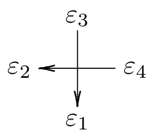
Лекция 8
Модель льда и коммутирующие трансфер-матрицы

Рассмотрим другую модель классической статистической механики — *шестивершинную модель* или *модель льда.* Пусть на ребрах квадратной решетки живут «спины» $\varepsilon = \pm$, а взаимодействие имеет место в вершинах. Именно, каждой конфигурации спинов вокруг вершины



сопоставим больцмановский вес $R^{\varepsilon_3\varepsilon_4}_{\varepsilon_1\varepsilon_2}$. Стрелки здесь обозначают ориентацию решетки.

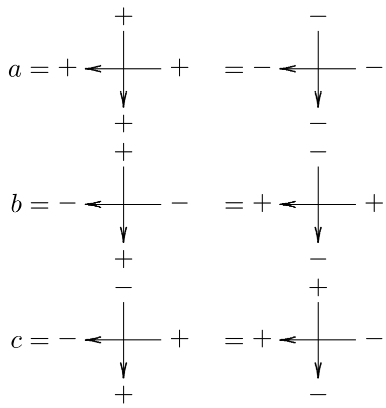
Конфигурацией C называется совокупность значений спинов на всех ребрах решетки. *Весом* конфигурации $W(C)$ называется произведение больцмановских весов во всех вершинах решетки. *Основной конфигурацией* называется конфигурация наибольшего веса. *Статистической суммой* называется сумма весов по всем конфигурациям $Z = \sum_C W(C)$. *Шестивершинной моделью* называется модель, в которой веса не равны нулю только при условии

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = \varepsilon_3 + \varepsilon_4, \tag{1}$$

и веса инвариантны по отношению к инверсии всех спинов:

$$R^{-\varepsilon_3\,-\varepsilon_4}_{-\varepsilon_1\,-\varepsilon_2} = R^{\varepsilon_3\varepsilon_4}_{\varepsilon_1\varepsilon_2}. \tag{2}$$

Итак, вокруг каждой вершины допускается одна из следующих шести конфигураций



Матрицу R можно в этом случае записать в виде

$$R = \begin{pmatrix} a & & & \\ & b & c & \\ & c & b & \\ & & & a \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Рассмотрим модель на решетке размера $M \times N$ с циклическими граничными условиями и введем трансфер-матрицу столбца

$$T^{\varepsilon'_1\ldots\varepsilon'_N}_{\varepsilon_1\ldots\varepsilon_N} = \sum_{\mu_1\ldots\mu_N} R^{\mu_2\varepsilon'_1}_{\mu_1\varepsilon_1} R^{\mu_3\varepsilon'_2}_{\mu_2\varepsilon_2} \ldots R^{\mu_1\varepsilon'_N}_{\mu_N\varepsilon_N}. \tag{4}$$

Матрицу R удобно рассматривать как оператор на тензорном произведении двух двумерных пространств:

$$R : \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2 \to \mathbf{C}^2 \otimes \mathbf{C}^2, \qquad v_{\varepsilon_1} \otimes v_{\varepsilon_2} \mapsto R^{\varepsilon_1\varepsilon_2}_{\varepsilon'_1\varepsilon'_2} v_{\varepsilon'_1} \otimes v_{\varepsilon'_2}.$$

Здесь v_ε — естественный базис в пространстве $V = \mathbf{C}^2$. Если имеется произведение идентичных пространств, скажем, $V_1 \otimes V_2 \otimes \ldots \otimes V_k$, то через R_{ij} мы будем обозначать оператор, действующий на произведении $V_i \otimes V_j$ как R, а на других V_l как единичный оператор. Тогда трансфер-матрицу можно записать компактно в виде

$$T = \mathrm{tr}_{V_0}(R_{0N} \dots R_{02} R_{01}). \tag{5}$$

Оператор под знаком следа заслуживает отдельного обозначения

$$L = R_{0N} \dots R_{02} R_{01} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \tag{6}$$

и называется *оператором монодромии*. Очевидно

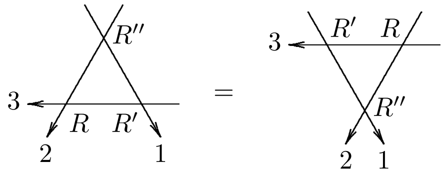
$$T = A + D. \tag{7}$$

Пространство $V_1 \otimes \dots \otimes V_N$ называется *квантовым пространством*, а пространство V_0 — *вспомогательным пространством*. Оператор L рассматривается обычно как оператор в квантовом пространстве и как матрица — во вспомогательном пространстве. Матричные элементы $A, \dots, D$ действуют как операторы в квантовом пространстве.

