

非平衡統計力学における緩和法と T C L E 法

富山商船高専 佐伯 瑞彦

(2001 年 11 月 22 日受理)

非平衡統計力学において、熱浴と相互作用している量子系の外場に対する応答係数を求める方法として、久保公式を熱浴を含めて計算する方法（「緩和法」という）と外場を含む時間非畳み込み型（T C L 型）な運動方程式からアドミッタンスを求める方法（「T C L E 法」という）がある。この二つの方法の関係を解析的および数値的に調べた結果を報告する。

1 はじめに

非平衡統計力学において、熱浴と相互作用している量子系の外場に対する線形応答の応答係数（アドミッタンス）を求める方法として、久保公式 [1] を熱浴を含めて計算する緩和法と筆者が提案する T C L E 法 [2]–[5] (method of time-convolutionless equations with external driving terms の略) がある。緩和法の従来の方法（以下、「従来の緩和法」という）では、久保公式における相関関数または応答関数を緩和理論によって求めるとき、考えている量子系と熱浴の初期状態としてデカップルさせた形 (decoupled initial condition) を用いる [6]–[8]。久保公式は系と熱浴の熱平衡状態を初期条件 (thermal equilibrium initial condition) として導かれているので、decoupled initial condition を用いると系と熱浴の初期相関の効果が無視される。更に、緩和法が尖鋭化極限（熱浴の相関時間零極限 ($\tau_c \rightarrow 0$)）[9] または系と熱浴の弱結合極限 (van Hove 極限) [10] において用いられるとき [6][8]、熱浴から系へ盛り返す記憶効果が無視される。T C L E 法は外場を含む T C L 型な運動方程式からアドミッタンスを直接求める方法で、方程式の中に含まれる外場と熱浴の干渉項が初期相関の効果と記憶効果を表す [2]–[5]。

この解説では、緩和法と T C L E 法のアドミッタンスの関係を解析的に調べ、T C L E 法における干渉項が表す初期相関の効果と記憶効果はアドミッタンスにどのような効果を与えるかを、大きさ $1/2$ の量子スピン系について数値的に調べた結果を報告する。熱浴は量子的に扱う。

第 2 節では、緩和法と T C L E 法のアドミッタンスの一般形を導き、その関係を議論する。第 3 節では、大きさ $1/2$ の量子スピン系について二つの方法による横方向帯磁率を数値的に比較し、干渉項が与える効果を議論する。

2 緩和法と T C L E 法のアドミッタンスとその関係

この節では、熱浴と相互作用している量子系を考え、外場に対する線形応答の応答係数（アドミッタンス）の一般形を、緩和法と T C L E 法とによってそれぞれ求めて、解析的に比較する。

2.1 緩和法によるアドミッタンス

緩和法は、量子系とそれと相互作用している熱浴を考え、熱浴変数を消去することによって系の物理量の相関関数または応答関数を求め、久保公式 [1] を用いてアドミッタンスを計算する方法である。ここでは、筆者によるアドミッタンスの一般形の導出法を紹介する [4][5][11]。量子系と熱浴のハミルトニアンを次のようにおく。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_{SB} + \mathcal{H}_B. \quad (1)$$

$\mathcal{H}_S$ は (量子) 系のハミルトニアン, $\mathcal{H}_B$ は熱浴のハミルトニアンで, $\mathcal{H}_{SB}$ は系と熱浴の相互作用 (ハミルトニアン) とする。全系 (量子系と熱浴) の密度演算子 $\rho_T(t)$ はリユービル方程式

$$(d/dt)\rho_T(t) = - (i/\hbar)[\mathcal{H}, \rho_T(t)] \equiv - iL\rho_T(t) \quad (2)$$

を満たす。ここで, L はハミルトニアン (1) に相当するリユービルアンである。系の物理量 A に対して、次の演算子を考える。

$$\tilde{A}(-t) = \rho_T(0)(e^{-iLt}A) \quad \text{or} \quad (e^{-iLt}A)\rho_T(0). \quad (3)$$

$\rho_T(0)$ は系と熱浴の初期状態で、熱平衡状態とする。

$$\rho_T(0) = f(\mathcal{H}) \equiv \exp(-\beta\mathcal{H}) / \text{Tr}\{\exp(-\beta\mathcal{H})\}. \quad (\text{Tr} = \text{tr tr}_B) \quad (4)$$

このとき、演算子 $\tilde{A}(-t)$ は次の方程式を満たす。

$$(d/dt)\tilde{A}(-t) = - (i/\hbar)[\mathcal{H}, \tilde{A}(-t)] = - iL\tilde{A}(-t). \quad (5)$$

熱浴変数を消去するために射影演算子 $\mathcal{P}$, $\mathcal{Q}$ を導入する。

$$\mathcal{P} = \rho_B \text{tr}_B, \quad \mathcal{Q} = 1 - \mathcal{P} \quad ; \quad \text{tr}_B \rho_B = 1. \quad (6)$$

ここで, ρ_B は熱浴の時間に依存しない密度演算子とする ($L_B \rho_B = 0$)。

方程式 (5) はリユービル方程式 (2) と同様な形をしている。文献 [12] でなされたように射影演算子 (6) を用いて時間非畳み込み型 (TCL型) な方程式を導く。結果は次のようになる [12]。

$$\begin{aligned} (d/dt)\mathcal{P}\tilde{A}(-t) = & - iPLP\tilde{A}(-t) - iPL\{\theta(t) - 1\}\mathcal{P}\tilde{A}(-t) \\ & - iPL\theta(t)\exp(-iQLQ\tau)\mathcal{Q}\tilde{A}(0), \end{aligned} \quad (7)$$

ここで $\theta(t)$ は次のように定義される [12]。

$$\theta(t) = \left\{ 1 + i \int_0^t d\tau \exp(-iQLQ\tau)QLP \exp(iL\tau) \right\}^{-1}. \quad (8)$$

方程式 (7) は、射影演算子 (6) によって、演算子

$$\tilde{a}(-t) = \text{tr}_B \tilde{A}(-t) = \text{tr}_B \rho_T(0)(e^{-iLt}A) \quad \text{or} \quad \text{tr}_B(e^{-iLt}A)\rho_T(0) \quad (9)$$

に対する次の TCL 方程式になる。

$$(d/dt)\tilde{a}(-t) = - iL_S \tilde{a}(-t) + C(t)\tilde{a}(-t) + I(t), \quad (10)$$

ここで、系と熱浴の衝突演算子 $C(t)$ と非斉次項 $I(t)$ は

$$C(t) = -i \operatorname{tr}_B L_{SB} \{\theta(t) - 1\} \rho_B \equiv -i \langle L_{SB} \{\theta(t) - 1\} \rangle_B, \quad (11)$$

$$I(t) = -i \operatorname{tr}_B L_{SB} \theta(t) \exp(-iQ L Q t) Q \tilde{A}(0), \quad (12)$$

であり、系のエネルギーに系と熱浴との相互作用の一次の繰り込みをした。

$$\mathcal{H}_S \longrightarrow \mathcal{H}_S + \langle \mathcal{H}_{SB} \rangle_B \Longrightarrow \mathcal{H}_S, \quad (13)$$

$$\mathcal{H}_{SB} \longrightarrow \mathcal{H}_{SB} - \langle \mathcal{H}_{SB} \rangle_B \Longrightarrow \mathcal{H}_{SB}. \quad (14)$$

方程式 (10) は文献 [12] で導出された系の縮約された密度演算子 (reduced density operator) に対する T C L 方程式に相当する。系と熱浴の初期状態 $\rho_T(0)$ [(4)] をデカップルさせた初期状態 $\rho_T(0) = \rho(0) \rho_B$ で近似すると、 $I(t) = 0$ となるので、非斉次項 $I(t)$ は系と熱浴の初期相関の効果を表す項である。方程式 (10) は形式的に次のように解かれる。

$$\begin{aligned} \tilde{a}(-t) &= \exp_{\leftarrow} \left\{ -i L_S t + \int_0^t d\tau C(\tau) \right\} \tilde{a}(0) \\ &\quad + \int_0^t d\tau \exp_{\leftarrow} \left\{ -i L_S \cdot (t - \tau) + \int_\tau^t ds C(s) \right\} I(\tau). \end{aligned} \quad (15)$$

これを久保公式 [1] に代入することによって、アドミッタンスが次のように求められる。

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^r(\omega) &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \operatorname{Tr} [e^{iL t} A_i, A_j] \rho_T(0) e^{i\omega t} = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \operatorname{Tr} A_i [e^{-iL t} A_j, \rho_T(0)] e^{i\omega t}, \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \operatorname{tr} A_i \exp_{\leftarrow} \left\{ i(\omega - L_S) t + \int_0^t d\tau C(\tau) \right\} [A_j, \rho(0)] \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt \int_0^t d\tau \operatorname{tr} A_i \exp_{\leftarrow} \left\{ i(\omega - L_S)(t - \tau) + \int_\tau^t ds C(s) \right\} \\ &\quad \times \operatorname{tr}_B L_{SB} \theta(\tau) \exp(-iQ L Q \tau) Q [A_j, \rho_T(0)] e^{i\omega \tau}, \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、

$$\rho(0) = \operatorname{tr}_B \rho_T(0) = \operatorname{tr}_B f(\mathcal{H}). \quad (17)$$

アドミッタンス (16) は、緩和法を熱平衡初期条件 (4) のもとで用いて得られたアドミッタンスの一般形の一つである。アドミッタンス (16) の第一項は、デカップルさせた初期条件 $\rho_T(0) = \rho(0) \rho_B$ のもとでの緩和法（従来の緩和法）を用いて得られるアドミッタンスであり、第二項は系と熱浴の初期相関による項である。

T C L 方程式 (10) において系と熱浴の相互作用の 2 次までの摂動近似をすると、方程式 (10) は次のようになる [3][11][12]。

$$(d/dt) \tilde{a}(-t) = -i L_S \tilde{a}(-t) + C^{(2)}(t) \tilde{a}(-t) + I^{(2)}(t), \quad (18)$$

with

$$C^{(2)}(t) = - \int_0^t d\tau \langle L_{SB} e^{-iL_0 \tau} L_{SB} e^{iL_0 \tau} \rangle_B, \quad (L_0 = L_S + L_B) \quad (19)$$

$$I^{(2)}(t) = i \operatorname{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0 t} \int_0^\beta d\beta' \left\{ \begin{array}{l} \rho_S \rho_B \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta') A \\ A \rho_S \rho_B \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta') \end{array} \right\}, \quad (20)$$

ここで、

$$\rho_S = \exp(-\beta \mathcal{H}_S) / \text{tr} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_S) \}. \quad (21)$$

このとき、久保公式 [1] よりアドミッタンスは次のようになる [11]。

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^r(\omega) = & \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \text{tr} A_i \exp_{\leftarrow} \left\{ i(\omega - L_S) t + \int_0^t d\tau C^{(2)}(\tau) \right\} [A_j, \rho(0)] \\ & - \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt \int_0^t d\tau \text{tr} A_i \exp_{\leftarrow} \left\{ i(\omega - L_S)(t - \tau) + \int_\tau^t ds C^{(2)}(s) \right\} \\ & \times \int_0^\beta d\beta' \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} \rho_B [A_j, \rho_S \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta')] e^{i\omega\tau}. \end{aligned} \quad (22)$$

第一項はデカップルさせた初期条件のもとでの緩和法（従来の緩和法）を用いて得られるアドミッタンスであり、第二項は系と熱浴の初期相関による項である。

系と熱浴の相互作用 $\mathcal{H}_{SB}$ が演算子の完全系 $\{u_k v_k\}$ (u_k は熱浴の演算子, v_k は系の演算子) で

$$\mathcal{H}_{SB} = \sum_k g_k u_k v_k \quad (23)$$

と展開されるとき (g_k は系と熱浴の結合定数)、非斉次項 $I^{(2)}(t)$ は

$$I^{(2)}(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_{k,l} g_k g_l \int_0^\beta d\beta' C_{lk}(-t - i\hbar\beta') \left[v_k, \left\{ \begin{array}{c} \rho_S v_l(-t - i\hbar\beta') A(-t) \\ A(-t) \rho_S v_l(-t - i\hbar\beta') \end{array} \right\} \right] \quad (24)$$

