非平衡状態の応答関数の普遍的性質

東北大学 国際高等研究教育機構　弓削 達郎
東京大学 総合文化研究科　清水 明

系に弱い摂動を与えてそれに対する応答を測定することは、系がどのような状態にあるかという情報を引き出すためによく行われる。その際、応答関数が必ず満たすべき関係式があれば、実験結果や計算結果の整合性を確かめる上で非常に便利であろう。系が平衡状態にあるときにはそのような関係式としていくつかの総和則などが知られている [1,2]。これらはいわゆる久保公式から導かれたものである。一方、系が非平衡状態になると久保公式は成り立たなくなるので、素朴にはこれらの関係式も成り立たなくなるように思える。しかし、最近我々はこれらを非平衡状態版に素直に拡張できること、さらにある条件では総和則の値が平衡状態の場合に等しいままになることを見出した [3,4,5]。ここでは、非平衡**定常**状態の**線形**応答に話を限定する。

マクロ物理

まずは、マクロ側から見た現象論を考える。着目系に時間的に一定のある駆動力（ポンプと呼び、シンボリックに F と書く）を掛けると、着目系はやがてマクロに見て時間変化しない状態に落ち着く。例えば、着目系が電気伝導体の場合、直流電圧を与えれば伝導体中を一定の電流が流れ、伝導体から周りの環境に一定のジュール熱が流れる状態ができる。これを定常状態と呼ぶ。定常状態にある着目系に対し外から時間に依存する弱い摂動（プローブと呼び、シンボリックに f と書く）を与えることを考える。電気伝導の例で言うと、直流電圧に加えて弱い交流電圧を与えるとか弱い光を当てるなどである。定常状態はプローブに対して安定である、つまり、プローブを一度掛けて再び切るともとの定常状態に戻るということを仮定する。このとき、着目系の物理量 A の期待値は与えられたプローブの時間変化 $f(t)$ に応じて f の 1 次で次のような時間変化をする：

$$\Delta A(t) = \langle A\rangle_{F+f}^{t} - \langle A\rangle_F = \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}t' \Phi_F(t-t') f(t'). \tag{1}$$

$\Phi_F(t-t')$ は線形応答関数と呼ばれる。Φ_F が時間差 $t-t'$ のみの関数であることは定常状態の時間並進不変性の反映である。Φ_F は上式と因果律 $\Phi_F(t-t') = 0$ for $t < t'$ によって定義される。

ここで、Φ_F の Fourier 変換を考える：$\Xi_F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau e^{i\omega\tau}\Phi(\tau)$. 振動数を複素数に拡張すると、因果律のためにこの関数は上半面で正則となり、平衡状態の場合と同様に Kramers-Kronig の関係式が成り立つ。さらに、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \Xi_F(\omega) = \Phi_F(+0) \tag{2}$$

という関係式や種々のモーメント総和則 [2] が成り立つことも平衡状態の場合と同様である。

ミクロ物理

次に、同じ物理をミクロ側から考える。ここではミクロな記述として量子力学を用いる。そのために、着目系、ポンプ F を発生させる駆動力源、着目系から散逸するエネルギーを受け取る環境

を含めた巨大な孤立系を考える。この状況で着目系が安定な定常状態に達すると仮定する（このとき駆動力源や環境は一般には非定常状態になる)。ここでさらに孤立系の外から着目系にプローブ f を与える。着目系とプローブの相互作用ハミルトニアンが $-\hat{B}f(t)$ （ただし、$\hat{B}$ は着目系の物理量）と書けるとき、この孤立系の運動方程式は次式で与えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}^{\rm tot}_{F+f}(t) = \frac{1}{i\hbar}\Big[\hat{H}^{\rm tot} - \hat{B}f(t), \hat{\rho}^{\rm tot}_{F+f}(t)\Big]. \tag{3}$$

ここで、$\hat{\rho}^{\rm tot}_{F+f}$ は孤立系の密度演算子、$\hat{H}^{\rm tot}$ はプローブなしのときの孤立系のハミルトニアンである。この運動方程式の解を f の1次摂動で求め、着目系の物理量 A の期待値を評価すると、

$$\Delta A(t) = {\rm Tr}\Big(\hat{\rho}^{\rm tot}_{F+f}(t)\hat{A}\Big) - {\rm Tr}\Big(\hat{\rho}^{\rm tot}_{F}(t)\hat{A}\Big) = \int_{-\infty}^{t} {\rm d}t'{\rm Tr}\Big(\hat{\rho}^{\rm tot}_{F}(t')\frac{1}{i\hbar}\Big[\hat{B}, \breve{A}(t-t')\Big]\Big)f(t') \tag{4}$$

となる。$\hat{\rho}^{\rm tot}_{F}$ はプローブなしのときの運動方程式の解で、$\breve{A}(\tau) = e^{i\hat{H}^{\rm tot}\tau/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}^{\rm tot}\tau/\hbar}$ である。

式 (1) と式 (4) を比べると似たような形をしているが、式 (4) は被積分関数の $f(t')$ を除いた部分が時間差 $t-t'$ 以外に t' にも依存している。しかし、マクロ物理（定常状態の時間並進不変性）とミクロ物理の整合性からこの t' 依存性は非常に弱いと考えるべきである。つまり、式 (4) の被積分関数に現れる t' 依存性は必要以上に細かいところまで見てしまっていたために生じたものであり、マクロに見るとこれは効かないと考える[1]。このため、式 (4) の t' 依存性を落とすと、非平衡定常状態の線形応答関数のミクロな表式（response-correlation relation (RCR) と呼ぶ）を得る：

$$\Phi_F(\tau) = {\rm Tr}\Big(\hat{\rho}^{\rm tot}_{F}\frac{1}{i\hbar}\Big[\hat{B}, \breve{A}(\tau)\Big]\Big). \tag{5}$$

ただし、$\hat{\rho}^{\rm tot}_{F}$ は（着目系に非平衡定常状態ができている）適当な時刻での孤立系の状態である。

応答関数の普遍的性質

RCR とモーメント総和則を組み合わせると様々な応答関数の普遍的性質が得られる。例えば、式 (2) からは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}\omega\,\Xi_F(\omega) = {\rm Tr}\Big(\hat{\rho}_F\frac{1}{i\hbar}\Big[\hat{B}, \hat{A}\Big]\Big) \tag{6}$$

という総和則が得られる。ただし、$\hat{\rho}_F$ は着目系の密度演算子である。この関係式の意味やその他の普遍的関係式については文献 [3] にある。また、ミクロな記述として Langevin モデルを用いたもの（ただし、overdamped Langevin モデルでは注意が必要）については文献 [4]、非線形応答関数については文献 [5] にある。

参考文献

[1] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).

[2] 久保 他、統計物理学 岩波講座 現代物理学の基礎 [第2版]（岩波書店、1978）.

[3] A. Shimizu and T. Yuge, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 013002 (2010).

[4] T. Yuge, Phys. Rev. E **82**, 051130 (2010).

[5] A. Shimizu, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 113001 (2010).

[1] この仮定は実は、平常状態に typical state をとったとき、通常の線形応答理論（久保公式）でも必要になる。従って、いかなる条件（どんなマクロ物理量を、どんな時間的・空間的に粗視化して見た場合か）においてこの仮定が正当化できるのかは、平衡近傍か否かとは無関係に、今後の研究課題である。