Решение задачи о вычислении статистической суммы шестивершинной модели сводится к задаче о нахождении собственных значений трансфер-матрицы. Когда такого типа задача могла бы быть разрешима точно? По сути это вопрос о *квантовой интегрируемости* модели. Что такое квантовая интегрируемость, мы точно не знаем, но в классической механике модель интегрируема тогда, когда в ней имеется достаточное количество интегралов движения в инволюции. Поэтому нам хотелось бы иметь достаточное количество операторов, коммутирующих с трансфер-матрицей и друг с другом. Предположим, что такие интегралы имеют снова вид трансфер-матрицы T' с какой-то другой матрицей R' вида (3). Итак, пусть имеются операторы T и T' вида (5) с R-матрицами вида (3). Когда они коммутируют? Достаточное (хотя и не необходимое) условие можно сформулировать так. Операторы T и T' коммутируют тогда, когда имеется матрица R'' вида (3), такая что

$$R''_{12} R'_{13} R_{23} = R_{23} R'_{13} R''_{12}. \tag{8}$$

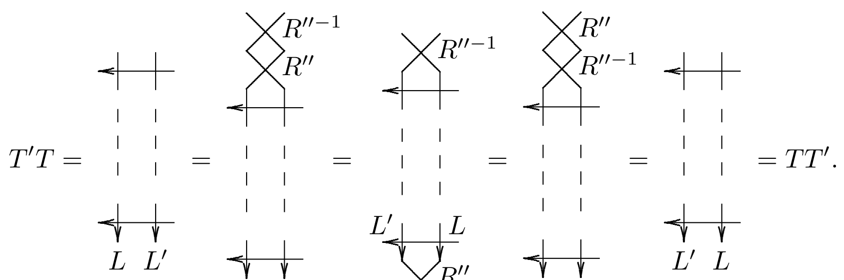
Графически это выглядит так:



(8′)

Это соотношение называется *уравнением Янга–Бакстера*.

Коммутативность трансфер-матриц T и T' при условии (8) легко доказать графически (циклические условия на вертикальных линиях подразумеваются):



В виде формул доказательство записывается так. Из уравнения Янга–Бакстера следует, что

$$R''_{12} L'_1 L_2 = L_2 L'_1 R''_{12},$$

где операторы L'_1 и L_2 действуют на одном и том же квантовом пространстве, но имеют разные вспомогательные пространства V_1 и V_2. Тогда

$$\begin{aligned} T'T &= \mathrm{tr}_{V_1 \otimes V_2}(L'_1 L_2) = \mathrm{tr}_{V_1 \otimes V_2}((R''_{12})^{-1} R''_{12} L'_1 L_2) = \mathrm{tr}_{V_1 \otimes V_2}((R''_{12})^{-1} L_2 L'_1 R''_{12}) \\ &= \mathrm{tr}_{V_1 \otimes V_2}(R''_{12} (R''_{12})^{-1} L_2 L'_1) = \mathrm{tr}_{V_1 \otimes V_2}(L_2 L'_1) = TT'. \end{aligned}$$

Теперь необходимо решить уравнение Янга–Бакстера. Не будем выводить решение последовательно, приведем только ответ. Понятно, что нормировка R-матриц не важна, поэтому R-матрицы можно параметризовать двумя переменными. Обозначим их λ и u. Удобно ввести тригонометрическую параметризацию

$$\begin{aligned} a(\lambda, u) &= \sin(\lambda - u), \\ b(\lambda, u) &= \sin u, \\ c(\lambda, u) &= \sin \lambda, \end{aligned} \tag{9}$$

если $c < a + b$, $a < b + c$, $b < a + c$, и

$$\begin{aligned} a(\lambda, u) &= \operatorname{sh}(\lambda - u), \\ b(\lambda, u) &= \operatorname{sh} u, \\ c(\lambda, u) &= \operatorname{sh} \lambda, \end{aligned} \tag{10}$$

если $c > a + b$. Случаи $a > b + c$ и $b > a + c$ не интересны (см. ниже).

