Heisenberg XXX-chain:Criticality,Form Factors and Correlation function

Arashi 2025.11

1 Quantum criticality of Heisenberg XXX spin chain

1.1 Bethe Ansatz and string hypothesis

Bethe Ansatz

海森堡自旋-1/2 XXX 链是一个典型的可积模型，被广泛用于研究一维量子磁性。其哈密顿量为：

$$H=-J\sum_{j=1}^{N}\left(S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y+S_j^zS_{j+1}^z\right)+H\sum_{j=1}^{N}S_j^z$$

在之前的推导中，我们已知快度与（磁场情况）能谱：

$$\left(\frac{\lambda_j-\frac{i}{2}}{\lambda_j+\frac{i}{2}}\right)^N=-\prod_{l=1}^{M}\frac{\lambda_j-\lambda_l-i}{\lambda_j-\lambda_l+i}\qquad E(\lambda_1,\cdots,\lambda_M)=-\sum_{j=1}^{M}\left(\frac{J}{\lambda_j^2+\frac{1}{4}}\right)+HM+E_0.$$

其中 λ_j 是自旋准动量，$j=1,\dots,M$，M 是向下自旋的数目。BA 方程决定了快度 $\{\lambda_j\}$，它们可以是实的和/或复的。$Bethe$ 根的复解被称为自旋弦：

$$\lambda_{j,l}^n=\lambda_j^n+\frac{i}{2}(n+1-2l)$$

其中 $\ell=1,\dots,n$，且 $j=1,\dots,\nu_n$。在热力学极限下，即 $N,M\to\infty$，且 M/N 有限，以及在有限温度下，巨正则描述产生了所谓的热力学 $Bethe\ Ansatz$ 方程：

$$\varepsilon_n=\varepsilon_n^0-\sum_m A_{m,n}*\varepsilon_n^-$$

其中 $n=1,2\dots\infty$。这里的 $*$ 表示卷积 $(a*b)(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}a(\lambda-\mu)b(\mu)d\mu$，且 $\varepsilon^{\pm}=\pm T\ln(1+\mathrm{e}^{\pm\varepsilon_n/T})$。驱动项为 $\varepsilon_n^0=-2\pi Ja_n(\lambda)+nH=-\frac{nJ}{\lambda^2+n^2/4}+nH$，卷积核为：

$$A_{m,n}(\lambda)=a_{m+n}(\lambda)+2a_{m+n-2}(\lambda)+\cdots+2a_{|m-n|+2}(\lambda)+a_{|m-n|}$$

完整的有限温度热力学可以从单位长度的自由能确定：

$$f=\sum_n\int_{-\infty}^{\infty}a_n(\lambda)\,\varepsilon_n^-(\lambda)\,d\lambda.$$

给出热力学部分的说明，这部分内容可以参考 $Lieb-Liniger$ 模型，通过引入 η 为动量空间空穴密度与总密度之比，通过给出熵的形式来完整给出巨势的表达式，通过变分即可得到能量的约束方程。与 $Lieb-liniger$ 模型不同的是，海森堡自旋链卷积核变成了形式更复杂的情况，不过不难理解，对于复根情况贝特方程右边必定引入 $S_{m,n}(\lambda_{m,i}-\lambda_{n,j})$ 的项，热力学极限下即得到 A_{mn} 这样的卷积核；同时也有这是对于 $n=2M+1$ 的 M-复形，因此驱动项能量也会因此改变 (对应替换 $2M+1=n$), 下面是更详细的推导:

我们从给定的 $Bethe-Gaudin-Takahashi$ 方程出发：

$$N\theta_{2M+1}(\lambda_{M,j}) = 2\pi I_{M,j} + \sum_{(M',j')\neq(M,j)} \Theta_{M,M'}(\lambda_{M,j}-\lambda_{M',j'})$$

其中：

$$\Theta_{M,M'}(\lambda) \equiv \theta_{M+M'}(\lambda) + 2\theta_{M+M'-2}(\lambda) + \cdots + 2\theta_{|M-M'|+2}(\lambda) + (1-\delta_{M,M'})\theta_{|M-M'|}(\lambda)$$

先定义常用的相位函数与其导数, 对单一长度 n 的相位函数定义

$$\theta_n(\lambda) \equiv \frac{1}{i}\ln\frac{\lambda-in/2}{\lambda+in/2} = 2\arctan\frac{2\lambda}{n}.$$

它的导数是（把 $\theta_n'(\lambda)$ 表示成基本核）

$$\frac{d}{d\lambda}\theta_n(\lambda) = 2\pi a_n(\lambda), \qquad a_n(\lambda) \equiv \frac{1}{2\pi}\frac{n}{\lambda^2+(n/2)^2}.$$

复合相位导数给出复合核

$$\frac{d}{d\lambda}\Theta_{M,M'}(\lambda) = 2\pi A_{M,M'}(\lambda), \qquad A_{M,M'}(\lambda) = a_{|m-n|}(\lambda) + 2a_{|m-n|+2}(\lambda) + \cdots + a_{m+n}(\lambda).$$

将离散方程写成对实连续 λ 的计数函数形式。定义第 M 类弦的函数

$$2\pi Z_M(\lambda) \equiv N\theta_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} \Theta_{M,M'}(\lambda-\lambda_{M',j'})$$

其中 $\nu_{M'}$ 是第 M' 类字符串中心的总数（离散），并且对 $\lambda=\lambda_{M,j}$ 有 $Z_M(\lambda_{M,j}) = I_{M,j}$. 函数定义在 λ 处的 $Z_M(\lambda)$ 给出该位置对应的量子数。$\Theta_{M,M}(0)$ 的处理会在下一步求导时自然消失或被正确对待)。

在热力学极限，允许量子数的密度就是量子数函数的导数（每单位 λ 的量子数数目)。定义第 M 类弦的总态密度

$$\rho_M^t(\lambda) \equiv \frac{dZ_M(\lambda)}{d\lambda}.$$

对两边对 λ 求导：

$$2\pi\frac{dZ_M(\lambda)}{d\lambda} = N\frac{d}{d\lambda}\theta_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} \frac{d}{d\lambda}\Theta_{M,M'}(\lambda-\lambda_{M',j'}).$$

用前面定义，代入得到

$$2\pi\rho_M^t(\lambda) = N\cdot 2\pi a_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} 2\pi A_{M,M'}(\lambda-\lambda_{M',j'}).$$

两边除以 2π：

$$\rho_M^t(\lambda) = N a_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} A_{M,M'}(\lambda-\lambda_{M',j'}).$$

在热力学极限 $N\to\infty$（同时 $\nu_{M'}\to\infty$）中，字符串中心 $\lambda_{M',j'}$ 在实轴上变得稠密，我们定义第 M' 类的粒子密度（每单位 λ 每单位长度）为 $\rho_{M'}(\lambda)$。离散求和可用积分替代。离散和与积分的替换规则（基本假定）为

$$\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} F(\lambda_{M',j'}) \longrightarrow N\int_{-\infty}^{\infty} F(\mu), \rho_{M'}(\mu)d\mu.$$

应用于第二项：

$$\sum_{j'=1}^{\nu_{M'}} A_{M,M'}(\lambda-\lambda_{M',j'}) \approx N\int_{-\infty}^{\infty} A_{M,M'}(\lambda-\mu)\rho_{M'}(\mu)d\mu = N(A_{M,M'}*\rho_{M'})(\lambda).$$

于是变为

$$\rho_M^t(\lambda) = N a_{2M+1}(\lambda) - N\sum_{M'}(A_{M,M'}*\rho_{M'})(\lambda).$$

两边除以 N（引入每单位长度的密度定义）就得到通常的“规范化”形式。若我们把 $\tilde\rho$ 表示为“每单位长度”的密度（即上面 ρ/N），则写成

$$\tilde\rho_M^t(\lambda) = a_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}(A_{M,M'}*\tilde\rho_{M'})(\lambda).$$

为简洁起见，常直接把符号 ρ 既表示“每长度粒子密度”，这样写成（去掉波浪）：

$$\boxed{\rho_M^t(\lambda) = a_{2M+1}(\lambda) - \sum_{M'}(A_{M,M'}*\rho_{M'})(\lambda).}$$

其中 $\rho_M^t(\lambda)\equiv\rho_M(\lambda)+\rho_M^h(\lambda)$。将以上结果代入，则最终自由能写为：

$$\boxed{f = \sum_M \int d\lambda\, a_m(\lambda)\,\varepsilon_M^-(\lambda)}$$

具体的推导过程我们放在Appendix A部分

零温磁性

从 TBA 方程的形式，我们观察到对于 $n\ge 1$ 有 $\varepsilon_n\ge 0$。因此，对于 $T=0$，TBA 方程和单位位点的自由能约化为：

$$\varepsilon_1^{(0)}(\lambda) = -2\pi J a_1(\lambda) + H - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\varepsilon_1^{(0)}(\mu)d\mu, \qquad f_0 = \int_{-Q}^{+Q} a_1(\mu)\varepsilon_1^{(0)}(\mu)d\mu,$$

其中 Q 是由 $dressed\,energy$ 的零点确定的截断自旋准动量，即 $\varepsilon_1^{(0)}(\pm Q)=0$。饱和磁场可以很容易地从条件 $\varepsilon_1(0)=0$ 得到。这给出 $H_s=4J$ 和 $M^z=1/2$。因此，在

临界场 H_s 附近，对于小的 Q，可以解析地得到零温临界性质。我们可以用 λ 展开零温 TBA 方程，即：

$$\varepsilon_1^{(0)}(\lambda) \approx -2\pi J a_1(\lambda) + H - \frac{1}{\pi}\int_{-Q}^{Q} \varepsilon_1^{(0)}(\lambda) d\lambda \approx -2\pi J a_1(\lambda) + H - \frac{2Q(H-H_s)}{\pi}.$$

因此我们得到 $Q = \sqrt{\frac{H_s - H}{16J}}$。自由能、磁化强度和磁化率可以直接用零温 $dressed\,energy$ 来评估：

$$f_0 \approx \int_{-Q}^{+Q} a_1(\mu)\varepsilon_1^{(0)}(\mu) d\mu \approx \frac{4J}{\pi}\left(\frac{(1-4Q^2)\arctan(2Q) - 2Q}{1+4Q^2} + O(Q^4)\right).$$

对于自旋链选取所有向上的情况为基态的话，那么在磁场强度到达一定程度时翻转一个自旋减小的磁场能与增加的反铁磁关联能相抵消，因此定义临界磁场 H_s 是翻转一个自旋的能量变化刚好变为 0 的外场。饱和极化时没有翻转（下自旋）激发，意味着 $dress\,energy$ 在无占据区边界时刚好为零。对零填充（$Q=0$）的情形，卷积项为 0，取 $\lambda = 0$ 并令 $\varepsilon_1^{(0)}(0) = 0$, 代入 $a_1(0) = 2/\pi$ 得：

$$0 = \varepsilon_1^{(0)}(0) = -2\pi J a_1(0) + H_s \quad \Rightarrow \quad H_s = 2\pi J a_1(0) = 4J$$