となる。ここで、 $v_k(t) = \exp(iL_S t) v_k$, $A(t) = \exp(iL_S t) A$ であり、又、 $C_{kl}(t)$ は熱浴の相関関数である。

$$C_{kl}(t) = \text{tr}_B u_k(t) u_l \rho_B \quad ; \quad u_k(t) = \exp(iL_B t) u_k. \quad (25)$$

非斉次項 $I^{(2)}(t)$ は (24) より、熱浴が素早く減衰する (相関時間 $\tau_c \rightarrow 0$) 極限 (尖鋭化極限) [9] において 0 になり ($I^{(2)}(t) \rightarrow 0$)、従って、この極限においては、緩和法をデカップルさせた初期条件のもとで用いてよいことがわかる。

減衰が大へん素早い (相関時間 $\tau_c \rightarrow 0$) 熱浴の場合、方程式 (18) は

$$(d/dt) \tilde{a}(-t) = -iL_S \tilde{a}(-t) + C^{(2)} \tilde{a}(-t), \quad (\tau_c \rightarrow 0) \quad (26)$$

with

$$C^{(2)} = C^{(2)}(\infty) = - \int_0^\infty d\tau \langle L_{SB} e^{-iL_0\tau} L_{SB} e^{iL_0\tau} \rangle_B \quad (27)$$

となる。これは系と熱浴の弱結合極限 (van Hove 極限) [10] において得られる方程式である。方程式 (26) の形式解

$$\tilde{a}(-t) = \exp\{ -iL_S t + C^{(2)} t \} \tilde{a}(0), \quad (\tau_c \rightarrow 0) \quad (28)$$

より、アドミッタンス $\chi_{ij}^r(\omega)$ は次のようになる [4][5]。

$$\chi_{ij}^r(\omega) \rightarrow \chi_{ij}^{rf}(\omega) = (i/\hbar) \text{tr} A_i \{ i(L_S - \omega) - C^{(2)} \}^{-1} [A_j, \rho(0)]. \quad (\tau_c \rightarrow 0) \quad (29)$$

2.2 TCLE法によるアドミッタンス

TCLE法は、量子系とそれと相互作用している熱浴および外場を考え、熱浴変数を消去することによって方程式を時間非畳み込み型 (TCL型) に導いて [2]-[4]、外場に対する応答係数を直接求める方法である。全系のハミルトニアンを次のようにおく。

$$\mathcal{H}_T(t) = \mathcal{H}_S + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{SB} + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SB} + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = \mathcal{H} + \mathcal{H}_{\text{ext}}(t). \quad (30)$$

ここで、 $\mathcal{H}_{\text{ext}}(t)$ は系と外場との相互作用ハミルトニアンとし、他は前節のハミルトニアンと同じとする。外場は初期時刻 $t = 0$ に加えられるとする。全系 (量子系と熱浴および外場) の密度演算子 $\rho_T(t)$ はリユービル方程式

$$(d/dt)\rho_T(t) = - (i/\hbar)[\mathcal{H}_T(t), \rho_T(t)] \equiv - iL_T(t)\rho_T(t) \quad (31)$$

を満たす。ここで、 $L_T(t)$ はハミルトニアン $\mathcal{H}_T(t)$ に相当するリユービリアンである。密度演算子 $\rho_T(t)$ を外場について次のように展開する。

$$\rho_T(t) = \rho_{T0}(t) + \rho_{T1}(t) + \rho_{T2}(t) + \dots \quad (32)$$

外場について 0 次の部分 $\rho_{T0}(t)$ 、1 次の部分 $\rho_{T1}(t)$ は次の方程式および初期条件を満たす。

$$(d/dt)\rho_{T0}(t) = - iL\rho_{T0}(t); \quad \rho_{T0}(0) = \rho_T(0), \quad (33)$$

$$(d/dt)\rho_{T1}(t) = - iL\rho_{T1}(t) - iL_{\text{ext}}\rho_{T0}(t); \quad \rho_{T1}(0) = 0. \quad (34)$$

方程式 (34) から射影演算子 (6) を用いて熱浴変数を消去することによって、時間非畳み込み型 (TCL型) な方程式を導く。結果は次のようになる [2][3]。

$$\begin{aligned} (d/dt)\mathcal{P}\rho_{T1}(t) = & - i\mathcal{P}L\mathcal{P}\rho_{T1}(t) - i\mathcal{P}L\{\theta(t) - 1\}\mathcal{P}\rho_{T1}(t) \\ & - \int_0^t d\tau \mathcal{P}L\theta(t) \exp[-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}(t-\tau)] \mathcal{Q}\theta^{-1}(\tau)L_{\text{ext}}(\tau) \exp(-iL\tau) \rho_T(0) \\ & - i\mathcal{P}L_{\text{ext}}(t) \rho_{T0}(t). \end{aligned} \quad (35)$$

ここで、 $\theta(t)$ は (8) で与えられ、(33) の形式解

$$\rho_{T0}(t) = \exp(-iLt) \rho_T(0) \quad (36)$$

を用いた。方程式 (35) は射影演算子 (6) によって、 $\rho_1(t) [= \text{tr}_B \rho_{T1}(t)]$ に対する次の TCL 型な運動方程式になる。

$$(d/dt)\rho_1(t) = - iL_S \rho_1(t) + C(t) \rho_1(t) + D(t) - iL_{\text{ext}}(t) \rho_0(t), \quad [\rho_0(t) = \text{tr}_B \rho_{T0}(t)] \quad (37)$$

ここで、系のエネルギーと系-熱浴相互作用の一次の繰り込み (13)(14) をした。方程式 (37) において、 $C(t)$ は (11) で与えられた系と熱浴の衝突演算子であり、 $D(t)$ は外場と系-熱浴相互作用との間の干渉による項で「外場と熱浴の干渉項」と呼び、次の形に書かれる [2][3]。

$$\begin{aligned} D(t) = & - \int_0^t d\tau \text{tr}_B L_{SB} \frac{1}{1-\Sigma(t)} \exp[-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}(t-\tau)] L_{\text{ext}}(\tau) \mathcal{Q} \exp(-iL\tau) \rho_T(0) \\ & + \int_0^t d\tau \text{tr}_B L_{SB} \frac{1}{1-\Sigma(t)} \exp[-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}(t-\tau)] \Sigma(\tau) L_{\text{ext}}(\tau) \exp(-iL\tau) \rho_T(0), \end{aligned} \quad (38)$$

with

$$\Sigma(t) = 1 - \theta^{-1}(t) = -i \int_0^t d\tau \exp(-i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}\tau) \mathcal{Q}L_{\text{SB}}\mathcal{P} \exp(iL\tau). \quad (39)$$

干渉項 (38) の第一項は系と熱浴の初期相関の効果を表す項であることが、次の考察からわかる。系と熱浴の初期状態 $\rho_{\text{T}}(0)$ が熱平衡状態 $f(\mathcal{H})$ [(4)] のとき、

$$\mathcal{Q} \exp(-iL\tau) \rho_{\text{T}}(0) = \mathcal{Q} f(\mathcal{H}) \quad \text{for} \quad \rho_{\text{T}}(0) = f(\mathcal{H}) \quad (40)$$

となるが、 $\rho_{\text{T}}(0)$ をデカップルさせた初期状態 $\rho(0) \rho_{\text{B}}$ で近似する [$f(\mathcal{H}) = \rho(0) \rho_{\text{B}}$] と、 $\mathcal{Q} \rho(0) \rho_{\text{B}} = 0$ より、上式 (40) 従って干渉項 (38) の第一項は 0 となる。干渉項 (38) の第二項は、方程式 (35) を TCL 型に導く際に記憶効果を繰り込むとき生じる項で、熱浴から盛り返す記憶効果を表す項である [2][3]。方程式 (37) の右辺第四項は系が外場から直接受ける効果を表す項である。

方程式 (37) は形式的に次のように解かれる。

$$\rho_1(t) = \int_0^t d\tau \exp_{\leftarrow} \left\{ -iL_{\text{S}} \cdot (t - \tau) + \int_{\tau}^t ds C(s) \right\} \{ D(\tau) - iL_{\text{ext}}(\tau) \rho_0(\tau) \}. \quad (41)$$

このとき、系の物理量 A_i の期待値の外場について一次の部分は

$$\Delta_1 \langle A_i(t) \rangle = \text{tr} A_i \rho_1(t), \quad (t > 0) \quad (42)$$

で与えられる。系と外場との相互作用 $\mathcal{H}_{\text{ext}}(t)$ が

$$\mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = - \sum_j A_j F_j(t) = - \sum_j \sum_{\omega} A_j F_j(\omega) e^{-i\omega t} = \sum_{\omega} \mathcal{H}_{\text{ext}}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (43)$$

と展開されとする (A_j は c 数の力 $F_j(t)$ に共役な物理量) と、アドミッタンス $\chi_{ij}(\omega)$ は $t \rightarrow \infty$ において次のように定義される [1][5]。

$$\Delta_1 \langle A_i(t) \rangle = \text{tr} A_i \rho_1(t) = \sum_j \sum_{\omega} \chi_{ij}(\omega) F_j(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (t \rightarrow \infty) \quad (44)$$

この方法では、(42), (44) が得られれば過渡応答および定常応答を議論することができる。

TCL 方程式 (37) において系と熱浴の相互作用の 2 次までの摂動近似をすると、方程式 (37) は次のようになる [2][3][5]。

$$(d/dt) \rho_1(t) = -iL_{\text{S}} \rho_1(t) + C^{(2)}(t) \rho_1(t) + D^{(2)}(t) - iL_{\text{ext}}(t) \rho_0(t). \quad (45)$$

上式において、衝突演算子 $C^{(2)}(t)$ は (19) で与えられる。干渉項 $D^{(2)}(t)$ の形は初期条件に依存する [2][3][5]。熱平衡初期条件 (4) の場合、干渉項は次の形をとる。

$$\begin{aligned} D_{\text{TE}}^{(2)}(t) = & \int_0^t d\tau \int_0^{\beta} d\beta' \text{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0\tau} L_{\text{ext}}(t - \tau) \rho(0) \rho_{\text{B}} \mathcal{H}_{\text{SB}}(-i\hbar\beta') \\ & - i \int_0^t d\tau \int_0^{\tau} ds \text{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0\tau} L_{\text{SB}} e^{iL_0(\tau-s)} L_{\text{ext}}(t - s) \rho(0) \rho_{\text{B}}. \end{aligned} \quad (46)$$

ここで、 $\rho(0)$ は (17) で与えられる。系と熱浴変数をデカップルさせた初期状態

$$\rho_{\text{T}}(0) = \rho(0) \rho_{\text{B}}; \quad \rho(0) = \text{tr}_{\text{B}} \rho_{\text{T}}(0) = \text{tr}_{\text{B}} f(\mathcal{H}), \quad (47)$$

の場合、干渉項は次の形をとる。

$$D_{\text{DC}}^{(2)}(t) = i \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 s} L_{\text{ext}}(t-s) e^{iL_0(s-\tau)} L_{\text{SB}} \rho(0) \rho_{\text{B}} \\ - i \int_0^t d\tau \int_0^\tau ds \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 \tau} L_{\text{SB}} e^{iL_0(\tau-s)} L_{\text{ext}}(t-s) \rho(0) \rho_{\text{B}}. \quad (48)$$

方程式 (45) の右辺第四項の中の $\rho_0(t)$ には、系-熱浴相互作用の 2 次の項だけでなく高次の項も含ませておく。干渉項 (46) と (48) の記憶効果を表す第二項は同じ形であるが、初期相関の効果を表す第一項の形は異なる。ところが、極限 $t \rightarrow \infty$ において、両干渉項の第一項従って両干渉項は一致する [5]。このことは、過渡応答を論ずる場合は初期条件として (4) を用いるか (47) を用いるかで結果が異なる（と思われる）が、定常応答 ($t \rightarrow \infty$) を論ずる場合は熱平衡初期条件 (4) を用いてもデカップルさせた初期条件 (47) を用いても同じ結果になることを意味する。

