4.2 Lieb, Schultz & Mattis の定理

（補）ハミルトニアンの対称性と物理量の期待値

ある対称操作を表すユニタリー変換を U とし，その変換でハミルトニアン H は不変とする：

$$UHU^\dagger = H \quad (\leftrightarrow [H, U] = 0) \tag{1}$$

このとき，任意の演算子 A について，その統計平均は U での変換で不変となる：

$$\langle UAU^\dagger \rangle = \frac{1}{z}\mathrm{Tr}UAU^\dagger e^{-\beta H} = \frac{1}{z}\mathrm{Tr}U^\dagger UAe^{-\beta H} = \frac{1}{z}\mathrm{Tr}Ae^{-\beta H} = \langle A \rangle \tag{2}$$

もし，A が変換 U のもと不変でなく，例えば

$$UAU^\dagger = -A \tag{3}$$

ならば，このとき

$$\langle A \rangle = \langle UAU^\dagger \rangle = -\langle A \rangle \qquad \therefore\ \langle A \rangle = 0 \tag{4}$$

となる。

もう少し話を具体的にする。ハイゼンヘルグ模型を想定し，S^z 軸周りの回転

$$U(\alpha) = e^{i\alpha S^z_{\mathrm{tot}}} \qquad \left(S^z_{\mathrm{tot}} = \sum_i S^z_i \ \sim\ \text{連続変換の生成子} \right) \tag{5}$$

を考える。この変換でハイゼンヘルグ模型は不変なので，先の議論より，任意の物理量 A について

$$\langle U(\alpha) A U^\dagger(\alpha) \rangle = \langle A \rangle \tag{6}$$

が成り立つ。両辺を α で微分して

$$\frac{d}{d\alpha}\langle U(\alpha) A U^\dagger(\alpha) \rangle = \frac{d}{d\alpha}\langle e^{i\alpha S^z_{\mathrm{tot}}} A e^{-i\alpha S^z_{\mathrm{tot}}} \rangle = i\langle e^{i\alpha S^z_{\mathrm{tot}}}[S^z_{\mathrm{tot}}, A] e^{-i\alpha S^z_{\mathrm{tot}}} \rangle = i\langle [S^z_{\mathrm{tot}}, A] \rangle \tag{7}$$

$$\frac{d}{d\alpha}\langle A \rangle = 0 \tag{8}$$

これより，

$$\langle [S^z_{\mathrm{tot}}, A] \rangle = 0 \tag{9}$$

となり，「連続変換の生成子との交換関係により作られる演算子の統計平均はゼロ」であることがわかる。$A = S^x_i$ とすると

$$[S^z_{\mathrm{tot}}, S^x_i] = [S^z_i, S^x_i] = iS^y_i \qquad \therefore\ \langle S^y_i \rangle = 0 \tag{10}$$

同様の議論により

$$\langle S^z_i \rangle = 0 \qquad \leftarrow\ \text{課題} \tag{11}$$

も示すことができる。

以上を踏まえ，Marshall の定理の成り立つ bipartite Heisenberg AF を考える：

$$\text{absolute ground state: } |\Psi_{\mathrm{g}}\rangle \tag{12}$$

$$\text{staggered magnetization: } \hat{M} = \sum_i (-1)^i S^z_i \tag{13}$$

ただし，$(-1)^i = 1$ for $i \in$A, -1 for $i \in$B である。staggered magnetization $\hat{M}$ の期待値（秩序パラメータ）は，(11) より

$$M(T) \equiv \sum_i (-1)^i \langle S^z_i \rangle = 0 \tag{14}$$

であり，常にゼロとなってしまう。$T \to 0$ では

$$M(0) = \lim_{T\to 0} \frac{\mathrm{Tr}\ \hat{M} e^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}\ e^{-\beta H}} = \lim_{T\to 0} \frac{\langle \Psi_\mathrm{g}|\hat{M}|\Psi_\mathrm{g}\rangle e^{-\beta E_\mathrm{g}}}{e^{-\beta E_\mathrm{g}}} = \langle \Psi_\mathrm{g}|\hat{M}|\Psi_\mathrm{g}\rangle = 0 \tag{15}$$

z 方向にスタッガード磁場

$$\hat{H}_\mathrm{st} = -H \sum_i (-1)^i S_i^z \tag{16}$$

をかけて，対称性を崩してみる。すると (11) は成り立たなくなるが，H が十分小さいと

$$M(T=0; H) = \langle \Psi_\mathrm{g}|\hat{M}|\Psi_\mathrm{g}\rangle + \mathcal{O}(H) \simeq 0 \tag{17}$$