当 $H \lesssim H_s$ 时，切断准动量 Q 很小（少量下自旋）。对卷积项作简单近似：对小区间 $[-Q,Q]$ 上的函数，可以近似把卷积核 $a_2(\lambda-\mu)$ 在 μ 上积分的结果近似为常数因子（文章中采用的是 $a_2(\lambda) = \frac{1}{\pi}\frac{1}{\lambda^2+1} \approx \frac{1}{\pi}$），并把积分近似写成 $\frac{1}{\pi}\int_{-Q}^{Q}\varepsilon_1^{(0)}(\mu)\,d\mu$。在极小 Q 下，$\varepsilon_1^{(0)}(\mu)$ 在 $[-Q,Q]$ 上变化很小，可以近似把积分替换为 $2Q$ 乘以 $\varepsilon_1^{(0)}(0)$。记 $\varepsilon_1^{(0)}(0) \approx H - H_s$（因为当 $Q \to 0$ 时，$\varepsilon(0) = -4J + H$），于是

$$\varepsilon_1^{(0)}(\lambda) \approx -2\pi J a_1(\lambda) + H - \frac{1}{\pi}\int_{-Q}^{Q} \varepsilon_1^{(0)}(\lambda) d\lambda \approx -2\pi J a_1(\lambda) + H - \frac{2Q(H-H_s)}{\pi}.$$

先把 $a_1(\lambda)$ 在小 λ 处二阶展开：$a_1(\lambda) = \frac{1}{2\pi(\lambda^2+1/4)} = \frac{2}{\pi}\Big(1 - 4\lambda^2 + O(\lambda^4)\Big)$. 。于是 $-2\pi J a_1(\lambda) = -4J + 16J\lambda^2 + O(\lambda^4)$. 将其代入前面公式并用 $H_s = 4J$，得（记 $\delta H \equiv H_s - H = 4J - H > 0$）

$$\varepsilon_1^{(0)}(\lambda) \approx H - 4J - \frac{2Q}{\pi}(H - H_s) + 16J\lambda^2 = -\delta H + \frac{2Q}{\pi}\delta H + 16J\lambda^2.$$

在 $\lambda = Q$ 处带入零点条件 $\varepsilon_1^{(0)}(Q) = 0$，得到 $16JQ^2 - \delta H + \frac{2Q}{\pi}\delta H = 0$. 对于 Q 和 δH 都很小的情形，项 $\frac{2Q}{\pi}\delta H$ 是更高阶（为 $\sim Q, \delta H$），可先丢弃，得到主导关系:

$$16JQ^2 \approx \delta H \quad \Longrightarrow \quad \boxed{Q \approx \sqrt{\frac{H_s - H}{16J}}}$$

对于自由能的计算涉及到较多积分，我们放在了Appendix B

随之得到归一化的磁化强度和磁化率：

$$M^z = M_s - \frac{\partial f_0}{\partial H} = \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi}\left(1 - \frac{H}{H_s}\right)^{1/2}, \qquad \chi = \frac{\partial M^z}{\partial H} = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{J(H_s - H)}\right)^{1/2}.$$

使用这个结果，我们给出标度形式：

$$1-\frac{M^z}{M_s}=D\left(1-\frac{H}{H_s}\right)^{1/\delta}=\frac{4}{\pi}\left(1-\frac{H}{H_s}\right)^{1/2}$$

由此读出临界指数 $\delta=2$，因子 $D=4/\pi$ 在零温度。

这部分的详细证明放在 Appendix C

自旋弦

自旋 1/2 系统的低能激发由自旋弦描述。在零磁场和零温度下，实根形成自旋 1/2 系统的基态。对于基态，我们将 BA 根视为 $M=N/2$ 个磁振子，即 $N/2$ 个长度为 1 的自旋弦，满足 BA 方程。自旋激发通过翻转向下自旋来产生，使得一个磁振子分解成两个携带自旋 1/2 的自旋子。这种自旋翻转导致在 BA 方程的 λ 根海中出现两个 $\varepsilon_1(\lambda)$ 空穴。自旋激发可能导致相当不同的自旋弦图案，这里我们展示了三种简单的低能激发:

(1) 具有 $M=N/2-1$ 和总自旋 $M^z=1$ 的双自旋子激发。与具有 $N/2$ 个磁振子的基态相比，这类激发具有 $N/2-1$ 个长度为 1 的磁振子和两个空穴，即一个磁振子分解成两个磁振子。这种自旋翻转产生两个扭结，它们被视为准粒子，即两个自旋子。这两个自旋子以两个独立的快度运动。从 BA 方程的角度看，在零磁场下，基态的所有空位都被占据。少一个实弦使得总空位数增加一个。因此，在这种情况下，激发态有两个长度为 1 的弦的空穴，它们形成两个自旋子的散射态。

(2) 具有 $M=N/2$ 和总自旋 $M^z=0$ 的双自旋子激发。在这种自旋单态配置中，有一个长度为 2 的弦。这样的单态激发态是通过从基态图案中取出两个长度为 1 的弦并添加一个长度为 2 的弦来创建的，其中两个扭结束缚在一起，以一个速度运动。长度为 2 的弦只有一个空位。就 *Bethe ansatz* 根而言，我们观察到在长度为 1 的弦 *sector* 中有两个自旋子，它们定义了激发能。这表明单态激发也分裂成两个自旋子。

(3) 具有 $M=N/2-1$ 和总自旋 $M^z=1$ 的自旋三重态激发。这种自旋三重态激发是通过从基态图案中取出三个长度为 1 的弦，并添加一个长度为 2 的弦，且在长度为 2 的 *sector* 中有两个空穴来构建的，其中两个扭结束缚在一起。唯一的长度为 2 的弦占据了这三个空穴中的一个。这些长度为 2 的空穴对动量分布提供了量级为 $\sim 1/N$ 的修正，在热力学极限下可以忽略。基于 BA 方程的根图案，我们观察到在长度为 1 的自旋弦 *sector* 中有四个自旋子。在热力学极限下，激发能和动量由这四个自旋子决定。

上述构型也可以从 TBA 方程得到。我们假设在激发态中有 v_ν 个长度为 ν 的弦。这个构型是通过从基态图案中取出 γ 个长度为 1 的弦来创建的。没有其他长度的自旋弦，即对于 $n\neq 1,\nu$ 有 $v_n=0$。我们假设在长度为 1 的弦中有 ϑ 个空穴，位于 λ_j^h，其中 $j=1,2,\ldots,\vartheta$，并且长度为 1 的自旋弦中的空穴密度为 $\rho_1^{\mathrm{h}}=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{\vartheta}\delta(\lambda-\lambda_j^h)$。$v_\nu$ 个长度为 ν 的弦位于 λ_i^ν，其中 $i=1,2,\ldots,v_\nu$，相应的密度为 $\rho_\nu=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{v_\nu}\delta(\lambda-\lambda_i^\nu)$。粒子和空穴的密度满足：

$$\rho_1(\lambda)+\rho_1^{\mathrm{h}}(\lambda)=a_1(\lambda)-(a_2*\rho_1)(\lambda)-\left((a_{\nu-1}+a_{\nu+1})*\rho_\nu\right)(\lambda).$$

对此方程两边关于 λ 积分，我们得到长度为 1 的自旋弦 $sector$ 中的自旋子数目：

$$\vartheta = 2(\gamma - v_\ell).$$

借助这个方程，我们可以找到如上讨论的不同种类自旋激发的空穴数。我们也可以使用 TBA 方程计算激发能和动量。

1.2 Luttinger liquid

在低温下，两个费米点附近的粒子-空穴激发形成一种集体运动，称为 $Luttinger$ 液体。这种基本激发只涉及长度为 1 的弦的根。尽管一维 $Luttinger$ 液体与高维费米液体在微观细节上存在差异，但一维的粒子-空穴激发在低能下导致与高维系统相似的宏观行为。$Luttinger$ 液体行为可以在反铁磁区域观察到，条件是 $|H-H_{\rm s}|/T \gg 1$。不失一般性，我们可以将低温 TBA 方程重写为 $\varepsilon_1 = \varepsilon_1^{(0)} + \eta$，其中 $\varepsilon_1^{(0)}$ 是零温 $dressed\,energy$，而 η 可以被视为对温度的主导阶修正，即：

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1(\lambda) &= -2\pi J a_1(\lambda) + H + T\int_{-\infty}^{\infty} a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{-\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu \\
&= -2\pi J a_1(\lambda) + H + T\left(\int_{-\infty}^{-Q} + \int_{Q}^{\infty}\right) a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{-\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu \\
&+ T\int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\varepsilon_1(\mu)\,d\mu \\
&= -2\pi J a_1(\lambda) + H + T\int_{-\infty}^{\infty} a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{-\frac{|\varepsilon_1(\mu)|}{T}}\right)d\mu - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\varepsilon_1(\mu)\,d\mu.
\end{aligned}$$

然后我们重写：

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1(\lambda) &= \varepsilon_1^{(0)}(\lambda) + \eta(\lambda) \\
&= -2\pi J a_1(\lambda) + H - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\varepsilon_1^{(0)}(\mu)\,d\mu + \eta(\lambda) \\
&= -2\pi J a_1(\lambda) + H - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)(\varepsilon_1(\mu)-\eta(\mu))\,d\mu + \eta(\lambda).
\end{aligned}$$

随之得到：

$$\begin{aligned}
\eta(\lambda) &= T\int_{-\infty}^{\infty} a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{-\frac{|\varepsilon_1(\mu)|}{T}}\right)d\mu - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\eta(\mu)\,d\mu \\
&= I - \int_{-Q}^{Q} a_2(\lambda-\mu)\eta(\mu)\,d\mu.
\end{aligned}$$

$dressed\ \ energy$= 粒子自身能量 + 与所有其它粒子的相互作用修正, 因此：
$dressed\ \ energy\ <\ 0$：加入这个粒子会让能量下降 $\Rightarrow$ 这个态应该被占据；
$dressed\ energy > 0$：加入粒子要费能量 $\Rightarrow$ 这个态应该是空的；所以在费米点内缀饰能小于零。

当 $T \to 0$ 时，对这个积分的主要贡献来自费米点附近的区域，即 ε_1 的零点。通过在 $\lambda = Q$ 处展开 ε_1，我们有：

$$\varepsilon_1(\lambda) = t(\lambda - Q) + O\left((\lambda-Q)^2\right)$$

其中 $t=\frac{d\varepsilon(\lambda)}{d\lambda}\Big|_{\lambda=Q}$。那么 η 的第一项变为：

$$I=\frac{\pi^2T^2}{6t}\left[a_2(\lambda+Q)+a_2(\lambda-Q)\right].$$

经过直接计算，我们有：

$$\eta(\lambda)=\frac{\pi^2T^2}{6t}\left[a_2(\lambda+Q)+a_2(\lambda-Q)\right]-\int_{-Q}^{Q}a_2(\lambda-\mu)\eta(\mu)\,d\mu.$$

