数理解析研究所講究録
367巻 1979年 34-45

スピンのブラウン運動

学習院大　理　物理　江沢　洋
中村孔一

乱雑に変化する磁場のなかにおかれたスピンの取り扱いを例として確率微分方程式の特質を説明し，あたえられた物理系にたいしてそれを書き下す際の模型化の問題を論ずる．

§1　確率微分方程式と模型化の問題

ウィーナー過程 $W(t,\omega)$ はブラウン運動の数学的理想化であって，初期条件 $W(0,\omega)=0$ および

平均：$E\{W(t,\cdot)\}=0$，

自己相関：$E\{W(t',\cdot)W(t,\cdot)\}=\min(t',t)$

により特徴づけられるガウス過程である．ここに，ω は標本のラヴェルであるが，以下では特に必要のないかぎりこれを省略する．

伊藤型の確率微分方程式

$$dX(t,\omega)=a(t,X(t,\omega))\,dt+b(t,X(t,\omega))\cdot dW(t,\omega) \tag{1}$$

においては，乱雑力の項は，$dt>0$ で

$$b(t, X(t))\bullet dW(t) \equiv b(t, X(t))[W(t+dt) - W(t)] \tag{2}$$

のように白色雑音 $dW(t)$ が係数 $b(t, X(t))$ より‘未来にむかって突出している’ものと理解しなければならない。もうすこし正確にいえば，積分範囲 $[t_0, t_1]$ の分割 $t_0 = s_1 < s_2 < \cdots < s_{N+1} = t_1$ を細かくしたときの

$$\lim \sum_{k=1}^{N} b(s_k, X(s_k))[W(s_{k+1}) - W(s_k)] \equiv \int_{t_0}^{t_1} b(t, X(t))\cdot dW(t) \tag{3}$$

という極限を把えるのが伊藤の確率積分であって，これを用いて確率微分方程式(1)は

$$X(t, \omega) - X(t_0, \omega) = \int_{t_0}^{t} a(s, X(s, \omega))\, ds + \int_{t_0}^{t} b(s, X(s, \omega))\cdot dW(s, \omega)$$

と理解される.

これにたいして，ストラトノーヴィッチ型の

$$dX(t, \omega) = a(t, X(t, \omega))\, dt + b(t, X(t, \omega)) \circ dW(t, \omega) \tag{4}$$

においては，過去と未来に関して対称な

$$b(t, X(t)) \circ dW(t) = \frac{b(t+dt, X(t+dt)) + b(t, X(t))}{2}[W(t+dt) - W(t)] \tag{5}$$

という解釈がとられる．この解釈のもとで(3)に対応すべき積分がどうなるかは書くまでもあるまい．

二つの型の確率微分方程式のあいだには本質的の差違はないのであって，実際

$$b(t+dt, X(t+dt)) = b(t, X(t)) + \frac{\partial b}{\partial X}[X(t+dt) - X(t)] + O(dt)$$

に (1) を用いれば

$$b(t+dt, X(t+dt)) = b(t, X(t)) + \frac{\partial b}{\partial X} b\,[W(t+dt) - W(t)] + O(dt)$$

となるから

$$[W(t+dt) - W(t)]^2 = dt \tag{6}$$

により

$$b \circ dW = b \cdot dW + \frac{1}{2}\frac{\partial b}{\partial X} b\, dt \tag{7}$$

の関係がある．すなわち，ストラトノーヴィッチ型の方程式は簡単に伊藤型に書き直せるのであって，それには，いわゆるドリフト項の係数 a に $\frac{1}{2}(\partial b/\partial X)b$ を加えてやればよい．

しかし，乱雑力の項で解釈のちがいが問題になる以上，あたえられた物理現象にたいして確率微分方程式を書き下す際には，決定論的な方程式の場合に比べて，それだけ余分の注意が必要になる．これが確率微分方程式の場合におこる模型化の問題であって，つまりは物理的な乱雑力を白色雑音として理想化するために支払わねばならない代価である．

ここでは，この模型化の問題が量子力学的現象の場合には　　　　保存という一般原理によって直截的に解かれることを，例によって示したいと思う．

しかし，その前に，伊藤積分とストラトノーヴィッチ積分の特質を一つ二つ注意しておきたい．

確率微分方程式で定まる $X(t, \omega)$ はマルコフ過程になるの

で，伊藤方程式 (1) においては dW が b より未来に突出しているため $E\{b\cdot dW\} = E\{b\}\cdot E\{dW\} = 0$ となり，したがって