次に、方程式 (45) の極限 $t \rightarrow \infty$ での形式解から定常応答のアドミッタンスの形を導く。熱浴の相関時間が有限の場合を考え、系と外場との相互作用 (43) に対して方程式 (45) の定常解を

$$\rho_1(t) = \sum_{\omega} \rho_1(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (t \rightarrow \infty) \quad (49)$$

の形におく。方程式 (45) の中の $\rho_0(t) [= \operatorname{tr}_{\text{B}} \rho_{\text{T0}}(t)]$ は、外場がない場合、熱平衡初期条件 (4) のときは $\operatorname{tr}_{\text{B}} f(\mathcal{H})$ に等しく、デカップルさせた初期条件 (47) のときは、系と熱浴の状態は $t \rightarrow \infty$ の極限において熱平衡になることを考えると、極限 $t \rightarrow \infty$ において $\operatorname{tr}_{\text{B}} f(\mathcal{H})$ に等しい。つまり、

$$\rho_0(t) = \operatorname{tr}_{\text{B}} f(\mathcal{H}) = \rho(0). \quad (t \rightarrow \infty) \quad (50)$$

方程式 (45) が極限 $t \rightarrow \infty$ においても成立するとすると、 $\rho_1(\omega)$ は次の方程式を満たす。

$$-i\omega \rho_1(\omega) = -iL_{\text{S}} \rho_1(\omega) + C^{(2)} \rho_1(\omega) + D^{(2)}(\omega) - iL_{\text{ext}}(\omega) \rho(0). \quad (51)$$

ここで、衝突演算子 $C^{(2)}$ は (27) で与えられ、干渉項 $D^{(2)}(\omega)$ は

$$D^{(2)}(t) = \sum_{\omega} D^{(2)}(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (t \rightarrow \infty) \quad (52)$$

によって定義される。但し、(49)(52) の振動数 ω についての和は、(43)(44) の ω と同じ振動数についての和とする。干渉項 $D^{(2)}(\omega)$ の形は、(46) と (48) から同じ結果が得られるが [5]、後の引用のため二つの表式を記しておく。

$$D_{\text{TE}}^{(2)}(\omega) = \int_0^\infty d\tau \int_0^\beta d\beta' \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 \tau} L_{\text{ext}}(\omega) \rho(0) \rho_{\text{B}} \mathcal{H}_{\text{SB}}(-i\hbar\beta') e^{i\omega\tau} \\ - i \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 \tau} L_{\text{SB}} e^{iL_0(\tau-s)} L_{\text{ext}}(\omega) \rho(0) \rho_{\text{B}} e^{i\omega s}, \quad (53)$$

$$D_{\text{DC}}^{(2)}(\omega) = i \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 s} L_{\text{ext}}(\omega) e^{iL_0(s-\tau)} L_{\text{SB}} \rho(0) \rho_{\text{B}} e^{i\omega s} \\ - i \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \operatorname{tr}_{\text{B}} L_{\text{SB}} e^{-iL_0 \tau} L_{\text{SB}} e^{iL_0(\tau-s)} L_{\text{ext}}(\omega) \rho(0) \rho_{\text{B}} e^{i\omega s}. \quad (54)$$

方程式 (51) より、 $\rho_1(\omega)$ の形式解が

$$\rho_1(\omega) = (i(L_{\text{S}} - \omega) - C^{(2)})^{-1} \{ -iL_{\text{ext}}(\omega) \rho(0) + D^{(2)}(\omega) \}, \quad (55)$$

と得られ、これと (44)(49) よりアドミッタンスの形は

$$\chi_{ij}(\omega) = \text{tr} A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} \{ (i/\hbar) [A_j, \rho(0)] + D_j^{(2)}(\omega) \}, \quad (56)$$

となる。上式の $D_j^{(2)}(\omega)$ も、後の引用のため二つの表式を記しておく。

$$\begin{aligned} D_{j\text{TE}}^{(2)}(\omega) = & -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\beta d\beta' \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} \rho_B [A_j, \rho(0) \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta')] e^{i\omega\tau} \\ & + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} L_{SB} e^{iL_0(\tau-s)} \rho_B [A_j, \rho(0)] e^{i\omega s}, \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} D_{j\text{DC}}^{(2)}(\omega) = & -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0 s} [A_j, e^{iL_0(s-\tau)} L_{SB} \rho(0)] \rho_B e^{i\omega s} \\ & + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} L_{SB} e^{iL_0(\tau-s)} \rho_B [A_j, \rho(0)] e^{i\omega s}. \end{aligned} \quad (58)$$

もう一度述べると、 $\rho(0)$ が (17) で与えられるときに、干渉項 $D_{\text{TE}}^{(2)}(\omega)$ と $D_{\text{DC}}^{(2)}(\omega)$ 、 $D_{j\text{TE}}^{(2)}(\omega)$ と $D_{j\text{DC}}^{(2)}(\omega)$ は、それぞれ、系-熱浴相互作用の 2 次のオーダーまでで一致する [5]。

$$D_{\text{TE}}^{(2)}(\omega) = D_{\text{DC}}^{(2)}(\omega); \quad D_{j\text{TE}}^{(2)}(\omega) = D_{j\text{DC}}^{(2)}(\omega). \quad (\rho(0) = \text{tr}_B f(\mathcal{H})) \quad (59)$$

2.3 アドミッタンスの関係

緩和法によって得られたアドミッタンスと TCLE 法によって得られたアドミッタンスを、TCL 方程式における系-熱浴相互作用の 2 次摂動の範囲で比較する。まず、緩和法によるアドミッタンス (22) は TCLE 法によるアドミッタンス (56) を含むことを示す [5][11]。 $\chi_{ij}^r(\omega)$ [(22)] の第一項を次のように書き直して、高次の項を残しながら展開する。

($\chi_{ij}^r(\omega)$ [(22)] の第一項)

$$\begin{aligned} & = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \text{tr} A_i \exp_{\leftarrow} \left\{ i(\omega - L_S) t + C^{(2)} t + \int_0^t d\tau (C^{(2)}(\tau) - C^{(2)}) \right\} [A_j, \rho(0)], \\ & = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \text{tr} A_i \exp \{ i(\omega - L_S) t + C^{(2)} t \} \exp_{\leftarrow} \left\{ \int_0^t d\tau \exp \{ -i(\omega - L_S) \tau - C^{(2)} \tau \} \right. \\ & \quad \times (C^{(2)}(\tau) - C^{(2)}) \exp \{ i(\omega - L_S) \tau - C^{(2)} \tau \} \left. \right\} [A_j, \rho(0)], \\ & = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \text{tr} A_i \exp \{ i(\omega - L_S) t + C^{(2)} t \} [A_j, \rho(0)] \\ & \quad + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \int_0^t d\tau \int_\tau^\infty ds \text{tr} A_i \exp \{ (i(\omega - L_S) + C^{(2)})(t - \tau) \} \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0 s} L_{SB} e^{iL_0 s} \rho_B \\ & \quad \times \exp \{ (i(\omega - L_S) + C^{(2)}) \tau \} [A_j, \rho(0)] + \dots, \\ & = (i/\hbar) \text{tr} A_i \{ i(L_S - \omega) - C^{(2)} \}^{-1} [A_j, \rho(0)] \\ & \quad + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_\tau^\infty ds \text{tr} A_i \{ i(L_S - \omega) - C^{(2)} \}^{-1} \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0 s} L_{SB} e^{iL_0 s} \rho_B \\ & \quad \times \exp \{ (i(\omega - L_S) + C^{(2)}) \tau \} [A_j, \rho(0)] + \dots, \\ & = (i/\hbar) \text{tr} A_i \{ i(L_S - \omega) - C^{(2)} \}^{-1} [A_j, \rho(0)] \\ & \quad + \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\tau ds \text{tr} A_i \{ i(L_S - \omega) - C^{(2)} \}^{-1} \\ & \quad \times \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} L_{SB} e^{iL_0(\tau-s)} \rho_B [A_j, \rho(0)] e^{i\omega s} + \dots. \end{aligned} \quad (60)$$

上の展開は、緩和法によるアドミッタンス $\chi_{ij}^r(\omega)$ [(22)] の第一項すなわちデカップルさせた初期条件のもとでの緩和法（従来の緩和法）を用いて得られるアドミッタンスは、熱浴が素早く減衰する（相関時間 $\tau_c \rightarrow 0$ ）極限（尖鋭化極限）[9] または系と熱浴の弱結合極限（van Hove 極限）[10] において得られるアドミッタンス $\chi_{ij}^{rf}(\omega)$ [(29)] と、熱浴から盛り返す記憶効果を表す（TCLE法における）干渉項 $D_j^{(2)}(\omega)$ [(57),(58)] の第二項（第二干渉項という）を含むことを示す[5]。つまり、
 $(\chi_{ij}^r(\omega) [(22)])$ の第一項

$$= \chi_{ij}^{rf}(\omega) + \text{tr } A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} (\text{second term of } D_j^{(2)}(\omega)) + \dots \quad (61)$$

同様に、 $\chi_{ij}^r(\omega) [(22)]$ の第二項を次のように書き直して展開する[11]。

$(\chi_{ij}^r(\omega) [(22)])$ の第二項

$$\begin{aligned} &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_\tau^\infty dt \text{tr } A_i \exp \left\{ (i(\omega - L_S) + C^{(2)})(t - \tau) + \int_\tau^t ds (C^{(2)}(s) - C^{(2)}) \right\} \\ &\quad \times \int_0^\beta d\beta' \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} \rho_B [A_j, \rho_S \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta')] e^{i\omega\tau}, \\ &= -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_\tau^\infty dt \text{tr } A_i \exp \{ (i(\omega - L_S) + C^{(2)})(t - \tau) \} \\ &\quad \times \int_0^\beta d\beta' \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} \rho_B [A_j, \rho_S \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta')] e^{i\omega\tau} + \dots, \\ &= -\text{tr } A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} \\ &\quad \times \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty d\tau \int_0^\beta d\beta' \text{tr}_B L_{SB} e^{-iL_0\tau} \rho_B [A_j, \rho_S \mathcal{H}_{SB}(-i\hbar\beta')] e^{i\omega\tau} + \dots \end{aligned} \quad (62)$$

上の展開は、 $\chi_{ij}^r(\omega) [(22)]$ の第二項は $\rho(0) = \text{tr}_B f(\mathcal{H})$ のとき (57)(59) より、系-熱浴相互作用の2次のオーダーまで干渉項 $D_j^{(2)}(\omega)$ [(57),(58)] の第一項を含むことを示す[11]。つまり、
 $(\chi_{ij}^r(\omega) [(22)])$ の第二項

$$= \text{tr } A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} (\text{first term of } D_j^{(2)}(\omega)) + \dots \quad (63)$$

このように、系と熱浴の初期相関による項である $\chi_{ij}^r(\omega)$ の第二項は、同じく初期相関の効果を表す（TCLE法における）干渉項の第一項（第一干渉項という）を含むことがわかる。

展開 (61) および (63) から、緩和法によるアドミッタンス $\chi_{ij}^r(\omega) [(22)]$ は、

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^r(\omega) &= \chi_{ij}^{rf}(\omega) + \text{tr } A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} D_j^{(2)}(\omega) + \dots, \\ &= \text{tr } A_i \{i(L_S - \omega) - C^{(2)}\}^{-1} \{ (i/\hbar)[A_j, \rho(0)] + D_j^{(2)}(\omega) \} + \dots, \end{aligned} \quad (64)$$

と展開され、TCLE法によるアドミッタンス $\chi_{ij}(\omega)$ [(56)] を含むことがわかる。上の展開式や、TCL方程式での2次摂動近似で得られた形 (22) と (56) との比較から、緩和法によるアドミッタンスの方がTCLE法によるアドミッタンスよりも多くの高次の項を含んでいることがわかる。厳密に計算できるならば、より多くの高次の項を含む方がより良い方法であるが、(22) を複雑な系や多体系に適用することは一般に容易ではない（厳密な形である (16) については言うまでもない）。多体系については多くの場合、尖鋭化極限[9] または van Hove 極限[10] において計算されており（例えば、[8]）、それはアドミッタンス $\chi_{ij}^{rf}(\omega)$ [(29)] を計算することに相当する。TCLE法における干渉項は、その極限からのずれの効果すなわち初期相関の効果（第一干渉項による）と記憶効果（第二干渉項による）を与える。TCLE法によるアドミッタンス (56) の方が、緩和法によるアドミッタンス (22) よりも高次の項が少ないだけ計算が容易であると思われる。次の節では、干渉項の効果や2次摂動近似の適用限界等について数値的に議論する。

