

になるように $H_{(3)}$ をきめると (i, j, k は一列に並んだスピン),

$$\begin{aligned} H_{(3)}(i, j, k) = & -2J[(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k)] - b[S_i^z S_j^z + S_j^z S_k^z] \\ & - c S_i^z S_k^z - [2J(z-1)\bar{S} - b\bar{S} - c\bar{S}](S_i^z + S_k^z) \\ & - [2J(z-2)\bar{S} - 2b\bar{S}]S_j^z \end{aligned} \quad (13)$$

変数 $\bar{S}$, b , c , $\langle S^z \rangle$ は次の四式から求まる。

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle = & \text{Tr } \rho_{(1)} S_i^z = \text{Tr } \rho_{(2)}' (1/2) (S_i^z + S_j^z) \\ = & \text{Tr } \rho_{(3)} (1/2) (S_i^z + S_k^z) = \text{Tr } \rho_{(3)} S_j^z \end{aligned} \quad (14)$$

但し $\rho_{(1)}$, $\rho_{(2)}'$, $\rho_{(3)}$ は夫々 (1), (10), (13) より作った規格化された密度行列である。

一次元の Heisenberg 模型

桂 重俊, 猪苗代盛 (東北大)

anisotropic な Heisenberg Model の Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2} \sum J_{\perp} (r_e^x \sigma_{e+1}^x + r_e^y \sigma_{e+1}^y) + J_{11} r_e^z r_{e+1}^z - m \sum r_e^z$$

を考える, $-J_{11} = J_{\perp} < 0$ の場合の $N=6$ ground state wave が $J_{11} = 0$ の場合のそれにきわめて近い性質を示すので, J_{11} に比例する項を相互作用として 3 次の order まで, 分配函数, Ground State の Energy, 帯磁率等を求めた。摂動項は発生消滅演算子の 2 次の項と 4 次の項を含むが, 前者の現われる過程は常に対応する後者の過程と一緒にして考えることにより modified linked cluster expansion の定式化が得られた。

Ground State Energy は 2 次までの近似で

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

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っている。

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ーター 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、 $t_0 + \Delta t$ に於ける巨視的状态 $\hat{\alpha}(t_0 + \Delta t)$ は $P[\hat{\alpha}(t_0), \alpha(t_0 + \Delta t)]$ を最大ならしめる $\alpha(t_0 + \Delta t)$ の値で与えられる。」ここに $P[\alpha(t_0), \alpha(t_0 + \Delta t)]$ は $\hat{\alpha}(t_0)$ が与えられた時、 Δt 時間後に状態 $\alpha(t_0 + \Delta t)$ 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 $B', B'', B''', \dots$