

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院 博士学位论文

Kitaev模型中的拓扑量子相变

封晓勇

指导教师 _____ 向涛研究员

中国科学院物理所

申请学位级别 博士 学科专业名称 凝聚态理论

论文提交日期 2007年11月 论文答辩日期 2007年11月

培养单位 _____ 中国科学院理论物理研究所

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Typeset by L^AT_EX 2_ε at November 8, 2007

With package C_ASt_hesis v0.1h of C_TE_X.ORG

Topological Quantum Phase Transition in Kitaev Model

Xiao-Yong Feng

Supervisor:

Prof. Tao Xiang

Institute of Theoretical Physics
Chinese Academy of Sciences

November, 2007

*Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Ph.D.
in Theoretical Condensed Matter Physics*

摘 要

Kitaev模型是一种可严格求解的二维量子自旋模型. 它的研究价值主要体现在两大方向上. 其中一个方向是拓扑量子计算. 退相干是实现量子计算的巨大障碍. 拓扑量子计算利用量子态的拓扑性质对局域扰动不敏感的特性来绕过这个难题. Kitaev模型拥有满足非阿贝尔统计的拓扑型准粒子激发. 通过操作这些准粒子就可以进行拓扑量子计算. 本文只将部分地涉及拓扑准粒子这个物理层面, 而不深入讨论拓扑量子计算的细节. 对Kitaev模型研究的另一个方向是拓扑量子相变. 这类相变不伴随对称性的自发破缺并且不存在用于刻画相变的局域序参量. 拓扑量子相变超越了朗道的相变范式, 对它的研究势必使我们对相变有更深入的认识. 这篇论文主要从量子相变的角度对Kitaev模型进行了系统的研究.

第一章为引言部分. 从刻画多体系统的热力学相变谈到发生在零温的量子相变, 然后再到不满足朗道相变范式的拓扑量子相变, 并且顺便介绍了一下拓扑量子计算, 最后带出了我们要研究的Kitaev模型.

第二章具有综述性质. 它介绍Kitaev模型的一些主要性质, 如它的对称性、基态相图、动力学自旋关联函数、拓扑激发以及加入时间反演破缺项对能谱的影响. 在这一章中, 我们利用约旦-维格纳变换将初始的自旋模型转化为处于 Z_2 场中的无相互作用Majorana费米子模型. 这种处理方法不带来冗余的自由度, 明显地优于模型的发明者Kitaev的四Majorana费米子表示加投影的办法. 这种优势在计算能谱和动力学自旋关联函数以及其它一些物理量时得到了充分的体现.

在第三章到第五章中我们限制Kitaev模型的一个空间维度, 分别讨论了一维Kitaev模型、自旋梯子模型和多腿梯子模型.

一维Kitaev模型可以作为最小的具有拓扑量子相变的模型加以研究. 因为它与最小的具有量子相变的模型一维横场依辛模型对偶. 在一维Kitaev模型中发生的量子相变不破缺对称性并且不存在表征相变的局域序参量, 这类量子相变称为拓扑量子相变. 我们找到了一种非局域的弦状序参量, 它从零到非零的改变表征了相变的发生. 一维Kitaev模型与横场依辛模型的对偶关系告诉我们, 发生在一个模型中的拓扑量子相变在它的某个对偶模型中或许可以用朗道的对称

性破缺理论来描述. 值得注意的是以上结果的得到都是严格的.

对两腿自旋梯子模型的研究同样可以得到表征拓扑量子相变的拓扑序参量的严格解析表达式. 并且我们得到了一个很有意思的结果: 两腿自旋梯子模型与垂直磁场中的xy模型对偶. 另外我们还计算了边缘态和涡旋激发态. 从中可以看出边缘态或涡旋激发态可以用来区分不同的相区.

固定一组 Z_2 场, 我们得到了多腿的费米子模型. 随着腿数目的增加, 相图中的临界线也随之增加. 当腿的数目趋向无穷大时, 大量的临界线合并为一个临界区域, 从而恢复了Kitaev模型的基态相图. 通过特殊的格点标记, 我们可以找到刻画发生在某条临界线上相变的拓扑序参量的算符表达式, 但不像一维Kitaev模型和自旋梯子模型那样, 除了四条腿的梯子模型一般我们无法给出具体的数值.

在第六章, 我们改变了Kitaev模型的参数. 得到的新模型具有一些有趣的性质, 比如在周期性边界条件下零磁通分布的费米子模型最少只要四条腿就与原先的二维Kitaev模型有一样的相图.

最后一章是对本篇论文的总结.

关键词: Kitaev 模型, 拓扑量子计算, 拓扑量子相变, 拓扑序参数

Abstract

The Kitaev model is a solvable two-dimensional quantum spin model. The research of it mainly concerns two big issues. One is Topological Quantum Computation (TQC). Decoherence is a huge stumbling block of the realization of quantum computation. TQC steers clear of this problem by protecting information with topological degree of freedom of a quantum system. There are topological excitations which satisfy non-Abelian statistics in the Kitaev model. TQC can be performed by operating these quasi-particles. This thesis is not going to delve into the details of TQC but partly to touch the physical level of topological excitations. The second research interest of the Kitaev model is about Topological Quantum Phase Transition (TQPT). Such kind of phase transition occurs without breaking symmetries and there is no local order parameter to characterize it, which is beyond Landau's paradigm of continuous phase transitions. The study of TQPT is bound to sharpen our understanding of phase transitions. This thesis studies the Kitaev model systematically from an angle of quantum phase transitions.

The first chapter is an introduction. Thermal phase transition which is indispensable to describe macroscopic system is discussed followed by the discussion of quantum phase transition which happens in zero temperature, and then the TQPT which can not be comprehended by Landau's symmetry breaking theory. After that, TQC as one of the main research interests of the Kitaev model is introduced. Finally, the Kitaev model is brought onto the stage.

The second chapter will give you a general overview of the Kitaev model. Some main properties of the Kitaev model are discussed including its symmetries, phase diagram, dynamic spin correlation functions, topological excitations and the effect of actions which disregard time-reversal symmetry. In this chapter, using Jordan-Wigner transformation, we map the Kitaev model into a non-interacting Majorana fermion model in Z_2 magnetic field. Our treatment will not bring unphysical degree of freedom and is remarkably superior to the method of

the model inventor Kitaev who expressed one spin by four Majorana fermions and did projection in the end of calculations. The advantages of our method will be sufficiently illustrated when calculating physical quantities such as phase diagram and dynamic spin correlation functions.

From chapter three to chapter five, we investigate the Kitaev model in the cases of single chain, two-leg ladder and multi-leg ladders respectively.

One-dimensional Kitaev model can be regarded as the minimum model for TQPT, since it is dual to quantum Ising model which is taken as the minimum model for quantum phase transition. We find a well-defined order parameter to character the TQPT occur in one-dimensional Kitaev model. The order parameter is a non-local one and has topological meaning. The duality of these two models tells us that TQPT can be described in a certain dual model by conventional theory. It is notable all the results obtained in this case are exact.

As for two-leg ladder case, the exact form of topological order parameters is obtained. Interestingly, the two-leg ladder model is dual to xy model in magnetic field. Furthermore, the edge states and vortex-core states are calculated and they can be used to distinguish phases with different topological orders.

After fixing the set of Z_2 fields, the multi-leg ladder models are studied. With the growth of legs, the critical lines are increasing. When the number of legs tends to be infinite, these critical lines merge into a critical region which recovers the phase diagram of the Kitaev model. Labeling the lattice sites in a particular way, we find the expression of topological order parameter for each critical line. However, we are not able to give the exact value of them except of some special cases.

In the sixth chapter, Kitaev model with a different set of couplings is studied which has some interesting properties. With periodic boundary condition, the four-leg ladder model in zero flux phase has the same phase diagram as the original Kitaev model.

The last chapter is the summary of the thesis.

Keywords: Kitaev model, topological quantum computation, topological quantum phase transition, topological order parameter

目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	v
第一章 引言	1
1.1 多体系统与统计	1
1.2 热力学相变与量子相变	2
1.3 KT相变与拓扑量子相变	5
1.4 拓扑量子计算	7
1.5 Kitaev模型	10
第二章 Kitaev模型	13
2.1 研究现状	13
2.2 物理实现	14
2.3 砖墙构型	16
2.4 对称性	17
2.5 费米化	20
2.5.1 四费米子表示	20
2.5.2 约旦-维格纳变换	21
2.5.3 守恒量的费米子表示	22
2.5.4 边界项	23
2.6 对角化	24
2.6.1 傅立叶变换	24
2.6.2 基态相图	25

2.6.3	动力学自旋关联函数	26
2.6.4	拓扑激发	27
2.6.5	磁场的作用	30
2.7	小结	31
第三章	一维Kitaev模型	33
3.1	哈密顿量	33
3.2	重整化群分析	35
3.3	拓扑序参数	37
3.4	拓扑数	39
3.5	关于拓扑序的一些讨论	40
3.6	零模及其对应的边缘态	41
3.7	小结	46
第四章	自旋梯子模型	47
4.1	哈密顿量	47
4.2	π 磁通分布和基态相图	48
4.3	重整化群分析	50
4.4	拓扑序参数	51
4.5	拓扑数	53
4.6	边缘态及拓扑激发	53
4.7	小结	58
第五章	多腿梯子模型	59
5.1	哈密顿量	59
5.2	四条腿的梯子情形	60
5.2.1	有限尺寸效应与一级量子相变	60
5.2.2	等价模型与拓扑序参数	61
5.3	多条腿的梯子情形	63
5.4	小结	67

第六章 新参数下的Kitaev模型	69
第七章 结语	73
附录 A 泡利算符	75
附录 B 约旦-维格纳变换	77
附录 C 动量空间重整化	79
附录 D 对偶变换	81
附录 E 转移矩阵方法计算拓扑序参数	83
附录 F Majorana费米子基态的 π 磁通条件	87
参考文献	91
发表文章目录	99
致谢	101

第一章 引言

1.1 多体系统与统计

量子力学的正确性被大量的实验在很高的精度上证实. 在非相对论极限下可以用薛定谔方程表述. 它是一类波动方程, 波函数可以用几率幅来诠释. 方程的线性性质使得两个量子态的叠加仍是系统的量子态. 出现在方程中的普朗克常数 h 在国际单位制下约等于 6.626×10^{-34} , 虽然很小但不为零, 是不确定性关系的来源. 量子力学问题在数学上就是波动方程的本征值问题.

除了少数可严格求解的单体问题, 人们在计算机的辅助下还可求解一些少体问题, 由此人们可以计算原子的磁性, 化学键的强度和固体的弹性等[1]. 但仅此而已, 如果涉及的粒子数达到两个数量级, 以目前计算机的处理能力已是望尘莫及. 并且这种困难随着自由度的增加指数增长(量子计算机可以克服这个困难, 但它基本上还处于概念阶段, 实验上的主要困难是量子退相干, 我们将在后面继续这一话题).

没有实验依据, 一切从微观理论出发为解释宏观现象所做的近似都是不可靠的. 将事物还原到一个简单法则的能力并不意味着我们可以从这个简单法则出发重构出整个宇宙[2]. 原则上, 同一物理现象并不一定要对应同一个微观理论. 量子电动力学中的狄拉克费米子可以在用非相对论量子力学描写的石墨单层中出现[3]. 在标准模型中存在的分数电荷可以在分数量子霍尔效应中观察到[4].

人们不禁要问, 是否目前所谓的微观理论也只不过是更基本层面上的一种衍生现象[5, 6]? 正如安德森所说的, 大量粒子的集合所表现的行为并不一定能够通过少量粒子性质的简单外推而理解. 相反, 在每一个复杂度层面上将出现新的性质, 而要理解这些新行为需要的研究在本质上和别的基础研究没有区别[2]. 用其精辟的话说就是: "More Is Different".

