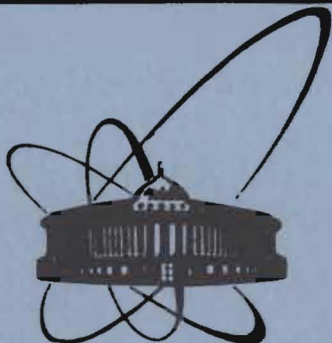




объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P2-85-243

Л.В.Авдеев, Б.-Д.Дёрфель

ПОПРАВКИ НА КОНЕЧНЫЙ РАЗМЕР
ДЛЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ XXX-ЦЕПОЧКИ

Направлено в "Journal of Physics A"

1985

Точно интегрируемые модели, и, в частности, одномерная изотропная ХХХ-модель Гейзенберга с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \frac{J}{4} \sum_{n=1}^N (\vec{\sigma}_n \cdot \vec{\sigma}_{n+1} - 1), \quad (1)$$

могут быть решены с помощью подстановки Бете^{/1/}. Явное решение модели (1) требует нахождения корней так называемых уравнений анзаца Бете (УАБ):

$$\left(\frac{\lambda_j + i/2}{\lambda_j - i/2} \right)^N = - \prod_{k=1}^M \frac{\lambda_j - \lambda_k + i}{\lambda_j - \lambda_k - i}, \quad (j=1 \dots M). \quad (2)$$

В случае вакуумного состояния при четных N и $J > 0$ (антиферромагнетик) решение содержит $M = N/2$ вещественных корней. В пределе бесконечного размера системы, $N \rightarrow \infty$, число уравнений и неизвестных стремится к бесконечности. При этом УАБ могут быть сведены к линейному интегральному уравнению для функции плотности^{/2/}, которое легко решается (см. обзор^{/3/}).

В недавней работе^{/4/} был предложен метод вычисления поправок на конечный размер для моделей с ненулевой массовой щелью. Последнее ограничение играло при этом существенную роль, так что метод неприменим к ХХХ-модели, где массовая щель отсутствует.

Однако, воспользовавшись аналогичной исходной идеей, мы сумели получить аналитическое выражение для первой поправки к энергии вакуума, которое хорошо согласуется с нашими численными расчетами. Далее, мы формулируем новую итерационную процедуру для нахождения плотности корней и показываем близость первого приближения к точной плотности, найденной численно.

В рассматриваемом случае система УАБ (2) может быть преобразована к следующему виду:

$$\frac{Q_j}{N} = \frac{1}{\pi} \operatorname{atan}(2\lambda_j) - \frac{1}{\pi N} \sum_{k=1}^{N/2} \operatorname{atan}(\lambda_j - \lambda_k), \quad (3)$$

где Q_j , $|Q_j| \leq Q_{\max}$, — (полу) целые числа, в зависимости от $Q_{\max} = N/4 - 1/2$. При больших N удобно рассматривать $z(\lambda_j) = Q_j/N$.

$$z(\lambda) = \frac{1}{\pi} \operatorname{atan}(2\lambda) - \frac{1}{\pi N} \sum_{k=1}^{N/2} \operatorname{atan}(\lambda - \lambda_k), \quad (4)$$

и производную от этой функции, $\frac{dz}{d\lambda} = \sigma_N(\lambda)$,

$$\sigma_N(\lambda) = \frac{1}{\pi} \frac{1/2}{1/4 + \lambda^2} - \frac{1}{\pi N} \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{1 + (\lambda - \lambda_k)^2}, \quad (5)$$

которая играет роль плотности распределения корней. Энергия состояния равна

$$E_N = -J \sum_{k=1}^{N/2} \frac{1/2}{1/4 + \lambda_k^2}. \quad (6)$$

Действуя по методу работы [4], можно представить поправки на конечный размер в виде

$$\Delta \sigma_N(\lambda) = \sigma_N(\lambda) - \sigma_\infty(\lambda) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\mu P(\lambda - \mu) \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(\mu - \lambda_k) - \sigma_N(\mu) \right], \quad (7)$$

$$\Delta E_N = E_N - E_\infty = -\pi J N \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \sigma_\infty(\lambda) \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(\lambda - \lambda_k) - \sigma_N(\lambda) \right]. \quad (8)$$

Здесь

$$P(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\rho}{2\pi} \frac{e^{i\lambda\rho}}{1 + e^{|\rho|}} = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \beta(1 - i\lambda), \quad (9)$$

а выражения в пределе бесконечного размера имеют вид

$$\sigma_\infty(\lambda) = \frac{1}{2 \cosh(\pi\lambda)}, \quad E_\infty = -J N \ln 2. \quad (10)$$

