Тема 1. Функції відгуку у фізиці конденсованого стану.

① Основні ~~ек~~експериментальні методи дослідження конденсованих середовищ.

Три класи експериментальних методів: термодинамічні експерименти, транспортні експерименти, Сканувальна тунельна спектроскопія.
Altland - Simons, Розділ 7.1.

② Теорія лінійного відгуку I.
(а) Основні поняття:
причинність, наслідки незалежності від часу гамільтоніану системи, лінійність, відгук трансляційно інваріантних систем.
(в) Мікроскопічна теорія відгуку (функціональний підхід).
Загальний вигляд кореляційної функції.

Altland - Simons, Розділ 7.2.

③ Теорія лінійного відгуку II.
Загальна теорія.
Переходимо на Giuliani - Vignale, Розділ 3.2.

Використовуємо операторний підхід!

(a) Функції відгуку. Операторний формалізм.

Розглянемо систему, що описується незалежним від часу гамільтоніаном $\hat{H}$. Він збурюється залежним від часу зовнішнім полем $F(t)$, яке поєднано лінійно зі спостережуваною $\hat{B}$ системи. Таким чином,

$$\hat{H}_F(t) = \hat{H} + F(t)\cdot\hat{B}. \qquad (*)$$

Ми вважаємо, що $F(t)=0$ при $t<t_0$.

Наприклад, для електронного газу у зовнішньому потенціалі $V_{ext}(\vec{r},t)$ наше збурення дорівнює

$$\int V_{ext}(\vec{r},t)\,\hat{n}(\vec{r})\,d\vec{r},$$

де $\hat{n}(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$ – оператор густини.

Тобто $F(t)\to V_{ext}(\vec{r},t)$ та $\hat{B}\to\hat{n}(\vec{r})$.

Оскільки при лінійному відгуку різні набивнні збурення додаються незалежно, то немає проблеми у розгляді лише одного збурення у $(*)$.

При $t\le t_0$ система за припущенням знаходиться в основному стані, або більш загально, у тепловій рівновазі з великим резервуаром з температурою T. Це означає, що n-ий власний стан незбуреного гамільтоніану $\hat{H}$ із власною енергією E_n, заповнено з імовірністю

$$p_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}, \text{ де } \beta \equiv \frac{1}{k_B T}, \text{ а}$$

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n}.$$

При $t \leq t_0$ еволюція в часі описується фазовим множником, який не змінює властивості системи.

Коли $t = t_0$ зовнішнє поле вмикається і система починає еволюцію під його впливом.
Ключовим є припущення, що слабка взаємодія між системою та тепловим резервуаром, яка потрібна для встановлення теплової рівноваги на початку, незначно впливає на еволюцію ансамблю за час наших спостережень. Зокрема, імовірності заповнення p_n залишаються постійними: переходи між ортогональними станами НЕ дозволені.
Це припущення є характерним для адіабатичного процесу. Воно є справедливим тільки якщо характерний час еволюції швидкіший за час встановлення теплової рівноваги. Якщо час еволюції менший за час встановлення рівноваги, то система може обмінюватися енергією з резервуаром, що призводить до перерозподілу заповнення рівнів.

4

Таким чином, еволюція системи у часі в представленні Шредінгера описується р-м Шредінгера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_n(t)\rangle = \hat{H}_F(t)|\Psi_n(t)\rangle$$

із початковою умовою

$$|\Psi_n(t_0)\rangle = |\Psi_n\rangle.$$

Його розв'язок

$$|\Psi_n(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\Psi_n(t_0)\rangle,$$ де

$\hat{U}(t,t_0)$ – унітарний оператор еволюції у часі.

У відсутності збурення

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}.$$

Для того, щоб отримати пертурбативний розклад $\hat{U}$ по ступінях F запишемо

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{U}_F(t,t_0),$$

де $\hat{U}_F(t,t_0)$ – частина оператора еволюції, яка пов'язана з F.

Це, фактично, представлення взаємодії:

$$|\Psi^I(t)\rangle \equiv e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}|\Psi(t_0)\rangle \quad + \quad \Rightarrow$$

$$|\Psi_n^I(t)\rangle = \hat{U}_F(t,t_0)|\Psi^I(t_0)\rangle$$

$$+ \Rightarrow |\Psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_0-t_0)}|\Psi^I(t)\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t\quad)}|\Psi^I(t)\rangle =$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}U_F(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

Можна показати (див. к.м.) з (+)
обравши $t_0 = 0$ та $t_1 = 1$

$$i\partial_t |\tilde{\Psi}_n(t)\rangle = (i\partial_t e^{iHt})|\Psi_n(t)\rangle +$$

$$+ e^{iHt}\underbrace{(i\partial_t |\Psi_n(t)\rangle)}_{\text{Точніше (можна отримати!)}} = e^{iHt}(\underbrace{-H + H_F}_{F(t)\hat{B}})|\Psi_n(t)\rangle$$

Відповідно, $U_F(t, t_0)$ задовільняє рівнянню

$$(**)\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}_F(t, t_0) = F(t)\hat{B}(t - t_0)\hat{U}_F(t, t_0)$$

з початковою умовою $\hat{U}_F(t_0, t_0) = 1$.

Залежний від часу оператор $\hat{B}(t - t_0)$ в представленні Гайзенберга

$$\hat{B}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{B}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

(Увага! тут $\hat{H}$, а не $\hat{H}_F$!)
співпадає з оператором $\hat{B}$ в картині Шредінгера при $t = 0$.

(**) корисно саме тому, що залежність від часу в $\hat{U}_F$ виключно завдяки збуренню. Якщо підставити в (**) нульове наближення $\hat{U}_{F,0}(t, t_0) = 1$ та проінтегрувати по часу, то отримаємо $\hat{U}_F$ у першому наближенні:

$$\hat{U}_{F,1}(t, t_0) = \left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{B}(t' - t_0)F(t')dt'\right].$$

Відповідно, повний оператор еволюції у часі в першому наближенні по F:

$$\hat{U}_1(t - t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)}\times$$

$$\times\left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{B}(t' - t_0)F(t')dt'\right].$$

6

Тепер розглянемо другу спостережувану $\hat{A}$, яка при $t < t_0$ має середнє рівноважне значення:

$$\langle \hat{A} \rangle_0 = \sum_n P_n \langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_n \rangle, \quad t \leq t_0.$$

Наша мета знайти очікування $\hat{A}$ при $t > t_0$ під впливом збурення.