В параметризации (9) или (10) решение уравнения Янга–Бакстера имеет вид

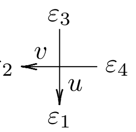
$$\begin{aligned} R &= R(\lambda, u_2 - u_3), \\ R' &= R(\lambda, u_1 - u_3), \\ R'' &= R(\lambda, u_1 - u_2). \end{aligned} \tag{11}$$

Параметр λ должен быть одинаков для всех трех матриц и в дальнейшем мы будем его опускать. Параметр u у всех трех матриц различен, хотя его значения и связаны соотношением. Важно, что для любых двух матриц R и R' с одинаковым значением λ имеется матрица R'' (с тем же, кстати, значением λ). Это значит, что имеется целое семейство коммутирующих трансфер-матриц $T(u)$ с произвольными u и фиксированным λ:

$$[T(u), T(u')] = 0 \quad \forall u, u'. \tag{12}$$

Переменная u называется *спектральным параметром.*

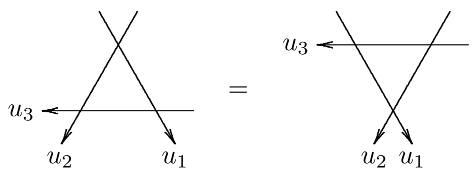
Заметим, что параметр u_i удобно приписать i-й линии, а R-матрицу записывать в виде

$R(u - v)^{\varepsilon_3 \varepsilon_4}_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} = \varepsilon_2$ 

Соотношение Янга–Бакстера

$$R_{12}(u_1 - u_2) R_{13}(u_1 - u_3) R_{23}(u_2 - u_3) = R_{23}(u_2 - u_3) R_{13}(u_1 - u_3) R_{12}(u_1 - u_2) \tag{13}$$

можно тогда изобразить как



(13′)

В таком виде уравнение Янга–Бакстера возникло в теории поля как условие факторизации многочастичного рассеяния на двухчастичные. Заметим также, что R-матрицы (9) и (10) удовлетворяют соотношениям кроссинг-симметрии и унитарности вида

$$R(\lambda - u)^{\varepsilon_3 \varepsilon_4}_{\varepsilon_1 \varepsilon_2} = R(u)^{\varepsilon_2\ -\varepsilon_3}_{\varepsilon_4\ -\varepsilon_1}, \qquad R_{12}(u) R_{21}(-u) = a(u) a(-u). \tag{14}$$

Наличие континуального семейства интегралов движения, конечно, не означает, что их действительно бесконечно много. На самом деле часть из них зависимы, так что их количество конечно, но достаточно для интегрируемости. Избавиться от континуального параметра можно, учтя аналитичность трансфер-матрицы как функции u и рассмотрев производящий функционал

$$T^{-1}(0)T(u) = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n u^n}{n!}.$$

Гамильтонианы H_n коммутируют друг с другом

$$[H_m, H_n] = 0 \quad \forall m, n$$

и образуют семейство локальных интегралов движения. Локальность означает, что H_n можно представить в виде $\sum_{i=1}^{N} I_{n,i}$, где $I_{n,i}$ зависит только от конечного числа узлов $i, i+1, \dots, i+n$. На самом деле только первые $N-1$ интегралов H_n и оператор $T(0)$ независимы. Оператор H_1 найти очень легко. Действительно, рассмотрим произведение

$$\begin{aligned}\check{R}(u) = R(u)P &= \begin{pmatrix} a(u) & & & \\ & c(u) & b(u) & \\ & b(u) & c(u) & \\ & & & a(u) \end{pmatrix} = 1 \sin\lambda + \begin{pmatrix} -u\cos\lambda & & & \\ & & u & \\ & u & & \\ & & & -u\cos\lambda \end{pmatrix} + O(u^2) \\ &= \sin\lambda - \left(h + \frac{\cos\lambda}{2}\right) u + O(u^2),\end{aligned}$$