3 アドミッタンスの数値的な比較

この節では、熱浴と相互作用している量子振動子系や大きさ $1/2$ の量子スピン系について、緩和法と T C L E 法とによるアドミッタンスや横方向帯磁率を 2 次摂動近似の範囲でそれぞれ求めて数値的に比較し、2 次摂動近似の適用限界や干渉項の効果を議論する。

3.1 2 次摂動近似の適用限界

熱浴と非断熱的な相互作用をしている量子振動子を考える。振動子だけのハミルトニアン $\mathcal{H}_S$ 、振動子と熱浴との相互作用ハミルトニアン $\mathcal{H}_{SB}$ 、振動子と外場との相互作用ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{ext}}(t)$ を次のようにとる。

$$\mathcal{H}_S = \hbar \omega_0 b^\dagger b, \quad (65)$$

$$\mathcal{H}_{SB} = \hbar g_1 (b B^\dagger + b^\dagger B), \quad (66)$$

$$\mathcal{H}_{\text{ext}}(t) = -\hbar K(t) b^\dagger - \hbar K^*(t) b = - \sum_{\omega} \{ \hbar K(\omega) b^\dagger + \hbar K^*(-\omega) b \} e^{-i\omega t}. \quad (67)$$

ここで、 $b, b^\dagger$ は振動子のボーズ演算子、 $B, B^\dagger$ は熱浴の演算子で、 g_1 はその結合定数である。又、 $K(t)$ は外場に相当し、時間の c 数関数とする。T C L 方程式での 2 次摂動近似の範囲で、T C L E 法によるアドミッタンスは次のようになる [5][13]。

$$\chi_{bb^\dagger}(\omega) = \frac{i + Z(\omega)}{i(\omega_0 + \Psi' - \omega) + \Psi''}. \quad (68)$$

ここで、

$$\Psi(t) = (g_1^2/i) \int_0^t d\tau \langle [B^\dagger(\tau), B(0)] \rangle_B e^{-i\omega_0 \tau}; \quad \Psi = \Psi(\infty) = \Psi' + i\Psi'', \quad (69)$$

$$Z(\omega) = g_1^2 \int_0^\infty d\tau \langle [B(\tau), B^\dagger(0)] \rangle_B (e^{i\omega \tau} - e^{i\omega_0 \tau}) / (\omega - \omega_0). \quad (70)$$

$Z(\omega)$ は第二干渉項から出てくる項であり、このモデルでは第一干渉項はアドミッタンス $\chi_{bb^\dagger}(\omega)$ に寄与しない [13]。従って、振動子と熱浴の初期相関の効果は結果に現れなく、熱浴から盛り返す記憶効果だけが結果に現れる。緩和法によるアドミッタンスは次のようになる [5]。

$$\chi_{bb^\dagger}^{\text{rf}}(\omega) = i \int_0^\infty dt \exp\{i(\omega - \omega_0)t - i \int_0^t d\tau \Psi^*(\tau)\}. \quad (71)$$

熱浴が素早く減衰する (相関時間 $\tau_c \rightarrow 0$) 極限 (尖鋭化極限) [9] または系と熱浴の弱結合極限 (van Hove 極限) [10] においては、上のアドミッタンス $\chi_{bb^\dagger}^{\text{rf}}(\omega)$ は次のようになる。

$$\chi_{bb^\dagger}^{\text{rf}}(\omega) = i \int_0^\infty dt \exp\{i(\omega - \omega_0)t - i\Psi^*t\} = \frac{i}{i(\omega_0 + \Psi' - \omega) + \Psi''}. \quad (72)$$

熱浴を減衰が素早い部分系を含むボゾン型の熱浴として、その相関関数を次のように仮定する。

$$\langle B(t) B^\dagger(0) \rangle_B = \langle B B^\dagger \rangle_B \exp(-i\omega_B t - \gamma t), \quad (73)$$

$$\langle B^\dagger(0) B(t) \rangle_B = \langle B^\dagger B \rangle_B \exp(-i\omega_B t - \gamma t). \quad (74)$$

ω_B は熱浴の特性振動数、 γ は減衰定数で、いずれも実数で特に γ は正とする。数値的に比較するために、次のスケールされた次元のないパラメータを用いる。

$$\tilde{g}_1 = g_1/\omega_0, \quad \tilde{\gamma} = \gamma/\omega_0, \quad \tilde{\omega}_B = \omega_B/\omega_0. \quad (75)$$

TCL方程式上での摂動項のオーダーは、2つの方法とも $O(\tilde{g}_1^2 / \{(1 - \tilde{\omega}_B)^2 + \tilde{\gamma}^2\}^{1/2})$ である [5]。 $\tilde{g}_1 = 0.3$, $\tilde{\omega}_B = 0.5$ の場合について、上のアドミッタンス (68)(71)(72) を数値的に比較する。図 1 (a), (b) にはアドミッタンスの実部、図 2 (a), (b) にはアドミッタンスの虚部が、それぞれ、 $\tilde{\gamma} = 1.0, 0.6$ のとき示されている。このときの摂動項のオーダーは、 $\tilde{\gamma} = 1.0$ のとき $O(0.08)$ 、 $\tilde{\gamma} = 0.6$ のとき $O(0.115)$ である。いずれの図においても、共鳴領域で $\chi_{bb^\dagger}(\omega)$ および $\chi_{bb^\dagger}^r(\omega)$ が $\chi_{bb^\dagger}^{rf}(\omega)$ とずれているのは干渉項（このモデルでは第二干渉項）による効果であり、図から第二干渉項によって表される記憶効果は共鳴領域でライン・シェイプを高める効果を与えることがわかる。これは熱浴から盛り返す記憶効果によって、振動子系のエネルギー散逸が共鳴領域で増加するからである。更に図からわかることは、 $\chi_{bb^\dagger}(\omega)$ は $\chi_{bb^\dagger}^r(\omega)$ と、 $\tilde{\gamma} = 1.0$ のときは殆ど一致しているのに対して、 $\tilde{\gamma} = 0.6$ のときは僅かにずれている。これは、 $\chi_{bb^\dagger}(\omega)$ より $\chi_{bb^\dagger}^r(\omega)$ [(71)] に多く含まれる高次の項のためであり、摂動項のオーダーが約 $O(0.1)$ よりも小さいならば、TCLE法による $\chi_{bb^\dagger}(\omega)$ に含まれなくて、緩和法による $\chi_{bb^\dagger}^r(\omega)$ に含まれる高次の項は、結果に殆ど寄与しなく無視できることが図からわかる。これより、TCLE法の2次摂動近似の適用限界はTCL方程式上での摂動項のオーダーが約 $O(0.1)$ 以下である、とこのモデルから言える。

3.2 量子スピン ($S = 1/2$) の帯磁率

熱浴および外部磁場と相互作用している量子スピン S (大きさ $S = 1/2$) を考える。 z 方向の静磁場 H_0 中の量子スピン S のハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_S = -\hbar\omega_0 S_z, \quad (\omega_0 = \gamma H_0) \quad (76)$$

とおく (γ は磁気回転比)。熱浴は、スピン S に作用する局所場である B 系とその周囲の R 系とから成ると仮定する [14][15]。スピン S と B 系との相互作用を

$$\mathcal{H}_{SB} = -(\hbar g_1/2)(S_+ B_- + S_- B_+) - \hbar g_2 S_z B_z, \quad (77)$$

とおく ($S_\pm = S_x \pm iS_y$, $B_\pm = B_x \pm iB_y$)。ここで、 B は B 系のエルミート演算子で、 g_1, g_2 はスピン S と B 系との結合定数である。外場は z 方向の静磁場 H_0 と xy 面上での回転磁場 $H(t)$ (これを「外場」という)

$$\mathbf{H}(t) = (H \cos \omega t, -H \sin \omega t, 0), \quad (78)$$

とであり、スピン S と外場 $H(t)$ との相互作用は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{ext}}(t) &= -\hbar\gamma \mathbf{H}(t) \cdot \mathbf{S} = -(\hbar\gamma/2)[H_-(t)S_+ + H_+(t)S_-], \\ &= -(\hbar\gamma H/2)(S_+ e^{i\omega t} + S_- e^{-i\omega t}), \end{aligned} \quad (79)$$

となる。ここで、 $H_\pm(t) = H_x(t) \pm iH_y(t) = H \exp(\mp i\omega t)$ 。外場 $H(t)$ は初期時刻 $t = 0$ にかけるられるとし、スピン S と熱浴の初期状態としてデカップルさせた状態

$$\rho_T(0) = \rho(0) \rho_B, \quad [\rho(0) = \text{tr}_B f(\mathcal{H})] \quad (80)$$

を仮定する (ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は (1) で与えられる)。又、 $\langle B_+ \rangle_B = \langle B_- \rangle_B = 0$ を仮定して、ハミルトニアン (76) および (77) において、(13), (14) に相当する変換

$$\omega_0 \longrightarrow \tilde{\omega}_0 = \omega_0 + g_2 \langle B_z \rangle_B, \quad B_z \longrightarrow \tilde{B}_z = B_z - \langle B_z \rangle_B, \quad (81)$$

をし、これによって変換されたハミルトニアンを新たに、それぞれ、 $\mathcal{H}_S$, $\mathcal{H}_{SB}$ とする。このとき、 $\langle \mathcal{H}_{SB} \rangle_B = 0$ が成り立つ。

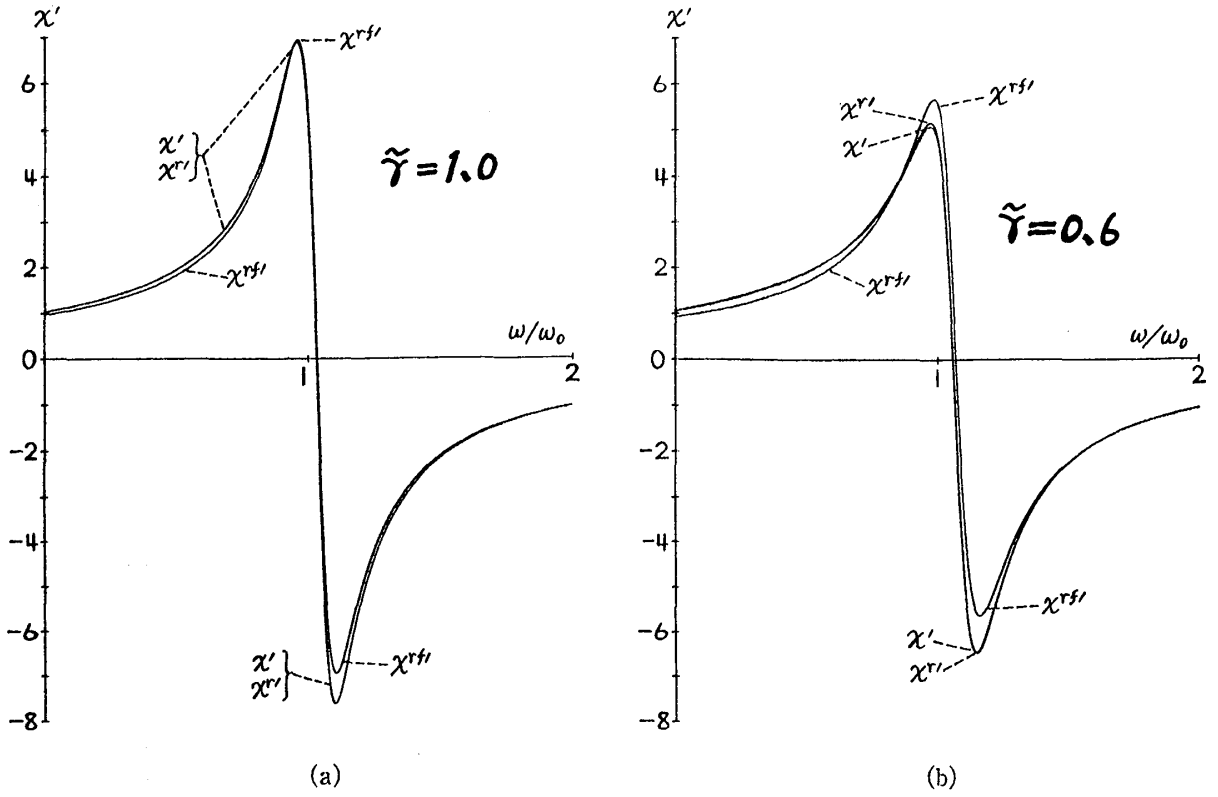


図 1 (a) $\tilde{\gamma} = 1.0$, $\tilde{g}_1 = 0.3$, $\tilde{\omega}_B = 0.5$ のときの実部 $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}(\omega)'$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^r(\omega)'$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^{rf}(\omega)'$ [5].
 (b) $\tilde{\gamma} = 0.6$, $\tilde{g}_1 = 0.3$, $\tilde{\omega}_B = 0.5$ のときの実部 $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}(\omega)'$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^r(\omega)'$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^{rf}(\omega)'$ [5].