一块能够被握在手心的物质包含了阿佛加德罗量级的分子或原子. 此时认为粒子数无穷大是一个很好的近似. 它比直接处理有限个大量粒子容易得多. 统计的概念在这里起了至关重要的作用. 物理归根结底是一门实验科学, 测量是联系理性与客观现实的唯一桥梁. 对一个宏观系统测量而得到的结果是在有

限的一段时间内对大量微观事件的平均. 特殊事件如夏天的湖面突然结冰, 小球不借助外力自动从地面弹起等被淹没在浩瀚的最几概率事件组成的海洋中.

那么,怎样才能说我们已经清楚地了解了一个凝聚态系统呢? 一个经验的判据就是给定一组如温度和压强这样的参数后我们就能够知道它所处的状态如能量, 比热以及结构特征等. 当然这一切是离不开对其内在机制的理解的. 在多粒子体系这个层次上相以及相变的概念是不可或缺的. 在同一个相, 系统的物理性质是相近的比如具有磁性或者能够超导. 不同相之间有一个相变的过程. 如果我们通过对保留物理元素的简化模型的研究找到了相应实际系统的相变和不同相的特性, 就可以说我们已经理解了这个系统.

这种简化模型可能与描写真实物理系统的微观模型大相径庭. 如描写常规超导体的BCS模型[7], 它的主要构件是库伯对, 而真实系统的哈密顿量描写的是电子通过交换声子实现弱耦合. 从弱耦合的电子到库伯对的凝聚并不能够通过直接的计算得到. 事实上, 超导转变伴随着自发的规范对称性破缺. 而这种破缺的信息是不包含在原始的哈密顿量里面的. 在这里相和相变有助于我们描述一个物理系统的低能行为而不过多地牵涉到它的细节.

1.2 热力学相变与量子相变

朗道的对称性破缺理论是我们理解连续相变的范式[8]. 这里的连续相变是指发生相变时物理量是连续变化的, 而自由能对温度的二阶导具有奇异性(发散或不连续). 这类相变的一个基本的重要特征是其中一个相的对称性要比另一个相的高. 对称性高的为无序相, 对称性低的为有序相. 可以用序参数来刻画它们. 序参数是某种局域的可观测量, 如液氦中的超流密度, 自旋点阵中的宏观磁化强度等. 在有序相序参数自然不为零, 当发生二阶相变时, 它由非零连续变成零. 朗道唯象地将一般系统的作用量用序参数表示出来, 其函数形式由系统的对称性决定. 发生相变时, 系统自发地破缺到原先对称性群的一个子群. 发生破缺的原因是系统具有简并基态, 实际物理系统只能选择其中之一, 于是系统就失去了联系各种基态的对称性.

在相变点附近物理量会表现出一些简单的和普适的行为. 它们与约化温度或约化磁场具有幂次关系, 各种幂指数之间满足一定的代数关系使得只有两个幂指数是独立的. 所有已知的统计系统都可以归入为数不多的普适类. 属于同一普适类的系统拥有一组相同的幂指数, 但它们所指的对象可以千差万别, 如气

液系统与磁性系统就属于同一普适类. 靠近临界点, 涨落趋向无穷大, 各种关联函数发散. 物理系统具有自相似性, 也就是说此时系统的细节被抹平, 只有长波性质是主要的, 准粒子对微观相互作用不再敏感, 从它们不能反推出微观相互作用形式, 这正是一种层展现象.

在以上讨论中, 我们没有刻意区分量子系统和热力学系统. 热力学相变发生在有限温. 导致有序到无序转变的是与温度相关的热力学涨落. 随着温度的升高, 配分函数中无序成分的比重增加, 当它超过某个临界点时, 热力学系统的性质发生了突变, 表现在自由能和各种关联函数在相变点的奇异性. 量子相变发生在零温, 通过改变有效哈密顿量的参数(如耦合强度, 参杂浓度, 磁场强度等)使多体哈密顿量的最低本征能级发生了非绝热的变化, 即基态及其拥有的序发生了改变. 量子相变是由量子涨落驱动的. 它来源于量子的非对易性. 使得基态在希尔伯特空间中与完全有序的基矢不再平行. 于是波函数中加入了无序的成分. 当基态发生改变, 系统将失去原先定义的序.

我们以属于同一普适类的二维铁磁依辛模型和一维横场依辛模型为例来进一步说明热力学相变和量子相变在机制结构上的类似性. 二维铁磁依辛模型在有限温存在一个二级相变[9]. 当温度低于临界温度时, 微弱的热力学涨落已经无法阻止系统发生有序的转变. 此时, 为了降低系统的能量, 自旋倾向于朝同一个方向排列. 由于上和下是等价的. 系统将发生自发的对称性破缺, 所有的自旋将同时指向上或下. 需要说明的是, 这种对称性的自发破缺确实发生在实际的系统中, 但具有完整对称性的理论并不自动包括这一机制, 需要人为地加上某种扰动以破坏这种对称性, 然后在热力学极限后撤销它以判断系统是否发生了对称性的自发破缺. 一旦对称性破缺了, 系统就进入有序相. 这个序就是自旋的指向一致. 它在零温时可以被良好的定义, 即所有的自旋指向同一方向. 热力学涨落的作用就是扰乱自旋的排列以增加系统的熵. 一维横场依辛模型改变横场的大小可以在零温发生从无序到有序二级相变. 这里的序也是指自旋的同向排列. 它可以在横场为零时被良好的定义, 此时所有自旋同向排列是哈密顿量的本征态. 自旋全朝上或全朝下是一对简并的基态. 但这两个态具有宏观的属性, 任何与环境的微弱作用都将使它们退相干. 实际系统只能处于其中一种状态, 也就是说对称性发生了自发破缺. 加入横场使得本征态必须叠加一些无序的成分. 如果横场足够大, 系统将恢复其对称性而进入无序相.

Hertz首次从微观作用量出发导出了处理量子相变的朗道序参量泛函[10].

他用路径积分表达量子的配分函数,从配合函数的表达式可以看出一个D维的量子系统等价于一个D+1维的经典系统.这里所说的经典是指配分函数中不再出现不可对易的算符.经典系统的有效哈密顿量前面的因子是原来量子哈密顿量中表征量子涨落的耦合系数的函数,在D+1维的配分函数中这个因子处于表征热力学涨落的温度的地位.量子涨落和热力学涨落就这样联系起来.但它们也是有区别的,因为量子系统往往在同一普适类的意义上才对应简单形式的经典系统,由软模导致的有效长程相互作用可以引起量子系统和经典对应系统中相变性质的定性不同[11].另外,多出来的一维对应虚时,所以这里的D+1维经典系统不同于D+1维实空间的经典系统,前者通过解析延拓可以得到系统的动力学信息,这是因为经典统计是处理对易量的,而量子统计需要运动方程的信息,也就是本征能谱,于是动力学信息自然地包含在量子统计中[12].

量子相变较之与热力学相变的这种不同使得研究量子相变成为一件很有意义的事情.首先在理论上,量子相变是刻画多体系统量子效应的有力手段.在量子临界点的涨落可以影响多体系统在有限温度的行为,甚至这种影响在室温也会有所体现[13, 14].给一个凝聚态体系建模是理论研究的通常手段,如果我们关心一个系统的基态和低温性质,我们只需对哈密顿量进行考察,研究其在各种参数下的行为并且找出其可能存在的量子相变.人们花了很大力气去研究的可以表示为简单哈密顿量形式的模型往往具有量子相变的能力,如Hubbard模型中随着电子在位排斥势的增大可以发生金属到莫特绝缘体(Mott Insulator)之间的转变[15, 16], t-J模型以化学势的大小即空穴浓度为变量来得到超导转变相图[17],一维的约瑟夫森阵列中电位能的改变将引起超导与绝缘相变[18].在量子临界点附近,往往有多种因素参与形成各种序的竞争,从而形成非常丰富的相结构.如高温超导材料,除了有超导相还有反铁磁相以及还没有被完全研究清楚的赝能隙区和非费米液体区[19].

在实验方面,随着低温技术和材料工艺的进步各种量子相变现象被验证和发现.在这里我只引两个在文献[13]中举的例子.其一是重费米子材料 $CeCu_{6-x}Au_x$.当 x 较大时它的基态是磁有序的, Ce 离子的磁矩以非公度的自旋波方式排列,当减少参杂量 x ,它将发生一个二级相变,基态从磁有序变为费米液体,这种费米液体的准粒子具有非常大的有效质量.另一个例子是半导体超结构中的二维电子气,当处在垂直于平面的强磁场中时,电子能谱将劈裂成分立的朗道能级,调节磁场大小让电子刚好占满第一朗道能级,此时电子自旋将以平行方式排列.这种铁磁结构的形成,与外磁场的塞曼耦合并不是主要原因,电

子利用泡利机制在实空间互相远离而降低库仑能才是其主要原因. 当两层这样的电子气互相靠近时, 层间的电子具有反铁磁的交换作用, 使得它们靠得足够近时层间电子形成自旋单态. 这种转变是通过两个二级量子相变实现的, 其中经历了一个斜反铁磁序的中间态.

似乎关于相及其相变的故事讲到这里该告个段落了. 然而, 精彩的还在后面. 大自然的神秘莫测就在于它的例外. 这里指的例外是在已有范式和理论框架下讲的, 它可以被一个更完整的理论所涵盖. 朗道的关于连续相变的对称性破缺理论是一个非常成功的理论. 它很好的解释了各种热力学临界现象, 包括 ^4He 的超流现象和BCS类型的超导现象(虽然这两种现象是量子效应的宏观体现, 但发生的相变还属于热力学的范畴, 因为在这里控制相变的是热力学涨落而非量子涨落, 量子效应只是为序参数的存在提供条件[12]). 在量子领域它也颇有成效, 如处理光学晶格中的玻色子在相互作用强度, 势井深度或粒子数密度的改变下发生的超流态和莫特绝缘态之间的相变[20, 21], 以及各种重费米子材料在零温下的磁性转变等. 朗道的对称性破缺理论业已成为我们理解相变的范式.

为了对这个范式有更清晰的理解需要谈及两个有用的定理. 其一是关于对称性破缺的. 是说当一个连续的对称性自发的破缺时将伴随一种无质量模式的产生, 人们称这种模式为Goldstone模[22], 它联系由连续参数表征的不同基态, 系统试图通过这种无能隙的激发来恢复原先的对称性. 其二是关于空间维数和序的关系的. Mermin和Wagner证明了这么一个定理[23]: 当维数小于等于2时, 一个无限的只有短程相互作用的系统在有限温度不具有长程序. 可以这样来理解这个定理: 在有限温度, Goldstone模的激发在低维十分显著以至于恢复了原来的高对称性而破坏了可能形成的长程序.

1.3 KT相变与拓扑量子相变

二维是一个很特殊的维数, KT相变可以在二维存在. 它是一种连续相变, 用自由能对温度的导数来定义, 它属于无穷级相变. 这类相变是拓扑缺陷(如xy模型中的vortices)驱动的, 不伴随对称性的破缺. 其中没有对称性破缺是由Mermin-Wagner定理保证的. 至于发生的相变, 它的来源是拓扑激发. 它不同于连续的结构变化而引起的自由能改变[24]. 这是朗道理论不能包含的.

KT相变是朗道范式的一种例外. 另一种例外发生在自旋为1的海森堡链中[25]. 不同于自旋为半整数的海森堡链, 它的低能激发是有能隙的. 一个直接

的结果是关联函数指数衰减. 表面上看它的基态是无序的, 事实上存在一种隐藏的反铁磁序(如果将 $S^z = 0$ 的自旋格点抽掉, 剩下的自旋按顺序排列就是反铁磁*Neel*态). 但是这种序的序参数不同于朗道理论的局域物理量或长程关联量, 它是一组实空间排列的算符链的期望值. 它具有非局域性和拓扑性.

