

スピン系の揺動現象

大阪(阪大・教養) 植山 宏

(8月10日受理)

[梗概]

Bloch Eq. に随伴する Fokker-Planck Eq. と(非線型の) Langevin Eq. が Wangness と Bloch の微視的モデルより演繹された。これらの方程式の熱力学的極限に於ける様相が論じられている。

§1 序

スピンの熱浴中での運動に関する研究は今ではかなり長い歴史を持っている¹⁾。この問題はスピン緩和と共鳴吸収の双方に関連している。

1946年, Bloch²⁾ は, 今日ブロッホ方程式として知られる有名な現象論的方程式

$$\frac{d}{dt}M = \gamma M \times H - iM_x/T_2 - jM_y/T_2 - k(M_z - M_0)/T_1 \quad (1.1)$$

を提出した。この方程式を微視的立場より演繹する件は非可逆過程の統計力学の典型的な問題である。Wangness と Bloch³⁾ は簡単なモデル・ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -\gamma H_0 S_z - \sum_{\alpha=x,y,z} \gamma H'_\alpha S_\alpha + \mathcal{H}_F \quad (1.2)$$

を用いて綺麗な一導出法を与えた。こゝに第一, 第三項は夫々独立したスピンの磁場 H_0 中の運動の熱浴だけの運動を与える部分で, 第二項はスピンと熱浴の干渉を与えるもの

*) この稿は昨年十月 J. Phys. Soc. Japan へ投稿した論文の和文版である。出版が著るしく遅れる見込の為当誌に発表するものである。既に物理学会年会(48年4月, 於九大)で報告されて居り, 又, 要約が本誌 19 巻 269 頁に発表されている。

とする。彼らの導出法は " Boltzmann Eq. " の方法 (今日では " master eq. と呼ばれる事が多い⁴⁾) を用いて、量子力学的に厳密なものであった。この仕事は Bloch^{5), 6)} によって更に外部磁場が時間的に変動する場合へ拡張されている。

他方、共鳴吸収の議論の為に、Bloembergen, Purcell & Pound⁷⁾ は簡便な確率論的解析を使ってブロッホ方程式を使わない方法を与えた。尤も、この方法は量子力学的には正しくないという欠点⁶⁾ を持っている。この方法は、Anderson^{8)~10)} 等^{11), 12)} によって更に展開されているので Langevin 法と呼んでもよい様である。Kubo, Hashitsume 両氏¹³⁾ は Stochastic Liouville Eq. の方法¹⁴⁾ を用いて、スピンの Langevin Eq. に関する揺動・散逸定理に因き Fokker-Planck Eq. を導いた。

上記の二つの流れの比較検討より、Langevin Eq. の見方は master Eq. の方法の欠点、即ち、量子力学的演算子の方法であって、又簡単な確率論的描像が持てない、を補うものであると結論出来そうである。然しながら、非可逆過程の一般論の分野では master eq. の方法は大層発展して居り^{15), 16)}、その上 master eq. に確率的に同等な非線形 Langevin Eq. が見付けられる^{17)~19)} 等の事があるので、この様な結論は変更すべき時期に来ている。

Master eq. というものは、van Kampen の考えに従えば¹⁵⁾、巨視変数についてのみ成立するものであり、又、スピン系の巨視変数は全スピン・モーメントの3つの成分であって、²⁰⁾ これらの三成分は個別スピンの数を N とする時 $N \rightarrow \infty$ の熱力学的極限で可換なオブザーバルの組をなす事が知られている。即ち、この極限ではこの三成分は古典的な量と見做す事ができる。この様な性質を持った巨視変数の (非線形) Langevin eq. を用いた解析法は文献¹⁹⁾ に与えられている。

本論文の目的は、全スピン・モーメントに対する (非線形) Langevin Eq. を master eq. と同様に厳密に量子力学に立脚して導出する事である。Langevin Eq. は揺動現象や共鳴吸収の議論に有効であると考えられる。尤も、共鳴吸収については Kubo, Tomita の両氏の線形応答理論²¹⁾ という別法が知られ広く応用されている。^{22), 23)}

全スピンの三成分は熱力学的極限では巨視変数ではあるが、この極限は計算の最後にとらねばならないので、計算の途中では厳密には巨視変数ではない。この様な物理量については文献¹⁹⁾ の方法は少し拡張の必要があり、この拡張を次節で行う。量子力学的演算子としての三成分に対する (非線形) Langevin Eq. と master eq. は第三節に、

主たる結論たる熱力学的極限でのこれらの方程式は第4節に簡単な議論も併せて記されている。

§2. 巨視変数の確率方程式

ここでいう巨視変数は van Kampen 等^{15), 24), 17) ~ 19), 25) ~ 27)} のものよりはほんの少し拡張された概念であり, 基本的には Zwanzig²⁸⁾ による。定義は下記による。

