核磁気緩和率と動的磁化率の関係

永井佑紀

平成 21 年 3 月 19 日

NMR の実験でよく測られる $1/T_1$ がどのような量なのか、について。参考文献の該当箇所をまとめた。超伝導状態における $1/T_1$ の解釈について理解を深めようというのが目的である 1 。

1 スピン格子緩和における緩和率と遷移確率の関係

1.1 核磁気共鳴

まず最初に、核スピンだけの系を考えてみる。この系に静磁場 H_0 をかけると、ゼーマン相互作用:

$$H_n = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{H}_0 \tag{1}$$

が生じる。ここで、 γ は gyromagnetic ratio「磁気回転比」である。もしこの静磁場がz方向であれば

$$H_n = -\gamma \hbar H_0 I_z \tag{2}$$

となる。ゼーマン相互作用のハミルトニアンが無い場合、この系の固有値は I_z の固有値に対応して

$$E = -\gamma \hbar H_0 m \tag{3}$$

$$m = I, I - 1, \cdots, -I \tag{4}$$

という幅 $\Delta E = \gamma \hbar H_0$ の離散化したエネルギーになる。

静磁場のかかったこの系に、エネルギー $\hbar\omega_0$ の電磁波を x 方向に照射する。この電磁波のエネルギーが

$$\hbar\omega_0 = \Delta E \tag{5}$$

となる ω_0 のとき、核スピン系はエネルギーを吸収(放出)し、準位が m から $m\pm 1$ に変化する。この核スピンによるエネルギーの吸収を核磁気共鳴吸収と言う。

1.2 核スピン - 格子系の緩和

次に、先ほど考えた核スピンの系の他に「格子」系(電子など)が存在し、スピン系と格子系でエネルギーのやり取りがある場合を考える。格子系の粒子は常に温度 T の熱平衡状態にあるとする。核スピン系の温度を T_s とすると 2 、核スピン系が熱平衡状態になったとき、 $T_s=T$ である。簡単のため I=1/2 の系を考える。このとき、m=+1/2 と m=-1/2 の準位の占有数をそれぞれ N_+^s 、 N_-^s とする。格子系の i 番目の準位の占有数を N_i 、i 番目の準位よりもエネルギーが $\hbar\omega_0$ 高い準位 i' の占有数を $N_{i'}$ とする。

 $^{^{-1}}$ 実際に測定しているわけではないので、間違っている可能性がある。正確な理解のためには参考文献を参照することを強く推奨する。 2 スピン温度が定義できないような非平衡状態もあるが、ここではスピン温度が定義できる程度にゆっくりとした変化のみを考えることにする。

熱平衡時のスピン系の磁化を M_0 とする。何らかの理由でスピン系の磁化が M_0 からずれたとき、どのように M_0 に緩和するのかを考える。スピン系と格子系がエネルギーを交換する確率を $U_{ii'}$ とし、 $U_{ii'}=U_{i'i}=U_i$ であ れば、 N_+^s と N_-^s の時間発展は

$$\frac{dN_{+}^{s}}{dt} = N_{-}^{s}W_{\downarrow} - N_{+}^{s}W_{\uparrow}
\frac{dN_{-}^{s}}{dt} = N_{+}^{s}W_{\uparrow} - N_{-}^{s}W_{\downarrow}
W_{\downarrow} \equiv \sum_{i} N_{i}U_{i}$$
(6)
$$(7)$$

$$\frac{dN_{-}^{s}}{dt} = N_{+}^{s}W_{\uparrow} - N_{-}^{s}W_{\downarrow} \tag{7}$$

$$W_{\downarrow} \equiv \sum_{i} N_{i} U_{i} \tag{8}$$

$$W_{\uparrow} \equiv \sum_{i}^{i} N_{i'} U_{i} \tag{9}$$

と書くことができる。したがって、占有数の差 $n^s \equiv N_+^s - N_-^s$ の時間発展は

$$\frac{dn^s}{dt} = 2(N_-^s W_{\downarrow} - N_+^s W_{\uparrow}) \tag{10}$$

と書ける。定常状態では $dn^s/dt=0$ なので、

$$0 = 2\sum_{i} (N_{-}^{s(0)} N_{i} - N_{+}^{s(0)} N_{i'}) U_{i}$$

$$\tag{11}$$

$$\frac{N_{-}^{s(0)}}{N_{+}^{s(0)}} = \frac{\sum_{i} N_{i'}}{\sum_{i} N_{i}} \tag{12}$$

