{\partial S_1}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial t} && (16)\\
&= \frac{\partial S_1}{\partial X}\int \mathrm{d}V \frac{\partial x}{\partial t} && (17)\\
&= \frac{\partial S_1}{\partial X}\int \mathrm{d}\mathbf{S}\cdot(-\mathbf{j}) && (18)\\
&= -\frac{\partial S_1}{\partial X}\hat{J}(t) && (19)\\
& && (20)
\end{aligned}
$$

となる。両辺積分することで、

$$
\begin{aligned}
S_1(\tau) - S_1(0) &= -\int_0^\tau \frac{\partial S_1}{\partial X}\hat{-}J(t)\mathrm{d}t && (21)\\
&= -\int_0^\tau \Pi_X^1 \hat{J}(t)\mathrm{d}t && (22)
\end{aligned}
$$

bath2 についても同様にして、

$$
S_2(\tau) - S_2(0) = \int_0^\tau \Pi_X^2 \hat{J}(t)\mathrm{d}t \tag{23}
$$

を得る。

よって、

$$
\begin{aligned}
(S_1(\tau)+S_2(\tau)) - (S_1(0)+S_2(0)) &= \int_0^\tau (\Pi_X^2 - \Pi_X^1)\hat{J}(t)\mathrm{d}t && (24)\\
&= \epsilon\int_0^\tau \sin(\omega t)\hat{J}(t)\mathrm{d}t && (25)
\end{aligned}
$$

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、

$$
\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\left\langle\left(\int_0^\tau \mathrm{d}t\hat{J}(t)\sin(\omega t)\right)^2\right\rangle_0 = 2\lim_{\tau\to 0}\frac{\partial}{\partial\epsilon}\left\langle\frac{1}{\tau}\int_0^\tau \mathrm{d}t\hat{J}(t)\sin(\omega t)\right\rangle\Bigg|_{\epsilon=0} \tag{26}
$$

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、

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

(28)

を得る。ここで、

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

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、

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

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

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

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:

$$\frac{\partial}{\partial \Delta \Pi_X} \left\langle \hat{\mathcal{J}}^2 \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X = 0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta \Pi_X^2} \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle^+ \Big|_{\Delta \Pi_X = 0} \tag{32}$$

**Prf**

FDT を導出する途中の展開をより高次まで行うと、

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

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

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

となる。ここで、$\hat{\mathcal{J}}$ は、

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

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、

$$1 = \left\langle e^{-\hat{\sigma}} \right\rangle = 1 - \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle^{-B} \Delta\Pi_X + \frac{1}{2}\left\langle \hat{\mathcal{J}}^2 \right\rangle^{-B} \Delta\Pi_X^2 - \frac{1}{6}\left\langle \hat{\mathcal{J}}^3 \right\rangle^{-B} \Delta\Pi_X^3 + O(\Delta\Pi_X^4) \tag{37}$$

$$= 1 - \left( \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle_0^{-B} \Delta\Pi_X + \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle^{-B} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \Delta\Pi_X^2 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \Delta\Pi_X^2} \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle^{-B} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \Delta\Pi_X^3 \right) \tag{38}$$

$$+ \frac{1}{2}(\left\langle \hat{\mathcal{J}}^2 \right\rangle_0^{-B} \Delta\Pi_X^2 + \frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{\mathcal{J}}^2 \right\rangle^{-B} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \Delta\Pi_X^3) - \frac{1}{6}\left( \left\langle \hat{\mathcal{J}}^3 \right\rangle_0^{-B} \Delta\Pi_X^3 \right) + O(\Delta\Pi_X^4) \tag{39}$$

となる。

ここで、期待値の時間反転対称性から、

$$\left\langle \hat{\mathcal{J}}^3 \right\rangle^{B} = -\left\langle \hat{\mathcal{J}}^3 \right\rangle^{-B} \tag{40}$$

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、

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

すなわち、

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

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、

$$\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \left\langle \hat{\mathcal{J}}^2 \right\rangle^{+} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta\Pi_X^2} \left\langle \hat{\mathcal{J}} \right\rangle^{+} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \tag{42}$$

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:

$$2\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X} \int_0^{\infty} \mathrm{d}t \left\langle \Delta\hat{J}(t)\Delta\hat{J}(0) \right\rangle^{+} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta\Pi_X^2} \left\langle \Delta\hat{J} \right\rangle^{+} \Big|_{\Delta\Pi_X=0} \tag{43}$$

**Prf**

$\hat{J}$ を $J$ を用いて表すことで、

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

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

$$\begin{aligned}
\left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \hat{J}(t')\hat{J}(t)\right\rangle^+ &= \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t (\Delta\hat{J}(t') + J(t'))(\Delta\hat{J}(t) + J(t))\right\rangle^+ &(45)\\
&= \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \Delta\hat{J}(t')\Delta\hat{J}(t)\right\rangle^+ &(46)\\
&+ 2\left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \Delta\hat{J}(t')J(t)\right\rangle^+ &(47)\\
&+ \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t J(t')J(t)\right\rangle^+ &(48)
\end{aligned}$$