系の巨視変数 $\{\tilde{A}_j\}$ はすべてある量子数 m でもって

$$\tilde{A}_j \leftrightarrow A_j(m, m') \quad (2.1)$$

と書けるが, 一般には Hilbert 空間は他の量子数 b を用いて $\{|m, b\rangle\}$ で張られるものと考えよう。この様な状況は, open system²⁹⁾ や, closed system でも少数の自由度即ち巨視変数だけが重要な系²⁸⁾ には共通のものである。すると,

$$\langle m' b' | \tilde{A}_j | m b \rangle = A_j(m, m') \delta_{bb'} \quad (2.2)$$

が得られる。この式を満す様な量を巨視変数と呼ぶ事にしよう。

さて外積

$$|m, b\rangle \langle m', b'| \quad (2.3)$$

の張る空間 (Liouville 空間) を考え, そこでの mixture と付随する写影演算子

$$E_{mm'} = \sum_b |mb\rangle \langle m'b| \quad (2.4)$$

を定義しよう。すると, 各巨視変数は

$$\tilde{A}_j = \sum_{mm'} A_j(m, m') E_{mm'} \quad (2.5)$$

$$= \sum_{\alpha} A_j(\alpha) E_{\alpha} \quad (2.6)$$

と書かれる。ここに α は組 (m, m') を表す。(2・6)式は文献19)の(2・1)式と同形であり、唯一の相異は E_α は Liouville 空間の中だけで単位の分解になっているのに、文献19)の E_j は Hilbert 空間で対応する分解を持っている事である。

文献19)に於ると同じ様にして、一組の確率方程式が導かれる。

$$\frac{d}{dt} q_\alpha(t) = i \sum_\alpha \omega_{\alpha\alpha'} q_{\alpha'}(t) - \sum_{\alpha'} \int K_{\alpha\alpha'}(s) q_{\alpha'}(t-s) ds + r_\alpha(t) \quad (2.7)$$

ここに

$$q_\alpha(t) = e^{iL t} E_\alpha' \quad (2.8)$$

$$r_\alpha(t) = e^{i(1-P)L t} i(1-P) L E_\alpha' \quad (2.9)$$

$$K_{\alpha\alpha'}(s) = \text{Tr} r_\alpha^*(s) r_{\alpha'}(0) \quad (2.10)$$

$$\omega_{\alpha\alpha'} = \text{Tr} E_\alpha' L E_{\alpha'} / \text{Tr} E_{\alpha'} \quad (2.11)$$

又、 P は部分空間 $\{E_\alpha\}$ への写影演算子である。当初巨視変数と仮定された物理量 $A_j(t)$ は

$$A_j(t) = \sum_\alpha A_j(\alpha) q_\alpha(t) \quad (2.12)$$

と与えられる。文献19)と同様にして、(2・7)式が一般化マスター方程式

$$\frac{d}{dt} P_\alpha(t) = i \sum_{\alpha'} \omega_{\alpha\alpha'} P_{\alpha'}(t) - \sum_{\alpha'} \int K_{\alpha\alpha'}(s) P_{\alpha'}(t-s) ds \quad (2.13)$$

に対応する事は明かである。(2・7)~(2・12)式より非線形 Langevin Eq.

$$\frac{d}{dt} A_j(t) = i v_j(A(t)) - \int \alpha_{lj}(A(t-s), s) ds + R_j(t) \quad (2.14)$$

が導かれる。こゝに、

$$v_j(A) = \sum_{\alpha} A_j(\alpha) \omega_{\alpha\alpha'} \quad (2 \cdot 15)$$

$$\alpha_{lj}(A, s) = \sum_{\alpha} A_j(\alpha) K_{\alpha\alpha'}(s) \quad (2 \cdot 16)$$

$$R_j(t) = \sum_{\alpha} A_j(\alpha) r_{\alpha}(t) \quad (2 \cdot 17)$$

又、(2・15)と(2・16)の右辺 α' -依存性は左辺では $A = \{A_j(\alpha')\}$ への依存性として記されている。

以上の定式化は、古典的な系へも直接適用される。この場合は E_{α} として

$$D_{\alpha}(x, p) = 1, \quad \text{if } |A_j(x, p) - A_j(\alpha)| \leq \epsilon \quad (2 \cdot 18)$$

