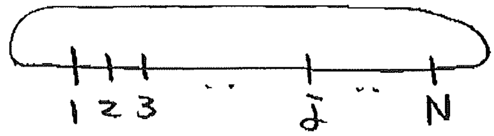
数学特論Ⅰ レポート（1回目）

1次元 Ising 模型



各点 j $(1 \leq j \leq N)$ に
スピン $s_j = \pm 1$ をのせる配置 $s = (s_1, s_2, \cdots, s_N)$ の
エネルギーを $E(s) = -E \sum_{j=1}^{N} s_j s_{j+1} - H \sum_{j=1}^{N} s_j$ とする。
なお $E > 0$，$H \in \mathbb{R}$ とする。

分配関数 $Z_N = \sum_{s} e^{-\beta E(s)}$ と

自由エネルギー $-\beta \cdot f = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log Z_N$ をもとめよう。

なお $\beta = 1/kT$ （k：ボルツマン定数，T：温度）とする。

コメント

$H = 0$ のときは授業でやった。
1次元 Ising 模型は外場 H というパラメーターを
簡単に入れられる。

	$H=0$	$H \neq 0$
1次元 Ising	解けた	解けた
2次元 Ising	解けた	未解決
N次元 Ising	未解決	未解決

問1、

$$Z_N = \mathrm{Tr}(V^N) \quad , \quad V = \begin{bmatrix} e^{\beta E+\beta H} & e^{-\beta E} \\ e^{-\beta E} & e^{\beta E-\beta H} \end{bmatrix}$$

を示せ。

問2、

$$Z_N = (\lambda_+)^N + (\lambda_-)^N$$

$$\lambda_\pm = e^{\beta E}\cosh(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta E}\sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta E}}$$

を示せ。

問3、

$$-\beta \cdot f = \log\left(e^{\beta E}\cosh(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta E}\sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta E}}\right)$$

を示せ。

(解答)

問1、
$$Z_N = \sum_S e^{-\beta E(S)}$$
$$= \sum_S \exp\left(\beta E \sum_{j=1}^{N} s_j s_{j+1} + \beta H \sum_{j=1}^{N} s_j\right)$$
$$= \sum_S \prod_{j=1}^{N} \exp\left(\beta E s_j s_{j+1} + \frac{\beta H}{2}(s_j + s_{j+1})\right)$$

$V_{t_1,t_2} = \exp\left(\beta E t_1 t_2 + \frac{\beta H}{2}(t_1+t_2)\right)$ と略記すれば、

$$Z_N = \sum_S \prod_{j=1}^{N} V_{s_j, s_{j+1}}$$
$$= \sum_{s_1}\sum_{s_2}\cdots\sum_{s_N} V_{s_1 s_2} V_{s_2 s_3} \cdots V_{s_{N-1} s_N} V_{s_N s_1}$$

と書ける。

2次行列 V を

$$V = \begin{pmatrix} V_{++} & V_{+-} \\ V_{-+} & V_{--} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} e^{\beta E + \beta H} & e^{-\beta E} \\ \hline e^{-\beta H} & e^{\beta E - \beta H} \end{array}\right)$$

と定めれば上の式は、

$\underline{Z_N = \mathrm{Tr}(V^N)}$ とまとまる。

問2、行列Vの固有値を調べる.

固有方程式

$$|\lambda - V| = \begin{vmatrix} \lambda - e^{\beta E + \beta H} & -e^{-\beta E} \\ -e^{-\beta E} & \lambda - e^{\beta E - \beta H} \end{vmatrix}$$

$$= \lambda^2 - e^{\beta E}(e^{\beta H} + e^{-\beta H}) + e^{2\beta E} - e^{-2\beta E} = 0$$

解の公式により、

$$\lambda = \frac{1}{2}\left(e^{\beta E}(e^{\beta H} + e^{-\beta H}) \pm \sqrt{D}\right)$$

$$D = e^{2\beta E}(e^{\beta H} - e^{-\beta H})^2 + 4e^{-2\beta E} > 0$$

$D \neq 0$ なので解は2つあり、

$$\underline{\lambda_\pm = e^{\beta E}\cosh(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta E}\sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta E}}}\ .$$

2次行列が相異なる2つの固有値をもつので対角化可能.

