

doi: 103969/j. issn. 0490-6756. 2016. 01. 021

横场伊辛链自旋模型费米子表象的问题

郭晓婷, 李 鹏

(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

摘要:人们在研究一维横场伊辛模型时,通常将模型中的自旋算符转换成费米子算符,一般是通过 Jordan-Wigner 变换来进行.但是变换前后的两个模型,即原自旋算符表达的模型与费米子算符表达的模型,其等价性需要伴随一些条件,如不细致处理,会造成后一模型的自由度冗余.本文中,我们通过对表象变换前后的两个模型进行详细对比,找出导致这两个模型等价的各个因素,包括边界条件和格点数目奇偶等,揭示在不同要素和条件下两个模型等价的内涵,并通过详细的实例来说明如何通过投影法剔除费米子表象模型的冗余自由度.

关键词:横场伊辛模型;表象变换;冗余自由度.

中图分类号: O04 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2016)01-0124-07

Pathology of the fermionic representation of transverse Ising model

GUO Xiao-Ting, LI Peng

(College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: When studying the quantum Ising chain in a transverse field, we usually transform the spin operators to fermion operators by applying the Jordan-Wigner transformation, i. e. we take it for granted that the spin model and corresponding fermionic model are equivalent naively. But deliberate treatment could reveal that the equivalence accompanies some delicate conditions. Redundant degrees of freedom should be projected out carefully, especially for finite length of chain. In this paper, we compare the two models in detail so as to find the conditions of equivalence of them, including the interaction, the boundary conditions, and oddity of the number of lattice sites. We also exemplify in detail how to project out the redundant degrees of freedom for the fermionic representation.

Key words: Transverse Ising model; Representation transformation; Redundant degrees of freedom.

1 引言

横场伊辛模型的研究源于 1960 年代初期,1963 年 de Gennes 利用这一理论模型研究了一些铁电材料的有序无序相变,并得到与实验相符很好地结果,因此诞生了横场伊辛模型^[1],之后这一模型被应用到许多体系和问题中^[2,3],例如量子自旋玻璃、量子铁电、量子弛豫、量子磁滞等

等^[4,5],近年来人们还通过离子阱、光晶格等技术来实现这个模型^[6,7].一维横场伊辛模型是一个可以严格求解的模型,我们只需通过 Jordan-Wigner 变换^[8,9]、傅里叶变换、以及玻戈留玻夫变换就可以将模型哈密顿量完全对角化,把自旋表象下的哈密顿量转换为费米子表象下对角化的哈密顿量,之后对于其他物理量的求解也就迎刃而解了.哈密顿量的对角化过程是在周期边界条件下进行

收稿日期: 2015-04-15

基金项目: 国家自然科学基金(11074177)

作者简介: 郭晓婷(1989—),女,湖北潜江人,硕士,主要研究方向为凝聚态理论.

通讯作者: 李鹏. E-mail: lipeng@scu.edu.cn

的, 而人们往往很少考虑自旋算符的周期边界条件在费米子算符中的表现形式以及这一表现形式所带来的影响. 如果同时考虑铁磁和反铁磁相互作用与格点数目的奇偶性, 则前后两个表象模型(即自旋算符表达和费米子算符表达的模型)的映射对应关系会更加复杂. 另外, 在开放性边界条件下处理这一问题时, 不能傅里叶变换将哈密顿量转换到动量空间进行对角化, 只能在某些特殊情况下进行解析求解, 譬如通过定义马约拉纳费米子在实空间直接将体系对角化^[10,11], 而一般情况只能进行数值求解. 对于这一系列的问题我们以横场伊辛链模型为例进行仔细的推导, 通过投影筛除费米子表象带来的冗余自由度, 找出两种表象下基态能够一一对应的条件, 以及在自旋的两种边界下基态的对应关系.