$$= 0, \quad \text{otherwise}$$

をとればよい。こゝに、 D_{α} は位相空間 $\{x, p\} \equiv \{x_j, p_j; 1 \leq j \leq 3N\}$ 内の coarse graining parameter ϵ で指定される定義函数であり従って又写影子である。^{24), 30)}もし $D_{\alpha}(x, p)$ を描象的に $\delta(A(x) - a) \equiv \prod_j \delta(A_j(x) - a_j)$, $a_j = A_j(\alpha)$, と書けば(2・13)式は Zwanzig の一般化マスター方程式²⁸⁾に他ならない。従って、(2・14)の右辺第一項 $v_j(A)$ は Zwanzig 等³¹⁾の云う "Streaming velocity" である。 $v_j(A)$ が非線形函数の場合には、現象論的方程式はもっと複雑になり、何かの "renormalization" が必要である。^{31), 32), *}しかし、以下ではすべて線形なので、現象論は単純に

$$\frac{d}{dt} \bar{A}_j(t) = v_j(\bar{A}(t)) - \int \alpha_{lK}(\bar{A}(t-s), s) ds \quad (2 \cdot 19)$$

で与えられる。

*) この問題に対する筆者の見解は多少変化している。物性研究 21 No. 4 の筆者の論文を参照されたい。

(2.7) 式や (2.14) 式に類似の方程式が Mori³³⁾, Kawasaki³⁴⁾ 両氏によって既に論じられている。Kawasaki 氏の理論は Mori 理論の単純な物理量の積として定義される様な物理量への適用又は拡張である*)。我々の理論と Mori 理論との関係は文献 19) と Mori 理論との関係とほとんど変化しない。即ち, Mori 理論というのは formal part と physical part より成り立っていると考えられる。こゝで formal part というのはある物理量に対する Liouville eq. の写影演算子を用いた形式的な分割による線形「確率」方程式への変換の部分であり, physical part というのは内積や写影演算子の具体化の部分である。この具体化によって Mori 理論は線形応答理論³⁵⁾ と不可分になった。我々の理論や文献 19) では physical part で異なり, 線形応答理論ではなく, 巨視変数の理論^{24) ~ 29)} と明瞭な関係を持っている。

実際問題には何かの近似が不可避である。第 0 近似として

$$L_0 = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} E_{\alpha}' \quad (2.20)$$

ととるのが良さそうである。こゝに

$$\omega_{\alpha} = \text{Tr}(L E_{\alpha}) / \text{Tr} E_{\alpha} \quad (2.21)$$

であり, (2.7) 式については

$$\frac{d}{dt} q_{\alpha}^{(0)}(t) = i \omega_{\alpha} q_{\alpha}^{(0)}(t) \quad (2.22)$$

$$q_{\alpha}^{(0)}(t) = e^{i \omega_{\alpha} t} q_{\alpha}^{(0)}(0) \quad (2.23)$$

すると, 第一近似として

*) 極く最近, 川崎 (恭治) 氏はもっと我々の理論に近い理論を出して居られる。

[J. Phys. A6(1973), L1].

$$\omega_{\alpha\alpha'} \simeq \omega_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (2 \cdot 24)$$

$$r_{\alpha}(s) \simeq e^{iL_0 s} iL' E_{\alpha'} \quad (2 \cdot 25)$$

が得られる。こゝに、 $L' = L - L_0$ で $K_{\alpha\alpha'}(s)$ は (2.10) 式で定まる。マルコフ近似では、¹²⁾ (2.7) 式は

$$\frac{d}{dt} q_{\alpha}(t) = i\omega_{\alpha} q_{\alpha}(t) - \sum_{\alpha'} \bar{K}_{\alpha\alpha'} q_{\alpha'}(t) + r_{\alpha}(t) \quad (2 \cdot 26)$$

となる。こゝに

$$\bar{K}_{\alpha\alpha'} = \int K_{\alpha\alpha'}(s) e^{-iL_0 s} ds \quad (2 \cdot 27)$$

$$Tr r_{\alpha'}^*(0) r_{\alpha}(t) = -\bar{K}_{\alpha\alpha'} \delta(t) \quad (2 \cdot 28)$$

である。

これから、すべて (2.24) ~ (2.28) の近似体系を用いる。この近似は、文献19) の §2 後半部の議論に対応し、熱力学的極限では一致する。

§3. スピンに対する量子力学的確率方程式

Tjon²⁰⁾ の示した様に、スピン系の巨視変数は全スピン・モーメントの三成分である。従って、一ケの代表的なスピンの運動を論ずる方が適切である。この点で、我々の取扱いは Wangness と Bloch³⁾ と異ってくる。しかし、我々のモデルは彼らのものとほとんど変化していない。というのは、同じ様にスピン-スピン相互作用を無視して居り、全スピンを個別スピンの数 N で割った量

$$s^{(\tau)} = \sum_j s_j^{(\tau)} / N \quad (3 \cdot 1)$$

に就いて同じハミルトニアン(1・2)を用いてからである。こんな便法を用いる為には同時に時間尺度を $t \rightarrow tN$ で変えておかねばならない。

