統計物理学 II 課題レポート

担当者: 桂 法称

2025 年 12 月 21 日

各大問ごとの配点は 50 点、レポート全体の上限を 100 点とします。(すべての問題を無理に解く必要はありません。)

1 平均場近似の変分法としての定式化

(a) 状態空間を Ω として、状態 $S \in \Omega$ に対する 2 つの確率分布 $P(S)$, $Q(S)$ に対し、Kullback-Leibler (KL) 情報量 $D_{\mathrm{KL}}(P\|Q)$ は以下のように定義される。ここで、任意の $S \in \Omega$ について、$P(S) > 0 \Rightarrow Q(S) > 0$ を仮定する[*1]。

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) \equiv \sum_{S\in\Omega} P(S) \ln \frac{P(S)}{Q(S)} \tag{1.1}$$

$D_{KL}(P||Q) \geq 0$ が成立することを示せ。

(b) 量子系の場合は、KL 情報量は密度演算子 ρ, σ (半正定値かつトレースが 1 の演算子) に対して以下のように定義される[*2]。

$$D_{\mathrm{KL}}(\rho\|\sigma) \equiv \mathrm{Tr}\left[\rho(\ln\rho - \ln\sigma)\right] \tag{1.4}$$

この場合にも、$D_{\mathrm{KL}}(\rho\|\sigma) \geq 0$ が成立することを示せ。

(c) 同じ状態空間 $S \in \Omega$ 上で定義された 2 つのハミルトニアン $H(S)$, $H_0(S)$ (量子系なら同じヒルベルト空間上で定義された 2 つのハミルトニアン H, H_0) を考える。H 及び H_0 に対応する系の自由エネルギーを F および F_0 とする。また、H_0 によるカノニカル分布（逆温

[*1] この仮定が満たされない場合は $D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) = +\infty$ とする。

[*2] σ のスペクトル分解を

$$\sigma = \sum_j q_j |j\rangle\langle j| \quad q_j \geq 0, \tag{1.2}$$

とする。 ここで、q_j は σ の固有値、$|j\rangle$ は対応する固有状態である。この問題では、$q_j = 0$ となる σ の固有状態 $|j\rangle$ については、

$$\langle j|\rho|j\rangle = 0 \tag{1.3}$$

が成り立つことを仮定する。（この仮定が満たされない場合は $D_{\mathrm{KL}}(\rho\|\sigma) = +\infty$ とする。）

度 β）での熱平均を $\langle\cdots\rangle_0$ とする。このとき、古典統計/量子統計のそれぞれの場合において、以下の Gibbs-Bogoliubov-Feynman (GBF) 不等式が成立することを示せ。

$$F_{\rm v} \equiv F_0 + \langle H - H_0\rangle_0 \geq F \tag{1.5}$$

(d) H をターゲットハミルトニアン、H_0 を試行ハミルトニアンと考え、試行ハミルトニアンのパラメータを最適化することにより、平均場近似を変分法として定式化することができる。その具体例として、H を配位数 z の格子上の Ising 模型のハミルトニアンとし、以下の試行ハミルトニアン H_0 を考えよう。

$$\begin{aligned} H &= -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j - B\sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1 \\ H_0 &= -\Lambda\sum_i S_i \end{aligned} \tag{1.6}$$

ここで、$\sum_{\langle i,j\rangle}$ は最近接のペア $\langle i,j\rangle$ に関する和を表す。また全サイト数を N とし、周期境界条件が課されているものとする。

(d-1) H_0 に関する 1 スピンの磁化 $m \equiv \langle S_i\rangle_0$ が $m = \tanh(\beta\Lambda)$ を満たすことを示せ.