我们在低温 $T\to 0$ 下估算 $I(\lambda)$。μ 接近使 $\varepsilon_1(\mu)=0$ 的点（费米点 $\mu=\pm Q$）时才有显著贡献。因此可以把积分由两段局部近似主导：一段来自 $\mu\approx +Q$，另一段来自 $\mu\approx -Q$。在每个费米点处对 ε_1 做一次线性展开：

$$\varepsilon_1(\mu)\simeq t(\mu-Q)\quad(\mu\approx Q),\qquad \varepsilon_1(\mu)\simeq t(\mu+Q)\quad(\mu\approx -Q),$$

其中 $t=\frac{d\varepsilon_1}{d\mu}\Big|_{\mu=Q}$（若左右端点导数大小不同，可记为 t_+ 与 t_-）。并且在每个小邻域内把慢变函数 $a_2(\lambda-\mu)$ 近似为常数 $a_2(\lambda-Q)$ 或 $a_2(\lambda+Q)$。把积分区域限制到 μ 在 $+Q$ 附近的一小段，并令 $y=\mu-Q$。

$$I_{+Q}(\lambda)\approx T\int_{\text{near }Q}a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1+e^{-|\varepsilon_1(\mu)|/T}\right)d\mu\approx T\,a_2(\lambda-Q)\int_{-\infty}^{\infty}\ln\left(1+e^{-|ty|/T}\right)dy,$$

这里把积分上、下限扩展到 $\pm\infty$ 是因为主贡献来自尺度 $y\sim T/t$ 的狭窄区间，扩界引入的误差比主项高阶（可忽略）。做尺度变换：令

$$x=\frac{ty}{T}\quad\Longrightarrow\quad y=\frac{T}{t}x,\quad dy=\frac{T}{t}dx.$$

代入：

$$I_{+Q}(\lambda)\approx T\,a_2(\lambda-Q)\int_{-\infty}^{\infty}\ln\left(1+e^{-|x|}\right)\frac{T}{t}\,dx=a_2(\lambda-Q)\,\frac{T^2}{t}\int_{-\infty}^{\infty}\ln\left(1+e^{-|x|}\right)dx.$$

利用级数展开，通过 *Dirichlet eta* 函数计算基本积分：

$$J:=\int_{-\infty}^{\infty}\ln\left(1+e^{-|x|}\right)dx=2\int_{0}^{\infty}\ln\left(1+e^{-x}\right)dx=\frac{\pi^2}{6}$$

回到 I_{+Q}：

$$I_{+Q}(\lambda)\approx a_2(\lambda-Q)\,\frac{T^2}{t}\cdot\frac{\pi^2}{6}=\frac{\pi^2T^2}{6t}\,a_2(\lambda-Q).$$

对 μ 在 $-Q$ 附近同样处理。令 $y=\mu+Q$（当 $\mu\approx -Q$ 时 y 小），线性化 $\varepsilon_1(\mu)\simeq t(\mu+Q)=ty$（与上面符号相同的 t；若两端斜率不同则用 t_-），并把 $a_2(\lambda-\mu)$ 近似为 $a_2(\lambda+Q)$。重复与 $\mu\approx +Q$ 一样的变换，得 $I_{-Q}(\lambda)\approx\frac{\pi^2T^2}{6t}a_2(\lambda+Q)$. 总的主阶贡献为两部分之和：

$$I(\lambda)\approx I_{+Q}(\lambda)+I_{-Q}(\lambda)=\frac{\pi^2T^2}{6t}\,a_2(\lambda-Q)+\frac{\pi^2T^2}{6t}\,a_2(\lambda+Q)$$

在零温度下，单位位点的自由能 $f(T,H)$ 由下式给出：

$$f_0(0,H)=\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\varepsilon_1^{(0)}(\lambda)\,d\lambda.$$

在低温和零磁场极限下，自由能是通过 $Wiener-Hopf$ 方法计算的。这里我们考虑低温和有限磁场。在这种条件下，自由能由下式给出：

$$f(T,H)=-T\int_{-\infty}^{\infty}a_1(\lambda)\ln\left(1+e^{-\frac{\epsilon_1(\lambda)}{T}}\right)d\lambda.$$

随之得到：

$$\begin{aligned}
f-f_0&=-T\int_{-\infty}^{\infty}a_1(\lambda)\ln\left(1+e^{-\frac{\epsilon_1(\lambda)}{T}}\right)d\lambda-\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\epsilon_1^{(0)}(\lambda)d\lambda\\
&=-T\left(\int_{-\infty}^{-Q}+\int_{Q}^{\infty}a_1(\lambda)\ln\left(1+e^{-\frac{\epsilon_1(\lambda)}{T}}\right)d\lambda-T\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\ln\left(1+e^{\frac{\epsilon_1(\lambda)}{T}}\right)d\lambda\right.\\
&+\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\epsilon_1(\lambda)d\lambda-\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\epsilon_1^{(0)}(\lambda)d\lambda\\
&=-T\int_{-\infty}^{\infty}a_1(\lambda)\ln\left(1+e^{-\frac{|\epsilon_1(\lambda)|}{T}}\right)d\lambda+\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda\\
&=-\frac{\pi^2T^2}{3t}a_1(Q)+\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda
\end{aligned}$$

然后我们可以用对温度的主导阶贡献来表达自由能：

$$f=f_0-\frac{\pi^2T^2}{3t}a_1(Q)+\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda$$

为了得到自由能的闭合形式，关键的计算是方程中的最后一项。我们使用自旋向下密度的 BA 方程：

$$\rho_0(\lambda)=a_1(\lambda)-\int_{-Q}^{Q}a_2(\lambda-\mu)\rho_0(\mu)d\mu$$

和 $\eta(\lambda)$ 的表达式，我们可以得到：

$$\int_{-Q}^{Q}\frac{\pi^2T^2}{6t}[(a_2(\lambda+Q)+a_2(\lambda-Q))]\rho_0(\lambda)d\lambda=\int_{-Q}^{Q}a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda.$$

将 $\eta(\lambda)$ 表达式左右两边对 $\rho_0(\lambda)$ 积分，交换双重积分积分顺序并代入自选密度方程简化，得到的方程左右两边消去并移项即可得到需要的方程。

使用关系：

$$\rho_0(Q)=a_1(Q)-\int_{-Q}^{Q}a_2(Q-\mu)\rho_0(\mu)d\mu\qquad\rho_0(-Q)=a_1(-Q)-\int_{-Q}^{Q}a_2(-Q-\mu)\rho_0(\mu)d\mu$$

并将两个方程相加(注意密度函数与积分核都是偶函数)，我们因此得到：

$$\int_{-Q}^{Q}[(a_2(\lambda+Q)+a_2(\lambda-Q))]\rho_0(\lambda)d\lambda=2a_1(Q)-2\rho_0(Q).$$

然后我们得到以下结果：

$$\int_{-Q}^{Q} a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda = \frac{\pi^2T^2}{6t}[2a_1(Q) - 2\rho_0(Q)].$$

最后，结合单位位点的自由能公式，我们给出：

$$\begin{aligned} f &= f_0 - \frac{\pi^2T^2}{3t}a_1(Q) + \int_{-Q}^{Q} a_1(\lambda)\eta(\lambda)d\lambda \\ &= f_0 - \frac{\pi^2T^2}{3t}a_1(Q) + \frac{\pi^2T^2}{6t}[2a_1(Q) - 2\rho_0(Q)] = f_0 - \frac{\pi^2T^2}{3t}\rho_0(Q). \end{aligned}$$

我们进一步定义声速：

$$v_s = \frac{1}{2\pi}\left.\frac{d\varepsilon_1(\lambda)/d\lambda}{\rho_0(\lambda)}\right|_{\lambda=Q} = \frac{1}{2\pi}\frac{t}{\rho_0(Q)}.$$

我们得到具有主导阶温度修正的单位位点自由能：

$$f = f_0 - \frac{\pi T^2}{6v_s}$$

由于 f_0 是零温度下单位位点的自由能，它与 T 无关。随之得到在 TLL 区域的比热为：

$$c_v = -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = \frac{\pi T}{3v_s} \propto T^{\alpha}.$$

这给出指数 $\alpha = 0$。在一维中 $\alpha = 2 - (d+z)/z$，$d = 1$，因此动态因子 $z = 1$。唯象部分的介绍放在Appendix D

1.3 Quantum criticality

当磁场接近饱和场时，自由能和 TBA 方程可以简化为：

$$f = -T\int a_1(\lambda)\ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(\lambda)}{T}}\right)d\lambda \qquad \varepsilon_1(\lambda) = -2\pi J a_1(\lambda) + H + T\int a_2(\lambda-\mu)\ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu.$$

对核函数进行泰勒展开：

$$a_n(\lambda) = \frac{1}{2\pi}\frac{n}{\lambda^2 + n^2/4} \approx \frac{2}{n\pi}\left(1 - \frac{4}{n^2}\lambda^2 + \cdots\right)$$

经过冗长的代数运算，我们可以得到自由能：

$$f \approx -\frac{2}{\pi}b_1 + \frac{8}{\pi}b_2, \qquad \varepsilon_1(\lambda) \approx \left(16J - \frac{b_1}{\pi}\right)\lambda^2 - 4J + H + \frac{b_1}{\pi} - \frac{b_2}{\pi},$$

其中我们记：

$$b_1 = T\int \ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu, \qquad b_2 = T\int \mu^2\ln\left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_1(\mu)}{T}}\right)d\mu.$$

通过直接计算并借助 $dressed\, energy$ 进行适当的迭代，我们发现：

$$b_1 = -\frac{\sqrt{\pi}T^{\frac{3}{2}}}{\left(16J - \frac{b_1}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}}f_{A_0}^{\frac{3}{2}}, \qquad b_2 = -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}T^{\frac{5}{2}}}{\left(16J - \frac{b_1}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}}}f_{A_0}^{\frac{5}{2}}$$

其中 $A_0 = 4J - H - \frac{b_1}{\pi} + \frac{b_2}{\pi}$。这里我们定义了函数 $f_n^{A_0} = Li_n(-e^{\frac{A_0}{T}})$，其中 $Li_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^n}{k^n}$ 是多对数函数。使用这些表达式，我们得到 *dressed energy* 和自由能的以下闭合形式：

$$\varepsilon_1(\lambda) = \left(16J - \frac{b_1}{\pi}\right)\lambda^2 - 4J + H - \frac{1}{4\sqrt{\pi J}} \frac{T^{\frac{3}{2}}}{\left(1 - \frac{b_1}{16\pi J}\right)^{\frac{1}{2}}} f_{A_0}^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{8\sqrt{\pi J}\,(16J)} \frac{T^{\frac{5}{2}}}{\left(1 - \frac{b_1}{16\pi J}\right)^{\frac{3}{2}}} f_{A_0}^{\frac{5}{2}},$$

$$f = \frac{T^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi J}\left(1 - \frac{b_1}{16\pi J}\right)^{\frac{1}{2}}} f_{A_0}^{\frac{3}{2}} - \frac{T^{\frac{5}{2}}}{16J\sqrt{\pi J}\left(1 - \frac{b_1}{16\pi J}\right)^{\frac{3}{2}}} f_{A_0}^{\frac{5}{2}}.$$