$$d\,E\{X(t,\cdot)\} = E\{a(t, X(t,\cdot))\}\,dt \tag{8}$$

がなりたつ．この簡明な関係は，ストラトノーヴィッチ方程式からは —— b が X を含まない場合を別として —— 一般には得られない。

ストラトノーヴィッチ積分においては，(5) から，たとえば

$$\int_0^t W(s)\circ dW(s) = \lim \sum_{k=1}^{N} \frac{W(s_{k+1})+W(s_k)}{2}\left[W(s_{k+1})-W(s_k)\right]$$

$$= \frac{1}{2}W(t)^2 \tag{9}$$

となる．そして一般に，普通の積分学の公式がそのまま成り立つことも証明されるのである．ところが，伊藤積分で (9) に対応する形の計算をしてみると

$$\int_0^t W(s)\cdot dW(s) = \lim \sum_{k=1}^{N} W(s_k)\left[W(s_{k+1})-W(s_k)\right]$$

$$= \lim \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{W(s_{k+1})+W(s_k)}{2}\left[W(s_{k+1})-W(s_k)\right] - \frac{W(s_{k+1})-W(s_k)}{2}\left[W(s_{k+1})-W(s_k)\right] \right\}$$

となり，(6) によって

$$\int_0^t W(s)\cdot dW(s) = \frac{1}{2}W(t)^2 - \frac{1}{2}t \tag{10}$$

のように右辺の第2項の分だけ普通の積分学の公式とちがっ

てくる．このことを一般的に言い表わすのが，いわゆる伊藤の公式である．すなわち，確率微分方程式 (1) の解 X の関数 $f(X,t)$ にたいして

$$df(X(t),t) = \left(a\frac{\partial f}{\partial X} + \frac{b^2}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial X^2} + \frac{\partial f}{\partial t}\right)dt + b\frac{\partial f}{\partial X}\cdot dW \tag{11}$$

がなりたつ．

§2 スピンのブラウン運動

［まえおき］　量子力学では，電子スピンの一時刻 t における「状態」は 2成分の確率振幅

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} a_\uparrow(t) \\ a_\downarrow(t) \end{pmatrix} \tag{12}$$

で表わされる．これは2次元複素ヒルベルト空間 $\mathbb{H}$ の元である．スピンは，量子力学における力学変数の通例として，この $\mathbb{H}$ の上の自己共役演算子で表現される．それは3個のデカルト座標成分をもち

$$\mathbb{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma,$$

ただし

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

一般に，力学変数 A と確率振幅 $\psi(t)$ とがあたえられたときそれらの物理との関わり（物理的解釈）は，「時刻 t の $\psi(t)$ なる状態で A の測定をすると，範囲 $(\lambda_1, \lambda_2]$ の測定値が

確率　$\left\| \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} dE(\lambda)\psi(t) \right\|^2$

で得られる」ということでつけられる。ただし，Aのスペクトル分解を $A=\int \lambda\, dE(\lambda)$ とし，$\|\psi(t)\|^2=1$ としている。

スピンの場合には話は簡単であって，時刻 t の (12) なる状態で，たとえば S_z の測定をすると，測定値 $+\frac{\hbar}{2}$，$-\frac{\hbar}{2}$ がそれぞれ $|a_\uparrow(t)|^2$，$|a_\downarrow(t)|^2$ の確率で得られることになる。
$\|\psi(t)\|^2=1$ にあたるのは

$$|a_\uparrow(t)|^2+|a_\downarrow(t)|^2=1\ . \tag{13}$$

この関係は，実は $t=0$ にたいして要求しておけば $t>0$ でも常に成り立つことが，$\psi(t)$ の時間発展を定めるシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=\mathcal{H}\,\psi(t) \tag{14}$$

のハミルトニアン演算子 $\mathcal{H}$ の自己共役性によって保証される。電子スピンが磁場 $\mathbb{B}=(B_x, B_y, B_z)$ のなかにあるという場合には（$\mathbb{B}$ の単位を適当にとって）

$$\mathcal{H}=\sigma\cdot\mathbb{B}\quad(=\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)\ .$$

すなわち

$$\mathcal{H}=\begin{pmatrix} B_z & B_x-iB_y \\ B_x+iB_y & -B_z \end{pmatrix}$$

であり，$\mathbb{B}$ は実数ベクトルだから $\mathcal{H}$ の自己共役性は一目瞭然である。

［揺らぐ磁場のなかのスピン］　静磁場$\mathbb{B}$に揺らぎ分として白色雑音$\sqrt{\gamma}\,\dot{\mathbb{W}}(t,\omega)$を加え，それに応ずるスピンの運動を調べよう．ただし，$\gamma>0$は揺らぎの大きさを表わす定数であり，$\mathbb{W}=(W_x, W_y, W_z)$は互に独立な3個のウィーナー過程を成分とするベクトルで

$$E\{W_k(t',\omega)W_l(t,\omega)\}=\delta_{kl}\min(t',t)\qquad(k,l=x,y,z)$$

これだけの揺らぎが加わって磁場が$\mathbb{B}+\sqrt{\gamma}\,\dot{\mathbb{W}}$になると，スピンの運動をきめる(14)の方程式は

$$i\hbar\, d\psi(t,\omega)=\sigma\cdot[\mathbb{B}\,dt+\sqrt{\gamma}\,d\mathbb{W}(t,\omega)]\cdot\psi(t,\omega)\qquad(15)$$