2 模型及其处理办法

2.1 模型

本文主要从一维横场伊辛模型出发来研究两种表象之间的等价关系, 给出自旋基态和费米子基态等价的条件, 继而推广至无限个格点的热力学极限的情况. 横场伊辛链模型的哈密顿量为

$$H = -J \sum_j \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - h \sum_j \sigma_j^z, \quad (1)$$

其中, σ^x 和 σ^z 为常见的泡利矩阵. 该模型有两个简单的极限: i) 当 $|J| \gg |h|$ 时, 哈密顿量的第一项起主要作用, 为每两个相邻格点间的相互作用; ii) 当 $|J| \ll |h|$ 时, 第二项起主要作用, 为外场的作用项. 上述模型的基态取决于两个参量 J 和 h 的比值, $J > 0$ 时, 模型描述的是铁磁体系, $J < 0$ 时, 模型描述的是反铁磁体系. 一般地, 该模型可以通过 Jordan-Wigner 变换为费米子模型进行完全求解, 为了详细考察这种求解办法中可能带来的问题, 我们重点考查第一种极限, 也就是 $h \rightarrow 0$ 的情况. 此时哈密顿量表示为

$$H = -J \sum_j \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + O(h). \quad (2)$$

我们利用 σ^z 的本征态: 自旋向上 $|\uparrow\rangle$, 自旋向下 $|\downarrow\rangle$, 将自旋 σ^x 的本征态表示为

$$\begin{aligned} |\rightarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), |\leftarrow\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (3)$$

即有

$$\sigma^x |\rightarrow\rangle = |\leftarrow\rangle, \sigma^x |\leftarrow\rangle = (-1)|\rightarrow\rangle. \quad (4)$$

通过定义自旋算符的产生和湮灭算符 $\sigma^\pm = \sigma^x \pm i\sigma^y$ ($i = \sqrt{-1}$), 上述哈密顿量可以表示为

$$H = -\frac{J}{4} \sum_j (\sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+). \quad (5)$$

2.2 费米子表象中的对角化

我们利用 Jordan-Wigner 变换

$$\begin{cases} \sigma_j^+ = 2f_j^\dagger \exp(i\pi \sum_{l>j} f_l^\dagger f_l), \\ \sigma_j^- = 2f_j \exp(-i\pi \sum_{l>j} f_l^\dagger f_l), \\ \sigma_j^z = 2f_j^\dagger f_j - 1, \end{cases} \quad (6)$$

将上述自旋模型化为一个费米子模型

$$H = J \sum_{j=1}^N (-f_j^\dagger f_{j+1}^\dagger + f_j f_{j+1} - f_j^\dagger f_{j+1} + f_j f_{j+1}^\dagger). \quad (7)$$

自旋 σ^z 表象与费米子粒子数表象的对应关系为

$$|\uparrow\rangle \rightarrow |1\rangle, |\downarrow\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad (8)$$

即有一个费米子处于占据态对应于自旋向上的态, 而费米子处于非占据态对应于自旋向下的态. 体系所处状态的宇称可以由下式定义

$$P = (-1)^{\sum_{j=1}^N f_j^\dagger f_j} \quad (9)$$

我们注意到, 如果认定自旋算符的周期边界条件, 则有

$$\sigma_{N+1}^\alpha = \sigma_1^\alpha, (\alpha = x, y, z, +, -), \quad (10)$$

然而这个自旋算符的周期边界条件在式(7)中的作用容易被忽视, 实际上费米子算符的周期条件及反周期条件都能导致这个自旋算符的周期边界条件. 为了找到费米子表象下的边界条件我们单独考虑表达式中 $j = N$ 这一项, 我们在式(7)中添加一个修正项(这不会改变原来的哈密顿量)

$$\begin{aligned} J(1 + \exp(i\pi \sum_{l=1}^N f_l^\dagger f_l))(-f_N^\dagger f_1^\dagger + f_N f_1 - \\ f_N^\dagger f_1 + f_N f_1^\dagger), \end{aligned} \quad (11)$$