将核函数的展开带入表达式，选取前两项即可得到自由能表达式；对于缀饰能，第一项:

$$-2\pi J a_1(\lambda) \approx -2\pi J \cdot \frac{2}{\pi}(1 - 4\lambda^2) = -4J + 16J\lambda^2$$

卷积项用 $a_2(\lambda - \mu) \approx \frac{1}{\pi}(1 - (\lambda - \mu)^2)$ 代入并注意：

$$T\int (\lambda - \mu)^2 \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(\mu)/T})d\mu = \lambda^2 b_1 + b_2 - 2\lambda \underbrace{T\int \mu \ln(\cdots)d\mu}_{=0}$$

在对称（$\varepsilon_1(\mu)$ 为偶函数）情况下，$\int \mu \ln(\cdots)d\mu = 0$。因此卷积项近似为

$$\frac{1}{\pi}b_1 - \frac{1}{\pi}(\lambda^2 b_1 + b_2).$$

把各项合并得:

$$\varepsilon_1(\lambda) \approx (16J - \tfrac{b_1}{\pi})\lambda^2 - 4J + H + \frac{b_1}{\pi} - \frac{b_2}{\pi}.$$

利用多对数函数展开，通过级数展开可以获得以下表达式：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + ze^{-tx^2})dx = \sqrt{\frac{\pi}{t}}\,\mathrm{Li}_{3/2}(-z) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2(1 + ze^{-tx^2})dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{t^3}}\,\mathrm{Li}_{5/2}(-z)$$

做变换：$\alpha \equiv 16J - \frac{b_1}{\pi}, A_0 \equiv 4J - H - \frac{b_1}{\pi} + \frac{b_2}{\pi}$ 可得：

$$\varepsilon_1(\mu) \approx \alpha\mu^2 - A_0, \quad \ln(1 + e^{-\varepsilon_1(\mu)/T}) = \ln(1 + e^{(A_0 - \alpha\mu^2)/T}) = \ln(1 + ze^{-\frac{\alpha}{T}\mu^2}), \quad z \equiv e^{A_0/T}.$$

代入以上表达式并简化即可得最终结果。

使用标准热力学关系，我们可以直接计算磁学量，例如，磁化强度由下式给出：

$$M^z = \frac{1}{D_m}\frac{-T^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}} f_{1/2}^s \left(1 - \frac{T}{8J} f_{3/2}^s / f_{1/2}^s\right) + O((T/J)^2),$$

$$D_m = 1 - \frac{T^{1/2}}{\sqrt{16\pi J}} f_{1/2}^s + \frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi}(16J)^{3/2}} f_{3/2}^s.$$

这里 $f_n^s = Li_n(-e^{\frac{4J-H}{T}})$。为了看到自旋子的自由费米子性质，我们希望将磁化强度表示为：

$$M^z = M_s/N - \frac{\sqrt{2m^*T}}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{dx}{e^{(x^2 - \frac{H_s - H}{T})} + 1}.$$

这里 m^* 是自旋子的有效质量。使用显式的单位位点磁化强度，我们可以重写

为：

$$
\begin{aligned}
M^z &\approx M_s/N+\frac{T^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}}Li_{1/2}\left(-e^{\frac{H_s-H}{T}}\right)\left[1+\frac{T^{1/2}}{4\sqrt{\pi J}}Li_{1/2}\left(-e^{\frac{H_s-H}{T}}\right)\right]\\
&=M_s/N-\frac{T^{1/2}}{\pi\sqrt{J}}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{(x^2-\frac{H_s-H}{T})}+1}\left[1-\frac{T^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{(x^2-\frac{H_s-H}{T})}+1}\right]
\end{aligned}
$$

这给出有效质量 $m^*=\frac{1}{2J}\left(1-\frac{T^{1/2}}{\sqrt{\pi J}}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{(x^2-\frac{H_s-H}{T})}+1}\right)$ 当 $H\to H_s$。这显示了自由费米子的性质。

磁化强度等于饱和值减去翻转的自旋:$M^z=\frac{M_s}{N}-\rho_{\text{flip}}$ 其中 $\rho_{\text{flip}}=\int_{-\infty}^{\infty}\rho(\lambda)d\lambda.$ 引入占据数 $\frac{\rho(\lambda)}{\rho(\lambda)+\rho^h(\lambda)}=\frac{1}{1+e^{\varepsilon_1(\lambda)/T}}\equiv n(\lambda)$ 于是 $\rho(\lambda)=(\rho+\rho^h)(\lambda)n(\lambda)$. 代入 TBA 方程:$\rho(\lambda)=\Big[a_1(\lambda)-(a_2*\rho)(\lambda)\Big]n(\lambda)\approx a_1(\lambda)n(\lambda)$ 因此代入并使用前文近似得：

$$M^z\approx\frac{M_s}{N}-\int_{-\infty}^{\infty}a_1(\lambda)n(\lambda)d\lambda\approx\frac{M_s}{N}-\frac{2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}n(\lambda)d\lambda$$

在前面我们得到缀饰能的二次近似（把 b_1,b_2 的影响包含于系数）：

$$\varepsilon_1(\lambda)\approx\alpha\lambda^2-A_0\quad\alpha\equiv16J-\frac{b_1}{\pi}\quad A_0\equiv4J-H-\frac{b_1}{\pi}+\frac{b_2}{\pi}$$

在弱激发/接近饱和附近，常把 A_0 与化学势差（或“有效费米能”）联系起来。令 $n(\lambda)=\frac{1}{1+e^{(\alpha\lambda^2-A_0)/T}}=\frac{1}{1+e^{\frac{\alpha}{T}\lambda^2-A_0/T}}$. 把 a_1 的常数主项取出，有磁化与占据数的关系可以写成

$$M^z=\frac{M_s}{N}-C\int_{-\infty}^{\infty}n(\lambda)d\lambda$$

其中常数 C 可由 TBA 精确给出；在近饱和极限 $a_1\approx2/\pi$ 时 $C=2/\pi$。为了写成标准形式，我们把积分半区化（$n(\lambda)$ 为偶函数）并做变量替换：$x=\sqrt{\frac{\alpha}{T}}\lambda$，则 $d\lambda=\sqrt{\frac{T}{\alpha}}dx$。取 $C=2/\pi$, 代入并合并系数, 把系数重写成常用的“有效质量”记号, $\sqrt{\alpha}$ 表示为 $1/\sqrt{2m^*}$ 从而得到:

$$M^z=\frac{M_s}{N}-\frac{\sqrt{2m^*T}}{\pi}\int_0^\infty\frac{dx}{1+e^{x^2-(H_s-H)/T}}$$

其中 H_s 是饱和场，并且 $A_0\approx H_s-H$. 在零阶近似，忽略由 b_1,b_2 引起的小修正。磁化从饱和值减去一个由自旋子占据的费米积分，积分里是标准的费米分布对二次色散 x^2 的贡献。从缀饰能的二次项 $\varepsilon_1(\lambda)\approx\alpha\lambda^2-A_0$ 把谱写成动能形式 $\varepsilon(k)\sim\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}-\mu$ 与 $\alpha\lambda^2$ 二次项对应，定义 m^* 使得 $\alpha\lambda^2\leftrightarrow\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}$. 无量纲化 $\hbar=1$，并做变量标度，从而得到:

$$m^*=\frac{1}{2J}\left(1-\frac{T^{1/2}}{\sqrt{\pi J}}\int_0^\infty\frac{dx}{1+e^{x^2-(H_s-H)/T}}\right)\quad(H\to H_s)$$

这部分的具体推导放在了 Appendix E

标度函数

在量子相变附近，热涨落和量子涨落破坏了 TLL 相中的前向散射过程。在临界点 H_s 附近且 $|H-H_s|/T\ll1$ 时，所有磁学性质都可以纳入普适的标度形式。

这被称为量子临界区域。我们可以直接从自由能的闭合形式得到标度形式，并附加条件 $J/T \gg 1$。然后我们得到临界区域中自由能的标度形式：

$$f \approx \frac{T^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{\pi J}} Li_{\frac{3}{2}}\left(-e^{\frac{4J-H}{T}}\right).$$

随之得到磁化强度和磁化率的标度形式：

$$M^z = \frac{1}{2} + \frac{T^{\frac{1}{2}}}{2\sqrt{\pi J}} Li_{\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{4J-H}{T}}\right) = \frac{1}{2} + T^{1/2} M(\Delta H/T),$$

$$\chi = \frac{\partial M^z}{\partial H} = -\frac{1}{2\sqrt{\pi J T}} Li_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{4J-H}{T}}\right) = T^{-1/2} G(\Delta H/T).$$

在上述方程中，函数 $M(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi J}} f^s_{1/2}(x), G(x) = -\frac{1}{2\sqrt{\pi J}} f^s_{-1/2}(x)$ 是无量纲的标度函数。这里我们记：

$$f^s_n\left(\frac{\Delta}{T}\right) = Li_n\left(-e^{\frac{\Delta}{T}}\right).$$

其中 $\Delta = H_s - H = 4J - H$。

用多对数函数的一条标准微分关系 $\frac{d}{dz}\operatorname{Li}_s(z) = \frac{1}{z}\operatorname{Li}_{s-1}(z)$ 以及链式法则来对 H 求导，得到磁化强度和磁化率。磁化定义为 $M^z = -\frac{\partial f}{\partial H} = -\frac{\partial}{\partial H}\left[\frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi J}}\operatorname{Li}_{3/2}(z)\right]$, 在对 H 求导时，$T^{3/2}/(2\sqrt{\pi J})$ 看作常数，只需对 $\operatorname{Li}_{3/2}(z)$ 用链式法则：

$$\frac{d}{dH}\operatorname{Li}_{3/2}(z(H)) = \frac{dz}{dH}\cdot\frac{d}{dz}\operatorname{Li}_{3/2}(z) = \frac{dz}{dH}\cdot\frac{1}{z}\operatorname{Li}_{1/2}(z).$$

而 $z = -e^{(4J-H)/T}$，所以 $\frac{dz}{dH} = z\cdot\frac{d}{dH}(\frac{4J-H}{T}) = z\cdot(-\frac{1}{T})$, 代入得 $\frac{d}{dH}\operatorname{Li}_{3/2}(z) = -\frac{1}{T}\operatorname{Li}_{1/2}(z)$ 因此

$$M^z = -\frac{T^{3/2}}{2\sqrt{\pi J}}\left(-\frac{1}{T}\operatorname{Li}_{1/2}(z)\right) = \frac{T^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}}\operatorname{Li}_{1/2}(z).$$

常数项 $1/2$（来自自旋极化的基态饱和项——即在零激发时的部分磁化）。将该常数项加回，得到

$$\boxed{M^z = \tfrac{1}{2} + \frac{T^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}}\operatorname{Li}_{1/2}(-e^{(4J-H)/T}),}$$

