

# Variational Wave Function and Parent Hamiltonians

## Variational Wave Function and Parent Hamiltonians

### 8.1 Valence Bond States

### 8.2 $S = \frac{1}{2}$ States

#### 8.2.1 The Majumdar-Ghosh Hamiltonian

#### 8.2.2 Square Lattice RVB States

### 8.3 Valence Bond Solids and AKLT Models

#### 8.3.1 Correlations in Valence Bond Solids

对于大多数非铁磁的Heisenberg模型我们并不知道其基态，即使是那些已知的解析形式，比如一维情况下的Bethe解，也需要通过数值计算求出自旋关联。

变分波函数提供了关于基态的有根据的猜测，通过对能量的最小化可以得到物理上的启示。变分法使我们超过了任何半经典、大N或其他展开方案的范围。如4.1节中的Hubbard模型所示，变分法的主要优点是在概念上简单明了。

这里我们将变分波函数与“母哈密顿量”的概念相联系。对于一个特定的波函数，它恰好是这个哈密顿量的基态。尽管这个哈密顿量可能与物理模型相差一些额外的相互作用，但它有助于我们对于后者的理解。它揭示了相互作用与基态关联之间的关系。延伸母哈密顿量方法来理解激发将是第九章的主题。

如参考文献所示，变分态和母哈密顿量的大部分思想与其他高度关联的量子系统共享。特别是，本章中解释的方法与众所周知的分数量子霍尔效应的处理方法非常相似。

## 8.1 Valence Bond States

价键态是反铁磁海森堡模型的变分波函数，在量子磁性和高温超导中有广泛的研究，其一般形式为

$$|\{c_\alpha\}, S\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (8.1)$$

$$|\alpha\rangle = \prod_{(i,j) \in \Lambda_{\alpha}} (a_i^{\dagger} b_j^{\dagger} - b_i^{\dagger} a_j^{\dagger}) |0\rangle. \quad (8.2)$$

其中 $c_\alpha$ 是变分参数， $a_i$ ， $b_i$ 是格点 $i$ 上的Schwinger玻色子， $\Lambda_\alpha$ 是键 $(ij)$ 的一个特定构型，显然键 $(ij)$ 对应着一个singlet。 $\Lambda_\alpha$ 的条件是每个格点都会产生 $2S$ 个键（满足Schwinger玻色子 $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S$ ）。在特定的情况下，(8.1)式中的求和会在大格点极限下被有限数量的构型主导。(8.1)式具有均匀分布的宏观数量构型的情况被称为“共振价键态”（resonating valence bonds states）。

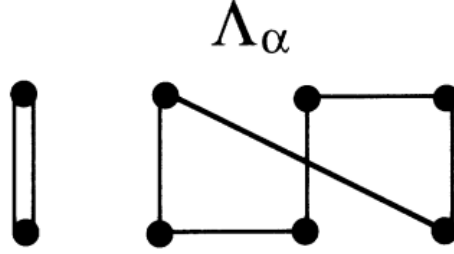


FIGURE 8.1. A configuration of valence bonds for  $S = 1$ .

通过式(7.13)可以很容易地计算出来所有的键算符 $a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger$ 在全局自旋旋转下是不变的，所以该变分态具有全局自旋旋转不变性，因此 $|\{c_\alpha\}, S\rangle$ 是总自旋的单态。一类特殊的价键态的形式为：

$$|\hat{u}, S\rangle = \sum_{\alpha} \left( \prod_{(ij) \in \alpha} u_{ij} \right) |\alpha\rangle. \quad (8.3)$$

这里有 $\mathcal{N}(\mathcal{N} - 1)/2$ 个独立变分参数 $u_{ij}$ ， $\mathcal{N}$ 是格点的数量。

如果键参数是二分且正定的，即

$$u_{ij} = \begin{cases} u_{ij} > 0 & i \in A \text{ and } j \in B \\ 0 & i, j \text{ on the same sublattice,} \end{cases} \quad (8.4)$$

那么(8.3)将满足Marshall符号修正(5.13)。

对于 $|\hat{u}, S\rangle$ 的一个键，可以贡献 $a_i^\dagger b_j^\dagger$ 或 $-b_i^\dagger a_j^\dagger$ ，也就是说在B晶格上每存在一个 $a^\dagger$ ，整体构型的符号就会多出一个 $-1$ 。根据Schwinger玻色子的性质：

$$\begin{aligned} 2S_i^z &= a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i \\ 2S &= a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i \end{aligned}$$