つまりある可逆行列Pがあり、

$$P^{-1}VP = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad となる.$$

$$\begin{aligned} Z_N &= \mathrm{Tr}(V^N) \\ &= \mathrm{Tr}(P^{-1}V^N P) \\ &= \mathrm{Tr}((P^{-1}VP)^N) \\ &= \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix}\right) = \underline{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \end{aligned}$$

問3、

Vの2つの固有値

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta E}\cosh(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta E}\sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta E}}$$

には大小関係がある。

$$|\lambda_+| > |\lambda_-|.$$

$$\frac{1}{N}\log Z_N = \frac{1}{N}\log(\lambda_+^N + \lambda_-^N)$$

$$= \log\lambda_+ + \frac{1}{N}\log\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right)$$

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \to 0 \quad (N \to \infty)$$ であるから、

$$-\beta \cdot f = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\log Z_N = \log\lambda_+$$

つまり、

$$\underline{-\beta \cdot f = \log\left(e^{\beta E}\cosh(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta E}\sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta E}}\right).}$$

問4

$$V_1 = \exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)$$ とする.

$$(V_1)_{s^{(1)}, s^{(2)}} = \delta_{s^{(1)}, s^{(2)}} \exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} s_j^{(1)} s_{j+1}^{(2)} \right)$$

を示せ.

ただし、$s^{(j)} = \begin{pmatrix} s_1^{(j)} \\ s_2^{(j)} \\ \vdots \\ s_M^{(j)} \end{pmatrix}$ $(s_i^{(j)} = \pm)$ とする.

$$(\sigma^z)_{s,t} = s\,\delta_{s,t} = t\,\delta_{s,t} \quad (s, t = \pm)$$

であるから、

$$\left(\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)_{s^{(1)}, s^{(2)}}$$

$$= (\sigma_j^z)_{s_j^{(1)} s_j^{(2)}} \times (\sigma_{j+1}^z)_{s_{j+1}^{(1)} s_{j+1}^{(2)}}$$

$$= s_j^{(1)} \cdot s_{j+1}^{(2)} \quad \delta_{s_j^{(1)} s_j^{(2)}} \cdot \delta_{s_{j+1}^{(1)} s_{j+1}^{(2)}}$$

$$\exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)$$

$$= \prod_{j=1}^{M} \exp\left(K_1 \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)$$

は対角行列であり、

$$\exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)_{s^{(1)}, s^{(2)}}$$

$$= \prod_{j=1}^{M} \exp\left(K_1 \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right)_{s^{(1)}, s^{(2)}}$$

$$= \prod_{j=1}^{M} \exp\left(K_1 s_j^{(1)} s_{j+1}^{(2)} \right) \times \delta_{s_j^{(1)} s_j^{(2)}} \delta_{s_{j+1}^{(1)} s_{j+1}^{(2)}}$$

$$= \prod_{j=1}^{M} \exp\left(K_1 s_j^{(1)} s_{j+1}^{(2)} \right) \times \delta_{s^{(1)}, s^{(2)}}$$

$$= \delta_{s^{(1)} s^{(2)}} \exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} s_j^{(1)} s_{j+1}^{(2)} \right).$$

問5

$V_1 V_2 \neq V_2 V_1$ を示せ.

$$\begin{cases} V_1 = \exp\left(K_1 \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z\right) \\ V_2 = (2\sinh(2K_2))^{\frac{M}{2}} \exp\left(K_2^* \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^x\right) \end{cases}$$

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} H_1 = \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \\ H_2 = \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^x \end{cases}$$ とおく.