在分数量子霍尔系统中, 电子的运动遵从: (1)在第一朗道能级做回旋运动; (2)电子总是以半整数步围绕别的电子; (3)电子间尽量彼此远离. 这些限制规定了电子“舞蹈”的样式. 不同填充因子的霍尔态具有不同的样式, 但它们不能用对称性来区分, 事实上它们是某种量子液体. 通过理论构造人们发现各种分数量子霍尔态具有相同的对称性和不同的内部结构. 而这种内部结构不同于已知的序, 不能用通常的方式观察到. 这种表征不同分数量子霍尔态的内部结构被称为拓扑序[26]. 但是不像自旋为1的海森堡链那样有定义良好的拓扑序参数, 分数量子霍尔系统中序的信息隐藏在电子的基态波函数里. 具有不同拓扑序的量子霍尔态之间可以发生连续的量子相变[27]. 由于没有对称性的破缺, 朗道理论在这里不再适用.

自旋为1的一维海森堡模型没有一个可调的参数使其能够发生量子相变, 它总是处在同一个自旋液体相中. 当然, 可以通过加入特殊的自旋耦合项使其具有相变的能力, 适当地选取耦合参数, 在特殊的参数点上可得到严格解, 在严格解附近发现拓扑序参数有从非零到零的转变[25].

拓扑量子相变还存在于手征自旋态中, 各种手征自旋液体无法用对称性来区分, 但它们具有不同的拓扑序[28]. 理论学家用各种方法来刻画拓扑序. 如用基态的简并度[29], 准粒子统计[30], 边缘态[31], 拓扑纠缠熵[32]等.

拓扑量子相变具有一些显著的特点:

- 相变不伴随对称性的自发破缺, 也就是说两相具有相同的对称性;
- 临界点两侧都是无序相, 即不存在刻画序的朗道型局域序参量;
- 无序相具有非平庸的拓扑序, 表现在它的基态简并度与系统所属流形的拓扑结构有关;
- 在量子临界点的激发往往是无质量的狄拉克费米子, 而在拓扑相的激发是一些改变整体拓扑性质的拓扑激发, 这类准粒子可以不遵循自旋统计, 可以有分数化的量子数[33].

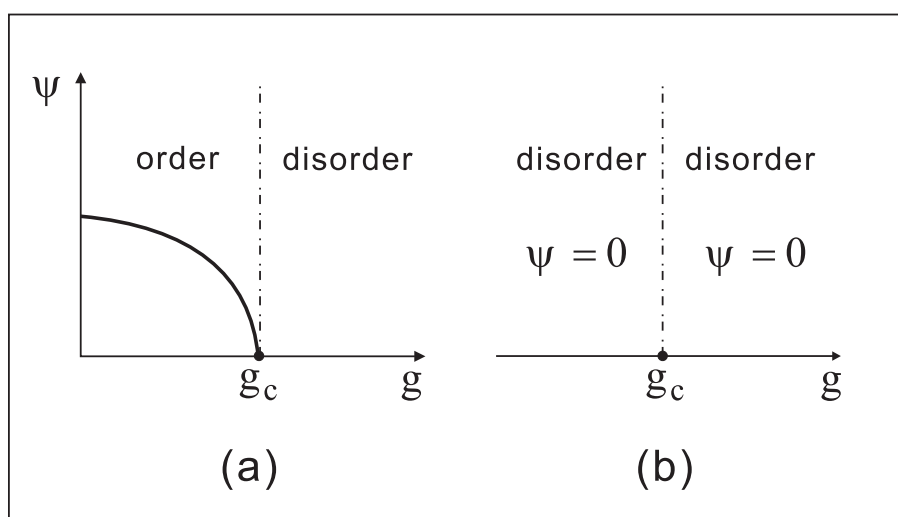


图 1.1: (a)朗道连续相变范式的图像. 相变伴随对称性的自发破缺, 有序相具有较低的对称性并存在一个非零的局域序参量;(b)拓扑量子相变的图像. 临界点两边具有相同的对称性, 不存在任何局域的序参量.

拓扑量子相变是对朗道相变范式的一种突破. 而我们知道每次对旧范式的突破都将带来新的概念和关于自然界更全面的理解. 这种效果已经在研究拓扑序的过程中显露出来. 对称性破缺是大统一理论的构造思路. 大统一理论通过破缺一个大的对称性群来得到各种低能物理, 从而将各种物理规律归结为一个统一的原理. 而发生拓扑相变时, 物理系统不是发生了对称性的破缺, 而是出现了新的更高的对称性. 这是一种层展现象, 是在凝聚态理论中发展起来的深刻的观念. 它为我们理解世界的统一性和规律的普遍性提供了崭新的图象.

另外对拓扑序和拓扑量子相变的研究不但在理论上有着重要的意义, 它与拓扑量子计算也密切相关.

1.4 拓扑量子计算

量子态具有可叠加性和非定域关联性, 这些在原理上有别于经典系统的特性使得量子计算机可以用多项式长的时间处理经典计算机需要指数长的时间才能处理的问题. 如大质数分解和最佳遍历路径等NP问题. 而经典计算机对前一问题无能为力是现代银行系统和军事系统以公开密钥协议进行信息传递的有力保证. 一旦制造出了量子计算机这种保证就不复存在了.

如此诱人的优势并不意味着量子计算机可以马上被研制出来. 我们知道, 在物理器件上进行逻辑运算, 由偶然事件导致的差错是无法避免的. 这就需要引入纠错机制. 在经典计算中最便于理解的纠错方法就是多次备份信息, 然后以多数原则来决定被噪声干扰后的信息. 在量子计算中环境噪声主要以退相干的方式带来误差. 然而, 量子不可克隆原理排除了上述纠错方法在量子计算中的直接应用[34]. 幸运的是, 利用量子态的纠缠性, 的确可以找到用于量子计算的纠错方法[35, 36]. 但是要进行有效的量子纠错, 误差率要求非常小(大约是每进行十万次逻辑运算只允许一个量子比特的偏差)[37], 凭现在的技术是无法实现的. 这就需要利用全新的机制来对付退相干.

几何形状的信息对于一个系统的拓扑性质来说是冗余的, 也就是说我们不需要考虑局域几何形状的连续改变对整体拓扑结构的影响. 我们可以利用希尔伯特空间的拓扑性质对局域扰动不敏感的特点来绕过困扰量子计算的退相干问题. 误差来源主要是热涨落所激发的影响计算的多余准粒子. 它可以被系统的能隙很好的保护起来. 造成的误差正比于玻尔兹曼因子 $e^{-\Delta/k_B T}$, 当能隙 Δ 远大于热涨落能量 $k_B T$ 时, 它是一个指数小量. 这种利用拓扑性质来回避退相干的量子计算方式称为拓扑量子计算[38].

既然信息被拓扑很好的保护了, 那我们如何在这样的系统中进行信息的处理并在计算结束后提取所要的信息呢? 要做到这一点我们必须弄清楚体系的拓扑结构, 即量子态所具有的拓扑序. 要执行拓扑量子计算首先需要一组具有不同拓扑序的简并基态, 不同的拓扑基态之间由拓扑型的准粒子激发联系起来, 如一维实空间中的扭结, 二维中的涡旋. 如果这些准粒子具有非阿贝尔的统计, 通过绝热地交换这些准粒子可以对量子态做么正变换, 末态不仅取决于对哪些准粒子做了交换, 而且取决于交换的顺序.

信息处理的过程如同编辫子, 在数学上用辫子群描写. 其生成元 T_j 满足两个基本的代数关系:

$$T_j T_k = T_k T_j \quad , \quad |j - k| > 1 \quad (1.1)$$

$$T_j T_{j+1} T_j = T_{j+1} T_j T_{j+1} \quad , \quad j = 1, 2, \dots, N - 2 \quad (1.2)$$

其中 T_j 表示交换第 j 个和第 $j + 1$ 个准粒子, N 为准粒子的数目. 第一个等式表示两个没有公共元素的交换是不相关的. 而第二个等式即为杨-巴斯特方程, 其左右两边的操作在拓扑上是等价的.

阿贝尔任意子即为辫子群的一维不可约表示. 若辫子群的不可约表示大于等于二维, 则对应的任意子为非阿贝尔任意子.

我们可以利用Majorana费米子构造非阿贝尔的辫子群表示[39]. Majorana费米子满足反对易关系: $\{\gamma_i, \gamma_j\} = 2\delta_{ij}$. 如果定义作用:

$$T_i: \begin{cases} \gamma_i \rightarrow \gamma_{i+1} \\ \gamma_{i+1} \rightarrow -\gamma_i \\ \gamma_j \rightarrow \gamma_j, \quad j \neq i, i+1 \end{cases} \quad (1.3)$$

可以验证, T_i 满足辫子群生成元的对易关系. 构造相应的么正算符 $\tau(T_i)$ 使得: $T_i\gamma_j = \tau(T_i)\gamma_j[\tau(T_i)]^{-1}$. 则辫子群操作可以通过量子态的么正演化来实现. 这样的么正算符可以用Majorana费米子表示出来:

$$\tau(T_i) = \exp\left(\frac{\pi}{4}\gamma_{i+1}\gamma_i\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \gamma_{i+1}\gamma_i) \quad (1.4)$$

第二个等式的得到利用了关系式: $(\gamma_{i+1}\gamma_i)^2 = -1$.

对于两个涡旋的情形, 可以将两个Majorana费米子组合成一个常规费米子: $\Psi = \frac{1}{2}(\gamma_1 + i\gamma_2)$. 辫子群只有一个生成元, 其对应的么正演化算符可以表示为:

$$\tau(T) = \exp\left(\frac{\pi}{4}\gamma_2\gamma_1\right) = \exp\left[i\frac{\pi}{4}(2\Psi^\dagger\Psi - 1)\right] = \exp\left(\frac{\pi}{4}\sigma_z\right) \quad (1.5)$$

其中 σ_z 是以 $(|0\rangle, \Psi^\dagger|0\rangle)$ 为基底的泡利矩阵.

如果有 $2n$ 个涡旋, 则对应 $2n$ 个局域在涡旋中心的Majorana费米子. 它们可以配对组合成 n 种常规费米子. 因为涡旋之间可以相距非常远, 这些费米子是非局域的. 每个费米子的Hilbert空间维数为2, 系统总的Hilbert空间维数为 2^n . 辫子群的表示为 $2^n \times 2^n$ 的矩阵.

以特定的方式编织这 $2n$ 个准粒子的世界线, 而最终的信息可利用一个非阿贝尔的任意子作为探测粒子通过观测不同路径的干涉效应来读取[40].

目前知道的存在非阿贝尔准粒子激发的实际物理系统是填充因子为 $5/2$ 的分数量子霍尔态[41], 但要进行所有可能的逻辑操作在它上面是不充分的[42]. 而填充因子为 $12/5$ 的分数量子霍尔态可能是充分的, 但是这样的系统非常脆弱只在最好的样品中和极低的温度下才能实现[43]. 另一个候选者是 $p_x + ip_y$ 波超导体, 在其涡旋激发的中心存在零模的Majorana费米子, 它们满足非阿贝尔的统计[39]. 到目前为止, 没有任何实验给出了非阿贝尔统计的直接证据. 在这种情况下, 如果能够找到一个简单的模型, 其准粒子激发具有非阿贝尔的统计性质, 并且模型有可能在实验上实现, 这将是一件很有意思的事情.

1.5 Kitaev模型

Kitaev模型是Alexei Kitaev为了实现拓扑量子计算而构造出来的[44]. 先前, 他构造了一个叫做toric code的模型[45]. 这个模型具有拓扑序, 它的低能激发是阿贝尔任意子. 然而阿贝尔任意子是不足以形成拓扑量子计算所需要的态空间结构的. 而且, toric code模型涉及四个自旋算符的耦合, 这一点是很难在物理上实现的. Kitaev模型只包有两自旋算符的耦合, 并且存在非阿贝尔的任意子激发, 利用它们不但可以实现量子信息的存储还可以进行各种抗干扰的量子逻辑门运算. 在某个参数极限下, Kitaev模型的有效模型即为toric code模型.