$$= \frac{\sum_{i} e^{-\hbar\omega_0/k_{\rm B}T} N_i}{\sum_{i} N_i}$$

$$= e^{-\hbar\omega_0/k_{\rm B}T}$$
(13)

$$= e^{-\hbar\omega_0/k_{\rm B}T} \tag{14}$$

となる。これは、熱平衡状態では $T=T_s$ であることを意味している。また、

$$W_{\uparrow} = e^{-\hbar\omega_0/k_{\rm B}T}W_{\downarrow} \tag{15}$$

である。

式 (10) は $N^s=N_+^s+N_-^s$ を用いると

$$\frac{dn^s}{dt} = 2(\frac{1}{2}(N^s - n^s)W_{\downarrow} - \frac{1}{2}(N^s + n^s)W_{\uparrow})$$
(16)

$$= N^{s}(W_{\downarrow} - W_{\uparrow}) - n^{s}(W_{\downarrow} + W_{\uparrow}) \tag{17}$$

$$= \frac{n_0^s - n^s}{T_1} \tag{18}$$

である。ここで、

$$n_0^s \equiv N^s \left(\frac{W_{\downarrow} - W_{\uparrow}}{W_{\downarrow} + W_{\uparrow}} \right) \tag{19}$$

$$\frac{1}{T_1} \equiv W_{\downarrow} + W_{\uparrow} \tag{20}$$

と定義した。もし、 $\hbar\omega_0/k_{\rm B}T\ll 1$ であれば、

$$W_{\downarrow} - W_{\uparrow} \sim \left(1 - \left(1 - \frac{\hbar\omega_0}{k_{\rm B}T}\right)\right)W_{\downarrow}$$
 (21)

$$= \frac{\hbar\omega_0}{k_{\rm B}T}W_{\downarrow} \tag{22}$$

$$W_{\downarrow} + W_{\uparrow} \sim \left(1 + \left(1 - \frac{\hbar\omega_0}{k_{\rm B}T}\right)\right)W_{\downarrow}$$
 (23)

$$\sim 2W_{\parallel}$$
 (24)

$$\sim 2W_{\downarrow} \tag{24}$$

$$n_0^s \sim \frac{N^s}{2} \frac{\hbar \omega_0}{k_{\rm B} T} W_{\downarrow} \tag{25}$$

$$\frac{1}{T_1} \sim 2W_{\downarrow}$$
 (26)

となる。

式 (18) の解は

$$n = n_0^s + Ae^{-t/T_1} (27)$$

である 3 。式 (18) から、定常状態 $dn^s/dt=0$ のときの解は $n^s=n_0^s$ であることがわかる。磁化 M_z は占有数の差 で定義でき、 $M_z \equiv \gamma \hbar(n^s/2)$ であるから、磁化に関しても

$$M_z = M_0 + Ae^{-t/T_1} (28)$$

という関係式がある。この関係式は、「なんらかの摂動で生じた磁化 M_z は、指数関数的に熱平衡値 M_0 に近づく」 ということを意味しており、この式の特徴的な時間スケール T_1 をスピンー格子緩和率(いわゆる核磁気緩和率) と呼ぶ。

1.3 電子系の緩和率の一般的表示

核磁気緩和率 $1/T_1$ は式 (20) によって遷移確率と関連づけられている。核スピン系と電子系をあわせた系を考 える。系のハミルトニアンを

$$H = H_e + H_n + H_{int} \tag{29}$$

とする。 H_e は電子系のハミルトニアンであり、 H_n は核スピンと外場 $m{H}$ によるゼーマン相互作用:

$$H_e = -\gamma \hbar \mathbf{I} \cdot \mathbf{H} \tag{30}$$

であり、 H_{int} は核スピンと電子系の相互作用 (hyperfine coupling: 超微細相互作用):

$$H_{int} = -\gamma \hbar \mathbf{I} \cdot \mathbf{h} \tag{31}$$

である。ここで、核スピンの磁気モーメント μ が

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \hbar \boldsymbol{I} \tag{32}$$

