

統計力学 2 レポート

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

2026 年 1 月 5 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

$$\ln \frac{1}{t} \geq 1 - t \quad (1.1)$$

である。よって、

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

(b) 同様に、量子系の密度演算子について

$$\rho = \sum_j p_j |i\rangle \langle i|, \sigma = \sum_i q_i |j\rangle \langle j| \quad (1.3)$$

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

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

が従う。

(c) まず、古典系の場合、

$$Z = \int dS e^{-\beta H(S)}, Z_0 = \int dS e^{-\beta H_0(S)} \quad (1.5)$$

である。この時、状態空間 $S \in \Omega$ 上の二つの確率変数

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

に対して (a) を用いると

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

$$F = -\frac{\ln Z}{\beta} \text{ より}$$

$$-F + F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 \geq 0 \quad (1.8)$$

よって、次の式が従う。

$$F_\nu = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 \geq F \quad (1.9)$$

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。

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

よって、

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

$$\langle H_0 \rangle_0 = -N \Lambda m \text{ より}$$

$$m = \tanh \beta \Lambda \quad (1.12)$$

上の式を満たす $m = m_0$ とする。この時、

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = -J \frac{Nz}{2} m^2 - (B - \Lambda) Nm \quad (1.13)$$

$$F_\nu = -\frac{NzJ}{2} m^2 - (B - \Lambda) Nm + F_0 \quad (1.14)$$

と表せる。ここで、

$$m = \tanh \beta \Lambda = \frac{e^{\beta \Lambda} - e^{-\beta \Lambda}}{e^{\beta \Lambda} + e^{-\beta \Lambda}} \quad (1.15)$$

$$\Lambda = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} \quad (1.16)$$

である。

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

$$F_\nu = -\frac{NzJ}{2} m^2 - \left(B - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} \right) Nm - N \frac{\ln (\cosh \beta \Lambda)}{\beta} \quad (1.17)$$

$$\frac{1}{\cosh^2 \beta \Lambda} = 1 - \tanh^2 \beta \Lambda = 1 - m^2 \quad (1.18)$$

であるので、

$$\begin{aligned} f_\nu &= -\frac{zJ}{2} m^2 - \left(B - \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} \right) m + \frac{\ln (1-m^2)}{2\beta} \\ &= -\frac{zJ}{2} m^2 - Bm - \frac{1}{\beta} \left(\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right) \\ &= -\frac{zJ}{2} m^2 - Bm - T\sigma(m) \end{aligned} \quad (1.19)$$

を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_\nu}{\partial m} &= -zJm - B - \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{2} - \frac{1}{2} \frac{\ln}{1-m^2} + 1 - 1 \right) \\ &= -zJm - B - \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \right) = 0 \end{aligned} \quad (1.20)$$

$$\frac{1}{2\beta} \ln \frac{1-m}{1+m} = zJm + B \quad (1.21)$$

$$m = \tanh \beta (zJm + B) \quad (1.22)$$

が成立する。

・長所

まず、自己無撞着方程式を導出する過程の物理的意味が明瞭である。GBF-不等式は、近似なしに成立する理論的な式であり、最小エネルギー法という明確な物理的目標に向かって議論することが可能である。不必要な近似を入れる必要がなく、熱力学的な正当性が担保できると考えられる。

また、モデルを拡張、あるいは改変する際に、通常のアプローチでは再度複雑な議論を必要とする場合がある。しかし、変分法ではエネルギー密度さえ求められればあとは同一の手法により統一的に議論することが可能である。

2 階層格子上の Ising 模型と実空間繰り込み群

(a)

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

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

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

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

を得る。これより

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

$$e^{2K} = \frac{1+t}{1-t} \quad (2.5)$$

を用いて変形し、

$$t' = \frac{2t^2}{1-t+t^2+t^3} \quad (2.6)$$

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。

$$\frac{2t^2}{1-t+t^2+t^3} - t \quad (2.7)$$

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、

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

$$K_c = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) \quad (2.9)$$

固定点の近傍において、

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

と線形化することになると、

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

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

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

$K \propto 1/T$ 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。

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

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)

$$t = \tanh^2(4 \operatorname{arctanh}(t))\tag{2.15}$$

は、まず自明な解 $t = 0$ を持つ。これは下に示すグラフの概形より、安定点である。

Newton 法により初期値 $t = 0.1$ として解くと、 $0 < t$ なる解として $t = 0.0651738$ を得る。非自明な固定点 $t_c = 0.0651738$ について、これは不安定な固定点であり、

$$K_c^{(\text{MK})} = \operatorname{arctanh}(0.0651738) = 0.065266\tag{2.16}$$

$$\lambda_t^{(\text{MK})} = \left. \frac{dt'}{dt} \right|_{t=t_c} = 1.91773\tag{2.17}$$

$$y_t^{(\text{MK})} = \frac{\ln \lambda_t^{(\text{MK})}}{\ln 2} = 0.9394\nu^{(\text{MK})} = 1.0645\tag{2.18}$$