簡単の為に、各個別スピン s_j は $1/2$ と仮定する。その固有状態は $|Q_j\rangle$ ($Q_j = \pm 1$) である。すると $s(0)$ の固有状態は

$$|N_z\rangle = N(N_z) \sum_Q e^{i\epsilon Q} \otimes_j |Q_j\rangle \quad (3\cdot 2)$$

となる。ここに和は N_z ケのスピンが \uparrow , $(N-N_z)$ ケのスピンが \downarrow なるすべての分割について行い、 $i\epsilon_Q$ は位相因子、 $N(N_z)$ は規格化因子で

$$\langle N_z | N'_z \rangle = \delta_{N_z N'_z} \quad (3\cdot 3)$$

なる様に決める。状態の組 $\{|N_z\rangle, 0 \leq N_z \leq N\}$ は $S^{(\tau)}$ を指定するのには十分で表示

$$\langle N'_z | S^{(0)} | N_z \rangle = (N_z/N - 1/2) \delta_{N_z N'_z} \quad (3\cdot 4)$$

$$\langle N'_z | S^{(+)} | N_z \rangle = \{(N_z + 1)(N - N_z)/N^2\}^{1/2} \delta_{N'_z N_z + 1} \quad (3\cdot 5)$$

$$\langle N'_z | S^{(-)} | N_z \rangle = \{N_z(N - N_z + 1)/N^2\}^{1/2} \delta_{N'_z N_z - 1} \quad (3\cdot 6)$$

を与える。パラメーターの組 (N, N_z) の代りに (ϵ, m)

$$\epsilon = 1/N \text{ and } m = N_z/N - 1/2 \quad (3\cdot 7)$$

を用いる事にすれば

(3・4)~(3・6)式は

$$\langle m | S^{(\tau)} | m' \rangle = S_m^{(\tau)} \delta_{m', m - \tau \epsilon'} \quad (3\cdot 8)$$

となる。但し

$$S_m^{(0)} = m \quad (3.9)$$

$$S_m^{(+)} = \{(1/2 + m)(1/2 - m + \epsilon)\}^{1/2} \quad (3.10)$$

$$S_m^{(-)} = \{(1/2 + m + \epsilon)(1/2 - m)\}^{1/2} \quad (3.11)$$

であり、又

$$|m| \leq 1/2 \quad (3.12)$$

である。

この節では、 N は固定したパラメーターである。従って、スピン系の完全な表示は $|m, b_s\rangle$ である。但し、 b_s は系の $\{S^{(\tau)}\}$ 以外の自由度を表す。又、熱浴の完全な表示は、そのエネルギー f とそれ以外の自由度 b_h で $|f, b_h\rangle$ である。従って、全系の表示は b_s, b_h を合せて b と書いて $|m, f, b\rangle$ となる。従って §2 の基本的な変数 $\{q_\alpha\}$ として

$$q_{mfm'f'}(t) = e^{iLt} E_{mfm'f'} \quad (3.13)$$

をとればよい。こゝに

$$E_{mfm'f'} = \sum_b |mfb\rangle \langle m'f'b| \quad (3.14)$$

とする。

近似体系 (2.20) ~ (2.24) に従えば、 L_0, ω_α は夫々

$$iL_0 X = -i [(-\gamma H_0 S^{(0)} + \mathcal{A}_F), X] \quad (3.15)$$

$$\omega_{mfm'f'} = E_m + E_f - E_{m'} - E_{f'} \quad (3.16)$$

となる。ここに E_m, E_f は夫々スピン及び熱浴のエネルギーであって

$$\langle mfb | (-\gamma H_0 S^{(0)}) | m'f'b' \rangle = E_m \delta_{mm'} \delta_{ff'} \delta_{bb'} \quad (3.17)$$

$$\langle mfb | H_F | m'f'b' \rangle = E_f \delta_{mm'} \delta_{ff'} \delta_{bb'} \quad (3.18)$$

で定義される。又,

$$E_m = -\gamma H_0 m \equiv \omega_0 m \quad (3.19)$$

となる。

以下、熱浴のエネルギーは §2 で拡張された意味の巨視変数であるばかりでなく、旧来の意味の巨視変数と考えるのが適切である。即ち、(3.13), (3.16) で ff' について対角項だけ考えればよい。故に

$$q_{mm'f}(t) \equiv q_{mfm'f}(t) \quad (3.20)$$

と書く事にする。Wangeess と Bloch³⁾ も用いた仮定

$$\sum_{bb_1} \langle fb | H'(\tau) | f_1 b_1 \rangle \langle f_1 b_1 | H'(-\tau) | fb \rangle = \delta_{\tau\tau'} \phi^{(\tau)}(ff_1) / \pi \quad (3.21)$$

