磁場中の粒子のスピン回転(μ^+SR)の Grassmann 数による扱い

東工大・理　　中　村　正　人

1．序

物質の内部磁場の様子を調べる手段としてμ^+SR（ミュオンスピン回転)がある。これはμ^+が物質中を拡散しながら各場所の磁場によってきまる振動数で Larmor 歳差運動をするので，スピンの向きの時間変化を見ることによって内部磁場の様子を探るというものである。

これを扱うものとして，当初，低磁場共鳴・緩和の理論として出された Kubo and Toyabe[1]，あるいは Shibata and Sato[2] などがあるが，これらは変動する磁場の下でのスピンの運動を考えている。

本研究では，ミュオンが量子力学的運動をしているときのスピンの回転を考える。スピン演算子を Fermi 演算子で書き，Fermi 系の経路積分を行なうことでこの問題にアプローチする。

2．理論の概要

扱うべきハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H = & -J\sum_{j}\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}(b^{+}_{j\sigma}b_{j+1\,\sigma}+b^{+}_{j+1\,\sigma}b_{j\sigma}) \\
& -\gamma/2\sum_{j}\Big\{(b^{+}_{j\uparrow}b_{j\uparrow}-b^{+}_{j\downarrow}b_{j\downarrow})H_{jz} \\
& \qquad +(b^{+}_{j\uparrow}b_{j\downarrow}+b^{+}_{j\downarrow}b_{j\uparrow})H_{jx} \\
& \qquad -\mathrm{i}(b^{+}_{j\uparrow}b_{j\downarrow}-b^{+}_{j\downarrow}b_{j\uparrow})H_{jy}\Big\}
\end{aligned}
\qquad \cdots\cdots(1)
$$

であり，第１項がミュオンのホッピングを，第２項が Zeeman エネルギーを表す。ただし，J，γ はそれぞれホッピングレイトと磁気回転比である。ここで用いた $b^{+}_{j\sigma}$，$b_{j\sigma}(\sigma=\uparrow,\downarrow)$ を次のように位置変数とスピン変数の演算子の積で表わす。

$$b^+_{j\uparrow} = c^+_j a^+ \qquad b_{j\uparrow} = c_j a$$

$$b^+_{j\downarrow} = c^+_j b^+ \qquad b_{j\downarrow} = c_j b$$

a, a^+, b, b^+ はスピンを表すために導入したFermi演算子である。真空 $|0>$ に a, b, a^+, b^+ を作用すると,

$$a^+|0> = |\uparrow> \qquad b^+|0> = |\downarrow>$$

$$<0|a = <\uparrow| \qquad <0|b = <\uparrow|$$

となる。このように c_i, c_i^+, a, a^+, b, b^+ を用いることにより, (1)は次のようになる。

$$H = -J\sum_j (c^+_j c_{j+1} + c^+_{j+1} c_j) \otimes 1$$

$$-\frac{\gamma}{2}\sum_j c^+_j c_j \{(a^+a - b^+b)H_{jz} + (a^+b + b^+a)H_{jx} - \mathrm{i}(a^+b - b^+a)H_{jy}\} \quad \cdots\cdots (2)$$

次にFermi演算子のコヒーレント状態を導入する。Grassmann数 ψ, ϕ を用いて

$$|\psi,\phi> = \mathrm{e}^{-\psi a^+ - \phi b^+}|0>$$

と表せるこの状態は, 消滅演算子の固有状態である：

$$a|\psi,\phi> = \psi|\psi,\phi>, \quad b|\psi,\phi> = \phi|\psi,\phi>$$

これに対し,

$$<\psi,\phi| = <0|\mathrm{e}^{-a\bar{\psi} - b\bar{\phi}}$$

と表される状態は

$$<\psi,\phi|a^+ = <\psi,\phi|\bar{\psi}, \quad <\psi,\phi|b^+ = <\psi,\phi|\bar{\phi}$$

を満たす。ここに $\bar{\psi}, \bar{\phi}$ は ψ, ϕ の involution である。これらにより, 完全性

$$\int \mathrm{d}\bar{\psi}\mathrm{d}\psi\mathrm{d}\bar{\phi}\mathrm{d}\phi\ \mathrm{e}^{-\bar{\psi}\psi-\bar{\phi}\phi}|\psi,\phi><\psi,\phi| = 1$$

