# 久保公式の一般的な扱い

Physics Lab.2021 物性班　渡邉悠稀

2021 年 5 月 8 日

## 目次

# 1　久保公式

一般的な状況で，平衡系からの摂動を考えてみよう．それには系に外場による小さな擾乱を加えて，その応答を観測する．本 PDF では外場との小さな相互作用 (擾乱)$\hat{A}e^{-i(\omega+i\delta)t}$ が Hamiltonian に加わったときの物理量 $\hat{J}$ の期待値を導出する．*1

## 1.1　準備：物理量の期待値をトレースの形で表す

時刻 $t$ における状態空間上の完全系 $|\alpha;t\rangle,\dots$ に対し，密度行列演算子を

$$\rho(t)=\sum_\alpha \rho_\alpha |\alpha;t\rangle\langle\alpha;t| \tag{1.1.1}$$

で定義する．$|\alpha;t\rangle\langle\alpha;t|$ は状態空間における $|\alpha;t\rangle$ 方向の射影演算子であり，

$$\sum_\alpha \rho_\alpha = 1, \qquad\qquad 0\le\rho_\alpha\le 1 \text{ for all } \alpha \tag{1.1.2}$$

を満たすものとする．すると

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{A}\right\rangle &= \sum_\alpha \rho(t)\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle\\ &= \mathrm{Tr}\Big[|\alpha\rangle\rho(t)\langle\alpha|\hat{A}\Big]\\ &= \mathrm{Tr}\Big[\rho(t)\hat{A}\Big]\end{aligned}$$

となる．特に，密度行列演算子 $\rho(t)$ が平衡状態での $\rho_0$ とそこからのずれ $\delta\rho(t)$ を用いて $\rho(t)=\rho_0+\delta\rho(t)$ と書かれる状況*2を考えると，

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{A}\right\rangle &= \mathrm{Tr}\Big[\{\rho_0+\delta\rho(t)\}\hat{A}\Big]\\ &= \mathrm{Tr}\Big[\rho_0\hat{A}\Big]+\mathrm{Tr}\Big[\delta\rho(t)\hat{A}\Big]\\ &= \left\langle\hat{A}\right\rangle_0+\mathrm{Tr}\Big[\delta\rho(t)\hat{A}\Big] \qquad (1.1.3)\end{aligned}$$

となる．$\left\langle\hat{A}\right\rangle_0 := \mathrm{Tr}\Big[\rho_0\hat{A}\Big]$ は平衡状態における物理量 $\hat{A}$ の期待値を表す．例えば $\hat{A}$ として電流 $\hat{j}_x$ を採用すると，平衡状態では電流は生じていないことから $\left\langle\hat{j}_x\right\rangle_0=0$ となる．従って，摂動による密度行列演算子の変化分 $\delta\rho(t)$ を用いて電流の期待値は

$$\left\langle\hat{j}_x\right\rangle = \mathrm{Tr}\Big[\delta\rho(t)\hat{j}_x\Big]$$

と表されることになる．

*1 本資料では話題を絞っている．詳細については [2][3] を参照されたい．
*2 摂動を加えた状況である．

## 1.2　久保公式の導出：摂動による密度演算子の変化分

まず，時刻 $t$ における密度演算子を時間偏微分して

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_\alpha |\alpha;t\rangle\,\rho_\alpha\,\langle\alpha;t|\right) \\
&= \sum_\alpha\left(i\hbar\frac{\partial\,|\alpha;t\rangle}{\partial t}\rho_\alpha\,\langle\alpha;t| + |\alpha;t\rangle\,\rho_\alpha i\hbar\frac{\partial\,\langle\alpha;t|}{\partial t}\right) \\
&= \sum_\alpha\left(\hat{\mathcal{H}}\,|\alpha;t\rangle\,\rho_\alpha\,\langle\alpha;t| - |\alpha;t\rangle\,\rho_\alpha\,\langle\alpha;t|\,\hat{\mathcal{H}}\right) \\
&= -\left[\rho(t),\hat{\mathcal{H}}\right] \qquad (1.2.1)
\end{aligned}
$$

を得る．今，平衡状態の Hamiltonian を $\hat{\mathcal{H}}_0$ と書く．この固有関数で展開した $\rho_0$ が $\hat{\mathcal{H}}_0$ と可換であるので，

$$
\left[\rho_0,\hat{\mathcal{H}}_0\right] = 0 \qquad (1.2.2)
$$

となる．

外場から摂動を受ける前の密度行列演算子が平衡状態の密度行列演算子 $\rho_0$ に等しい，すなわち

$$
\rho(-\infty) = \rho_0 \qquad (1.2.3)
$$

とする．外場からの摂動は $t=-\infty$ に受け始めたとする．時刻 $t$ に摂動で Hamiltonian が

$$
\hat{\mathcal{H}}_0 \to \hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}'(t),
$$

