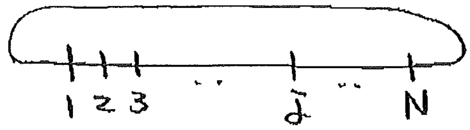
数学特論Ⅰ レポート（1回目）

1次元Ising模型



各点 j $(1\leq j\leq N)$ に
スピン $s_j=\pm1$ 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.

	$H=0$	$H\neq0$
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、

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

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

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、

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