Формально

$$\langle \hat{A} \rangle_F (t) = \sum_n P_n \langle \Psi_n(t) | \hat{A} | \Psi_n(t) \rangle,$$

де $|\Psi_n(t)\rangle$ знаходяться за допомогою $\hat{U}(t, t_0)$. Оскільки нас цікавить тільки лінійний відгук, то досить використати тільки U_1 та $\hat{U}_1^+$.

$$|\Psi_n(t)\rangle = U_1(t, t_0) |\Psi_n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \times$$
$$\times \left[\hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{B}(t'-t_0) F(t') dt' \right] |\Psi_n\rangle,$$

$$\langle \Psi_n(t)| = \langle \Psi_n | U^+(t, t_0) =$$
$$= \langle \Psi_n | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \left[\hat{1} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \hat{B}(t'-t_0) F(t') dt' \right].$$

З $\left[1 + i \int B(t') dt'\right] \hat{A} \left[1 - i \int B(t') dt'\right]$ виникне комутатор $-i\left[\hat{A}(t-t_0), \hat{B}(t'-t_0)\right]$.

$\hat{A}(t)$ якщо ще вставимо $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \times$ $\times e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$

При виводі кінцевої формули також важливе співвідношення:

$$\langle \Psi_n | [\hat{A}(t-t_0), \hat{B}(t'-t_0)] | \Psi_n \rangle =$$

$$= \langle \Psi_n | [\hat{A}(t), B(t')] | \Psi_n \rangle .$$

$$\langle \hat{A} \rangle_F (t) - \langle \hat{A} \rangle_0 =$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_0 F(t') dt', \quad (*)$$

де обидва $A(t)$ та $B(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{B} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ (це представлення Гайзенберга, але для $\hat{H}$).
$[\hat{A}, \hat{B}]$ – комутатор та $\langle \ldots \rangle_0$ означає усереднення по термодинамічному ансамблю (знову з $\hat{H}$, а не $\hat{H}_F$!).
Оскільки $\hat{H}$ не залежить від часу, то

$$\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle_0 = \langle [\hat{A}(\tilde{t}), \hat{B}] \rangle_0 ,$$

де $\tilde{t} \equiv t - t' > 0$.
Ми визначаємо запізнюючу вольну ф-ю відгуку χ_{AB} наступним чином:

$$\chi_{AB}(\tilde{t}) \equiv -\frac{i}{\hbar} \theta(\tilde{t}) \langle [\hat{A}(\tilde{t}), B] \rangle_0 ,$$

де $\theta(\tilde{t})$ – функція Гевісайда.
Після заміни змінної $t' = t - \tilde{t} \Rightarrow \tilde{t} = t - t'$

$$\langle \hat{A} \rangle_1 (t) \equiv \langle \hat{A} \rangle_F (t) - \langle \hat{A} \rangle_0 =$$

$$= \int_0^{t-t_0} \chi_{AB}(\tilde{t}) F(t - \tilde{t}) d\tilde{t} . \quad (!)$$

Ф-ла для ф-ї відгуку не має посилання на „початковий час вмикання". Тому можна дозволити спрямувати $t_0 \to -\infty$, якщо збурення також зникає при $t \to -\infty$, тобто $\langle \hat{A} \rangle_1 (t) = \int_0^{\infty} \chi_{AB}(\tilde{t}) F(t - \tilde{t}) d\tilde{t}$.

Оскільки, якщо $\hat{A}$ та $\hat{B}$ – ермітові оператори, як ми неявно припустили, то $\chi_{AB}(t)$ зв'язує дві дійсні величини.

Нагадаю, що комутатор двох ермітових операторів $\hat{A}(t)$ та $\hat{B}$ є антиермітовим, тобто змінює знак при ермітовому спряженні. Його очікування тоді повністю уявне число. Саме тому означення ф-ї відгуку включає „$-i$", щоб мати дійсний відгук на дійсне збурення. Хоча можна розглядати і відгук для будь-якої пари операторів.

(в) Періодичне збурення.

Ми вже бачили, що центральну роль грає періодичне збурення

$$F(t) = F_\omega e^{-i\omega t} + c.c. \text{ (комплексне спряження)} \quad (**)$$

Нагадаю, що в наших означеннях

$$F(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{F}(\omega) e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \quad \text{та} \quad \hat{F}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(t) e^{i\omega t} dt.$$

Є, однак, наступна проблема – періодичний потенціал в (*) не зникає при $t \to -\infty$. Тому ми не можемо вважати, що система була у рівновазі в минулому.

Стандартний спосіб уникнути цієї проблеми – це „адіабатичне ~~вмик~~ вмикання" збурення: припустимо, що амплітуда періодичного потенціалу повільно вмикається за законом $e^{\eta t}$, де $\eta > 0$, а η^{-1} є масштаб часу, який є набагато довшим за період збурення.

Таким чином, розглядається збурення

$$F(t) = F_\omega e^{-i(\omega+i\eta)t} + c.c. \qquad (***)$$

Поки η присутнє, ми можемо використовувати описаний вище формалізм. Ми можемо розглянути границю $\eta \to 0^+$ в кінці обчислення. Якщо границя існує, то вона описує фізичний відгук системи на рівномірне періодичне поле, тобто таке поле, яке триває настільки довго, щоб „забути" про штучне адіабатичне вмикання.

Точніше, η не може стати меншим за γ, де γ – порядку оберненого часу встановлення теплової рівноваги. Таким чином, теорія розглянена при $\omega \gg \gamma$.

Підставивши $(***)$ в $(*)$ зі с. 7 маємо

$$\langle\hat{A}\rangle_1(t) = \langle\hat{A}\rangle_1(\omega) e^{-i\omega t} + c.c.,$$

де $\langle\hat{A}\rangle_1(\omega) = \chi_{AB}(\omega) F_\omega$, та

$$\chi_{AB}(\omega) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^\infty \langle[\hat{A}(\tilde{t}), \hat{B}]\rangle_0 e^{i(\omega+i\eta)\tilde{t}}.$$

10 (c) Спектральне представлення Лемана для запізнюваної функції:

комутатор $\langle[\hat{A}(\tilde{t}), B]\rangle_0$ корисно розкласти по повному набору $|\Psi_n\rangle$ власних станів гамільтоніана $\hat{H}$:
$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$. Нагадаю, що в представленні Гайзенберга
$\hat{B}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{B}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ та
$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}.$$

Введемо позначення
$$O_{nm} \equiv \langle\Psi_n|\hat{O}|\Psi_m\rangle = [O^{\dagger}_{mn}]^*,$$
$$\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar = -\omega_{mn}.$$

Тоді $\langle[\hat{A}(\tilde{t}), \hat{B}]\rangle_0 =$
$$= \sum_{m,n} P_m\left(e^{i\omega_{mn}\tilde{t}}A_{mn}B_{nm} - e^{i\omega_{nm}\tilde{t}}B_{mn}A_{nm}\right)$$
$$= \sum_{m,n}(P_m - P_n)e^{i\omega_{mn}\tilde{t}}A_{mn}B_{nm}. \quad (+)$$

Substituting (+) in $\chi_{AB}(\omega)$ отримуємо представлення Лемана
$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm}\frac{P_m - P_n}{\omega - \omega_{nm} + i\eta}A_{mn}B_{nm},$$
$\eta \to 0^+$.

