

§3. 線形応答理論

3-1. 時間相関関数

目標 定義と性質を理解する。何に使えるか。性質は何から導けるか。具体的には以下のことを分かる。

- 時間相関関数 (TCF) の定義はサンプルの平均と時間平均がある。
- 時間相関関数 (TCF) は不規則な運動を特徴付けるのに便利。
- 定常過程は時間の原点をずらしても平均量は変わらない。
- 結論は定常過程から導ける。
- 線形ランジュバン方程式が成り立つ時、時間相関関数 (TCF) は簡単に計算できる。

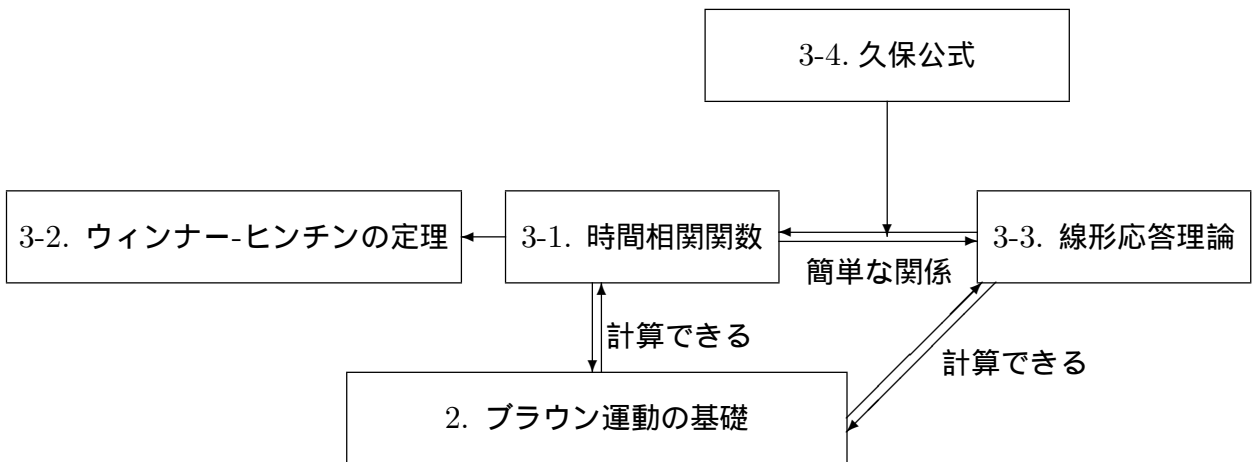
- 目次 (1) §3 の流れ
 (2) 定義と物理的な意味
 (3) 基本的な性質
 (4) ランジュバン方程式からの計算

仮定 定常過程 (時間の原点をずらしても、平均量は変らない)。

結論 $\psi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t)X_\nu(0) \rangle$ として、 $\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)$ 。特に $\mu = \nu$ の時、時間相関関数は、偶関数。

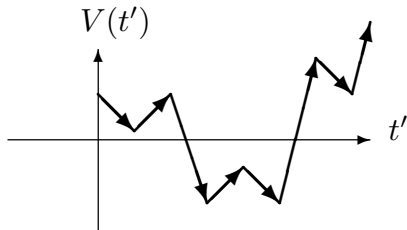
さらに、 $\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t)\dot{X}_\nu(0) \rangle$ 。特に $\mu = \nu$ の時、 $\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = 0$ 。

(1) §3 の流れ

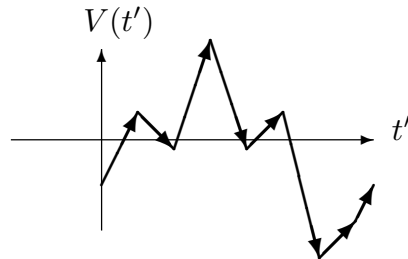


(2) 定義と物理的な意味

液体 A に微粒子を溶かす。 $V(t)$ = 微粒子の速度

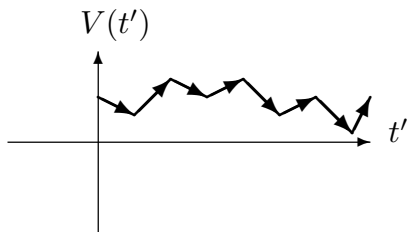


1 回目

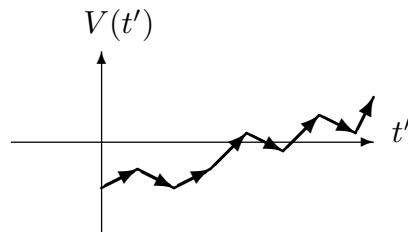


2 回目 (1 回目と似ている。)