где

$$h = -\frac{1}{2}(\sigma^x \otimes \sigma^x + \sigma^y \otimes \sigma^y - \cos\lambda\, \sigma^z \otimes \sigma^z).$$

В первом порядке по u именно эти слагаемые дадут вклад в H_1. Их не очень сложно собрать (например, в индексных обозначениях), и получить

$$H_1 \sin\lambda = H_{\mathrm{XXZ}} + \frac{N}{2}\cos\lambda,$$

где H_{XXZ} — гамильтониан XXZ-модели Гайзенберга:

$$H_{\mathrm{XXZ}} = -\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(\sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y + \Delta \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z), \tag{15}$$

где

$$\Delta = -\cos\lambda = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} \tag{16}$$

(последнее равенство верно при любых u). В случае $c > a + b$ имеем

$$\Delta = -\operatorname{ch}\lambda. \tag{16$'$}$$

Таким образом, чтобы найти собственные состояния шестивершинной модели, достаточно найти собственные состояния XXZ-модели Гайзенберга. На самом деле обе задачи равной сложности. Но XXZ-модель содержит важный намек на то, как следует решать эту задачу. Прежде всего, введем оператор полного спина

$$S^z = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\sigma_n^z.$$

Из условия льда следует, что наши операторы коммутируют с ним:[1]

$$[T(u), S^z] = [H_{\mathrm{XXZ}}, S^z] = 0. \tag{17}$$

Отсюда следует, что собственные состояния имеют определенную проекцию полного спина S^z. Простейшее из таких состояний легко построить: это *псевдовакуумы*

$$|\Omega_\pm\rangle = \underbrace{v_\pm \otimes v_\pm \otimes \ldots \otimes v_\pm}_{N}, \tag{18}$$

[1]При этом они *не* коммутируют с S^x, S^y!

в которых все спины повернуты вверх или все вниз. Очевидно,

$$S^z|\Omega_\pm\rangle = \pm\frac{N}{2}|\Omega_\pm\rangle, \qquad T(u)|\Omega_\pm\rangle = (a^N(u)+b^N(u))|\Omega_\pm\rangle, \qquad H_{XXZ}|\Omega_\pm\rangle = -\frac{N\Delta}{2}|\Omega_\pm\rangle.$$

Проблема в том, что эти состояния являются основными только в случае $\Delta > 1$. В этом случае $a > b + c$ (или $b > a + c$) и основными конфигурациями шестивершинной модели являются конфигурации, в которых все спины имеют один знак (или все на вертикальных ребрах один знак, а на горизонтальных — другой). Легко убедится, что для того, чтобы перевернуть один спин, необходимо в этом случае перевернуть также $\sim N$ спинов, так что в термодинамическом пределе вероятность переворота спина в точности равна нулю. Говорят, что в системе имеются *вмороженные* основные конфигурации. Нас будет интересовать случай $\Delta < 1$.

Состояния фиксированного спина $S^z = N/2-k$ можно представить в виде линейной комбинации состояний

$$|n_1,\ldots,n_k\rangle = \sigma^-_{n_1}\ldots\sigma^-_{n_k}|\Omega_+\rangle, \qquad \sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y), \tag{19}$$

причем все n_j должны быть различны. Поскольку гамильтониан $H_{\rm XXZ}$ переворачивает только соседние спины, собственные состояния гамильтониана будут выглядеть как плоские волны, когда $|n_i - n_j| > 1$ $(\forall i, j)$.

Начнем со случая $k = 1$. В этом случае рассмотрим состояние

$$|\Psi_1(z)\rangle = \sum_n z^n|n\rangle. \tag{20}$$

Нетрудно проверить, что

$$H_{XXZ}|\Psi_1(z)\rangle = \left(-\frac{N\Delta}{2}+\epsilon(z)\right)|\Psi_1(z)\rangle, \qquad \epsilon(z) = 2\Delta - z - z^{-1}. \tag{21}$$

Очевидно $|z| = 1$, так что $-2 < z+z^{-1} < 2$. Таким образом, при $\Delta > 1$ все одночастичные возбуждения имеют положительную энергию $\epsilon(z)$, так что $|\Omega_\pm\rangle$ является истинным двукратно вырожденным вакуумом системы. В случае $-1 < \Delta < 1$ часть возбужденных состояний имеют положительную энергию, а часть — отрицательную. При $\Delta < -1$ все возбуждения имеют отрицательную энергию. В двух последних случаях основным состоянием является состояние с $S^z = 0$ или $S^z = \pm 1/2$.