我们可以很容易的求出 $a_i^\dagger a_i = S + S_i^z = S + m_i$ ，符合Marshall符号修正

考虑海森堡模型，如果  $J_{ij} > 0$  并且连接了两个二分子晶格，则在磁化为  $M$  的扇区内，最低能量态  $\Psi_0^M$  可以在旋转后的Ising基矢  $\tilde{\Phi}_\alpha^M$  下有正定系数，即

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

其中

$$\begin{aligned} \Phi_{\alpha} &= |S, m_1^{\alpha}\rangle_1 |S, m_2^{\alpha}\rangle_2 \cdots, |S, m_{\mathcal{N}}^{\alpha}\rangle_{\mathcal{N}} \\ \tilde{\Phi}_{\alpha} &= |S, \tilde{m}_1^{\alpha}\rangle_1 |S, \tilde{m}_2^{\alpha}\rangle_2 \cdots, |S, \tilde{m}_{\mathcal{N}}^{\alpha}\rangle_{\mathcal{N}} \\ |S, m_i\rangle_i &\rightarrow |S, \tilde{m}_i\rangle_i = \begin{cases} |S, m_i\rangle_i & i \in A \\ (-1)^{(S+m_i)} |S, m_i\rangle_i & i \in B \end{cases} \end{aligned}$$

所以为了将基矢转换为旋转前的  $\Phi_{\alpha}$ ，我们需要进行Marshall符号修正，即

$$\begin{aligned} \Psi_0^M &= \sum_{\alpha} (-1)^{\Gamma(\alpha)} f_{\alpha}^M \Phi_{\alpha}^M \\ \Gamma(\alpha) &= \sum_{i \in B} (S + m_i^{\alpha}) \end{aligned}$$

Schwinger玻色子平均场态的定义为：

$$|\hat{u}\rangle = \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{ij} u_{ij} \left( a_i^{\dagger} b_j^{\dagger} - b_i^{\dagger} a_j^{\dagger} \right) \right] |0\rangle, \quad (8.5)$$

其中  $u_{ij} = -u_{ji}$ ，这样的态由反铁磁海森堡模型的Schwinger玻色子平均场理论给出，在18章中会用到。 $|\hat{u}\rangle$  在所有位置包括不同自旋大小的贡献，因此不是真正的自旋状态。它可以通过Bogoliubov变换成为一个可因子分解的Fock态（实际上是变换后的玻色子的真空）。在练习中会看到，平均场态的关联可以在解析上得到，价键态  $|\hat{u}, S\rangle$  可以通过将(8.5)式通过  $P_S$  投影构造：

$$|\hat{u}, S\rangle = P_S |\hat{u}\rangle$$

这个投影过的态是不能因子分解的，这是因为由  $P_S$  引入的关联导致的。

评估  $|\hat{u}\rangle$  中的相关性要比评估  $|\hat{u}, S\rangle$  中的相关性容易得多。可用于计算价键态的自旋关联的方法多种多样。有一些数值方法，涉及波函数的组合计算或蒙特卡罗采样。然后是使用自旋相干态表示的精确计算（见第8.3.1小节）。此外，还有一个  $1/N$  展开，其中  $N$  是Schwinger玻色子flavor的数量。矩阵  $\{\hat{u}\}$  的总大小是固定的，每个位置平均产生  $2S$  个玻色子。平均场态  $|\hat{u}\rangle$  的自旋相关性是该展开中的零阶近似。这种近似可以通过约束生成函

数的 $1/N$ 展开来系统地改进，这与第16章中配分函数的大 $N$ 展开非常相似。参考书目中列出了这些方法的示例。

特定价键态是母哈密顿量的基态，之后的内容会讲述投影子技术，这对于构建母哈密顿量一般是有用的

## 8.2 $S = \frac{1}{2}$ States

任何位点的 $S = \frac{1}{2}$ 的态可以用旋子 (spinor) 态表示

$$|\uparrow_i\rangle \equiv a_i^\dagger|0\rangle, \quad |\downarrow_i\rangle \equiv b_i^\dagger|0\rangle. \quad (8.7)$$