以便看出费米子数的奇偶性的影响. 尽管费米子数 $\sum_{l=1}^N f_l^\dagger f_l$ 是不守恒的, 但是费米子数的奇偶性却能决定上述费米子的边界问题, 具体来说, 就是总费米子数为奇数会对应着周期边界条件, 而总费米子数为偶数会对应着反周期边界条件,

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N f_l^\dagger f_l = \text{odd} \Rightarrow \text{周期边界条件:} \\ f_{N+1} = f_1, \end{aligned} \quad (12)$$

$\sum_{l=1}^N f_l^\dagger f_l = \text{even} \Rightarrow$ 反周期边界条件:

$$f_{N+1} = -f_1. \quad (13)$$

进一步, 为了看出两个边界条件对哈密顿量产生的影响我们继续进行傅里叶变换

$$f_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_j} f_k. \quad (14)$$

我们得到变换之后动量空间下 k 的取值不仅依赖于费米子算符的边界条件而且还与总的格点数目 N 的奇偶性密切相关, 具体结果为

(1) 周期边界条件

$$-\frac{N-1}{N}\pi, -\frac{N-3}{N}\pi, \dots, 0, \dots, \frac{N-3}{N}\pi,$$

$$\frac{N-1}{N}\pi \quad N = \text{odd}$$

$$-\frac{N-2}{N}\pi, -\frac{N-4}{N}\pi, \dots, 0, \dots, \frac{N-2}{N}\pi, \pi$$

$$N = \text{even}$$

(2) 反周期边界条件

$$-\frac{N-2}{N}\pi, -\frac{N-4}{N}\pi, \dots, -\frac{1}{N}\pi, \frac{1}{N}\pi, \dots,$$

$$\frac{N-2}{N}\pi, \pi \quad N = \text{odd}$$

$$-\frac{N-1}{N}\pi, -\frac{N-3}{N}\pi, \dots, -\frac{1}{N}\pi, \frac{1}{N}\pi, \dots,$$

$$\frac{N-3}{N}\pi, \frac{N-1}{N}\pi \quad N = \text{even}$$

不过, 动量空间哈密顿量在两种边界条件下都可以写为

$$H = J \sum_k (-if_k f_{-k} \text{sinc} + if_{-k}^\dagger f_k^\dagger \text{sinc} - f_k^\dagger f_k \text{cos}k + f_{-k}^\dagger f_{-k} \text{cos}k) \quad (15)$$

因此体系的哈密顿量可以统一对角化为

$$H = -2J \sum_k (d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2}), \quad (16)$$

其中使用了玻戈留玻夫变换

$$d_k^\dagger = \mu_k f_k^\dagger - i\nu_k f_{-k}, \quad (17)$$

$$d_k = \mu_k f_k + i\nu_k f_{-k}^\dagger, \quad (18)$$

其中 $\mu_k = \cos(k/2)$, $\nu_k = \sin(k/2)$.

到此为止我们就完成了横场伊辛模型哈密顿量的对角化, 因此我们可以求出体系的费米子基态和激发态, 以便和原自旋哈密顿量的结果进行比较.

2.3 费米子模型与自旋模型的基态和激发态比较

2.3.1 铁磁体系

首先我们考虑铁磁伊辛模型, 也就是 $J > 0$ 时的情况, 此时基态满足

$$|\psi_g\rangle = |d_k^\dagger d_k = 1\rangle, d_k^\dagger |\psi_g\rangle = 0, \quad (19)$$

这个是费米子 d 表象下的基态, 转换为费米子 f 表象则为粒子数不守恒的 BCS 配对波函数

$$|\psi_g\rangle = \prod_{k>0} (-i\nu_k + \mu_k f_k^\dagger f_{-k}^\dagger) |0\rangle. \quad (20)$$

现在我们问这个基态对应的原自旋表象的态是怎样的? 下面我们取典型的有限格点数 $N = 3$ 和 $N = 4$ 为例来进行分类详细说明, 并把结论推广至无穷格点数.

