統計力学1 第8回練習問題

1. Ising 模型の真の平衡状態を表す確率分布 $p(\{s_i\})$ に対して、独立性を仮定した近似分布 $\tilde{p}(\{s_i\}) = \prod_i \tilde{p}(s_i)$ を導出したい。この際 $p(\{s_i\})$ と $\tilde{p}(\{s_i\})$ は分布としてできるだけ近くなっていて欲しいので、確率分布における (擬) 距離である Kullback-Leibler divergence

$$D_{KL}(\tilde{p}|p) = \sum_{\{s_i\}} \tilde{p}(\{s_i\}) \log[\tilde{p}(\{s_i\})/p(\{s_i\})]$$

を $\sum_{s_i} \tilde{p}(s_i) = 1$ の制約下で最小化する事を考える。$p(\{s_i\})$ は Ising 模型の Hamiltonian

$$H = -J \sum_{<i,j>} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

が与えるカノニカル分布であるとして、近似分布 $\tilde{p}(s_i)$ を site j のスピンの期待値 $< s_j >$ を用いて表せ。またそこから $< s_i > = < s_j >$ として、$< s_i >$ が満たすべき式を求めよ。(これは平均場近似で求めた式と一致する)

2. １次元 Ising 模型

$$H(\{s_i\}) = -J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1} - g\mu_B h_z \sum_{i=1}^{L} s_i$$

について、転送行列の方法を用いて、分配関数を計算せよ。また $L \gg 1$ の極限での自由エネルギーを計算した後、それを用いて、磁化の期待値 $< s_i >$ と磁気感受率 $\chi = \partial < s_i > /\partial h_z|_{h_z \to 0}$ を計算せよ。最後にそれぞれの量の低温極限 $\beta g \mu_B |h_Z| \gg 1,\ \ \beta|J| \gg 1$ を計算せよ。

3. (挑戦問題。期末試験には絶対に入れない問題である。修士に行こうと思っている人の内、余力のある人は挑戦してみよう。) ポリマー系が示すゴム弾性はエントロピーからの寄与とエネルギーからの寄与に分解できる。これまでエネルギーからの寄与はエントロピーからの寄与に比べ無視できるとされていた。(授業で用いた模型はこの立場)

   近年 (2021 年) ある種のポリマーにおいてはこのエネルギーからの寄与がそれなりにあり、しかも負の寄与を持つ事がわかった。これを説明するために今年の４月に arXiv に公開された論文 (arXiv:2404.06885, Physical Review E: 110.L032102(2024)) に沿って、以下のモデルを考えてみよう。

$$H(\{s_i\}) = \epsilon \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1 - s_i s_{i+1}}{2} - f_{ex} a \sum_{i=1}^{n} s_i$$

   s_i は各ポリマーが連結部分から右に伸びていれば $+1$, 左に伸びていれば -1 の値を取るものとする。

   逆温度が β の時のこの系の分配関数を $Z(\beta, f_{ex}, n)$ として

$$\lim_{n\to\infty} \beta g = -\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log Z(\beta, f_{ex}, n)$$

を、転送行列の方法を用いて求めよ。

4. (3) において、$< X >= a < \sum_i s_i >$ として

$$x = \lim_{n \to \infty} \frac{< X >}{n}$$

を計算して、f_{ex} と x の関係式を導け。さらにゴム弾性係数 $k = \partial f_{ex}/\partial x$ を β, a, x, ϵ を用いて表せ。

5. 自由エネルギー $F = U - TS$ と考えるとエントロピーからのゴム弾性の寄与 k_S は

$$\begin{aligned} k_S &= -T \frac{\partial^2 S}{\partial < X >^2} = T \frac{\partial^2}{\partial < X >^2} \frac{\partial F}{\partial T} = T \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial^2 F}{\partial < X >^2} = T \frac{\partial k}{\partial T} \\ k &= k_U + k_S \end{aligned}$$

と書ける。簡単のため $x = 0$ の場合を考え、エントロピーからの寄与 k_S とエネルギーからの寄与 $k_U = k - k_S$ を求め、$k_U < 0$ である事を確かめよ。