任意遵循Marshall符号修正的二分价键态(8.2)构型可以写成单态键乘积的归一化形式

$$|\alpha\rangle_{S=\frac{1}{2}} = \prod_{(ij) \in \Lambda_\alpha}^{i \in A, j \in B} (|\uparrow_i\rangle|\downarrow_j\rangle - |\downarrow_i\rangle|\uparrow_j\rangle) / \sqrt{2}. \quad (8.8)$$

根据量子力学的简单计算可以得到自旋关联为

$$\langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle = \begin{cases} \frac{3}{4} & i = j \\ -\frac{3}{4} & (ij) \in \Lambda_\alpha \\ 0 & (ij) \notin \Lambda_\alpha \end{cases} \quad (8.9)$$

因此如果 $\Lambda_\alpha$ 中的键是**短程** (即最近邻) 的,  $|\alpha\rangle_{S=\frac{1}{2}}$ 是无序的自旋液体态。不同的价键构型并不是正交的, 因为它们的overlap是:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \prod_{l \in \langle \alpha | \beta \rangle} 2^{1-L_l/2} \\ &= 2^{N_L^{(\alpha\beta)} - \mathcal{N}}, \end{aligned} \quad (8.10)$$

第一行是所有 $\langle \alpha | \beta \rangle$ 中loop的乘积, 每个loop的长度是 $L_l$ , overlap的图象可以将两个价键构型的图象叠放得到, 如Fig 8.2所示。 $\alpha$ 和 $\beta$ 中两个相同的键产生一个长度 $L = 2$ 的loop。在第二行中 $N_L$ 是loop的总数,  $\mathcal{N}$ 是格点的总数

---

Phys. Rev. B 31, 3786 (1988)

[Systems with resonating-valence-bond ground states: Correlations and excitations \(aps.org\)](https://arxiv.org/abs/1905.08761)

由于在特定的构型中，所有的自旋都已两两配对形成单态，所以对于最后的波函数我们只需要约束其符号，对于键 $(ij)$ 其波函数为 $(\uparrow_i \downarrow_j - \downarrow_i \uparrow_j)/\sqrt{2}$ ，我们规定在键上有一个箭头从 $j$ 指向 $i$ ，并且在一个构型中所有的箭头都必须从右指向左，或从下指向上

对于两个态 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ ，其叠放可以由有限个loop表示，假设我们有 $\mathcal{N}$ 个格点，在叠放中每个格点平均占有一个bond，如果不形成loop，则末端的格点只占有半个bond

长度为2的loop为单态自身的叠加，自动归一。考虑一个长度为 $L_l$ 的loop，在对自旋的求和中只有Neel态不为0，在同一个loop上Neel态有两个，先不考虑符号，我们得到的overlap是 $2 \times 2^{-L_l/2}$

假设我们的loop上的方向是顺时针的，则产生的overlap的符号是 $(-1)^{L_l/2}$ ，现在我们需要修正loop的方向，这会使得一半的键方向翻转，所以修正的符号是 $(-1)^{L_l/2}$ ，最后两个符号会相抵消

所以最后我们得到 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的overlap是：

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \prod_{l \in \langle \alpha | \beta \rangle} 2^{1-L_l/2}$$

对这个式子进一步简化，由于loop的总长度正好为 $\mathcal{N}$ ，则

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \prod_{l \in \langle \alpha | \beta \rangle} 2 \times 2^{-L_l/2} = 2^{N_L^{(\alpha\beta)} - \mathcal{N}/2}$$

书上的公式应该是有个typo

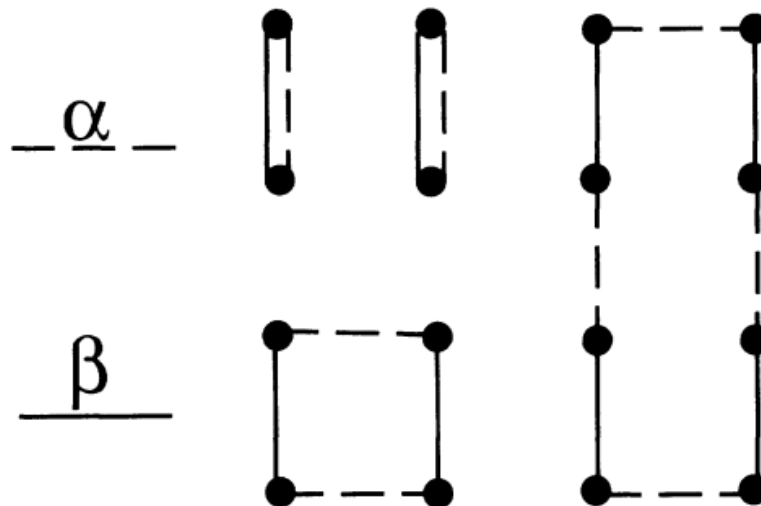


FIGURE 8.2. Overlap of two valence bond configurations ( $S = \frac{1}{2}$ ).