(1) 周期边界条件 $f_{N+1} = f_1$, 奇数格点 $N = 3$

当我们选取格点数为奇数 $N = 3$ 并在费米子算符的周期边界条件下时, 通过对(20)做逆 s 变换回到自旋表象时发现上述基态并不是体系的真实基态. 为了找到体系的真实基态, 我们来分析对角化前后(两个不同表象下)的哈密顿量. 对于格点数 $N = 3$ 并满足费米子算符的周期边界条件时, 格点在动量空间的取值为 $\pm \frac{2\pi}{3}, 0$. 满足(19)的条件表示动量等于这三个值的准粒子都处于占据态, 因此费米子表象下的基态能为 $-3J$, 这与自旋表象下的基态能一致, 然而我们观察(20)式发现上述基态并没有满足 $k = 0$ 的准粒子处于占据态, 因此系统的真实基态应该修正为

$$|\psi_g\rangle = \prod_{k>0} (-i\nu_k + \mu_k f_k^\dagger f_{-k}^\dagger) |0\rangle \otimes f_0^\dagger |0\rangle, \quad (21)$$

上述基态具有奇宇称($P = -1$), 也满足费米子的周期边界条件, 对上式做逆变换得到在自旋表象下的形式为

$$|\psi_1\rangle = C_1 (|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (22)$$

C_1 为归一化系数, 显然上式是自旋表象下的基态, 只是由于费米子的奇偶性要求体系的宇称守恒导致为所谓的 GHZ 态^[12].

(2) 反周期边界条件 $f_{N+1} = -f_1$, 奇数格点 $N = 3$

在反周期边界条件下, k 在动量空间的取值为 $\pm \frac{\pi}{3}, \pi$. 体系的基态还是三个准粒子占据, 对于 $k = \pi$ 的准粒子(19)式满足 $d_k^\dagger |\psi_g\rangle = 0$, 因此式(20)就是体系的基态, 具有偶宇称($P = 1$), 它同样满足费米子算符的反周期边界条件这一先决条件. 同样做逆变换得到自旋表象下的形式为

$$|\psi_2\rangle = C_2 (|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (23)$$

这是另一个 GHZ 态.

(3) 周期边界条件 $f_{N+1} = f_1$, 奇数格点 $N = 4$

当我们选取偶数个格点 $N = 4$ 在周期边界条件时, 动量空间的取值为 $\pm \frac{\pi}{2}, 0, \pi$. 同样 BCS 超导基态没有满足 $k = 0$ 的准粒子处于占据态, 而在 $k = \pi$ 满足, 体系的真实基态还是需要做一个类似于式(20)得修正. 可以由具有奇宇称的费米子基态推出自旋基态为

$$|\psi\rangle_1 = C_1(|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle). \quad (24)$$

(4)反周期边界条件 $f_{N+1} = -f_1$, 奇数格点 $N = 4$

在反周期边界条件时, 动量空间的取值为 $\pm \frac{3\pi}{4}, \pm \frac{\pi}{4}$, 因为不存在动量为 0 和 π 的特殊点, BCS 态式(19)就是体系的真实基态(偶宇称). 相应的自旋表象基态为

$$|\psi\rangle_2 = C_2(|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle). \quad (25)$$

(5)无限长一维铁磁体系的自旋基态

根据上面对奇偶格点的讨论, 我们可以推广得到以下结论. 当格点数为 N , 满足费米子算符周期边界条件时, 基态为 GHZ 态

$$|\psi_1\rangle = C_1(|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rightarrow\rangle + (-1)^{N+1} |\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (26)$$

而满足费米子算符反周期边界条件时, 基态为另一 GHZ 态

$$|\psi_2\rangle = C_2(|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rightarrow\rangle - (-1)^{N+1} |\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\leftarrow\rangle). \quad (27)$$

上述推广的结论与直接求解自旋模型的基态结果是一致的, 我们只需将有确定宇称的费米子表达的基态通过二项式定理换到自旋 σ^z 表象即可得证.