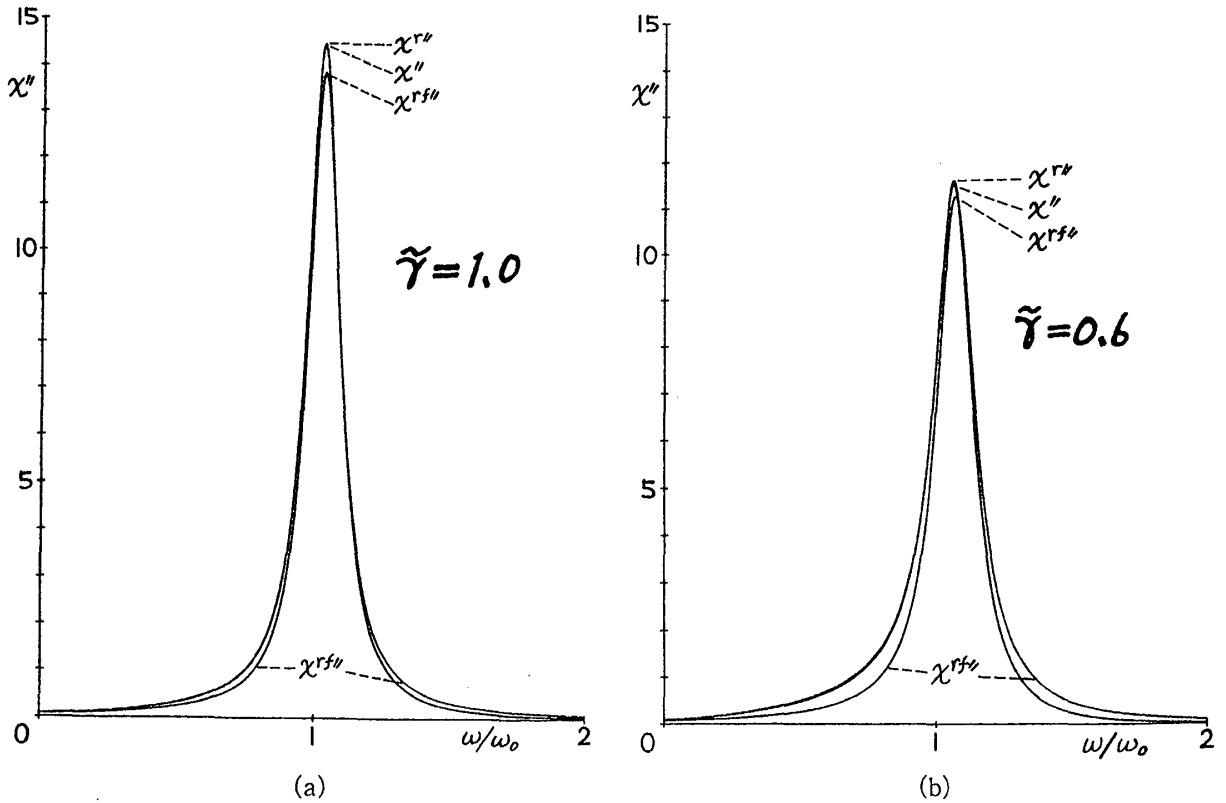


図 2 (a) $\tilde{\gamma} = 1.0$, $\tilde{g}_1 = 0.3$, $\tilde{\omega}_B = 0.5$ のときの虚部 $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}(\omega)''$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^r(\omega)''$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^{rf}(\omega)''$ [5].
 (b) $\tilde{\gamma} = 0.6$, $\tilde{g}_1 = 0.3$, $\tilde{\omega}_B = 0.5$ のときの虚部 $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}(\omega)''$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^r(\omega)''$, $\omega_0 \chi_{bb\uparrow}^{rf}(\omega)''$ [5].

TCLE法による横方向帯磁率 (transverse magnetic susceptibility) $\chi_{+-}(\omega)$ は、期待値 $\langle S_+ \rangle_t$ $[= \text{tr } S_+ \rho(t)]$ に対する T C L 方程式の $t \rightarrow \infty$ における解を

$$\langle S_+ \rangle_t = \langle S_+ \rangle_\omega e^{-i\omega t} = (1/2\hbar\gamma) \chi_{+-}(\omega) H e^{-i\omega t}, \quad (t \rightarrow \infty) \quad (82)$$

とおくことによって得られる (但し、初期値 $\langle S_+ \rangle_0 = 0$ とした)。結果は [14]

$$\chi_{+-}(\omega) = 2\hbar\gamma^2 \frac{i\langle S_z \rangle_0 + Z(\omega)}{i(\tilde{\omega}_0 - \omega) + \Phi}, \quad (83)$$

ここで、

$$\begin{aligned} Z(\omega) = & \frac{1}{2} \int_0^\infty d\tau \left\{ (g_1^2/4) \langle [B_+(\tau), B_-(0)] \rangle_B (e^{i\omega\tau} - e^{i\tilde{\omega}_0\tau}) \right. \\ & \left. + g_2^2 \left((1/2) \langle [\tilde{B}_z(\tau), \tilde{B}_z(0)] \rangle_B + \langle S_z \rangle_S \langle [\tilde{B}_z(\tau), \tilde{B}_z(0)] \rangle_+ \right) (e^{i(\omega - \tilde{\omega}_0)\tau} - 1) \right\} \\ & / (\omega - \tilde{\omega}_0), \end{aligned} \quad (84)$$

$$\Phi(t) = \Phi_{+-}(t) + (1/2) \Phi_{zz}(t); \quad \Phi = \Phi(\infty) = \Phi_{+-} + (1/2) \Phi_{zz}, \quad (85)$$

with

$$\Phi_{+-}(t) = (g_1^2/4) \int_0^t d\tau \langle [B_+(\tau), B_-(0)] \rangle_B e^{i\tilde{\omega}_0\tau}; \quad \Phi_{+-} = \Phi_{+-}(\infty), \quad (86)$$

$$\Phi_{zz}(t) = g_2^2 \int_0^t d\tau \langle [\tilde{B}_z(\tau), \tilde{B}_z(0)] \rangle_B; \quad \Phi_{zz} = \Phi_{zz}(\infty). \quad (87)$$

$Z(\omega)$ は第一および第二干渉項から出てくる項で、熱平衡初期条件 (4) のもとで得られたもの [16] と一致することが示される [14]。 $\langle S_z \rangle_S$ および $\langle S_z \rangle_0$ は $O(\mathcal{H}_{SB}^2)$ までで次のようになる [14][16]。

$$\langle S_z \rangle_S = \text{tr } S_z \rho_S = (1/2) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0 / 2), \quad (88)$$

$$\langle S_z \rangle_0 = \text{tr } S_z \rho(0) = (1/2) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0 / 2) + \beta^2 \hbar^2 (\psi_{+-} - \psi_{-+}) / \{4 \cosh^2(\beta \hbar \tilde{\omega}_0 / 2)\}, \quad (89)$$

上式の ρ_S , ψ_{+-} , ψ_{-+} は次のように定義される [14][16]。

$$\rho_S = \exp(-\beta \mathcal{H}_S) / \text{tr} \{ \exp(-\beta \mathcal{H}_S) \}, \quad (90)$$

$$\psi_{+-} = (g_1^2/4\beta^2) \int_0^\beta d\beta' (\beta - \beta') \langle B_-(-i\hbar\beta') B_+(0) \rangle_B e^{-\beta'\hbar\tilde{\omega}_0}, \quad (91)$$

$$\psi_{-+} = (g_1^2/4\beta^2) \int_0^\beta d\beta' (\beta - \beta') \langle B_+(-i\hbar\beta') B_-(0) \rangle_B e^{\beta'\hbar\tilde{\omega}_0}. \quad (92)$$

緩和法による横方向帯磁率 $\chi_{+-}^{\text{rf}}(\omega)$ を、文献 [7] のようにデカップルさせた初期条件で求めると、一般式 (22) における初期相関の効果を表す第二項がない結果が得られる。結果は初期条件 (80) のもとで次のようになる [14]。

$$\chi_{+-}^{\text{rf}}(\omega) = 2i\hbar\gamma^2 \langle S_z \rangle_0 \int_0^\infty dt \exp \left\{ i(\omega - \tilde{\omega}_0)t - \int_0^t d\tau \Phi(\tau) \right\}. \quad (93)$$

熱浴が素早く減衰する (相関時間 $\tau_c \rightarrow 0$) 極限 (尖鋭化極限) [9] または系と熱浴の弱結合極限 (van Hove 極限) [10] においては、上の帯磁率 $\chi_{+-}^{\text{rf}}(\omega)$ は次のようになる。

$$\chi_{+-}^{\text{rf}}(\omega) = 2i\hbar\gamma^2 \langle S_z \rangle_0 \int_0^\infty dt \exp \{ i(\omega - \tilde{\omega}_0)t - \Phi t \} = \frac{2i\hbar\gamma^2 \langle S_z \rangle_0}{i(\tilde{\omega}_0 - \omega) + \Phi}. \quad (94)$$

上の帯磁率 $\chi_{+-}^{\text{rf}}(\omega)$ は、TCL E法による帯磁率 $\chi_{+-}(\omega)$ [(83)] において干渉項 $Z(\omega)$ がないものと一致している。又、デカップルさせた初期条件で求めた緩和法による帯磁率 $\chi_{+-}^{\text{r}}(\omega)$ [(93)] は、記憶効果を表す干渉項の第二項は含むが、初期相関の効果を表す干渉項の第一項は含まないことが示される [14]。但し、干渉項 $Z(\omega)$ の式 (84) は第一項と第二項を合併して書かれており、ここで言う「第一項」「第二項」とは、文献 [14] における式 (2・15) [γH を除く] の第一項、第二項のことを言う。

(1) スピン型熱浴の場合

熱浴の B 系がスピン型 (量子スピン B ; 大きさ $B = 1/2$) で R 系の減衰が素早い場合を考える。B 系だけのハミルトニアン $\mathcal{H}_{B0}$ 、B 系と R 系との相互作用 $\mathcal{H}_{BR}$ を、次のようにとる。

$$\mathcal{H}_{B0} = -\hbar \tilde{\omega}_{B0} \tilde{B}_z, \quad (\tilde{\omega}_{B0} = \omega_{B0} + g_{R2} \langle R_z \rangle_R) \quad (95)$$

$$\mathcal{H}_{BR} = -(\hbar g_{R1}/2)(B_+ R_- + B_- R_+) - \hbar g_{R2} \tilde{B}_z \tilde{R}_z. \quad (\tilde{R}_z = R_z - \langle R_z \rangle_R) \quad (96)$$

