Точно-решаемые модели
статистической механики *(2018)*

Пугай Я.П. ИТФ РАН

Продолжение 12. XXZ модель, координатный анзатц Бете III

Мы продолжаем изучать диагонализацию гамильтонина XXZ модели в координатном анзатце Бете.

$$H_{XXZ} = -\frac{1}{2}\sum_{1}^{n}\left(\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y + \Delta(\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1)\right) .$$

Анзатц для многочастичного случая со спином $\frac{n}{2} - l$ строится как естетсвенное обобщение двучастичного случая. Рассмотрим возбуждения над псевдовакуумом

$$\Psi_{j_1 j_2 \cdots j_l} = \sigma_{j_1}^- \cdots \sigma_{j_l}^- \Psi_0 .$$

Возьмем линейную кобминацию таких векторов. Снова попытаемся найти решения в виде бегущих волн

$$\Phi(k_1, \ldots, k_l) = \sum_{1 \le j_1 < j_2 \cdots < j_l \le n} \sum_{p \in S_l} A_{p_1 \cdots p_l} e^{\sum_{i=1}^{l} k_{p_i} j_i} \Psi_{j_1 j_2 \cdots j_l} .$$

Для решения проблемы на собственные вектора

$$H_{XXZ}\Phi = \varepsilon\Phi$$

с энергией и имульсом

$$\varepsilon = \sum_i \varepsilon_{k_i} , \quad k = \sum_i k_i ,$$
$$\varepsilon_k = 2(\Delta - \cos k) ,$$

необходимо наложить условие двухчастичной матрицы рассеяния.

$$S(k_i, k_j) = \frac{A_{\ldots ij \ldots}(k_1, \ldots, k_l)}{A_{\ldots ji \ldots}(k_1, \ldots k_l)} = -\frac{1 + e^{i(k_i + k_j)} - 2\Delta e^{ik_i}}{1 + e^{i(k_i + k_j)} - 2\Delta e^{ik_j}} .$$

Общая матрица рассеяния факторизуется в произведение двухчастичных. Как и ранее, мы также накладываем условие периодичности

$$\frac{A_{p_1 p_2 \cdots p_l}}{A_{p_2 \cdots p_l p_1}} = e^{ik_{p_1} n} .$$

Результирующие уравнения анзатца Бете тогда имеют вид следующей системы трансцендентных уравнений

$$e^{ik_i n} = \prod_{j=1, j\neq i}^{l} S(k_i, k_j)\,, \quad i = 1, \ldots, l$$

В быстротной параметризации

$$\begin{aligned} &k_j = k(u_j)\,, \Delta = -\cos\lambda\,, \\ &e^{ik(u)} = \frac{\sin\left(\frac{\lambda}{2} + u\right)}{\sin\left(\frac{\lambda}{2} - u\right)}\,, \\ &S(k_1, k_2) = -\frac{\sin\left(\lambda + (u_1 - u_2)\right)}{\sin\left(\lambda - (u_1 - u_2)\right)} \end{aligned}$$

мы имеем следующий вид для уравнений анзатца Бете

$$\left(\frac{\sin\left(\frac{\lambda}{2} + u_i\right)}{\sin\left(\frac{\lambda}{2} - u_i\right)}\right)^n = (-1)^{l-1} \prod_{j=1, j\neq i}^{l} \frac{\sin\left(\lambda + (u_i - u_j)\right)}{\sin\left(\lambda - (u_i - u_j)\right)}$$

Эти нелинейные уравнения на возможные значения быстрот u_j трудно анализировать аналитически за исключением некоторых частных случаев. Тем не менее, можно пытаться написать интегральные уравнения в непрерывном пределе, которые, при некоторых гипотезах, позволяют найти свободную энергию. Для удобства логарифмирования, введем обозначение

$$S(k(u_1), k(u_2)) = -\frac{\sin\left(\lambda + (u_1 - u_2)\right)}{\sin\left(\lambda - (u_1 - u_2)\right)} = e^{i\theta(u_1 - u_2)}\,, \quad \theta(0) = 0.$$

Беря логарифмическую форму уравнений анзатца Бете

$$e^{ink(u_i)} = e^{i\sum_{j=1}^{l}\theta(v_i - v_j)}$$

мы имеем

$$nk(v_i) = 2\pi I_i + \sum_{j=1}^{l} \theta(v_i - v_j)\,.$$

Предположим, что $I_{i+1} - I_i = 1$ для основного состояния, причем наибольшее собственное значение получается в ситуации, когда корни расположены симметрично относительно нуля. Вычитая из уравнения для $i+1$ уравнение для i, получаем

$$\frac{k(v_{i+1}) - k(v_i)}{v_{i+1} - v_i} = \frac{2\pi}{n(v_{i+1} - v_i)} + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{l} \frac{\theta(v_{i+1} - v_j) - \theta(v_i - v_j)}{v_{i+1} - v_i}\,.$$