を用いれば、(2.26) 式は線形確率方程式の組

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_{mm'f}(t) = & i(E_m - E_{m'}) q_{mm'f}(t) \\ & - \sum_{m_1 m'_1 f_1} K_{mm'f m_1 m'_1 f_1} q_{m_1 m'_1 f_1}(t) + r_{mm'f}(t) \end{aligned} \quad (3.22)$$

を与える。こゝに

$$\begin{aligned}
 & K_{mm'f m_1 m_1' f_1} \\
 &= \sum_{\tau} \{ \delta_{ff_1} \delta_{mm_1} \delta_{m'm_1'} [S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)} \sum_{f''} \phi^{(\tau)}(ff'') \delta(E_f - E_{f''} + E_m - E_{m-\tau\epsilon}) \\
 &+ S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)} \sum_{f''} \phi^{(\tau)}(ff'') \delta(E_f - E_{f''} + E_{m'} - E_{m'-\tau\epsilon})] \\
 &- \delta_{m_1 m - \tau\epsilon} \delta_{m_1' m_1' - \tau\epsilon} S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)} \phi^{(\tau)}(ff_1) \\
 &\times [\delta(E_f - E_{f_1} + E_m - E_{m-\tau\epsilon}) + \delta(E_f - E_{f_1} + E_{m'} - E_{m'-\tau\epsilon}) \\
 &- \frac{i}{\pi} \sum_{\tau} \delta_{ff_1} \delta_{mm_1} \delta_{m'm_1'} \{ S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)} \sum_{f''} \phi^{(\tau)}(ff'') P[1/(E_f - E_{f''} + E_m - E_{m-\tau\epsilon})] \\
 &- S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)} \sum_{f''} \phi^{(\tau)}(ff'') P[1/(E_f - E_{f''} + E_{m'} - E_{m'-\tau\epsilon})] \} \} \quad (3 \cdot 23)
 \end{aligned}$$

である。又、 P は *principal part* を示す。虚数部の意味はあまり明確でない。以下では簡単の為此の項を落す事にしよう。

この近似では、(3・23)式の構造は(3・22)が方程式群

$$\frac{d}{dt} q_{mf}^{(\eta)}(t) = i\eta\omega_0 q_{mf}^{(\eta)}(t) - \sum_{m_1 f_1} K_{mf m_1 f_1}^{(\eta)} q_{m_1 f_1}^{(\eta)}(t) + r_{mf}^{(\eta)}(t) \quad (3 \cdot 24)$$

に分割され得る事を示している。こゝに、

$$q_{mf}^{(\eta)}(t) \equiv q_{mm-\eta\epsilon f}^{(\eta)}(t) \quad (3 \cdot 25)$$

と書いた。又、核は

$$\begin{aligned}
 K_{mf m_1 f_1}^{(\eta)} &\equiv K_{mm-\eta\epsilon f m_1 m_1' - \eta\epsilon f_1} \\
 &= \sum_{\tau} \{ \delta_{ff_1} \delta_{mm_1} [S_{m-\eta\epsilon}^{(\tau)} S_{m-\eta\epsilon-\tau\epsilon}^{(-\tau)} + S_m^{(\tau)} S_{m-\tau\epsilon}^{(-\tau)}]
 \end{aligned}$$

$$-2\delta_{m_1 m - \tau \epsilon} S_{m - \eta \epsilon}^{(\tau)} S_{m - \tau \epsilon}^{(-\tau)} \phi^{(\tau)}(E) \quad (3 \cdot 26)$$

となる。こゝに、

$$\begin{aligned} \phi^{(\tau)}(E) = & \sum_{bb_1} \pi \langle fb | H'^{(\tau)} | f_1 b_1 \rangle \langle f_1 b_1 | H'^{(-\tau)} | fb \rangle \\ & \times \delta(E_f + E_m - E) \delta(E_{f_1} + E_{m_1} - E) \delta_{m_1 m - \tau \epsilon} \end{aligned} \quad (3 \cdot 27)$$

であるが、 E は系の全エネルギーを示す。(3.24)~(3.27)式で熱浴エネルギーへの依存性は、全エネルギーへの依存性という形で表すことができる。しかし、全エネルギーは保存量なので変化せず、従ってこの量への依存性は表わに書く必要はない。従って、最終的に

$$\frac{d}{dt} q_m^{(\eta)}(t) = i\pi\omega_0 \epsilon q_m^{(\eta)}(t) - \sum_{m_1} K_{mm_1}^{(\eta)} q_{m_1}^{(\eta)}(t) + r_m^{(\eta)}(t) \quad (3 \cdot 28)$$

