

スピنبゾンモデルの非指数緩和

金沢大学理学部 高須昌子

1 はじめに

スピنبゾンモデルの性質に関しては既に文献 [1, 2] で報告したが、ここでは実験との対応を考える。液体中の電子移動については様々な実験が行なわれているが、Nagasawa ら [3] の蛍光スペクトルの測定によると、溶媒を変えることにより、指数緩和と非指数緩和が得られ、指数緩和の場合は速度定数の温度依存性は見られず、非指数緩和の場合は、温度が高くなると速度が大きくなった。このような実験を簡単なスピنبゾンモデル [4, 5, 6, 1, 2] で定性的に説明する。

2 方法

次のようなハミルトニアンを考える

$$H = H_0 + H_B + H_{int} \quad (1)$$

ここで H_0 はスピンのハミルトニアン、 $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & J \\ J & 0 \end{pmatrix}$, H_B はボゾンのハミルトニアン、 H_{int} は相互作用である。スペクトル関数は次のような形をとる。

$$J(\omega) = \eta \omega^s \exp(-\omega/\omega_c) \quad (2)$$

ここで $s = 1$ の場合を Ohmic と呼び、 $s > 1$, $s < 1$ の場合をそれぞれ super-Ohmic, sub-Ohmic と呼んでいる [4]。ここでは3節は $s = 1$ の場合であり、4節では $s \neq 1$ の場合を考える。

3 速度定数の温度依存性

スピنبゾンモデルの緩和を計算すると、振動解が得られるコーヒーレント相と単調減少しているインコヒーレント相とに分けられる。このインコヒーレント相において、図 1 のように緩和は指数緩和になる場合と非指数緩和になる場合があることがわかる。

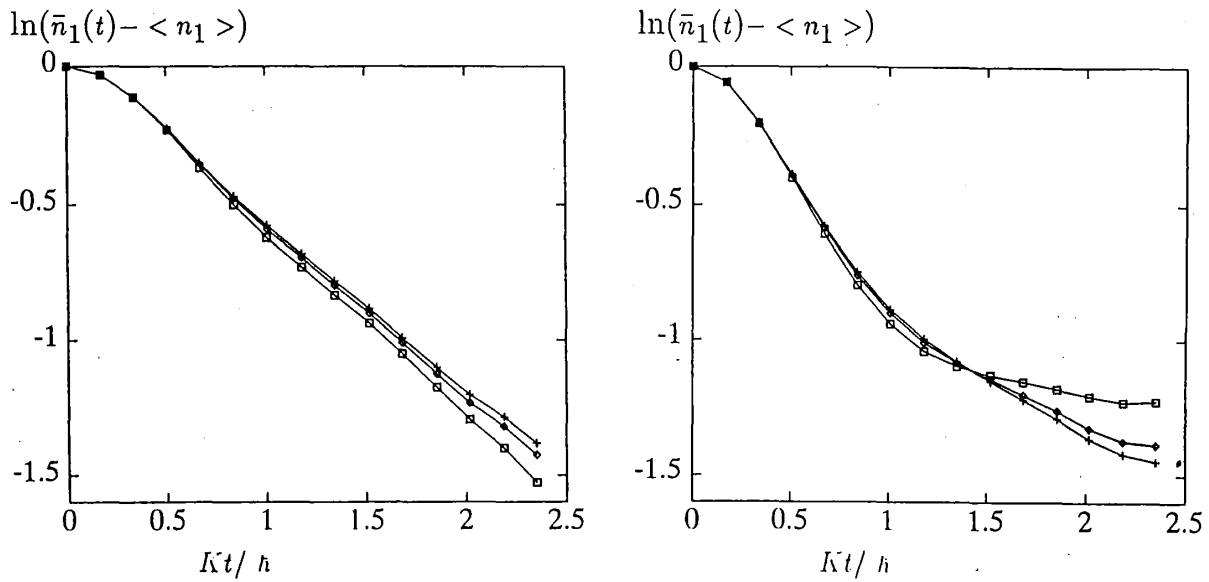


図1 $E_1/J = 4$ (a), $E_1/J = 0$ (b) の場合の緩和の様相。 $\hbar\omega_c/J = 2.5$, $\eta/\hbar = 1.2506$
 $\beta J = 1$ (+), 1.2 (◇), 2 (□).