に変わるだろう．これを伊藤型の確率微分方程式とみてよいだろうか？

否．これでは全確率の保存(13)が破れてしまう．実際，(6)と同様の理由から$dW_k\,dW_l=\delta_{kl}\cdot dt$となるので，$\langle\ ,\ \rangle$で$\mathbb{H}$の内積を表わして

$$\langle\psi(t)+d\psi(t),\ \psi(t)+d\psi(t)\rangle-\langle\psi(t),\psi(t)\rangle$$
$$=\langle\psi(t),d\psi(t)\rangle+\langle d\psi(t),\psi(t)\rangle+\langle d\psi(t),d\psi(t)\rangle$$

の右辺オ3項が無視できない．右辺のオ1項とオ2項の和は(15)により0となるのだが，オ3項を計算してみると

$$\langle d\psi(t),d\psi(t)\rangle=\sum_{k,l}\gamma\langle\psi(t),\sigma_k\sigma_l\psi(t)\rangle\,dW_k\,dW_l$$

となるから

$$d\langle\psi(t),\psi(t)\rangle=\frac{3\gamma}{\hbar^2}\langle\psi(t),\psi(t)\rangle\,dt\qquad(16)$$

が得られ

$$\langle \psi(t), \psi(t) \rangle = \langle \psi(0), \psi(0) \rangle \, e^{3\gamma t/\hbar^2}$$

という式を書いてみるまでもなく全確率の保存(13)の破れていることがわかる．それゆえ，(15)は伊藤型とみたのでは量子力学の方程式として使うことができない．

全確率の保存が成り立つように(15)を修正する仕方は，いろいろあるだろう．最も簡単なのは，(16)の右辺を打ち消すように減衰項を加えて

$$i\hbar \, d\psi(t,\omega) = \sigma\cdot[\,B\,dt + \sqrt{\gamma}\, dW(t,\omega)]\cdot\psi(t,\omega) \\ - i\,(3\gamma/2\hbar)\,\psi(t,\omega)\,dt \qquad (17)$$

とすることである．

［時間反転］ (16)の$\langle \psi(t), \psi(t) \rangle$は未来にむかって増加してゆくので，過去との間に非対称がある．これは，(2)のところで説明したように伊藤型の確率積分が未来へのむきを特別あつかいしているせいである．もし，過去と未来を対称的にあつかうストラトノーヴィッチの確率積分を用いていたら，全確率の保存はひとりでに成り立つことになったのではないか．

そこで，(15)の代りに

$$i\hbar \, d\psi(t,\omega) = \sigma\cdot[\,B\,dt + \sqrt{\gamma}\, dW(t,\omega)]\circ\psi(t,\omega) \qquad (18)$$

を‘シュレーディンガー方程式’にしてみる．これを詳しく書けば

$$i\hbar[\psi(t+dt)-\psi(t)] = \sigma\cdot\mathbb{B}\psi(t)dt + \sqrt{\gamma}\,\sigma\cdot\frac{\psi(t+dt)-\psi(t)}{2}[\mathbb{W}(t+dt)-\mathbb{W}(t)] .$$

そこで, $-t$ に当る変数を仮に τ と書いて

$$t+dt = -\tau, \qquad t = -(\tau+d\tau) \qquad\qquad (dt = d\tau > 0)$$

とおくと

$$i\hbar[\psi(-\tau)-\psi(-\tau-d\tau)] = \sigma\cdot\mathbb{B}\psi(-\tau-d\tau)+\sqrt{\gamma}\,\sigma\cdot\frac{\psi(-\tau)+\psi(-\tau-d\tau)}{2}[\mathbb{W}(-\tau)-\mathbb{W}(-\tau-d\tau)] .$$

よって, $\psi(t)$, $\mathbb{W}(t)$, $\mathbb{B}$ の時間反転をそれぞれ

$$\psi_T(t) = \sigma_y\psi^*(-t), \qquad \mathbb{W}_T(t) = \mathbb{W}(-t), \qquad \mathbb{B}_T = -\mathbb{B}$$

で定義すれば

$$i\hbar[\psi_T(\tau+d\tau)-\psi_T(\tau)] = \sigma\cdot\mathbb{B}_T\psi_T(\tau)+\sqrt{\gamma}\,\sigma\cdot\frac{\psi_T(\tau+d\tau)+\psi_T(\tau)}{2}[\mathbb{W}_T(\tau+d\tau)-\mathbb{W}_T(\tau)]$$