を得る。核は

$$\begin{aligned} K_{mm_1}^{(\eta)} = & \sum_{\tau} \phi^{(\tau)} \left\{ \delta_{mm_1} \left[S_{m - \eta \epsilon}^{(\tau)} S_{m - \eta \epsilon - \tau \epsilon}^{(-\tau)} + S_m^{(\tau)} S_{m - \tau \epsilon}^{(-\tau)} \right] \right. \\ & \left. - 2 S_{m - \eta \epsilon}^{(\tau)} S_{m - \tau \epsilon}^{(-\tau)} \delta_{m_1 m - \tau \epsilon} \right\} \end{aligned} \quad (3 \cdot 29)$$

で与えられる。又、(2.28)式より

$$T r r_m^{(\eta')} (t) r_m^{(\eta)}(0) = -K_{m'm}^{(\eta)} \delta(t) \delta_{\eta\eta'} \quad (3 \cdot 30)$$

という関係を得る。

(3.27)式の和は全エネルギー E とスピン・エネルギー E_m が一定という条件で、すべての微視状態について行うものである。

平衡統計力学の標準的な教科書³⁶⁾によれば、この様な和はカノニカル分布

$$\sum_b \delta(E_f + E_m - E) \propto e^{-\beta E_m} \quad (3.31)$$

を与える。従って、 $\langle f b | H'(\tau) | f_1 b_1 \rangle$ の b, b_1 への依存性が十分に小さいという当然の仮定の下に、関係式

$$\phi(\tau) = e^{-\kappa\tau} \phi(-\tau) \quad (3.32)$$

及び

$$\phi(\tau) \propto e^{-\beta(E_m + E_{m_1})} \quad (3.33)$$

を得る。但し、定義

$$\kappa = 2\beta\omega_0\varepsilon \quad (3.34)$$

を導入した。これらの関係は Wangness-Bloch³⁾ の (4.11), (3.17) 式に対応する (因子 2 が違う)。

(2.12) 式を用いて (3.28) より (非線形) Langevin Eq. を導くのはすぐに出来る。

$$S^{(\tau)}(t) = \sum_m S_{m-\tau\varepsilon}^{(\tau)} q_m^{(\tau)}(t) \quad (\tau = 0, \pm) \quad (3.35)$$

より

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S^{(0)}(t) = & -\varepsilon\phi^{(1)} \{ \varepsilon(1+e^{-\kappa}) S^{(0)} + (1-e^{-\kappa})(S^{(+)} S^{(-)} + S^{(-)} S^{(+)})/2 \} \\ & + R^{(0)}(t) \end{aligned} \quad (3.36)$$

及び

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S^{(\pm)}(t) = & \pm i\omega_0 \varepsilon S^{(\pm)}(t) - \varepsilon^2 [\phi^{(0)} + (1 + e^{-\kappa}) \phi^{(1)}] S^{(\pm)}(t) \\ & + (1 - e^{-\kappa}) \varepsilon \phi^{(1)} (S^{(\pm)} S^{(0)} + S^{(0)} S^{(\pm)}) + R^{(\pm)}(t) \end{aligned} \quad (3 \cdot 37)$$

が得られる

当然の事として、(3・36)、(3・37) 両式は $W-B$ の (4・19)、(4・20) 両式に対応する。異なる点といえば、乱雑力 $R^{(\tau)}(t)$ が付加され、従って、適当な時間領域で Heisenberg 方程式と同等になっている点である。(3・36) 式 of 非線形項は $S^{(0)}(t)$ が正しい平衡値に到達する事を保証している。^{3), 13)}

非線形項が重要で線形近似が行えない時は、これらの方程式は量子論的な演算子に対する方程式なので、解くのは容易でない。熱力学的極限では、これらの演算子は古典的な量になる。

§4. 熱力学的極限と結論

熱力学的極限は (3・28) ~ (3・37) で、 $\varepsilon \rightarrow 0$ ($N \rightarrow \infty$) ととればよい。

$$\varepsilon \phi^{(\tau)} \rightarrow \psi^{(\tau)} \quad (4 \cdot 1)$$

と仮定するのが良さそうである。こゝに $\psi^{(\tau)}$ は有限の値とする。クロネッカーの δ -記号は δ -関数に置き換えて ε の 2 次まで展開する。時間尺度は元に戻す: $t \rightarrow \varepsilon t$ 。この極限での $q_m^{(\eta)}(t)$ を $g^{(\eta)}(m, t)$ と書けば、

$$\frac{d}{dt} g^{(\eta)}(m, t) = i\eta\omega_0 g^{(\eta)}(m, t) - \int K^{(\eta)}(m, m_1) g^{(\eta)}(m_1, t) dm_1 + r^{(\eta)}(m, t) \quad (4 \cdot 2)$$

