統計力学1 第7回練習問題

カノニカル分布は「エネルギーの期待値を固定した際に、シャノンエントロピーを最大化する分布」としても導出する事ができる。これを Lagrange の未定乗数法を用いて導出したい。(ミクロカノニカルは状態 (確率変数) のエネルギーを固定して導出。)

1. 状態を x, その状態のエネルギーを $\epsilon(x)$ とした時に、状態確率分布 $p(x)$ についての拘束条件を2つ書け。(確率分布の和が1、そしてエネルギー期待値が E とする)

2. (1) の拘束条件について、Lagrange の未定乗数をそれぞれ α, β として、シャノンエントロピー $S(p) = -\int dx p(x) \log[p(x)]$ に取り入れた Lagrange 関数を書け。

3. (2) の Lagrange 関数から拘束条件下でシャノンエントロピーを最大にする状態確率分布 $p(x)$ を、未定乗数 α, β を用いて表せ。また結果を拘束条件式に代入する事で α, β が満たすべき式を書け。ただし汎函数微分
$$\frac{\delta}{\delta p}\Big(\int dx F(p(x))\Big) = 0 \Rightarrow \frac{\partial F(p)}{\partial p}(x) = 0 \Big(\forall x\Big)$$
を用いよ。

4. エネルギー ϵ の状態の状態密度を Ω_ϵ として、(3) で求めた $p(x)$ を $p(\epsilon)$ に書き直せ。さらに多体極限で成り立つとされる近似
$$Z(\beta(E)) = \sum_\epsilon \Omega_\epsilon \exp[-\beta(E)\epsilon]$$
$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta(E)} \log Z(\beta(E)) \simeq -\frac{\partial}{\partial \beta(E)} \log\Big[\Omega_E \exp[-\beta(E)E]\Big]$$
を用いる事で、Lagrange の未定乗数 β が (注目している系の) 逆温度である事を導け。

周期的な

5. 1次元 Ising 模型 $H = \sum_i [-J s_i^z s_{i+1}^z - h s_i^z]$ $(J < 0)$ において、その磁化の期待値を転送行列もしくは平均場近似を用いて計算せよ。(平均場近似を用いる場合は、反強磁性 (交互に逆向きに磁化すること) が出る可能性も考慮せよ。)

(1) $$\begin{cases} \int dx\, p(x) = 1 & \text{—①} \\ \int dx\, \varepsilon(x)\, p(x) = E & \text{—②} \end{cases}$$

(2) $$\tilde{S}(p) = -\int dx\, p(x) \ln p(x) + \alpha\left(1 - \int dx\, p(x)\right) + \beta\left(E - \int dx\, \varepsilon(x)\, p(x)\right)$$

(3) $$\frac{\delta \tilde{S}}{\delta p} = 0 \Rightarrow -\ln p(x) - 1 - \alpha - \beta\, \varepsilon(x) = 0$$

$$\Rightarrow p(x) = \exp[-\beta\, \varepsilon(x)] / e^{1+\alpha}$$

① より $e^{1+\alpha} = \int dx\, \exp[-\beta\, \varepsilon(x)]$

② より $$E = \int dx\, \varepsilon(x) \exp[-\beta\, \varepsilon(x)] \Big/ \int dx\, \exp[-\beta\, \varepsilon(x)]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int dx\, \exp[-\beta\, \varepsilon(x)]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} Z$$

(4) $$\simeq -\frac{\partial}{\partial \beta(E)} \ln[\Omega_E \exp(-\beta E)]$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta(E)} [\ln \Omega_E - \beta E]$$

$$= E + \frac{\partial E}{\partial \beta}\left(\beta - \frac{\partial}{\partial E} \ln \Omega_E\right)$$

$$\Rightarrow \beta = \frac{\partial}{\partial E} \ln \Omega_E = \frac{1}{k_B} \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} \quad (S = k_B \ln \Omega_E)$$

$$p(\varepsilon) = \Omega_\varepsilon \exp[-\beta \varepsilon] \Big/ \left(\sum_\varepsilon \Omega_\varepsilon \exp[-\beta \varepsilon]\right)$$

(5) $\mathcal{H} = -J\sum_i S_i S_{i+1} - h\sum_i S_i$

$$\hat{T} = \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array}\begin{pmatrix} \exp[\frac{\beta}{4}(J+2h)] & \exp[-\frac{\beta}{4}J] \\ \exp[-\frac{\beta}{4}J] & \exp[\frac{\beta}{4}(J-2h)] \end{pmatrix}$$

$$= e^{\frac{\beta J}{4}}\cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right)\sigma^0 + e^{-\frac{\beta J}{4}}\sigma^x + e^{\frac{\beta J}{4}}\sinh(\ )\sigma^z$$

固有値 $\lambda_\pm = e^{\frac{\beta J}{4}}\left(\cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \pm \sqrt{\sinh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + e^{-\beta J}}\right)$

$$Z = \mathrm{Tr}[\hat{T}^n] = \lambda_+^n + \lambda_-^n$$

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln Z \simeq -\frac{n}{\beta}\ln\lambda_+$$

$$m = -\frac{1}{n}\frac{\partial F}{\partial h} = \frac{1}{2}\sinh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \Big/ \sqrt{\sinh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) + e^{-\beta J}}$$