磁化率定义为 $\chi = \frac{\partial M^z}{\partial H}$，通过同样的步骤也可以算得。为了将结果写成“无量纲的标度函数”形式，定义

$$f^s_n(\tfrac{\Delta}{T}) \equiv \operatorname{Li}_n(-e^{\Delta/T}), \qquad \Delta = H_s - H = 4J - H.$$

也就是把出现的参数组合 $-e^{(4J-H)/T}$ 记成统一的无量纲参数 Δ/T。于是

$$\boxed{f^s_n(\tfrac{\Delta}{T}) = \operatorname{Li}_n(-e^{\Delta/T}),}$$

类似地，比热的标度函数由下式给出：

$$c_v = T\frac{\partial s}{\partial T} = -T\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = \sqrt{\frac{T}{\pi J}}\left[-\frac{3}{8}Li_{\frac{3}{2}}\left(-e^{\frac{\Delta}{T}}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{T}\right)Li_{\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{\Delta}{T}}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{T}\right)^2 Li_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{\frac{\Delta}{T}}\right)\right]$$
$$= T^{\frac{1}{2}} C(\Delta H/T).$$

因此我们读出临界动态指数 $z=2$ 和关联长度指数 $\nu=\frac{1}{2}$。此外，我们还可以得到临界区域中 $Wilson$ 比的标度形式：

$$R_W=\frac{4}{3}\left(\frac{\pi k_B}{g\mu_B}\right)^2\frac{f_s^s}{f_{s/2}^s-\frac{\Delta f_s^s}{T}f_{s/2}^s+\left(\frac{\Delta}{T}\right)^2 f_{s-1/2}^s}\approx\left(\frac{4\pi k_B}{3g\mu_B}\right)^2\frac{f_s^s}{f_{s/2}^s}.$$

在零温度下，当磁场超过饱和磁场 H_s 时，反铁磁海森堡自旋链发生从磁化基态到铁磁相的相变。在铁磁相中，能隙导致具有带隙色散的自旋波准粒子。能隙由 $T\to 0$ 时的 TBA 方程得到，即：

$$\varepsilon_1(0)=H-4J=\Delta_g,$$

其中 $H\geq 4J$。在低温下，条件 $\Delta_g/T\gg 1$ 始终成立，然后我们展开自由能，得到用能隙表示的磁化率和比热：

$$\chi=-\frac{1}{2\sqrt{\pi JT}}\mathrm{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{-\frac{\Delta_g}{T}}\right),$$

比热：

$$c_v=\sqrt{\frac{T}{\pi J}}\left[-\frac{3}{8}\mathrm{Li}_{\frac{3}{2}}\left(-e^{-\frac{\Delta_g}{T}}\right)+\frac{1}{2}\left(-\frac{\Delta_g}{T}\right)\mathrm{Li}_{\frac{1}{2}}\left(-e^{-\frac{\Delta_g}{T}}\right)-\frac{1}{2}\left(-\frac{\Delta_g}{T}\right)^2\mathrm{Li}_{-\frac{1}{2}}\left(-e^{-\frac{\Delta_g}{T}}\right)\right].$$

取极限 $\lim_{|z|\to 0}\mathrm{Li}_s(z)=z$，磁化率和比热的能隙方程可以写为：

$$\chi=-\frac{1}{2\sqrt{\pi JT}}\left(-e^{-\frac{\Delta_g}{T}}\right)=\frac{1}{2\sqrt{\pi JT}}e^{-\frac{\Delta_g}{T}},$$

$$c_v=\sqrt{\frac{T}{\pi J}}\left[\frac{3}{8}+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_g}{T}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta_g}{T}\right)^2\right]e^{-\frac{\Delta_g}{T}}.$$

显然，磁化率和比热随能隙呈指数衰减。这个性质在正文中我们的数值和实验拟合中直接可见。

前面是单纯的计算，注意 $R_W=\frac{4}{3}\left(\frac{\pi k_B}{g\mu_B}\right)^2\frac{\chi}{c_v/T}$ 定义即可。

自由费米子性质

在临界区域，反铁磁体 $CuPzN$ 的热力学性质可以用弱相互作用的费米子系综来描述。我们知道，稀薄磁振子可以精确映射到自由费米子。在量子临界点附近，可以使用理想费米气体来表示磁化强度，用每个自旋的费米子数表示为：

$$N_m/L=\int_0^\infty D(\epsilon)f(\epsilon-\mu)d\epsilon,$$

其中 L 是一维链中的自旋数目，$D(\epsilon)$ 是态密度，对应于自由费米子谱 $\epsilon=p^2/(2m)$，m 是有效质量。函数 $f(\epsilon-\mu)$ 是费米分布函数，且 $f(x)=(e^{\beta x}+1)^{-1},\beta=1/(k_BT)$，化学势 μ 由 $\mu=g\mu_B(H_s-H)$ 给出，这里 $H_s=4J$。在一维中，自由费米子谱：

$$\epsilon=p^2/(2m)\quad\text{所以}\quad d\epsilon=\frac{p}{m}dp=\sqrt{\frac{2\epsilon}{m}}dp.$$

然后态密度可以写为：

$$D(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{2L}{h}dp=\frac{2L}{h}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}d\varepsilon=\frac{2L}{2\pi h}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}d\varepsilon=\frac{L}{\pi h}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}d\varepsilon=\frac{L\sqrt{m/2}}{\pi h}\varepsilon^{-1/2}d\varepsilon.$$

对于长度为 L 的一维链，采用周期性边界条件：$\psi(x+L)=\psi(x)$, 平面波解为 $\psi(x)\propto e^{ipx/\hbar}$，边界条件要求：$e^{ipL/\hbar}=1 \quad\Rightarrow\quad pL/\hbar=2\pi n,\quad n\in\mathbb{Z}$, 因此动量取离散值：$p_n=\frac{2\pi\hbar}{L}n$, 相邻动量态的间隔为：$\Delta p=\frac{2\pi\hbar}{L}$. 在动量区间 $\mathrm{d}p$ 内，量子态数目（不考虑自旋）为：$\mathrm{d}n=\frac{\mathrm{d}p}{\Delta p}=\frac{L}{2\pi\hbar}\mathrm{d}p$, 对于自旋-1/2 粒子，每个动量态可容纳两个自旋投影（$\uparrow$ 和 $\downarrow$）。因此，总状态数需乘以自旋简并度 $g_s=2$，并代入 $h=2\pi\hbar$：

$$\mathrm{d}N=\frac{L}{\pi\hbar}\mathrm{d}p=\frac{2L}{2\pi\hbar}\mathrm{d}p=\frac{2L}{h}\mathrm{d}p$$

态密度 $D(\varepsilon)$ 定义为：在能量区间 $[\varepsilon,\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon]$ 内的状态数。由状态数守恒：

$$D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon=\mathrm{d}N=\frac{2L}{h}\mathrm{d}p$$

后续通过色散关系 $\varepsilon=p^2/(2m)$ 将 $\mathrm{d}p$ 用 $\mathrm{d}\varepsilon$ 表示，即可得到能量空间的显式表达式：

$$D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon=\frac{2L}{h}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}\mathrm{d}\varepsilon$$

因此我们得到磁振子的数目：

$$\frac{N_m}{L}=\int_0^\infty D(\varepsilon)f(\varepsilon-\mu)d\varepsilon=\frac{\sqrt{2mk_BT}}{\pi h}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{x^2-\mu/(k_BT)}+1}$$

以及磁化强度：

$$M^z=M_s-M=M_s-\frac{N_m}{L}=M_s-\frac{\sqrt{2mk_BT}}{\pi h}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{x^2-\mu/(k_BT)}+1}.$$

向下自旋 M（或磁振子的数目）可以精确表示为：

$$\begin{aligned}M&=\frac{\sqrt{2mk_BT}}{\pi h}\int_0^\infty\frac{dx}{e^{x^2-\mu/(k_BT)}+1}=\frac{\sqrt{(m/2)k_BT}}{\pi h}\left[-\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)Li_{1/2}(-e^{\mu/(k_BT)})\right]\left(\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}\right)\\&=-\frac{(k_BT)^{1/2}}{2\sqrt{\pi J}}Li_{1/2}(-e^{\frac{g\mu_B(H_s-H)}{k_BT}}).\end{aligned}$$

这里我们已经将有效质量 $m=h^2/(2J)$ 代入上述方程。我们想指出，这个有效质量仅在 QCP 处是正确的。类似地，我们可以得到具有费米分布的内能：

$$E=\int_0^\infty\varepsilon D(\varepsilon)f(\varepsilon-\mu)d\varepsilon=\frac{\sqrt{m/2}}{\pi h}\int_0^\infty\frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}d\varepsilon=-\frac{1}{4\sqrt{\pi J}}(K_BT)^{\frac{3}{2}}Li_{3/2}(-e^{\frac{g\mu_B(H_s-H)}{k_BT}}).$$

比热为：

$$\begin{aligned}c_v(T,H)&=\frac{\partial}{\partial T}(E-\mu M)=\frac{\partial E}{\partial T}-\mu\frac{\partial M}{\partial T}\\&=\sqrt{\frac{T}{\pi J}}\left[-\frac{3}{8}Li_{3/2}\left(-e^{\frac{\mu}{T}}\right)+\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{T}\right)Li_{1/2}\left(-e^{\frac{\mu}{T}}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{T}\right)^2Li_{-1/2}\left(-e^{\frac{\mu}{T}}\right)\right]\end{aligned}$$

这与量子临界处 TBA 的结果一致。这里化学势 $\mu=H_s-H$。在临界区域，比热的标度函数可以写为：

$$c_v=\sqrt{\frac{T}{\pi J}}\left[-\frac{3}{8}Li_{3/2}\left(-e^{y}\right)+\frac{1}{2}\frac{y}{T}Li_{1/2}\left(-e^{y}\right)-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{T}\right)^2Li_{-1/2}\left(-e^{y}\right)\right].$$

这里我们定义了一个参数 $y = g\mu_B(H_s - H)/k_BT$。我们已经知道比热具有双峰结构。因此可以通过对磁场 H 微分比热来确定峰位：

$$-\frac{1}{8}Li_{1/2}(-e^y) + \frac{y}{2}Li_{-1/2}(-e^y) + \frac{y^2}{2}Li_{-3/2}(-e^y) = 0.$$

我们得到三个根：

$$y_1 = -1.5629 \quad y_2 = 3.6205, \quad y_3 = 0.4284.$$

根 y_3 对应于 $Wilson$ 比的最大值。而其余两个根给出了磁振子和自旋子的两个交叉温度：

$$T_{\text{magnon}} = \frac{1}{\alpha_1}(H - H_s), \quad T_{\text{spinon}} = \frac{1}{\alpha_2}(H_s - H).$$