すなわち, もとの (18) と全く同じ形の

$$i\hbar\, d\psi_T(\tau,\omega) = \sigma\cdot[\mathbb{B}_T d + \sqrt{\gamma}\, d\mathbb{W}_T(\tau,\omega)]\circ\psi_T(\tau,\omega) \qquad (19)$$

の成り立つことがわかる. いそいで付け加えるが,「マルコフ過程の時間反転はまたマルコフ過程である」という定理があるので (J. L. Doob: Stochastic Processes, pp. 83-85), 上記の $\mathbb{W}_T$ がウィーナー過程であることは平均と自己相関を計算して容易に検証できる.

さて, 明らかに

$$\|\psi_T(t)\|^2 = \|\psi(-t)\|^2$$

であるから, (19) と (18) が同じ形であって同一のコーシー・データにたいして解けることを考えると $\|\psi(t)\|^2$ は今度は t と共に増大することはできない!

［伊藤方程式からストラトノーヴィッチ方程式への変換］

上の結果から，(18)と(17)とは，形こそ違え，実質は同じなのではないかと推測される．実際そのとおりであることは，次のようにして容易に確かめられる．(2)と(5)より

$$\psi \circ dW_k - \psi \cdot dW_k = \frac{1}{2}[\psi(t+dt) - \psi(t)][W_k(t+dt) - W_k(t)]$$

となるが，(17)の$d\psi$を右辺に代入すれば

$$\psi \circ dW_k - \psi \cdot dW_k = -i\frac{\sqrt{\gamma}}{2\hbar}\sum_l \sigma_l [W_l(t+dt) - W_l(t)][W_k(t+dt) - W_k(t)]\psi$$

$$= -i\frac{\sqrt{\gamma}}{2\hbar}\sigma_k \psi$$

よって

$$\sqrt{\gamma}\,\sigma \cdot [\psi(t) \circ dW] = \sqrt{\gamma}\,\sigma \cdot [\psi(t) \cdot dW] - i(3\gamma/2\hbar)\psi(t)dt$$

となり，(17)から確かに(18)が導びかれる．伊藤方程式からストラトノーヴィッチ方程式へのこの変換法は，この場合にかぎらず一般的に通用する．このことは(7)の所でも述べた。

§3 結論

揺らぎをもつ磁場のなかにおかれたスピンの運動を白色雑音を用いて模型的に扱う場合，シュレーディンガー方程式の形を‘揺らぎなし’の場合と同じにしたいなら，その方程式はストラトノーヴィッチ型の確率微分方程式と解釈すべきである．

これは，量子力学における全確率の保存の要請から導かれ

る結論である．あるいは，言葉をかえて，シュレーディンガー方程式を時間反転に関して対称にするためである，ということもできる．

また，次の事実にも注意しておきたい．白色雑音を導くウィーナー過程 $W(t,\omega)$ は物理的な揺らぎの理想化として用いられるわけであるが，いま，その物理的な揺らぎ $Y_n(t,\omega)$ が以下の条件をみたすものとしよう．ただし，$n=1,2,\cdots$ はウィーナー過程への理想化を行なうためのパラメタで，$Y_n(t,\omega)$ は $n\to\infty$ でほとんど確実に $W(t,\omega)$ に各点（resp. 一様）収束するものとしておく．物理的揺らぎに要求する条件とは：

(1)　t の区間 $[t_0, t_1]$ 上で有界変動，かつ連続にして区分的に連続的微分可能．

(2)　ほとんど確実に $n_0(\omega)$，$k(\omega)$ が存在して，$\forall n > n_0(\omega)$ で $Y_n(t,\omega) \leqq k(\omega)$，$\forall t \in [t_0, t_1]$．

このとき，ある種の条件をみたす係数 a，b をもつ微分方程式

$$dX_n(t,\omega) = a(t, X_n(t,\omega))\,dt + b(t, X_n(t,\omega))\,dY_n(t,\omega)$$

の初期条件 $X_n(t_0) = 0$ をみたす解 $X_n(t,\omega)$ は，$n\to\infty$ のとき同じ a，b をもつストラトノーヴィッチ方程式の解に各点（resp. 一様）収束する［E. Wong and M. Zakai: Ann. Math. Stat. 36 (1965), 1560-1564］．

このことは，乱雑力を白色雑音を用いて理想化し確率微分方程式によって扱おうとするとき，方程式の形を乱雑力なしの場合と同じにしたいなら，その確率微分方程式はストラトノーヴィッチ型と解釈すべきである，ということを，かなり一般的に示しているといえるだろう．この処法が，量子力学的な要請から導かれた処法と一致しているのは，偶然ではない．