ここで、 R は R 系のエルミート演算子 ($R_{\pm} = R_x \pm iR_y$)、 g_{R1} , g_{R2} は B 系と R 系との結合定数、 $\langle \cdots \rangle_R = \text{tr}_R(\cdots \rho_R)$ [ρ_R は R 系の密度演算子]。R 系の減衰が素早い場合、B 系の相関関数は次の形になる [6][14]。

$$\langle B_+(t) B_-(0) \rangle_B = \langle B_+ B_- \rangle_B \exp(-i\omega_B t - \gamma_1 t), \quad [\gamma_1 = 1/\tau_{c1}] \quad (97)$$

$$\langle B_-(0) B_+(t) \rangle_B = \langle B_- B_+ \rangle_B \exp(-i\omega_B t - \gamma_1 t), \quad (98)$$

$$\langle \tilde{B}_z(t) \tilde{B}_z(0) \rangle_B = \langle \tilde{B}_z(0) \tilde{B}_z(t) \rangle_B = \langle \tilde{B}_z^2 \rangle_B \exp(-\gamma_2 t), \quad [\gamma_2 = 1/\tau_{c2}] \quad (99)$$

with

$$\omega_B = \tilde{\omega}_{B0} + \Phi_R'', \quad \gamma_1 = \Phi_R', \quad \gamma_2 = 2\Phi_{R+-}', \quad (100)$$

$$\Phi_{R+-} = \frac{g_{R1}^2}{4} \int_0^\infty d\tau \langle [R_+(\tau), R_-(0)]_+ \rangle_R e^{i\tilde{\omega}_{B0}\tau}, \quad (101)$$

$$\Phi_R = \Phi_{R+-} + \frac{g_{R2}^2}{2} \int_0^\infty d\tau \langle [\tilde{R}_z(\tau), \tilde{R}_z(0)]_+ \rangle_R. \quad (102)$$

γ_1, γ_2 は B 系の減衰定数 (τ_{c1}, τ_{c2} は B 系の相関時間) である。 $\langle B_+ B_- \rangle_B$, $\langle B_- B_+ \rangle_B$, $\langle \tilde{B}_z^2 \rangle_B$ は

$$\langle B_+ B_- \rangle_B = \text{tr}_B B_+ B_- \rho_B = (1/2) \{1 + \tanh(\beta \hbar \omega_B / 2)\} + O(g_{R1}^2, g_{R2}^2), \quad (103)$$

$$\langle B_- B_+ \rangle_B = \text{tr}_B B_- B_+ \rho_B = (1/2) \{1 - \tanh(\beta \hbar \omega_B / 2)\} + O(g_{R1}^2, g_{R2}^2), \quad (104)$$

$$\langle \tilde{B}_z^2 \rangle_B = \langle B_z^2 \rangle_B - \langle B_z \rangle_B^2 = (1/4) \{1 - \tanh^2(\beta \hbar \omega_B / 2)\} + O(g_{R1}^2, g_{R2}^2). \quad (105)$$

と与えられる。このとき、 $\Phi_{+-}(t)$ と $\Phi_{zz}(t)$ は、(86), (87) より次のようになる。

$$\Phi_{+-}(t) = \frac{g_1^2 \langle [B_+, B_-]_+ \rangle_B}{4(\gamma_1 - i(\tilde{\omega}_0 - \omega_B))} \{1 - \exp(-\gamma_1 t + i(\tilde{\omega}_0 - \omega_B)t)\}, \quad (106)$$

$$\Phi_{zz}(t) = (2g_2^2 \langle \tilde{B}_z^2 \rangle_B / \gamma_2) \{1 - \exp(-\gamma_2 t)\}. \quad (107)$$

数値的に比較するために、次のスケールされた次元のないパラメーターを用いる。

$$\tilde{g}_i = g_i / \omega_0, \quad \tilde{\gamma}_i = \gamma_i / \omega_0, \quad (i = 1, 2) \quad (108)$$

$$\tilde{\omega}_B = \omega_B / \omega_0, \quad \tilde{\beta} = \beta \hbar \omega_0 = \hbar \omega_0 / (k_B T). \quad (109)$$

$\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\omega}_B = 0.1$, $\tilde{\beta} = 2$ の場合について、帯磁率 (83)(93)(94) の実部を図 3 に、 $\chi_{+-}(\omega)''/\omega$, $\chi_{+-}^{\text{r}}(\omega)''/\omega$ によって定義されるパワー・スペクトル [17] を図 4 に示す。

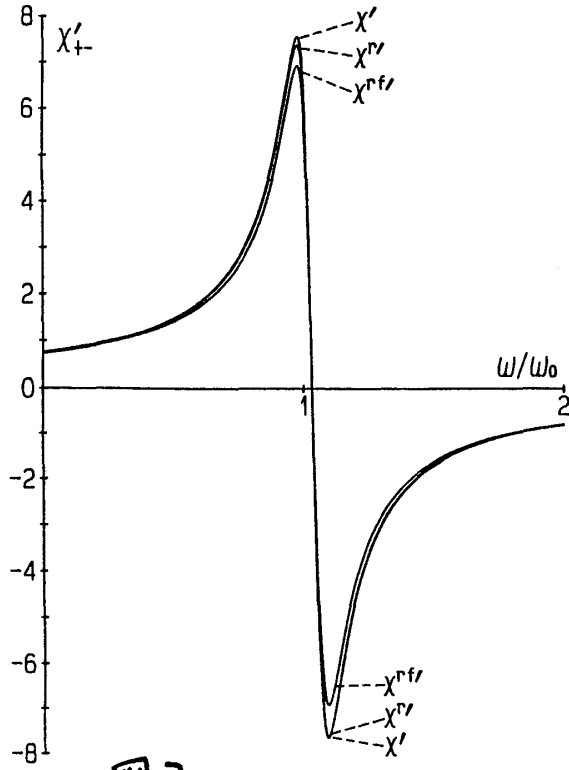


図3

図3 実部 $\omega_0 \chi_{+-}(\omega)/\hbar\gamma^2$, $\omega_0 \chi_{+-}^{(rf)}(\omega)/\hbar\gamma^2$; [$\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\omega}_B = 0.1$, $\tilde{\beta} = 2$] [11].

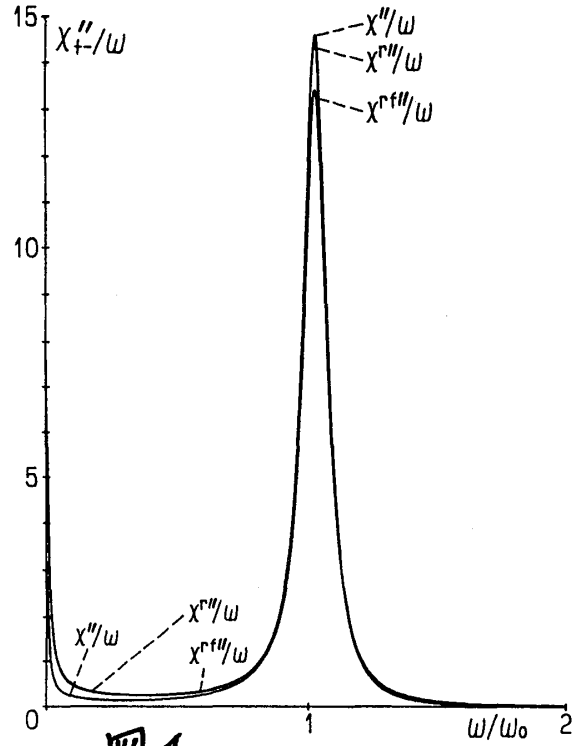


図4

図4 パワー・スペクトル $\omega_0^2 \chi_{+-}(\omega)/\hbar\gamma^2\omega$, $\omega_0^2 \chi_{+-}^{(rf)}(\omega)/\hbar\gamma^2\omega$; [$\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\omega}_B = 0.1$, $\tilde{\beta} = 2$] [11].

図3および図4において、 $\chi_{+-}(\omega)'$, $\chi_{+-}(\omega)''/\omega$ からの、それぞれ $\chi_{+-}^{rf}(\omega)'$, $\chi_{+-}^{rf}(\omega)''/\omega$ のずれは、初期相関の効果を表す第一干渉項によるもので、図から第一干渉項は、小さい振動数の領域 ($0 < \omega/\omega_0 \lesssim 0.5$) でパワー・スペクトルのライン形を低め (abase)、共鳴領域で帯磁率の実部およびパワー・スペクトルのライン形のピークを僅かに高める (enhance) 効果を生じることがわかる。又、 $\chi_{+-}^{rf}(\omega)'$, $\chi_{+-}^{rf}(\omega)''/\omega$ からの、それぞれ $\chi_{+-}^{rf'}(\omega)'$, $\chi_{+-}^{rf'}(\omega)''/\omega$ のずれは、記憶効果を表す第二干渉項によるもので、図から第二干渉項は、共鳴領域で帯磁率の実部およびパワー・スペクトルのライン形のピークを高める効果を生じることがわかる。第一および第二干渉項による共鳴領域でのライン形のピークの高まり (enhancement) は、ピークの高さの約 1/10 で無視できない。又、第一干渉項による、パワー・スペクトル・ラインの小さい振動数領域での下がり (abatement) は、その領域でのライン形の高さの約 1/2 で、やはり無視できない。このように、第一および第二干渉項は無視できない効果を生じることがわかる。

(2) ボゾン型熱浴の場合

次に、熱浴のB系がボゾン型でR系の減衰が素早い場合を考える [15]。B系のボーズ演算子を $B, B^\dagger$ として、B系の演算子 B に対して次の置換をする。

$$B_- \rightarrow B, \quad B_+ \rightarrow B^\dagger, \quad B_z \rightarrow B^\dagger B. \quad (110)$$

B系だけのハミルトニアン $\mathcal{H}_{B0}$, B系とR系との相互作用 $\mathcal{H}_{BR}$ を、次のようにとる。

$$\mathcal{H}_{B0} = \hbar\omega_{B0} \widetilde{B^\dagger B}, \quad \mathcal{H}_{BR} = \hbar g_R (B^\dagger R + BR^\dagger). \quad (111)$$

ここで、 $R, R^\dagger$ はR系の演算子で、 g_R はB系とR系との結合定数とする。R系の減衰が素早い場合、B系の相関関数は次の形になる [15]。

$$\langle B^\dagger(t) B(0) \rangle_B = \langle B^\dagger B \rangle_B \exp(i\omega_B t - \gamma_1 t), \quad (112)$$

$$\langle B(0) B^\dagger(t) \rangle_B = \langle B B^\dagger \rangle_B \exp(i\omega_B t - \gamma_1 t), \quad (113)$$

$$\langle \widetilde{B^\dagger B}(t) \widetilde{B^\dagger B}(0) \rangle_B = \langle \widetilde{B^\dagger B}(0) \widetilde{B^\dagger B}(t) \rangle_B = \langle \widetilde{B^\dagger B} \widetilde{B^\dagger B} \rangle_B \exp(-\gamma_2 t), \quad (114)$$

with

$$\omega_B = \omega_{B0} + \Psi'_R, \quad \gamma_1 = \tau_{c1}^{-1} = \Psi''_R, \quad \gamma_2 = \tau_{c2}^{-1} = 2\Psi''_R, \quad (115)$$

$$\Psi_R = -i g_R^2 \int_0^\infty d\tau \langle [R^\dagger(\tau), R(0)] \rangle_R e^{-i\omega_{B0}\tau} = \Psi'_R + i\Psi''_R. \quad (116)$$

$\langle B^\dagger B \rangle_B, \langle B B^\dagger \rangle_B, \langle \widetilde{B^\dagger B} \widetilde{B^\dagger B} \rangle_B$ は

$$\langle B^\dagger B \rangle_B = \text{tr}_B B^\dagger B \rho_B = 1 / \{ \exp(\beta \hbar \omega_B) - 1 \} + O(g_R^2), \quad (117)$$

$$\langle B B^\dagger \rangle_B = \text{tr}_B B B^\dagger \rho_B = \exp(\beta \hbar \omega_B) / \{ \exp(\beta \hbar \omega_B) - 1 \} + O(g_R^2), \quad (118)$$

$$\langle \widetilde{B^\dagger B} \widetilde{B^\dagger B} \rangle_B = \langle B^\dagger B B^\dagger B \rangle_B - \langle B^\dagger B \rangle_B^2 = \exp(\beta \hbar \omega_B) / \{ \exp(\beta \hbar \omega_B) - 1 \}^2 + O(g_R^2). \quad (119)$$