であり、磁場 H でのゼーマン相互作用が

$$H_0 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{H} \tag{33}$$

であることを用いた⁴。h は電子系が核スピンに与える磁場である。

hyperfine coupling が無ければ、核スピンの状態と電子系の状態は独立に指定できて 5 、

$$|I\rangle = |i, I_z\rangle \tag{34}$$

³A は積分定数

⁴最初の節の静磁場の系と同じ。

⁵核スピンには最初の節の静磁場がかかっており、電子系は別のハミルトニアンで記述され、間に相互作用が無いため。

と書ける。ここで、i は電子系 H_e の厳密な多体固有状態であり、 I_z は核スピンである。 H_{int} を H_e+H_n に対する摂動として考える。始状態をエネルギー ϵ_I を持つ状態 $|I\rangle$ 、終状態をエネルギー ϵ_F を持つ状態 $|F\rangle$ としたとき、摂動 H_{int} による遷移確率 $w_{|I\rangle\to|F\rangle}$ はフェルミの黄金律により

$$w_{|I\rangle \to |F\rangle} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle I|H_{int}|F\rangle|^2 \tag{35}$$

と書ける。

遷移確率 W_{\uparrow} は、核スピン系が m=1/2 から m=-1/2 に遷移し、電子系が i から f に遷移する確率なので、

$$|I\rangle = |i, +1/2\rangle \tag{36}$$

$$|F\rangle = |f, -1/2\rangle \tag{37}$$

となり、全系のエネルギーは

$$\epsilon_i = E_i + \frac{\hbar\omega_0}{2} \tag{38}$$

$$\epsilon_f = E_f - \frac{\hbar\omega_0}{2} \tag{39}$$

となる。ここで、電子系の状態 l のエネルギーを E_l と定義した。

このとき、遷移確率 W_{\uparrow} は、

$$W_{\uparrow} = \sum_{i} \rho_{e,i} \sum_{f} w_{|I\rangle \to |F\rangle} \tag{40}$$

である。ここで、 ρ_e は電子のハミルトニアンの密度行列

$$\rho_e = \frac{e^{-\beta H_e}}{\text{Tr } e^{-\beta H_e}} \tag{41}$$

であり、 ρ_i はその対角成分 (i,i) である。つまり、式 (40) は $w_{|I\rangle \to |F\rangle}$ の電子系の熱力学平均を取っていることに対応する。さらに、

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{h} = I_x h_x + I_y h_x + I_z h_z = \frac{1}{2} (I_+ h_- + I_- h_+) + I_z h_z$$
(42)

と書け 6 、 $w_{|I
angle o |F
angle}$ に寄与する項は I_+h_- しかないことを考えると、遷移確率 W_\uparrow は、

$$W_{\uparrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} \rho_{e,i} |\langle -1/2|\hbar \gamma I_{+}/2|1/2\rangle|^{2} |\langle i|h_{-}|f\rangle|^{2} \delta(E_{i} - E_{f} - \hbar\omega_{0})$$

$$(43)$$

$$= \frac{\pi\hbar\gamma^2}{2} \sum_{i,f} \rho_{e,i} |\langle i|h_-|f\rangle|^2 \delta(E_i - E_f - \hbar\omega_0)$$
(44)

と書くことができる。

この遷移確率をさらに計算していく。デルタ関数 $\delta(E_i-E_f-\hbar\omega_0)$ はフーリエ変換すると

$$\delta(E_i - E_f - \hbar\omega_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} e^{i(E_i - E_f - \hbar\omega_0)t/\hbar}$$
(45)