である。すなわち，$H=0$ での基底状態が一意的に $|\Psi_\mathrm{g}\rangle$ に決まっていると，H が小さいときの基底状態はほぼ $|\Psi_\mathrm{g}\rangle$ である。逆に言うと，$H=0$ での基底状態が縮退を持っていると，無限小のスタッガード磁場が縮退を取り除き，自発的対称性の破れが起こり，スタッガード磁化が有限になることが可能となる。$H=0$ での基底状態が縮退は，系のスピン総数 N が有限である限り Marshall の定理によって禁止される。縮退が起こるとすると，熱力学極限 $N\to\infty$ に限られる。実際には，$N\to\infty$ で $S_\mathrm{tot}>0$ の状態が降りてくることにより自発的対称性の破れが可能となっている。

Lieb, Schultz & Mattis の定理

定理 1：1 次元鎖上のハイゼンベルグ反強磁性体を考える：

$$H = J\sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_{i+1} \quad (J>0,\ \ N：\text{偶数}, \boldsymbol{S}_{N+1} = \boldsymbol{S}_1：\text{周期境界条件}) \tag{18}$$

半整数スピン（$S=1/2,\ 3/2,\ldots$）の場合，$N\to\infty$ で励起エネルギーがゼロとなるような状態が存在する。

H の absolute ground state を Ψ_0 とする。twist operator

$$T = \exp\left(i\frac{2\pi}{N}\sum_{j=1}^{N} j S_j^z\right) \quad \leftarrow \quad \text{各サイトのスピン座標軸を } xy \text{ 面内で徐々に回転} \tag{19}$$

を用いて twisted state Ψ_1 を導入する：

$$|\Psi_1\rangle = T|\Psi_0\rangle \tag{20}$$

次の順で定理を証明していく。

命題 1：Ψ_1 と Ψ_0 は直交する：

$$\langle \Psi_0|\Psi_1\rangle = 0 \tag{21}$$

命題 2：Ψ_0 のエネルギーを E_0 として

$$\lim_{N\to\infty} [\langle \Psi_1|H|\Psi_1\rangle - E_0] = 0 \tag{22}$$

spin を 1 格子点分並進する演算子を U_x とする：

$$U_x \boldsymbol{S}_j U_x^{-1} = \boldsymbol{S}_{j+1} \quad (U_x \boldsymbol{S}_N U_x^{-1} = \boldsymbol{S}_1) \tag{23}$$

ハミルトニアンは並進不変（$[H, U_x]=0$）なので

$$H|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle \ \ \to \ \ HU_x|\Psi_0\rangle = E_0 U_x|\Psi_0\rangle \quad \therefore\ U_x|\Psi_0\rangle \text{ も } E_0 \text{ に属す固有ベクトル} \tag{24}$$

Marshall の定理より，エネルギー E_0 の状態は非縮退なので

$$U_x|\Psi_0\rangle = \text{const.} \times |\Psi_0\rangle \equiv e^{ik_0}|\Psi_0\rangle \quad (k_0 \text{ は基底状態の結晶運動量}) \tag{25}$$

twisted state と ground state の overlap を

$$\langle\Psi_0|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_0|T|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\underbrace{U_x^{-1}}_{\to e^{-ik_0}} U_x T U_x^{-1} \underbrace{U_x}_{\to e^{ik_0}}|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|U_x T U_x^{-1}|\Psi_0\rangle \tag{26}$$