Будем считать, что корни анзатца Бете в пределе $n \to \infty$ залегают плотно и существует предел плотности распределения корней

$$\rho(v) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n(v_{i+1} - v_i)}$$

Тогда в термодинамическом пределе мы получаем следующее интегральное уравнение для уравнения анзатца Бете для основного состояния

$$\frac{dk(v)}{dv} = 2\pi\rho(v) + \int_{-\infty}^{\infty} dv' \frac{d\theta(v - v')}{dv}\rho(v')\,.$$

Используя преобразование Фурье,

$$\rho(v) = \int ds \rho_s e^{isv}$$

и зная фурье образы для известных функций $\frac{dk(v)}{dv}$ и $\frac{d\theta(v)}{dv}$, получаем, что в пределах верности используемых гиоптез, плотность корней равна

$$\rho_s = \frac{1}{4\pi \cosh \frac{\lambda}{2} s}$$

Это решение уравнений анзатца Бете надо подставить в выражение для (наибольшего) собственного значения Гамильтониана цепочки. Мы имеем в термодинамическом пределе следующее выражение для свободной энергии на узел решетки

$$f(v) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \Lambda^n(v) = \log a(v) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{s} \frac{\sinh(2vs)\sinh(\pi - \lambda)s}{2\sinh \pi s \cosh \lambda s}$$

1 Алгебраический анзатц Бете

Координатный анзатц Бете, введенный Бете для XXX цепочки является очень простым и иллюстративным. Тем не менее, полезным является и прямое вычисление собственных векторов в более абстрактной формулировке, основанной на уравнении Янга-Бакстера и соответствующей алгебре матриц мондромии - так называемый алгебраический анзатц Бете. При этом, ответы будут полностью совпдать.

Возвратимся к условию коммутации матриц монодромии. Мы рассматриваем шести-вершинную модель, которой R-матрица задана как

$$a(u|\lambda) = \sin(\lambda - u)\,,$$
$$b(u|\lambda) = \sin(u)\,,$$

$$c(u|\lambda) = \sin(\lambda)\,.$$

Эта параметризация удобна для описания режима $|\Delta| < 1$.[1] В силу уравнения Янга-Бакстера соответствующие трансфер матрицы коммутируют

$$T(u)T(v) = T(v)T(u)\,.$$

Можно решаем задачу о даигонализации трансфер матриц путем использования коммутационных соотношений в алгебре операторов матриц монодромий

$$R_{12}(v-u)L_1(v)L_2(u) = L_2(u)L_1(v)R_{12}(v-u)\,.$$

Запишем данное соотношение явно

$$\sum_{\mu\mu'} R^{\mu\mu'}_{\sigma_1\sigma_1'}(v-u)L^{\sigma_2'}_{\mu'}(v)L^{\sigma_2}_{\mu}(u) = \sum_{\mu\mu'} L^{\mu'}_{\sigma_1'}(u)L^{\mu'}_{\sigma_1}(v)R^{\sigma_2'\sigma_2}_{\mu\mu'}(v-u)\,.$$

Данное соотношение должно выполняться для произвольных наборов внешних индексов $(\sigma_1, \sigma_1', \sigma_2, \sigma_2')$. Тем самым определяется алгебра операторов

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L^+_+ & L^-_+ \\ L^+_- & L^-_- \end{pmatrix}$$

При этом мы помним, что элементы A, B, C, D являются не числами, а операторами, действуюшими на квантовом пространстве спиновых переменных

$$\mathcal{H} = \otimes_1^n C^2$$

и могут не коммутировать между собою. Явный вид коммутационных соотношений просто рассматривается перебором всех возможных значений $(\sigma_1, \sigma_1', \sigma_2, \sigma_2')$. Например, для $(++++)$ мы имеем условие

$$\sum_{\mu\mu'} R^{\mu\mu'}_{++}(v-u)L^+_{\mu'}(v)L^+_{\mu}(u) = \sum_{\mu\mu'} L^{\mu'}_{+}(u)L^{\mu'}_{+}(v)R^{++}_{\mu\mu'}(v-u)\,.$$

С учетом вида R матрицы для шестивершинной модели, получим простое соотношение для коммутации операторов $A(u)$ при действии на $\mathcal{H}$

$$a(v-u)A(v)A(u) = A(u)A(v)a(v-u)\,.$$

[1] Для случая $\Delta < -1$ существует схожая параметризация в терминах гиперболических функций

$$\begin{aligned} a(u|\lambda) &= \sinh(\lambda-u)\,, \\ b(u|\lambda) &= \sinh(u)\,, \\ c(u|\lambda) &= \sinh(\lambda)\,. \end{aligned}$$

Сократив функции $a(u)$ видим, что это соответствует коммутации операторов $A(u)$ между собою. Аналогично, можно выписать в явном виде коммутационные соотношения для всей алгебры операторов.

