$$\frac{E_G}{N|J_\perp|}=-\frac{2}{\pi}-\frac{2}{\pi^2}\frac{J_{11}}{J_\perp}-\frac{16}{\pi^3}\left(\frac{1}{6}-\frac{\pi^2}{144}\right)\left(\frac{J_{11}}{J_\perp}\right)^2+0\left(\left(\frac{J_{11}}{J_\perp}\right)^3\right)$$

が得られ $J_{11}=J_\perp<0$ とすると $E_G/NJ=0.8893$ で，Bethe-Hulthen の Exact な値 0.8863 に対してきわめてよい近似になつている。

尚，Fig.1 に示す様な部分を Self consistent に unperturbed Hamiltonian にくり込むと Balaenskii の Hartree Fock 近似が得られる。

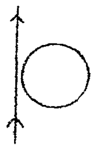


Fig.1

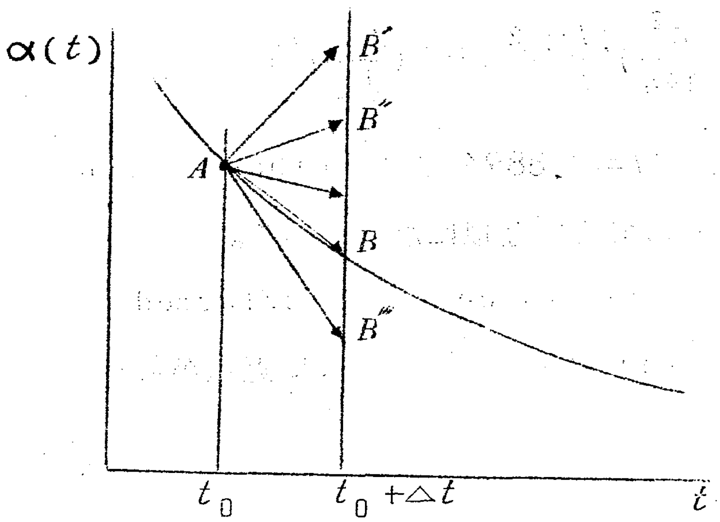
Path probability method の一般論　　　菊池良一

§1　Path probability function の導入

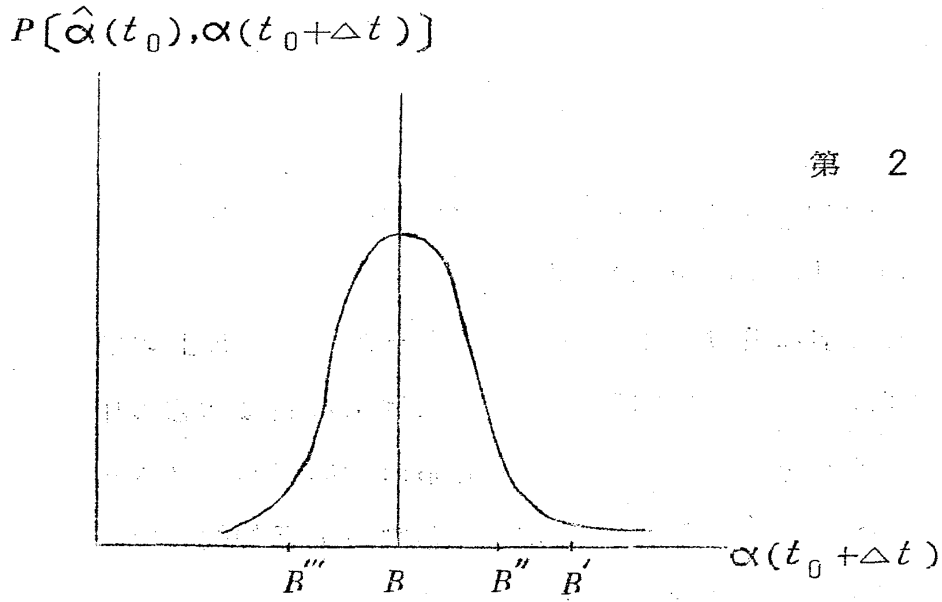
平衡状態の熱力学や統計力学に於ける「自由エネルギー最小の原理」の意味を考えて見る。この原理は「巨視的に実現される状態は，可能な状態の中で最も確からしい状態である」という事である。即ち系の状態がパラメター α で指定される場合，状態 α の現れる確率を $p(\alpha)$ とした時，巨視的に実現される状態は $p(\alpha)$ を最大ならしめる α の値として与えられる。

上の考えを非平衡の統計力学に拡張する事を考えて見ると，次の様に言う事が出来る。「時刻 t_0 に於ける状態 $\hat{\alpha}(t_0)$ が与えられた時，$t_0+\triangle t$ に於ける巨視的状態 $\hat{\alpha}(t_0+\triangle t)$ は $P[\hat{\alpha}(t_0), \alpha(t_0+\triangle t)]$ を最大ならしめる $\alpha(t_0+\triangle t)$ の値で与えられる。」ここに $P[\alpha(t_0), \alpha(t_0+\triangle t)]$ は $\hat{\alpha}(t_0)$ が与えられた時，$\triangle t$ 時間後に状態 $\alpha(t_0+\triangle t)$ が現われる条件確率である。

これを図で示すと第1図の様になる。点Aが与えられた時最も確からしい変化によると系の状態はBに移る。しかし原理的には B', B'', B''', ...