が満足される。

求めたいものは，例えば$\langle S_x(0)\rangle = \dfrac{1}{2}$のときの$\langle S_x(t)\rangle$であるから，確率振幅$K(q_\mathrm{f}, \sigma_\mathrm{f}, t\ ; q_\mathrm{i}, \sigma_\mathrm{i}, 0) = \langle q_\mathrm{f}, \sigma_\mathrm{f}|\mathrm{e}^{-iHt}|q_\mathrm{i}\sigma_\mathrm{i}\rangle$を計算しなくてはならない。時間を$N$等分に区切って各時刻における完全系をはさんでやると，

$$\begin{aligned}\langle q_\mathrm{f}, \sigma_\mathrm{f}|\mathrm{e}^{-iHt}|q_\mathrm{i}, \sigma_\mathrm{i}\rangle = \lim_{N\to\infty}\sum_{q_{N-1}}\cdots\sum_{q_1}\langle q_\mathrm{f}|\mathrm{e}^{iJ\varepsilon\Sigma C_i{}^\dagger C_j}|q_{N-1}\rangle\cdots\langle q_1|\mathrm{e}^{\mathrm{i}J\varepsilon\Sigma C_i{}^\dagger C_j}|q_\mathrm{i}\rangle \\ \times\int(\mathrm{d}\bar{\psi})(\mathrm{d}\psi)(\mathrm{d}\bar{\phi})(\mathrm{d}\phi)\ \langle\sigma_\mathrm{f}|\psi_N,\phi_N\rangle\langle\psi_0, \phi_0|\sigma_\mathrm{i}\rangle \\ \times\exp\Big[-\sum_{j=0}^{N}\Big\{\bar{\psi}_j\bar{\psi}_j-\Big(1+\mathrm{i}\frac{\gamma}{2}\varepsilon H_{jz}\Big)\bar{\psi}_j\psi_{j-1} \\ +\bar{\phi}_j\phi_j-\Big(1-\mathrm{i}\frac{\gamma}{2}\varepsilon H_{jz}\Big)\bar{\phi}_j\phi_{j-1} \\ -\mathrm{i}\frac{\gamma}{2}\varepsilon A_j\bar{\psi}_j\phi_{j-1}-\mathrm{i}\frac{\gamma}{2}\varepsilon A_j^*\bar{\phi}_j\psi_{j-1}\Big\}\Big]\end{aligned} \qquad \cdots\cdots(3)$$

となる。ここに$A_j = H_{j\bar{x}} - iH_{jy}$，$A_j^*$はその複素共役，

$$(\mathrm{d}\bar{\psi}) = \mathrm{d}\bar{\psi}_N\mathrm{d}\bar{\psi}_{N-1}\cdots\mathrm{d}\bar{\psi}_0, \qquad (\mathrm{d}\psi) = \mathrm{d}\psi_0\mathrm{d}\psi_1\cdots\mathrm{d}\psi_N \qquad \text{など}$$

である。以後$\dfrac{\gamma}{2}H_{jz} = \omega_j$，$\dfrac{\gamma}{2}A_j = a_j$，$\dfrac{\gamma}{2}A_j^* = a_j^*$と書くことにする。なお，$\psi_{-1} = \phi_{-1} = 0$，$H(\bar{\psi}_0, \bar{\phi}_0, \psi_{-1}, \phi_{-1}) = 0$とする。

確率振幅の経路積分表示は，位置変数の部分とスピン変数の部分が分かれている。以下スピン変数の部分に注目する。例として，$\sigma_\mathrm{f} = \uparrow$，$\sigma_\mathrm{i} = \uparrow$とすると，$\langle\uparrow|\psi_N,\phi_N\rangle = \psi_N$，$\langle\psi_0,\phi_0|\uparrow\rangle = \bar{\psi}_0$となる。(3)を計算するために，

$$\psi_N\bar{\phi}_0 = \mathrm{e}^{-\bar{\phi}_0\psi_N} - 1$$

と書いて(3)に代入すると，結局スピンに関する確率振幅$K_\mathrm{S}(\uparrow t\ ; \uparrow 0)$は

$$K(\uparrow t\ ; \uparrow 0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}s\,\omega(q(s))}$$

$$- \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_1}^{t} \mathrm{d}s_1 \omega(q(s_1))} a(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{-i\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}s_2 \omega(q(s_2))} a^*(q(t_2)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_0^{t_2} ds_3 \omega(q(s_3))}$$

$$+ \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \int_0^{t_2} \mathrm{d}t_3 \int_0^{t_3} \mathrm{d}t_4 \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_1}^{t} \mathrm{d}s_1 \omega(q(s_1))} a(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}s_2 \omega(q(s_2))} a^*(q(t_2))$$

