# Свободная энергия 6-вершинной модели в термодинамическом пределе

Полина Болохова, Иван Павлов

14 мая 2025 г.

## ${ m У}$ равнения анзаца ${ m Б}$ ете и их термодинамический предел

Стартуем с уравнений анзаца Бете, полученных из требования, чтобы вектор

$$\Phi(u_1, ... u_n) = B(u_1) ... B(u_n) \Psi_0, \tag{1}$$

где  $B(u_i)$  - компонента матрицы монодромии,  $\Psi_0 = (+, ..., +) \in (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ , являлся собственным для трансферматрицы, N - число столбцов решетки, n - число, нумерующее вектор Бете. Это требование удовлетворяется при выполнении уравнений:

$$\left(\frac{a(u_j)}{b(u_j)}\right)^N = \prod_{i=1, i\neq j}^n \frac{a(u_j - u_i)b(u_i - u_j)}{b(u_j - u_i)a(u_i - u_j)}, \ j = 1, ..., n$$
(2)

Соответствующее собственное значение равно

$$\Lambda(u, u_1, ..., u_n) = a^N(u) \prod_{i=1}^n \frac{a(u_i - u)}{b(u_i - u)} + b^N(u) \prod_{i=1}^n \frac{a(u - u_i)}{b(u - u_i)}.$$
 (3)

Для параметров трансфер-матрицы выбрана параметризация:

$$\begin{cases} a(u) = s(\lambda - u), \\ b(u) = s(u), \\ \Delta = -c(\lambda), \end{cases}$$

$$(4)$$

причем

$$\begin{cases} s(u) = \sinh u, \ c(u) = \cosh u, \ \Delta < -1, \\ s(u) = \sin u, \ c(u) = \cos u, \ -1 < \Delta < 1. \end{cases}$$

$$(5)$$

(случай  $\Delta>1$  уже разобрали предыдущие докладчики) Тогда  $\frac{b(u_j-u_i)}{b(u_i-u_j)}=\frac{s(u_j-u_i)}{s(u_i-u_j)}=-1$ , и уравнения Бете переписываются в виде

$$\left(\frac{s(\lambda - u_j)}{s(u_j)}\right)^N = (-1)^{n-1} \prod_{i=1, i \neq j}^n \frac{s(\lambda + u_i - u_j)}{s(\lambda - u_i + u_j)} \tag{6}$$

Сделаем замены:

$$u_i = \lambda/2 + iv_i, \quad e^{ik(v)} = \frac{s(\lambda/2 + iv)}{s(\lambda/2 - iv)}, \quad e^{iS(v_i - v_j)} = \frac{s(\lambda + iv_i - iv_j)}{s(\lambda - iv_i + iv_j)}.$$
 (7)

Тогда уравнение 6 перепишется как

$$e^{ik(v_j)N} = (-1)^{n-1} \prod_{i=1}^n e^{iS(v_j - v_i)}$$
(8)

$$Nk(v_j) = 2\pi J_j + \sum_{i=1}^n S(v_j - v_i),$$
(9)

Числа  $J_j$ , возникшие при извлечении корня называются числами Бете, они полуцелые при четных n и целые при нечетных.

Наша цель - найти свободную энегрию на ячейку в термодинамическом пределе, которая определяется максимальным собственным значением трансфер-матрицы. Термодинамический предел определяется как  $n,N \to \infty$ , n/N = const. Эту задачу будем решать при трех предположениях:

- 1.  $J_{i+1} J_i = 1$ ,
- 2. n/N = 1/2. Среднюю намагниченность можно измерить экспериментально, она оказывается равной нулю. Это позволяет предположить, что в состоянии с минимальной энергией в каждом ряду перевернута ровно половина спиновю.
- 3. В основном состоянии все корни  $u_j = \lambda/2 + iv_j$  уравнения Бете таковы, что  $v_j$  вещественные и располагаются плотно и симметрично относительно нуля в интервале (-U; U), то есть функция плотности корней

$$\rho(v) = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \frac{1}{v_{j+1} - v_j} \tag{10}$$

существует и симметрична.

