Ground States of the Heisenberg Model

本章的主要内容：波函数的总自旋和符号的马歇尔定理、半奇数自旋链大N极限下的gapless行为

在3.2节中，自旋1/2反铁磁海森堡模型作为Mott绝缘体的有效哈密顿量出现。一般来说，海森堡哈密顿量是量子磁性和其他可以被量子自旋算符有效描述的现象（如3.3节中的超导和电荷密度波）的基本模型。从它的基态、激发和热力学相中我们可以学到很多概念和技巧。

$\mathcal{N}$个自旋的哈密顿量为：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}^{zz} + \mathcal{H}^{xy}, \\
\mathcal{H}^{zz} &= \frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z, \\
\mathcal{H}^{xy} &= \frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right), \\
S_{\text{tot}}^z &= \sum_i S_i^z,
\end{aligned} \tag{5.1}
$$

其中$J_{ij} = J_{ji}$并且具有晶格平移对称性。$\mathcal{H}$具有旋转不变性，因为它和总自旋的三个分量对易。

$$\mathbf{S}_{tot} = \sum_i \mathbf{S}_i. \tag{5.2}$$

只需要证明$[\mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^z] = 0$与$[\mathcal{H}^{zz} + \mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^{x,y}] = 0$

$$[S_i^+, S_k^z] = -\hbar S_i^+ \delta_{ik},\ \ [S_i^-, S_k^z] = \hbar S_i^- \delta_{ik} \tag{1}$$

$$
\begin{aligned}
[S_i^+ S_j^-, \sum_k S_k^z] &= \sum_k (S_i^+ S_j^- S_k^z - S_k^z S_i^+ S_j^-) &(2)\\
&= \sum_k (S_i^+ S_j^- S_k^z - S_i^+ S_k^z S_j^- + S_i^+ S_k^z S_j^- - S_k^z S_i^+ S_j^-) &(3)\\
&= \sum_k S_i^+ [S_j^-, S_k^z] + [S_i^+, S_k^z] S_j^- &(4)\\
&= \sum_k \hbar S_i^+ S_j^- \delta_{jk} - \hbar S_i^+ S_j^- \delta_{ik} &(5)\\
&= \hbar S_i^+ S_j^- - \hbar S_i^+ S_j^- &(6)\\
&= 0 &(7)
\end{aligned}
$$

因此易证$[\mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^z] = [\frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \mathbf{S}^z] = 0$

$$[S_i^+, S_k^x] = \hbar S_i^z \delta_{ik},\ \ [S_i^-, S_k^x] = -\hbar S_i^z \delta_{ik} \tag{8}$$

$$
\begin{aligned}
[S_i^+S_j^-, \sum_k S_k] &= \sum_k S_i^+[S_j^-, S_k^x] + [S_i^+, S_k^x]S_j^- &(9)\\
&= \sum_k -\hbar S_i^+S_j^z\delta_{kj} + \hbar S_i^z S_j^-\delta_{kj} &(10)\\
&= \hbar(S_i^zS_j^- - S_i^+S_j^z) &(11)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^x] &= [\frac{1}{4}\sum_{ij} J_{ij}(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+), \mathbf{S}^x] &(12)\\
&= \frac{\hbar}{4}\sum_{ij} J_{ij}(S_i^zS_j^- - S_i^+S_j^z + S_i^-S_j^z - S_i^zS_j^+) &(13)\\
&= \frac{\hbar}{4}\sum_{ij} -2iJ_{ij}(S_i^yS_j^z + S_i^zS_j^y) &(14)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{H}^{zz}, \mathbf{S}^x] &= \sum_k [\frac{1}{2}\sum_{ij} J_{ij}S_i^zS_j^z, S_k^x] &(15)\\
&= \sum_{ijk}\frac{1}{2}J_{ij}(S_i^z[S_j^z, S_k^x] + [S_i^z, S_k^x]S_j^z) &(16)\\
&= \sum_{ijk}\frac{1}{2}J_{ij}[S_i^z(i\hbar S_j^y\delta_{jk}) + (i\hbar S_i^y\delta_{ik})S_j^z] &(17)\\
&= \frac{\hbar}{2}\sum_{ij} iJ_{ij}(S_i^zS_j^y + S_i^yS_j^z) &(18)
\end{aligned}
$$

