統計力学 2 レポート

理学部化学科 3 年 05253011 Fumiya Kashiwai / 柏井史哉

2025 年 12 月 31 日

1　平均場近似の変分法としての定式化

(a) $t > 0$ に対して

$$\ln \frac{1}{t} \geq 1 - t \tag{1.1}$$

である。よって、

$$D_{\mathrm{KL}}(P||Q) = \sum_{S\in\Omega} P(S) \ln \frac{P(S)}{Q(S)} \geq \sum_{S\in\Omega} P(S) \left(1 - \frac{Q(S)}{P(S)}\right) = \sum_{S\in\Omega} (P(S) - Q(S)) = 0 \tag{1.2}$$

(b) 同様に、量子系の密度演算子について

$$\rho = \sum_j p_j \left|i\right\rangle \left\langle i\right|,\ \sigma = \sum_i q_i \left|j\right\rangle \left\langle j\right| \tag{1.3}$$

とスペクトル分解できるとする。この時、$\left|i\right\rangle, \left|j\right\rangle$ は必ずしも同じではない正規直交基底である。

これより

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(\rho||\sigma) &= \mathrm{Tr}(\rho \ln \rho) - \mathrm{Tr}(\rho \ln \sigma) = \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i \left\langle i\right| \rho \ln \sigma \left|i\right\rangle \\ &= \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i \sum_j p_i \left\langle i|j\right\rangle \left\langle j\right| \ln \sigma \left|i\right\rangle \\ &= \sum_i p_i \ln p_i - \sum_i \sum_j p_i |\left\langle i|j\right\rangle|^2 \ln q_j \\ &= \sum_i \sum_j p_i |\left\langle i|j\right\rangle|^2 (\ln p_i - \ln q_j) \\ &\geq \sum_i \sum_j (p_i - q_j) |\left\langle i|j\right\rangle|^2 \\ &= \sum_i p_i \left(\sum_j |\left\langle i|j\right\rangle|^2\right) - \sum_j q_j \left(\sum_i |\left\langle i|j\right\rangle|^2\right) \\ &= 1 - 1 = 0 \end{aligned} \tag{1.4}$$

が従う。

(c) まず、古典系の場合、

$$Z = \int \mathrm{d}S e^{-\beta H(S)},\ Z_0 = \int \mathrm{d}S e^{-\beta H_0(S)} \tag{1.5}$$

である。この時、状態空間 $S \in \Omega$ 上の二つの確率変数

$$P(S) = \frac{e^{-\beta H(S)}}{Z},\ P_0(S) = \frac{e^{-\beta H_0(S)}}{Z} \tag{1.6}$$

に対して (a) を用いると

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(P_0||P) &= \sum_{S\in\Omega} \frac{e^{-\beta H_0(S)}}{Z_0} \ln \frac{e^{-\beta H_0(S)}}{Z_0} \frac{Z}{e^{-\beta H(S)}} \\ &= \ln Z - \ln Z_0 + \sum_{S\in\Omega} \frac{e^{-\beta H_0(S)}}{Z_0} \beta (H(S) - H_0(S)) \\ &= \ln Z - \ln Z_0 + \beta \left\langle H - H_0 \right\rangle_0 \geq 0 \end{aligned} \tag{1.7}$$

$F = -\dfrac{\ln Z}{\beta}$ より

$$-F + F_0 + \left\langle H - H_0 \right\rangle_0 \geq 0 \tag{1.8}$$

よって、次の式が従う。

$$F_\nu = F_0 + \left\langle H - H_0 \right\rangle_0 \geq F \tag{1.9}$$

量子系の場合にも、同様に KL-情報量の非負性から従う。

(d) 状態空間 $S \in \Omega$ の要素の総数は 2^N である。

$$\begin{aligned} Z_0 &= \sum_{S\in\Omega} e^{\beta H_0} = \sum_{S\in\Omega} \prod_i e^{\beta\Lambda S_i} \\ &= e^{-\beta\Lambda N} \sum_{S\in\Omega} \prod_i e^{\beta\Lambda S_i + 1} \\ &= e^{-\beta\Lambda N} \sum_{k=0}^{N} \binom{N}{k} e^{2\beta\Lambda k} \\ &= e^{-\beta\Lambda N} \left(1 + e^{2\beta\Lambda k}\right)^N = (2\cosh\beta\Lambda)^N \end{aligned} \tag{1.10}$$