$\sigma^x \sigma^z = -\sigma^z \sigma^x$ であるから、

$$H_2 \cdot H_1 = \sum_{j=1}^{M} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \left\{ (\sigma_j^x + \sigma_{j+1}^x) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j, j+1}}^{M} \sigma_k^x \right\}$$

$$= \sum_{j=1}^{M} \left\{ -(\sigma_j^x + \sigma_{j+1}^x) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j, j+1}}^{M} \sigma_k^x \right\} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$$

一方、

$$H_1 \cdot H_2 = \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=1}^{M} \sigma_k^x \cdot \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$$

$$= \sum_{j=1}^{M} \left\{ +(\sigma_j^x + \sigma_{j+1}^x) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j, j+1}}^{M} \sigma_k^x \right\} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$$

よって $H_1 H_2 \neq H_2 H_1$

さて、

$$V_1V_2 = (1 + K_1H_1 + O(K_1^2)) \times (1 + K_2^*H_2 + O(K_2^{*2}))$$
$$\times (2\sinh(2K_2))^{\frac{M}{2}}$$

$$= (2\sinh(2K_2))^{\frac{M}{2}} (1 + K_1H_1 + K_2^*H_2 + K_1K_2^* H_1H_2 + \cdots)$$

$$V_2V_1 = (2\sinh(2K_2))^{\frac{M}{2}} (1 + K_1H_1 + K_2^*H_2 + K_1K_2^* \cdot H_2H_1 + \cdots)$$

よって $\quad V_1V_2 \neq V_2V_1$.

問6.

$$\sigma_m^y \cdot W^{(\pm)} \subset W^{(\mp)}$$
$$\sigma_m^z\, W^{(\pm)} \subset W^{(\mp)}$$ を示せ.

$$\begin{cases} W = (\mathbb{C}^2)^{\otimes M} \\ \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

$$\varepsilon = \sigma_1^x \sigma_2^x \cdots \sigma_M^x$$

$$W^{(\pm)} = \{ w \in W \mid \varepsilon w = \pm w \}$$

$v_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $v_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ とする.

$u_\pm = v_+ \pm v_-$ とおく.

$$\begin{cases} \sigma^x u_\varepsilon = \varepsilon u_\varepsilon \\ \sigma^y u_\varepsilon = i\varepsilon\, u_{-\varepsilon} \qquad (\varepsilon = \pm) \\ \sigma^z u_\varepsilon = u_{-\varepsilon} \end{cases}$$

$u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M}$ $(\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_M = \pm)$ は W の basis であり,

$$W^{(\pm)} = \langle w = u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M}\ (\varepsilon w = \pm w) \rangle_{\mathbb{C}}$$
$$= \langle u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M}\ (\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cdots \varepsilon_M = \pm) \rangle_{\mathbb{C}}$$

さて

$$\begin{cases} \sigma_m^y\, u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} = i\varepsilon_m \cdot u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{-\varepsilon_m} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} \\ \sigma_m^z\, u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} = u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{-\varepsilon_m} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} \end{cases}$$

そえ字の1つ u_{ε_m} が $u_{-\varepsilon_m}$ に変わることに注意する.

よって

$$\begin{cases} \varepsilon \cdot \sigma_m^y u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} = -\varepsilon_1 \cdots \varepsilon_M \, \sigma_m^y u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} \\ \varepsilon \cdot \sigma_m^z u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} = -\varepsilon_1 \cdots \varepsilon_M \, \sigma_m^z u_{\varepsilon_1} \otimes \cdots \otimes u_{\varepsilon_M} \end{cases}$$

よって

$$\begin{aligned} \sigma_m^y W^{(\pm)} &= \{ \sigma_m^y w \ (w \in W) \mid \varepsilon w = \pm w \} \\ &= \{ \sigma_m^y w \ (w \in W) \mid \varepsilon \sigma_m^y w = \mp \sigma_m^y \cdot w \} \\ &= \{ w \in W \mid \varepsilon w = \mp w \} = W^{(\mp)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_m^z W^{(\pm)} &= \{ \sigma_m^z w \ (w \in W) \mid \varepsilon w = \pm w \} \\ &= \{ \sigma_m^z w \ (w \in W) \mid \varepsilon \sigma_m^z w = \mp \sigma_m^z w \} \\ &= \{ w \in W \mid \varepsilon w = \mp w \} = W^{(\mp)} \end{aligned}$$