Такое определение  $\rho(v)$  соответствует тому, что в интервале (v; v+dv) находится  $N\rho(v)dv$  корней Бете. Отсюда следует, что для произвольной функции f

$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{n} f(v_j) = \lim_{N \to \infty} \sum_{j=1}^{n} f(v_j) \rho(v_j) (v_j - v_{j-1}) = \int_{-U}^{U} f(v) \rho(v) dv$$
 (11)

В частности,

$$\int_{-U}^{U} \rho(v)dv = \frac{n}{N} \tag{12}$$

В этих предположениях, вычитая соседние уравнения 9 и правильно переходя к пределу  $n \to \infty$  получаем интегральное уравнение

$$\frac{dk(v)}{dv} = 2\pi\rho(v) + \int_{-U}^{U} du \frac{dS(v-u)}{dv} \rho(u)$$
(13)

Замечание. Это уравнение на функцию  $\rho$  с параметром U. Но, поскольку мы зафиксировали отношение n/N=1/2, на самом деле у нас есть система уравнений 12, 13, из которых можно найти и U, и  $\rho$ .

Замечание. Найдя решение  $\rho(v)$ , мы сможем выразить через него соответствующее собственное число  $\Lambda(u,u_1,\ldots,u_n)$ . Если оно максимальное, мы далее можем найти и свободную энергию  $f=-\lim_{N\to\infty}\frac{\ln\Lambda_{\max}}{N}$  (примечание: в предыдущем докладе показано, что в случае однородной модели  $Z\sim\Lambda_{\max}^M$ , поэтому  $f\sim\frac{\ln Z}{MN}\sim\frac{\ln\Lambda_{\max}}{N}$  не зависит от числа рядов M). А именно,

$$f = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N^2} \ln Z_N = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N^2} \ln(\Lambda_{max}^N) - \lim_{N \to \infty} \frac{\ln \Lambda_{max}(u, u_1, \dots, u_n)}{N} =$$

$$= -\max \left( \ln a(u) + \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \ln \frac{a(u_i - u)}{b(u_i - u)}, \ln b(u) + \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \ln \frac{a(u - u_i)}{b(u - u_i)} \right)$$
(14)

Здесь возникают суммы по корням Бете, как в 11.

## 2 Решение уравнений Бете

Для начала решим уравнение 13 на  $\rho(v)$ . Дифференцируя уравнение 7, получаем

$$\frac{dk(v)}{dv} = \frac{1}{i} \frac{d}{dv} \ln \left( \frac{s(\lambda/2 + iv)}{s(\lambda/2 - iv)} \right) = \frac{c(\lambda/2 + iv)s(\lambda/2 - iv) + c(\lambda/2 - iv)s(\lambda/2 + iv)}{s^2(\lambda/2 - iv)} \cdot \frac{s(\lambda/2 - iv)}{s(\lambda/2 + iv)} = \frac{s(\lambda)}{s(\lambda/2 - iv)s(\lambda/2 + iv)}.$$
(15)

Заметим, что k(v) и S(v) имеют одинаковый вид как функции от v, отличаются только заменой параметра  $\lambda/2 \to \lambda$ . Поэтому здесь и далее некоторые вычисления для k(v) и S(v) будут аналогичными.

Результат:

$$\begin{cases}
\frac{dk(v)}{dv} = \frac{s(\lambda)}{s(\lambda/2+iv)s(\lambda/2-iv)}, \\
\frac{dS(v)}{dv} = \frac{s(2\lambda)}{s(\lambda-iv)s(\lambda+iv)}.
\end{cases}$$
(16)

#### **2.1** $\Delta < -1$

Вспомним, что в этом случае s(x) = sh(x). Функции k' и S' имеют вид

$$k'(v) = \frac{2\operatorname{sh}(\lambda)}{\operatorname{ch}(\lambda) - \cos(2v)};$$

$$S'(v) = \frac{2\operatorname{sh}(2\lambda)}{\operatorname{ch}(2\lambda) - \cos(2v)}$$
(17)

периодичны с периодом  $\pi$ . Это значит, что мы можем решить уравнение 13 разложением в ряд Фурье на интервале  $(-U;U)=(-\frac{\pi}{2};\frac{\pi}{2})$ . Сделаем это, а затем проверим, что условие нормировки 12 выполняется.