$$\times \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_3}^{t_2} \mathrm{d}s_3 \omega(q(s_3))} a(q(t_3)) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_4}^{t_3} \mathrm{d}s_4 \omega(q(s_4))} a^*(q(t_4)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_0^{t_4} \mathrm{d}s_5 \omega(q(s_5))}$$

$$- + \cdots\cdots$$

となる。同様に他の確率振幅も書くと,

$$K(\downarrow t\,;\ \downarrow 0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_0^t \mathrm{d}s \omega(q(s))}$$

$$-\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t} \mathrm{d}s_1 \omega(q(s_1))} a^*(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}s_2 \omega(q(s_2))} a(q(t_2)) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_0^{t_2} \mathrm{d}s_3 \omega(q(s_3))}$$

$$+\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \int_0^{t_2} \mathrm{d}t_3 \int_0^{t_3} \mathrm{d}t_4 \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_1}^{t} \mathrm{d}s_1 \omega(q(s_1))} a^*(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}s_2 \omega(q(s_2))} a(q(t_2))$$

$$\times \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_3}^{t_2} \mathrm{d}s_3 \omega(q(s_3))} a^*(q(t_3)) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_{t_4}^{t_3} \mathrm{d}s_4 \omega(q(s_4))} a(q(t_4)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_0^{t_4} \mathrm{d}s_5 \omega(q(s_5))}$$

$$- + \cdots\cdots$$

$$K(\uparrow t\,;\ \downarrow 0) = \int_0^t \mathrm{d}t_1 K(\uparrow t\,;\ \uparrow t_1) a(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_0^{t_1} \mathrm{d}s \omega(q(s))}$$

$$K(\downarrow t\,;\ \uparrow 0) = \int_0^t \mathrm{d}t_1 K(\downarrow t\,;\ \downarrow t_1) a^*(q(t_1)) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}s \omega(q(s))}$$

となる。

これらの確率振幅を用いて,緩和関数 $\langle S_x(t) \rangle$ などが計算できる。$\langle S_x(0) \rangle = \frac{1}{2}$ として,粒子が q_{i} から q_{f} へ移動したときのスピンの x 成分の期待値は,

$$\langle S_x(t) \rangle = \frac{1}{4} \Big[(\langle \uparrow | U^+ | \downarrow \rangle \langle \uparrow | U | \uparrow \rangle + \mathrm{c.c.})$$

$$+ (\langle \downarrow | U^+ | \downarrow \rangle \langle \uparrow | U | \downarrow \rangle + \mathrm{c.c.})$$

$$+ \{ (\langle \downarrow | U^+ | \downarrow \rangle \langle \uparrow | U | \uparrow \rangle) + \langle \downarrow | U^+ | \uparrow \rangle \langle \downarrow | U | \uparrow \rangle + \mathrm{c.c.} \} \Big]$$

ここでは略して書いたが$\langle\uparrow|U|\uparrow\rangle = K(q_{\mathrm{f}},\uparrow,t\,;\,q_{\mathrm{i}},\uparrow,0)$などである。

ミュオンがランダムな磁場中を運動しているとすると，ランダムな磁場についても平均しなくてはならない。その様子を大雑把に記しておくことにする。$H_x = H_y = 0$，H_zは平均0のガウス分布に従う古典系である場合を例にしよう。このときは

$$\langle\downarrow|U^{+}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|U|\uparrow\rangle = K^{*}(q_{\mathrm{f}},\downarrow,t\,;\,q_{\mathrm{i}},\downarrow,0)K(q_{\mathrm{f}},\uparrow,t\,;\,q_{\mathrm{i}},\uparrow,0)$$

を磁場について平均したもの$<\langle\downarrow|U^{+}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|U|\uparrow\rangle>_{\mathrm{r}}$が必要である。$\frac{\gamma}{2}H_z = \omega_z$の相関関数

$$\phi(q(\tau),q(s)) = \langle\omega(q(\tau))\,\omega(q(s))\rangle_r$$

$$\phi(q(\tau),q'(s)) = \langle\omega(q(\tau))\omega(q'(s))\rangle_{\mathrm{r}}$$

などを用い，上で用いていた

$$\sum_{q_{N-1}}\cdots\sum_{q_1}\langle q_N|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon J\Sigma C_i^{\dagger}C_j}|q_{N-1}\rangle\cdots\langle \mathrm{q}_1|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon J\Sigma C_i^{\dagger}C_j}|q_{\mathrm{i}}\rangle$$