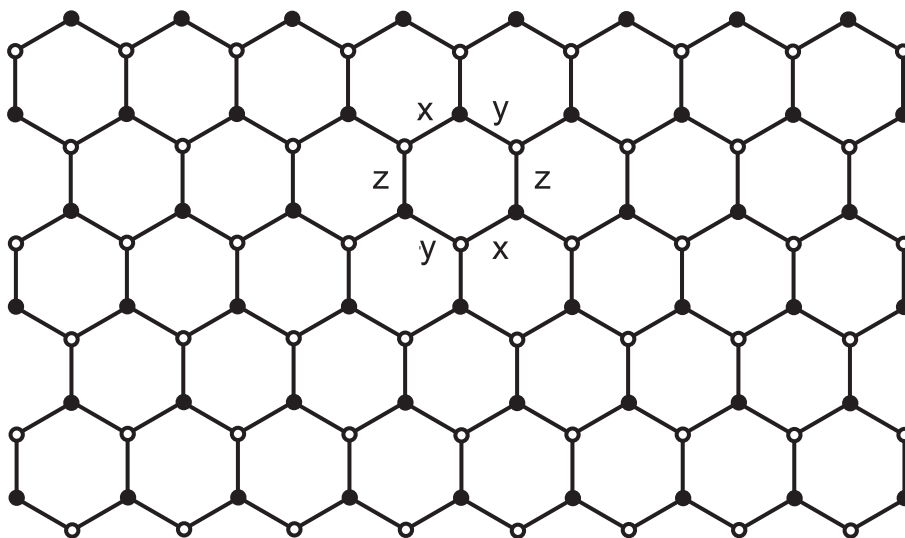


图 1.2: Kitaev 模型结构示意图. 自旋座落在格点上. 由于是六角晶格构型, 格点可以分为两套, 分别由实心点和空心点表示. 耦合只发生在不同类型的格点之间. x (y 或 z)表示相邻格点自旋分量的 x (y 或 z)耦合, 因为模型具有六角晶格的平移对称性, 我们只在一个元胞中标注了 x, y 和 z .

Kitaev模型是一个二维的量子自旋模型. 之所以称之为量子模型是因为模型中各相互作用项不对易. 模型定义在六角晶格上[见图1.2]. 在每个顶角上座落一个自旋. 顶角之间的连线表示依辛类型的自旋耦合. 根据连线的不同朝向, 可将它们分成三组, 为别对应 xx , yy 和 zz 耦合. 这些自旋在经典极限下也是有阻挫的. 即同一元胞中的自旋取向不能同时降低各相互作用项的能量.

Kitaev模型的哈密顿量为:

$$H = J_1 \sum_{\langle mn \rangle_x} \sigma_m^x \sigma_n^x + J_2 \sum_{\langle mn \rangle_y} \sigma_m^y \sigma_n^y + J_3 \sum_{\langle mn \rangle_z} \sigma_m^z \sigma_n^z \quad (1.6)$$

其中 $\langle mn \rangle_\alpha$ 表示 α ($\alpha = x, y, z$)方向的最近邻耦合, σ_m^α 为泡利算符.

本论文是关于Kitaev模型某些重要性质的系统研究. 除了它与拓扑量子计算的密切关系外, Kitaev模型的研究价值还在于以下几个方面:

首先它是一个二维量子模型, 这为我们提供了一个良好的研究平台. 许多奇异的物质状态发生在二维. 如高温超导体的母体化合物具有准二维的结构, 高温超导电性被认为主要发生在二维[19]. 量子霍尔效应产生在加了垂直磁场的二维电子气中, 整数量子霍尔效应涉及二维电子系统由于杂质的存在而发生的局域化, 分数量子霍尔效应源于相互作用电子系统的强关联, 其中出现了分数电荷和分数统计等奇特的现象[46]. 二维较之一维可以承载非平庸的拓扑结构, 较之三维更能显现量子涨落的效果.

Kitaev模型的一个重要优点是可以严格求解. 可以说非平庸的可严格求解模型是统计物理学和凝聚态物理学中的明珠. 很多物理概念的澄清是建立在对一个模型的严格求解基础上的. 如二维伊辛模型的严格解证明了在这个模型中存在二级相变并给出了各种临界指数的值, 这对于我们理解自发对称性破缺和热力学相变等都是至关重要的[9]. 格点采用砖墙构型后这个模型可以连续地从一维过渡到二维, 在每一步都可以严格求解, 这有助于我们理解维数对系统性质的影响. 另外, 对梯子系统本身的研究也给出了有意思的物理内容.

在这篇论文中, 我们主要关心模型的量子相变和拓扑序. 量子相变的研究是凝聚态物理的一大方向, 涉及高温超导体, 重费米子材料, 有机导体, 磁性材料等很多重要课题. 量子临界性已经被做为理解某些复杂系统的图象, 为人们认识强关联系统提供了一个新的视角[13]. 这个模型中的量子相变不能用朗道的对称性破缺理论来描述. 其相变不破坏哈密顿量的对称性, 并且相变点的两边都是自旋液体, 不存在一个局域的序参量. 这样的相变涉及基态拓扑序的改变. 如何刻画拓扑序和拓扑相变是目前的一个理论研究热点.

第二章 Kitaev模型

2.1 研究现状

Kitaev的具有先锋性质的文章[44]给出了模型的基态相图并且指出了模型的许多重要特性. 近来, Kitaev模型由于其具有的独特性质引起了广泛的注意, 并且获得了一定的研究进展.

利用约旦-维格纳变换, 可将由自旋构造的Kitaev模型转化为在依辛场中运动的自由Majorana费米子模型[47, 48]. 通过翻转依辛场可以产生或者消灭穿过六边形单元的 Z_2 型磁通.

固定一组磁通分布而得到的费米子模型(二维时回到Kitaev模型), 在有限条链或二维时存在拓扑量子相变. 这类相变不破坏哈密顿量的对称性, 并且没有可以表征相变的局域序参数. 对于单链, 自旋梯子和四条链的情形, 可以找到了用于刻画拓扑量子相变的弦状序参数的严格表达式[47].

在文献[48]中, Chen和Nussinov分析了各种弦状序参数, 并且将基态用原始的自旋算符作用在某个参考态上表达出来.

在有能隙相存在阿贝尔的任意子激发. Pachos详细地说明了如何操控这些阿贝尔任意子[49].

在无能隙相, 通过引入破坏时间反演对称性的三自旋耦合相, 可以打开一个能隙从而使拓扑激发成为低能激发. Lee与合作者分析了Kitaev模型中边缘激发与电荷分数化的关系[50], 指出二维中分数化量子数的出现可以约化为一维中具有分数电荷的孤立子的问题.

Baskaran和他的合作者解析地计算了Kitaev模型的动力学自旋关联函数, 发现除了最近邻点之间的关联函数, 其它的两点关联函数都为零[51]. 这个结果对于任意关联时间, 任意耦合参数以及任意温度都成立. 同时他们还指出一对静态的 Z_2 涡旋激发来自于一个局域自旋翻转量子的分数化, 这个过程产生了自由的Majorana费米子.

Yao在Kitaev模型的基础上通过加入复式结构构造了一种新的模型[52]. 新模型仍然保持可积性, 其基态自发地破坏时间反演对称性, 但保持晶格的平移对

称性, 属于手征自旋液体. 量子临界点两边的相区具有不同的Chern数, 拓扑激发在Chern数为 ± 1 的相区满足非阿贝尔统计.

Kitaev模型可以进一步被推广为一类由其基本单元—三个不同指向的自旋极化耦合—拼接而成的具有复式晶格结构的模型[53]. 将自旋用Majorana费米子算符表示后, 这些模型显示了可积性. 由于复杂的晶格结构, 模型的相图更加丰富. 不同几何构型的模型在拓扑序上也表现出微妙的差别.

2.2 物理实现

一个有现实意义的模型应该有物理的实现.

我们这个模型涉及自旋的完全极化耦合. 而一般的自旋交换机制产生的耦合作用是各向同性的, 要实现这个模型光靠自旋的直接作用是不可行的. 电子轨道角动量的波函数空间分布是各向异性的. 某些晶体材料中, 杨-泰勒机制和自旋轨道耦合的超交换机制可以分裂简并的基态从而形成如量子 120° 模型等用赝自旋算符表示的具有各向异性耦合的自旋模型[54], 但具体模型的构造受限于材料的对称性和能级结构.

光学晶格由于其独特的可控性是实现我们这个模型的一个可行方式. 通过调节作用在冷原子上的囚禁激光的强度, 频率和极化方向可以让冷原子排列成蜂窝的晶格结构并且产生所要求的极化耦合作用[55]. 另外囚禁在光学晶格中的极化分子也可以用于实现自旋各向异性耦合的模型. 这些极化分子具有偶极矩的相互作用. 转动能级的微波激发可以有效用于控制偶极矩作用的空间依赖. 最后利用分子转动能级的自旋转动劈裂, 可以让偶极矩作用自旋依赖. 利用这一机制可以实现包括Kitaev模型在内的各种自旋极化模型[56].

约瑟夫森阵列也可以用来构造有效的自旋模型[57, 58]. 由于其体积小, 操作方便, 并且具有固化和可集成的特点, 很有可能在它上面实现模型的构造, 并用于实用的目的.

下面, 我们具体介绍如何通过光学晶格中的冷原子实现Kitaev模型[55].

利用驻波激光束制造周期势: $V_{\mu\sigma} \sin^2(\vec{k}_\mu \cdot \vec{r})$, 其中 μ 表示方向, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 表示原子的两个内部自由度或称自旋. 原子感受到的势场强度是自旋依赖的. 冷原子处于势谷, 并且可以隧穿到邻近位置. 让一个格点平均占据一个原子. 当势场足够大, 温度足够低时, 冷原子处于莫特绝缘体相. 其低能哈密顿量可以写为:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (t_{\mu\sigma} a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + H.c.) + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U_\sigma n_{i\sigma} (n_{i\sigma} - 1) + U_{\uparrow\downarrow} \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1)$$

湮灭(产生)算符 $a_{i\sigma}$ ($a_{i\sigma}^\dagger$)可以是波色型的或费米型的. 由于通常玻色子易于冷却, 这里只考虑 $a_{i\sigma}$ 为波色型的情况. 隧穿强度 $t_{\mu\sigma}$ 指数依赖于 $V_{\mu\sigma}/E_R$, 其中 $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ 为原子的反冲能. 相互作用能与它们的依赖较弱. 可以通过调节势场深度 $V_{\mu\sigma}$ 很显著地改变隧穿强度 $t_{\mu\sigma}$. 让 $t_{\mu\sigma}$ 远小于各种相互作用强度, 于是可以将隧穿项作为微扰. 保留到 $t_{\mu\sigma}/U_{\uparrow\downarrow}$ 的一阶, 得到以下有效哈密顿量:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \lambda_{\mu z} \sigma_i^z \sigma_j^z - \lambda_{\mu \perp} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) \quad (2.2)$$

其中 $\sigma_j^z = n_{j\uparrow} - n_{j\downarrow}$, $\sigma_j^x = a_{j\uparrow}^\dagger a_{j\downarrow} + a_{j\downarrow}^\dagger a_{j\uparrow}$ 以及 $\sigma_j^y = -i(a_{j\uparrow}^\dagger a_{j\downarrow} - a_{j\downarrow}^\dagger a_{j\uparrow})$ 即为通常的自旋算符. 有效哈密顿量中的耦合系数满足:

$$\lambda_{\mu z} = \frac{t_{\mu\uparrow}^2 + t_{\mu\downarrow}^2}{2U_{\uparrow\downarrow}} - \frac{t_{\mu\uparrow}^2}{U_{\uparrow}} - \frac{t_{\mu\downarrow}^2}{U_{\downarrow}}, \quad \lambda_{\mu \perp} = \frac{t_{\mu\uparrow} t_{\mu\downarrow}}{U_{\uparrow\downarrow}} \quad (2.3)$$

显然, 当取 t_{\uparrow} 或 t_{\downarrow} 为零时, $\lambda_{\mu \perp} = 0$, 我们得到依辛模型.