と書き，$U_x T U_x^{-1}$ を求めると

$$\begin{aligned} U_x T U_x^{-1} &= U_x \exp\left(i\frac{2\pi}{N}\sum_{j=1}^{N} jS_j^z\right) U_x^{-1} = \exp\left(i\frac{2\pi}{N}\sum_{j=1}^{N} jS_{j+1}^z\right) \\ &= \exp\left(i\frac{2\pi}{N}\sum_{j=1}^{N} jS_j^z - i\frac{2\pi}{N}\sum_{j=1}^{N} S_j^z + i2\pi S_1^z\right) \\ &= Te^{-i\frac{2\pi}{N}S_{\text{tot}}^z} e^{i2\pi S_1^z} \end{aligned} \tag{27}$$

Marshall の定理より，Ψ_0 は全スピンの 1 重項状態なので

$$e^{-i\frac{2\pi}{N}S_{\text{tot}}^z} \quad \to \quad 1 \tag{28}$$

また

$$e^{i2\pi S_1^z} = \begin{cases} +1 & \text{for } S = 1, 2, \cdots \\ -1 & \text{for } S = 1/2, 3/2, \cdots \end{cases} \tag{29}$$

なので，これらを用いると

$$U_x T U_x^{-1} = \begin{cases} T & \text{for } S = 1, 2, \cdots \\ -T & \text{for } S = 1/2, 3/2, \cdots \end{cases} \tag{30}$$

よって，半整数スピンに対して

$$\langle\Psi_0|\Psi_1\rangle = -\langle\Psi_0|\Psi_1\rangle = 0 \quad \text{for } S = 1/2, 3/2, \cdots \tag{31}$$

となり，命題 1 が示された。

命題 2 の証明に取りかかる。まず，twisted state Ψ_1 のノルムは

$$\langle\Psi_1|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_0|T^\dagger T|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1 \tag{32}$$

であり，規格化されている。以下，Ψ_1 のエネルギーを求める：

$$\langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_0|T^\dagger HT|\Psi_0\rangle \tag{33}$$

右辺の演算子は

$$\begin{aligned} T^\dagger HT &= e^{-i\frac{2\pi}{N}\sum_{l=1}^{N} lS_l^z} J\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{S}_j \cdot \boldsymbol{S}_{j+1} e^{i\frac{2\pi}{N}\sum_{l=1}^{N} lS_l^z} \\ &= J\sum_{j=1}^{N} S_j^z S_{j+1}^z + \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N}\left[e^{-i\frac{2\pi}{N}jS_j^z} S_j^+ e^{i\frac{2\pi}{N}jS_j^z} e^{-i\frac{2\pi}{N}(j+1)S_{j+1}^z} S_{j+1}^- e^{i\frac{2\pi}{N}(j+1)S_{j+1}^z} + \text{h.c.}\right] \end{aligned}$$

ここで

$$e^{aS_i^z} S_i^\pm e^{-aS_i^z} = S_i^\pm + a\underbrace{[S_i^z, S_i^\pm]}_{=\pm S_i^\pm} + \frac{a^2}{2!}\underbrace{[S_i^z,[S_i^z, S_i^\pm]]}_{=(\pm)^2 S_i^\pm} + \cdots = e^{\pm a} S_i^\pm \tag{34}$$

$$\rightarrow \quad e^{-i\frac{2\pi}{N}jS_j^z}S_j^+e^{i\frac{2\pi}{N}jS_j^z}\times e^{-i\frac{2\pi}{N}(j+1)S_{j+1}^z}S_{j+1}^-e^{i\frac{2\pi}{N}(j+1)S_{j+1}^z}=e^{-i\frac{2\pi}{N}j}S_j^+e^{i\frac{2\pi}{N}(j+1)}S_{j+1}^-=e^{i\frac{2\pi}{N}}S_j^+S_{j+1}^- \tag{35}$$

を用いると

$$T^\dagger HT=J\sum_{j=1}^N S_j^zS_{j+1}^z+\frac{J}{2}\sum_{j=1}^N\left(e^{i\frac{2\pi}{N}}S_j^+S_{j+1}^-+\mathrm{h.c.}\right) \tag{36}$$