となる。ここで、第二項について、

$$\begin{aligned}
2\left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \Delta\hat{J}(t')J(t)\right\rangle^+ &= 2\int_0^\tau \int_0^\tau \mathrm{d}t'\mathrm{d}t J(t)\left\langle \Delta\hat{J}(t')\right\rangle^+ &(49)\\
&= 0 &(50)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \hat{J}(t')\hat{J}(t)\right\rangle^+ &= \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t (\Delta\hat{J}(t') + J(t'))(\Delta\hat{J}(t) + J(t))\right\rangle^+ &(51)\\
&= \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t \Delta\hat{J}(t')\Delta\hat{J}(t)\right\rangle^+ &(52)\\
&+ \left\langle \int_0^\tau \mathrm{d}t' \int_0^\tau \mathrm{d}t J(t')J(t)\right\rangle^+ &(53)\\
& &(54)
\end{aligned}$$

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、$(\int_0^\tau \mathrm{d}t \left\langle \hat{J}(t))^2\right\rangle$ 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、

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

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

$$2\,\frac{\partial}{\partial \Delta\Pi_X}\int_0^\infty \mathrm{d}t \left\langle \Delta\hat{J}(t)\Delta\hat{J}(0)\right\rangle^+ \Bigg|_{\Delta\Pi_X=0} = \frac{\partial^2}{\partial \Delta\Pi_X^2}\left\langle \Delta\hat{J}\right\rangle^+ \Bigg|_{\Delta\Pi_X=0} \tag{56}$$

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、

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

で定義される。

このとき、

$$J_X = L_{XX}\Pi_X + L_{XY}\Pi_Y \tag{58}$$

$$J_Y = L_{YX}\Pi_X + L_{YY}\Pi_Y \tag{59}$$

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、

$$L_{XY} = L_{YX} \tag{60}$$

が成り立つ。

**Prf**

$$\left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle = \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_X \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X, \hat{\mathcal{J}}_Y) \tag{61}$$

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

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

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

となる。ここで、

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

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

となる。$\Delta\Pi_Y$ の 0 次の項を比較することで、

$$\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle}{\partial \Delta\Pi_Y} = -\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle}{\partial \Delta\Pi_Y} + \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0 \tag{67}$$

を得る。整理して、

$$2\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \right\rangle}{\partial \Delta\Pi_Y} = \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0 \tag{68}$$

を得る。同様にして、

$$2\frac{\partial \left\langle \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle}{\partial \Delta\Pi_X} = \left\langle \hat{\mathcal{J}}_X \hat{\mathcal{J}}_Y \right\rangle_0 \tag{69}$$

を得る。これらを比較することで、

$$L_{XY} = L_{YX} \tag{70}$$

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:

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

**Prf**

磁場が時間反転対称性を破ることを考えると、DFT は、

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

となる。このとき、

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

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すると、

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{\mathcal{J}}_X\right\rangle^B &= \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_X \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X,\hat{\mathcal{J}}_Y;B) &(74)\\ &= \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_X \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(-\hat{\mathcal{J}}_X,-\hat{\mathcal{J}}_Y;-B)exp(\hat{\mathcal{J}}_X\Delta\Pi_X+\hat{\mathcal{J}}_Y\Delta\Pi_Y) &(75)\\ &= -\int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_X \int \mathrm{d}\hat{\mathcal{J}}_Y \hat{\mathcal{J}}_X P(\hat{\mathcal{J}}_X,\hat{\mathcal{J}}_Y;-B)exp(-\hat{\mathcal{J}}_X\Delta\Pi_X-\hat{\mathcal{J}}_Y\Delta\Pi_Y) &(76)\\ &= -\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\left\langle\hat{\mathcal{J}}_X(-\hat{\mathcal{J}}_X\Delta\Pi_X-\hat{\mathcal{J}}_Y\Delta\Pi_Y)^{k-1}\right\rangle^{-B}}{(k-1)!} &(77)\end{aligned}$$

となる。ここで、

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

となる。$\Delta\Pi_Y$ の 0 次の項を比較することで、

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

を得る。したがって、

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

を得る。

また、

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

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、

$$\begin{aligned}1=\left\langle e^{-\hat{\sigma}}\right\rangle^{-B} &= \langle exp(-\mathcal{J}_X\Delta\Pi_X-\mathcal{J}_Y\Delta\Pi_Y)\rangle^{-B} &(82)\\ &= 1-\langle\mathcal{J}_X\rangle^{-B}\Delta\Pi_X-\langle\mathcal{J}_Y\rangle^{-B}\Delta\Pi_Y &(83)\\ &\quad+\frac{1}{2}\left\langle\mathcal{J}_X^2\right\rangle^{-B}\Delta\Pi_X^2+\langle\mathcal{J}_X\mathcal{J}_Y\rangle^{-B}\Delta\Pi_X\Delta\Pi_Y &(84)\\ &\quad+\frac{1}{2}\left\langle\mathcal{J}_Y^2\right\rangle^{-B}\Delta\Pi_Y^2+O(\Delta\Pi^3) &(85)\end{aligned}$$

を得る。ここで、

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

と、

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

および、

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

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、

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

を得る。よって、

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

を得る。

この二式から、

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

を得る。 □