为了实现Kitaev模型, 我们需要在平面中的三个互成 120° 的方向上构造不同类型的依辛相互作用. 为此, 在垂直方向上作用一个势场, 将这个方向上的隧穿和自旋交换作用完全抑制. 然后在平面内应用三个自旋独立的束缚势:

$$V_j(x, y) = V_0 \cos^2 \left[\frac{k}{\sqrt{3}} (x \cos \theta_j + y \sin \theta_j) \right] \quad (2.4)$$

其中 $j = 1, 2, 3$, $\theta_j = -\pi/2 + j\pi/3$. 这三束驻波激光形成的势场具有六角晶格的分布, 相邻势谷之间的势垒为 $V_0/4$.

完成了晶格结构后, 需要对相互作用的方式进行控制. 为此, 再在三个近邻的隧穿方向上应用三个势场:

$$V_{\nu\sigma}(x, y) = V_{\nu\sigma} \sin^2 [k(x \cos \theta_\nu + y \sin \theta_\nu)] \quad (2.5)$$

其中 $\nu = x, y, z$, $\theta_x = -\pi/3$, $\theta_y = \pi$, $\theta_z = \pi/3$. 这样的势不影响原子的平衡位置.

我们要求 $V_{\nu\sigma}$ 依赖于原子的自旋态:

$$V_{\nu\sigma} = V_{nu+} |+\rangle_\nu \langle +| + V_{nu-} |-\rangle_\nu \langle -| \quad (2.6)$$

其中 $|+\rangle_\nu$ ($|-\rangle_\nu$)为泡利算符 σ^ν 的本征态.

激光 L_1 和 L_2 分别作用在自旋朝上态和自旋朝下态. 它们的极化方向都垂直平面. 在z方向只施加 L_1 以产生 $V_{z\sigma}(x, y)$. 在x或y方向同时施加 L_1 和 L_2 , 但要锁定一定的相位以实现 $V_{x\sigma}(x, y)$ 和 $V_{y\sigma}(x, y)$.

激光 L_1 和 L_2 产生的势场使得原先相邻格点的势垒从 $V_0/4$ 变成了 $V'_{\nu\sigma} = V_0/4 + V_{\nu\sigma}$ 系数 V_{nu+} 和 V_{nu-} 的大小可以通过改变激光束的强度来调节. 我们可以让 ν 方向上的隧穿强度 $t_{+\nu}$ 远大于 $t_{-\nu}$. 于是根据(2.2)式, 我们在三个方向上实现了三种不同类型的依辛耦合, 即利用光格子中的冷原子实现了Kitaev模型.

2.3 砖墙构型

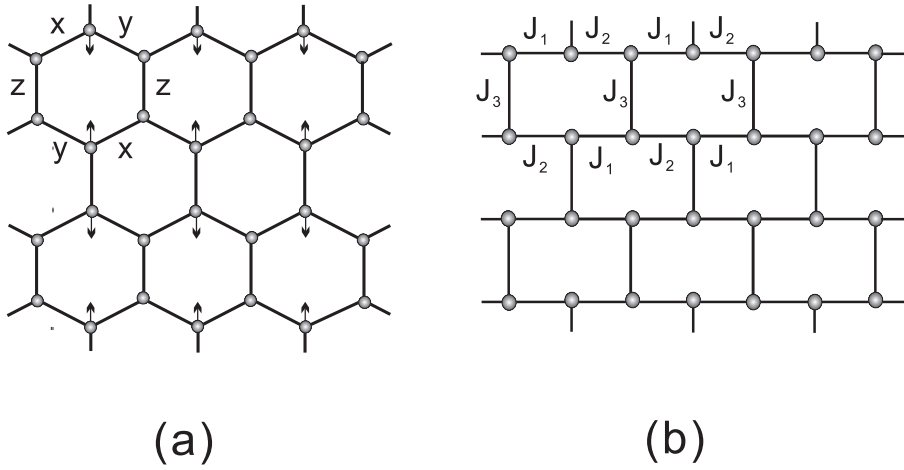


图 2.1: 从蜂窝构型到砖墙构型.(a)蜂窝构型. x , y 和 z 表示极化耦合的方向; (b)砖墙构型. J_1 , J_2 和 J_3 为耦合强度. 砖墙构型可以通过对蜂窝构型进行一定的形变得到, 它们具有相同的拓扑结构,

原始的Kitaev模型构造在蜂窝结构(六角晶格)上. 由于引入了三种耦合类型及不同的耦合强度, 模型失去了六角晶格的 C_6 转动对称性. 但还拥有在平面中互成 120° 的三个方向上的晶格平移对称性.

为了方便做约旦-维格纳变换和处理其中一个平面维度被约束时的情形, 我们将原来蜂窝状的晶格构型进行稍微的变形, 使之成为砖墙状的构型. 通过压平垂直方向的格点即可实现这种变形. 显然蜂窝结构和砖墙结构在拓扑上是等价的, 它们的每个顶角都与相邻的三个顶角相连(如图2.1).

在砖墙结构下, 我们可以方便地使用平面直角坐标来标记各个自旋的位置. 哈密顿量可以重新写成,

$$H = \sum_{n+m=even} (J_1 \sigma_{n,m}^x \sigma_{n+1,m}^x + J_2 \sigma_{n+1,m}^y \sigma_{n+2,m}^y + J_3 \sigma_{n,m}^z \sigma_{n,m+1}^z) \quad (2.7)$$

2.4 对称性

模型(2.7)具有丰富的对称性和很好的变换性质.

在时间反演下单自旋算符要变号,即 $T\sigma^\alpha T^{-1} = -\sigma^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$), 其中 T 为时间反演算符. 我们看到哈密顿量由两自旋耦合项构成, 于是, 哈密顿量在时间反演操作下保持不变. 磁场将带来单自旋作用项, 所以可以通过引入磁场来破坏时间反演对称性.

由于采用了周期性边界条件, 这个模型具有横向或纵向的晶格平移对称性. 周期为两个晶格单位, 所以可以分为奇格子和偶格子来处理. 这使得我们可以用准动量来标记哈密顿量的不同矩阵直和块.

将六边形的每个边上的作用项相乘得到块算符(plaquette operator). 可以验证它与哈密顿量对易, 是系统的守恒量. 经过化简, 块算符用自旋算符表示为

$$W_{n,m} = \sigma_{n,m}^y \sigma_{n+1,m}^z \sigma_{n+2,m}^x \sigma_{n+2,m+1}^y \sigma_{n+1,m+1}^z \sigma_{n,m+1}^x \quad (2.8)$$

为了让 $W_{n,m}$ 中的自旋属于同一个六边形, $n + m$ 必须为偶数. 由于 $W_{n,m}^2 = 1$, 块算符的好量子数为1或-1. $W_{n,m} = -1$ 表示通过所在六边形的磁通量为 π , $W_{n,m} = 1$ 则表示通过的磁通量为零. 基态与磁通分布密切相关.

类似的方式可以定义回路算符. 将回路经过的所有相互作用项连乘起来即得回路算符, 它们度量回路中总的磁通量, 是系统的守恒量. 如果将格点系统定义在环面上, 则存在三类拓扑不等价的回路算符. 第一类回路算符可以表示成包含在回路中所有块算符的乘积. 而块算符可以称为此类算符的最小回路算符, 独立的算符个数为格点数的二分之一. 另外两类分别为环绕管壁和亏格的回路. 可以论证同一类回路算符中经过同一点的两个回路算符不独立, 它们的联合作用给出第一类回路算符. 后两类中独立算符个数分别为横向和纵向的六边形数.

这个模型还具有类规范对称性(Gauge-like symmetry) [59]. 可以构造算符:

$$\hat{O}_m^z = \prod_j \sigma_{j,m}^z, \quad (2.9)$$

它为对称性算符. 显然, 如果取周期性边界条件, 它属于回路算符. 其个数为自旋链的条数. 其中 j 取遍自旋链上的所有点. 这样的算符表示让第 m 条链上的自旋一起绕 z 方向旋转180度. 在这样的操作下, 自旋 x 和 y 分量将变号, 而自旋 z 分量

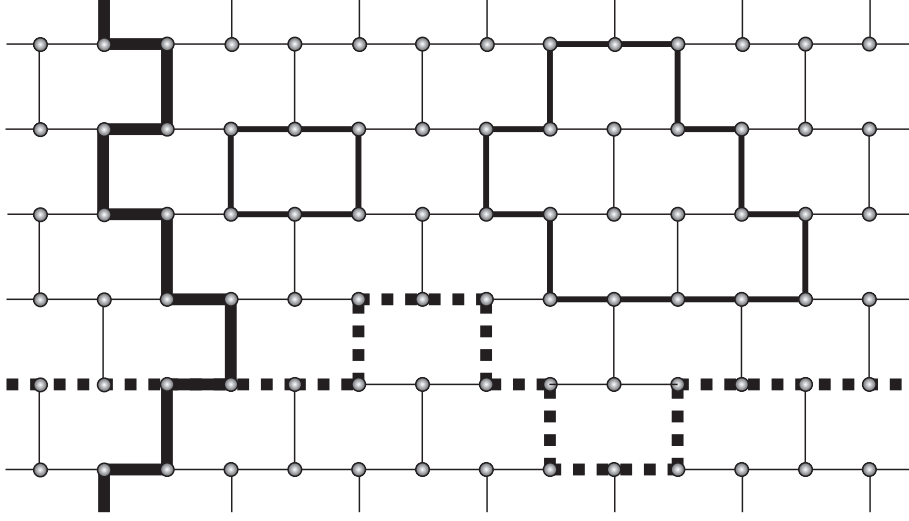


图 2.2: 黑色实线表示的是第一类回路算符, 块算符为此类的最小回路算符; 粗黑实线表示环绕圆环管壁回路算符; 粗黑虚线表示环绕圆环亏格的回路算符. 类规范对称性算符属于后两类算符.

不变号. 也就是说

$$\hat{O}_m^{-1} \sigma_{n,m}^x \hat{O}_m = - \sigma_{n,m}^x \quad (2.10)$$

$$\hat{O}_m^{-1} \sigma_{n,m}^y \hat{O}_m = - \sigma_{n,m}^y \quad (2.11)$$

$$\hat{O}_m^{-1} \sigma_{n,m}^z \hat{O}_m = \sigma_{n,m}^z \quad (2.12)$$

因为在某一行中 σ_x (或 σ_y)总是成对出现, 哈密顿量在这类算符的作用下保持不变: $\hat{O}_m^{-1} H \hat{O}_m = H$.

类规范对称性介于整体对称性和局域规范对称性之间. 它在不能被自发破缺的意义上类似于规范对称性. 然而它不是真正意义上的规范变换, 因为它可能会改变物理态(这意味着存在一个可观测量, 它在变换前后的态下取值不同)[60]. 由于哈密顿量具有如此多的对称性, 它的每个态都是高度简并的. 这些类规范对称性暗示着某些非平庸性的出现[61]. 我们这个模型中, 简并的基态之间有一个能量屏障. 引入热力学涨落后, 熵增可能大于内能降低对自由能的贡献(某些系统由于没有能量屏障, 量子涨落比如弱场的扰动就可以联系各种基态[62, 63], 绝热过程看这是一种单纯的熵增), 于是某些态的权重可能特别的大. 这种状态的选择性暗示着发生由无序导致有序的反直觉现象[64, 65, 66].