2.3.2 奇数格点反铁磁体系

接下来我们考虑反铁磁 $J < 0$ 的情况, 这个时候, 原自旋模型有着阻挫效应, 有着 $2N$ 重简并的基态, 比铁磁情形要复杂一点, 不失一般性, 我们取格点数 $N = 3$ 来讨论, 以便把所有态, 包括基态和激发态, 都罗列出来. 结论可以推广至任意长的奇数格点体系.

(1)周期边界条件 $f_{N+1} = f_1$

在周期边界条件下, 我们由式(16)得到各个能级和态函数如下

$$E_0 = -3|J|, |\varphi_0\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_0^\dagger d_0 = 0\rangle, \quad (28a)$$

$$E_1 = -|J|, |\varphi_1\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_0^\dagger d_0 = 1\rangle, \quad (28b)$$

$$E_2 = |J|, |\varphi_2\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_0^\dagger d_0 = 2\rangle, \quad (28c)$$

$$E_3 = 3|J|, |\varphi_3\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_0^\dagger d_0 = 3\rangle. \quad (28d)$$

其中各个态的能级简并度容易得出, 结果见图 1(a). 虽然费米子 d 表象的粒子数恒定的态对应于费米子 f 表象的粒子数并不恒定, 粒子数的奇偶性却不变, 即宇称不变. 一般地, 为了保留合适宇称的态, 投影筛除方法可以用宇称算子 P (式(9))表达如下

$$|\psi^{\text{odd}}\rangle = (1 - P) |\psi\rangle, \quad (29)$$

$$|\psi^{\text{even}}\rangle = (1 + P) |\psi\rangle. \quad (30)$$

在上面的结果中, 式(28a)与(28c)为偶宇称的态, 而式(28b)与(28d)为奇宇称的态. 但是, 当我们作 Jordan-Wigner 变换后, 根据式(12), 在周期边界条件下, 奇数格点情形费米子数目应当为奇数, 即态函数应该是奇宇称的, 所以式(28a)与(28c)不是原自旋哈密顿量的态, 应当被投影筛除掉. 因此, 此处得到的 1 重简并费米子基态 $|\varphi_0\rangle$ (式(28a))并非原自旋模型的基态. 以下我们证明原自旋模型的基态对应于费米子态 $|\varphi_1\rangle$.

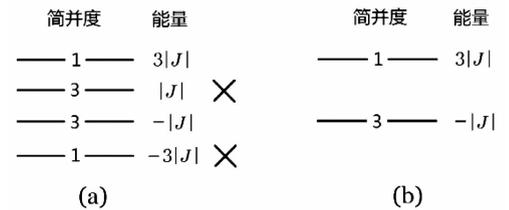


图 1 奇数格点反铁磁体系($N = 3$, 周期边界条件)的简并度和能级结构.

(a) 费米子模型的能级结构及其简并度, “X” 标记被投影筛除的能级和状态. (b) 符合原自旋模型的能级结构及其简并度.

Fig. 1 The energy levels and degeneracy of the anti-ferromagnetic chain with odd number of sites ($N = 3$, periodic boundary condition).

(a) for the fermion model, where “X” marks the redundant degrees of freedom that needs to be projected out. (b) for the spin model.

为了求出符合要求的基态, 我们先把费米子表象中的基态表达为 BCS 波函数

$$|\varphi_0\rangle = \prod_{k>0} (\mu_k + i\nu_k f_{-k}^\dagger f_k^\dagger) |0\rangle, \quad (31)$$

以此我们可以写出 3 重简并的符合奇宇称要求的基态,

$$|\varphi_{1,0}\rangle = d_0^\dagger |\varphi_0\rangle, \quad (32a)$$

$$|\varphi_{1,2\pi/3}\rangle = d_{2\pi/3}^\dagger |\varphi_0\rangle, \quad (32b)$$

$$|\varphi_{1,-2\pi/3}\rangle = d_{-2\pi/3}^\dagger |\varphi_0\rangle. \quad (32c)$$

$$|\varphi_{1,0}\rangle = \frac{-2}{\sqrt{3}}(|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (33a)$$

$$|\varphi_{1,2\pi/3}\rangle = 2|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-\sqrt{3}i - 1)|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (\sqrt{3}i - 1)|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (\sqrt{3}i - 1)|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-\sqrt{3}i - 1)|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + 2|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle, \quad (33b)$$

$$|\varphi_{1,-2\pi/3}\rangle = 2|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (\sqrt{3}i - 1)|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-\sqrt{3}i - 1)|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-\sqrt{3}i - 1)|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (\sqrt{3}i - 1)|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + 2|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle. \quad (33c)$$