由于 $|\alpha\rangle$ 在每个格点上成一个键，所有简单格点的配位数大于等于2，所以 $|\alpha\rangle$ 打破了晶格的平移对称性，这个对称性可以通过在(8.1)中对于所有 $\alpha$ 求和来重新复原。

从现在起，我们将自己限制在具有最近邻键或“二聚体” (dimer) 的价键状态。我们分别讨论一维和二维情况。

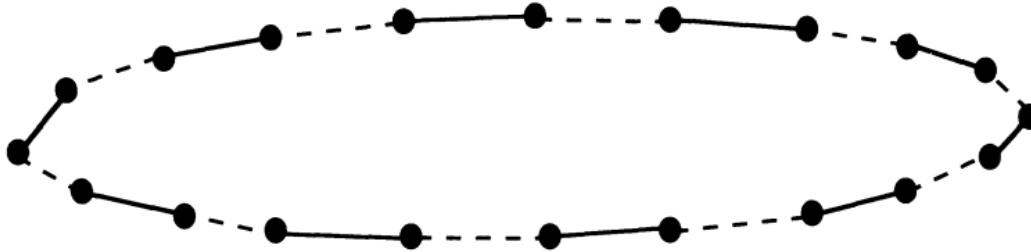


FIGURE 8.3. The two dimer states  $|d\rangle_{\pm}$  depicted with solid and dashed lines, respectively.

## 8.2.1 The Majumdar-Ghosh Hamiltonian

Majumdar和Ghosh引入了下面的哈密顿量

$$H^{MG} = \frac{4|K|}{3} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} \right) + \frac{1}{2} \mathcal{N} \quad (8.11)$$

$i$ 是一维偶数原子链的格点位置标记， $\mathbf{S}_{\mathcal{N}+1} = \mathbf{S}_1$ 。下面我们会看到 $H^{MG}$ 是二聚体态的母哈密顿量

$$|d\rangle_{\pm} = \prod_{n=1}^{\mathcal{N}/2} (|\uparrow_{2n}\rangle |\downarrow_{2n\pm 1}\rangle - |\downarrow_{2n}\rangle |\uparrow_{2n\pm 1}\rangle) / \sqrt{2}. \quad (8.12)$$

下面我们会证明

•

$$H^{MG}|d\rangle_{\pm} = 0, \quad (8.13)$$

• 所有其他的本征能量都是正的，因此 $|d\rangle_{\pm}$ 是 $H^{MG}$ 的基态

$H^{MG}$ 包含了次近邻的反铁磁相互作用，这在一定程度上阻挫了最近邻的关联，因此我们可以预测其基态比只有最近邻相互作用的情况更加无序。事实上，最近邻模型的Bethe波函数的关联随着距离的倒数衰减，然而在(8.9)中，二聚体态的关联衰减距离超过晶格常数

(8.13)式的证明在构建母哈密顿量的技术方面是普适的，在格点 $(i-1, i, i+1)$ 的总自旋为：

$$\mathbf{J}_i = \mathbf{S}_{i-1} + \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}, \quad (8.14)$$

其平方的本征值为 $J(J+1)$ ， $J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ 。基本思想是将 $H^{MG}$ 展开为一系列投影算符的求和：

$$H^{MG} = |K| \sum_i \mathcal{P}_{3/2}(i-1, i, i+1), \quad (8.15)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{3/2}(i-1, i, i+1) &= \frac{1}{3} \left( \mathbf{J}_i^2 - \frac{3}{4} \right) \\ &= \frac{1}{2} + \frac{2}{3} (\mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) \end{aligned} \quad (8.16)$$

之所以叫它投影算符是因为很容易验证 $\mathcal{P}_{3/2}$ 的本征值为：

$$\frac{1}{3} \left[ J(J+1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} 0 & \text{for } J_i = 1/2 \\ 1 & \text{for } J_i = 3/2 \end{cases}$$