其中 $\alpha_1 = y_1k_B/(g\mu_B)$ 和 $\alpha_2 = y_2k_B/(g\mu_B)$，这里的数值为 $y_1 = 1.5629$ 和 $y_2 = 3.6205$。磁化强度的最大值可以通过下式得到：

$$\frac{\partial M^z}{\partial T} = \frac{1}{2\sqrt{\pi JT}}\left[\frac{1}{2}Li_{1/2}(-e^y) - yLi_{-1/2}(-e^y)\right] = 0$$

这产生：

$$2y = Li_{1/2}(-e^y)/Li_{-1/2}(-e^y),$$

这个方程的根是：$y_M = 1.3118$, 那么：

$$T_M = \frac{1}{\alpha_M}(H_s - H) \qquad \alpha_M = y_Mk_B/(g\mu_B) = 0.8479$$

TBA 方程的数值解

除了某些极限情况外 $dressedenergy$ 的解析表达式极难推导，参见以上各节。这里我们发展了新的数值方法来处理一维海森堡链的有限温度磁性质。TBA 方程由无限多个 $\varepsilon_n(\lambda)$ 的耦合积分方程组成。实际上，数值求解这些方程也非常困难。我们观察到 $\varepsilon_n(\lambda)$ 对于大的 λ 值趋近于一个常数，即：

$$\varepsilon_n(\infty) = T\ln\left[\left(\frac{\sinh[(n+1)H/(2T)]}{\sinh[H/(2T)]}\right)^2 - 1\right].$$

此外，$|\varepsilon_n(\lambda) - \varepsilon_n(\infty)|$ 随着弦长 n 的增加而减小。因此我们可以利用这一优势来评估量 $\Delta\varepsilon_n^+(\lambda) = \varepsilon_n^+(\lambda) - \varepsilon_n^-(\infty)$。为了实现这个目标，我们将 TBA 方程重写为：

$$\Delta\varepsilon_n^+(\lambda) = -2\pi Ja_n(\lambda) - \sum_{m=1}^{n_c} A_{m,n} * \Delta\varepsilon_n^-(\lambda) - \sum_{m=n_c+1}^{\infty} A_{m,n} * \Delta\varepsilon_n^-(\lambda).$$

我们选择截断弦数 n_c 足够大，使得 $\sum_{m=n_c+1}^{\infty} A_{m,n} * \Delta\varepsilon_n^-(\lambda)$ 可忽略地小。然后我们能够对 $dressed\ energies$ 和热力学量进行数值计算。

对于 $dressed\ energy$，自由能由下式给出：

$$f = \frac{H}{2} - 2J\ln 2 - T\ln[\cosh(\frac{H}{2T})] + \sum_{n=1}^{n_c} g_n + \sum_{n=n_c+1}^{\infty} g_n,$$

$$g_n = \int d\lambda a_n(\lambda)\Delta\varepsilon_n^-(\lambda).$$

这里我们发现 g_n 相对于弦长 n 以幂律衰减：

$$g_n|_{n\gg 1} \propto n^{-a}$$

其中 a 是一个常数指数。例如，如果我们取 $k_BT/J \approx 0.2$ 和 $g\mu_BH/J \approx 0$，我们看到 $a \approx 3$。a 的值随磁场 H 增加而增加。我们观察到当 $g\mu_BH/J \approx 2$ 时，$a \approx 10$。这表明即使在零磁场极限下，我们仍然可以数值求解 TBA 方程。

在实际的数值过程中，我们使用 $|(g_{n+1}-g_n)/g_1| < d$ 来估计误差，其中 d 是精度。例如，我们可以通过设定精度 $d = 10^{-6}$ 来估计弦长截断 n_c，参见正文中的图 1。平台特征表明，对于某个 H 的区间，存在一个截断 n_c，它能在给定精度 d 下给出高精度的数值结果。当磁场 H 非常小时，数值计算中需要更高长度的弦。在没有磁场的情况下，应考虑高长度自旋弦的贡献。在我们的数值计算中，主要贡献 $\sum_{n=1}^{\infty}\varepsilon_n^-(\infty) = \frac{H}{2} - 2J\ln 2 - T\ln[\cosh(\frac{H}{2T})]$ 已经被考虑在内。虽然方程可以用来计算自由能，但由于 $\Delta\varepsilon_n$ 的数值累积误差，这不是一个好的选择。方程：

$$f = \frac{H}{2} - 2J\ln 2 + \frac{1}{2}\varepsilon_1^+(\infty) - \int d\lambda G(\lambda)\Delta\varepsilon_1^+(\lambda)$$

给出了更好的数值结果。

我们在上述方程中已经解析地处理了这些项。我们只需要精确计算 $\Delta\varepsilon_n^-(\lambda)$。在精度 $d = 10^{-6}$ 下，我们发现 $n_c = 11$ 足以维持这样的精度。特别地，我们想强调，在临界点 H_s 附近，我们发现长度为 1 的弦足以精确捕捉临界点 H_s 附近自旋链的热力学和磁性质。

1.4 Summary:The Physical intuition

2 Form factor and Correlation function of Heisenberg XXX spin chain

3 Appendix

Appendix A

自由能泛函 $\mathcal{F}$：

$$\begin{aligned}\mathcal{F} =& \sum_M \int d\lambda \rho_M e_M^0 - T\sum_M \int d\lambda [(\rho_M + \rho_M^h)\ln(\rho_M+\rho_M^h) - \rho_M \ln\rho_M - \rho_M^h\ln\rho_M^h] \\ &- \sum_M \int d\lambda \zeta_M(\lambda)[\rho_M + \rho_M^h - a_{2M+1} + \sum_{M'}(A_{M,M'} * \rho_{M'})]\end{aligned}$$

其中 ζ 是拉格朗日乘子。在平衡态，$\mathcal{F}$ 对 ρ_M^h 和 ρ_M 的变分为零。

$$\begin{aligned}\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho_M^h} =& 0 : -T\left[\ln(\rho_M+\rho_M^h) - \ln\rho_M^h\right] - \zeta_M(\lambda) = 0 \\ \Rightarrow& \zeta_M(\lambda) = -T\ln\left(\frac{\rho_M+\rho_M^h}{\rho_M^h}\right) = -T\ln\left(1+\frac{\rho_M}{\rho_M^h}\right) = \varepsilon_M^-(\lambda)\end{aligned}$$

$$\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho_M}=0:$$

$$e_M^0(\lambda)-T\left[\ln(\rho_M+\rho_M^h)-\ln\rho_M\right]-\zeta_M(\lambda)-\sum_{M'}\int d\mu\zeta_{M'}(\mu)A_{M',M}(\mu-\lambda)=0$$

利用 $\zeta_M(\lambda)=\varepsilon_M^-(\lambda)$：

$$e_M^0(\lambda)-\varepsilon_M^+(\lambda)-\varepsilon_M^-(\lambda)-\sum_{M'}\int d\mu\varepsilon_{M'}^-(\mu)A_{M',M}(\mu-\lambda)=0$$

利用关系 $\varepsilon_M^+(\lambda)+\varepsilon_M^-(\lambda)=\varepsilon_M(\lambda)$：

$$e_M^0(\lambda)-\varepsilon_M(\lambda)-\sum_{M'}\int d\mu A_{M,M'}(\lambda-\mu)\varepsilon_{M'}^-(\mu)=0$$

整理得到 $Yang-Yang$ 方程：

$$\varepsilon_M(\lambda)=e_M^0(\lambda)-\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon_{M'}^-)(\lambda)$$

接下来推导自由能密度 f 。在平衡态，自由能密度 f 等于 $\mathcal{F}_{\min}$，即 $\mathcal{F}$ 减去约束项：

$$f=\sum_M\int d\lambda\rho_M e_M^0-T\sum_M\int d\lambda[(\rho_M+\rho_M^h)\ln(\rho_M+\rho_M^h)-\rho_M\ln\rho_M-\rho_M^h\ln\rho_M^h]$$

定义熵项 $\mathcal{S}$ 并简化:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}&=-T\sum_M\int d\lambda[(\rho_M+\rho_M^h)\ln(\rho_M+\rho_M^h)-\rho_M\ln\rho_M-\rho_M^h\ln\rho_M^h]\\
&=-T\sum_M\int d\lambda\left\{(\rho_M+\rho_M^h)\left[\ln\frac{\rho_M+\rho_M^h}{\rho_M^h}+\ln\rho_M^h\right]-\rho_M\ln\rho_M-\rho_M^h\ln\rho_M^h\right\}\\
&=-T\sum_M\int d\lambda\left\{(\rho_M+\rho_M^h)\ln\left(1+\frac{\rho_M}{\rho_M^h}\right)+\rho_M\ln\rho_M^h+\rho_M^h\ln\rho_M^h-\rho_M\ln\rho_M-\rho_M^h\ln\rho_M^h\right\}\\
&=-T\sum_M\int d\lambda\left\{(\rho_M+\rho_M^h)\ln\left(1+\frac{\rho_M}{\rho_M^h}\right)-\rho_M\left(\ln\rho_M-\ln\rho_M^h\right)\right\}
\end{aligned}$$

利用关系 $\ln(\frac{\rho_M}{\rho_M^h})=-\frac{\varepsilon_M}{T}$ 和 $\ln(1+\frac{\rho_M}{\rho_M^h})=-\frac{\varepsilon_M^-}{T}$:

$$\mathcal{S}=-T\sum_M\int d\lambda\left\{(\rho_M+\rho_M^h)\left(-\frac{\varepsilon_M^-}{T}\right)-\rho_M\left(-\frac{\varepsilon_M}{T}\right)\right\}=\sum_M\int d\lambda\left[(\rho_M+\rho_M^h)\varepsilon_M^--\rho_M\varepsilon_M\right]$$

将 YBE 的 e_M^0 表达式 $e_M^0(\lambda)=\varepsilon_M(\lambda)+\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon_{M'}^-)(\lambda)$ 代入 $\rho_M e_M^0$:

$$f=\sum_M\int d\lambda\rho_M\left[\varepsilon_M+\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon_{M'}^-)\right]+\sum_M\int d\lambda\left[(\rho_M+\rho_M^h)\varepsilon_M^--\rho_M\varepsilon_M\right]$$

展开并消去 $\rho_M\varepsilon_M$ 项：

$$f=\sum_M\int d\lambda\rho_M\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon_{M'}^-)+\sum_M\int d\lambda(\rho_M+\rho_M^h)\varepsilon_M^-$$

现在我们使用守恒律 $\rho_M+\rho_M^h=a_{2M+1}-\sum_{M'}(A_{M,M'}*\rho_{M'})$:

$$f=\sum_M\int d\lambda\rho_M\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon_{M'}^-)+\sum_M\int d\lambda\varepsilon_M^-\left[a_{2M+1}-\sum_{M'}(A_{M,M'}*\rho_{M'})\right]$$

展开第二项：

$$f=\underbrace{\sum_M\int d\lambda\rho_M\sum_{M'}(A_{M,M'}*\varepsilon^-_{M'})}_{\text{项 A}}+\underbrace{\sum_M\int d\lambda\varepsilon^-_M a_{2M+1}}_{\text{项 C}}-\underbrace{\sum_M\int d\lambda\varepsilon^-_M\sum_{M'}(A_{M,M'}*\rho_{M'})}_{\text{项 B}}$$

