

転送行列法

香取研究室 樋口将

◆ N個のスピン鎖をもつ1次元イジングモデルを考える。
 ハミルトニアン $H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_{i=1}^N \sigma_i$
 ※ J: 結合定数, B: 外磁場
 周期的境界条件 $\sigma_i = \sigma_{N+i}$

◆ 転送行列法は、スピン配置の和を行列の積で書けるので、
 分配関数は以下のようになる。 $Z_N = \sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma_1 | V(\sigma_1, \sigma_2) | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | V(\sigma_2, \sigma_3) | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | V(\sigma_N, \sigma_1) | \sigma_1 \rangle$
 ※ $\langle \sigma | V(\sigma, \sigma') | \sigma' \rangle = \exp[k\sigma\sigma' + h\frac{(\sigma+\sigma')}{2}]$,
 $k = \beta J, h = \beta B$

◆ Vは2×2行列で表される。
 ※ スピン基底を以下のように定義する。

$$|\sigma_i\rangle = \begin{cases} |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdots \sigma_i = +1 \text{ のとき} \\ |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \cdots \sigma_i = -1 \text{ のとき} \end{cases}$$

$$\langle \sigma_i| = \begin{cases} \langle +| = (1 \ 0) \cdots \sigma_i = +1 \text{ のとき} \\ \langle -| = (0 \ 1) \cdots \sigma_i = -1 \text{ のとき} \end{cases}$$

すると、行列Vを下のように表すことができる。

$$V = \begin{pmatrix} \langle +| e^{\beta H} |+\rangle & \langle +| e^{\beta H} |-\rangle \\ \langle -| e^{\beta H} |+\rangle & \langle -| e^{\beta H} |-\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{k+h} & e^{-k} \\ e^{-k} & e^{k-h} \end{pmatrix}$$

ブラケットの完全性 $\sum_{\sigma_i = \pm 1} |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| = E$ を用いると、
 $Z_N = \sum_{\sigma_i = \pm 1} \langle \sigma_1 | V^N | \sigma_1 \rangle$
 $= \langle + | V^N | + \rangle + \langle - | V^N | - \rangle$
 $= \text{Tr } V^N$

トレースは基底の選び方によらないので、Vが対角行列になるようにユニタリ行列Uを用いて、Vの固有値 λ_+, λ_- が対角成分に並ぶように変換する。

$$U^{-1} V U = D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \quad \text{※ } U = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \lambda_+ > \lambda_-$$

対角行列Dを用いて $\text{Tr } V^N$ を書くと以下ようになる。
 $\text{Tr } V^N = \text{Tr } U U^{-1} V^N U = \text{Tr } U^{-1} V^N U = \text{Tr } D = \lambda_+ + \lambda_-$

固有値 λ_+, λ_- を求めるために固有方程式 $|V - \lambda E| = 0$ を解く。

$$|V - \lambda E| = \begin{vmatrix} e^{k+h} - \lambda & e^{-k} \\ e^{-k} & e^{k-h} - \lambda \end{vmatrix} = (e^{k+h} - \lambda)(e^{k-h} - \lambda) - e^{-2k} = 0$$

$$\lambda_{\pm} = e^k \cosh h \pm \sqrt{e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k)}$$

スピン一つあたりの自由エネルギーFを考える。

$$F = -\frac{1}{\beta N} \ln(\lambda_+^N + \lambda_-^N)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \left\{ \ln \lambda_+ + \frac{1}{N} \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\}$$

$N \rightarrow \infty$ ととると、 $F = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+$ となるので、

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \{ e^k \cosh h + \sqrt{e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k)} \}$$

自由エネルギーFをBで微分することで磁化の平均を求めることができる。

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{1}{\beta} \frac{e^k \beta \sinh h + \frac{1}{2} \{ e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k) \}^{-\frac{1}{2}} e^{2k} 2\beta \cosh h \sinh h}{e^k \cosh h + \sqrt{e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k)}}$$

$$= \frac{e^k \sinh h \times 2 \sinh(2k)}{2 \sinh(2k) \sqrt{e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k)}} = \frac{e^k \sinh h}{\sqrt{e^{2k} \cosh^2 h - 2 \sinh(2k)}}$$

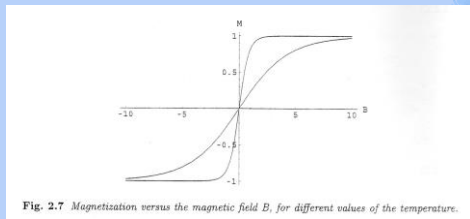


Fig. 2.7 Magnetization versus the magnetic field B, for different values of the temperature.

Tが有限のときは相転移を起こさないが、 $T \rightarrow 0$ ととると磁化は不連続となる。式で表すと、

$$\langle \sigma \rangle = \varepsilon(B) \quad \text{※ } \varepsilon(x) = \begin{cases} 1 & (\text{if } x > 0) \\ 0 & (\text{if } x = 0) \\ -1 & (\text{if } x < 0) \end{cases}$$

スピンの相関関数の計算

相関子を以下のようにとる。

$$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_1 V(\sigma_1, \sigma_2) \cdots \sigma_{r+1} V(\sigma_r, \sigma_{r+1}) \cdots V(\sigma_N, \sigma_1)$$

$S_{\sigma, \sigma'} = \sigma \delta_{\sigma, \sigma'}$ を満たす対角行列 $S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ を導入して書き換えると以下ようになる。

$$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} (S V^r S V^{N-r})$$

また、 σ の期待値は、 $\langle \sigma \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} S V^N$ であたえられる。

SにVを対角化するユニタリ行列を用いることで、

$$U^{-1} S U = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi \end{pmatrix}$$

$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle$ を対角したVで表すために各行列の間に $U U^{-1} = E$ を挟み込んで、

$$\langle \sigma_1 \sigma_{r+1} \rangle = Z_N^{-1} \times \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^r & 0 \\ 0 & \lambda_-^r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-r} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-r} \end{pmatrix} \right\}$$

$$= Z_N^{-1} \{ (\lambda_+^N + \lambda_-^N) \cos^2 2\varphi + (\lambda_+^r \lambda_-^{N-r} + \lambda_+^{N-r} \lambda_-^r) \sin^2 2\varphi \}$$

※ $N \rightarrow \infty$ ととると

$$\rightarrow \cos^2 2\varphi + \sin^2 2\varphi \left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-} \right)^r$$

同様に $\langle \sigma \rangle$ も計算し、

$$\langle \sigma \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} \left\{ \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ -\sin 2\varphi & -\cos 2\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \right\}$$

$$= Z_N^{-1} \{ (\lambda_+^N - \lambda_-^N) \cos 2\varphi \}$$

$$= \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \cos 2\varphi = \frac{1 - \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N}{1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N} \cos 2\varphi \rightarrow \cos 2\varphi$$

※ $N \rightarrow \infty$ ととった

したがって2点における相関関数は、

$$G_c^{(2)}(r) = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

$$= \cos^2 2\varphi + \sin^2 2\varphi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r - \cos^2 \varphi$$

$$= \sin^2 2\varphi \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r$$

参考文献

・Statistical Field Theory(2010) Giuseppe Mussardo p51-p57
 ・ときわ台学 (1次元イジングモデル)
<http://f-denshi.com/000okite/100tokei/t121.html>