$\mathcal{P}_{3/2}$ 的作用即为将态投影到 $J = 3/2$ 的子空间且 $\mathcal{P}_{3/2}\mathcal{P}_{3/2} = \mathcal{P}_{3/2}$ ，由于 $H^{MG}$ 可以表示为一系列 $\mathcal{P}_{3/2}$ 的和，所以 $H^{MG}$ 的本征能量不会比0更低

根据上式也很容易看出 $\mathcal{P}_{3/2}$ 湮灭了triad $(i-1, i, i+1)$ 的所有总自旋 $J = 1/2$ 的态，此外二聚体态(8.12)不包含 $J^z > \frac{1}{2}$ 的态，因为在任意一个triad中，成键的两个自旋形成了singlet，已经抵消了量子数 $S^z$ ，所以在 $|d\rangle_{\pm}$ 中不会存在 $J = \frac{3}{2}$ 的成分，至此其实上面两点已经证明完毕

通过下面的论证可以证明没有 $J > \frac{1}{2}$ 的triad：假设一个triad的 $J^z = \frac{1}{2}$ 但是 $J = \frac{3}{2}$ 。现在对 $|d\rangle$ 施加一个全局旋转，这会在波函数中混合（通过应用 $\mathbf{J}_i^+$ ）一个 $J^z = \frac{3}{2}$ 的成分，这与 $|d\rangle$ 的旋转不变性相矛盾。因此，不可能有 $J > \frac{1}{2}$ 的成分在 $|d\rangle$ 中，并且因此每个算符 $\mathcal{P}_{3/2}$ 湮灭 $|d\rangle_{\pm}$ 。因为 $|K|\mathcal{P}_{3/2}$ 是非负算符， $|d\rangle_{\pm}$ 张成了 $H^{MG}$ 的基态流形。  
Q.E.D.

## 8.2.2 Square Lattice RVB States

共振价键态(8.3)充分满足Marshall定理5.1和5.2的要求，这些态是Anderson提出的自旋液体态的候选者。尽管正方形晶格上最近邻反铁磁体（所有迹象表明）在 $T = 0$ 时是有序的，但这些态在掺杂反铁磁体和高温超导的背景下非常流行

---

Marshall's Theorem 5.1 对于等大小的AB子晶格，基态一定是总自旋的单态

---

然而，测量RVB态的关联并不容易，我们可以在(8.10)中看到，它们并不正交。正方形晶格上不同键覆盖物的数量随着位点的数量呈指数增长。Fisher曾经计算过正方形格点上dimer构型的数量为：

$$\text{Number of dimers} \sim (1.791623)^{N/2}. \quad (8.17)$$

数值蒙特卡洛模拟表明RVB态没有键的长程序，键的衰减速率最少为：

$$u_{ij} \propto |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{-p}, \quad p \geq 5. \quad (8.18)$$

RVB态可以因此作为有序或无序的变分基态。这使它们成为研究Neel反铁磁体向顺磁相转变的有吸引力的候选者

### 8.3 Valence Bond Solids and AKLT Models

AKLT模型用于解决 $S \neq \frac{1}{2}$ 的情况

价键固体是：

$$|\Psi^{VBS}\rangle = \prod_{\langle ij \rangle} \left( a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger \right)^M |0\rangle, \quad (8.19)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 是最近邻键， $M$ 是一个整数，满足：

$$M = 2S/z. \quad (8.20)$$

$z$ 是格点配位数。很明显(8.20)根据晶格结构来约束 $S$ 的值。对于一维晶格 $S = 1, 2, \dots$ ，对于正方晶格 $S = 2, 4, \dots$ ，在Fig 8.4中画出了一些VBS态的图



