

菊 地 理 論

三 宅 哲

新しいpreprintを紹介する。

1. General Formulation で、activation energy を必要とする素過程の場合を区別し、transition rate の Boltzmann factor に対する処方箋を与えた。温度 T の熱浴に接しているとき、ある状態から ϵ だけ energy の高い状態へ移る transition rate は $\theta \exp(-\frac{\epsilon}{2kT})$ 、逆の rate は $\theta \exp(\frac{\epsilon}{2kT})$ と取ればよいが、activation energy U を必要とする場合には、行先の状態の energy にはよらず、 $\theta \exp(-\frac{U}{kT})$ と取ればよいことを示した。

2. 上の処方箋によつて、vacancy mechanism による、結晶内の原子拡散を扱う。state variable として pair fractional までとる。得られる path は、triplet fractional に superposition approx. をしたことに相当する。

3. 協力現象の起る系での緩和の議論。

3a. 一次元 Ising model. state variable として pair fractional までとれば、long-range order parameter ξ と short-range order parameter η に対する Kinetic eq. は couple せず、 η の空間についての微係数も現れない。 ξ については二次微係数が現れる。 η の緩和時間 $T \rightarrow 0$ で有限で、 ξ の緩和時間は、 ξ が空間的に一様なら $T \rightarrow 0$ で無限に長くなる。state variable として triplet fractional までとれば、 η の空間微係数も現れる。Kinetic eq. は二次までで閉じない。

3b. 空孔を含む AB 型合金。空間的に均質とし、vacancy mechanism を考える。state variable は pair fractional まで。Bethe 近似を dynamical な場合に拡張したことに相当する。平衡状態からのはずれが小さい時、disordered state では long-range order と short-range order は独立に緩和し、前者の緩和時間は $T \rightarrow T_c + 0$ で無限に長くなり、

二次相転移・不可逆過程

後者は有限である。orderd state では二つの order parameters の緩和は独立でない。定性的な結果は、exchange mechanism の場合の結果に同じ。

Prigogine 学派の理論について

橋 爪 夏 樹

1950年代後半より最近まで約10年間に van Hove, Prigogine を中心とする二学派により運動学的方法がかなり前進した。van Hove 学派の理論は、ハミルトニアンを \mathcal{M} とするとき、変換関数 $\exp(\pm it\mathcal{M}/\hbar)$ を damping theory によつて処理するため、transition probability 自身に対してではなく、その spectral component に対してしか、master equation を与えることができなかつた。これらに対し、Prigogian 学派の理論は変換関数 $\exp(-it\mathcal{M}^*/\hbar)$ を damping theory によつて処理するものである。ここに \mathcal{M}^* は \mathcal{M} との交換子を作る演算を示す。系の密度行列 ρ の要素のうちから適当なものを拾い出す projection operator を \mathcal{D} とすると、 $\rho_0 \equiv \mathcal{D}\rho$ および $\rho_1 \equiv (1-\mathcal{D})\rho$ は

$$\frac{\partial \rho_0(t)}{\partial t} - \mathcal{D}\left[\frac{\mathcal{M}}{i\hbar}; \rho_0(t)\right] = \int_0^t dt' \mathcal{S}(t') \rho_0(t-t') + D_0[t; \rho_1(0)], \quad (1)$$

$$\rho_1(t) = \int_0^t dt' \mathcal{C}(t') \rho_0(t-t') + D_1[t; \rho_1(0)] \quad (2)$$

の形の方程式を満す。適当なる初期値 $\rho_1(0)$ をとれば、十分短い時間の後に destruction term D_0, D_1 は落せるものと仮定して、第一式から master equation を得、第二式にその解を代入して、 $\rho_1(t)$ が定められる。このとき $\rho(t) = \rho_0(t) + \rho_1(t)$ は $\rho_0(t)$ の functional になつているわけで、これは Bogolioubov の idea の一般化になつている。積分核 $\mathcal{S}(t)$ が消える時間 t_0 より長い時間を問題とするときには、時間積分の上限を $+\infty$ で近似するこ