$\chi_{AB}(\omega)$ є аналітичною у верхній напівплощині ω та має прості полюси у нижній напівплощині.

Границю $T=0$ представлення Лемана можна отримати поклавши
$P_n = 1$ для основного стану $(n=0)$
$P_n = 0$ при $n>0$.

Цікавою властивістю представлення Лемана є те, що члени з $n=m$ (або з $E_n = E_m$) не дають внеску у суму, оскільки $P_n = P_m$.
Це означає, що якщо ми позначимо $\hat{A}_0$ діагональну частину оператора $\hat{A}$ в представленні, в якому $\hat{H}$ є діагональним, а недіагональну частину $\hat{A}$ у тому ж представленні як $\tilde{A} = \hat{A} - \hat{A}_0$, то тоді $\chi_{AB} = \chi_{\tilde{A}B}$.
Ми, таким чином, бачимо, що ф-я відгуку зникає, якщо $\hat{A}$ або $\hat{B}$ є константами незбуреного руху (тобто комутують з $\hat{H}$), оскільки $\tilde{A}$ або $\tilde{B}$ у цьому випадку дорівнюють нулю.

Далі ми використаємо ф-лу Сохацького

$$\lim_{\eta \to 0^+} \frac{1}{\omega - y + i\eta} = P\frac{1}{\omega - y} - i\pi\delta(\omega - y),$$

де P – головне значення Коші:

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\omega)}{\omega - y} d\omega = \lim_{\eta \to 0^+} \left(\int_{-\infty}^{y-\eta} \frac{f(\omega)}{\omega - y} dy + \int_{y+\eta}^{\infty} \frac{f(\omega)}{\omega - y} d\omega \right) \quad \forall f(\omega).$$

Розділення на Re та Im part має найпростіший вигляд, коли $\hat{B}=\hat{A}^+$.
Тоді $A_{mn}B_{nm}=|A_{mn}|^2$ і ми маємо

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AA^+}(\omega)=\frac{1}{\hbar}\,P\sum_{n,m}\frac{|A_{mn}|^2}{\omega-\omega_{nm}}(\rho_m-\rho_n)$$

та

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega)=-\frac{\pi}{\hbar}\sum_{nm}(\rho_m-\rho_n)|A_{mn}|^2\delta(\omega-\omega_{nm})$$

$\delta(\omega-\omega_{nm})$

$$=-\frac{\pi}{\hbar}\sum_{nm}\rho_m\left[|A_{mn}|^2\delta(\omega-\omega_{nm})-|A^+_{mn}|^2\delta(\omega+\omega_{nm})\right]$$

$\delta(\omega+\omega_{nm})$

$\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega)<0$ для $\omega>0$ та
>0 для $\omega<0$.

Корисно розширити означення ф-ї відгуку χ_{AA^+} на комплексні значення аргументу:

$$(!)\quad \tilde{\chi}_{AA^+}(z)=\frac{1}{\hbar}\sum_{nm}\frac{|A_{mn}|^2}{z-\omega_{nm}}(\rho_m-\rho_n),\ z\in\mathbb{C}.$$

Відзначимо, що $\tilde{\chi}_{AA^+}(\omega+i0)=\chi_{AA^+}(\omega)$,
але $\tilde{\chi}_{AA^+}(\omega-i0)=\chi^*_{AA^+}(\omega)$
(це вже буде не запізнювальна, а випереджаюча ф-я Гріна).
Таким чином, $\tilde{\chi}_{AA^+}(z)$ має розрив повздовж дійсної осі з величиною
$2i\,\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega)$.
Дуже корисним є те, що $\tilde{\chi}_{AA^+}(z)$

може бути пов'язана з $Im\,\chi_{AA^+}(\omega)$, яка задана на дійсній осі:

$$\tilde{\chi}_{AA^+}(z) = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{Im\,\chi_{AA^+}(\omega)}{z-\omega}\,d\omega.$$

В цьому можна переконатися підставивши сюди $Im\,\chi_{AA^+}(\omega)$ та отримавши (!).

(d) Симетрія та співвідношення взаємності

Структура рівнянь

$$(*)\quad \chi_{AB}(\omega) = -\frac{i}{\hbar}\lim_{\eta\to 0^+}\int_0^\infty \langle[\hat{A}(\tilde{t}),\hat{B}]\rangle_0\, e^{i(\omega+i\eta)\tilde{t}}\,d\tilde{t}$$

та

$$(**)\quad \chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm}\frac{\rho_m-\rho_n}{\omega-\omega_{nm}+i\eta}A_{mn}B_{nm}$$

дозволяє отримати кілька корисних та точних співвідношень між ф-ми відгуку.

1) Спочатку розглянемо статичний випадок, $\omega = 0$. З (**) видно, що тільки головна частина $\frac{1}{\omega-\omega_{nm}+i\eta}$ виживає, оскільки $(\rho_n-\rho_m)\delta(\omega_{nm})=0$. Це означає, що $\chi_{AA^+}(0)$ є дійсним та від'ємним,

$$\chi_{AA^+}(0) \leq 0,$$

що є критично важливим для стабільності системи. Слідує з

$$\frac{e^{-\beta E_m} - e^{-\beta E_n}}{E_m - E_n} < 0.$$

2) Інша цікава властивість:

$$\chi_{AB}(0) = \chi_{BA}(0),$$

яка доводиться $m \leftrightarrow n$ в (**).

$$\chi_{AB}(0) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_m - P_n}{\omega_{mn} + i\eta} A_{mn} B_{nm}$$

$$\chi_{BA}(0) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_m - P_n}{\omega_{mn} + i\eta} B_{mn} A_{nm} = \left| m \leftrightarrow n \right|$$

$$= \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_n - P_m}{\omega_{nm} + i\eta} A_{mn} B_{nm}$$

Дійсні частини співпадають, а уявна дорівнює нулю.

