第四讲

§ Fluctuation and Dissipation

当外场驱动系统时，会有能量耗散到系统里：例如给导体通电，它会发热。

线性响应函数的虚部给出耗散的能量。

考虑简单情况：$A=B$：$H = H_0 + b(t)\,\hat{A}$

$E(t) = {}_n\langle\psi(t)|\, H \,|\psi(t)\rangle_n$ $\quad |\psi(t)\rangle_n$ 表示初始态是 $|n\rangle$，$\quad H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

由于 $\dfrac{d\langle A\rangle}{dt} = \dfrac{\langle[A,H]\rangle}{i\hbar} + \left\langle\dfrac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$

$$\therefore \frac{dE(t)}{dt} = \frac{d\langle H\rangle}{dt} = {}_n\langle\psi(t)|\overset{\partial H/\partial t}{\boxed{\frac{db(t)}{dt}\hat{A}}}|\psi(t)\rangle_n = \langle\hat{A}\rangle_n(t)\cdot\frac{db(t)}{dt}$$

推广到热平衡系统：$\langle\cdots\rangle_n \longrightarrow \langle\cdots\rangle_T = \dfrac{1}{Z}\sum_n\langle n|e^{-\beta H}\cdots|n\rangle$

由于 $\langle A\rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, R_{AA}(t-\tau)\, b(\tau)$ $\quad$（设 $\langle A\rangle_T = 0$ 在平衡态）

$$\therefore \boxed{\frac{dE}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, R_{AA}(t-\tau)\, b(\tau)\cdot\frac{db(t)}{dt}}$$

积分：$\Delta E = \int dt\,\dfrac{dE(t)}{dt} = \int dt\,\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau\, R_{AA}(t-\tau)\, b(\tau)}\,\dfrac{db(t)}{dt}$

$$\langle A\rangle(t) = \int\frac{d\omega}{2\pi}\langle\tilde{A}\rangle(\omega)\, e^{-i\omega t} = \int\frac{d\omega}{2\pi} R_{AA}(\omega)\, b(\omega)\, e^{-i\omega t}$$

$$= \int dt\left[\int\frac{d\omega}{2\pi} R_{AA}(\omega)\, b(\omega)\right]\frac{db(t)}{dt}\cdot e^{-i\omega t}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi} R_{AA}(\omega)\, b(\omega)\left(\int_{-\infty}^{\infty} dt\,\dot{b}(t)\, e^{-i\omega t}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\, i\omega\, R_{AA}(\omega)\, |b(\omega)|^2 \qquad \text{（分部积分）}$$

由于 $\mathrm{Re}(R_{AA}(\omega)) = \mathrm{Re}(R_{AA}(-\omega))$，$|b(\omega)|^2 = \left|\int_{-\infty}^{\infty} dt\, b(t)\, e^{i\omega t}\right|^2 = |b(-\omega)|^2$．$\quad\therefore$ 实部对 ΔE 无贡献

记 $R_{AA}(\omega)$ 虚部为 $R''_{AA}(\omega)$，$\quad \Delta E = -2\int_0^{\infty}\dfrac{d\omega}{2\pi}\,\omega\, R''_{AA}(\omega)\, |b(\omega)|^2$，当 $\omega = E_m - E_n > 0$，$R''_{AA}(\omega) < 0$，$\Rightarrow \Delta E > 0$

- $R''_{AA}(\omega)$ 给出系统对探测（at ω）导致的能量耗散。 $\quad\omega$ 其实是 $\hbar\omega$ 即增减的能量

在没有外场驱动时，系统仍有涨落（平衡涨落）

- 定量 spectrum of fluctuation （自己演化偏离 $A(0)$，虽然 $\langle A(t)\rangle = \langle A(0)\rangle$）

$$S(t) \equiv \langle A(t) A(0)\rangle_T = \frac{1}{Z}\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\, \underline{e^{i\hat{H}t} A e^{-i\hat{H}t}}\, A\right) \leftarrow \text{时间关联函数}$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_{nm} e^{-\beta E_n} e^{i(E_n - E_m)t} \langle n|A|m\rangle\langle m|A|n\rangle \neq \langle A^2\rangle$$

（$[A,H]=0$ 时，$\langle m|A|n\rangle = A_n\delta_{mn}$）
$S(t) = \frac{1}{Z}\sum_n e^{-\beta E_n} A_n^2 = \langle A^2\rangle$

- 动力学结构因子（dynamic structure factor）

$$S(\omega) \equiv \int dt\, e^{i\omega t} S(t) = \frac{2\pi}{Z}\sum_{nm} e^{-\beta E_n}|A_{nm}|^2\, \delta(\omega - E_{mn}) \leftarrow \text{谱表示}$$

类似于弹簧有自然频率，当驱动频率与其共振时响应最大。$S(\omega)$ 与 $R_{AA}(\omega)$ 的关系？

- 与 $R''_{AA}(\omega)$ 对比

$$R''_{AA}(\omega) = -\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}|A_{nm}|^2 e^{-\beta E_n}\left(\delta(\omega - E_{mn}) - \underbrace{\delta(\omega + E_{mn})}_{\to\, \delta(\omega-(E_n-E_m))}\right) \quad (A)$$

$\hookrightarrow \delta(\omega - (E_m - E_n))$

$$= -\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}|A_{nm}|^2\left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}\right)\delta(\omega - E_{mn})$$

$$= -\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}|A_{nm}|^2 e^{-\beta E_n}\left(1 - e^{-\beta \overset{\to\,\omega}{E_{mn}}}\right)\delta(\omega - E_{mn})$$