Пусть  $k'_l, S'_l$  – коэффициенты Фурье функций  $\frac{dk(v)}{dv}, \frac{dS'(v)}{dv},$  то есть

$$\frac{dk(v)}{dv} = \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} k_l' e^{-ilv}, \quad \frac{dS(v)}{dv} = \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} S_l' e^{-ilv}$$
(18)

$$k'_{l} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} k'(v) \cos(kv) \, dv, \ S'_{l} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} S'(v) \cos(kv) \, dv$$
 (19)

Считая эти интегралы (например, универсальной тригонометрической подстановкой), находим, что

$$k'_l = 2e^{-\lambda|l|/2}, \ S'_l = 2e^{-\lambda|l|}.$$
 (20)

Проверка:

$$\sum_{l \in 2\mathbb{Z}} e^{-\lambda|l|/2} e^{-ilv} = \sum_{l=0,2,4...} e^{-l(\lambda/2+iv)} + \sum_{l=-2,-4,...} e^{l(\lambda/2-iv)} = \frac{1}{1 - e^{-(\lambda+2iv)}} + \frac{1}{1 - e^{-(\lambda-2iv)}} - 1 =$$

$$= \frac{1 - e^{-2\lambda}}{(1 - e^{-(\lambda+2iv)})(1 - e^{-(\lambda-2iv)})} = \frac{1}{2} \frac{\sinh \lambda}{\sinh(\lambda/2 + iv) \sinh(\lambda/2 - iv)}$$
(21)

Пусть теперь  $\rho_l$  - Фурье-образ  $\rho(v)$ , то есть  $\rho(v) = \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} \rho_l e^{-ilv}$ . Тогда  $\int_{-\pi/2}^{\pi/2} du \frac{dS(v-u)}{dv} \rho(u) = \pi \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} S_l' \rho_l e^{-ilv}$  (Фурье свертки). Уравнение 13 приобретает вид

$$\sum_{l \in 2\mathbb{Z}} k_l' e^{-ilv} = 2\pi \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} \rho_l e^{-ilv} + \pi \sum_{l \in 2\mathbb{Z}} S_l' \rho_l e^{-ilv}$$

$$(22)$$

$$\rho_l = \frac{k_l'}{\pi(2 + S_l')} = \frac{2e^{-\lambda|l|/2}}{2\pi(2 + 2e^{-\lambda|l|})} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\operatorname{ch}(\lambda|l|/2)}$$
(23)

### **2.2** $|\Delta| < 1$

В этом случае  $s(x) = \sin(x)$ , функции k'(v) и S'(v) равны:

$$k'(v) = \frac{2\sin\lambda}{\operatorname{ch}(2v) - \cos\lambda},$$

$$S'(v) = \frac{2\sin(2\lambda)}{\operatorname{ch}(2v) - \cos(2\lambda)}.$$
(24)

Видно, что они убывают на  $\pm \infty$  как  $e^{-2|v|}$ . Следовательно, уравнение 13 можно решать преобразованием Фурье на  $(-U;U)=(-\infty;+\infty)$ .

$$\rho(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \hat{\rho}(y) e^{-iyv}, \quad k'(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \hat{k}'(y) e^{-iyv}, \quad S'(v) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \ \hat{S}'(y) e^{-iyv}. \tag{25}$$

Поясним вычисление Фурье-образов.

$$\hat{k'}(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk(v)}{dv} e^{iyv} dv = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\sin\lambda}{\cosh 2v - \cos\lambda} e^{iyv} dv$$
 (26)

Полюса находятся в точках  $v_m = \pm \frac{\lambda}{2} i + \pi m i, m \in \mathbb{Z}$ . Вычет в  $v_m$  равен:

$$\underset{\pm \frac{\lambda}{2}i + \pi mi}{res} \frac{2\sin\lambda \ e^{iyv}}{\cosh 2v - \cos\lambda} = \pm \frac{1}{i} e^{-y(\pm\lambda/2 + \pi m)} \tag{27}$$