Важным свойством этой алгебры является ассоциативность, следующая из уравнения Янга-Бакстера для структурных функций, определяющих соотношения алгебры.

В нашем случае будут важны следующие частные коммутационные соотношения

$$\begin{aligned}
&B(v)B(u) = B(u)B(v)\,,\\
&a(v-u)B(v)A(u) = A(u)B(v)b(v-u) + B(u)A(v)c(v-u)\,,\\
&a(u-v)B(v)D(u) = D(u)B(v)b(u-v) + B(u)D(v)c(u-v)\,.
\end{aligned}$$

Первый вопрос, это как построить псевдовакуум. Так как трансфер матрица и XXZ гамильтониан коммутируют, то естественно взять его, как и в случае цепочки, в виде

$$\Psi_0 = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

Напомним, что нам нужно диагонализвать трансфер матрицу, которая есть след матрицы монодромии по вспомогательному пространству

$$T = A(u) + D(u)\,.$$

Как действуют эти операторы на векторе Ψ_0? Рассмотрим R матрицу, действующую в пространстве $R_{0,j}$ выделив явно компоненты во вспомогательном пространстве $\mathcal{H}_0$ и оставим неявными компоненты в спиновом пространстве $\mathcal{H}_j$.

$$\begin{pmatrix} a & & & \\ & b & c & \\ & c & b & \\ & & & a \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2} I_j + \frac{a-b}{2}\sigma_j^z & c\sigma_j^- \\ c\sigma_j^+ & \frac{a+b}{2} I_j + \frac{a-b}{2}\sigma_j^z \end{pmatrix}.$$

Напомним, что

$$R_{0j} : \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_j \longrightarrow \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_j$$

В записи, представленной выше, операторы I_j, σ_j^z и т.д. действуют в j-ой компоненте квантового простраства $\mathcal{H}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_j \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n$. В записи выше мы явно выделили матрицу в вспомогательном пространстве $\mathcal{H}_0$

$$(R_{0j})^{\mu+}_{\sigma+} = (\frac{a+b}{2} I_j + \frac{a-b}{2}\sigma_j^z)^{\mu}_{\sigma}\,,$$

$$
\begin{aligned}
&(R_{0j})^{\mu-}_{\sigma+} = (c\sigma^-_j)^\mu_\sigma\,,\\
&(R_{0j})^{\mu+}_{\sigma-} = (c\sigma^+_j)^\mu_\sigma\,,\\
&(R_{0j})^{\mu-}_{\sigma-} = (\frac{a+b}{2}I_j - \frac{a-b}{2}\sigma^z_j)^\mu_\sigma\,,
\end{aligned}
$$

В частности, при действии на вектор $v^+ = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ мы находим, что

$$
\begin{aligned}
&(\frac{a+b}{2}I_j + \frac{a-b}{2}\sigma^z_j)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = a\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\,,\\
&(c\sigma^-_j)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\,,\\
&(c\sigma^+_j)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = 0\,,\\
&(\frac{a+b}{2}I_j - \frac{a-b}{2}\sigma^z_j)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = b\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Рассмотрим теперь произведение двух R-матриц $R_{0,j}R_{0,j+1}$ как матрицу операторов в вспомогательном пространстве $\mathcal{H}_0$. Компонента ++ будет иметь вид тензорного произведения матриц, действующих в пространстве $\mathcal{H}_j \otimes \mathcal{H}_{j+1}$

$$
\begin{aligned}
&(R_{0,j}R_{0,j+1})^+_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1} =\\
&= (\frac{a+b}{2}I_j + \frac{a-b}{2}\sigma^z_j)(\frac{a+b}{2}I_{j+1} + \frac{a-b}{2}\sigma^z_{j+1})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1} +\\
&+(c\sigma^-_j)(c\sigma^+_{j+1})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1} = a^2\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1}
\end{aligned}
$$

Так как σ^+_{j+1} действует нулем на вектор v^+, то второй член исчезает и (++) компонента действует диагонально. Аналогично, мы прибываем к утверждению, что

$$
(R_{0,j}R_{0,j+1})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1} = \begin{pmatrix}a^2 & *\\ 0 & b^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_j \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{j+1}\,.
$$

Повторяя процедуру n раз, мы получаем, что при действии на псевдовакуум

$$
\begin{aligned}
&A(u)\Psi_0 = a^n(u)\Psi_0\,,\\
&D(u)\Psi_0 = b^n(u)\Psi_0\,,
\end{aligned}
$$

$$C(u)\Psi_0 = 0\,.$$

В ситуации, где мы стартуем с R-матрицы, не имея явной решеточной реализации модели, подобные соотношения нужно постулировать.