と与えられる。(84), (85), (89) で与えられる $Z(\omega), \Phi(t), \langle S_z \rangle_0$ は置換 (110) をして上の相関関数を用いることによって計算される [15]。数値計算のパラメーターは、(108), (109) で定義されるパラメーターを用いる。 $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1, \tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5, \tilde{\omega}_B = 0.3, \tilde{\beta} = 1$ の場合について、帯磁率 (83), (93), (94) の実部を図 5 に、 $\chi_{+-}(\omega)''/\omega, \chi_{+-}^{(rf)}(\omega)''/\omega$ によって定義されるパワー・スペクトル [17] を図 6 に示す。

図 5 および図 6 から、 $\chi_{+-}(\omega)', \chi_{+-}(\omega)''/\omega$ からの、それぞれ $\chi_{+-}^{(f)}(\omega)', \chi_{+-}^{(f)}(\omega)''/\omega$ のずれをもたらす、第一干渉項によって表される初期相関の効果は、スピン型熱浴の場合のように、小さい振動数の領域 ($0 < \omega/\omega_0 \lesssim 0.5$) でパワー・スペクトルのライン形を低め (abase)、共鳴領域で帯磁率の実部およびパワー・スペクトルのライン形のピークを僅かに高める (enhance) 効果を生じることがわかる。又、図から $\chi_{+-}^{(f)}(\omega)', \chi_{+-}^{(f)}(\omega)''/\omega$ からの、それぞれ $\chi_{+-}^{(f)}(\omega)', \chi_{+-}^{(f)}(\omega)''/\omega$ のずれをもたらす、第二干渉項によって表される記憶効果は、スピン型熱浴の場合のように共鳴領域で帯磁率の実部およびパワー・スペクトルのライン形のピークを高める効果を生じる他に、小さい振動数の領域でパワー・スペクトルのライン形を低める効果も生じることがわかる。第一および第二干渉項による共鳴領域でのライン形のピークの高まり (enhancement) は、ピークの高さの約 1/8 であり、パワー・スペクトル・ラインの小さい振動数領域での下がり (abatement) は、その領域でのライン形の高さの約 3/5 で、いずれも無視できない。このように、第一および第二干渉項はスピン型熱浴の場合と同様に、無視できない効果を生じることがわかる。

3.3 干渉項の効果

前節で議論した量子スピンについて、第一干渉項および第二干渉項の効果の大きさについて議論する。(84) で与えられた干渉項 $Z(\omega)$ を、第一干渉項 $Z_1(\omega)$, 第二干渉項 $Z_2(\omega)$ によって

$$Z(\omega) = Z_1(\omega) + Z_2(\omega), \quad (120)$$

と分けて書く。

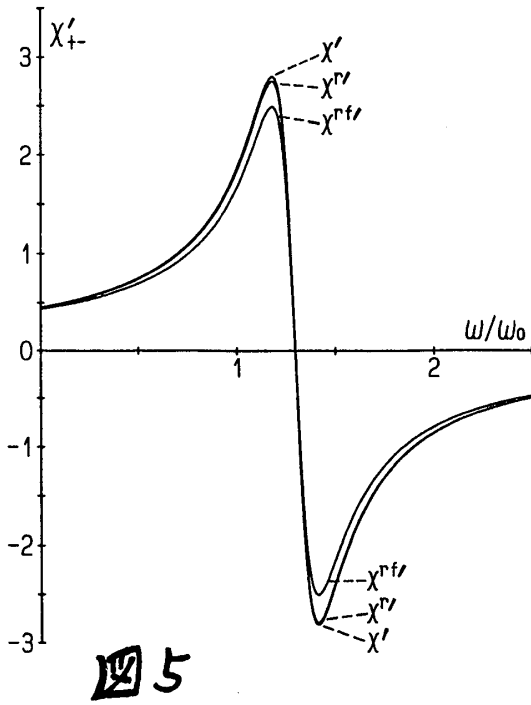


図5

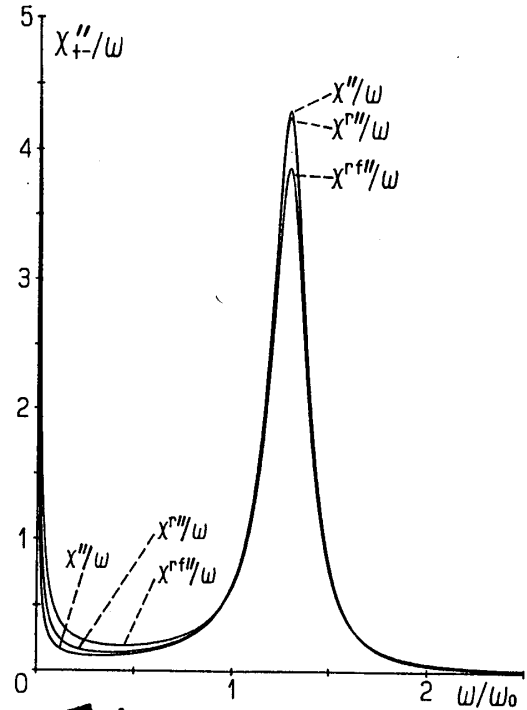


図6

 図5 実部 $\omega_0 \chi_{+-}(\omega)/\hbar\gamma^2$, $\omega_0 \chi_{+-}^{(rf)}(\omega)/\hbar\gamma^2$; [$\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\omega}_B = 0.3$, $\tilde{\beta} = 1$] [15].

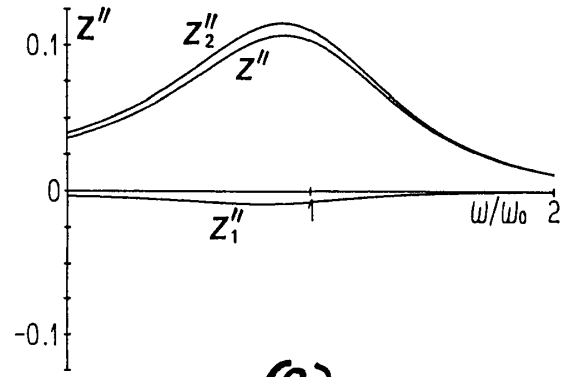
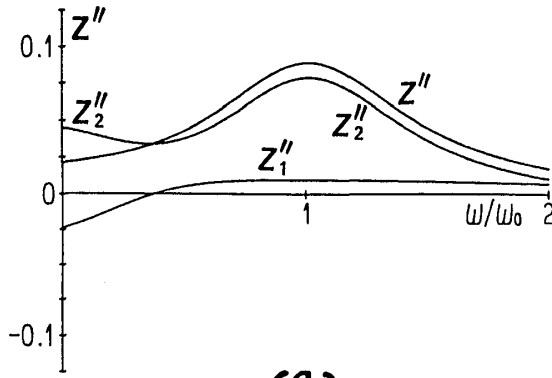
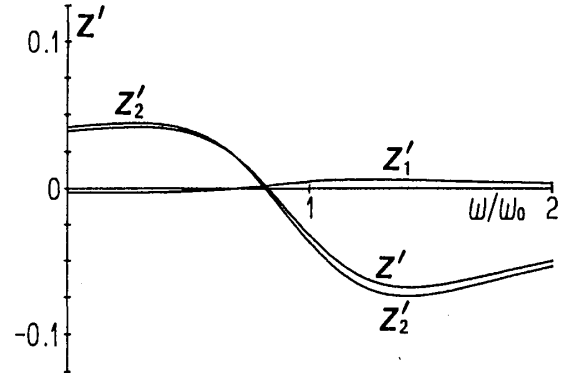
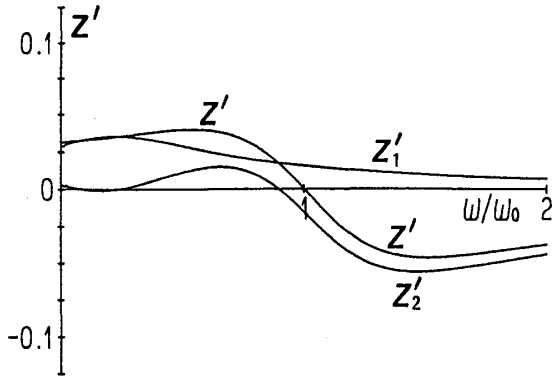
 図6 パワー・スペクトル $\omega_0^2 \chi_{+-}(\omega)/\hbar\gamma^2\omega$, $\omega_0^2 \chi_{+-}^{(rf)}(\omega)/\hbar\gamma^2\omega$; [$\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\omega}_B = 0.3$, $\tilde{\beta} = 1$] [15].

スピン型熱浴の場合、第一干渉項 $Z_1(\omega)$ 、第二干渉項 $Z_2(\omega)$ は、次のようになる [11]。

$$Z_1(\omega) = (g_1^2/8) [\tanh(\beta \hbar \omega_B/2) - \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2)] \\ \times \frac{-\gamma_1(\omega - \omega_B + \tilde{\omega}_0 - \omega_B) + i[\gamma_1^2 - (\omega - \omega_B)(\tilde{\omega}_0 - \omega_B)]}{[\gamma_1^2 + (\omega - \omega_B)^2][\gamma_1^2 + (\tilde{\omega}_0 - \omega_B)^2]}, \quad (121)$$

$$Z_2(\omega) = (g_1^2/8) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2) \frac{-\gamma_1(\omega - \omega_B + \tilde{\omega}_0 - \omega_B) + i[\gamma_1^2 - (\omega - \omega_B)(\tilde{\omega}_0 - \omega_B)]}{[\gamma_1^2 + (\omega - \omega_B)^2][\gamma_1^2 + (\tilde{\omega}_0 - \omega_B)^2]} \\ + (g_2^2/8) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2) [1 - \tanh^2(\beta \hbar \omega_B/2)] \frac{-(\omega - \tilde{\omega}_0) + i\gamma_2}{\gamma_2 [\gamma_2^2 + (\omega - \tilde{\omega}_0)^2]}. \quad (122)$$

初期相関の効果を表す第一干渉項 $Z_1(\omega)$ は、高温極限 ($\beta \rightarrow 0$) か、熱浴の減衰が素早い極限 ($\gamma_1 = \tau_{c1}^{-1} \rightarrow \infty$) において、又は $\omega_B = \tilde{\omega}_0$ のときに、0 になる (vanish)。特に、高温極限 ($\beta \rightarrow 0$) 又は熱浴の減衰が素早い極限 ($\gamma_1 = \tau_{c1}^{-1} \rightarrow \infty$, $\gamma_2 = \tau_{c2}^{-1} \rightarrow \infty$) においては、記憶効果を表す第二干渉項 $Z_2(\omega)$ も 0 になり、従って干渉項 $Z(\omega)$ は 0 になる。この極限を除いては、干渉項 $Z(\omega)$ は一般に 0 にならない。 $\langle S_z \rangle_0$ に対する $Z(\omega)$, $Z_i(\omega)$ [$i = 1, 2$] の実部と虚部の比の値を、 $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 2$ の場合について数値計算する (数値計算のパラメーターは (108), (109) で定義されるパラメーターを用いる)。 $\tilde{\omega}_B = 0.1, 0.5, 0.9$ の各場合について数値計算した結果を、それぞれ、図 7 (a), (b), (c) に示す。図から第一干渉項の効果は、熱浴の特性振動数 $\tilde{\omega}_B$ が大きいと小さいが、 $\tilde{\omega}_B$ が小さくなる程大きくなり、特に小さい振動数の領域での効果が大きいことがわかる。又、 $\tilde{\omega}_B$ が大きくなると第二干渉項の虚部の効果が大きくなることもわかる。



(a)

(c)

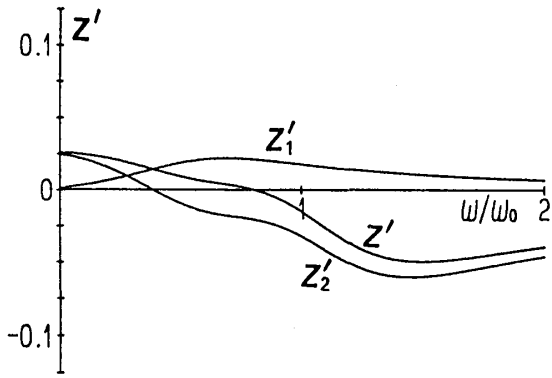


図 7 (a) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.1$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 2$]
[11].