ここで、非指数緩和になる場合は、インコヒーレント相の中でも、コヒーレント相に近い領域であり、元の状態に戻るメカニズムが働いた結果、非指数緩和になると考えられる。

速度定数を温度の関数としてプロットすると図2のようになる。

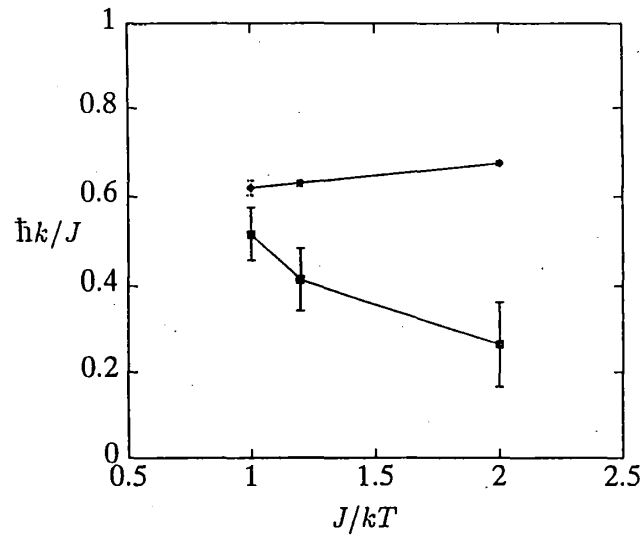


図2 速度定数の温度依存性。 $\hbar\omega_c/J = 2.5$, $\eta/\hbar = 1.2506$ $E_1/J = 4$ (◇), $E_1/J = 0$ (□).

非指数的緩和の場合、温度を上げると、速度定数が大きくなるという傾向は実験と一致している。指数的緩和の場合、温度を上げると速度定数は小さくなるが、実験では温度依存性は見られておらず、この点は一致していない。一般に実験で速度定数を測る時、指数関数形を仮定することが多いが、実際には非指数的になる場合もあり、関数形をまず確かめる必要がある。

4 non-Ohmic な場合の緩和

Leggett らの non-interacting blip 近似 [4] によると、sub-Ohmic な場合 ($0 < s < 1$) は、 $T > 0$ で指数的緩和になり、 $s > 2$ の場合には振動的な緩和になることが予想されている。両方の場合に結果を見ると図 3 のように、コヒーレントな振舞いとインコヒーレントな振舞いの両方が得られることがわかる。これは Leggett らの結果と異なっている。

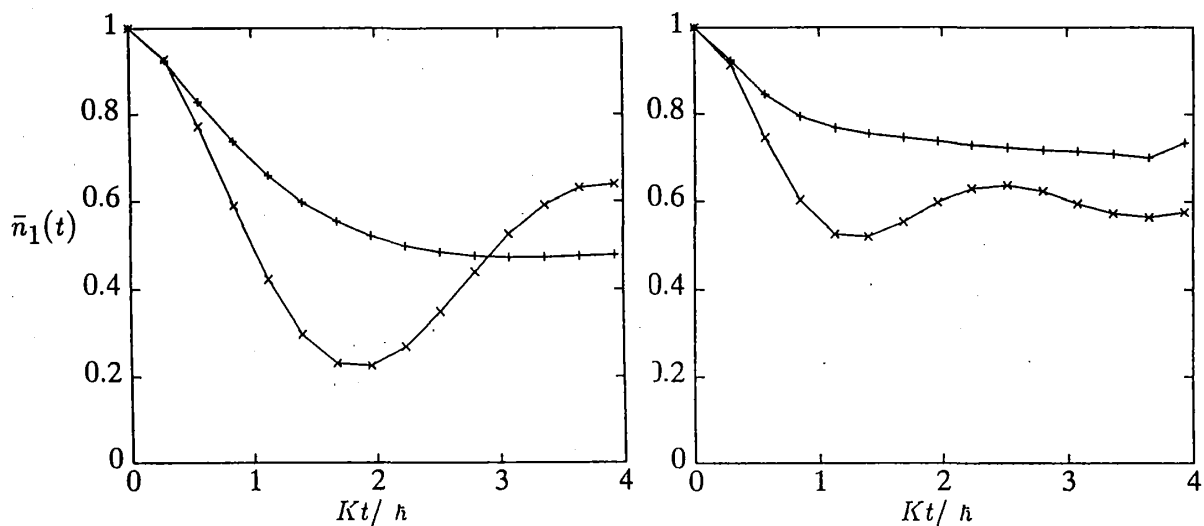


図 3 スペクトル関数を変えた時の緩和 $s = 3$ (a), $s = 0.5$ (b). $\beta = 0.4$, $\eta = 0.7(+)$, $0.2(x)$.

5 最後に

以上スピノボゾンモデルを用いて電子移動の計算を行なったが、このモデルの弱点は、線形のカップリングの場合を扱っている点である。また、方法はここで用いた以外にも filter を用いる方法 [6] などが考案されており、今後の発展が期待される。

References

- [1] M. Takasu, to be published in Phys. Rev. E (1995).
- [2] M. Takasu, D. Chandler, in Computer Aided Innovation of New Materials II, ed. by M. Doyama et al. Elsevier Science Publishers (1993) 375.
- [3] Y. Nagasawa, A. P. Yartsev, K. Tominaga, A. E. Johnson, K. Yoshihara, J. Chem. Phys. **101** (1994) 5717.
- [4] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg, W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **59**, 1 (1987).
- [5] C. H. Mak, D. Chandler, Phys. Rev. A **41**, 5709 (1990); C. H. Mak, D. Chandler, Phys. Rev. A **44**, 2352 (1991); C. H. Mak, Phys. Rev. Lett. **68**, 899 (1992).
- [6] R. Egger, C. H. Mak, Phys. Rev. B **50**, 15210 (1994).