となる。

(e)

$$f(x) = \tanh^2(2^{d-1} \operatorname{arctanh} x) - x\tag{2.19}$$

として、 $f(x) = 0$ の根について考察する。

$d = 2 - 10$ に関して、プロットを行うと下の図 1 となる。

$f(x)$ は、 d が大きい時 $x \simeq 0$ と、 $0 \ll x$ の 2 種類の漸近的な挙動により議論できる。

■ $x \simeq 0$

$\tanh x \simeq x, \operatorname{arctanh} x \simeq x, \cosh(x) \simeq 1 + \frac{1}{4}x^2$ に留意すると、

$$f(x) \simeq \tanh^2(2^{d-1}x) - x \simeq 2^{2d-2}x^2 - x\tag{2.20}$$

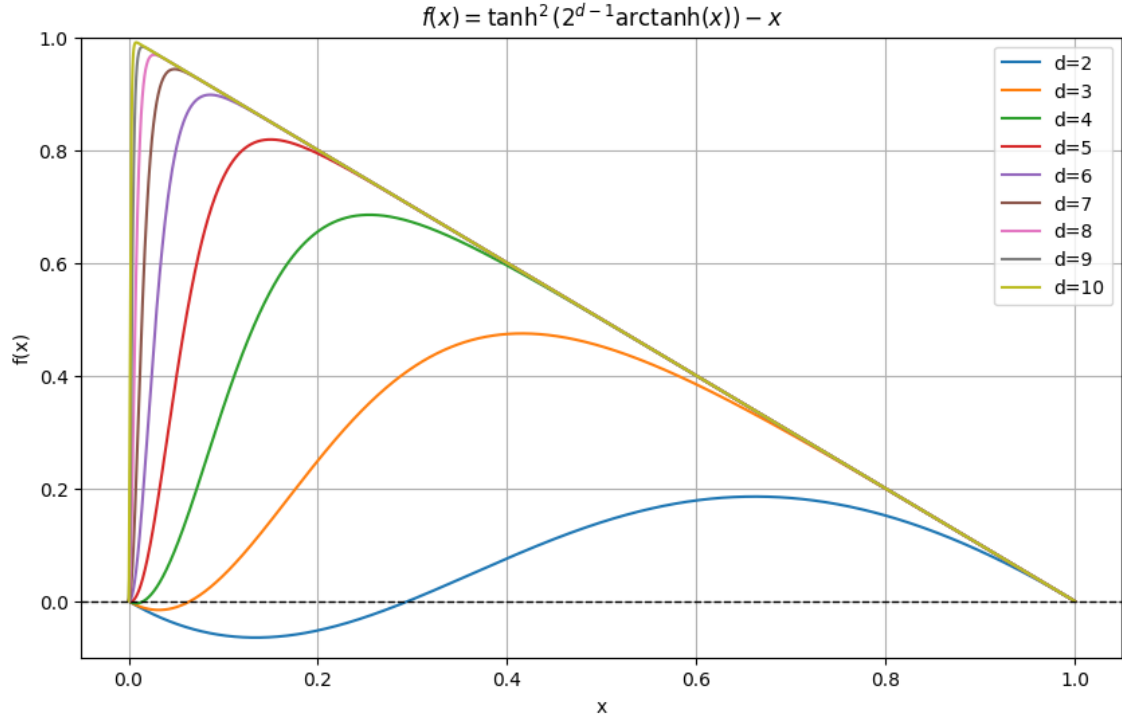


図 1: Overall plot

■ $0 \ll x$

$\operatorname{arctanh} x$ は急激に増加するため、特に d が大きければ $(2^{d-1} \operatorname{arctanh} x)$ は十分大きく、