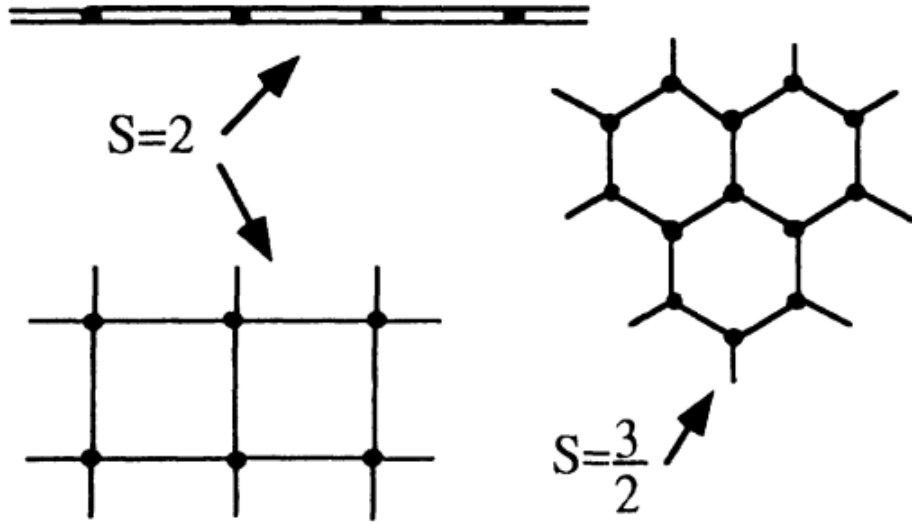


FIGURE 8.4. Some valence bond solids.

Affleck, Kennedy, Lieb, Tasaki (AKLT) 给出了VBS的母哈密顿量

$$\mathcal{H}^{AKLT} = \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{J=2S-M+1}^{2S} K_J \mathcal{P}_J(ij), \quad K_J \geq 0. \quad (8.21)$$

键投影子 $\mathcal{P}_J(ij)$ 将键自旋 $\mathbf{J}_{ij} = \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j$ 投影到 $J$ 的子空间。 $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ 的任意幂 $m = 0, 1, 2, \dots$ 可以用 $\mathbf{J}_{ij}^2$ 的幂次表示, 并且拓展为键投影算符的线性组合:

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^m = \sum_{J=0}^{2S} \left[ \frac{1}{2} J(J+1) - S(S+1) \right]^m \mathcal{P}_J(ij). \quad (8.22)$$

相反的, 键投影算符也可以表示为 $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ 的多项式。

为了证明(8.19)是(8.21)的基态, 我们将展示:

$$\mathcal{H}^{AKLT} |\Psi^{VBS}\rangle = 0, \quad (8.23)$$

如果 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 对于任何 $(ij)$ 没有 $J(ij) > 2S - M$ 的成分, 上式将成立。

让我们考虑特定键 $(ij)$ 上具有最大可能数量 $a^\dagger$ 的项对 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 的贡献:

$$\dots (a_i^\dagger)^{2S-M} \left( a_i^\dagger b_j^\dagger - b_i^\dagger a_j^\dagger \right)^M (a_j^\dagger)^{2S-M} \dots \quad (8.24)$$

通过数这个键上 $a^\dagger$ 的幂减去 $b^\dagger$ 的幂, 我们发现(8.19)式 $J_{ij}^z$ 最大的本征值为:

$$J_{max}^z = 2S - M. \quad (8.25)$$

如果 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 有一个 $J > J_{max}^z$ 的成分，对整个波函数的一个全局旋转会产生一个 $J^{z'} = J$ 的成分。但是 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 是旋转不变的，因此与(8.25)矛盾。因此 $J_{max} = 2S - M$ ，并且我们已经证明 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 会被 $\mathcal{H}^{AKLT}$ 湮灭，因为 $\mathcal{H}^{AKLT}$ 只包含 $J > J_{max}$ 的投影算符。因为在(8.21)中 $K_J$ 是非负的，所以 $\mathcal{H}^{AKLT}$ 的本征值是非负的且 $|\Psi^{VBS}\rangle$ 是一个基态。Q.E.D.

一个重要的例子是 $S = 1$ ,  $M = 1$ 的自旋链。通过(8.22)式我们可以写出其哈密顿量形式为：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{AKLT} &= K \sum_{\langle ij \rangle} \mathcal{P}_2(ij) \\ &= K \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \frac{2}{3} \right].\end{aligned}\tag{8.26}$$

该模型为标准海森堡模型添加了一个双二次项。我们将看到，该模型的基态和激发类似于其他方法对标准海森堡模型的预测。在这方面，我们可以得出结论，双二次扰动实际上是“小”的

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= \frac{1}{2} [J(J+1) - 4] \\ S = 0, \quad \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= -2 \\ S = 1, \quad \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= -1 \\ S = 2, \quad \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= 1\end{aligned}$$

所以可以构造投影子

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_0(ij) &= \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + 1)(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 1) \\ \mathcal{P}_1(ij) &= -\frac{1}{2} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + 2)(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - 1) \\ \mathcal{P}_2(ij) &= \frac{1}{6} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + 2)(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + 1)\end{aligned}$$