得到 fluctuation - dissipation theorem：

$$\chi_{AA} = \frac{\partial\langle A\rangle}{\partial b} = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$$

$$\boxed{R''_{AA}(\omega) = -\frac{1}{2}\left(1 - e^{-\beta\omega}\right) S(\omega)}$$

or：
$$S(\omega) = \frac{-2}{1 - e^{-\beta\omega}} R''_{AA}(\omega)$$

- A 式的推导

$$R_{AA}(t) = -\frac{i}{Z}\theta(t)\,\mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}[A(t), A(0)]\right) = -\frac{i}{Z}\theta(t)\sum_{nm} e^{-\beta E_n}|A_{nm}|^2\left(e^{-iE_{mn}t} - e^{iE_{mn}t}\right)$$

$$\langle n|A(t)|m\rangle\langle m|A|n\rangle = |A_{nm}|^2 e^{-iE_{mn}t}$$

$$R_{AA}(\omega) = -\frac{i}{Z}\int dt\, \theta(t) e^{i\omega t}\sum_{mn}|A_{nm}|^2 e^{-\beta E_n}\left(e^{-iE_{mn}t} - e^{+iE_{mn}t}\right)$$

$$= -\frac{i}{Z}\sum_{nm}|A_{n,m}|^2 e^{-\beta E_n}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, \theta(t)\left[e^{i(\omega - E_{mn})t} - e^{i(\omega + E_{mn})t}\right] \leftarrow \theta(t) \text{ 的傅立叶变换，} \omega - E \text{ 和 } \omega + E$$

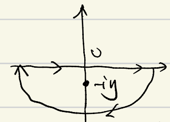
$$= \frac{1}{Z}\sum_{mn}|A_{nm}|^2 e^{-\beta E_n}\left(\frac{1}{\omega - E_{mn} + i\eta} - \frac{1}{\omega + E_{mn} + i\eta}\right) \quad \text{其中} \lim_{\eta\to 0^+}\frac{1}{\omega - E + i\eta} = P\frac{1}{\omega - E} - i\pi\delta(\omega - E),$$

$$\hat{\theta}(\omega - E) = \lim_{\eta\to 0^+}\frac{i}{\omega - E + i\eta} \quad \text{是 } \theta(t) \text{ 在 } \omega - E \text{ 的傅立叶变换}$$

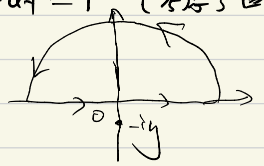
证明：我们计算逆变换

$$I = \lim_{\eta\to 0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\frac{i}{\omega + i\eta} e^{-i\omega t} \quad \text{应该为 } \theta(t)$$

$\omega \to z$, I 化为围道积分.



1. $t>0$. e^{-izt} 在下半平面 $(\mathrm{Im}\,z<0) \longrightarrow 0$ 当 $|z|\to\infty$,
pole 在 $z=-i\eta$, 在下半平面. 留数为 $a_{-1}=\frac{i}{2\pi}$, $I=-2\pi i\cdot a_{-1}=1$ (考虑了回路方向⊖)



2. $t<0$. e^{-izt} 在上半平面 $(\mathrm{Im}\,z>0) \longrightarrow 0$, 当 $|z|\to\infty$
围道内无 pole, $\therefore I=0$.

这就证明了 $\theta(\omega)=\frac{i}{\omega+i\eta}$ 是 $\theta(t)$ 的付立叶变换

再来证明: $\lim\limits_{\eta\to 0^+}\frac{1}{\omega-E+i\eta} = P\frac{1}{\omega-E} - i\pi\delta(\omega-E)$ $\longrightarrow$ (C)

计算 $I=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\,\frac{b(\omega)}{\omega-(E-i\eta)}$ 在复 ω 平面, pole 在 $E-i0^+$ 处

$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega \longrightarrow$ ① ③ ② ($E-i0^+$)

$I=①+②+③$. 其中 $①+②=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\, P\left(\frac{1}{\omega-E}\right)b(\omega)$, $③=\oint d\omega\,\frac{b(\omega)}{\omega-(E-i\eta)} = -\frac{1}{2}2\pi i\cdot a_{-1}$ 顺时针.
$=-\pi i\, b(E-i\eta) = -\pi i\, b(E)$

与 C 式右边直接积分一致. 因此等式成立

- 利用上面的推导.

$$R_{AA}(\omega)=\frac{1}{Z}\sum_{mn}|A_{nm}|^2e^{-\beta E_n}\left(P_r\frac{1}{\omega-E_{mn}} - P_r\frac{1}{\omega+E_{mn}}\right) - i\frac{\pi}{Z}\sum_{nm}|A_{nm}|^2e^{-\beta E_n}\left(\delta(\omega-E_{mn})-\delta(\omega+E_{mn})\right)$$

于是我们得到 (A) 式.

- 例: 设 $A=S_q^z=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_i e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}_i}S_i^z$

$$S(t)=\langle S_q^z(t)S_q^z(0)\rangle$$

$$\Rightarrow S(q,\omega)=\int dt\, S(t)e^{i\omega t} = \frac{2\pi}{Z}\sum_{nm}|\langle n|S_q^z|m\rangle|^2e^{-\beta E_n}\delta(\omega-E_{mn})$$

$$S(q,\omega)=\frac{-2}{1-e^{-\beta\omega}}R''(q,\omega)$$