可以验证,这 3 个态确实是原自旋模型的基态,但是,我们注意到,对角化原反铁磁自旋哈密顿量会得到 6 个简并的基态,上面只是其中的 3 个,而另外 3 个则需要用反周期边界条件找出来.

(2)反周期边界条件 $f_{N+1} = -f_1$

我们同样把基态和激发态全部罗列出来

$$E_0 = -3|J|, |\varphi_0\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_\pi^\dagger d_\pi = 0\rangle, \quad (34a)$$

$$E_1 = -|J|, |\varphi_1\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_\pi^\dagger d_\pi = 1\rangle, \quad (34b)$$

$$E_2 = |J|, |\varphi_2\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_\pi^\dagger d_\pi = 2\rangle, \quad (34c)$$

$$E_3 = 3|J|, |\varphi_3\rangle = |d_{2\pi/3}^\dagger d_{2\pi/3} + d_{-2\pi/3}^\dagger d_{-2\pi/3} + d_\pi^\dagger d_\pi = 3\rangle. \quad (34d)$$

在上面的结果中,因为在 $k = \pi$ 这一点进行了粒子-空缺对交换,式(34a)与(34c)为奇宇称的

通过不太复杂的计算,我们得出他们在自旋表象中对应的态分别为

态,而式(34b)与(34d)为偶宇称的态(宇称定义以费米子 f 为准,见式(9)). 同样,根据式(13),在反周期边界条件下,奇数格点情形费米子数目应当为偶数,即态函数应该是偶宇称的,所以式(34a)与(34c)不是原自旋哈密顿量的态,应当被投影筛除掉. 此处得到的费米子基态

$$|\varphi_0\rangle = \prod_{k>0} (\mu_k + i\nu_k f_k^\dagger f_k^\dagger) |0\rangle \otimes f_\pi^\dagger |0\rangle, \quad (35)$$

不是原自旋模型的基态,真实基态实际上对应着 $|\varphi_1\rangle$ (式(34b)), 且是 3 重简并的

$$|\varphi_{1,\pi}\rangle = d_\pi^\dagger |\varphi_0\rangle, \quad (36a)$$

$$|\varphi_{1,\pi/3}\rangle = d_{\pi/3}^\dagger |\varphi_0\rangle, \quad (36b)$$

$$|\varphi_{1,-\pi/3}\rangle = d_{-\pi/3}^\dagger |\varphi_0\rangle. \quad (36c)$$

它们在自旋表象下的形式为

$$|\varphi_{1,\pi}\rangle = -\frac{2\sqrt{3}}{3}(|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle - |\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle - |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (37a)$$

$$|\varphi_{1,\pi/3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(2|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-1 + i\sqrt{3})|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (1 + i\sqrt{3})|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-1 - i\sqrt{3})|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (1 - i\sqrt{3})|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle - 2|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (37b)$$

$$|\varphi_{1,-\pi/3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(-2|\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (1 + i\sqrt{3})|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-1 + i\sqrt{3})|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (1 - i\sqrt{3})|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + (-1 - i\sqrt{3})|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle + 2|\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle). \quad (37c)$$

将周期边界条件和反周期边界条件合起来,可以正确复现原自旋模型的 6 重简并的基态.

