

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\mathcal{W}}(t) = \hat{K}(t) \hat{\mathcal{W}}(t) + I(t) \quad (2)$$

(2)は(1)とは全く異質の方程式であるのだが、(2)の導出は(1)の発見以後実に二十数年を要している。 $\hat{K}(t)$ の構造も解明されていて g の巾で展開すると “ordered cumulant” というもので書けてしまう。

(1)も(2)も厳密であるから実際の物理系に応用する場合、厳密に計算ができるものであるならば両者は同じ答を与える。けれどもそういうことが可能であるのは稀有であるから、実際上の応用で有益なガイドが欲しい。簡単なモデルで調べてみると次の事が分る：

(1)は物理量を支配する(確率)過程が2状態遷移モデルの如き場合に g の低次でよい近似を与える。

(2)は逆の極限、即ちガウス過程のように多くの実現値が可能なものに対して g の低次近似がよい結果を与える。

物理現象として “ガウシアン” はしばしば登場するので(2)の有用性が分るであろう。

さらに g の摂動の各次数で(2)は時間変化をも含めて正しい結果を与えるが、(1)の扱いはよほど注意を要する。(1)で正しい結果を得るには一度解かねばならないので、これは手間のかかることである。

(2)の式は Kubo, van Kampen のキュムラント法とも関係している。

最近(2)を系統的に用いていくつかの問題を扱っている。たとえば次の講演のテーマであるスピンの緩和現象、フレンケル励起子、多原子分子中の位相乱雑化の問題、レーザー理論等である。

文献として方法論は

F. Shibata and T. Arimitsu: J. Phys. Soc. Jpn. 49 (1980) 891.

をあげておく。歴史的な経過もある程度書かれているし他の必要な文献は孫引きして下さればよい。

実際の問題への適用は '79~'82の J. Phys. Soc. Jpn. に幾つかの論文が出ている。

スピン緩和理論の諸問題

—コリンハ関係式の拡張など—

東大・教養 浜野洋子
お茶の水大・理 柴田文明

我々は実験や観測では自然界の中の一部のみの情報を得るのが普通である。そこでここでは、

見ている系の緩和過程を記述するのに、周囲の環境を粗視化した Brown 運動としてとらえる一般的方法を与えることにする。

モデルとしてスピン緩和をとるのは、通常の実験解析に用いられる基礎方程式である Bloch 方程式に不満足な点があるからである。それは例えば横成分は次の形を持つ。

$$\langle \dot{S}_+ \rangle_t = i \omega_0 \langle S_+ \rangle_t - \frac{1}{T_2} \langle S_+ \rangle_t \quad (1)$$

この方程式は、(i)現象論であり具体的な T_1, T_2 の評価、特に温度変化が出ない；(ii)線形緩和の式であり平衡近傍でのみ成立することが予測される；(iii)尖鋭化の極限下の式である；(iv)高温 ($\hbar \omega_0 / k T \ll 1$) で有効；等の問題を孕む。以上の点は完全に微視的な理論に依って曖昧さ無く解決されるものであろう。其の為に最も単純なモデル計算を試みる。

A, B, R という 3 つの系を考える。A が今注目している大きさ J のスピン S 、B は大きさ $1/2$ のスピン Z 個から成り、A と相互作用している。R は特に指定しないが、常に温度 T の熱平衡にある系で B と相互作用している。A-B-R という 3 つの系で考えるのは、実際にこういう機構が多い為であって、もっと単純な A-R というシステムに対する応用例は一般論の後にこの報告の最後に言及する。

全系の密度行列に対する Liouville 方程式から出発して、減衰理論を用いて R と B を段階的に消去する。その際 Time-Convolutionless な摂動展開を用いることによって、A 系のみの密度行列に対して尖鋭化の極限をとらない基本式が得られる。それからモーメントの運動方程式を求めると、

$$\langle \dot{S}_+ \rangle_t = \left\{ i \tilde{\omega}_0 - \frac{1}{T_2(x, t)} \right\} \langle S_+ \rangle_t + \frac{\tanh x}{2 T_1(x, t)} \langle \{ S_z, S_+ \} \rangle_t, \quad x = \hbar \omega_0 / k T \quad (2)$$