3) У загальному випадку при скінченій частоті $\chi_{AB}(-\omega) = \left[\chi_{A^+B^+}(\omega)\right]^*$.

$$\chi_{A^+B^+}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_m - P_n}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} A^+_{mn} B^+_{nm}$$

$$\left[O_{nm}\right]^* = O^+_{mn}$$

$$= \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_m - P_n}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} A^*_{nm} B^*_{mn} = \left| n \leftrightarrow m \right| =$$

$$= \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{P_n - P_m}{\omega - \omega_{mn} + i\eta} A^*_{mn} B^*_{nm} =$$

$$= \frac{1}{\hbar} \sum_{nm} \left(\frac{\rho_m - \rho_n}{(-\omega) - \omega_{nm} + i\eta} \right)^* A_{mn}^* \; B_{nm}^*$$

Таким чином, $\left[\chi_{AB}(-\omega)\right]^* = \chi_{A^+B^+}(\omega)$.

З цього випливають окремі співвідношення для дійсних та уявних частин: $\chi_{AB}(\omega) \equiv \mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) + i\,\mathrm{Im}\,\chi_{AB}$.

А саме $\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \mathrm{Re}\,\chi_{A^+B^+}(-\omega)$,

$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega) = -\mathrm{Im}\,\chi_{A^+B^+}(-\omega)$.

Ці формули особливо корисні, коли $\hat{A}$ та $\hat{B}$ – ермітові оператори.

Тоді $\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(-\omega) = \mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega)$,

$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(-\omega) = -\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)$, тобто

$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega)$ – парна ф-я ω, а

$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)$ – непарна.

Ця властивість також напряму слідує з того, що відгук $\chi_{AB}(\hat{t})$ є дійсним.

4) Лінійний відгук системи, яка симетрична відносно обернення часу (наприклад, електронна рідина у відсутності магнітного поля) задовільняє наступним співвідношенням взаємності:

$$\chi_{AB}(\omega) = \chi_{{}^tB\,{}^tA}(\omega), \quad (!)$$

де ${}^t\hat{A} = (\hat{A}^+)^*$ – транспонування $\hat{A}$.

Увага! Див. перелік виправлень до підручника.

В загальному випадку симетрії відносно обернення часу може бути недостатньо, щоб мати (!). Це рівняння отримано за припущення, що можливо обрати повний набір власних функцій гамільтоніана дійсними. Але, наприклад, спін-орбітальна взаємодія зберігає симетрію відносно обернення часу, але власні ф-ї комплексні.
З іншого боку, іноді можна мати набір власних ф-ій дійсний, але гамільтоніан не інваріантний відносно обернення часу. Простий приклад, Зеєманівська взаємодія між спінами та магнітним полем у певному напрямку. (Див. рані Уточнення.)

Наприклад, оператор густини частинок $t\hat{n}(\vec{r}) = \hat{n}(\vec{r})$, але для парамагнітної густини струму $t\vec{j}_p(\vec{r}) = -\vec{j}_p(\vec{r})$ через наявність „i" в операторі імпульсу $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$: $\vec{j}_p = \frac{1}{2m}\sum_i [\vec{p}_i\,\delta(r-r_i) + \delta(r-r_i)\times \vec{p}_i]$.

Доведення. Таки припустимо, що власні ф-ї гамільтоніану можна обрати дійсними.

Тоді $A_{mn} = \langle \psi_m | \hat{A} | \psi_n \rangle =$
$= (\langle \psi_n | \hat{A}^+ | \psi_m \rangle)^* = \langle \psi_n | (\hat{A}^+)^* | \psi_m \rangle =$
$= {}^tA_{nm}$.

Якщо підставити відповідні A_{mn} та B_{nm} у спектральне представлення, то

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{\rho_m-\rho_n}{\omega-\omega_{nm}+i\eta}\underset{A_{mn}}{[{}^tB]_{mn}}\,\underset{B_{nm}}{[{}^tA]_{nm}} =$$

$$= \chi_{{}^tB\,{}^tA}(\omega).$$

Тепер розглянемо електронну рідину у присутності магн. поля $\vec{B}$, яке порушує симетрію обернення часу. Тепер власні ф-ї не є дійсними, але якщо $\psi_n(\vec{B})$ є власною функцією для енергії E_n, то тоді (для спектрів!) $\psi_n^*(\vec{B})$ є власною функцією для цієї ж енергії, але в полі $-\vec{B}$. Таким чином, виведення формули таке ж саме, як і раніше, але на останньому кроці вже маємо $\psi_n^*(\vec{B}) = \psi_n(-\vec{B})$. Оскільки енергії не змінюються при зміні напрямку магн. поля, то

$$\chi_{AB}(\omega, \vec{B}) = \chi_{{}^tB\,{}^tA}(\omega, -\vec{B}).$$

Уточнення!

Наприклад, для частинок зі спіном 1/2, ${}^TA \equiv \hat{\sigma}_y ({}^tA) \hat{\sigma}_y$ (σ_y — друга матриця Паулі, які відповідають кожній частинці

18

в системі), співвідношення взаємності правильніше записувати так:

$$\chi_{AB}(\omega, \vec{B}) = \chi_{T_B T_A}(\omega, -\vec{B})\ !$$

Це слідує з того, що якщо вже спінорна хвильова ф-я є власною ф-ю гамільтоніана в магн. полі $\vec{B}$, то тоді $i\hat{\sigma}_y \Psi_n^*$ є власною ф-ю гамільтоніана з $-\vec{B}$. Див. Давидов (укр. видання) с. 571:

$i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$.

Співвідношення взаємності є дуже важливими, оскільки вони встановлюють математичний зв'язок між різними фізичними процесами. Наприклад, густина, індукована магнітним полем $\vec{B} \parallel \hat{z}$ в спін поляризованій системі, пов'язана зі спіновою густиною, індукованою електричним потенціалом в тій же системі:

$$\chi_{n S_z}(\omega) = \chi_{S_z n}(\omega).$$

Наприкінці відзначимо, що багато властивостей ф-й відгуку, які пов'язані з ермітовістю $\hat{A}$ та $\hat{B}$, наприклад, уя

$Re\, \chi_{AB}(-\omega) = Re\, \chi_{AB}(\omega)$, $Im\, \chi_{AB}(-\omega) =$ (*)

$= -Im\, \chi_{AB}(\omega)$.

зберігаються і для важливого класу некерміотових операторів в однорідних системах, які мають симетрію відносно інверсії:
Це перетворення Фур'є

$$\hat{A}_{\vec{q}} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left[\hat{A}_i e^{+i\vec{q}\vec{r}_i} + e^{-i\vec{q}\vec{r}_i}\hat{A}_i\right]$$

для ермітового оператору наступної форми $\hat{A} = \sum_{i=1}^{N}\hat{A}_i$, де $\hat{A}_i$ – ермітов оператор, що діє на i-ту частинку. Бачимо, що $\hat{A}^+_{\vec{q}} = \hat{A}_{-\vec{q}}$.
Тому з симетрії інверсії слідує, що (*) виконується і для

$$\chi_{A_{\vec{q}} A_{-\vec{q}}}.$$

20

(e) Походження дисипації.