经过以上详细讨论,我们可以看到费米子表象的态中产生了假态,属于冗余自由度,必须根据适当的约束条件来剔除. 现在如果我们再回去去分析铁磁体系的能级结构时,会发现费米子表象的

态中仍然是要产生假态的,只不过它们是发生在激发态上. 而在本节的奇数格点数目反铁磁体系中,这样的假态(或冗余自由度)发生在真实基态以下,这容易导致对自旋体系的错误结论. 而这些假态对于有能隙的热力学极限体系有何影响和怎样剔除则是令人感兴趣的有待进一步研究的课题.

另外, 我们并没有讨论反铁磁体系的偶数个格点的情况, 是因为它不存在阻挫效应, 可以按照类似于铁磁体系的分析就能得到基态 2 重简并的结论, 在这里就不再赘述.

2.4 开放边界条件下费米子模型与自旋模型基态的比较

现在我们从开放边界条件出发来分析, 此时的哈密顿量中格点数 j 不再包括 N , 也就是

$$H = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x, \quad (38)$$

Jordan-Wigner 变换后相应的费米子表象下的哈密顿量为

$$H = J \sum_{j=1}^{N-1} (-f_j^\dagger f_{j+1}^\dagger + f_j f_{j+1} - f_j^\dagger f_{j+1} + f_j f_{j+1}^\dagger), \quad (39)$$

因为开放边界条件下不能再使用傅里叶变换, 所以我们在实空间定义马约拉纳费米子, 直接将哈密顿量在实空间进行对角化, 马约拉纳费米子的定义为

$$C_{2j-1} = f_j + f_j^\dagger, \quad (40)$$

$$C_{2j} = -i(f_j - f_j^\dagger), \quad (41)$$

哈密顿量转换为

$$H = J \sum_{j=1}^{N-1} iC_{2j}C_{2j+1} + 0^+ C_{2N}C_0 \quad (42)$$

哈密顿量对角化为

$$H = 2J \sum_{j=1}^{N-1} \left(d_j^\dagger d_j - \frac{1}{2} \right) + \epsilon d_0^\dagger d_0. \quad (43)$$

其中 ϵ 为零模 ($\epsilon = 0^+$), 玻戈留玻夫变换分别为

$$d_j^\dagger = C_{2j} - iC_{2j+1}, \quad (44)$$

$$d_0 = C_{2N} + iC_1, \quad (45)$$

(1) 铁磁体系

对于铁磁系统, $J > 0$, 哈密顿量的基态满足

$$d_j |\psi_g\rangle = 0, \quad (46)$$

同样我们选取有限个格点来求出满足上述条件的基态在自旋表象下的形式, 然后将这一形式进行推广. 当格点数 $N = 3$ 时, 在满足基态条件 (46) 的基础上再加上零模是否占据一个费米子条件, 我们可以求得在 σ^x 表象下基态是

$$|\psi_g\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle, \quad (47)$$

而当格点数 $N = 4$ 时在 σ^x 表象下基态是

$$|\psi_g\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle, \quad (48)$$

(2) 反铁磁体系

对于反铁磁系统, $J < 0$, 哈密顿量同样对角

化为式 (43), 只是此时的基态满足

$$d_j^\dagger |\psi_g\rangle = 0. \quad (49)$$

同理, 在有限个格点下基态在 σ^x 表象下的表达式

$$N = 3 \quad |\psi_g\rangle = C(|\rightarrow\leftarrow\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\rightarrow\leftarrow\rangle), \quad (50)$$

$$N = 4 \quad |\psi_g\rangle = C(|\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rangle), \quad (51)$$

从上述分析可知, 在开放性边界的条件下, 铁磁和反铁磁体系的基态都是两重简并的. 此模型在周期边界的费米子体系下有不平庸的马约拉纳数, 因而也可以把上述基态称为零模边界态. 对上述结果我们也可以推广到无穷多个格点的情况, 对于铁磁体系, 基态为

$$|\psi_g\rangle = |\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\rangle, \quad (52)$$

然而对于反铁磁, 基态为

$$|\psi_g\rangle = |\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\cdots\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle \pm |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\cdots\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow\rangle, \quad (53)$$

上述结果的证明与周期边界条件下的铁磁体系情况类似.