Таким образом, на вектор Ψ_0 наша матрица монодромии действует как верхне-треугольная матрица,

$$L\Psi_0 = \begin{pmatrix} a^n & * \\ 0 & b^n \end{pmatrix}.$$

Соответственно, для след этой матрицы

$$Tr_0(L(u)) = A(u) + D(u)$$

псевдовакуум является собственным вектором с собственным значением равным $a^n + b^n$. Мы попытаемся сконструировать возбуждения общего вида, беря вектора вида

$$\Phi(v_1,\ldots,v_l) = B(v_1)\cdots B(v_l)\Psi_0\,,$$

в качестве анзатца для построения векторов, диагонализующих след трансфер матрицы. На такие вектора действие оператора $A(u)+D(u)$ вообще говоря не является диагональным. Необходимо использовать коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} A(u)B(v) &= \frac{a(v-u)}{b(v-u)}B(v)A(u) - B(u)A(v)\frac{c(v-u)}{b(v-u)}\,, \\ D(u)B(v) &= \frac{a(u-v)}{b(u-v)}B(v)D(u) - B(u)D(v)\frac{c(u-v)}{b(u-v)}\,. \end{aligned}$$

чтобы прокоммутировать оператор $A(u)$ через произведение операторов $B(v_j)$ и аналогично для оператора $D(u)$. После этого подействовать операторами A, D на псевдовакуум. Попытаемся вычислить явно эту операцию:

$$\begin{aligned} &T(u)\Phi(v_1,\ldots,v_l) = (A(u)+D(u))\,\Phi(v_1,\ldots,v_l) = \\ &= \left(a^n(u)\prod_{j=1}^{l}\frac{a(v_j-u)}{b(v_j-u)} + b^n(u)\prod_{j=1}^{l}\frac{c(v_j-u)}{b(v_j-u)}\right)\Phi(v_1,\ldots,v_l) + \\ &+ \sum_j F_j(u,v_1,\ldots,v_l)\prod_{i=1,i\neq j} B(v_i)\Psi_0\,. \end{aligned}$$

Как видим, сумма по j в правой части уравнения выше разрушает условие, что вектор $\Phi(v_1,\ldots,v_l)$ является собственным для трансфер матрицы. Здесь символом $F_j(u,v_1,\ldots,v_l)$ мы обозначили функцию от быстротных переменных, которая появляется как коэффициент при векторе

$\prod_{i=1,i\neq j} B(v_i)\Psi_0$. Считая, что вектора являются независимыми, мы можем потребовать, чтобы эти функции F_j были бы нулями. Это бы наложило условие для дозволительных быстрот $\{v_j\}$ дающих решения задачи диагонализации.

Выписывая F_j явно,

$$F_j(u, v_1, \ldots, v_l) = \frac{c(u-v_j)}{b(u-v_j)} \left(a^n(v_j) \prod_{i=1,i\neq j}^{l} \frac{a(v_i - v_j)}{b(v_i - v_j)} - b^n(v_j) \prod_{i=1,i\neq j}^{l} \frac{a(v_j - v_i)}{b(v_j - v_i)} \right) = 0$$

мы получаем набор уравнений алгебраического анзатца Бете для шестивершинной модели в нулевом магнитном поле

$$\frac{a^n(v_j)}{b^n(v_j)} = \prod_{i=1,i\neq j}^{l} \left(\frac{b(v_i - v_j)a(v_j - v_i)}{a(v_i - v_j)b(v_j - v_i)} \right), \quad j = 1, \ldots, l\,.$$

Здесь $a(v), b(v)$ - элементы нашей R матрицы. Видно, что эти уравнения совпадают с уравнениями координатного анзатца Бете, если отождествить $\exp(ik_j)$ с $a(v_j)/b(v_j)$:

$$\left(\frac{\sin(\lambda - v_j)}{\sin(v_j)} \right)^n = (-1)^{l-1} \prod_{i=1,i\neq j}^{l} \left(\frac{\sin(\lambda - v_j + v_i)}{\sin(\lambda - v_i + v_j)} \right), \quad j = 1, \ldots, l\,.$$