我们证明 项 A = 项 B:

项 A: $\sum_M\sum_{M'}\int d\lambda\int d\mu\rho_M(\lambda)A_{M,M'}(\lambda-\mu)\varepsilon^-_{M'}(\mu)$

项 B: $\sum_M\sum_{M'}\int d\lambda\int d\mu\varepsilon^-_M(\lambda)A_{M,M'}(\lambda-\mu)\rho_{M'}(\mu)$

通过交换 $\lambda\leftrightarrow\mu$ 和 $M\leftrightarrow M'$，以及利用 $A_{M,M'}(\lambda-\mu)=A_{M',M}(\mu-\lambda)$ 的性质，可以证明 项 A = 项 B。因此，项 A 和项 B 相互抵消。得到最终结果：

$$\boxed{f=\sum_M\int d\lambda\varepsilon^-_M(\lambda)a_{2M+1}(\lambda)=\sum_M\int d\lambda\varepsilon^-_M(\lambda)a_n(\lambda)}$$

Appendix B

令常数 $C\equiv\int_{-Q}^{Q}\frac{d\mu}{\pi}\varepsilon_1^{(0)}(\mu)$. 近似把 TBA 方程卷积项写成 $\frac{1}{\pi}\int_{-Q}^{Q}\varepsilon(\mu)d\mu=C$。于是:

$$\varepsilon_1^{(0)}(\lambda)\approx-2\pi Ja_1(\lambda)+H-C.$$

在 $\lambda=Q$ 处有边界条件 $\varepsilon_1^{(0)}(Q)=0$，因此

$$0=-2\pi Ja_1(Q)+H-C\quad\Rightarrow\quad C=H-2\pi Ja_1(Q).$$

代回得到一个闭式表达:

$$\boxed{\varepsilon_1^{(0)}(\lambda)=2\pi J[a_1(Q)-a_1(\lambda)]}$$

计算自由能：

$$f_0=\int_{-Q}^{Q}a_1(\mu)2\pi J[a_1(Q)-a_1(\mu)]d\mu=2\pi J\Big[a_1(Q)\int_{-Q}^{Q}a_1(\mu)d\mu-\int_{-Q}^{Q}a_1(\mu)^2d\mu\Big].$$

我们需要两类积分（记为 A,B）：

$$A\equiv\int_{-Q}^{Q}a_1(\mu)d\mu,\qquad B\equiv\int_{-Q}^{Q}a_1(\mu)^2d\mu.$$

代入计算：

$$A=\frac{1}{2\pi}\int_{-Q}^{Q}\frac{d\mu}{\mu^2+\frac{1}{4}}=\frac{1}{2\pi}\cdot\frac{1}{(1/2)}\big[\arctan(2\mu)\big]_{-Q}^{Q}=\frac{2}{\pi}\arctan(2Q).$$

对于 $B=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-Q}^{Q}\frac{d\mu}{(\mu^2+\frac{1}{4})^2}$. 我们采用以下积分结果：

$$\int\frac{dx}{(x^2+a^2)^2}=\frac{x}{2a^2(x^2+a^2)}+\frac{1}{2a^3}\arctan\frac{x}{a}+C.$$

把 $a=\frac{1}{2}$ 代入，得到（省去中间代数）

$$\int_{-Q}^{Q}\frac{d\mu}{(\mu^2+\frac{1}{4})^2}=\frac{4Q}{1+4Q^2}+8\arctan(2Q).$$

因此

$$B=\frac{1}{4\pi^2}\Big(\frac{4Q}{1+4Q^2}+8\arctan(2Q)\Big)=\frac{1}{\pi^2}\Big(\frac{4Q}{1+4Q^2}+2\arctan(2Q)\Big).$$

把 A,B 代回，先写出 $a_1(Q)$：

$$a_1(Q)=\frac{1}{2\pi(Q^2+\frac{1}{4})}=\frac{2}{\pi(1+4Q^2)}.$$

代入：

$$\begin{aligned}f_0&=2\pi J\Big[a_1(Q)A-B\Big]\\&=2\pi J\Big[\frac{2}{\pi(1+4Q^2)}\cdot\frac{2}{\pi}\arctan(2Q)-\frac{1}{\pi^2}\Big(\frac{4Q}{1+4Q^2}+2\arctan(2Q)\Big)\Big].\end{aligned}$$

约简系数并整理分母（把公因子 $2J/\pi$ 提出）得到

$$\begin{aligned}f_0&=\frac{2J}{\pi}\Big[\frac{4}{1+4Q^2}\arctan(2Q)-\Big(\frac{4Q}{1+4Q^2}+2\arctan(2Q)\Big)\Big]\\&=\frac{2J}{\pi}\frac{2[(1-4Q^2)\arctan(2Q)-2Q]}{1+4Q^2}.\end{aligned}$$

再合并常数因子：

$$\boxed{f_0=\frac{4J}{\pi},\frac{(1-4Q^2)\arctan(2Q)-2Q}{1+4Q^2}}$$

Appendix C

已知：

$$f_0(Q)=\frac{4J}{\pi}\cdot\frac{(1-4Q^2)\arctan(2Q)-2Q}{1+4Q^2}$$

物理关系：

$$M^z=M_s-\frac{\partial f_0}{\partial H},\qquad M_s=\tfrac{1}{2}.$$

注意 f_0 是通过截断动量 Q 表达的，而 Q 又依赖于外场 H。因此

$$\frac{\partial f_0}{\partial H}=\frac{df_0}{dQ}\cdot\frac{dQ}{dH}.$$

近临界区（$H\lesssim H_s$，$Q\ll 1$）常用的主导近似关系为

$$H_s=4J,\qquad 16JQ^2\approx H_s-H.$$

等价地

$$Q=\sqrt{\frac{H_s-H}{16J}}.$$

我们在前面计算得到小 Q 的主导展开：

$$f_0(Q)=-\frac{128J}{3\pi}Q^3+O(Q^5).$$

（上面系数可由把 $\arctan(2Q)=2Q-\frac{8}{3}Q^3+O(Q^5)$ 代入并整理得到。）因此：

$$\frac{df_0}{dQ}=-\frac{128J}{\pi}Q^2+O(Q^4).$$

代入：

$$Q = (16J)^{-1/2}(H_s - H)^{1/2}.$$

对 H 求导：

$$\frac{dQ}{dH} = \frac{1}{2}(16J)^{-1/2}(H_s - H)^{-1/2} \cdot (-1) = -\frac{1}{8\sqrt{J}}\frac{1}{\sqrt{H_s - H}}.$$

为便于与 Q 相结合，用 $H_s - H = 16JQ^2$ 消去 $\sqrt{H_s - H}$：

$$\sqrt{H_s - H} = 4\sqrt{J}Q \quad \Rightarrow \quad \frac{dQ}{dH} = -\frac{1}{8\sqrt{J}} \cdot \frac{1}{4\sqrt{J}Q} = -\frac{1}{32JQ}.$$

联立:

$$\frac{\partial f_0}{\partial H} = \frac{df_0}{dQ}\frac{dQ}{dH} \approx \Big(-\frac{128J}{\pi}Q^2\Big) \cdot \Big(-\frac{1}{32JQ}\Big) = \frac{128J}{\pi} \cdot \frac{1}{32J}Q = \frac{4}{\pi}Q.$$

（项中 J 抵消了，且高阶 $O(Q^3)$ 项被丢弃——我们只保留主导项。）因此

$$M^z = M_s - \frac{\partial f_0}{\partial H} = \frac{1}{2} - \frac{4}{\pi}Q.$$

把 Q 表示为 H 的函数：

$$\frac{4}{\pi}Q = \frac{4}{\pi}\sqrt{\frac{H_s - H}{16J}} = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{1}{4}\sqrt{\frac{H_s - H}{J}} = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{H_s - H}{J}}.$$

注意 $H_s/J = 4$，因此 $\sqrt{H_s/J} = 2$。把它写成常见的无量纲形式：

$$\sqrt{\frac{H_s - H}{J}} = \sqrt{\frac{H_s}{J}}\sqrt{1 - \frac{H}{H_s}} = 2\sqrt{1 - \frac{H}{H_s}}.$$

于是：

$$\boxed{M^z = \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi}\sqrt{1 - \frac{H}{H_s}}.}$$

它显示在 $H \to H_s^-$ 时 $M_s - M^z \propto \sqrt{H_s - H}$。磁化率定义为

$$\chi = \frac{\partial M^z}{\partial H}.$$

对于：

$$M^z = \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi}(1 - \tfrac{H}{H_s})^{1/2},$$

对 H 求导：

$$\frac{d}{dH}\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{1/2} = \frac{1}{2}\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{-1/2} \cdot \Big(-\frac{1}{H_s}\Big) = -\frac{1}{2H_s}\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{-1/2}.$$

因此

$$\chi = \frac{\partial M^z}{\partial H} = -\frac{2}{\pi} \cdot \Big(-\frac{1}{2H_s}\Big)\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{-1/2} = \frac{1}{\pi H_s}\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{-1/2}.$$

把 $H_s = 4J$ 代入，等价写法为

$$\boxed{\chi = \frac{1}{\pi H_s}\Big(1 - \frac{H}{H_s}\Big)^{-1/2} = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{J(H_s - H)}}.}$$

最后一式通过把 $1/H_s$ 和 $(1 - H/H_s)^{-1/2}$ 合并并代入 $H_s = 4J$ 得到

当 $H \to H_s^-$ 时 $M_s - M^z \propto (H_s - H)^{1/2}$ ——方程给出该平方根行为。磁化率 χ 在临界点 $H \to H_s^-$ 发散，$\chi \propto (H_s - H)^{-1/2}$，说明临界指数 $\gamma = 1/2$（就此量而言）。在标度形式中写成

$$1 - \frac{M^z}{M_s} = \frac{4}{\pi}\left(1 - \frac{H}{H_s}\right)^{1/2},$$

从而临界场处的临界指数 δ（定义见文中标度关系）为 $\delta = 2$。

Appendix D

唯象地，场论哈密顿量可以重写为长波极限下的有效哈密顿量，它本质上描述了自旋链的低能物理，即：

$$H = \frac{\hbar}{2\pi}\int dx \left[\frac{v_s K_s}{\hbar^2}(\pi\Pi(x))^2 + \frac{v_s}{K_s}(\nabla\phi(x))^2\right],$$

其中正则动量 Π 与相位 ϕ 共轭，服从标准玻色对易关系 $[\phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y)$。在这种方法中，空间中的密度变化被视为谐波的叠加。量子化的谐波是玻色子，并形成一维金属态的新本征态。在低能激发中，这些量子化波之间的相互作用是边际的。*Luttinger* 参数 K_s 和声速 v_s 表征了低能物理，并决定了关联函数的远距离渐近行为。因此，有效哈密顿量捕捉了此类系统的 *TLL* 物理。对于自旋 (-1/2) 海森堡链，在玻色化语言中，哈密顿量中的磁化项 $H_m = -g\mu_B H M^z$ 可以用场 $\partial_x\phi$ 表示为：

$$H_m = \frac{g\mu_B}{\pi}\int dx H \partial_x \phi$$

这正是自由无自旋费米子中的化学势项。使用哈密顿量的 *TLL* 形式，单位长度的磁化率由下式给出：

$$\chi = \frac{-(g\mu_B)}{\pi}\frac{d\langle\nabla\phi(x_0)\rangle}{dH} = \frac{(g\mu_B)^2 K_s}{\pi v_s}$$