ところが別の液体 B に微粒子を溶かして測ると、



1 回目



2 回目 (1 回目と似ている。)

A と B はかなり違う。液体によって違う感じがする。もちろん、軌道そのものは測る度に違うが、同じ液体ならば、似ていると感じる。しかし、違う液体は違うと感じる。2つの液体は平均も分散も同じなので、他に液体 A と B を定量化する方法はないのか？

時間相関関数の定義

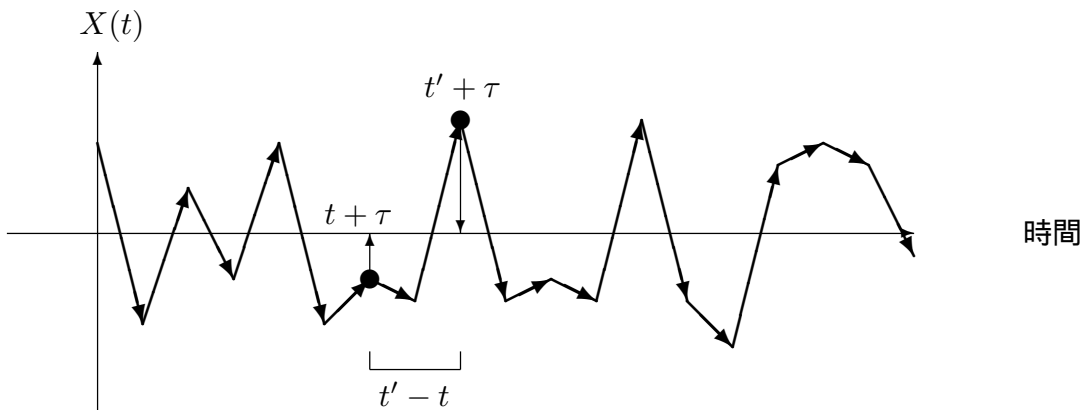
① サンプル平均による定義

② 時間平均による定義

定常過程 (後述) の時だけ使える定義

$$\langle X(t)X(t') \rangle \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T X(t + \tau)X(t' + \tau) d\tau \quad (1)$$

1つのサンプル $X(t)$ について、

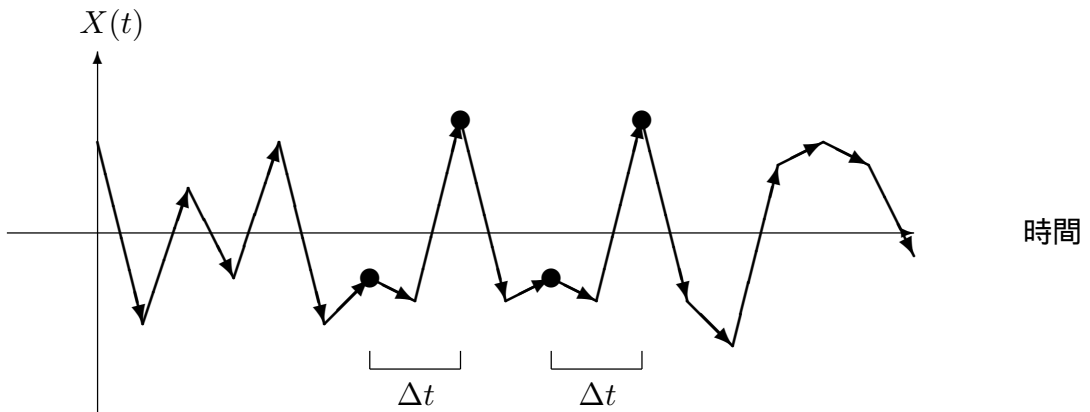


時間軸にそってずらす

定常過程であっても、①と②が何時も同じになるとは限らない。等価な時をエルゴード性が成り立つという。

(3) 基本的な性質

定常過程



Δt が同じであれば、相関も等しい。

$X(t)$ を複数考える。 $\{X_1(t), X_2(t), \dots\} = \{X_\mu(t)\}$ ここで、添え字は、サンプルを表すのではないことに注意。

$$\boxed{\psi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle} \quad (2)$$