よって、

$$\begin{aligned} \left\langle H_0 \right\rangle_0 &= \frac{1}{Z_0} \sum_{S\in\Omega} H_0 e^{-\beta H_0} \\ &= \frac{\Lambda}{(2\cosh\beta\Lambda)^N} \sum_{k=0}^{N} \binom{N}{k} (2k - N) e^{-2\beta\Lambda k} \\ &= \frac{\Lambda e^{\beta\Lambda N}}{(2\cosh\beta\Lambda)^N} \left(2Ne^{-2\beta\Lambda} \left(1 + e^{-2\beta\Lambda}\right)^{N-1} - N \left(1 + e^{-2\beta\Lambda}\right)^N \right) \\ &= \frac{\Lambda N e^{\beta\Lambda}}{(2\cosh\beta\Lambda)} \left(2e^{-2\beta\Lambda} - \left(1 + e^{-2\beta\Lambda}\right)\right) \\ &= -\frac{\Lambda N}{(2\cosh\beta\Lambda)} \left(e^{\beta\Lambda} - e^{-\beta\Lambda}\right) && (1.11) \\ &= -N\Lambda \tanh\beta\Lambda && (1.12) \end{aligned}$$

$\left\langle H_0 \right\rangle_0 = -\Lambda N m$ より

$$m = \tanh\beta\Lambda \tag{1.13}$$

上の式を満たす $m = m_0$ とする。この時、

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = -J\frac{Nz}{2}m^2 - (B - \Lambda)Nm \tag{1.14}$$

$$F_\nu = -\frac{NzJ}{2}m^2 - (B - \Lambda)Nm + F_0 \tag{1.15}$$

と表せる。ここで、

$$m = \tanh\beta\Lambda = \frac{e^{\beta\Lambda} - e^{-\beta\Lambda}}{e^{\beta\Lambda} + e^{-\beta\Lambda}} \tag{1.16}$$

$$\Lambda = \frac{1}{2\beta}\ln\frac{1+m}{1-m} \tag{1.17}$$

である。

$F_0 = -\frac{\ln Z_0}{\beta} = -N\frac{\ln(\cosh\beta\Lambda)}{\beta}$ であり、この時、

$$F_\nu = -\frac{NzJ}{2}m^2 - \left(B - \frac{1}{2\beta}\ln\frac{1+m}{1-m}\right)Nm - N\frac{\ln(\cosh\beta\Lambda)}{\beta} \tag{1.18}$$

$$\frac{1}{\cosh^2\beta\Lambda} = 1 - \tanh^2\beta\Lambda = 1 - m^2 \tag{1.19}$$

であるので、

$$\begin{aligned} f_\nu &= -\frac{zJ}{2}m^2 - \left(B - \frac{1}{2\beta}\ln\frac{1+m}{1-m}\right)m + \frac{\ln\left(1-m^2\right)}{2\beta} \\ &= -\frac{zJ}{2}m^2 - Bm - \frac{1}{\beta}\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right) \\ &= -\frac{zJ}{2}m^2 - Bm - T\sigma(m) \end{aligned} \tag{1.20}$$

を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\nu}{\partial m} &= -zJm - B - \frac{1}{\beta}\left(\frac{1}{2}\ln\frac{1+m}{2} - \frac{1}{2}\frac{\ln}{1-m2} + 1 - 1\right) \\ &= -zJm - B - \frac{1}{\beta}\left(\frac{1}{2}\ln\frac{1+m}{1-m}\right) = 0 \end{aligned} \tag{1.21}$$

$$\frac{1}{2\beta}\ln\frac{1-m}{1+m} = zJm + B \tag{1.22}$$

$$m = \tanh\beta\left(zJm + B\right) \tag{1.23}$$

が成立する。

・長所

2 階層格子上の Ising 模型と実空間繰り込み群

(a)

$$
\begin{aligned}
Ae^{K' e_i e_j} &= \sum_{e_1, e_2 = \pm 1} e^{K((\sigma_i + \sigma_j)(\sigma_1 + \sigma_2) + \sigma_1 \sigma_2)} \\
&= e^{2K(\sigma_i + \sigma_j) + K} + 2e^{-K} + e^{-2K(\sigma_i + \sigma_j) + K}
\end{aligned} \tag{2.1}
$$

