2005年度非平衡物理学 授業ノート 5

2005.11.24 担当 吉森 明

§3. 線形応答理論

3-1. 時間相関関数

目標 時間相関関数のイメージできるようにする。何に使えるか。性質はどこからくるのか。具体的には以下のことを分かる。

- 時間相関関数 (TCF) は不規則な運動を特徴付けるのに便利。
- TCF の定義はサンプルの平均と時間平均がある。
- TCF は、「記憶」を表すと言える。
- 2 つの性質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

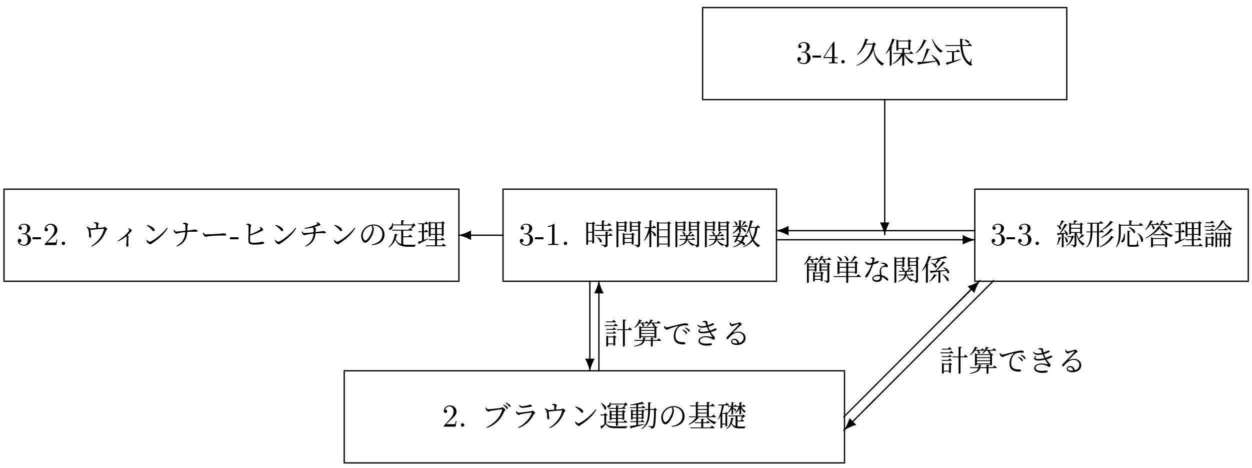
(4) ランジュバン方程式からの計算

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。

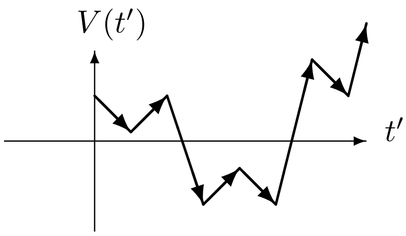
さらに、$\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle$。特に $\mu = \nu$ の時、$\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = 0$。

(1) §3 の流れ

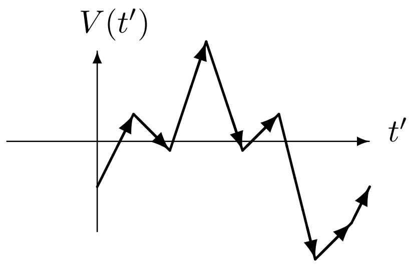


(2) 定義と物理的な意味

○ 液体 A に微粒子を溶かす。$V(t)$ = 微粒子の速度

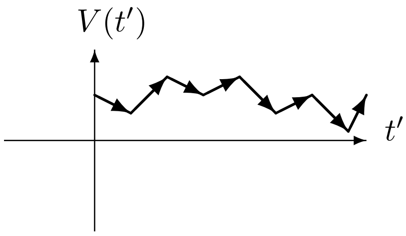


1 回目

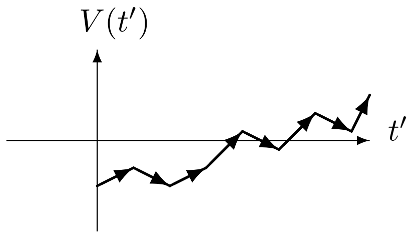


2 回目 (1 回目と似ている。)

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

不規則に変動する変数 $X(t)$ に対して、i 番目の測定で得られた値を $X_i(t)$ とすると、

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i}^{N} X_i(t)X_i(t') \tag{1}$$

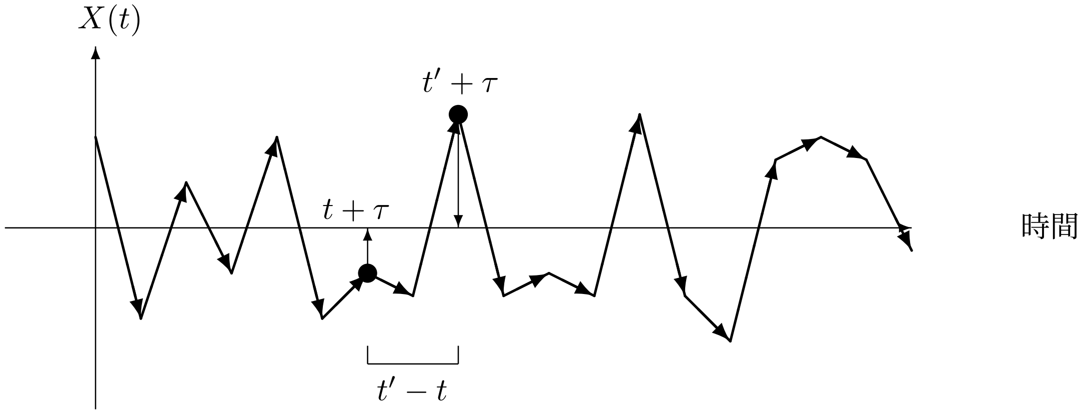
$\langle R(t)R(t')\rangle$ と同じ定義。

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

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T X(t+\tau)X(t'+\tau)d\tau \tag{2}$$