(d-2) 変分自由エネルギー密度 $f_{\rm v}(\Lambda) \equiv F_v(\Lambda)/N$ が、パラメータ Λ の代わりに m を用いて

$$f_{\rm v}(m) = -\frac{zJ}{2}m^2 - Bm - T\sigma(m) \tag{1.7}$$

の形に書けることを示せ。ここで $\sigma(m)$ は以下の Shannon エントロピーである[*3]:

$$\sigma(m) = -k_{\rm B}\left[\frac{1+m}{2}\ln\left(\frac{1+m}{2}\right) + \frac{1-m}{2}\ln\left(\frac{1-m}{2}\right)\right] \tag{1.8}$$

(d-3) $f_{\rm v}(m)$ を最小化する条件から、以下の自己無撞着方程式を導け。

$$m = \tanh\left(\beta(zJm + B)\right) \tag{1.9}$$

(d-4) 分子場理論（自己無撞着方程式を導く通常の平均場近似）と比較して、変分法による平均場近似の定式化にどのようなメリットがあるのか考察せよ。

[*3] 小問 (b) での密度演算子 σ とは無関係な点に注意せよ。$k_{\rm B}$ は Boltzmann 定数である。

2　階層格子上の Ising 模型と実空間繰り込み群

Migdal–Kadanoff (MK) 階層格子（ダイヤモンド型階層格子）上での実空間繰り込みを考える。1 本のボンド（世代 $r = 0$）から出発し、各ボンドを「長さ 2 の枝を 2 本並列にしたユニット」に置き換える操作を 1 ステップ（$r \to r + 1$）として繰り返すことで階層格子を生成する（図 1)。

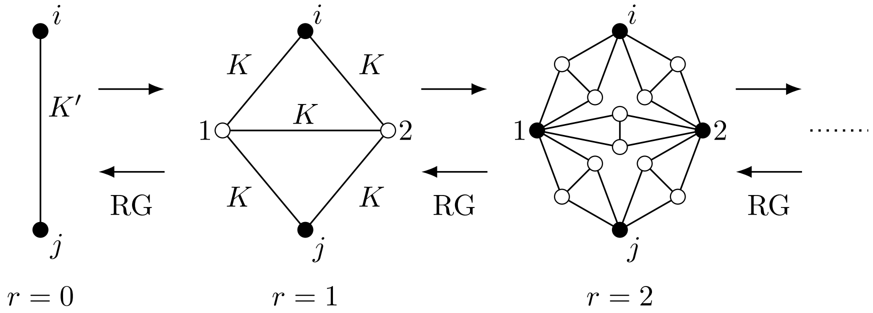

図 1　階層格子の生成（→）と実空間繰り込み（←)。

対応して各ステップで、○ 上に新たな Ising スピンが導入される。例えば、図 1 で世代 $r = 1$ では、○1, ○2 上にスピン σ_1, σ_2 が導入される。このようにして生成された世代 r の MK 階層格子上において、以下のハミルトニアンで与えられる Ising 模型を考える。

$$H^{(r)} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad \sigma_i = \pm 1 \tag{2.1}$$

ここで $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は、最近接ペア $\langle i, j \rangle$ に関する和を表す。また、無次元結合定数を $K = \beta J$ ($\beta = 1/k_B T$) とする。

以下では、世代 r (結合定数 K) の MK 階層格子のユニット内部スピン σ_1, σ_2 を縮約して、粗視化後（世代 $r - 1$）の有効結合定数 K' を定義する (ここで、A はスピンの配位に依存しない定数である):

$$Ae^{K' \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm} e^{K(\sigma_i \sigma_1 + \sigma_i \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_j + \sigma_2 \sigma_j)} \tag{2.2}$$

(a)　上の式をもとに、$t = \tanh K$ についての繰り込み群方程式を導出せよ。

(b)　前問 (a) で得た繰り込み群方程式から固定点 t_0 を求めよ。また、各固定点が安定か不安定かについても議論せよ。

(c)　前問 (b) における非自明な固定点 $K = K_\mathrm{c}$ 近傍で繰り込み群方程式を線形化し、繰り込み群固有値

$$y_t = \frac{\ln \lambda_t}{\ln b}, \qquad \lambda_t = \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K = K_\mathrm{c}} \qquad (b = 2) \tag{2.3}$$