である。また、$\{e_i, e_j\} = \{1, 1\}, \{1, -1\}$ の場合をそれぞれ考えることにより

$$
Ae^{K'} = e^{5K} + 2e^{-K} + e^{-3K} \tag{2.2}
$$

$$
Ae^{-K'} = 2\left(e^K + e^{-K}\right) \tag{2.3}
$$

を得る。これより

$$
e^{2K'} = \frac{Ae^{K'}}{Ae^{-K'}} = \frac{e^{5K} + 2e^{-K} + e^{-3K}}{2\left(e^K + e^{-K}\right)} \tag{2.4}
$$

$$
e^{2K} = \frac{1+t}{1-t} \tag{2.5}
$$

を用いて変形し、

$$
t' = \frac{2t^2}{1 - t + t^2 + t^3} \tag{2.6}
$$

を得る。ただし、$t' = \tanh K', t = \tanh K$ とした。$t' = t = t_0$ として $t_0 = 0, 1, -1 \pm \sqrt{2}$ を得る。

$-1 \leq t_0 \leq 1$ であるので、$t_0 = 0, 1, \sqrt{2} - 1$ となる。

$$
\frac{2t^2}{1 - t + t^2 + t^3} - t \tag{2.7}
$$

のグラフを考えると、$t = 0, 1$ の近傍で傾き負、$t = t_c = \sqrt{2} - 1$ の近傍で傾き正である。

ゆえに、$t = 0, 1$ は安定点、$t = t_c$ は不安定点である。$\tanh K_c = t_c = \sqrt{2} - 1$ とすると、

$$
e^{2K_c} = \frac{1+t}{1-t} = \sqrt{2} + 1 \tag{2.8}
$$

$$
K_c = \frac{1}{2} \ln\left(\sqrt{2} + 1\right) \tag{2.9}
$$

固定点の近傍において、

$$
t = \tanh K = \sqrt{2} - 1 + \frac{1}{\cosh^2 K_c}(K - K_c) \tag{2.10}
$$

と線形化することにすると、

$$
\begin{aligned}
\lambda_t = \left.\frac{\mathrm{d}K'}{\mathrm{d}K}\right|_{K=K_c} = \left.\frac{\mathrm{d}t'}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t_c} &= \frac{4t_c(1 - t_c + t_c^2 + t_c^3) - 2t_c^2(-1 + 2t_c + 3t_c^2)}{(1 - t_c + t_c^2 + t_c^3)^2} \\
&= \frac{4t_c \cdot 2t_c - 2t_c^2(-1 + 2t_c + 3t_c^2)}{4t_c^2} \\
&= \frac{5 - 2t_c - 3t_c^2}{2} \\
&= 1 + 2t_c \\
&= 2\sqrt{2} - 1 \simeq 1.83
\end{aligned} \tag{2.11}
$$

$$
y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln 2} = \frac{\ln\left(2\sqrt{2} - 1\right)}{\ln 2} \simeq 0.87 \tag{2.12}
$$

$$
\nu = \frac{1}{y_t} \simeq 1.15 \tag{2.13}
$$

$K \propto 1/T$ であることから、T_c, K_c の相対誤差の値は等しく、0 である。

$$\frac{\nu^{\mathrm{MK}} - \nu^{\mathrm{exact}}}{\nu^{\mathrm{exact}}} \simeq 15\% \tag{2.14}$$

となる。K_c あるいは臨界温度 T_c は正確に計算されており、相関長臨界係数は誤差 15% 程度であることがわかった。

(d)

$$t = \tanh^2\left(4\,\mathrm{arctanh}\,(t)\right) \tag{2.15}$$

を数値的に (Wolfram Alpha を使って) 解くと、

$t = 0, 0.0655642580585243..., 0.992326060468120...$ を得る。非自明な固定点 $t_c = 0.06556$ について、これも不安定な固定点であり、

$$K_c^{(\mathrm{MK})} = \mathrm{arctanh}\,0.06556 = 0.06565 \tag{2.16}$$

$$y_t^{(\mathrm{MK})} = \left.\frac{\mathrm{d}t'}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t_c} = 1.9058 \tag{2.17}$$

$$\nu^{(\mathrm{MK})} = 0.5247 \tag{2.18}$$

となる。

(e) まだ

3 量子 Ising 模型と Majorana chain

(a) 仮定の下で

$$H = -iJ\sum_{j=0}^{2N}\gamma_i\gamma_{i+1} = \sum_{k=1}^{N}\varepsilon_k\left(d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2}\right) \tag{3.1}$$