となるので、

$$W_{\uparrow} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{2\pi\hbar} \frac{\pi\hbar\gamma^2}{2} \sum_{i,f} \rho_{e,i} |\langle i|h_-|f\rangle|^2 e^{i(E_i - E_f - \hbar\omega_0)t/\hbar}$$
(46)

$$= \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega_0 t} \sum_{i,f} \rho_{e,i} |\langle i|h_-|f\rangle|^2 e^{i(E_i - E_f)/\hbar}$$

$$\tag{47}$$

 $^{^{6}}I_{+}=I_{x}\pm iI_{yo}$

が得られ、

$$\sum_{f} |\langle i|h_{-}|f\rangle|^{2} e^{i(E_{i}-E_{f})t/\hbar} = \sum_{f} \langle i|e^{iE_{i}t/\hbar}h_{-}e^{-iE_{f}t/\hbar}|f\rangle\langle f|h_{-}^{\dagger}|i\rangle$$
(48)

$$= \sum_{f} \langle i|e^{iH_{e}t/\hbar}h_{-}e^{-iH_{e}t/\hbar}|f\rangle\langle f|h_{+}|i\rangle$$
 (49)

$$= \langle i|e^{iH_et/\hbar}h_-e^{-iH_e/\hbar}h_+|i\rangle \tag{50}$$

$$= \langle i|h_{-}(t)h_{+}(0)|i\rangle \tag{51}$$

を用いると7、

$$W_{\uparrow} = \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega_0 t} \sum_{i} \rho_{e,i} \langle i | h_{-}(t) h_{+}(0) | i \rangle$$
 (52)

$$= \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega_0 t} \operatorname{Tr} \left(\rho_{e,i} h_-(t) h_+(0) \right)$$
 (53)

$$= \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega_0 t} \langle h_-(t)h_+(0) \rangle \tag{54}$$

が得られる。ここで、最後の⟨・・・⟩は電子系の熱力学平均である。

もう一つの遷移確率 W_{\parallel} は、始状態と終状態が

$$|I\rangle = |i, -1/2\rangle \tag{55}$$

$$|F\rangle = |f, +1/2\rangle \tag{56}$$

であり、全系のエネルギーは

$$\epsilon_i = E_i - \frac{\hbar\omega_0}{2} \tag{57}$$

$$\epsilon_f = E_f + \frac{\hbar\omega_0}{2} \tag{58}$$

なので

$$W_{\downarrow} = \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_+(t)h_-(0) \rangle$$
 (59)

になる。

最後に、核磁気緩和率 $1/T_1$ を求める。そのために、

$$W_{\uparrow} = -\frac{\gamma^2}{4} \int_{\infty}^{-\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(-t)h_+(0) \rangle$$
 (60)

$$= \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(0)h_+(t) \rangle \tag{61}$$

と変形すると8、

$$\frac{1}{T_1} = \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle (h_-(0)h_+(t) + h_+(t)h_-(0)) \rangle$$
 (62)

$$= \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle \{h_+(t), h_-(0)\} \rangle$$
 (63)

が得られる。

 $^{^{7}}h_{-}^{\dagger}=h_{+}$ である。

⁸時間に対して並進対称性が存在するため。

1.4 第二量子化による表現

得られた核磁気緩和率を第二量子化によって表現する。まず、第二量子化の手続きをおさらいする。ある場所 x での状態密度 $\rho(x)$ は

$$\rho(x) = \sum_{i} \delta(x - x_i) \tag{64}$$

と書ける。ここで i は粒子のインデックス。このとき、第二量子化した状態密度の演算子 $\hat{\rho}(x)$ は、場の演算子 $\hat{\psi}(x)$ を用いて

$$\hat{\rho}(x) = \sum_{\alpha,\beta} \int dx' \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(x) \delta(x - x') \hat{\psi}_{\beta}(x')$$
(65)

$$= \sum_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\alpha}(x) \tag{66}$$