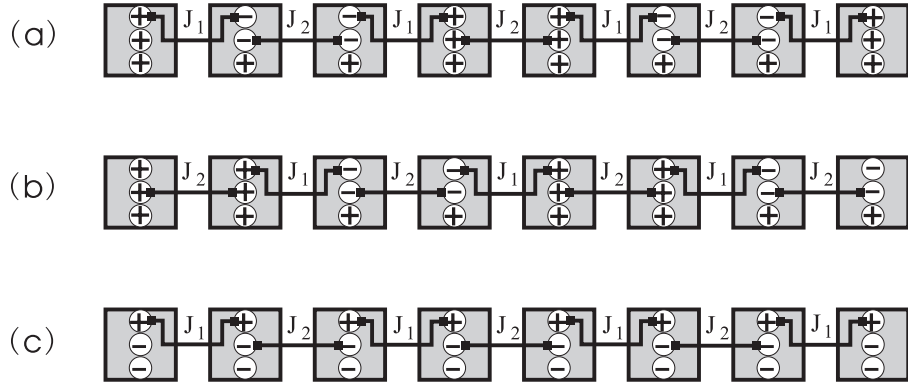


图 2.3: 大框表示格点,三个连成串的圆圈由上至下分别表示格点上自旋的三个分量 x,y 和 z . 圆圈中的正号表示不翻转, 负号表示翻转对应的自旋算符. 连接两个格点的圆圈的线表示对应自旋方向的耦合. 图中用周期性来表示不断重复的单元. (a)改变某一行 J_1 的符号; (b)改变某一行 J_2 的符号; (c)改变与某一行耦合的 J_3 的符号

通过对某组格点的自旋做转动, 我们可以改变耦合项系数 J_1 , J_2 或 J_3 的正负号. 并且这种正负号的改变可以在每行中分别进行. 如果我们要改变第 m 行的 J_1 的符号, 只需对哈密顿量做变换: $H \rightarrow \hat{O}_m^{-1} H \hat{O}_m$. 其中变换算符

$$\hat{O}_m = \prod_n \sigma_{4n-2,m}^z \sigma_{4n-1,m}^z \quad (2.13)$$

如果要改变第 m 行的 J_2 的符号, 相应的变换算符为:

$$\hat{O}'_m = \prod_n \sigma_{4n-1,m}^z \sigma_{4n,m}^z \quad (2.14)$$

下面的变换算符可以改变与第 m 行耦合的 J_3 的符号:

$$\hat{O}''_m = \prod_n \sigma_{n,m}^x \quad (2.15)$$

如图2.3所示, 格点用一个大框表示, 格点上自旋的三个分量分别用三个连成串的圆圈表示,上中下分别代表 x , y 和 z . 其中的正号表示不翻转,负号表示翻转对应的自旋算符. ($\sigma^z = e^{i\pi\sigma^z}$, 它作用在态上面表示自旋绕 z 轴旋转180度, 可以翻转 x , y 自旋的方向. 某个方向的自旋耦合用连接这两个格点中对应圆圈的线表示. 图2.3(a)表示在 \hat{O}_m 的作用下改变第 m 行 J_1 的符号, 图2.3(b)表示在 \hat{O}'_m 的作用

下改变第 m 行 J_2 的符号, 图2.3(c)表示在 \hat{O}_m'' 的作用下改变与第 m 行耦合的 J_3 的符号. 参数的正负号可以用一个规范变换联系起来. 我们知道规范变换不改变系统的物理, 这个性质给我们带来很大的方便. 下面的讨论只需在非负的参数空间中进行.

2.5 费米化

2.5.1 四费米子表示

Kitaev用四种Majorana费米子来表示一个自旋算符: $\tilde{\sigma}_j^\alpha = ib_j^\alpha c_j$ ($\alpha = x, y, z$), 其中 b_j^α 和 c_j 为Majorana费米子. 因为每对Majorana费米子算符的自由度为2, 每个自旋有两个内部自由度. 具有四个自由度的四个Majorana费米子来表示具有两个自由度的自旋, 必须加上约束. 可知

$$P_j \equiv b_j^x b_j^y b_j^z c_j \quad (2.16)$$

是系统的一组守恒量(与哈密顿量对易, 以及彼此之间对易), 并且 $P_j^2 = 1$, 即 P_j 可取1或-1. 可以验证如果约束 $P_j = 1$, 即使得 $\tilde{\sigma}_j^x \tilde{\sigma}_j^y \tilde{\sigma}_j^z = i$, 则 $\tilde{\sigma}_j^\alpha$ 具有自旋算符的所有代数性质.

在这种Majorana费米子表示下, Kitaev模型的哈密顿量成为

$$\tilde{H} = J_1 \sum_{\langle mn \rangle_x} b_m^x b_n^x c_m c_n + J_2 \sum_{\langle mn \rangle_y} b_m^y b_n^y c_m c_n + J_3 \sum_{\langle mn \rangle_z} b_m^z b_n^z c_m c_n \quad (2.17)$$

其中 \tilde{H} 表示不受约束的哈密顿量, $b_m^\alpha b_n^\alpha$ 各自独立并且与 \tilde{H} 对易, 是系统的好量子数, 于是 \tilde{H} 成为可对角化的二次型. 物理空间可以由不受约束的哈密顿量得到的状态经过如下投影得到:

$$|\Psi\rangle = \prod_j \left(\frac{1 + P_j}{2} \right) |\tilde{\Psi}\rangle \quad (2.18)$$

可以验证对所有的 j , $P_j |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$. 这种投影的方法用起来并不那么容易. 与不受约束的四种Majorana费米子所生成的空间维数相比, 物理的子空间的维数几乎是忽略不计的. 因此, 绝大多数状态是要被投影掉的, 这使得我们很难对系统的一些重要性质做出正确的判断. 例如基态的简并度和激发态的性质.

2.5.2 约旦-维格纳变换

能否找到一种不带来多余自由度的表示方法呢? 答案是肯定的. 利用约旦-维格纳变换, 将自旋算符表示成无自旋自由度的费米子算符, 可以使问题处理起来变得简单清晰. 因为无自旋费米子的希尔伯特空间维数是二, 而在 z 表象下每个自旋可取上下两种状态, 于是这种变换不带来多余的自由度.

约旦-维格纳变换的公式为[67]:

$$\begin{aligned}\sigma_j^+ &= 2a_j^\dagger \exp \left[i \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^{j-1} (\sigma_k^z + 1) \right] \\ \sigma_j^z &= 2a_j^\dagger a_j - 1\end{aligned}\quad (2.19)$$

格点坐标 (n, m) 对应公式中的 $j = N(m - 1) + n$, 其中 N 为水平方向的格点数. 对(2.7)式中的自旋做上述约旦-维格纳变换. 由于每对共轭的费米子算符 (a, a^\dagger) , 可以对应一对Majorana费米子算符 c 和 d . 为此我们作如下定义:

当 $n + m$ 为偶数时(对应图1.2中的白点):

$$c_{n,m} = i(a_{n,m}^\dagger - a_{n,m}), \quad d_{n,m} = a_{n,m}^\dagger + a_{n,m}\quad (2.20)$$

当 $n + m$ 为奇数时(对应图1.2中的黑点):

$$d_{n,m} = i(a_{n,m}^\dagger - a_{n,m}), \quad c_{n,m} = a_{n,m}^\dagger + a_{n,m}\quad (2.21)$$

显然 c 和 d 满足如下Majorana费米子算符的代数关系:

$$\begin{aligned}c_{n,m}^\dagger &= c_{n,m}, \quad d_{n,m}^\dagger = d_{n,m} \\ \{c_{n,m}, c_{n',m'}\} &= 2\delta_{n,n'}\delta_{m,m'} \\ \{d_{n,m}, d_{n',m'}\} &= 2\delta_{n,n'}\delta_{m,m'} \\ \{c_{n,m}, d_{n',m'}\} &= 0\end{aligned}\quad (2.22)$$

这样定义的好处是变换以后 d 算符只以守恒量的形式出现在哈密顿量中.

利用变换性质:

$$\sigma_{n,m}^x \sigma_{n+1,m}^x = (a_{n,m}^\dagger - a_{n,m})(a_{n+1,m}^\dagger + a_{n+1,m})\quad (2.23)$$

$$\sigma_{n,m}^y \sigma_{n+1,m}^y = - (a_{n,m}^\dagger + a_{n,m})(a_{n+1,m}^\dagger - a_{n+1,m})\quad (2.24)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{n,m}^z \sigma_{n,m+1}^z &= - (a_{n,m}^\dagger - a_{n,m})(a_{n,m+1}^\dagger - a_{n,m+1}) \\ &\quad (a_{n,m}^\dagger + a_{n,m})(a_{n,m+1}^\dagger + a_{n,m+1})\end{aligned}\quad (2.25)$$

哈密顿量在经过约旦-维格纳变换后成为:

$$H = -i \sum_{n+m=\text{even}} (J_1 c_{n,m} c_{n+1,m} - J_2 c_{n+1,2m} c_{n+2,m} + J_3 D_{n,m} c_{n,m} c_{n,m+1}) \quad (2.26)$$

其中 $D_{n,m} \equiv i d_{n,m} d_{n,m+1}$. 哈密顿量中出现的D算符定义在不同的纵向连接上,所以它们彼此对易. 又它是d算符的二次型,与哈密顿量的每一项都对易,于是与整个哈密顿量对易. 由此可知, D算符对应的物理量是守恒量, 由恒等式 $D_{n,m}^2 = 1$ 得好量子数为 ± 1 . 这样一组守恒量的存在使得哈密顿量可以被严格对角化.

2.5.3 守恒量的费米子表示

事实上块算符经过约旦-维格纳变换后成为,

$$W_n = D_{n,m} D_{n+2,m} \quad (2.27)$$

于是 $D_{n,m} = D_{n+2,m} = 1$ 和 $D_{n,m} = D_{n+2,m} = -1$ 对应同一个块算符. 对于同一个磁通分布, 每相邻两行之间的D都各自有两种选择. 为了得到基态,好量子数的选取不是任意的. 在附录中我们论证了对于Kitaev模型, 基态时通过每个六边形的磁通量为零. 如果有M条链, 则基态的简并度至少为 2^M .

至于回路算符, 经过约旦-维格纳变换后可以表示成经过回路的所有D算符的乘积. 这是因为各格点上的c算符均成对出现而约掉了. 插入 $D_{n,m}^2 = 1$, 其中 (n, m) 为所有回路所围区域中的点, 可以将回路算符用包围在回路中的块算符的乘积表示出来. 这个结果的得到比直接从自旋表示得到要清晰得多.

最后我们给出一组在费米子表象下的类规范对称性算符. 容易验证: $\prod_{n=1}^{2N} c_{n,m}$ 作用在哈密顿量上将改变与第m行有耦合的 J_3 的符号. 而我们知道, c算符作用的空间和d算符作用的空间是直积空间. 可以通过转动d算符作用的空间, 将这个负号改回来. 标记 $D_{n,m} = 1$ 的本征矢为 $|+\rangle$, $D = -1$ 的本征矢为 $|-\rangle$. 构造算符 $\hat{\Omega} = |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|$. 由本征矢 $|\pm\rangle$ 的正交完备性知 $\hat{\Omega}^2 = 1$. $\hat{\Omega}$ 的作用是翻转D的本征矢: $\hat{\Omega}|+\rangle = |-\rangle$, $\hat{\Omega}|-\rangle = |+\rangle$. 即有 $\hat{\Omega}^{-1} D \hat{\Omega} = -D$. 实际上 $d_{n,m}$ 就满足 $\hat{\Omega}_{n,m}$ 算符的所有性质,

于是下面的算符就是我们要找的类型规范对称性算符

$$\hat{O}_m = \prod_n i c_{n,m} d_{n,m} \quad (2.28)$$

在算符表达式中引入 i 是有用意的,可以验证上式中的 \hat{O}_m 就是原来用自旋算符表示的类规范对称性算符经过约旦-维格纳变换后的形式.