密度行列演算子が

$$
\rho_0 \to \rho(t) = \rho_0 + \delta\rho(t)
$$

と変化すると考える．(摂動を考えるので $\hat{\mathcal{H}}',\delta\rho(t)$ はそれぞれ $\hat{\mathcal{H}}_0,\rho_0$ に対して微小な量であるとする．)

以上のもとでは (1.2.1) は

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} &= -\left[\rho_0+\delta\rho(t),\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}'(t)\right] \\
&= -\left[\rho_0,\hat{\mathcal{H}}'(t)\right] - \left[\delta\rho(t),\hat{\mathcal{H}}\right] \\
&\left(\because -\left[\delta\rho(t),\hat{\mathcal{H}}'(t)\right]\text{は 2 次の微小量であることと，(1.2.2) による．}\right) \qquad (1.2.4)
\end{aligned}
$$

少し唐突だが，ここで $\delta\rho(t) = \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)g(t)\hat{\mathcal{U}}(t)\left(\text{但し，}\hat{\mathcal{U}}(t) = \exp\left[i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar\right]\right)$ と定義すると，(1.2.4) の左辺は

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} &= \hat{\mathcal{H}}_0\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)g(t)\hat{\mathcal{U}}(t) + i\hbar\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)\frac{\partial g(t)}{\partial t}\hat{\mathcal{U}}(t) - \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)g(t)\hat{\mathcal{U}}(t)\hat{\mathcal{H}}_0 \\
&= i\hbar\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)\frac{\partial g(t)}{\partial t}\hat{\mathcal{U}}(t) - \left[\delta\rho(t),\hat{\mathcal{H}}_0\right] \qquad (1.2.5)
\end{aligned}
$$

となる．(1.2.4)，(1.2.5) から

$$
\frac{\partial g(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{U}}(t)\left[\hat{\mathcal{H}}'(t),\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t) \qquad (1.2.6)
$$

が得られ，ここから $g(t)$ が形式的に

$$
g(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\hat{\mathcal{U}}(t')\left[\hat{\mathcal{H}}'(t'),\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t') \qquad (1.2.7)
$$

と書けるので，密度行列演算子の摂動は結局

$$\begin{aligned}\delta\rho(t) &= \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t)g(t)\hat{\mathcal{U}}(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\hat{\mathcal{U}}(t'-t)\left[\hat{\mathcal{H}}'(t'),\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t)\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

と書けることになる．これは久保公式と呼ばれる．[*3]

## 1.3 久保公式の適用：摂動で誘起される物理量の期待値

前節では一般の摂動を形式的に $\hat{\mathcal{H}}'(t)$ とした場合の密度行列演算子の摂動（=線形応答）として久保公式を得た．本節では $\hat{\mathcal{H}}'(t)$ を具体的な表式で与えた場合を得る．さらに 1.1 節の結果を併せることで，一般の摂動に対する物理量 $\hat{J}$ の期待値の表式が得られることを見る．

$\left[\hat{\mathcal{H}}'(t'),\rho_0\right]$ を具体的に計算していくことにする．一般には，摂動による Hamiltonian の変化分は

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) = \hat{A}e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}e^{\delta t} \qquad (\delta\text{は正の無限小の量}) \tag{1.3.1}$$

を考えれば十分である．ここで $\hat{A}$ は摂動で，例えば外部から $H_0$ に比べて小さい電場 $\boldsymbol{E}$ を印加したときの仕事 $-e\sum_i \boldsymbol{r}_i\cdot\boldsymbol{E}$ が挙げられる．$e^{\delta t}$ は $t\to-\infty$ のときに摂動が存在しないという初期条件を満たすための因子である．$e^{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$ は空間変化と振動数 $\omega$ での時間変化による位相のずれを表す因子であるが，ここでは簡単のために原点を $\boldsymbol{r}=0$ となるように取り直して $e^{-i\omega t}$ で考えることにする．そうして以下では (1.3.1) の代わりに

$$\hat{\mathcal{H}}'(t) = \hat{A}e^{-i\omega t}e^{\delta t} \qquad (\delta\text{は正の無限小の量}) \tag{1.3.2}$$