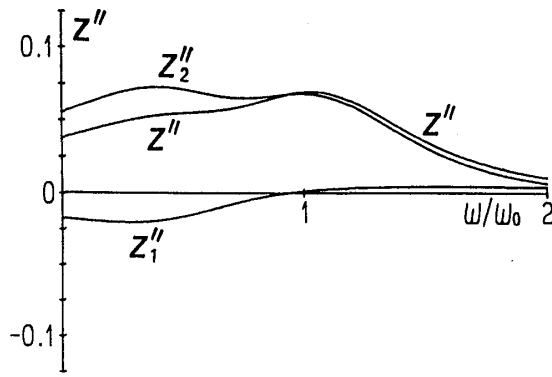


図 7 (b) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.5$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 2$]
[11].

図 7 (c) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.9$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.3$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 2$]
[11].

(b)

ボゾン型熱浴の場合、第一干渉項 $Z_1(\omega)$ 、第二干渉項 $Z_2(\omega)$ は、次のようになる [11]。

$$Z_1(\omega) = - (g_1^2/8) [1 + \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2) \cdot \coth(\beta \hbar \omega_B/2)] \\ \times \frac{-\gamma_1(\omega + \omega_B + \tilde{\omega}_0 + \omega_B) + i[\gamma_1^2 - (\omega + \omega_B)(\tilde{\omega}_0 + \omega_B)]}{[\gamma_1^2 + (\omega + \omega_B)^2][\gamma_1^2 + (\tilde{\omega}_0 + \omega_B)^2]}, \quad (123)$$

$$Z_2(\omega) = (g_2^2/8) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2) \cdot \coth(\beta \hbar \omega_B/2) \\ \times \frac{-\gamma_1(\omega + \omega_B + \tilde{\omega}_0 + \omega_B) + i[\gamma_1^2 - (\omega + \omega_B)(\tilde{\omega}_0 + \omega_B)]}{[\gamma_1^2 + (\omega + \omega_B)^2][\gamma_1^2 + (\tilde{\omega}_0 + \omega_B)^2]} \\ + (g_2^2/2) \tanh(\beta \hbar \tilde{\omega}_0/2) \frac{\exp(\beta \hbar \omega_B)}{[\exp(\beta \hbar \omega_B) - 1]^2} \cdot \frac{-(\omega - \tilde{\omega}_0) + i\gamma_2}{\gamma_2[\gamma_2^2 + (\omega - \tilde{\omega}_0)^2]}. \quad (124)$$

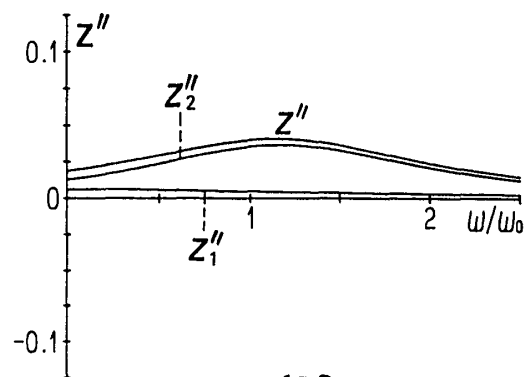
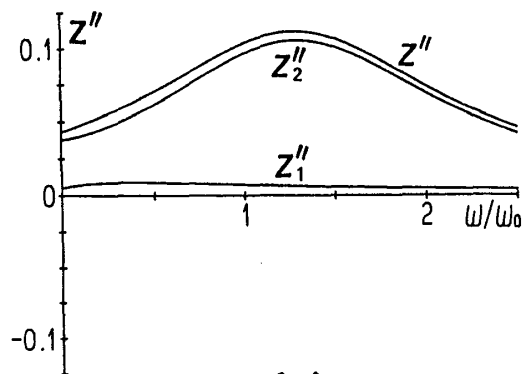
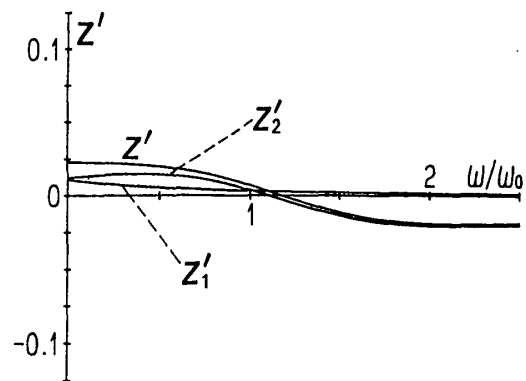
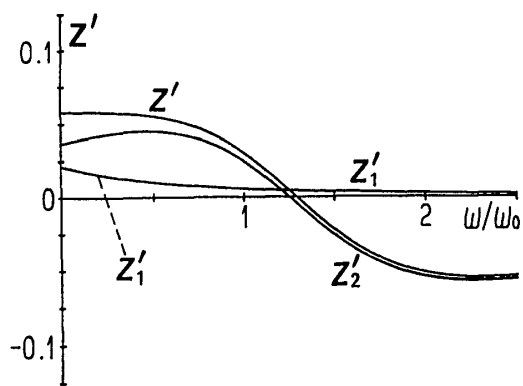
初期相関の効果を表す第一干渉項 $Z_1(\omega)$ は、熱浴の減衰が素早い極限 ($\gamma_1 = \tau_{c1}^{-1} \rightarrow \infty$) において 0 になる (vanish)。特に、熱浴の減衰が素早い極限 ($\gamma_1 = \tau_{c1}^{-1} \rightarrow \infty$, $\gamma_2 = \tau_{c2}^{-1} \rightarrow \infty$) においては、記憶効果を表す第二干渉項 $Z_2(\omega)$ も 0 になり、従って干渉項 $Z(\omega)$ は 0 になる。この極限を除いては、干渉項 $Z(\omega)$ は一般に 0 にならない。このボゾン型熱浴の場合、スピン型熱浴の場合と異なって、高温極限 ($\beta \rightarrow 0$) においても第一および第二干渉項 従って干渉項は一般に 0 にならない。 $\langle S_z \rangle_0$ に対する $Z(\omega)$, $Z_i(\omega)$ [$i = 1, 2$] の実部と虚部の比の値を、 $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 1$ の場合について数値計算する (数値計算のパラメーターは (108), (109) で定義されるパラメーターを用いる)。 $\tilde{\omega}_B = 0.3, 0.4, 0.5$ の各場合について数値計算した結果を、それぞれ、図 8 (a), (b), (c) に示す。図から第一干渉項の効果は、スピン型熱浴の場合と同様に、熱浴の特性振動数 $\tilde{\omega}_B$ が大きいと小さく、 $\tilde{\omega}_B$ が小さくなる程大きくなり、特に小さい振動数の領域での効果が大きいことがわかる。小さい振動数の領域では、第一干渉項の実部が第二干渉項の実部よりも大きくなる場合もある [11]。又、図から $\tilde{\omega}_B$ が大きくなると、第一および第二干渉項 従って干渉項の実部および虚部の効果が小さくなることもわかる。

4 むすび

緩和法と TCLE 法の関係を考察したが、最後に二つの方法の特徴 (利点) について述べておく。

- (1) 緩和法は、そのアドミッタンス (16) が厳密に計算できるならば全く問題ないわけで、考えている系が簡単な系で、系と熱浴の相互作用について高次まで計算できる場合に有用な方法である。その場合、初期相関の効果を表す (16) の第二項も計算しなければならない。なぜなら、第 3 節で数値的に考察したように初期相関は一般的に必ずしも無視できないからである。高次まで計算できないときは、TCL 方程式において 2 次摂動近似した形 (22) を計算しなければならない。
- (2) TCLE 法は、考えている系が複雑な系か多体系で、緩和法のアドミッタンス (16) も (22) も計算できない場合に有用な方法であると思われる。2 次摂動近似での TCLE 法によるアドミッタンス (56) は、第 3.1 節で考察したように TCL 方程式上で摂動項の大きさのオーダーが約 $O(0.1)$ 以下ならばよく、多体系ならば殆どの系で満たしていると思われる。初期相関の効果と記憶効果を表す干渉項をアドミッタンスに組み込んで計算するようにすればよいと思われる。

筆者は、第 3.2 節の熱浴と相互作用している量子スピンの模型で、R 系の減衰定数が有限で、B 系が R 系から受ける相互作用が乱雑な摂動によって与えられる場合を考え、量子スピンの横方向帯磁率を TCLE 法によって計算した [14][15]。これは熱浴が少し複雑な場合で、TCLE 法では容易に計算できるが、緩和法では容易に計算できない例である。



(a)

(c)

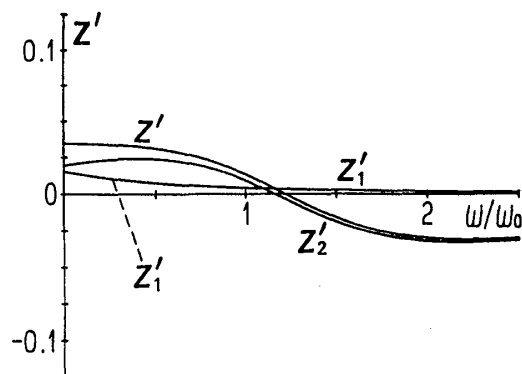


図 8 (a) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と 虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.3$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 1$]
[11].

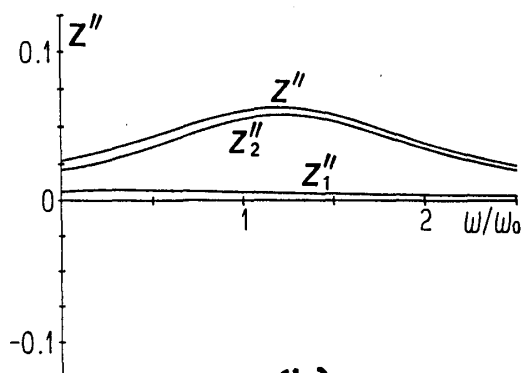


図 8 (b) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と 虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.4$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 1$]
[11].

図 8 (c) 実部 $Z'(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z'_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
と 虚部 $Z''(\omega)/\langle S_z \rangle_0$, $Z''_i(\omega)/\langle S_z \rangle_0$ ($i = 1, 2$)
[$\tilde{\omega}_B = 0.5$, $\tilde{g}_1 = \tilde{g}_2 = 0.1$, $\tilde{\gamma}_1 = \tilde{\gamma}_2/2 = 0.5$, $\tilde{\beta} = 1$]
[11].

(b)

今後の問題として、TCLE法を多体系や複雑な系に適用する問題がある。もし緩和法で2次摂動近似したアドミッタンス (22) が第二項も含めて計算できるならば、緩和法はよりよい問題となる。又、(16)(22)(56) は熱浴を explicit に含むアドミッタンスの一般形であるが、これらはTFDの表示やc数表示で表すことも可能である。これを用いて久保理論 [1] に相当する線形応答理論を論ずることも興味のある問題である。

引用文献

- [1] R. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- [2] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **67** (1982) 1313.
- [3] M. Saeki: J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1846.
- [4] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **79** (1988) 396.
- [5] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **89** (1993) 607.
- [6] F. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn. **49** (1980) 15.
M. Asou and F. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1981) 1846, 2481.
- [7] Y. Hamano and F. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 1727, 2721, 2728.
- [8] T. Arimitsu and H. Umezawa: Prog. Theor. Phys. **74** (1985) 429.
T. Arimitsu and H. Umezawa: Prog. Theor. Phys. **77** (1987) 32, 53.
- [9] R. Kubo: *Tokei Butsurigaku, Statistical Physics*, ed. M. Toda and R. Kubo (Iwanami, Tokyo, 1978) 2nd ed., Chap. 6 [in Japanese].
- [10] L. van Hove: Physica **23** (1957) 441.
- [11] M. Saeki: J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 3831.
- [12] N. Hashitsume, F. Shibata and M. Shingu, J. Stat. Phys. **17** (1977) 155.
- [13] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 615.
- [14] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **98** (1997) 1025.
- [15] M. Saeki: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 1327.
- [16] M. Saeki: Prog. Theor. Phys. **77** (1987) 262.
- [17] R. Kubo and K. Tomita: J. Phys. Soc. Jpn. **9** (1954) 888.