Подсчитаем теперь лидирующий вклад в ΔE_N . Решение уравнения (4) относительно λ определяет функцию $\lambda_N[z]$ для непрерывных z . Делая замену переменной в (8), мы получим

$$\Delta E_N = -\pi J N \int_{-1/4}^{1/4} dz \sigma_\infty(\lambda_N[z]) \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(z - z_k) - 1 \right], \quad (11)$$

где $z_k = -1/4 + (k - 1/2)/N$. Проблема состоит в том, что поскольку точная плотность неизвестна, неизвестна и функция $\lambda_N[z]$. Но ниже мы покажем, что вместо нее можно подставить в качестве первого приближения

$$\lambda_\infty[z] = \frac{1}{\pi} \ln \tan[\pi(z + 1/4)], \quad (12)$$

и тогда поправка вычисляется:

$$\Delta E_N^{(1)} = -\pi J N \left[\frac{1}{2N \sin(\pi/N)} - \frac{1}{2\pi} \right] = -\frac{J}{N} \frac{\pi^2}{12} + O\left(\frac{1}{N^3}\right). \quad (13)$$

Коэффициент $\pi^2/12 \approx 0,8225$ согласуется с нашим "экспериментальным" значением $\approx 0,823$, подсчитанным с помощью формулы (6) по численным решениям УАБ (2) вплоть до $N = 256$ (см. табл. I). Поправки к энергии основного состояния для относительно небольших N впервые были вычислены в работе [2], а впоследствии зависимость от N (≤ 12) изучалась в [5], однако до настоящего времени аналитического выражения получено не было.

Таблица I

Поправка к энергии основного состояния для конечных N (численные результаты)

N	$-\frac{J}{N} \Delta E_N$	N	$-\frac{J}{N} \Delta E_N$	N	$-\frac{J}{N} \Delta E_N$
4	0,909645	10	0,839745	64	0,824437
6	0,863355	16	0,831064	130	0,823687
8	0,847328	32	0,826165	256	0,823318

Теперь мы хотим оценить ошибку, вызванную заменой в формуле (11) $\lambda_N[z]$ на $\lambda_\infty[z]$:

$$\Delta E_N^{(2)} = -2\pi J N \int_0^{1/4} dz \left\{ \sigma_\infty(\lambda_N[z]) - \sigma_\infty(\lambda_\infty[z]) \right\} \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(z - z_k) - 1 \right]. \quad (14)$$

Разобьем интервал интегрирования на две части. В первой области, $0 \leq z \leq 1/4 - 1/N$, сдвиги корней $\Delta \lambda_N[z] = \lambda_N[z] - \lambda_\infty[z]$ малы и

$$\Delta \lambda_N[z] \approx - \frac{1}{\sigma_\infty(\lambda_\infty[z])} \int_0^{\lambda_\infty[z]} d\lambda \Delta \sigma_N(\lambda). \quad (15)$$

Тогда, разлагая σ_∞ , получим

$$\Delta E_N^{(2)} \approx -2\pi^2 JN \int_{1/4-1/N}^{1/4} dz \sin(2\pi z) \int_{\lambda_\infty[z]}^{\lambda_\infty[z]} d\lambda \Delta \sigma_N(\lambda) \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(z-z_k) - 1 \right] - 2\pi JN \int_{1/4-1/N}^{1/4} dz e^{-\pi \lambda_\infty[z]} \left(e^{-\pi \Delta \lambda_N[z]} - 1 \right) \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N/2} \delta(z-z_k) - 1 \right]. \quad (I6)$$

Разность между суммой и интегралом в (I6) дает множитель $1/N^2$, и еще одна степень $1/N$ возникает из $\int d\lambda \Delta \sigma_N$ (см. ниже). Во второй области, $1/4-1/N \leq z \leq 1/4$, величина $\Delta \lambda_N[z]$ уже не мала, но дополнительное подавление обеспечивается быстрым убыванием $\sigma_\infty(\lambda)$. Учитывая всё это, мы выводим из (I6), что $\Delta E_N^{(2)} = O(1/N^2)$. Таким образом, формулы (II) и (I3) дают возможность эффективно вычислять поправки к энергии для ХХХ-цепочки.