を求めよ。相関長臨界指数は $\nu = 1/y_t$ で与えられることを用い、ν を求めよ。

さらに 2 次元 ($d = 2$) 正方格子の場合の厳密な結果として、

$$K_{\mathrm{c}}^{(\mathrm{exact})} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \sqrt{2}\right), \qquad \nu^{(\mathrm{exact})} = 1 \tag{2.4}$$

を文献値として用い、それに対して MK 階層格子に対して得られた $K_{\mathrm{c}}^{(\mathrm{MK})}$ および $\nu^{(\mathrm{MK})}$ が (1) 臨界温度 T_{c}（あるいは K_{c}）でどの程度ずれるか、(2) ν でどの程度ずれるか、相対誤差（%）で評価せよ。

以下では MK 階層格子ではなく、d 次元超立方格子上の Ising 模型に対する Migdal-Kadanoff 近似を考える。

(d) スケール因子を $b = 2$ とすると、無次元結合 $t = \tanh K$ は実空間繰り込みの 1 ステップで、

$$t' = \tanh^2 \left(2^{d-1} \operatorname{arctanh}(t)\right) \tag{2.5}$$

と変換される。この式を用いて $d = 3$ の場合の非自明な固定点 $K_{\mathrm{c}}^{(\mathrm{MK})}$ と $y_t^{(\mathrm{MK})}$ を数値的に求め、$\nu^{(\mathrm{MK})} = 1/y_t^{(\mathrm{MK})}$ を与えよ。

(e) 上の関係式 (2.5) を一般の d に対して数値的に解析し、(i) 非自明固定点 $t_{\mathrm{c}}^{\mathrm{MK}}(d)$ の存在領域と d 依存性、(ii) $y_t^{\mathrm{MK}}(d)$, $\nu^{\mathrm{MK}}(d)$ の d 依存性を調べよ（必要に応じて数値計算して良い)。特に $d \to \infty$ および $d \geq 4$（平均場領域）との整合性について議論せよ。

3　量子 Ising 模型と Majorana chain

1 次元量子 Ising 模型 (開放境界条件) のハミルトニアンは、以下で与えられる。

$$H = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \Gamma \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^x \tag{3.1}$$

このハミルトニアンは、Majorana フェルミオン演算子 γ_j $(j = 1, ..., 2N)$ を用いると、

$$H = -\mathrm{i}\Gamma \sum_{j=1}^{N} \gamma_{2j-1}\gamma_{2j} - \mathrm{i}J \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{2j}\gamma_{2j+1} \tag{3.2}$$

と書き換えられる。以下では、H が gapless となる $\Gamma = J$ の場合について調べる。

(a)　H は、反交換関係

$$\{d_k, d_l^\dagger\} = \delta_{k,l}, \quad \{d_k, d_l\} = \{d_k^\dagger, d_l^\dagger\} = 0 \tag{3.3}$$

を満たすフェルミオン演算子 d_k, $d_k^\dagger$ を用いて、

$$H = \sum_{k=1}^{N} \epsilon_k \left(d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2} \right) \tag{3.4}$$

の形に書くことができる。$\epsilon_k > 0 \quad (k = 1, 2, \cdots N)$ を求めよ。

(b)　H の基底状態エネルギー E_0 を求めよ。

(c)　基底状態におけるエネルギー密度は、N が十分大きい場合、

$$\frac{E_0}{N} = e_0 + \frac{e_1}{N} + \frac{e_2}{N^2} + O(N^{-3}) \tag{3.5}$$

と書ける。定数 e_0, e_1, e_2 を求めよ。

(d)　有限温度の場合を考える。以下で定義される比熱 $c(T)$ を求めよ。

$$c(T) = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \tag{3.6}$$

ただし、T は温度、$\langle H \rangle$ はハミルトニアンの熱平均を表す。また、熱力学極限 $N \to \infty$ を先に取り、低温極限 $T \to 0$ で $c(T) \sim \gamma T$ となることを示し、係数 γ を求めよ。(興味のある人は、(c) 及び (d) の結果について、共形場理論や有限サイズ・スケーリングとの関係を調べ議論せよ。)