Розглянемо систему, що описується гамільтоніаном

$$\hat{H}_F(t) = \hat{H} + F_\omega e^{-i(\omega+i\eta)t}\hat{A}^+ + F_\omega^* e^{i(\omega-i\eta)t}\hat{A}.$$

Середня потужність, яку повідомляє зовнішнє поле до системи за один період осциляцій T:

$$W = \frac{1}{T}\int_0^T \frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)|\hat{H}_F(t)|\Psi(t)\rangle dt, \ (!)$$

тобто це зміна енергії поділена на час, який вона тривала.

Вочевидь, для періодичної еволюції $W \equiv 0$ і тому ідеально мальне η тут критично важливе!

Похідна по часу знайдена за допомогою тотожності, що нагадує теорему Хеллмана – Фейнмана, яка виконується оскільки $|\Psi(t)\rangle$ задовільняє рівняння Шредінгера (книга Васарчука — Шредінгер!), а саме

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)|\hat{H}_F(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t)|\frac{\partial \hat{H}_F(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_F(t), \hat{H}_F(t)]|\Psi(t)\rangle =$$

$$= \langle\Psi(t)|\frac{\partial \hat{H}_F(t)}{\partial t}|\Psi(t)\rangle.$$

Підставивши сюди гамільтоніан (!) та нехтуючи членами, які зникають при $\eta \to 0^+$, ми отримуємо

$$W = \frac{1}{T}\int_0^T dt \left[-i\omega F_\omega e^{-i\omega t} \langle \hat{A}^+ \rangle_1 (t) + \right.$$
$$\left. + i\omega F^*_\omega e^{i\omega t} \langle \hat{A} \rangle_1 (t) \right]. \quad (!!)$$

Очікування $\hat{A}$ та $\hat{A}^+$ отримуються в теорії лінійного відгуку. Видно, що тільки $\langle \hat{A} \rangle_1 (t) \sim e^{-i\omega t}$ та $\langle \hat{A}^+ \rangle_1 (t) \sim e^{i\omega t}$ дають ненульовий внесок в W.

Щоб отримати потужність, яка поглинається, запишемо

$$\langle \hat{A} \rangle_1 (t) \sim \mathrm{Re}\, \chi_{AA^+}(\omega) F_\omega e^{-i\omega t} \quad (a)$$
$$+ i\, \mathrm{Im}\, \chi_{AA^+} F_\omega e^{-i\omega t}$$

та

$$\langle \hat{A} \rangle_1 (t) \sim \mathrm{Re}\, \chi_{A^+A} (-\omega) F^*_\omega e^{i\omega t} \quad (b)$$
$$+ i\, \mathrm{Im}\, \chi_{A^+A} (-\omega) F^*_\omega e^{i\omega t}.$$

Нагадаємо, що для відгуку на періодичне збурення ми записували

$\langle \hat{A} \rangle_1 (t) = \langle \hat{A} \rangle_1 (\omega) e^{-i\omega t} + c.c.$, де

$\langle \hat{A} \rangle_1 (\omega) = \chi_{AB}(\omega) F_\omega.$

Також співвідношення симетрії:

$$\chi_{AB}(-\omega) = [\chi_{A^+B^+}(\omega)]^*.$$

Відгуки (a) та (b) мають компоненту, яка перебуває в фазі зі збуренням, а також компоненту, яка зсунута на

90° до ~~фази~~ збурення.
Підставивши (a) та (b) до (!!), проінтегрувавши, а також використавши властивість симетрії, бачимо:

$$\chi_{AA^+}(\omega) = \chi^*_{A^+A}(-\omega) \Rightarrow$$

$$Im\,\chi_{A^+A}(-\omega) = -Im\,\chi^*_{A^+A}(-\omega) = -Im\,\chi_{AA^+}(\omega)$$

маємо

$$W = -2\omega\, Im\,\chi_{AA^+}(\omega)|F_\omega|^2.$$

Оскільки $Im\,\chi_{AA^+}(\omega) < 0$ при $\omega > 0$ та > 0 при $\omega < 0$, то ми бачимо, що W завжди додатня, у згоді з 2-м законом.

Здається, що все це виглядає як якийсь математичний трюк. Бо як ми вже вказали, при $\eta \to 0$ рівняння (!) представляє інтеграл за один період від похідної періодичної функції! Чому ж це не нуль?
З фізичної точки зору, можна зрозуміти, що коли система осцилює в часі, ~~то~~ середня енергія має залишатися постійною. Це означає, що будь-яка робота, виконана зовнішнім полем над системою, має бути розсіяна у зовнішнє середовище, а не потрапити до системи.
Проблема у тому, що здається так, що гамільтонів формалізм для опису еволюції в часі не має для цього ніяких механізмів.

Ці системи вимагають різних підходів в залежності від того чи розглядається система скінченого розміру з дискретним спектром (наприклад, атом), або нескінченна система з неперервним спектром (наприклад, електронна рідина в термодинамічній границі).

З представлення

$$\operatorname{Im} \chi_{AB}(\omega) = \sum_{nm} P_m \left[|A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) - |A^+_{mn}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) \right]$$

випливає, що для скінченної системи немає поглинання енергії, якщо тільки частота поля не збігається з однією з частот ω_{nm}. Якщо ж $\omega = \omega_{nm}$, то теорія лінійного відгуку порушується. Дослідження, подібне до вивчення резонансу у класичній теорії гармонічного осцилятору, показує, що відгук системи вже не буде періодичним. Амплітуда осциляцій зростатиме незалежно від того наскільки слабке зовнішнє поле. Це пояснює чому W в (.1) не зникає і вказує на те, що робота виконана зовнішнім полем зберігається у зростаючій амплітуді осциляцій. Парадоксально але теорія лін. відгуку дозволяє обчислити поглинання енергії тим, що „розбігається"!

24

Регуляризаційний множник η регуляризує теорію завдяки тому, що розподіляє резонанс на скінченну область частот, що дає відгук скінченної амплітуди. Наявність η порушує ідеальну періодичність $H_F(t)$ і дозволяє δW в (!) бути неперервним. При скінченому η система досягає рівноважного осцилюючого режиму, але енергія, яка потрапляє в систему, дисипується системою в її оточення. Це оточення (а для атома це прямо може бути завжди присутнє електром. поле) не включається явно в $\hat{H}$, але його наявність приймається до уваги тим, що є скінчене η. Його роль така ж, як і у класичній теорії гармонічного осцилятора під впливом зовнішн. сили — η описує зв'язок між системою та оточенням (середовищем).