第 1 図



第 2 図

に移る事も可能であつて，その中Bに移る確率が最大になる。第2図にその事情を示す。状態を示す量$\alpha(t)$の他に，$\triangle t$内の状態変化を記述する変数$A(t_0,\ t_0+\triangle t)$を与え，変化の確率PをAの函数と考えた時，$P[A(t_0,\ t_0+\triangle t)]$をpath probability functionと呼ぶ事にする。この様なformulationに従うと非可逆過程の統計的取扱いは$P[A(t_0,\ t_0+\triangle t)]$の函数形を導く事に帰着する。

§2　Path probability function の一例

$P[A(t_0,t_0+\triangle t)]$を導く例として次の様な問題を考える。系の中にN

個の粒子があり，各粒子は ground state と，それよりエネルギーが ε だけ高い excited state との二つの状態をとりうるものとする。粒子間の相互作用はなく，各粒子は二つの熱源 T_1 及び T_2 との間にエネルギーのやりとりをして状態を変えるものとする。$T_1(T_2)$ から ε を吸収して excite される量子論的な確率を $\theta_1(\theta_2)$ とする。

t に於ける粒子の状態	状態頻度
gr.	$x_1(t)$
exc.	$x_2(t)$

第 1 表

系の状態は第1表の x で指定され，path variable A は第2表の X で表わされる。Path probability function P は三つの因子 P_1, P_2', P_2'' より成る。この中 P_1 は weight を表し

$$P_1 = \frac{\prod_i (Nx_i(t))!}{\prod_{i,j,k} (NX_{i,j,k}(t, t+\triangle t))!}$$

状態変化 t → $t+\triangle t$	path variable
gr → gr	$X_{11}(t_0, t_0+\triangle t)$
exc. → exc.	X_{22}
gr $\xrightarrow[T_1]{}$ exc.	$X_{12,1}$
gr $\xrightarrow[T_2]{}$ exc.	$X_{12,2}$
exc. $\xrightarrow[T_1]{}$ gr.	$X_{21,1}$
exc. $\xrightarrow[T_2]{}$ gr.	$X_{21,2}$

第 2 表

P_2' P_2'' は Boltzmann factor の拡張であつて

$$P_2' = (1-\theta_{11}\triangle t)^{NX_{11}}(1-\theta_{22}\triangle t)^{NX_{22}}$$

$$\times (\theta_1\triangle t)^{NX_{12,1}+NX_{21,1}}(\theta_2\triangle t)^{NX_{12,2}+NX_{21,2}}$$

$$P_2'' = \exp\left[-\frac{(\triangle E)_1}{2kT_1} - \frac{(\triangle E)_2}{2kT_2}\right]$$

と書ける。ここに $(\triangle E)_i$ は $\triangle t$ 時間内に熱源 T_i から系に入るエネルギーで

$$\triangle E_i = \varepsilon(NX_{12,i} - NX_{21,i}) : i = 1, 2.$$

P_1 P_2' P_2'' の積を $x_i(t)$ を固定して X について maximize すると

$$\begin{aligned} \widehat{X}_{12,i}(t, t+\triangle t) &= \theta_i\ e^{-\varepsilon/2kT_i}\ x_1(t)\triangle t \\ \widehat{X}_{21,i}(t, t+\triangle t) &= \theta_i\ e^{\varepsilon/2kT_i}\ x_2(t)\triangle t \end{aligned} \qquad i = 1, 2$$

という結果をうる。これは物理的に予期される結果であつて analysis の正しい事を保証している。

§3 Discussion

この方法には長所もあるが短所も多い。長所としては

(1) 平衡状態の結晶統計を非可逆の場合に拡張する事が可能である。その例としては

(a) 結晶内の stbstitutional diffusion の統計的取扱いが出来る。

(b) 結晶内の或る種の phase boundary の移動を論ずる事が出来る。

(c) order-disorder 系内の非可逆現象を論ずる事が出来る。

(2) Onsager の principle of least dissipation of energy や Prigogine の minimum entropy production の関係を論ずる事が出来る。

短所としては

(1) マルコフ過程を仮定している。従つて古典的な取扱いである。

(2) 結晶内での取扱いは比較的容易であるが連続系（液態或は気態）にはそのまま使えない。

対相関の dynamics

西川恭治（東大教養）

非平衡協力現象の菊池理論では，系の状態変化の道筋を指定する path parameters の選び方が重要なポイントになつている。例えば，菊池氏が β-brass 型合金の緩和理論に用いた pair 近似では，path parameters を指定する状態変化の素過程として，最近接 pair の状態変化のみが選ばれているが，この近似では，例えば Curie 点の上で，長距離秩序度のみならず短距離秩序度も亦指数函数的緩和を示す事になる。これは，（短距離秩序度の緩和は元来マルコフ過程として取扱えないという批判はさておいても）現象論からえられる一般的結果── 指数函数的緩和を示すのは一般にある加算的不変量のフーリエ成分であつて，短距離秩序度の如き局所的な量ではない── と矛盾する。この矛盾は，素過程として一般に任意の距離離れた対相関の状態変化の全体を選ぶ事によつて解消される。一方，Curie 点近傍に於ける緩和現象の異常性は，粒子間の長距離相関によつている。これは又，長距離相関の緩和が Curie 点近傍で遅くなる事と関係している。この後の事実は，Curie 点近傍では，長距離相関の緩和過程を，菊池理論にあるように，マルコフ過程として取扱つてよい事を意味している。このような観点から，長距離対相関の緩和現象を，菊池理論に従つて解析してみた。但し，変分法を使うのは困難なので，kinetic な議論で満足する事にする。その