$$f(x) \simeq 1 - x \quad (2.21)$$

となる。

以上の議論より、 $0 < x$ なる解について、

$$2^{2d-2} x_c^2 - x_c = 0 \quad (2.22)$$

$$x_c = 2^{2-2d} \quad (2.23)$$

と見積もられる。実際 $d = 3$ について、上の数値解 $0.0651738 \sim 2^{-4} = 0.0625$ である。

次に、解付近での微分係数 $f'(x_c)$ について議論する。図 2 より、 $f'(x_c) \sim 1$ が期待できる。実際、

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{\cosh^2(2^{d-1} \operatorname{arctanh} x)} \cdot 2^{d-1} \frac{1}{1-x^2} 2 \tanh(2^{d-1} \operatorname{arctanh} x) - 1 \\ &\simeq \frac{2^d}{1 + \frac{1}{4}((2^{d-1}x)^2)} 2^{d-1}x - 1 \\ &\simeq 2^{2d-1}x - 1 \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$f'(x_c) \simeq 2^{2d-1} \cdot 2^{2-2d} - 1 = 1 \quad (2.25)$$

である。

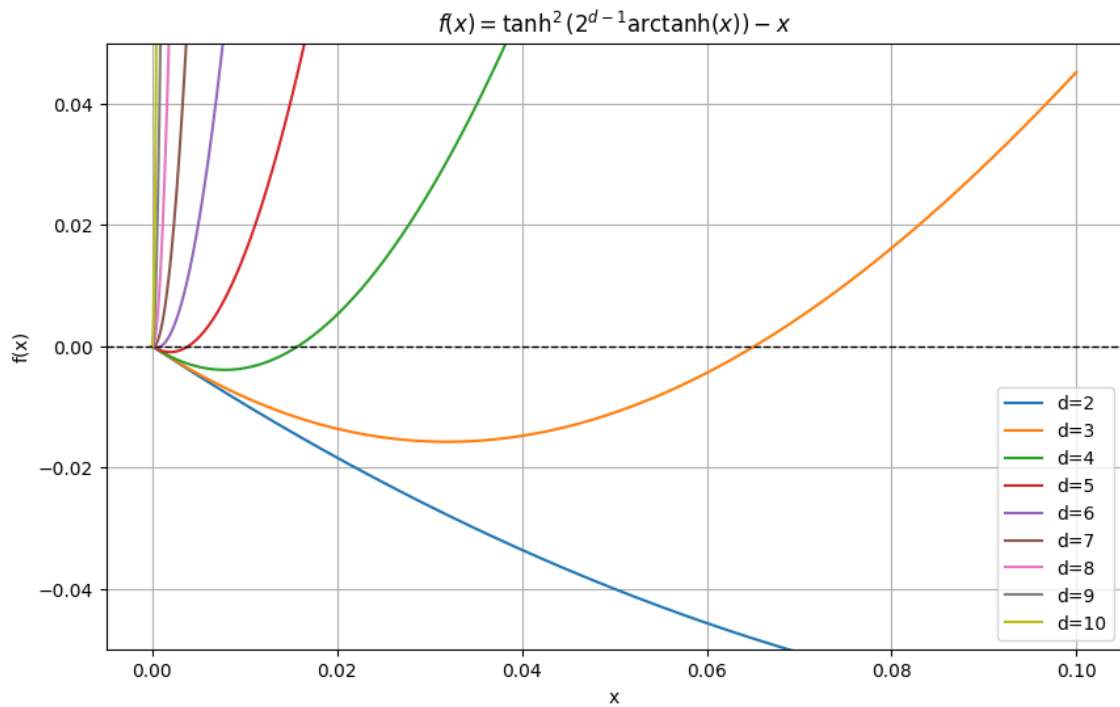


図 2: 解の拡大

これより

$$(i) \quad t_c^{\text{MK}}(d) \simeq 2^{2-2d} \quad (2.26)$$

なお、これは d について急激に 0 に収束するため、大きい d では数値的な解析が困難である。

$$(ii) \quad \lambda_t^{(\text{MK})}(d) \simeq f'(x_c) + 1 = 2 \quad (2.27)$$

$$y_t^{(\text{MK})}(d) = \frac{\ln \lambda_t^{(\text{MK})}(d)}{\ln 2} \simeq 1 \quad (2.28)$$