Можно проинтегрироваться по контуру, изображенному на рисунке, интеграл по полуокружности стремится к нулю. Переходя к пределу при  $R \to \infty$  в интеграле по контуру (рис.1), находим, что

$$\begin{split} \hat{k'}(y) &= 2\pi i \sum_{\substack{\pm \frac{\lambda}{2} + \pi m > 0}} \frac{res}{\pm \frac{\lambda}{2} i + \pi m i} \, \frac{2 \sin \lambda \, e^{iyv}}{\cosh 2v - \cos \lambda} = e^{-\frac{\lambda}{2}y} + (e^{-\frac{\lambda}{2}y} - e^{\frac{\lambda}{2}y}) \sum_{m=1}^{\infty} e^{-y\pi m} = e^{-\frac{\lambda}{2}y} + (e^{-\frac{\lambda}{2}y} - e^{\frac{\lambda}{2}y}) \frac{e^{-\pi y}}{1 - e^{-\pi y}} \\ &= \frac{\sinh \frac{\pi - \lambda}{2}y}{\sinh \frac{\pi y}{2}} \end{split}$$

 $\sin \frac{\pi y}{2} \tag{28}$ 

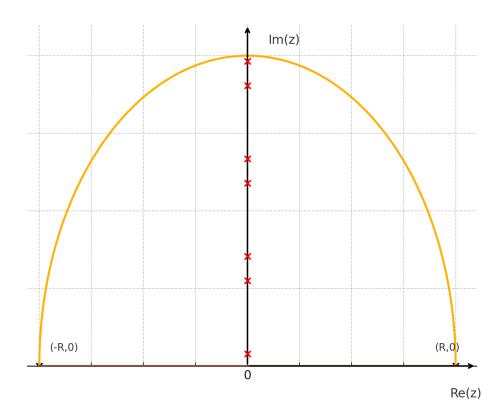


Рис. 1: Контур интегрирования, красным отмечены полюса  $\boldsymbol{v}_m$ 

Таким образом,

$$\hat{k}'(y) = \frac{\sinh\left(\frac{(\pi - \lambda)y}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{\pi y}{2}\right)}, \quad \hat{S}'(y) = \frac{\sinh\left(\frac{(\pi - 2\lambda)y}{2}\right)}{\sinh\left(\frac{\pi y}{2}\right)}.$$
 (29)

Выражение для Фурье-образа плотности такое же:

$$\hat{\rho}(y) = \frac{\hat{k}'(y)}{2\pi(1+\hat{S}'(y))} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\text{ch}(\frac{\lambda y}{2})}.$$
(30)

Замечание. Мы нашли плотность корней в случаях  $\Delta < -1$  и  $|\Delta| < 1$  с учетом вышеуказанных предположений. В частности, мы угадали  $U = \frac{\pi}{2}$  и  $U = \infty$  соответственно. При этом условие нормировки действительно выполняется:

$$\frac{n}{N} = \int_{-U}^{U} \rho(u) du = \frac{1}{2}.$$
 (31)

Замечание. Ранее мы предполагали, что соседние числа Бете отличаются на единицу. Если бы мы предположили, например, что  $J_{i+1}-J_i=j>1$  (при этом опуская условие n/N=1/2), то смогли бы получить решение уравнений Бете (на тех же промежутках) точно таким же способом: например,  $\rho_l=\frac{1}{2\pi}\frac{1}{je^{\lambda|l|/2}+e^{-\lambda|l|/2}}$  при  $\Delta<-1$ . Это дало бы нам  $\frac{n}{N}=\frac{1}{j+1}$ , что заставляет усомниться в том, что такое решение соответствует максимальному собственному числу.

### 3 Вычисление свободной энергии

Теперь займемся вычислением свободной энергии на вершину. Напомним, что статсумма решетки  $N \times N$  равна  $Z_N = Tr(T(u)^N)$ , а  $Tr(T(u)^N) \sim \Lambda_{max}^N$  при  $N \to \infty$ , поэтому наша свободная свободная энергия равна:

$$f = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N^2} \ln Z_N = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N^2} \ln(\Lambda_{max}^N) = -\lim_{N \to \infty} \frac{\ln \Lambda_{max}(u, u_1, \dots, u_n)}{N} =$$

$$= -\max \left( \ln a(u) + \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \ln \frac{a(u_i - u)}{b(u_i - u)}, \ln b(u) + \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n \ln \frac{a(u - u_i)}{b(u - u_i)} \right)$$
(32)