Тепер розглянемо випадок нескінченної системи в термодинам. границі. Новою властивістю є те, що дисипація тепер відбувається в неперервному діапазоні частот навіть у границі $\eta \to 0$, якщо термодинамічна границя береться першою. Це відбувається тому, що в цій границі спектр системи неперервний: нескінчена кількість переходів знаходиться в області ширеного η, незалежно наскільки це η мале. У цьому сенсі дисипація є внутрішньою властивістю великих систем. Вони не потребують зовнішнього оточення. Можна сказати, що великі системи є власними „тепловими резервуарами", оскільки вони можуть забирати на нескінченність енергію, яку постачає зовнішнє поле.

26 (1) Кореляції залежні від часу та флуктуаційно-дисипативна теорема.

Ми побачили, що $\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}$ описує поглинання енергії від поля, яке зв'язане лінійно з $\hat{A}^+$. Існує глибокий зв'язок, відомий як флуктуаційно-дисипативна теорема, між інтенсивністю поглинання та спектром залежних від часу флуктуацій $\hat{A}$ (Callen et al., 1951).

Останні описуються так званим динамічним структурним фактором

$$S_{AA^+}(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \langle A(t) A^+\rangle_0\, e^{i\omega t}\, dt .$$

Для нього можна вивести ф-лу, подібну до тієї, яку ми виводили для спектрального представлення

$$\langle \hat{A}(t)\hat{A}^+\rangle_0 = \sum_{m,n} \rho_m e^{\overbrace{i\omega_{mn}}^{=-\omega_{mn}} t} A_{mn} A^+_{nm} ,$$

де $\omega_{nm} = \dfrac{E_n - E_m}{\hbar}$ прийшло з представл. Гейзенберга $\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} A e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$,

$$A_{nm} \equiv \langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_m\rangle = [A^+_{mn}]^* .$$

Для спектральн. представлення у нас був

$$-i\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\omega+i\eta)t} e^{-i\omega_{nm}t}\,\theta(t) \underset{\eta\to+0}{=}$$

$$= -i\,\frac{(-1)}{i(\omega-\omega_{nm}+i\eta)} .$$

Тепер же все ще простіше:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega t - i\omega_{nm} t} = \delta(\omega - \omega_{nm}).$$

Тому маємо

$$S_{AA^+}(\omega) = \sum_{nm} \rho_m |A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}).$$

Це дійсна ~~і~~ додатня величина.

Відзначимо, що записав $\hat{A} = \langle A \rangle_0 + \delta\hat{A}$, де $\langle \hat{A}_0 \rangle$ – рівноважне середнє $\hat{A}$, а $\delta\hat{A}$ – флуктуації, можна переписати визначення $S_{AA^+}(\omega)$ так:

$$S_{AA^+}(\omega) = |\langle \hat{A} \rangle_0|^2 \delta(\omega) + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta A(t) \delta A^+ \rangle_0 e^{i\omega t} dt$$

Це показує, що поведінка $S_{AA^+}(\omega)$ при $\omega \neq 0$ визначається динамікою флуктуацій.

При $\omega > 0$, $S_{AA^+}(\omega)$ описує спектр поглинання для поля частоти ω, яке лінійно зв'язано з $\hat{A}$.

При $\omega < 0$, $S_{AA^+}(\omega)$ описує спектр стимульованого цим полем випромінення.

Можна побачити, що

$$S_{AA^+}(-\omega) = \sum_{nm} \rho_m |A_{mn}|^2 \delta(-\omega - \omega_{mn}) =$$

$$\left| n \leftrightarrow m \right. \quad \rho_m \sim e^{-\beta E_m} \to e^{-\beta E_n} = e^{-\beta(E_m + \hbar\omega_{nm})} \Big|$$

$$= A^+_{mn} \cdot A_{nm}$$

$$= \sum_{nm} \underbrace{\frac{e^{-\beta E_m}}{Z}}_{\rho_m} \cdot e^{-\beta\hbar\omega_{nm}} |A_{nm}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) =$$

$$= e^{-\beta\hbar\omega} S_{A^+A}(\omega).$$

← Увага!

Співвідношення $S_{AA^+}(-\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} S_{A^+A}(\omega)$

Окуди, що спектр випромінення зникає

при $T = 0$.

Нагадаю співвідношення

$$(*)\ \operatorname{Im} \chi_{AA^+}(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar} \sum_{nm}{}' (P_m - P_n) |A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm})$$

З якого ми отримали переписавши 2-й член так:

$$\sum_{nm}{}' P_n |A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) =$$

$$= \left| \begin{array}{l} n \leftrightarrow m \quad |A_{mn}|^2 \to |A_{nm}|^2 = A^+_{mn} A_{nm} \\ A^*_{nm} = [A^+_{mn}], \ \omega_{mn} = -\omega_{nm} \end{array} \right| =$$

$$= \sum_{mn}{}' P_m |A^+_{mn}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) \implies$$

$$\operatorname{Im} \chi_{AA^+}(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar} \sum_{nm}{}' P_m \Big[|A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}) -$$

$$(**) \qquad - |A^+_{mn}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) \Big].$$

Перепишу $(*)$ так $\qquad -\beta(E_n - E_m) = -\beta\hbar\omega_{nm}$

$$\operatorname{Im} \chi_{AA^+}(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar} \sum_{nm}{}' P_m \left(1 - e^{-\beta E_n + \beta E_m}\right) \times$$

$$|A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm})$$

$$= -\frac{\pi}{\hbar} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) \sum_{nm}{}' P_m |A_{mn}|^2 \delta(\omega - \omega_{nm})$$

$$= -\frac{\pi}{\hbar} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) S_{AA^+}(\omega). \qquad (+)$$

Це і є флуктуаційно-дисипативна теорема.

цю теорему часто також записують і в інших еквівалентних формах.

1. Переставивши флуктуації на дисипацію (див. підручник Coleman, 2013, Ch. 10.4.3).

> До речі, зверніть увагу на визначення запізнювальної ф-ї відгуку в різних підручниках.
> У Giuliani – Vignale маємо $-i\langle[A,B]\rangle$.
> У Coleman я помітив $+i\langle[A,B]\rangle$, тому знак у ф-ле теореми інший.
> В Altland – Simons теж з „$-i$", див. (7.12).
> У Bruus – Flensberg з „$-i$", рів. (8.28).

$$\underbrace{S_{AA^+}(\omega)}_{\text{флуктуації}} = -\frac{\hbar}{\pi}\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\,\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega) =$$

$$= -\frac{\hbar}{\pi}\left[1 + n_B(\hbar\omega)\right]\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega),$$

квантові → ← теплові флукт. дисипац.

де $n_B(\hbar\omega) = \dfrac{1}{1+e^{\beta\hbar\omega}}$ – ф-я розподілу Бозе.