と書ける。

式 (63) に出てくる h_+ は、核スピンが感じる電子スピンによる磁場である。 したがって、ある場所 x の核スピンが感じる電子スピンの磁場 h は、

$$\boldsymbol{h} = A\boldsymbol{S}(x) \tag{67}$$

と書ける。ここで、接触型の相互作用を仮定した。故に、核磁気緩和率 $1/T_1$ を第二量子化の表示で書く為には、 $S_l(l=x,y,z)$ を第二量子化の表示で書ければよい。ある場所 x のスピン密度 $S_l(x)$ は

$$S_l(x) = \sum_i \sigma_l \delta(x - x') \tag{68}$$

なので、場の演算子を用いると

$$\hat{S}_{l}(x) = \sum_{\alpha,\beta} \int dx' \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(x) \sigma_{l} \delta(x - x') \hat{\psi}_{\beta}(x')$$
(69)

$$= \sum_{\alpha,\beta} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(x) \sigma_l \hat{\psi}_{\alpha}(x) \tag{70}$$

となる。l=x のときは、 $\alpha=\uparrow$ かつ $\beta=\downarrow$ か、 $\alpha=\downarrow$ かつ $\beta=\uparrow$ なので、

$$\hat{S}_x(x) = \sum_{\alpha,\beta} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger}(x) \sigma_x \hat{\psi}_{\alpha}(x)$$
 (71)

$$= \frac{\hbar}{2} (\hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\downarrow}(x) + \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\uparrow}(x)) \tag{72}$$

である。故に、 S_+ のときは、 $\alpha = \uparrow$ かつ $\beta = \downarrow$ のときのみであり、

$$\hat{S}_{+}(x) = \hbar \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\downarrow}(x) \tag{73}$$

が得られる。

1.5 摇動散逸定理

最後に、揺動散逸定理を用いて、式 (63) と動的磁化率を関連づける。この節以降、 $\hbar=k_{\rm B}=1$ とする。熱平衡状態における二つの演算子 A と B の積の平均を

$$\langle A(t)B(0)\rangle = \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}} \operatorname{Tr} \left(e^{-\beta H} e^{iHt} A(0) e^{-iHt} B(0) \right)$$
(74)

$$= \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}} \operatorname{Tr} \left(B(0)e^{-\beta H}e^{iHt}A(0)e^{-iHt} \right)$$
 (75)

$$= \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}} \operatorname{Tr} \left(e^{\beta H} e^{-\beta H} B(0) e^{-\beta H} e^{iHt} A(0) e^{-iHt} \right)$$
 (76)

$$= \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}} \operatorname{Tr} \left(e^{-\beta H} B(0) e^{-\beta H} e^{iHt} A(0) e^{-iHt} e^{\beta H} \right)$$
(77)

と変形すると9、

$$\langle A(t)B(0)\rangle = \langle B(0)A(t+i\beta)\rangle \tag{78}$$

という恒等式が成立していることがわかる10。

この恒等式を用いると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_+(t)h_-(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(0)h_+(t+i\beta) \rangle$$
 (79)

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega_0(t'-i\beta)} \langle h_-(0)h_+(t')\rangle \tag{80}$$

$$= e^{\beta\omega_0} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(0)h_+(t) \rangle \tag{81}$$

となり、式(63)を

$$\frac{1}{T_1} = \left(e^{\beta\omega_0} + 1\right) \frac{\gamma^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(0), h_+(t) \rangle \tag{82}$$

と書き換えることができる。

この式では反交換関係の計算を行ったが、交換関係 $[h_+(t),h_-(0)]=h_+(t)h_-(0)-h_-(0)h_+(t)$ の積分も同様に計算してみると

$$([h_{+}(t), h_{-}(0)])_{\omega_{0}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle$$
 (83)

$$= (e^{\beta\omega_0} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle h_-(0), h_+(t) \rangle$$
(84)

が得られ、

$$\frac{1}{T_1} = \frac{e^{\beta\omega_0} + 1}{e^{\beta\omega_0} - 1} \frac{\gamma^2}{4} ([h_+(t), h_-(0)])_{\omega_0}$$
(85)

$$= \frac{\gamma^2}{4} ([h_+(t), h_-(0)])_{\omega_0} \coth \frac{\beta \omega_0}{2}$$
 (86)