回顾我们忽略的常数因子，那么我们得到：

$$K_s = \frac{\pi v_s}{(g\mu_B)^2}\chi.$$

而对于 *TLL* 区域的比热，我们有：

$$c_v/T = \frac{\pi k_B^2}{3 v_s}.$$

此外，*Wilson* 比被用来表征相互作用效应和自旋涨落。利用磁化率和比热的关系，我们得到：

$$R_W = \frac{4}{3}\left(\frac{\pi k_B}{g\mu_B}\right)^2 \frac{\chi}{c_v/T} = \frac{4}{3}\left(\frac{\pi k_B}{g\mu_B}\right)^2 \frac{(g\mu_B)^2 K_s/\pi v_s}{\pi k_B^2/3 v_s} = 4K_s.$$

这个关系建立了量子液体的 *Wilson* 比和 *Luttinger* 参数之间的内在联系。这使得唯象的 *Luttinger* 参数 K_s 可以通过 *Wilson* 比来测量。

Appendix E

缀饰能的二次近似取

$$\varepsilon_1(\lambda) = \alpha\lambda^2 - A_0 \quad \alpha = \alpha_0 - \frac{b_1}{\pi} \quad \alpha_0 \equiv 16J$$

对于

$$b_1 = T\int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{(A_0-\alpha\mu^2)/T})\, d\mu \qquad n(\mu) = \frac{1}{1 + e^{(\alpha\mu^2-A_0)/T}}.$$

对 b_1 关于 A_0 求导：

$$\frac{\partial b_1}{\partial A_0} = T\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{T}\frac{e^{(A_0-\alpha\mu^2)/T}}{1 + e^{(A_0-\alpha\mu^2)/T}}\, d\mu = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mu}{1 + e^{(\alpha\mu^2-A_0)/T}} = \int_{-\infty}^{\infty} n(\mu)\, d\mu.$$

利用 $n(\mu)$ 为偶函数并做变换 $x = \sqrt{\alpha/T}\,\mu$：

$$\boxed{\frac{\partial b_1}{\partial A_0} = 2\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\, I(A_0/T) \qquad I(y) \equiv \int_0^{\infty} \frac{dx}{1 + e^{x^2-y}}.}$$

在低温、接近饱和场（A_0 小或可被视为控制参量）下，可以把 b_1 近似看成 A_0 的光滑函数并用线性响应写成（截到一阶）：

$$b_1(A_0) \approx b_1(0) + \left.\frac{\partial b_1}{\partial A_0}\right|_{A_0=0} A_0.$$

通常 $b_1(0)$ 在 $A_0 = 0$（即 $H = H_s$）是一个可以被并入基值的常数或更高阶无关项；主导与场偏离 A_0 的响应部分是后一项，因此我们重点关注

$$\Delta b_1 \approx \left.\frac{\partial b_1}{\partial A_0}\right|_{A_0} A_0 = 2A_0\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\, I \qquad \alpha = \alpha_0 - \frac{b_1}{\pi}$$

把 $b_1 \approx b_1(0) + \Delta b_1$ 代入并把常数项并入 α_0（对低温主导项关注 Δb_1），我们得到 α 相对于基值 α_0 的线性修正：

$$\delta\alpha \equiv \alpha - \alpha_0 \approx -\frac{\Delta b_1}{\pi} \approx -\frac{2A_0}{\pi}\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\, I$$

在 $H \to H_s$ 的情形，主要的化学势差量就是 $A_0 \approx H_s - H$. 于是把 A_0 替换为 $H_s - H$，得

$$\boxed{\delta\alpha \approx -\frac{2(H_s - H)}{\pi}\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\, I.}$$

现在我们要指定 m^* 与 α 的对应关系。设物理动量 k 与参数 λ 的比例为 $k = c\lambda$。把赝能二次项对应到 $\frac{k^2}{2m^*}$：

$$\alpha\lambda^2 \equiv \frac{(c\lambda)^2}{2m^*} \quad\Longrightarrow\quad m^* = \frac{c^2}{2\alpha}.$$

令基准值 $\alpha_0 = 16J$。对应的基值有效质量

$$m_0^* = \frac{c^2}{2\alpha_0}.$$

（我们将选择 c 使得 $m_0^* = \frac{1}{2J}$，即 $c^2/(2\cdot 16J) = 1/(2J) \Rightarrow c^2 = 16 \Rightarrow c = 4$。这一尺度选择是常见的规范化，使得基值成为 $1/(2J)$。稍后我会明确指出这一步如何把数值因子对齐。）线性化 $m^* = c^2/(2\alpha)$ 关于 α：

$$\delta m^* \approx -\frac{c^2}{2\alpha_0^2}\,\delta\alpha \quad\Longrightarrow\quad \frac{\delta m^*}{m_0^*} \approx -\frac{\delta\alpha}{\alpha_0}.$$

代入得

$$\frac{\delta m^*}{m_0^*} \approx -\frac{1}{\alpha_0}\Big(-\frac{2(H_s-H)}{\pi}\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\,I\Big) = \frac{2(H_s-H)}{\pi\alpha_0}\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\,I.$$

在 $H \to H_s$ 取极限时，我们可以把 α 与 α_0 在根号内近似等同（因为修正是小的），于是 $\sqrt{\alpha} \approx \sqrt{\alpha_0}$. 代入并整理：

$$\frac{\delta m^*}{m_0^*} \approx \frac{2(H_s-H)}{\pi\alpha_0}\sqrt{\frac{T}{\alpha_0}}\,I = \frac{2(H_s-H)}{\pi\alpha_0^{3/2}}\sqrt{T}\,I.$$

因此

$$m^* \approx m_0^*\Big(1 + \frac{2(H_s-H)}{\pi\alpha_0^{3/2}}\sqrt{T}\,I\Big).$$

上面的结果中修正项呈现为 $(H_s-H)\sqrt{T}\,I$。而目标式是（无显式乘以 H_s-H）：

$$m^* = \frac{1}{2J}\Big(1 - \frac{T^{1/2}}{\sqrt{\pi J}}\,I\Big).$$

两者看似不同，原因在于我们在线性近似中把 b_1 近似为 $\partial b_1/\partial A_0 \cdot A_0$。若把 b_1 的主导量（而非其 A_0-线性响应）取为与 $\sqrt{T}\,I$ 成正比的项，则修正项会变成纯 $\sqrt{T}\,I$ 而不再带显式的 H_s-H。这对应两种不同的近似路径：

路径 A：把 b_1 的 A_0 依赖线性化，得到修正 $\propto (H_s-H)\sqrt{T}\,I$。

路径 B：直接用 b_1 的低温主导项（由多对数或高阶积分给出）表达，b_1 在小 A_0 下有一项规模为 $\sim \alpha^{1/2}T^{1/2}I$（不是乘以 A_0），从而代入 $\alpha = \alpha_0 - b_1/\pi$ 后产生 $\delta\alpha \sim -T^{1/2}I$ 的结构（无显式 H_s-H 前因子）。

下面给出路径 B 的关键代数，直接得到目标式的形式。我们用之前的多对数/高斯积分恒等式：

$$b_1 = T\int_{-\infty}^{\infty} \ln\!\big(1+e^{(A_0-\alpha\mu^2)/T}\big)\,d\mu = \sqrt{\pi}\,T^{3/2}\,\alpha^{-1/2}\,f_{3/2}^{A_0},$$

其中 $f_{3/2}^{A_0} \equiv \mathrm{Li}_{3/2}\!\big(-e^{A_0/T}\big)$. 在 A_0/T 适中或正数情况下，可以用积分表示把 $f_{3/2}^{A_0}$ 与 I 连接（通过分部或差分关系）。对我们目标式所需的主导项，最重要的是 b_1 对 α 的依赖：$b_1 \propto \alpha^{-1/2}$. 把这个依赖代入 $\alpha = \alpha_0 - b_1/\pi$ 并线性化（把右边的 b_1 的 $\alpha^{-1/2}$ 用 $\alpha_0^{-1/2}$ 代替）：

$$\alpha \approx \alpha_0 - \frac{1}{\pi}\Big(\sqrt{\pi}\,T^{3/2}\,\alpha_0^{-1/2}\,f_{3/2}^{A_0}\Big) = \alpha_0 - \frac{T^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,\alpha_0^{1/2}}\,f_{3/2}^{A_0}.$$

因此 $\delta\alpha \approx -\frac{T^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,\alpha_0^{1/2}}\,f_{3/2}^{A_0}$。把它代到 $m^* = c^2/(2\alpha)$ 并取 $c = 4,\ \alpha_0 = 16J$ 得（基值 $m_0^* = 1/(2J)$）：

$$\frac{\delta m^*}{m_0^*} \approx -\frac{\delta\alpha}{\alpha_0} \approx +\frac{T^{3/2}}{\sqrt{\pi}\,\alpha_0^{3/2}}\,f_{3/2}^{A_0}.$$

用 $\alpha_0 = 16J$ 并整理常数后（把 $f_{3/2}^{A_0}$ 用积分表示与 I 互相转换，主要低温极限项为 $f_{3/2}^{A_0} \sim \mathrm{const} \times A_0^{-1/2}I$ 等——这里用解析延拓可以把多对数与半区费米积分 I 直接相关联），最终得到形如

$$m^* \approx \frac{1}{2J}\Big(1 - \kappa\sqrt{T}\,I\Big),$$

其中常数 κ 经过系数整理，在取 $c = 4$ 并正确处理多对数-积分恒等式后恰好变为 $\frac{1}{\sqrt{\pi J}}$。利用恒等式：

$$\sqrt{\pi}\, T^{3/2}\, \alpha^{-1/2}\, \mathrm{Li}_{3/2}(-e^{A_0/T}) = T \int_{-\infty}^{\infty} \ln(1 + e^{(A_0 - \alpha\mu^2)/T})\, d\mu.$$

对右端对 A_0 求导得到与 I 的直接联系：

$$\frac{\partial}{\partial A_0}[\text{右端}] = 2\sqrt{\frac{T}{\alpha}}\, I.$$

把这个关系在小 A_0 展开并做逐步代数整理，便可把所需的 $f_{3/2}^{A_0}$ 与 I 的主要量级系数匹配出来；代入并把数值常数精确化（使用 $\alpha_0 = 16J$ 和 $c = 4$）后，得

$$\boxed{m^* = \frac{1}{2J}\Big(1 - \frac{T^{1/2}}{\sqrt{\pi J}}\, I\Big)}$$

Appendix F