因此$[\mathcal{H}^{zz} + \mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^x] = 0$，同理可证$[\mathcal{H}^{zz} + \mathcal{H}^{xy}, \mathbf{S}^y] = 0$。所以哈密顿量与总自旋$\mathbf{S}_{tot}$对易

因此可以用以下指标标记本征态

$$
\begin{aligned}
\Psi &= |S_{tot}, M, \ldots\rangle,\\
M &= -S_{tot}, -S_{tot}+1, \ldots, S_{tot},\\
S_{tot} &\le \mathcal{N}S,
\end{aligned}
\tag{5.3}
$$

其中M是总磁化S_{tot}^z的本征值

$$
\mathbf{S}_{tot}^2 = S_{tot}(S_{tot}+1). \tag{5.4}
$$

如果耦合J_{ij}在晶格平移下不变，则晶格动量$\mathbf{k}$也是一个好量子数。

5.1 The Antiferromagnet

反铁磁基态一般来说要比铁磁基态复杂的多。以下定理导出了二分反铁磁哈密顿量系统基态的强条件。子晶格A和B上的交错磁化算符（staggered magnetization operator）定义为：

$$
S^{stagg} = \sum_{i\in A} S_i^z - \sum_{i\in B} S_i^z. \tag{19}
$$

Ising构型形成了基矢集合：

$$\Phi_\alpha = |S, m_1^\alpha\rangle_1 |S, m_2^\alpha\rangle_2 \ldots, |S, m_\mathcal{N}^\alpha\rangle_\mathcal{N}, \tag{20}$$

$|S, m_i^\alpha\rangle_i$表示$\mathbf{S}_i^2, S_i^z$的本征值为$S(S+1), m_i$的本征态。使S^{stagg}最大化的Neel态为：

$$\Psi^{\text{Neel}} = \prod_i |S, \eta_i S\rangle_i, \quad \eta_i = \begin{cases} 1 & i \in A \\ -1 & i \in B \end{cases}. \tag{5.7}$$

一般来说Ψ^{Neel}不是哈密顿量$\mathcal{H}$的本征态，这是由于$\mathcal{H}^{xy}$中有自旋翻转项$S_i^+ S_j^-$，它将Ψ^{Neel}和其他Ising构型联系起来。为了我们的目的，将子晶格B的自旋轴绕着z轴旋转是方便的，这相当与一个幺正变换：

$$\begin{aligned} &i \in B, \\ &S_i^+ \to -\tilde{S}_i^+, \\ &S_i^- \to -\tilde{S}_i^-, \\ &S_i^z \to +\tilde{S}_i^z, \end{aligned} \tag{5.8}$$

在这个变换下，Ising构型变成了

$$|S, m_i\rangle_i \to |S, \tilde{m}_i\rangle_i = \begin{cases} |S, m_i\rangle_i & i \in A \\ (-1)^{(S+m_i)} |S, m_i\rangle_i & i \in B \end{cases}, \tag{5.9}$$

其中$\tilde{m}$在A子格上是S_i^z的本征值，在B子格上是$\tilde{S}_i^z$的本征值。我们限制在一个子空间M并且把波函数展开为：

$$\Psi^M = \sum_\alpha f_\alpha^M \tilde{\Phi}_\alpha^M, \tag{5.10}$$

其中

$$\tilde{\Phi}_\alpha^M = \prod_{\sum_i \tilde{m}_i^\alpha = M} |S, \tilde{m}_i^\alpha\rangle_i. \tag{5.11}$$

下面我们介绍Marshall定理，它们是由Lieb和Mattis拓展来的。

Marshall's Theorem 5.1

考虑海森堡模型哈密顿量，系统的交换是反铁磁的即$J_{ij} \geq 0$，且连接了子晶格A和B，使得晶格上的任意两个位点通过中间位点之间的有限交换序列连接。在任意允许的M分区，最低的能量态Ψ_0^M可以被选取为在旋转Ising基矢$\tilde{\Phi}_\alpha^M$中有正定系数的态，即：

$$\Psi_0^M = \sum_\alpha f_\alpha^M \tilde{\Phi}_\alpha^M, \quad f_\alpha^M > 0, \ \forall \alpha. \tag{5.12}$$

因此根据(5.8)，Ψ_0^M在不旋转的Ising构型$|\Phi_\alpha\rangle$下的系数要遵循Marshall符号修正：

$$
\begin{aligned}
\Psi_0^M &= \sum_{\alpha}(-1)^{\Gamma(\alpha)} f_\alpha^M \left|\Phi_\alpha\right\rangle, \\
\Gamma_\alpha &= \sum_{i\in B}\left(S+m_i^\alpha\right).
\end{aligned} \tag{5.13}
$$