を簡単に

$$\int_{q(0)=q_{\mathrm{i}}}^{q(t)=q_{\mathrm{f}}}\mathscr{D}(q)\mathrm{e}^{iS(q)}$$

と書いてやると

$$\langle\langle\downarrow|U^{+}|\downarrow\rangle\langle\uparrow|U|\uparrow\rangle\rangle_{\mathrm{r}} = \int\mathscr{D}(q)\int\mathscr{D}(q')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[S(q)-S(q')]}$$

$$\times\exp\Big[-\frac{1}{2}\int_0^t\mathrm{d}\tau\int_0^t\mathrm{d}s\Big\{\phi(q(\tau),q(s))$$

$$+\phi(q'(\tau),q(s))+\phi(q(\dot{\tau}),q'(s))+\phi(q'(\tau),q'(\tau))\Big\}\Big]$$

となる。さらに$\phi(q(\tau),q(s))$などを経路で平均したもので置き換えるという近似を行なうと（これは時刻τ,sの関数$\phi(\tau,s)$となる），ランダムな磁場中を運動するミュオンのスピ

ン緩和関数の振舞の様子を知ることができる。

3．まとめ

粒子が量子力学的運動をしているときのスピン回転の様子を調べるため，スピン自由度に対しては，Fermi 演算子を用いてスピン演算子を書き，Fermi 系の経路積分を行ない，その確率振幅の表現を得た。これを用いて，スピンの期待値を具体的に計算していかなければならない。

Appendix

簡単に，ここで用いた Grassmann 数[3]の性質について触れておく。Grassmann 数は反交換する c 数である。それを ψ_1，$\psi_2 \cdots$ と表すと，

$$\{\psi_i, \psi_j\} = 0$$

を満たす。特別の場合として $\psi_i^2 = 0$ を得る。さらに Grassmann 奇の数(奇数個の Grassmann 数の積)とも反交換する。しかし，Grassmann 偶の数(普通の c 数や偶数個の Grassmann 数の積)とは交換する。一般に Grassmann 偶の数を e_i，Grassmann 奇の数を o_i と表わすと，

$$\{o_i, o_j\} = 0$$
$$[e_i, e_j] = [e_i, o_j] = 0$$

を満たす。

積分は次のように定義する。

$$\int \mathrm{d}\psi_i \psi_i = 1, \qquad \int \mathrm{d}\psi_i = 0$$

ただし，$\{\psi_i, \mathrm{d}\psi_j\} = \{\mathrm{d}\psi_i, \mathrm{d}\psi_j\} = 0$ とする。このとき ψ，ξ を N 成分ベクトルとすると，

$$\int (\mathrm{d}\psi)(\mathrm{d}\xi) \mathrm{e}^{-{}^t\psi A \xi} = \det A$$

$$(\mathrm{d}\psi) = \mathrm{d}\psi_N \mathrm{d}\psi_{N-1} \cdots \mathrm{d}\psi_1, \ (\mathrm{d}\xi) = \mathrm{d}\xi_1 \mathrm{d}\xi_2 \cdots \mathrm{d}\xi_N$$

という公式が成り立つ。

Fermi演算子のコヒーレント状態を作るときに用いたことは，Fermi演算子とGrassmann数との反交換関係

$$\{\psi, a_i\} = \{\psi, a_i^+\} = 0$$

と真空 $|0\rangle$，$\langle 0|$ がGrassmann数と交換できる，すなわち

$$\psi|0\rangle = |0\rangle\psi, \quad \psi\langle 0| = \langle 0|\psi$$

ということである。ただし真空の定義は $a|0\rangle = \langle 0|a^+ = 0$ となるものである。最後に ψ_i のinvolution $\bar{\psi}_i$ であるが，これは ψ_i に全く独立で $\overline{(\bar{\psi}_i)} = \psi_i$ を満たすGrassmann数であり，積分としては，

$$\int \mathrm{d}\bar{\psi}_i\bar{\psi}_i = 1, \quad \int \mathrm{d}\bar{\psi}_i = 0$$

を定義としている。

参 考 文 献

1) R. Kubo and T. Toyabe, in: *Proc. of the XIVth Colloque Ampère Ljubljana 1966 Magnetic Resonance and Relaxation,* R. Blinc, ed. (North-Holland, Amsterdam 1967) p. 810.
2) F. Shibata and I. Sato, Physica **143A** (1987) 468.
3) Y. Ohnuki and T. Kashiwa, Prog. Theor. Phys. **60** (1978) 548;
F. Berezin, *The Method of Second Quantization* (Academic Press. 1966).