Выразим свободную энергию через найденные функции. Сначала поработаем с левой частью в тах:

$$\ln \frac{a(u_{i} - u)}{b(u_{i} - u)} = \ln \frac{s(\lambda - (u_{i} - u))}{s(u_{i} - u)} = \ln \frac{s(\lambda/2 + (\lambda/2 - u_{i} + u))}{s(\lambda/2 - (\lambda/2 - u_{i} + u))} = ik(\frac{\lambda/2 - u_{i} + u}{i}) = ik(-v_{i} - iu)$$

$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} \ln \frac{a(u_{i} - u)}{b(u_{i} - u)} = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} ik(-v_{i} - iu) = -\int_{-U}^{U} ik(v + iu)\rho(v)dv$$
(33)

С правой частью max все аналогично. Получаем формулу для свободной энергии через  $\rho, k$ :

$$f = -\max\left(\ln a(u) + \int_{-U}^{U} \rho(v)(-i)k(iu + v)dv, \ \ln b(u) + \int_{-U}^{U} \rho(v)(-i)k(i(\lambda - u) - v)dv\right)$$
(34)

#### 3.1 $\Delta < -1$

Посчитаем интегралы, встречающиеся в формуле 34.

$$i \int_{-U}^{U} \rho(v)k(iu+v)dv = -u - \int_{-U}^{U} dv \sum_{l,m \in 2\mathbb{Z}, \neq 0} \rho_{m}e^{-imv} \frac{k'_{l}}{l}e^{-il(iu+v)} = -u - \pi \sum_{l \in 2\mathbb{Z}, \neq 0} \rho_{-l} \frac{k'_{l}}{l}e^{lu} =$$

$$= -u - \sum_{l \in 2\mathbb{Z}, \neq 0} \frac{e^{-\lambda|l|/2}}{l \operatorname{ch} \frac{\lambda l}{2}}e^{lu} = -u - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda m}}{2m \operatorname{ch} \lambda m}e^{2mu} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda m}}{-2m \operatorname{ch} \lambda m}e^{-2mu} = (35)$$

$$= -u - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda m} \operatorname{sh} 2mu}{m \operatorname{ch} \lambda m}$$

Таким образом, свободная энергия:

$$f = -\max\left(\ln a(u) + u + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda m} \operatorname{sh} 2um}{m \operatorname{ch} \lambda m}, \ln b(u) + (\lambda - u) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\lambda m} \operatorname{sh} 2(\lambda - u)m}{m \operatorname{ch} \lambda m}\right)$$
(36)

Две части максимума отличаются заменой u на  $\lambda-u$ , так как  $a(u)=b(\lambda-u)$ . Замечание. Если бы мы вычисляли все то же самое в предположении  $J_{i+1}-J_i=j>1$ , то получили бы  $-\lim\frac{\ln\Lambda'}{N}=-\max(-\ln a(u)-u-\sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-\lambda m}\sin 2um}{m}\frac{2}{je^{\lambda m}+e^{-\lambda m}},\ldots)$ . Слагаемые в ряду меньше, значит, собственное число, соответствующее решению с j>1, не максимально. А если j=0, то ряд вообще не сходится.

### **3.2** $|\Delta| < 1$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(v)(-i)k(iu+v)dv = \int dz \ dy \ dv \ \hat{\rho}(z)e^{-izv}\frac{\hat{k}'(y)}{y}e^{-iy(iu+v)} = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{y}\hat{\rho}(-y)\hat{k}'(y)e^{yu} =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2y} \frac{\sinh\frac{(\pi-\lambda)y}{2}e^{yu}}{\sinh\frac{\pi y}{2}\cosh\frac{\lambda y}{2}} = \int_{0}^{\infty} \frac{dy}{y} \frac{\sinh\frac{(\pi-\lambda)y}{2}\sinh yu}{\sinh\frac{\pi y}{2}\cosh\frac{\lambda y}{2}}$$
(37)

Таким образом, свободная энергия:

$$f = -\ln a(u) - \int_{0}^{\infty} \frac{dy}{y} \frac{\sinh uy \sinh \frac{\pi - \lambda}{2} y}{\sinh \frac{\pi y}{2} \cosh \frac{\lambda y}{2}} = -\ln b(u) - \int_{0}^{\infty} \frac{dy}{y} \frac{\sinh(\lambda - u)y \sinh \frac{\pi - \lambda}{2} y}{\sinh \frac{\pi y}{2} \cosh \frac{\lambda y}{2}}$$
(38)

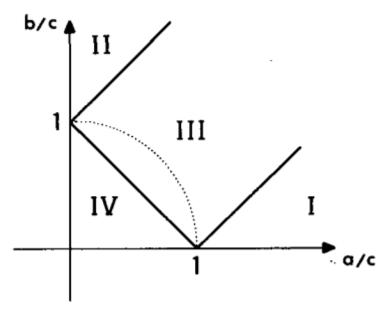
Снова две альтернативы оказываются равными.