例 3次元のブラウン運動 $V(t) = (V_x(t), V_y(t), V_z(t))$

$$\psi_{11}(t) = \langle V_x(t) V_x(0) \rangle \quad (3)$$

$$\psi_{12}(t) = \langle V_x(t) V_y(0) \rangle \quad (4)$$

$$\psi_{31}(t) = \langle V_z(t) V_x(0) \rangle \quad (5)$$

基本的な性質

定常過程から (仮定)

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(t') \rangle = \langle X_\mu(t-t') X_\nu(0) \rangle = \langle X_\mu(0) X_\nu(t'-t) \rangle \quad (6)$$

$t' = 0$ にすると、

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \langle X_\mu(0) X_\nu(-t) \rangle \quad (7)$$

したがって、

$$\boxed{\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)} \quad (8)$$

特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\psi_{\mu\mu}(t) = \psi_{\mu\mu}(-t)} : \psi_{\mu\mu}(t) \text{ は偶関数} \quad (9)$$

(7) 式を t で微分

$$\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(0) \dot{X}_\nu(-t) \rangle \quad (10)$$

右辺の時間の原点を t だけずらす

$$\boxed{\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle} \quad (11)$$

特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = \langle \dot{X}_\mu(0) X_\mu(0) \rangle = 0} \quad (12)$$

宿題の訂正: 前回の授業でも説明しましたが、問題 3 はミスプリがありました。訂正が多くて申し分けありません。

3(20 点) 誤: $\langle X(0)^2 \rangle = D/2 \longrightarrow$ 正: $\langle X(0)^2 \rangle = D/(2\gamma)$

宿題:

23 (10 点) 時間相関関数 $\psi(t) = \langle X(t)X(0) \rangle$ に対して $|\psi(t)| \geq \psi(0)$ を示しなさい。

24 (30 点) 量子力学における時間相関関数の定義

ハイゼンベルグ表示を使って $\hat{X}_\mu(t) \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{X}_\mu e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ とする。ただし、 \hat{X} 、 \hat{H} は演算子を表す。これを使って、 $\psi_{\mu\nu}(t) = \langle \hat{X}_\mu(t) \hat{X}_\nu \rangle$ と定義すると、不都合。なぜなら、これは実数ではない。そこで次の 2 つの定義が通常使われる。

(a) 対称化積

$$\psi_{\mu\nu}^{\text{対}}(t) \equiv \frac{1}{2} \langle \hat{X}_\mu(t) \hat{X}_\nu + \hat{X}_\nu \hat{X}_\mu(t) \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{eq} [\hat{X}_\mu(t) \hat{X}_\nu + \hat{X}_\nu \hat{X}_\mu(t)] \} \quad (13)$$

(b) カノニカル相関

$$\psi_{\mu\nu}^{\text{カノ}}(t) \equiv \langle \hat{X}_\mu(t); \hat{X}_\nu \rangle \equiv \int_0^\beta \frac{d\lambda}{\beta} \text{Tr} \{ \hat{\rho}_{eq} e^{\lambda\hat{H}} \hat{X}_\mu(t) e^{-\lambda\hat{H}} \hat{X}_\nu \} \quad (14)$$

ただし、 $\hat{\rho}_{eq} = e^{-\beta\hat{H}} / \text{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}]$

それぞれについて、以下の事を示せ。

- (1) 演算子がすべて可換になると、古典力学における定義と一致する事。ただし、 $\hat{X}(t)$ は $X(t)$ と考える。
- (2) 実数である事。
- (3) 定常性を仮定して、 $\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)$ となる事。