### 8.3.1 Correlations in Valence Bond Solids

为了计算出(8.19)式中VBS态的关联，我们使用自旋相干态 $|\hat{\Omega}\rangle$ 。这个基允许我们将VBS关联展开为经典统计力学的平均

$$\begin{aligned}
\Psi^{VBS}[\hat{\Omega}] &= \left\langle 0 \left| \prod_{\langle ij \rangle} (a_i b_j - b_i a_j)^M \prod_i \frac{(u_i a_i^\dagger + v_i b_i^\dagger)^{2S}}{\sqrt{(2S)!}} \right| 0 \right\rangle \\
&= \sqrt{(2S)!} \prod_{\langle ij \rangle} (u_i v_j - v_i u_j)^M \\
&= \sqrt{(2S)!} \prod_{\langle ij \rangle} \left( \frac{1 - \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j}{2} \right)^{M/2}
\end{aligned} \tag{8.27}$$

其中 $u(\theta, \phi)$ 和 $v(\theta, \phi)$ 的定义是(7.14)。这个用单位向量写出的VBS波函数形式对于理解它的关联很有用。通过(7.26)自旋关联是：

$$\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = Z^{-1} (S + 1 - \delta_{ij})(S + 1) \times \int \prod_i d\hat{\Omega}_i |\Psi^{VBS}[\hat{\Omega}]|^2 \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j \tag{8.28}$$

---


$$\begin{aligned}
\frac{\langle \Psi | \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} &= \frac{(S + 1 - \delta_{ij})(S + 1)}{Z} \int \prod_i d\hat{\Omega}_i |\Psi[\hat{\Omega}]|^2 \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j \\
Z &= \int \prod_i d\hat{\Omega}_i |\Psi[\hat{\Omega}]|^2
\end{aligned}$$


---

其中归一化分母是

$$Z = \int \prod_i d\hat{\Omega}_i |\Psi^{VBS}[\hat{\Omega}]|^2. \tag{8.29}$$

通过转移矩阵可以在开放的一维晶格上显式计算(8.28)，最后的结果是：

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle &= \begin{cases} (-1)^n (S + 1)^2 \exp[-\kappa|n|] & n \neq 0 \\ S(S + 1) & n = 0 \end{cases} \\
\kappa(S) &= \ln \left( 1 + \frac{2}{S} \right).
\end{aligned} \tag{8.30}$$

Complete analysis of two spin correlations of valence bond solid chains for all integer spins

[Complete analysis of two spin correlations of valence bond solid chains for all integer spins | SpringerLink](#)

相关性的以纯指数的方式衰减。我们将在随后的章节中看到，这种行为类似于第12章和第13章中，海森堡反铁磁体的Haldane连续体近似的预测。这支持了我们之前的论点，即(8.26)离标准的海森堡模型不“远”。

对于更高维度，可以通过考虑等效的经典统计力学系统来理解相关性。我们将经典玻尔兹曼权重定义为：

$$\exp\left(-\frac{\Phi}{T}\right) \Leftrightarrow |\Psi^{VBS}[\hat{\Omega}]|^2, \quad (8.31)$$

其中有效“温度”为：

$$T \Leftrightarrow \frac{1}{M} \quad (8.32)$$

经典“能量”通过接近Neel关联的展开给定，也就是对于小的 $(1 + \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j)$ ,

$$\begin{aligned} \Phi &= - \sum_{\langle ij \rangle} \ln[(1 - \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j)/2] \\ &\approx \sum_{\langle ij \rangle} \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(\hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j) + \mathcal{O}(1 + \hat{\Omega}_i \cdot \hat{\Omega}_j)^2 \dots \right]. \end{aligned} \quad (8.33)$$

$\Phi$ 是经典短程反铁磁类海森堡哈密顿量，有着 $O(3)$ 旋转对称性。通过经典版本的Mermin和Wagner定理6.2，我们期望有限温度 $T$ （或者 $M$ ）在一维和二维时没有长程序。因此VBS态在一维和二维晶格只有短程序，也就是它们描述“量子自旋液体”。另一方面，在三维晶格，对于足够大的 $M$ （也就是“低温”），我们期望经典哈密顿量产生长程反铁磁序。在这种情况下，VBS描述一个真正有着反铁磁长序的旋转不变的态。

---

Mermin and Wagner's Theorem 6.2 对于量子Heisenberg模型

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^z$$

如果其具有短程相互作用，则在一维二维情况下，有限温度时没有自发对称性破缺

---