Рассмотрим теперь двухчастичное состояние, $k = 2$. Будем искать его в виде

$$|\Psi_2(z_1,z_2)\rangle = \sum_{n_1<n_2}(A_{12}z_1^{n_1}z_2^{n_2} + A_{21}z_2^{n_1}z_1^{n_2})|n_1,n_2\rangle. \tag{22}$$

Действие гамильтониана на члены суммы с $n_2 > n_1+1$ не отличается от действия на одночастичные состояния (20), а действие на члены с $n_2 = n_1 + 1$ можно рассматривать как условия сшивки. Они имеют вид

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = S(z_1,z_2) \equiv -\frac{1+z_1z_2-2\Delta z_1}{1+z_1z_2-2\Delta z_2}. \tag{23}$$

Очевидно

$$H_{XXZ}|\Psi_2(z_1,z_2)\rangle = \left(-\frac{N\Delta}{2}+\epsilon(z_1)+\epsilon(z_2)\right)|\Psi_2(z_1,z_2)\rangle,$$

то есть энергии возбуждений складываются. Кроме того, видно, что анзац для волновой функции (22) не содержит отраженных волн. Мы предположим, что это свойство сохраняется и в общем случае:

Предположение. *Плоские волны в базисе (19) рассеиваются под действием $H_{\rm XXZ}$ безотражательно.*

Это значит, что волновые функции следует искать в виде

$$|\Psi_k(z_1,\ldots,z_k)\rangle = \sum_{n_1<\ldots<n_k}\sum_{\sigma\in S_k} A_{\sigma_1\ldots\sigma_k}\prod_{j=1}^k z_{\sigma_j}^{n_j}|n_1,\ldots,n_k\rangle.$$

Такой вид волновой функции называется *(координатным) анзацем Бете*. Можно показать, что действие гамильтониана H_{XXZ} не порождает новых условий сшивки, так что отношения амплитуд даются той же функцией (23):

$$A_{\dots ij\dots}/A_{\dots ji\dots} = S(z_i, z_j). \tag{24}$$

При этом условии

$$H_{XXZ}|\Psi_k(z_1,\dots,z_k)\rangle = \left(-\frac{N\Delta}{2} + \sum_{i=1}^{k} \epsilon(z_i)\right)|\Psi_k(z_1,\dots,z_k)\rangle, \tag{25}$$

то есть энергии возбуждений опять-таки аддитивны. Далее следует наложить условие периодичности

$$z_i^N = \prod_{j,\ j\neq i} S(z_i, z_j), \tag{26}$$

которое дает систему уравнений на «импульсы» z_i, называемую системой *уравнений Бете*. Решая эту систему и подставляя решения в (25), можно найти все собственные значения гамильтониана. В следующей лекции мы получим эту систему несколько иным путем.

Задачи

1. Определим «нормированную» R-матрицу $\tilde{R}(u) = \kappa^{-1}(u)R(u)$ условиями:

$$\tilde{R}(\lambda - u)^{\varepsilon_3\varepsilon_4}_{\varepsilon_1\varepsilon_2} = \tilde{R}(u)^{\varepsilon_2\ -\varepsilon_3}_{\varepsilon_4\ -\varepsilon_1}, \qquad \tilde{R}_{12}(u)\tilde{R}_{21}(-u) = 1.$$

Очевидно, что аналитическая функция $\kappa(u)$ удовлетворяет условиям

$$\kappa(\lambda - u) = \kappa(u), \qquad \kappa(u)\kappa(-u) = a(u)a(-u).$$

Найти решение этих уравнений при $\Delta < -1$, являющееся функцией переменной $z = e^u$ и не имеющее полюсов и нулей в области $-\lambda < \operatorname{Re} u < \lambda$. Решение удобно выразить через функции вида

$$(z;p)_\infty = \prod_{n=0}^{\infty}(1 - zp^n).$$

2. Доказать соотношение (23).