$$\nu^{(\text{MK})}(d) \simeq 1 \quad (2.29)$$

を得る。つまり平均場領域では、相関長臨界指数は $d \rightarrow \infty$ としてしまった場合と近似的に一致することになる。

3 量子 Ising 模型と Majorana chain

(a) 仮定の下で

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

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

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

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

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

$$[d_k, H] = \varepsilon_k d_k \quad (3.4)$$

となる。 d_k と γ_k の間の関係式を用いると、

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

を得る。 γ_i の係数を比較することによって

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

$i^j u_{k,j} = w_{k,j}$ と改めておくことによって

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

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、

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

$$\varepsilon_k = 4J \cos \alpha_k \quad (3.9)$$

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、

$$u_{k,j} \propto \sin \alpha_k \quad (3.10)$$

$$\sin (2N+1)\alpha_k = 0 \quad (3.11)$$

$$\alpha_k = \frac{k\pi}{2N+1} \quad (3.12)$$

となるので、

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

となる。ここで、 $\varepsilon_1 < \dots < \varepsilon_N$ とするため、あらためて

$$\varepsilon_k = 4J \sin \frac{k\pi}{2N+1} \quad (3.14)$$

とする。

(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

$$E_0 = -2J \sum_{k=1}^N \sin \frac{k\pi}{2N+1} = -2J \frac{\cos \frac{N\pi}{2(2N+1)} \sin \frac{(N+1)\pi}{2(2N+1)}}{\sin \frac{\pi}{2(2N+1)} - 1} = -J \left(\frac{1}{\sin \frac{\pi}{2(2N+1)}} - 1 \right) \quad (3.15)$$

$N \rightarrow \infty$ 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、 $x = \frac{\pi}{2(2N+1)}$ として

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

$$\frac{E_0}{N} = -J \left(\frac{4}{\pi} + \frac{1}{N} \left(\frac{2}{\pi} - 1 \right) + \frac{\pi}{24N^2} + O(N^{-3}) \right) \quad (3.17)$$

を得る。よって

$$e_0 = -\frac{4J}{\pi}, e_1 = -J \left(\frac{2}{\pi} - 1 \right), e_2 = -\frac{\pi J}{24} \quad (3.18)$$

(d) fermi 分布の式を用いると、

$$\langle d_k^\dagger d_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} \quad (3.19)$$

となる。これより、

$$\langle H \rangle = \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \left(\frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} - \frac{1}{2} \right) = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \frac{e^{\beta \varepsilon_k}}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} c(T) &= -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \frac{e^{\beta \varepsilon_k}}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} \right) = -\frac{1}{2N} \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{e^{\beta \varepsilon_k}}{e^{\beta \varepsilon_k} + 1} \\ &= \frac{1}{2N k_B T^2} \sum_{k=1}^N \frac{\varepsilon_k^2 e^{\beta \varepsilon_k}}{(e^{\beta \varepsilon_k} + 1)^2} \end{aligned} \quad (3.21)$$

これが比熱 $c(T)$ の表式となる。

まず、粒子数について古典極限 $N \rightarrow \infty$ をとると、和を積分で置き換えられる。

$$\varepsilon_k = 4J \sin \frac{k\pi}{2N+1} = 4J \sin q \quad (3.22)$$

$$\frac{1}{2N k_B T^2} \sum_{k=1}^N \frac{\varepsilon_k^2 e^{\beta \varepsilon_k}}{(e^{\beta \varepsilon_k} + 1)^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2k_B T^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dq \frac{(4J \sin q)^2}{(e^{4J\beta \sin q} + 1)^2} \frac{2}{\pi} \quad (3.23)$$

さらに、低温極限 $\beta \rightarrow \infty$ では、小さい q のみが寄与する。 $\sin q \simeq q$ とした上で、積分区間を $0 \rightarrow \infty$ としても影響は十分に小さく、

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2k_B T^2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dq \frac{(4J \sin q)^2}{(e^{4J\beta \sin q} + 1)^2} \frac{2}{\pi} &\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \frac{k_B}{\pi} \int_0^{\infty} dq \frac{(4\beta J q)^2}{(e^{4J\beta q} + 1)^2} \\
 &= \frac{k_B}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{x^2}{(e^x + 1)^2} \frac{1}{4\beta J} \\
 &= \frac{k_B^2 T}{4\pi J} \left[-\frac{x^2}{e^x + 1} \right] \int_0^{\infty} dx \frac{2x}{e^x + 1} \\
 &= \frac{2k_B^2 T}{4\pi J} \frac{\pi^2}{12} \\
 &= \frac{\pi^2 k_B^2 T}{24\pi J}
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

よって、

$$\gamma = \frac{\pi^2 k_B^2}{24J} \tag{3.25}$$

として、 $c(T) \propto \gamma T$ である。