至此,我们构造了一组费米子表象下的对称性变换算符.这种类规范对称性普遍存在于自旋模型[68, 69],轨道模型[70, 71],以及超导阵列[72, 73]等系统中.关于类规范对称性有一些特殊的性质.对于一个具有 d 维类规范对称性的理论,它的有效维数将从原先的 D 维约化到 d 维[60].所谓 d 维对称性就是指保持哈密顿量不变的对称性算符只对 $d(d \leq D)$ 维区域的格点场量作用.我们这个模型的对称性算符由占据一整排格点位置的算符组成,说明它具有 $d=1$ 的类规范对称性,并且这种对称性是 Z_2 的(表现在它联系两个完备的群元,比如上或下,正或负,在我们这个模型中它联系 $\{D_j\}$ 和 $\{-D_j\}$.显然它是一种分立的对称变换).

Nussinov等证明对于一个有能隙的有限作用力程和强度的系统,如果它的各个基态可以用分立的 $d \leq 1$ 的类规范对称变换联系起来,则它可以在有限温度也呈现拓扑量子序[74].拓扑量子序的含义就是对于任何局域算符,它以正交的基态本征矢为基底的算符矩阵是对角矩阵(任何对角元都不为零).这正是这个模型所具有的性质.后面的章节中,我们将在此基础上,给出拓扑序的序参量表达式,在特殊情形下(例如单链,自旋梯子以及四条自旋链的构型)还可以给出解析值.

2.5.4 边界项

如果我们在自旋链方向采用的是周期性边界条件,则费米子表示的哈密顿量(2.26)在每条链的首尾相接处存在一个边界项,它与其它项具有不同的形式.在采用开边界条件时,则没有这种形式上的不同.

假定自旋链的格点数为 $2N$,则在链的首尾相接处存在两种耦合项.它们分别为 $J_2 \sigma_{2N,2m-1}^y \sigma_{1,2m-1}^y$ 和 $J_1 \sigma_{2N,2m}^x \sigma_{1,2m}^x$.经过约旦-维格纳变换后

$$\sigma_{2N,2m-1}^y \sigma_{1,2m-1}^y = -i \hat{O}_{2m-1} c_{2N,2m-1} c_{1,2m-1} \quad (2.29)$$

$$\sigma_{2N,2m}^x \sigma_{1,2m}^x = i \hat{O}_{2m} c_{2N,2m} c_{1,2m} \quad (2.30)$$

其中 $\hat{O}_m = \prod_{n=1}^{2N} \sigma_{n,m}^z = \exp \left[i \frac{\pi}{2} \sum_{n=1}^{2N} (\sigma_{n,m}^z + 1) \right]$ 即为之前定义的类规范对称性算符.这意味着边界项相对于其它作用项多带了一串与整条链有关的相因子.我们知道 \hat{O}_m 是系统的守恒量可以取1或-1两种值. $\hat{O}_m = 1$ 相当于对费米子链取反周期性边界条件,而 $\hat{O}_m = -1$ 相当于取周期性边界条件.值得注

意的是 $D_{n,m}$ 与 \hat{O}_m 不对易. 事实上它们满足反对易关系: $\{D_{n,m}, \hat{O}_m\} = 0$. 于是 $D_{n,m}$ 与它所在的链的边界项不对易. 边界项将降低取周期性边界条件的有限系统的简并度. 只有在热力学极限下, 不考虑边界效应时, 可以把 $D_{n,m}$ 作为守恒量, 本文要讨论的模型满足这样的要求.

2.6 对角化

2.6.1 傅立叶变换

如果我们关心基态, 需要确定一组属于基态的 $D_{n,m}$, 然后对二次型的哈密顿量进行对角化. Lieb证明如果一个格点电子系统满足(1)晶格可分为两套子格子, 电子的跳跃只在不同子格子之间发生;(2)跳跃矩阵具有反射对称性; (3)电子半满填充, 则能量最优的状态是通过每个四边形晶格单元的磁通量为 π , 通过每个六边形晶格单元的磁通量为零[75]. 在附录中, 我们论证了对于Kitaev模型, 虽然它描写Majorana费米子并且跳跃矩阵不具有反射对称性, 能量最优的状态即基态也要求通过每个六边形单元的磁通量为零. 于是, 基态时, 所有的 $W_{n,m}$ 等于1. 我们不妨选取以下一组 $D_{n,m}$ 来满足这样的要求,

$$D_{2n-1,2m-1} = 1, \quad D_{2n,2m} = -1 \quad (2.31)$$

考虑到在砖墙构型下, 系统的最小周期为两个晶格单位, 可以对Majorana费米子算符做如下的傅立叶变换:

$$\begin{aligned} c_{2n-1,2m-1} &= \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_1(n-\frac{1}{2})+ik_2(m-\frac{1}{2})} f_1(\mathbf{k}) \\ c_{2n,2m-1} &= \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_1 n+ik_2(m-\frac{1}{2})} f_2(\mathbf{k}) \\ c_{2n-1,2m} &= \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_1(n-\frac{1}{2})+ik_2 m} f_3(\mathbf{k}) \\ c_{2n,2m} &= \sqrt{\frac{2}{NM}} \sum_{\mathbf{k}} e^{ik_1 n+ik_2 m} f_4(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.32)$$

其中 M 和 N 分别代表横向和纵向的格点数, 而准动量 $\mathbf{k} \equiv (k_1, k_2) = (2\pi i/N, 2\pi j/M)$, i 和 j 分别从0取到 $N-1$ 和 $M-1$. 傅立叶分量 $f_l(\mathbf{k})$ ($l = 1, 2, 3, 4$)满足通常费米子

的反对易关系

$$\{f_l(\mathbf{k}), f_{l'}^\dagger(\mathbf{k})\} = \delta_{ll'} \quad (2.33)$$

$$\{f_l(\mathbf{k}), f_{l'}(\mathbf{k})\} = \{f_l^\dagger(\mathbf{k}), f_{l'}^\dagger(\mathbf{k})\} = 0 \quad (2.34)$$

以及满足相反动量算符互为共轭的关系:

$$f_l^\dagger(\mathbf{k}) = f_l(-\mathbf{k}) \quad (2.35)$$

取 N 为无穷大, 此时忽略掉边界项的差别是合理的. 经过傅立叶变换, 哈密顿量成为以准动量标识的块对角矩阵

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \psi^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{M}_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{k}) \quad (2.36)$$

$$\psi^\dagger(\mathbf{k}) = (f_1^\dagger(\mathbf{k}), f_2^\dagger(\mathbf{k}), f_3^\dagger(\mathbf{k}), f_4^\dagger(\mathbf{k})) \quad (2.37)$$

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -iu_{\mathbf{k}} & -iv_{\mathbf{k}} & 0 \\ iu_{\mathbf{k}}^* & 0 & 0 & -iv_{\mathbf{k}}^* \\ iv_{\mathbf{k}}^* & 0 & 0 & iu_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & iv_{\mathbf{k}} & -iu_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

其中 $u_{\mathbf{k}} = J_1 e^{i\frac{1}{2}k_1} + J_2 e^{-i\frac{1}{2}k_1}$, $v_{\mathbf{k}} = J_3 e^{i\frac{1}{2}k_2}$.

2.6.2 基态相图

相图可直接从模型的能谱得到. 将哈密顿量矩阵 $\mathbf{M}_{\mathbf{k}}$ 对角化后可以得到四支准粒子谱,

$$\pm |u_{\mathbf{k}} \pm iv_{\mathbf{k}}| \quad (2.39)$$

其中正负号独立选取共四种组合. 零温时, 能量为负的两支被填满, 能量为正的两支空占据. 添加一个准动量为 \mathbf{k} 的费米子需要的能量为 $|u_{\mathbf{k}} + iv_{\mathbf{k}}|$ 或 $|u_{\mathbf{k}} - iv_{\mathbf{k}}|$. 可将其明显的写为

$$E_{\mathbf{k}}^\pm = \sqrt{(J_+ \cos \frac{k_1}{2} \mp J_3 \sin \frac{k_2}{2})^2 + (J_- \sin \frac{k_1}{2} \pm J_3 \cos \frac{k_2}{2})^2} \quad (2.40)$$

其中 $J_\pm \equiv J_1 \pm J_2$. 要使准粒子激发无能隙, (2.5)式根号下的两个平方项必须同时为零, 即

$$\begin{cases} J_+ \cos \frac{k_1}{2} \mp J_3 \sin \frac{k_2}{2} = 0 \\ J_- \sin \frac{k_1}{2} \pm J_3 \cos \frac{k_2}{2} = 0 \end{cases} \quad (2.41)$$

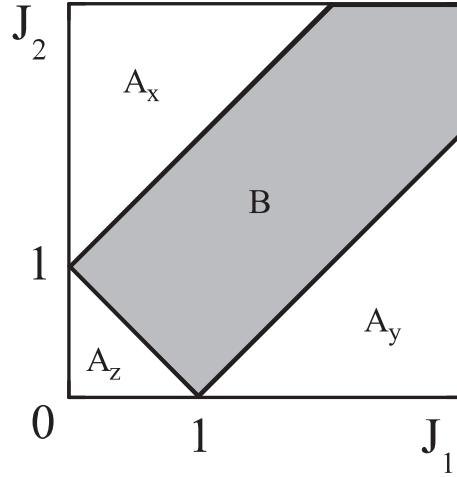


图 2.4: Kitaev模型的相图。其中阴影部分为无能隙区, 其余的三块分别为有能隙区。图中用字母标注的相区分别对应文献[44]中的相区。其中 J_3 被设成单位一。

对于二维系统, k_2 可以连续取值。上面的条件等价与三角形中的余弦公式:

$$\cos k_1 = \frac{J_3^2 - J_1^2 - J_2^2}{2J_1J_2} \quad (2.42)$$

于是, 无能隙激发的参数区域由满足三角形关系的不等式决定:

$$|J_1| + |J_2| \geq |J_3|, \quad |J_2| + |J_3| \geq |J_1|, \quad |J_3| + |J_1| \geq |J_2| \quad (2.43)$$

经过无能隙激发区域和有能隙激发区域的界限时发生二级量子相变。在 J_1 - J_2 平面的第一象限中, Kitaev模型的相图由一个无能隙相和三个不连通的有能隙相构成(见图2.4), 这与Kitaev得到的相图是一致的[44]。

2.6.3 动力学自旋关联函数

唯一非零的两自旋动力学关联函数就是定义在耦合键上的关联函数[51]。这个结论对于任意温度都成立。下面我们将用无冗余自由度的费米子表示来推导出这个性质。较之文献[51]所用的四费米子表示, 我们的方法更直接和清晰。

在有限温下的两个z分量自旋算符的虚时推迟格林函数为

$$\mathcal{G}^\beta(\tau) = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H} e^{\tau H} \sigma_j^z e^{-\tau H} \sigma_l^z]}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (2.44)$$

$$= \sum_{m,n} \langle \psi_n | \sigma_j^z | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \sigma_l^z | \psi_n \rangle \frac{e^{-\epsilon_n \beta - (\epsilon_m - \epsilon_n) \tau}}{\sum_n e^{-\beta \epsilon_n}} \quad (2.45)$$

第二个等式为关联函数的莱曼表示. 实时的关联函数可以通过如下解析延拓得到:

$$iG^\beta(t) = \mathcal{G}^\beta(it + 0^+) \quad (2.46)$$

将哈密顿量的第 m 个本征态分解为两部分,

$$|\psi_m\rangle = |D_m(j)\rangle|\psi'_m\rangle \quad (2.47)$$

其中 $|D_m(j)\rangle$ 为守恒量 $D(j) = id_1d_2$ 的本征值为 $D_m(j)$ 的本征态(j 代表某个格点位置). d_1 和 d_2 分别定义在 zz 耦合键的两端. $|\psi'_m\rangle$ 为本征态 $|\psi_m\rangle$ 的其余部分.