を一般の摂動としてみていくことにする．この下で (1.2.8) は

$$\begin{aligned}\delta\rho(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\hat{\mathcal{U}}(t'-t)\left[\hat{A}e^{-i\omega t}e^{\delta t},\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega t}e^{\delta t}\hat{\mathcal{U}}(t'-t)\left[\hat{A},\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t) \\ &\quad (\because e^{-i\omega t}e^{\delta t}\text{は演算子ではないため，}\rho_0\text{ や }\hat{H}\text{ ひいては}\hat{\mathcal{U}}(t)\text{ と可換になる.})\end{aligned} \tag{1.3.3}$$

と書ける．これと 1.1 節の (1.1.3) から，物理量 $\hat{J}$ の期待値は

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{J}\right\rangle &= \left\langle\hat{J}\right\rangle_0 + \mathrm{Tr}\left[\delta\rho\hat{J}\right] \\ &= \left\langle\hat{J}\right\rangle_0 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega t'}e^{\delta t'}\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\mathcal{U}}(t'-t)\left[\hat{A},\rho_0\right]\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t)\hat{J}\right\}\end{aligned} \tag{1.3.4}$$

と書かれる．この Tr の部分を $\mathrm{Tr}\{\rho_0\bigcirc\}$ という形に直すと

$$\left\langle\hat{J}\right\rangle = \left\langle\hat{J}\right\rangle_0 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{0} dt'' e^{-i\omega\left(t+t'\right)}e^{\delta\left(t+t'\right)}\int_0^{\beta\hbar} d\tau\,\mathrm{Tr}\left\{\rho_0\frac{\partial\hat{A}(t'')}{\partial t''}\hat{J}(i\tau)\right\} \tag{1.3.5}$$

と書かれる．ここで，

$$\hat{A}(t) \coloneqq \hat{\mathcal{U}}(t)\hat{A}\hat{\mathcal{U}}^{-1}(t) = \exp\left(i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar\right)\hat{A}\exp\left(-i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar\right)$$

[*3] ここでは (1.2.8) が「久保公式」と呼ばれると導入した．他には (1.2.8) を適用して得られた結果も久保公式と呼ばれることがある．そのため，単に「久保公式」と言われただけではどの表式なのかは特定できず，前後の文脈に依る必要がある．

とおいた．式変形は付録に回した．本質的でないので読まなくても問題ない．(1.3.5) が一般の摂動で誘起される物理量の期待値である．

# 2　付録

## (1.3.4) から (1.3.5) への行間

まず

$$\left[\hat{A}(t), \rho_0\right] = -i\rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial \hat{A}(t - i\tau)}{\partial t} \tag{2.0.1}$$

を示す．右辺を変形していく．

$$\begin{aligned}
&-i\rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial \hat{A}(t - i\tau)}{\partial t} \\
&= -i\rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial \hat{A}(t - i\tau)}{\partial(-i\tau)} \\
&= \rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial \hat{A}(t - i\tau)}{\partial \tau} \\
&= \rho_0 \left\{ \hat{A}(t - i\beta\hbar) - \hat{A}(t) \right\} \\
&= \rho_0 \left\{ e^{i\hat{\mathcal{H}}_0(-i\beta\hbar)/\hbar} \hat{A}(t) e^{-i\hat{\mathcal{H}}_0(-i\beta\hbar)/\hbar} - \hat{A}(t) \right\} \\
&= \rho_0 \left\{ e^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{A}(t) e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} - \hat{A}(t) \right\}
\end{aligned} \tag{2.0.2}$$

ここで，初期時刻を $t = -\infty$ にとった熱平衡状態での分布をカノニカル分布とすれば

$$\rho_0 = \sum_\alpha \rho_\alpha \left|\alpha; t = -\infty\right\rangle \left\langle\alpha; t = -\infty\right|$$

において

$$\rho_\alpha = \frac{e^{-\beta\mathcal{E}_\alpha}}{\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i}}$$

となる．

$$\begin{aligned}
&\left( \sum_\alpha e^{-\beta\mathcal{E}_\alpha} \left|\alpha; -\infty\right\rangle \left\langle\alpha; -\infty\right| \right) \left|\alpha'; -\infty\right\rangle \\
&= e^{-\beta\mathcal{E}_{\alpha'}} \left|\alpha'; -\infty\right\rangle \\
&= e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \left|\alpha'; -\infty\right\rangle
\end{aligned}$$