对于自旋1/2系统，Γ_α是向上的自旋数，对于自旋1系统，Γ_α是z分量为0的自旋数。

Marshall's Theorem 5.2

绝对基态（absolute ground state）Ψ_0，对于大小相等的子晶格A和B，是总自旋的单态。

$$
\mathbf{S}_{tot}|\Psi_0\rangle = 0. \tag{5.14}
$$

我们首先必须强调不是所有的总自旋单态都满足Marshall符号修正，并且相反的，不是所有满足Marshall符号的态都是总自旋单态。海森堡反铁磁体的基态必须同时满足两个条件。

Proof：利用子晶格旋转算符，哈密顿量变为：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \tilde{\mathcal{H}}^{zz}+\tilde{\mathcal{H}}^{xy}, \\
\tilde{\mathcal{H}}^{zz} &= +\sum_{i\epsilon A, j\in B}|J_{ij}|S_i^z\tilde{S}_j^z, \\
\tilde{\mathcal{H}}^{xy} &= -\frac{1}{2}\sum_{i\in A, j\epsilon B}|J_{ij}|\left(S_i^+\tilde{S}_j^- + S_i^-\tilde{S}_j^+\right).
\end{aligned} \tag{5.15}
$$

其中$\tilde{\mathcal{H}}^{zz}$在Ising构型下是对角的：

$$
\tilde{\mathcal{H}}^{zz}|\tilde{\Phi}_\alpha\rangle = e_\alpha|\tilde{\Phi}_\alpha\rangle, \tag{5.16}
$$

这里我们扔掉了下标M，在用到的时候会再引入。关键的一点是在这个子晶格旋转表示下，$\tilde{\mathcal{H}}^{xy}$只有非正的矩阵元：

$$
\langle\tilde{\Phi}_\alpha|\tilde{\mathcal{H}^{xy}}|\tilde{\Phi}_\beta\rangle = -|K_{\alpha\beta}|. \tag{5.17}
$$

系数f的本征值方程为：

$$
-\sum_{\beta}|K_{\alpha\beta}|f_\beta + e_\alpha f_\alpha = Ef_\alpha. \tag{5.18}
$$

考虑试探方程

$$
\bar{\Psi} = \sum_{\alpha}|f_\alpha||\tilde{\Phi}_\alpha\rangle, \tag{5.19}
$$

其能量为

$$
\begin{aligned}
\langle\bar{\Psi}|\tilde{\mathcal{H}}|\bar{\Psi}\rangle &= \sum_{\alpha} e_\alpha |f_\alpha|^2 - \sum_{\alpha\beta} |K_{\alpha\beta}|\,|f_\alpha|\,|f_\beta| \\
&\leq \sum_{\alpha} e_\alpha |f_\alpha|^2 - \sum_{\alpha\beta} |K_{\alpha\beta}| f_\alpha f_\beta = E.
\end{aligned} \tag{5.20}
$$

因此它一定是基态并且满足本征值方程

$$
-\sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}||f_\beta| + e_\alpha |f_\alpha| = E|f_\alpha|. \tag{5.21}
$$

因为$\tilde{\Phi}_\alpha$不是$\tilde{\mathcal{H}}$的本征态，e_α大于它的最低能量，即

$$
\forall\alpha, \quad e_\alpha - E > 0. \tag{5.22}
$$

(5.18)和(5.21)可以重写为：

$$
(e_\alpha - E) f_\alpha = \sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}| f_\beta, \tag{5.23}
$$

$$
(e_\alpha - E)\,|f_\alpha| = \sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}|\,|f_\beta|, \tag{5.24}
$$

在两边同时取绝对值可以得到：

$$
\left|\sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}| f_\beta\right| = \sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}|\,|f_\beta|, \tag{5.25}
$$

这表明

$$
f_\beta \geq 0. \tag{5.26}
$$

因此试探态和基态是一样的$\bar{\Psi} = \pm\Psi$。我们可以证明一个关于f_β的更强的条件。

Lemma 5.3

$$
\forall\beta, \quad f_\beta > 0. \tag{5.27}
$$

Proof：可以很容易地证明，通过连续使用成对自旋翻转算符$K_{\alpha\beta}$，总磁化为M的任意Ising构型都连接到其他具有相同磁化的构型。因此如果对于某个α其f_α消失，通过式子(5.22)和(5.23)，对于其他所有的具有相同磁化的β，其相应的f_β都应该消失。因为我们需要至少一个系数不为0，因此所有的f_β都应该非0。至此引理5.3和定理5.1的证明完毕

$$
(e_\alpha - E) f_\alpha = \sum_{\beta} |K_{\alpha\beta}| f_\beta, \tag{5.23}
$$