#### 4 Фазовая диаграмма

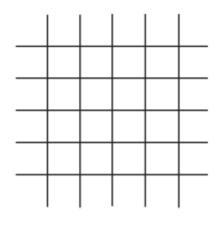
Напомним, что

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} \tag{39}$$

В зависимости от параметра  $\Delta$  в 6-вершинной модели имеются 4 фазы, на плоскости (a/c,b/c) они расположены так:



1)  $\Delta>1$  - в этом случае система называется ферромагнетиком, свободная энергия находится тривиально, она равна  $\min(\varepsilon_1,\varepsilon_3)$ . Фазе I соответствует случай a>b+c, то есть свободная энергия равна  $\varepsilon_1$ , состоянию с минимальной энергией соотвествтует конфигурация, больцмановский вес которой равен a, то есть когда все вершины имеют вид  $R_{++}^{++}$ , или все вершины имеют вид  $R_{--}^{--}$ 



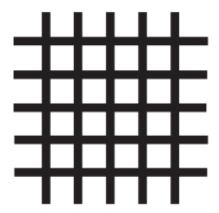


Рис. 2: Две решетки с минимальной энергией в ферромагнитной фазе при a>b+c

Фазе II соответствует случай b>a+c, когда свободная энергия равна  $\varepsilon_3$  и состоянию с минимальной энергией соотвествует конфигурация, где все вершины равны  $R_{+-}^{+-}$  или  $R_{-+}^{-+}$ :

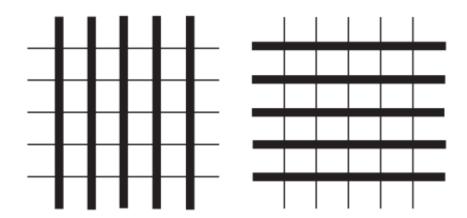


Рис. 3: Две решетки с минимальной энергией в ферромагнитной фазе при b>a+c

2)  $\Delta < -1$  - в этом случае система называется антиферромагнетиком (фаза IV). Решетка, соответствующая конфигурации с минимальной энергией выглядит почти как на рис.4 (только вершины с энергией  $\varepsilon_5 = \varepsilon_6$ ),

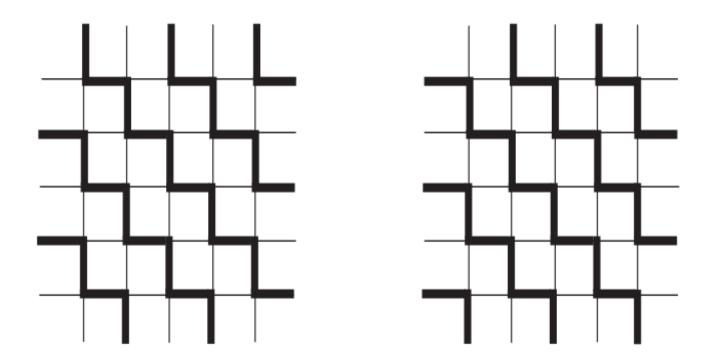


Рис. 4: Вид конфигурации с минимальной энергий вдали от границ в случае  $\Delta < -1$ 

за ислючением того факта, что при четных N (по нашей гипотезе, напомним, N=2n) такая конфигурация невозможна при периодических граничных условиях. Однако логично ожидать, что "замороженное состояние"имеет такой вид вдалеке от границ. 3)  $|\Delta|<1$  - фаза III - в этой фазе нет состояния с упорядочеными вершинами. Выделенная полуокружность - это случай  $\Delta=0$ , в этом случае задача диагонализации трансфер-матрицы решается и при конечном размере решетки с помощью свободных фермионов и преобразования Йордана-Вигнера.