を得る。但し、

$$K^{(\eta)}(m, m_1) = \{ \eta^2 \psi^{(0)} + 2\psi^{(1)} [2m \frac{\partial}{\partial m} + (1/4 - m^2) (2\beta\omega_0 \frac{\partial}{\partial m} - \frac{\partial^2}{\partial m^2})] \} \delta(m - m_1) \quad (4 \cdot 3)$$

である。

この極限では、 $\{S^{(\tau)}\}$ は古典的変数であり、これらの量を m の代って表わに出す方が便利である。(4.2)と(4.3)両式は

$$\frac{d}{dt} g^{(\tau)}(S^{(\tau)}, t) = - \int K^{(\tau)}(S^{(\tau)}, S^{(\tau)'}) g^{(\tau)}(S^{(\tau)'}, t) dS^{(\tau)'} + r^{(\tau)}(S^{(\tau)}, t) \quad (4.4)$$

となる。こゝに

$$K^{(0)}(s, s_1) = 2\Psi^{(1)} \left[2s \frac{\partial}{\partial s} + (1/4 - s^2) \left(2\beta\omega_0 \frac{\partial}{\partial s} - \frac{\partial^2}{\partial s^2} \right) \right] \delta(s - s_1) \quad (4.5)$$

$$K^{(\pm)}(s, s_1) = \left\{ \Psi^{(0)} + 2\Psi^{(1)} \left[-(1/4 - s^2) \frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{1}{4s^2} + \left(\frac{1}{4s} + 2s \right) \frac{\partial}{\partial s} - 2\beta\omega_0 \left(s \sqrt{1/4 - s^2} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{1}{4} (1/4 - s^2)^{-1/2} \right) \right] \right\} \delta(s - s_1) \quad (4.6)$$

とする。§2の結果によれば、(4.4)式より乱雑力を除いた式はマスター方程式である。この式は2階までの微分しか含んでいないので Fokker-Planck Eq. でもある。この式は、しかし、古典スピンの研究より推測されていたもの^{11), ~13), 37)}とは可成違っている。非線形 Langevin Eq. は

$$\frac{d}{dt} S^{(0)} = -4\Psi^{(1)} S^{(0)} - 2\beta\omega_0 \Psi^{(1)} (S^{(+)} S^{(-)} + S^{(-)} S^{(+)}) + R^{(0)}(t) \quad (4.7)$$

及び

$$\frac{d}{dt} S^{(\pm)} = i\omega_0 S^{(\pm)} - 2(\Psi^{(0)} + 2\Psi^{(1)}) S^{(\pm)} + 3\beta\omega_0 \Psi^{(1)} (S^{(\pm)} S^{(0)} + S^{(0)} S^{(\pm)}) + R^{(\pm)}(t) \quad (4.8)$$

となる。この乱雑力は関係式

$$\langle R^{(\tau)}(t) R^{(\tau')}(0) \rangle_{S(0)} = \delta^{(\tau)} \delta_{\tau\tau'} d_1^{(\tau)}(S(0)) \quad (4.9)$$

を満す。こゝに

$$d_1^{(0)}(s) = 4\Psi^{(1)} [s^2 + \beta\omega_0 s(1/4 - s^2)] \quad (4 \cdot 10)$$

$$d_1^{(\pm)}(s) = 2\Psi^{(0)} s^2 + 4\Psi^{(1)} [s^2 - 6\beta\omega_0 s^2 \sqrt{1/4 - s^2} - 1/4] \quad (4 \cdot 11)$$

とする。(4.7), (4.8) 両式より乱雑力を落せば現象論的方程式

$$\frac{d}{dt} S^{(0)} = -4\Psi^{(1)} S^{(0)} - 2\beta\omega_0 \Psi^{(1)} (S^{(+)} S^{(-)} + S^{(-)} S^{(+)}) \quad (4 \cdot 12)$$

$$\frac{d}{dt} S^{(\pm)} = \pm i\omega_0 S^{(\pm)} - 2(\Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}) S^{(\pm)} + 3\beta\omega_0 \Psi^{(1)} (S^{(\pm)} S^{(0)} + S^{(0)} S^{(\pm)}) \quad (4 \cdot 13)$$

が得られるが、これは丁度 Bloch Eq. (1.1) に相当する。何とならば、非線形項を平均で置換えれば(4.12)では $M_0 = \langle S^{(0)} \rangle$ に、(4.13)ではゼロになる^{3), 13)}からである。

Fokker-Planck Eq. (4.4) ~ (4.6), (非線形) Langevin Eq. (4.7) ~ (4.11) 及び Bloch Eq. (4.12), (4.13) が本論文の主要結果である。

得られた(非線形) Langevin Eq. は揺動現象や共鳴吸収の議論に有効であろう。尤も、時間に依存する外磁 $H_1(t)$ が付加された場合には、 $(H_1(t) \times S)$ といった項が付加されねばならないだろう。Modified Bloch Eq.^{5), 6)} を導くのと同様の修正を加えねばならないだろう。