(36) の右辺第 2 項を整理して

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^N\left(e^{i\frac{2\pi}{N}}S_j^+S_{j+1}^-+\mathrm{h.c.}\right)&=\sum_{j=1}^N\left\{e^{i\frac{2\pi}{N}}[S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y-i(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)]+\mathrm{h.c.}\right\}\\&=2\cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)\sum_{j=1}^N(S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y)+2\sin\left(\frac{2\pi}{N}\right)\sum_{j=1}^N(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)\end{aligned} \tag{37}$$

これより

$$T^\dagger HT=H+J\left[\cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)-1\right]\sum_{j=1}^N(S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y)+J\sin\left(\frac{2\pi}{N}\right)\sum_{j=1}^N(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x) \tag{38}$$

であり，よって

$$\begin{aligned}\langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle&=\langle\Psi_0|T^\dagger HT|\Psi_0\rangle\\&=E_0+J\left[\cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)-1\right]\sum_{j=1}^N\langle\Psi_0|(S_j^xS_{j+1}^x+S_j^yS_{j+1}^y)|\Psi_0\rangle\\&\qquad+J\sin\left(\frac{2\pi}{N}\right)\sum_{j=1}^N\langle\Psi_0|(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)|\Psi_0\rangle\end{aligned} \tag{39}$$

(39) の第 2 行について考える：

$$I\equiv\langle\Psi_0|(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)|\Psi_0\rangle \tag{40}$$

次のユニタリー変換を導入する：

$$US_i^xU^\dagger=S_i^y,\quad US_i^yU^\dagger=S_i^x,\quad US_i^zU^\dagger=-S_i^z \tag{41}$$

これは，スピン空間の z 軸まわりの 90 度回転を行なった後，x 軸まわりの 180 度回転を行うことに相当する。この U を利用して

$$\begin{aligned}I&=\langle\Psi_0|U^\dagger U(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)U^\dagger\underbrace{U|\Psi_0\rangle}_{\equiv\gamma|\Psi_0\rangle}=\underbrace{|\gamma|^2}_{=1}\langle\Psi_0|(S_j^yS_{j+1}^x-S_j^xS_{j+1}^y)|\Psi_0\rangle\\&=-\langle\Psi_0|(S_j^xS_{j+1}^y-S_j^yS_{j+1}^x)|\Psi_0\rangle=-I\qquad\therefore\quad I=0\end{aligned} \tag{42}$$

よって

$$\langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle-E_0=+J\left[1-\cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)\right]\sum_{j=1}^N\langle\Psi_0|(-S_j^xS_{j+1}^x-S_j^yS_{j+1}^y)|\Psi_0\rangle \tag{43}$$

一般に，不等式

$$-\langle S_i^xS_j^x+S_i^yS_j^y\rangle\le|\langle\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j\rangle|\le S(S+1) \tag{44}$$

が成り立つ。これを用いて

$$\langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle-E_0\le J\left[1-\cos\left(\frac{2\pi}{N}\right)\right]NS(S+1)=2\pi^2JS(S+1)N^{-1}+\mathcal{O}(N^{-3}) \tag{45}$$

従って

$$\lim_{N\to\infty}\langle\Psi_1|H|\Psi_1\rangle=E_0 \tag{46}$$

となり，命題 2 が示される。

[課題]

問 1. 有限の大きさを持つ格子上でのハイゼンベルグ模型

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{i,j}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j$$

を考える。このとき，$\langle S_i^z \rangle = 0$ の成り立つことを証明せよ。ただし，$\langle \cdots \rangle$ は統計平均を表す。

問 2. 大きさ S のスピン演算子 $\boldsymbol{S}_i$, $\boldsymbol{S}_j$ について不等式

$$|\langle \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \rangle| \leq S(S+1)$$

の成り立つことを示せ。(ヒント：任意の実数 x に対し，$\langle (x\boldsymbol{S}_i + \boldsymbol{S}_j)\cdot(x\boldsymbol{S}_i + \boldsymbol{S}_j)\rangle \geq 0$ の成立することを用いよ。)