当外场 $h \neq 0$ 时自旋基态的准粒子占有数和上述分析得到的结果一致, 然而处于几个费米子占据的态的概率会像反铁磁体系的周期边界条件那样不具有一般规律, 因此自旋基态的表达形式也就很难从少数几个格点的情况得到推广. 但是费米子表象带来的冗余自由度仍然会成为一个问题.

3 总 结

从上述分析中我们得到, 对一维横场伊辛模型使用 Jordan-Wigner 变换、傅里叶变换以及玻戈留玻夫变换后得到的费米子模型会产生假态 (或冗余自由度), 特别地对于有阻挫的奇数格点的反铁磁体系, 假态会产生于真实基态之下, 造成对原自旋体系的错误结论, 而对于其他情形, 假态产生于激发态中, 其后果还有待考察. 产生假态的原因是使用 Jordan-Wigner 变换将自旋算符转变为费米子算符时有两种费米子边界条件 (周期边界条件和反周期边界条件) 可供选择, 从而产生了冗余自由度. 然而在开放边界条件下, 得到的基态因为不涉及边界条件的多样性, 所以得到的基态是体系真实无误的基态, 体系的自由度也不会产生冗余. 一般认为, 开放边界条件下的零模边界态对应着周期边界下的拓扑不平庸的基态, 即所

谓体内 - 边界对应 (bulk-edge correspondence)^[13]. 我们的工作表明有着阻挫的奇数格点数目的反铁磁体周期链的基态与其开放链的零模边界态对应方式完全不同于其他简单情况, 如偶数格点以及铁磁等. 最后, 值得指出的是, 当我们使用离子阱技术或光晶格技术, 利用费米子来模拟横场伊辛自旋模型时, 如果模拟一个周期或反周期边界条件的体系时, 其费米子态虽然本身都不是假态而是真态, 但是其中某些态的存在就使其不能成为自旋模型的合适对应物了.

参考文献:

- [1] Gennes P G. Collective motions of hydrogen bonds [J]. Solid State Commun, 1963, 1(6): 132.
- [2] Kobayashi K K. Dynamical theory of the phase transition in KH_2PO_4 -type ferroelectric crystals[J]. J Phys Soc Jpn, 1968, 24(3): 497.
- [3] Kaminow I P, Damen T C. Temperature dependence of the ferrqelectric mode in KH_2PO_4 [J]. Phys Rev Lett, 1968, 20(20): 1105.
- [4] Dutta A, Divakaran U, Sen D, *et al.* Quantum phase transitions in transverse field spin models; from statistical physics to quantum information[J]. arXiv: 1012. 0653v2
- [5] Suzuki S, Inoue J, Chakrabarti B K. Quantum ising phases and transitions in transverse ising models [M]. New York: Springer, 2013: 2.
- [6] Mezzacapo A, Casanova J, Lamata L, et al. Topological qubits with majorana fermions in trapped ions [J]. New Journal of Physics, 2013, 15:033005.
- [7] Leibfried D, Blatt R, Monroe C, et al. Quantum dynamics of single trapped ions[J]. Rev Mod Phys, 2003, 75(1): 281.
- [8] Coleman P. Introduction to many body physics[M]. London:Cambridge University Press, 2010: 79.
- [9] Jordan P, Wigner E. Über das paulische aquivalenzverbot [J]. Zeitschrift für Physik, 1928, 47 (9): 631.
- [10] Piet W B. Enter the majorana fermion[J]. Science, 2012, 336: 989.
- [11] Kitaev A Y. Unpaired majorana fermions in quantum wires[J]. Usp Fiz Nauk: Suppl, 2001, 171 (10): 131.
- [12] Greenberger D M, Horne M A, Shimony A, Zeilinger A. Bell's theorem without inequalities[J]. Am J Phys, 1990, 58(12): 1131.
- [13] Shen S Q. Topological insulators[M]. New York: Springer, 2012: 169.