Рассмотрим теперь поправку к плотности корней. Разность между суммой и интегралом в (7) может быть оценена следующим образом:

$$\Delta \sigma_N(\lambda) = -\frac{1}{2N} \left[P(\lambda - \lambda_{\max}) + P(\lambda + \lambda_{\max}) \right] + \int_{1/4}^{1/4} dz \left\{ P(\lambda - \lambda_N[z]) + P(\lambda + \lambda_N[z]) \right\} - \frac{1}{12N^3} \sum_{k=2}^{N/2} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{1}{\sigma_N(\lambda_N[z])} \frac{\partial P(\lambda - \lambda_N[z])}{\partial \lambda_N[z]} \right\} \Big|_{z=z_k^*}, \quad (I7)$$

где $\lambda_{\max} = \lambda_N[z_{\max}]$, $z_{\max} = \frac{1}{4} - \frac{1}{2N}$, $z_{k-1} \leq z_k^* \leq z_k$. Мы видим, что после преобразования последней суммы в интеграл следовало бы уметь оценивать $1/\sigma_N(\lambda_{\max})$. Из наших численных данных мы можем заключить, что $1/\sigma_N(\lambda_{\max}) = O(N)$ при $N \rightarrow \infty$. И тогда нетрудно вывести из (I7) следующие соотношения:

$$|\Delta \sigma_N(\lambda)| \leq \frac{A}{N}, \quad \left| \int_0^{\lambda_\infty[z]} d\lambda \Delta \sigma_N(\lambda) \right| \leq \frac{B}{N}, \quad (I8)$$

где A и B — константы.

Но, к сожалению, $\Delta \sigma_N(\lambda)$ нельзя вычислять простыми итерациями по формуле (7). Из-за медленного убывания β -функции (9) ошибка, вызываемая подстановкой $\lambda_\infty[z]$ вместо $\lambda_N[z]$, будет неконтролируемой, а получаемый таким образом результат окажется неверным. Численные расчеты подтверждают это: даже у $\Delta \sigma_N(0)$ получается неправильный знак, причем ответ не стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$.

Поэтому мы строим другую итерационную схему для $\sigma_N(\lambda)$ на основе соотношений (4) и (5). Чтобы получить $\sigma_N^{(1)}$, мы подставляем в правую часть $\lambda_k = \lambda_\infty[z_k]$ из (I2). Затем каждый корень корректируется с помощью (4), после чего можно находить $\sigma_N^{(2)}$, и т.д. Для иллюстрации эффективности схемы в табл. 2 и на рис. 1 сравнивается первая поправка $\Delta \sigma_N^{(1)} = \sigma_N^{(1)} - \sigma_\infty$ (штриховая линия на рис. 1) с точным значением $\Delta \sigma_N(\lambda)$ (сплошная линия), рассчитанным непосредственно по численному решению УАБ (2) при $N = 10$ (положение $\lambda_{\max} = 0,598087$ отмечено вертикальным пунктиром).

Таблица 2

Точная поправка к плотности $\Delta \sigma_N(\lambda)$ и ее первое приближение $\Delta \sigma_N^{(1)}(\lambda)$ при $N = 10$

λ	$\Delta \sigma_{10}(\lambda)$	$\Delta \sigma_{10}^{(1)}(\lambda)$	λ	$\Delta \sigma_{10}(\lambda)$	$\Delta \sigma_{10}^{(1)}(\lambda)$
0	$-2,92 \cdot 10^{-3}$	$-3,44 \cdot 10^{-3}$	1,6	$1,47 \cdot 10^{-3}$	$1,61 \cdot 10^{-3}$
0,2	$-2,96 \cdot 10^{-3}$	$-3,43 \cdot 10^{-3}$	1,8	$1,50 \cdot 10^{-3}$	$1,61 \cdot 10^{-3}$
0,4	$-2,98 \cdot 10^{-3}$	$-3,31 \cdot 10^{-3}$	2	$1,38 \cdot 10^{-3}$	$1,47 \cdot 10^{-3}$
0,6	$-2,66 \cdot 10^{-3}$	$-2,80 \cdot 10^{-3}$	2,2	$1,19 \cdot 10^{-3}$	$1,25 \cdot 10^{-3}$
0,8	$-1,81 \cdot 10^{-3}$	$-1,79 \cdot 10^{-3}$	2,4	$9,84 \cdot 10^{-4}$	$1,04 \cdot 10^{-3}$
1	$-6,43 \cdot 10^{-4}$	$-5,06 \cdot 10^{-4}$	2,6	$8,00 \cdot 10^{-4}$	$8,41 \cdot 10^{-4}$
1,2	$4,36 \cdot 10^{-4}$	$6,10 \cdot 10^{-4}$	6	$3,39 \cdot 10^{-5}$	$3,58 \cdot 10^{-5}$
1,4	$1,15 \cdot 10^{-3}$	$1,31 \cdot 10^{-3}$	16	$6,47 \cdot 10^{-7}$	$6,88 \cdot 10^{-7}$