となる。ただし、$\gamma_0 = \gamma_{2N+1} = 0$ とする。

$$d_k = \sum_{j=0}^{2N+1} w_{k,j}\gamma_j \tag{3.2}$$

となるように要請する。ただし $w_{k,j} \in \mathbb{C}$ とする。この時、Heisenberg 方程式を考えると

$$[\gamma_i, H] = 2iJ\left(\gamma_{i+1} - \gamma_{i-1}\right) \tag{3.3}$$

$$[d_k, H] = \varepsilon_k d_k \tag{3.4}$$

となる。d_k と γ_k の間の関係式を用いると、

$$2iJ\sum_{j=0}^{2N+1} w_{k,j}\left(\gamma_{j+1} - \gamma_{j-1}\right) = \sum_{j=0}^{2N+1} w_{k,j}[\gamma_j, H] = \varepsilon_k\sum_{j=0}^{2N+1} w_{k,j}\gamma_j \tag{3.5}$$

を得る。γ_i の係数を比較することによって

$$2iJ(w_{k,j-1} - w_{k,j+1}) = \varepsilon_k w_{k,j} \tag{3.6}$$

$i^j u_{k,j} = w_{k,j}$ と改めておくことによって

$$u_{k,j-1} + u_{k,j+1} = \frac{\varepsilon_k}{2J} u_{k,j} \tag{3.7}$$

となる。境界条件として、$u_{k,0} = u_{k,2N+1} = 0$ が課される。この差分方程式の解として $u_{k,j} \propto e^{i\alpha_k j}$ をとると、

$$\left(e^{-i\alpha_k} + e^{i\alpha_k}\right) = \frac{\varepsilon_k}{2J} \tag{3.8}$$

$$\varepsilon_k = 4J\cos\alpha_k \tag{3.9}$$

が要請される。さらに、境界条件から、$u_{k,j}$ は sin 型の関数であって、

$$u_{k,j} \propto \sin\alpha_k \tag{3.10}$$

$$\sin(2N+1)\alpha_k = 0 \tag{3.11}$$

$$\alpha_k = \frac{k\pi}{2N+1} \tag{3.12}$$

となるので、

$$\varepsilon_k = 4J\cos\frac{k\pi}{2N+1} \tag{3.13}$$

となる。

(b) d_k は、励起による準粒子の fermion 演算子であり、基底状態においてはすべての k で $d_k^\dagger d_k = 0$ となる。よって基底状態は

$$E_0 = -2J\sum_{k=1}^{N}\cos\frac{k\pi}{2N+1} = -2J\frac{\cos\frac{N\pi}{2(2N+1)}\sin\frac{(N+1)\pi}{2(2N+1)}}{\sin\frac{\pi}{2(2N+1)} - 1} = -J\left(\frac{1}{\sin\frac{\pi}{2(2N+1)}} - 1\right) \tag{3.14}$$

$N \to \infty$ において E_0 を展開する。$\sin x = x - \frac{x^3}{6}O(x^5)$ であるので、$x = \dfrac{\pi}{2(2N+1)}$ として

$$\begin{aligned}
E_0 &\simeq -J\left(\frac{1}{x(1-\frac{x^2}{6})} - 1\right) \simeq -J\frac{1}{x}\left(1 + \frac{x^2}{6} - x\right) = -J\left(\frac{1}{x} + \frac{x}{6} - 1\right) \\
&= -J\left(\frac{4N+2}{\pi} + \frac{\pi}{12(2N+1)} - 1\right) \\
&\simeq -J\left(\frac{4N+2}{\pi} + \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{24N}\left(1 - \frac{1}{2N}\right) - 1\right) \\
&= -J\left(\frac{4N}{\pi} + \frac{2}{\pi} - 1 + \frac{\pi}{24N} + O(N^{-2})\right) && (3.15) \\
\frac{E_0}{N} &= -J\left(\frac{4}{\pi} + \frac{1}{N}\left(\frac{2}{\pi} - 1\right) + \frac{\pi}{24N^2} + O(N^{-3})\right) && (3.16)
\end{aligned}$$

を得る。よって

$$e_0 = -\frac{4J}{\pi},\ e_1 = -J\left(\frac{2}{\pi} - 1\right),\ e_2 = -\frac{\pi J}{24} \tag{3.17}$$

(d)