Звідси легко бачити, що у класичному випадку, $\hbar\omega \ll k_B T$, коли

$$n_B(\hbar\omega) \sim \frac{k_B T}{\hbar\omega}$$

$$S_{AA^+}(\omega) = -\frac{1}{\pi}\frac{k_B T}{\omega}\,\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega).$$

Розгляд квантового випадку дещо формальний. Для більш. фізичного розгляду класичн. випадку раджу книжку Coleman Розд. 10.2

2. Тепер наведу ще одну форму ф-д теореми.

Перепишемо

$$1-e^{-x} = (1+e^{-x})\frac{1-e^{-x}}{1+e^{-x}} = (1+e^{-x})\,\mathrm{th}\frac{x}{2}.$$

$$(1-e^{-\beta\hbar\omega})S_{AA^+}(\omega) = (1+e^{-\beta\hbar\omega})\,\mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\times$$

$$\times S_{AA^+}(\omega) = \mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\left[S_{AA^+}(\omega) + e^{-\beta\hbar\omega}S_{AA^+}(\omega)\right]$$

$$= \mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\left[S_{AA^+}(\omega) + S_{A^+A}(\omega)\right],$$ де

ми використали (+).

Таким чином

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega) = -\frac{\pi}{\hbar}\,\mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2}\left[S_{AA^+}(\omega) + S_{A^+A}(\omega)\right].$$

При $T=0$ тільки член з додатнім аргументом виживає, а $\mathrm{th}\frac{\beta\hbar\omega}{2} \to \mathrm{sgn}(\omega)$.

Увага! В книжці одруківка, див. список одруківок на сайті автора.

З фізичної точки зору наявність зв'язку між флуктуаціями та дисипацією потрібна для утримання термодинамічної рівноваги. Тоді як дисипація спричиняє незворотній перехід кожної спостережуваної до рівноважного значення, випадкові флуктуації відбуваються, щоб зберегти правильний статистичний розподіл величин спостережуваної.

Наприкінці згадаємо так званий статичний структурний фактор

$$\int_{-\infty}^{\infty} S_{AA^+}(\omega)\,d\omega = \langle\hat{A}\hat{A}^+\rangle_0 = |\langle\hat{A}\rangle_0|^2 +$$

$$+ \langle\delta\hat{A}\,\delta\hat{A}^+\rangle_0.$$

(Співвідношення Крамерса-Кроніга)

(g) Аналітичні властивості та колективні моди.

Оскільки всі функції відгуку зникають при $t < t_0 = 0$ (що відображає причинність), то інтуїтивно ясно те, що строго стверджує лема Тічмарша. А саме, перетворення Фур'є $\chi_{AB}(\omega)$, яке розглядається як функція комплексної частоти ω, є аналітичною функцією ω у верхній половині комплексної площини (ВПК). Це так, оскільки в інтегралі $\int dt\, e^{i(\omega+i\eta)t}\dots$ додатня уявна частина ω робить $e^{i\omega t}$ експоненційно спадаючим при великих $t > 0$, що забезпечує збіжність. Вочевидь, цей аргумент не працює у нижній половині компл. площини, або якщо функція не зникає при $t < t_0$.

Ця властивість прямо слідує з представлення Лемана:

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_{nm} \frac{\rho_m - \rho_n}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} A_{mn} B_{nm}, \quad \eta \to 0^+.$$

Для скінченної системи це представлення показує, що всі сингулярності у лінійному відгуку є простими полюсами, які розташовані інфінітезімально нижче дійсної осі у відповідності до частот переходів ω_{nm} системи.

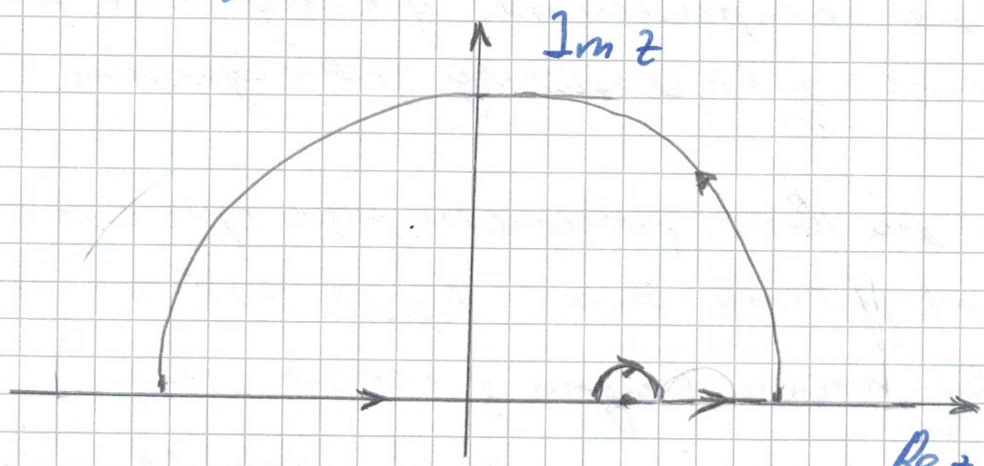
У великій системі перехід до термодинамічної границі призводить до якісно нових властивостей.
По-перше, ф-я відгуку, яка містить суму по неперервному спектру, вже має розріз, що знаходиться інфінітезимально нижче дійсної осі. Цей розріз виникає в результаті об'єднання нескінченної кількості полюсів зі зникаючою вагою. По-друге, що найважливіше, аналітичне продовження ф-ї відгуку з верхньої площини через розріз може мати ізольований полюс скінченої ваги у нижній комплексній напівплощині. Такий полюс з $\omega = Re\,\omega + i\,Im\,\omega$ з $Im\,\omega < 0$ вказує на існування колективного резонансного стану, також відомого як колективна мода, яка має енергію $\hbar\,Re\,\omega$ та час життя $\sim |Im\,\omega|^{-1}$.
Наявність полюсу поблизу дійсної осі зазвичай проявляє себе як різкий пік у спектрі поглинання $Im\,\chi(\omega)$.
Такий пік легко ідентифікується вище безструктурного континууму з точних власних станів.
Поява добре визначених колективних збуджень, які концептуально відрізняються від точних власних станів є відмінною властивістю систем з нескінченною кількістю ступенів вільності.

„Колективний" полюс з'являється тільки після переходу до термодинамічної границі, тобто коли сума по n замінена на інтеграл.