となる。

一方で、 $([h_+(t), h_-(0)])_{\omega_0}$ は

$$([h_{+}(t), h_{-}(0)])_{\omega_{0}} = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle$$
(87)

$$= \int_{-\infty}^{0} dt e^{i\omega_0 t} \langle [h_+(t), h_-(0)] \rangle + \int_{0}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle [h_+(t), h_-(0)] \rangle$$
(88)

$$= \int_{0}^{\infty} dt e^{-i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(-t), h_{-}(0)] \rangle + \int_{0}^{\infty} dt e^{i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle$$
 (89)

$$= \int_{0}^{\infty} dt e^{-i\omega_{0}t} (-1)\langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle + \int_{0}^{\infty} dt e^{i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle$$
 (90)

$$= -\int_{0}^{\infty} dt e^{-i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle + \int_{0}^{\infty} dt e^{i\omega_{0}t} \langle [h_{+}(t), h_{-}(0)] \rangle$$
 (91)

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega_0 t} \langle [h_+(t), h_-(0)] \rangle \theta(t) + \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega_0 t} \langle [h_+(t), h_-(0)] \rangle \theta(t)$$
(92)

$$= -i\langle\langle h_{+}h_{-}\rangle\rangle_{\omega_{0}}^{R*} + i\langle\langle h_{+}h_{-}\rangle\rangle_{\omega_{0}}^{R}$$
(93)

$$= -2\operatorname{Im}\langle\langle h_{+}h_{-}\rangle\rangle_{\omega_{0}}^{R} \tag{94}$$

⁹トレースの巡回不変性を用いた。

¹⁰Kubo-Martin-Schwinger の恒等式。

と書ける。ここで、 $\langle\langle h_+h_angle
angle^R_{\omega_0}$ は演算子 h_+ と h_- による遅延 Green 関数:

$$\langle\langle h_{+}(t)h_{-}(0)\rangle\rangle^{R} \equiv i\langle[h_{+}(t),h_{-}(0)]\rangle\theta(t)$$
(95)

のフーリエ変換である。

以上から、

$$\frac{1}{T_1} = -2\frac{\gamma^2}{4} \operatorname{Im} \langle \langle h_+ h_- \rangle \rangle_{\omega_0}^R \coth \frac{\beta \omega_0}{2}$$
(96)

となる。多くの実験において $\hbar\omega_0\ll 1/\beta$ が成り立つので、 $\coth(x)\sim 1/x$ から

$$\frac{1}{T_1} \sim -T\gamma^2 \frac{\operatorname{Im} \langle \langle h_+ h_- \rangle \rangle_{\omega_0}^R}{\omega_0} \tag{97}$$

が得られる11。

よって、 h_{\pm} と S_{\pm} の関係を用いると、

$$\frac{1}{T_1} \propto -T\gamma^2 \frac{\operatorname{Im} \langle \langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\downarrow}(x)\hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(x)\hat{\psi}_{\uparrow}(x)\rangle \rangle_{\omega_0}^R}{\omega_0}$$
(98)

が得られる。これで、動的磁化率と核磁気緩和率の対応がついたことになる。あとはこの動的磁化率を適当に計算すればよい。超伝導状態の場合に関しては参考文献参照。

参考文献

C. P. Slichter, "Principles of Magnetic Resonance 2nd Edition" Springer series in solid-state science, Springer-Verlag New York (1980).

朝山邦輔、"遍歴電子系の核磁気共鳴ー金属磁性と超伝導ー" 物性科学選書、裳華房、(2002)

アブラガム、"核の磁性 下" 吉岡書店 、(1964)

K. V. Samokhin and B. Mitrovic "NMR relaxation time in a clean two-band superconductor", Phys. Rev. B **75** (2005) 134511.

A. M. ザゴスキン「多体系の量子論 < 技法と応用 > 」 シュプリンガー・フェアラーク東京

¹¹係数が間違っているかもしれない。