(4.8) 式や(4.13) 式で非線形項が線形化され、時間に依存する外磁場が十分小さくて $\langle S^{(0)} \rangle$ を変化させない様な場合には、Langevin Eq. (4.7) と(4.8) より、文献19) の(4.20), (4.21) 式を用いて、緩和時間 T_1, T_2 に対する単純な表式を与える事が出来よう。この表式は、Bloch Eq. の方法と線形応答理論^{21), 22), 35)} の橋渡しをするものであるが、線形化出来ない時はこの橋は落ちてしまう様である。この様な場合の議論はこれからの問題である。

文 献

- 1) A. Abragam, "The Principles of Nuclear Magnetism" (Oxford, 1961: Japanese Translation by K. Tomita and M. Tanaka.)
- 2) F. Bloch, Phys. Rev. 70(1946) 460
- 3) R. K. Wangness and F. Bloch, Phys. Rev. 89(1953) 728.
- 4) G. V. Chester, in "Many-Body Problems" (W. A. Benjamin, Inc. 1969)
- 5) F. Bloch, Phys. Rev. 102(1955) 104.
- 6) F. Bloch, Phys. Rev. 105(1957) 1206.
- 7) N. Bloembergen, E. M. Purcell and R. V. Pound, Phys. Rev. 73(1948) 679.
- 8) P. W. Anderson and P. R. Weiss, Rev. Mod. Phys. 25(1953) 269.
- 9) P. W. Anderson, J. Phys. Soc. Japan 9(1954) 316.
- 10) J. R. Klauder and P. W. Anderson, Phys. Rev. 125(1962) 912.
- 11) A. Yoshimori and J. Korryng, Phys. Rev. 128(1962) 1054.
- 12) H. Nakao and A. Yoshimori, Prog. Theor. Phys. 32(1964) 685.
- 13) R. Kubo and N. Hashitsume, Suppl. Prog. Theor. Phys. 46(1970) 210.
- 14) R. Kubo, J. Math. Phys. 4(1963) 174.
- 15) N. G. van Kampen, in "Fluctuation Phenomena in Solids" ed. by R. E. Burgers, (Academic Press, 1965)
- 16) R. W. Zwanzig, in "Lectures in Theoretical Physics" ed. by W. E. Brittin and others (Interscience Pub, 1961), vol. III.
- 17) H. Ueyama, Prog. Theor. Phys. Letters. 47(1972) 346.
- 18) H. Ueyama, Prog. Theor. Phys. Letters. 48(1972) 685.
- 19) H. Ueyama, Prog. Theor. Phys. 48(1972) 1090.
- 20) J. A. Tjon, Physica 30(1964) 1 and 1341.
- 21) R. Kuba and K. Tomita, J. Phys. Soc. Japan 9(1954) 888.
- 22) R. Kubo, in "Fluctuation, Relaxation and Magnetic Systems" (Sootish University Summer School, 1961)
- 23) P. M. Argyres and P. L. Kelley, Phys. Rev. 134(1964) A98.

- 24) N. G. van Kampen, in "Fundamental Problems in Statistical Mechanics" compiled by E. G. D. Cohen (North Holland Pub. Co. 1962)
- 25) M. S. Green, J. Chem. Phys. 20(1952) 1281.
- 26) G. Ludwig, in "International School of Physics" <<Enrico Fermi>> XIV Course (Academic Press, 1960)
- 27) G. Emch, Helv. Phys. Acta, 37(1964) 532.
- 28) R. Zwanzig, Phys. Rev. 124(1961) 983.
- 29) G. G. Emch and G. L. Sewell, J. Math. Phys. 9(1968) 946.
- 30) G. L. Sewell, in "Lectures in Theoretical Physics" ed. by A. O. Barut and W. E. Brittin (Gordon and Breach, 1968) val. X-A.
- 31) R. Zwanzig, K. S. J. Nordholm and W. C. Mitchell, Phys. Rev. A5 (1972) 2680.
- 32) R. Zwanzig, in "Proceedings of the Sixth IUPAP Conference on Statistical Mechanics," (Univ. Chicago Press, 1972)
- 33) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 33(1965) 423.
- 34) K. Kawasaki, Ann. Phys. 61(1970) 1.
- 35) R. Kubo, in the same reprint series as Ref. 4)
- 36) L. D. Landau and E. M. Lifshits, "Statistical Mechanics" (Japanese Translation)
- 37) H. Ueyama, Bussei Kenkyu (Domestic Journal on Statistical Mechanics) 19(1972), 131 and 153. See also Science Reports Coll. Gen. Educ. Osaka University 21 [2] (1973), 1.