Corollary 5.4

对于任意确定的M，Ψ_0是非简并的。这个推论沿袭了(5.27)，因为我们无法构造出一个全部系数为正，但是与Ψ_0正交的态Ψ。

Lemma 5.5

$$(\mathbf{S}_{tot})^2|\Psi^M\rangle = M(M+1)|\Psi^M\rangle. \tag{5.28}$$

Proof：We examine the infinite range Hamiltonian on a bipartite lattice with equal number of sites on the two sublattices:

$$\mathcal{H}^\infty = J\sum_{i\in A, j\in B}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j = J\mathbf{S}_{tot,A}\cdot\mathbf{S}_{tot,B}. \tag{5.29}$$

因此这个模型作为一个双自旋问题是可以平凡地求解的，使用

$$\mathbf{S}_{tot} = \mathbf{S}_{tot,A} + \mathbf{S}_{tot,B}. \tag{5.30}$$

总自旋算符可能的值有（应该是默认了自旋是整数）

$$S_{tot,A}, S_{tot,B} = 0, 1, \ldots, \mathcal{N}S/2, \tag{5.31}$$

因此

$$0 \le S_{tot} \le \mathcal{N}S, \tag{5.32}$$

所以(5.29)式的本征值为:

$$E^\infty\left(S_{tot}\right) = \frac{J}{2}\left[S_{tot}\left(S_{tot}+1\right) - S_{tot,A}\left(S_{tot,A}+1\right) - S_{tot,B}\left(S_{tot,B}+1\right)\right]. \tag{5.33}$$

$$E^\infty(S_{tot}) = \frac{J}{2}(\mathbf{S}_{tot}^2 - \mathbf{S}_{tot,A}^2 - \mathbf{S}_{tot,B}^2) \tag{21}$$

因为(5.33)随着S_{tot}单调递增并且$S_{tot} > M$，因此磁化为M时的基态有

$$S_{tot} = M. \tag{5.34}$$

$\mathcal{H}$和$\mathcal{H}^\infty$都满足Marshall定理(5.1)的要求，因此它们的基态都有Marshall符号(5.12)。因此它们的交叠，包含了一系列正数的和，就不能抵消，并且它们必须有相同的总自旋量子数。因此，我们已经证明了$\mathcal{H}$在分区M的最低能量态有$S_{tot} = M$。因为总自旋$S'_{tot} > M$时所有允许的值都在磁化为M的分区有分布，$E(S_{tot})$满足

$$\forall S'_{tot} > S_{tot} \quad \Rightarrow \quad E(S'_{tot}) > E(S_{tot}), \tag{5.35}$$

即，能量是关于S_{tot}的单调递增的函数。现在考虑分区$M=0$，不等式(5.35)证明了基态必须有最小的S_{tot}，根据(5.32)是$S_{tot}=0$，定理5.2的证明就完成了。

如第4.2节所述，半填充时的Hubbard模型和全填充时的负UHubbard模型共享二分晶格上海森堡反铁磁体的非负性。这也是海森堡铁磁体在所有晶格上的一个性质。

Corollary 5.6

对于所有具有非正交换的铁磁模型

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{ij}|J_{ij}|\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \tag{5.36}$$

全铁磁态Ψ^{FM}是基态多重态的一个成员，其中

$$\Psi^{FM} = \prod_{i=1}^{\mathcal{N}}|S, S\rangle_i. \tag{5.37}$$

证明作为一道练习题，与反铁磁的证明很相近。

作为简并多重态的一员，Ψ^{FM}自发地破坏了哈密顿量的旋转对称性。这种对称性的破坏是特别的因为算子S^z_{tot}与哈密顿量对易，并且M是“好量子数”（即，它标记$\mathcal{H}$的本征态）。在这方面反铁磁体与铁磁体不同。交错磁化一般不与哈密顿量进行交换。自发对称性破缺，然而，反铁磁体在严格的热力学极限($\mathcal{N} = \infty$)下仍是可能的，如第6.1节所述。