Аналітичність χ_{AB} у верхній напівплощині та на дійсній осі приводить до того, що деякий контурний інтеграл дорівнює нулю

$$\int_{\Gamma} \frac{\chi_{AB}(z)}{z-\omega}\frac{dz}{2\pi i} = 0,$$

де контур Γ показано на рисунку:



З цього за умови, що $\chi_{AB}(z) \to 0$ при $|z| \to \infty$ (можна і ще більш точно!), випливає

$$P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{AB}(\nu)}{\nu-\omega}\frac{d\nu}{2\pi i} - \frac{1}{2}\chi_{AB}(\omega) = 0.$$

Таким чином, отримуємо співвідношення Крамерса-Кроніга (KK):

$$\chi_{AB}(\omega) = -iP\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_{AB}(\nu)}{\nu-\omega}\frac{d\nu}{\pi}.$$

Для ермітових $\hat{A}$ та $\hat{B}$ ми мали

$Re\, \chi_{AB}(-\omega) = Re_{AB}(\omega)$ та

$Im\, \chi_{AB}(-\omega) = -Im\, \chi_{AB}(\omega)$.

Тому КК співвідношення можна переписати так:

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\nu\, \mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\nu)}{\nu^2-\omega^2} d\nu \quad (A)$$

та

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\nu)}{\nu^2-\omega^2} d\nu .$$

Усі причинні функції задовольняють цим співвідношенням. Вони описують нетривіальний зв'язок між поглинанням та поглинанням. Часто простіше отримати уявну частину та потім з інтегралу знаходити дійсну.

Раніше ми вже говорили, що при $\omega = 0$ $\chi_{AA^+}(\omega)$ дійсна та $\chi_{AA^+}(0) \leq 0$.

Це знову таки видно з того, що $\mathrm{Im}\,\chi_{AA^+}(\omega) < 0$ при $\omega > 0$ та (A).

(Д) Правила сум.

Одним з найбільш відомих та корисних застосувань дисперсійних співвідношень є отримання правил сум — співвідношень, які пов'язують моменти спектру поглинання та рівноважні середні спостережуваних.

Для отримання загальних правил сум почнемо з співвідношення

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \frac{2}{\pi} P\int_0^\infty \frac{\nu\,\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\nu)}{\nu^2-\omega^2}\,d\nu = (!)$$

Відзначимо, що спектральна ф-я $\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)$ швидко спадає до нуля при $\omega > \omega_{max}$, і де ω_{max} — характерна верхня границя спектру збурень. Для $\omega >> \omega_{max}$ можна розкласти відповідний знаменник

Продовження ф-ли (!):

$$= \frac{1}{\pi} P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\nu)}{\nu-\omega}\,d\nu$$

$$\frac{1}{\omega'-\omega} = \frac{(-1)}{\omega(1-\omega'/\omega)} = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\omega'^k}{\omega^{k+1}}.$$

Оскільки $\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(-\omega) = -\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)$ інтеграли $\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'$, які містять парні ступені ω' зникають і ми отримуємо наступний високочастотний розклад для $\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega)$:

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AB}(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{M_{AB}^{(2k+1)}}{\omega^{2k+2}}, \qquad (+)$$

де величини

$$M_{AB}^{(2k+1)} = -\frac{2}{\pi}\int_0^{\infty} \omega^{2k+1}\,\mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)\,d\omega \qquad (++)$$

є непарними моментами спектральної функції $-\frac{1}{\pi}\chi_{AB}(\omega)$.

Звісно, ряд (+) має чисто формальний зміст, бо якщо спектр не спадає експоненційно при великих ω, то $M_{AB}^{(2k+1)}$ будe розбіжним для k більших певного значення і відповідний момент не існує. Тим не менше, перші декілька моментів зазвичай скінченні і вони відповідають за інтенсивність головних членів високочастотного розкладу. Важливим є і те, що (+) дозволяє встановити зв'язок між спектральними моментами та поведінкою ф-ї відгуку на коротких часах.

Щоб це побачити розкладемо

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\left\langle\left[\hat{A}(t), B\right]\right\rangle_0 \qquad (*)$$

у ряд Тейлора по t:

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{t^l}{l!}\left\langle\left[\hat{A}^{(l)}, \hat{B}\right]\right\rangle_0 \quad \text{, де}$$

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\hat{A}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

ми визначили

$$\hat{A}^{(l)} = \left(\frac{d^l \hat{A}(t)}{dt^l}\right)_{t=0} =$$

$$= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^l [\hat{H}, [\hat{H} \ldots [\hat{H}, \hat{A}] \ldots]],$$

з $\hat{A}^{(0)} = \hat{A}$. Якщо підставити цей розклад у

$$\chi_{AB}(\omega) = -\frac{i}{\hbar} \lim_{\eta \to 0^+} \int_0^\infty \langle [\hat{A}(t), \hat{B}] \rangle_0 e^{i(\omega + i\eta)t} dt$$

то отримуємо за допомогою

$$\int_0^\infty dt\, t^l e^{i(\omega+i\eta)t} = \Gamma(l+1)(-i)^{-l-1} \frac{1}{\omega^{l+1}}$$

$$\chi_{AB}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{i^l}{\omega^{l+1}} \langle [\hat{A}^{(l)}, \hat{B}] \rangle_0 .$$

Цей вираз придатний як для $\mathrm{Re}\, \chi_{AB}$ так і для $\mathrm{Im}\, \chi_{AB}$.

Ми можемо знайти $\mathrm{Re}\, \chi_{AB}$ прийнявши до уваги те, що комутатор двух ермітових операторів антиермітов і, таким чином, його середні уявні.

$\hat{A}^{(l)}$ має $l+1$ оператор + ще $\hat{B}$.

При $l = 2k+1$ — $[\hat{A}^{(l)}, \hat{B}]$ ерміт ів.

Тому

$$\mathrm{Re}\, \chi_{AB}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\langle [\hat{A}^{(2k+1)}, \hat{B}] \rangle_0}{\omega^{2k+2}} . \quad (+++)$$

Порівнявши (+++) та (++) маємо

$$M_{AB}^{(2k+1)} \equiv -\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \omega^{2k+1}\, \mathrm{Im}\,\chi_{AB}(\omega)\,d\omega =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(-1)^k \left\langle \left[\hat{A}^{(2k+1)}, \hat{B}\right] \right\rangle_0 .$$

(i) Теорема про жорсткість (stiffness).

Приводжу цю теорему без доведення (воно є у Розділі 3.2.9).

Обернена статична ф-я відгуку $\chi_{AA}(0)$ є мірою жорсткості системи проти поля, яка намагається змінити величину $\langle \hat{A} \rangle$.

Найнижча можлива енергія системи при умові, що $\langle \hat{A} \rangle = A \neq 0$ дорівнює

$$E(A) = \min_{\Psi \to A} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle ,$$

де $\Psi \to A$ показує, що мінімум береться по нормалізованим