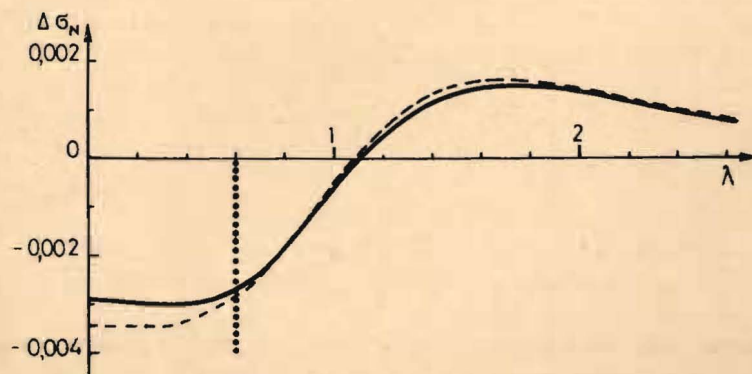


Рис. I

И, наконец, в табл. 3 и на рис. 2 показана относительная поправка к плотности $\delta\sigma_N = \Delta\sigma_N/\sigma_N$ для $N = 10$ (точками) и $N = 256$ (штрихами); $\lambda_{\max} = 1,635314$.

Таблица 3

Относительная поправка к плотности $\delta\sigma_N(\lambda)$ для $N = 10$
и $N = 256$

λ	$\delta\sigma_{10}(\lambda)$	$\delta\sigma_{256}(\lambda)$	λ	$\delta\sigma_{10}(\lambda)$	$\delta\sigma_{256}(\lambda)$
0	$-5,87 \cdot 10^{-3}$	$-4,50 \cdot 10^{-5}$	1,8	0,300	$-1,85 \cdot 10^{-2}$
0,2	$-7,19 \cdot 10^{-3}$	$-5,70 \cdot 10^{-5}$	2	0,424	$-1,26 \cdot 10^{-2}$
0,4	$-1,14 \cdot 10^{-2}$	$-1,04 \cdot 10^{-4}$	2,2	0,543	$1,76 \cdot 10^{-2}$
0,6	$-1,82 \cdot 10^{-2}$	$-2,29 \cdot 10^{-4}$	2,4	0,649	$8,06 \cdot 10^{-2}$
0,8	$-2,31 \cdot 10^{-2}$	$-5,47 \cdot 10^{-4}$	2,6	0,738	0,175
1	$-1,51 \cdot 10^{-2}$	$-1,34 \cdot 10^{-3}$	3	0,864	0,417
1,2	$1,86 \cdot 10^{-2}$	$-3,23 \cdot 10^{-3}$	4	$1-1,95 \cdot 10^{-2}$	0,865
1,4	$8,54 \cdot 10^{-2}$	$-7,17 \cdot 10^{-3}$	6	$1-1,92 \cdot 10^{-4}$	$1-1,96 \cdot 10^{-3}$
1,6	0,183	$-1,34 \cdot 10^{-2}$	16	$1-2,29 \cdot 10^{-16}$	$1-3,08 \cdot 10^{-15}$

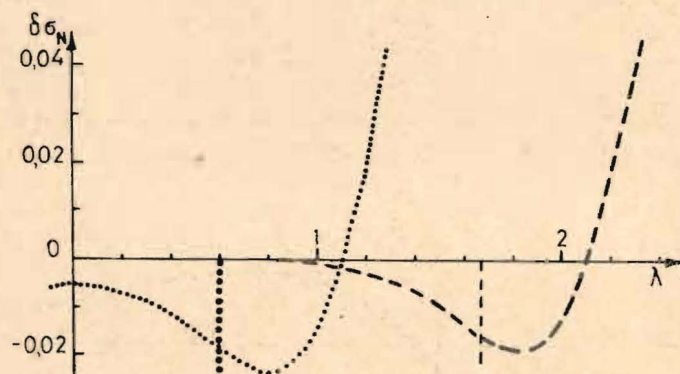


Рис. 2

Видно, что с ростом N область, где относительная поправка мала, расширяется, в то время как сама поправка внутри этой области уменьшается, а на ее границе остается практически неизменной.

Авторы признательны А.А. Владимирову за полезные обсуждения.

Литература

1. Bethe H. Zeitschr. für Phys., 1931, Bd. 71, S. 205.
2. Hulthén L. Arkiv för Matematik, Astronomi och Fysik, 1938, Bd. 26A, H.3, N. 11, S.1.
3. Фаддеев Л.Д., Тахтаджян Л.А. Зап. научн. семин. ЛОМИ, 1981, 109, с. 134.
4. de Vega H.J., Woynarovich F. Method for calculating finite-size corrections in Bethe - ansatz systems: Heisenberg chain and six-vertex model. LPTHE preprint 84.13, Paris, 1984.
5. Bonner J.C., Fisher M.E. Phys. Rev., 1964, 135, 3A, p. 640.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 апреля 1985 года.