1 つのサンプル $X(t)$ について、

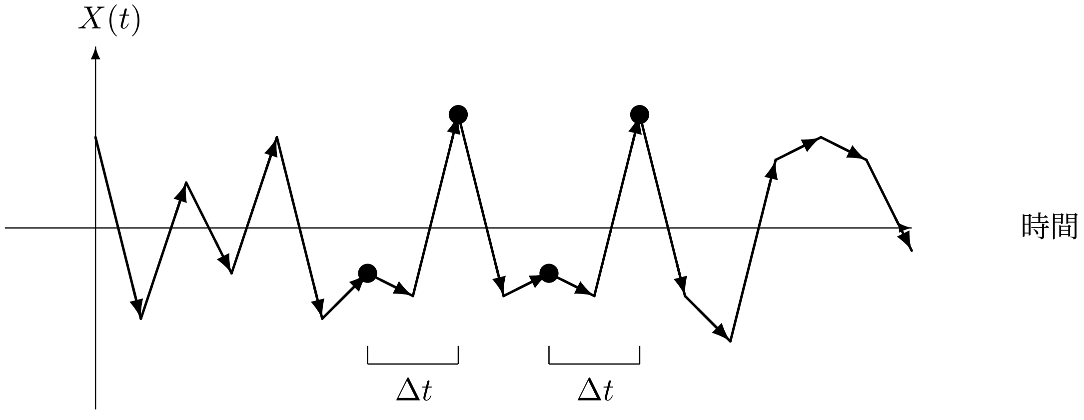


時間軸にそってずらす

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

$$\boxed{\psi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle} \tag{3}$$

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

$$\psi_{11}(t) = \langle V_x(t)V_x(0)\rangle \tag{4}$$
$$\psi_{12}(t) = \langle V_x(t)V_y(0)\rangle \tag{5}$$
$$\psi_{31}(t) = \langle V_z(t)V_x(0)\rangle \tag{6}$$

○ 基本的な性質

● 定常過程から (**仮定**)

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(t')\rangle = \langle X_\mu(t-t')X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(t'-t)\rangle \tag{7}$$

$t'=0$ にすると、

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(-t)\rangle \tag{8}$$

したがって、

$$\boxed{\psi_{\mu\nu}(t) = \psi_{\nu\mu}(-t)} \tag{9}$$

● 特に $\mu=\nu$ の時

$$\boxed{\psi_{\mu\mu}(t) = \psi_{\mu\mu}(-t)} : \psi_{\mu\mu}(t) \text{ は偶関数} \tag{10}$$

● (8) 式を t で微分

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

右辺の時間の原点を t だけずらす

$$\boxed{\langle \dot{X}_\mu(t)X_\nu(0)\rangle = -\langle X_\mu(t)\dot{X}_\nu(0)\rangle} \tag{12}$$

● 特に $\mu=\nu$ の時

$$\boxed{\dot{\psi}_{\mu\mu}(0) = \langle \dot{X}_\mu(0)X_\mu(0)\rangle = 0} \tag{13}$$

宿題:

21 (10 点) 時間相関関数 $\psi(t) = \langle X(t)X(0)\rangle$ に対して $|\psi(t)| \leq \psi(0)$ を示しなさい。

22 (20 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、$\hat{X}_\mu$、$\hat{H}$ 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

$$\psi^{\text{対}}_{\mu\nu}(t) \equiv \frac{1}{2}\langle \hat{X}_\mu(t)\hat{X}_\nu + \hat{X}_\nu\hat{X}_\mu(t)\rangle = \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{eq}[\hat{X}_\mu(t)\hat{X}_\nu + \hat{X}_\nu\hat{X}_\mu(t)]\} \quad (14)$$

（b）カノニカル相関

$$\psi^{\text{カノ}}_{\mu\nu}(t) \equiv \langle \hat{X}_\mu(t); \hat{X}_\nu\rangle \equiv \int_0^\beta \frac{d\lambda}{\beta}\,\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_{eq}e^{\lambda\hat{H}}\hat{X}_\mu(t)\mathrm{e}^{-\lambda\hat{H}}\hat{X}_\nu\} \quad (15)$$

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

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、$\hat{X}_\mu(t)$ は $X_\mu(t)$ 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。

(ヒント) 公式 $\mathrm{Tr}\,AB = \mathrm{Tr}\,BA$ を使う。(b) のカノニカル相関は、積分変数を λ から $\lambda' = \beta - \lambda$ に変換する。