であることを用いれば，

$$\begin{aligned}
\rho_0 &= \sum_\alpha \rho_\alpha \left|\alpha; -\infty\right\rangle \left\langle\alpha; -\infty\right| \\
&= \frac{\sum_\alpha e^{-\beta\mathcal{E}_\alpha} \left|\alpha; -\infty\right\rangle \left\langle\alpha; -\infty\right|}{\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i}} \\
&= \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}}{\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i}}
\end{aligned} \tag{2.0.3}$$

を得る．よって，(2.0.2)，(2.0.3) より

$$
\begin{aligned}
-i\rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial \hat{A}(t-i\tau)}{\partial t} &= \rho_0 \Big\{ e^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{A}(t) e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} - \hat{A}(t) \Big\} \\
&= \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}}{\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i}} e^{\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{A}(t) e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0} - \rho_0 \hat{A}(t) \\
&= \hat{A}(t) \frac{e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}_0}}{\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i}} - \rho_0 \hat{A}(t) \\
&\quad \left( \because 1/\sum_i e^{-\beta\mathcal{E}_i} \text{は定数ゆえ演算子と可換になる．} \right) \\
&= \hat{A}(t)\rho_0 - \rho_0 \hat{A}(t) \\
&= \Big[ \hat{A}(t), \rho_0 \Big]
\end{aligned} \tag{2.0.4}
$$

を得るので，(2.0.1) が示されたことになる．

これにより，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\Big\{ \hat{\mathcal{U}}(t'-t) \Big[ \hat{A}, \rho_0 \Big] \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t) \hat{J} \Big\} &= \mathrm{Tr}\Big\{ \Big[ \hat{A}(t'-t), \rho_0 \Big] \hat{J} \Big\} \\
&\quad \left( \because (2.0.3) \text{ より，} \rho_0 \text{ は } \hat{\mathcal{U}}(t) = \exp\Big( i\hat{\mathcal{H}}_0 t/\hbar \Big) \text{ と可換になる．} \right) \\
&= -i\, \mathrm{Tr}\left\{ \rho_0 \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{\partial}{\partial(t'-t)} \Big( \hat{A}(t'-t-i\tau) \Big) \hat{J} \right\} \qquad (\because (2.0.1)) \\
&= -i \int_0^{\beta\hbar} d\tau\, \mathrm{Tr}\left\{ \rho_0 \frac{\partial \hat{A}(t'-t-i\tau)}{\partial(t'-t)} \hat{J} \right\}
\end{aligned} \tag{2.0.5}
$$

を得る．以上の式変形を経てから

$$
\begin{aligned}
&(1.3.4) \text{ の第二項} \\
&= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega t'} e^{\delta t'}\, \mathrm{Tr}\Big\{ \hat{\mathcal{U}}(t'-t) \Big[ \hat{A}, \rho_0 \Big] \hat{\mathcal{U}}^{-1}(t'-t) \hat{J} \Big\} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{t} dt' e^{-i\omega t'} e^{\delta t'} \int_0^{\beta\hbar} d\tau\, \mathrm{Tr}\left\{ \rho_0 \frac{\partial \hat{A}(t'-t-i\tau)}{\partial(t'-t)} \hat{J} \right\} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} dt'' e^{-i\omega\left(t''+t\right)} e^{\delta\left(t''+t\right)} \int_0^{\beta\hbar} d\tau\, \mathrm{Tr}\left\{ \rho_0 \frac{\partial \hat{A}(t''-i\tau)}{\partial t''} \hat{J} \right\} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{0} dt'' e^{-i\omega\left(t''+t\right)} e^{\delta\left(t''+t\right)} \int_0^{\beta\hbar} d\tau\, \mathrm{Tr}\left\{ \rho_0 \hat{\mathcal{U}}^{-1}(-i\tau) \frac{\partial \hat{A}(t'')}{\partial t''} \hat{\mathcal{U}}(-i\tau) \hat{J} \right\} \\
&= (1.3.5) \text{ の第二項} \qquad\qquad (\because \rho_0 \text{ と } \hat{\mathcal{U}}(-i\tau) \text{ は可換．})
\end{aligned}
$$

を得る．

## 参考文献


[1] 野村健太郎『トポロジカル絶縁体・超伝導体』(丸善出版，東京，2016).

[2] Kubo, R. (1957) Statistical-mechanical theory ofirreversible processes. I. General theory and simpleapplications to magnetic and conduction problems.J. Phys. Soc. Jpn.12, 570–586.

[3] 伏屋雄紀，福山秀敏，久保公式とグリーン関数法の実践的基礎（その２），http://www.kookai.pc.uec.ac.jp/kotaibutsuri/practical_guide_vol_2.pdf