となる。(1)式との違いは、(i)非マルコフ効果を取り入れた事に因って、“緩和時間”が時間に依存する；(ii)方程式は非線形であり、 $\tanh x \cdot T_2(\infty)/T_1(\infty)$ という量が非線形性の大きさを決めている；(iii)方程式が温度を含んでいて、緩和の温度変化が議論できる；等であり、(iv)尖鋭化の極限、高温近似で(1)と一致する。

(2)式が与えられると、通常は平衡近傍を仮定して decoupling 等を行なって線形化してしまっただけなのであるが、ここではコヒーレント表示を用いて C-数空間に移り、更に分布関数を球面調和関数で展開する。そうすると、解くべき方程式は有限個の線型連立微分方程式と成るので厳密に解くことができる。その結果、緩和は一般には $2J$ 個の減衰関数の重ね合わせで書ける多時間緩和過程となり、その全貌が、温度、 J 、初期条件を用いて完全に表わされる。

モーメントの緩和が求まると応答関数が求まる。応答関数にしてしまうと、久保公式の精神から考えればこれは平衡近傍の定常応答であり、実際数値計算による結果は線形緩和を示唆している。応答関数からはスペクトルが求まる。高温ではスペクトルの形は J には依らない。低温では J 依存性が見られるが、 $J = 2$ までの計算の結果は J がもっと大きい場合も類推できる様な簡単な形をしている。更に温度変化を調べるとそれは、B系、R系の統計性や相互作用の強さに依存していて、温度上昇と共にスペクトルの形や線巾は様々に変化する。逆に言えば、スペクトルの温度変化が分かれば、緩和機構を知る事も可能である。

以上で緩和を扱う枠組を得たので、是れを金属内の核スピンの伝導電子による緩和、という問題に適用してみた。此の問題に対しては T_1 が絶対温度 T に比例するという Korringa の関係式が知られているが、高温展開を用いない我々の定式化によって、正確にはスピン $1/2$ の核スピンの緩和に対して

$$T_1 \propto \tanh(\hbar\omega_0/kT) \quad (3)$$

が得られ、スピンの大きさが1より大きい非線形緩和に対しては、一番長い緩和時間が温度の関数として $\hbar\omega_0 \sim kT$ 近傍で極大値を持つという現象が見出された。

詳細は以下の文献を見て載きたい。

Y. Hamano and F. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 1727, 2085, 2717, 2728 (1982).

F. Shibata and Y. Hamano: Solid State Comm., to be published; J. Phys. Soc. Jpn., to be submitted.

電気複屈折で観測される非線形、動力学過程

秋田大・教育 森田昭雄

東大・教養 渡辺 啓

電気屈折は外部電場によって誘起される光学的異方性を光を用い観測する。座標系 $O_{x'y'z'}$ を分子に固定しもう一個の座標系 O_{xyz} を空間に固定する。 $\mathbf{A}$ を $O_{x'y'z'}$ 系から O_{xyz} 系に対する変換とすれば $\mathbf{m} = \mathbf{A}\mathbf{m}'$, $\mathbf{E} = \mathbf{A}\mathbf{E}'$ が成立する。ここで $\mathbf{m}$, $\mathbf{m}'$ 及び $\mathbf{E}$, $\mathbf{E}'$ はそれぞれ O_{xyz} 及び $O_{x'y'z'}$ 系における誘起双極子モーメント、外部電場である。また $\boldsymbol{\mu}'$ を分子の永久双極子モーメント、 $\boldsymbol{\alpha}'$ を分子の分極率テンソルとすれば $\mathbf{m}' = \boldsymbol{\mu}' + \boldsymbol{\alpha}'\mathbf{E}'$ である。従って、 $\mathbf{m} = \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}$ と書くと、 $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{A}\boldsymbol{\mu}'$, $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}'\mathbf{A}^{-1}$ である。今電場 $\mathbf{E} = E\mathbf{k}$ を z 軸に沿って加え、光を yz 平