σ_j^z 可以用Majorana费米子算符表示成 ic_1d_1 . 利用 $D_m^2(j) = 1$ 以及Majorana费米子之间的代数关系, 我们有

$$\begin{aligned} \langle D_m(j)|d_1|D_m(j)\rangle &= D_m(j)\langle D_m(j)|d_1(id_1d_2)|D_m(j)\rangle \\ &= iD_m(j)\langle D_m(j)|d_2|D_m(j)\rangle \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \langle D_m(j)|d_1|D_m(j)\rangle &= D_m(j)\langle D_m(j)|(id_1d_2)d_1|D_m(j)\rangle \\ &= -iD_m(j)\langle D_m(j)|d_2|D_m(j)\rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

由此可得 $\langle D_m(j)|d_1|D_m(j)\rangle = 0$. Majorana费米子算符 d_1 的非零矩阵元只能是 $\langle \bar{D}_m(j)|d_1|D_m(j)\rangle$, 其中 $|\bar{D}_m(j)\rangle$ 为 $D(j)$ 的另一个本征态, 对应的本征值为 $-D_m(j)$.

如果 $\sigma_i^z \neq ic_2d_2$, $\langle \psi_n|\sigma_j^z|\psi_m\rangle$ 和 $\langle \psi_m|\sigma_i^z|\psi_n\rangle$ 中必有一个为零. 于是整个关联函数为零. 至此, 我们证明了两个 σ^z 的关联函数只在 zz 耦合键上不为零. 至于 σ^x 以及 σ^y 的关联函数, 我们可以先将其转到 z 方向, 然后进行同样的讨论.

2.6.4 拓扑激发

Kitaev模型中除了费米子类型的准粒子, 还存在另一类准粒子. 已知基态为零磁通分布, 此时所有的块算符 $W_{n,m}$ 等于1. 当某相邻两行格点之间的一串 $D_{n,m}$ 翻转后, 由于 $W_{n,m}$ 等于两个相邻的 $D_{n,m}$ 的乘积, 定义在此串两端的 $W_{n,m}$ 从1变成-1. 这意味着两端的六边形分别通过了 π 个磁通形成了一对 Z_2 涡旋. 它们可以相距足够远以至于局域在它们上面的准粒子波函数不发生重叠. 这类准粒子具有拓扑性质. 它们可以联系不同的基态. 设想将两个 Z_2 涡旋不断沿着横向拉开, 由于周期性边界条件它们最后融合在一起. 这样得到的态

仍然是系统的基态. 但与先前的基态不同, 其中某一整排 $D_{n,m}$ 改变了符号. 这类激发对应的准粒子为任意子, 它们在有能隙相满足阿贝尔统计, 而在无能隙相满足非阿贝尔统计.

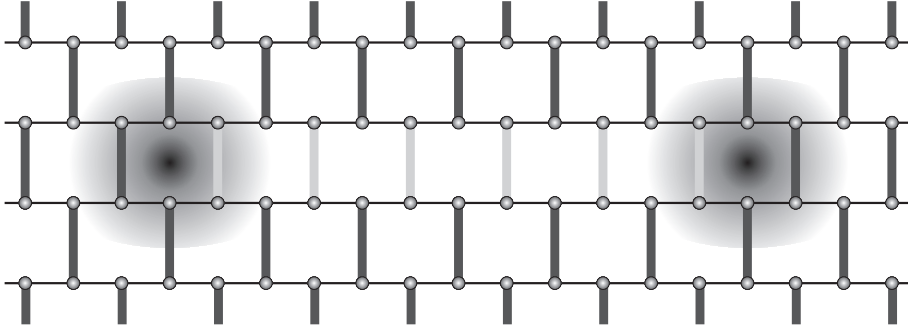


图 2.5: Kitaev模型中的拓扑激发态的卡通示意图. 灰色的粗线表示其上的 D 算符被翻转了. 在端点处形成了 π 磁通.

在说明如何控制这些任意子之前, 我们先对任意子有一个一般的认识.

任意子的统计性质介于波色子和费米子之间. 由于逆时针交换和顺时针交换一对任意子得到不同的结果, 所以任意子系统破坏宇称和时间反演对称性.

可以用一个唯象模型来描写任意子. 对于一个无相互作用的包含 N 个任意子的系统, 其模型哈密顿量为:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N (\mathbf{p}_i - q\mathbf{a}_i)^2 \quad (2.50)$$

其中 \mathbf{a}_i 为规范势, 它与多体系统的粒子分布有关.

$$\mathbf{a}_i = \frac{\Phi}{2\pi} \sum_{j \neq i} \frac{\hat{\mathbf{z}} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \quad (2.51)$$

任意子可以被理解为携带磁通的带电粒子. Φ 即为每个任意子所携带的磁通量, q 则为任意子所具有的电荷. 对于这样一个形式上简单的模型, 只当 $N = 2$ 时可以给出非平庸的解析解. 两个无相互作用任意子的基态波函数当相对距离趋向零时具有形式:

$$R \sim (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^{\frac{q\Phi}{2\pi}} \quad (2.52)$$

可见当两个任意子无限靠近时波函数趋于零, 所以这种全同的任意子是排斥的, 并且满足硬核条件. 当交换这两个任意子时, 波函数会改变一个与所带电荷和磁通有关的相因子.

如果交换两个任意子波函数只改变一个相位, 则这样的任意子被称为阿贝尔任意子. 设想有 n 个任意子构成的系统, 其波函数是 g 重简并的, 交换一对任意子可使态矢在封闭的希尔伯特空间中转动. 交换任意子1和2 我们得到 $M_{ab}\psi_b$, 交换2和3我们得到 $N_{ab}\psi_b$. 如果矩阵 M_{ab} 与 N_{ab} 不对易, 则说明这是非阿贝尔任意子, 交换它们所得到的波函数与交换它们的顺序有关.

下面我们在四个准粒子的Pfaffian态中考察一下非阿贝尔任意子的性质. Pfaffian态可以被看作 p 波配对费米子的量子霍耳态. 其准粒子的电荷为 $e/4$. 当存在 $2n$ 个准粒子时, 状态空间为 2^{n-1} 重简并[76]. 当准粒子数为4时, 存在两个独立的简并波函数:

$$\Psi_{(13)(24)}(z_j) = \prod_{j<k} (z_j - z_k)^2 \prod_j e^{-|z_j|^2/4} Pf \left(\frac{(z_j - \eta_1)(z_j - \eta_3)(z_k - \eta_2)(z_k - \eta_4) + (j \leftrightarrow k)}{z_j - z_k} \right) \quad (2.53)$$

$$\Psi_{(14)(23)}(z_j) = \prod_{j<k} (z_j - z_k)^2 \prod_j e^{-|z_j|^2/4} Pf \left(\frac{(z_j - \eta_1)(z_j - \eta_4)(z_k - \eta_2)(z_k - \eta_3) + (j \leftrightarrow k)}{z_j - z_k} \right) \quad (2.54)$$

另一种成对组合的波函数 $\Psi_{(12)(34)}$ 可以由以上两种波函数线性叠加而成:

$$\Psi_{(12)(34)} = \frac{1}{x-1} (x\Psi_{(14)(23)} - \Psi_{(13)(24)}) \quad (2.55)$$

其中 $x = (\eta_1 - \eta_4)(\eta_2 - \eta_3)/(\eta_1 - \eta_3)(\eta_2 - \eta_4)$.

将两个独立的波函数做如下组合:

$$\Psi^\pm = \frac{[(\eta_1 - \eta_3)(\eta_2 - \eta_4)]^{\frac{1}{4}}}{(1 \pm \sqrt{x})^{\frac{1}{2}}} (\Psi_{(13)(24)} \pm \sqrt{x}\Psi_{(14)(23)}) \quad (2.56)$$

当准粒子 η_1 绕 η_3 一圈(等价与交换两次)时, Ψ^+ 变成了 $i\Psi^-$ [77]. 这正是非阿贝尔任意子所具有的属性.

在Kitaev模型中, 任意子对应的物理实体为涡旋. 在同一行中产生了一对 Z_2 涡旋后, 通过逐个翻转相邻的 $D_{n,m}$ 可以对其中某个 Z_2 涡旋进行水平移动.

对于周期性边界条件, 至少同时产生一对 Z_2 涡旋, 假定它们处于 (i,m) 和 $(i+2n,m)$. 水平移动这一对涡旋, 只需对哈密顿量作用么正算符:

$$\hat{U} = d_{i,m} d_{i+2n,m} \quad (2.57)$$

回到自旋空间则为

$$\hat{U} = \sigma_j^x \exp \left[i \frac{\pi}{2} \sum_{k=i+1}^{i+2n} (\sigma_k^z + 1) \right] \quad (2.58)$$

如果要在垂直方向移动这一对 Z_2 涡旋. 需要翻转对应 Z_2 涡旋一侧与链相连的所有 D . 么正算符

$$\hat{U}' = \prod_{j=i}^{i+2n} d_{j,m} \quad (2.59)$$

可以将它们做垂直移动. 回到自旋空间则为

$$\hat{U}' = -i \sigma_{i,m}^y \left(\prod_{j=i+1}^{i+2n-1} \sigma_{j,m}^z \right) \sigma_{i+2n,m}^x \quad (2.60)$$

在费米子表示下, 我们看到模型中拓扑准粒子由 c 算符描写, 而拓扑准粒子的操控通过由 d 算符构成的么正演化算符实现.

2.6.5 磁场的作用

通常, 拓扑激发都是有能隙的. 而在无能隙相, 费米子激发是不需要能量的. 要使拓扑激发成为最低能激发, 我们需要在哈密顿量中加入某种作用项从而在费米子激发谱中打开一个能隙. 而无能隙的性质是由时间反演对称性保护的, 为了打开一个能隙我们需要加入破坏时间反演对称性的作用项[44],

$$\begin{aligned} V &= h \sum_{n+m=even} \sigma_{n,m}^x \sigma_{n+1,m}^z \sigma_{n+2,m}^y + \\ &\quad h \sum_{n+m=odd} \sigma_{n,m}^y \sigma_{n+1,m}^z \sigma_{n+2,m}^x \\ &= -ih \sum_{n,m} (-1)^{n+m} c_{n,m} c_{n+2,m} \end{aligned} \quad (2.61)$$

它由三自旋耦合项构成. 因为在时间反演下每个自旋算符反号, 这样的作用项在时间反演变换下不能保持形式不变.

V 可以来自于对磁场耦合项(2.62)的三阶微扰.

$$H_h = \sum_{n,m} (h_x \sigma_{n,m}^x + h_y \sigma_{n,m}^y + h_z \sigma_{n,m}^z) \quad (2.62)$$

费米化的 V 经过傅立叶变换后以对角元的形式加入到哈密顿矩阵 $\mathbf{M}_{\mathbf{k}}$ 中,

$$\mathbf{M}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{k}} & -iu_{\mathbf{k}} & -iv_{\mathbf{k}} & 0 \\ iu_{\mathbf{k}}^* & -\omega_{\mathbf{k}} & 0 & -iv_{\mathbf{k}}^* \\ iv_{\mathbf{k}}^* & 0 & -\omega_{\mathbf{k}} & iu_{\mathbf{k}}^* \\ 0 & iv_{\mathbf{k}} & -iu_{\mathbf{k}} & \omega_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (2.63)$$

其中新出现的量 $\omega_{\mathbf{k}} = h \sin k_1$. 此时四支准粒子谱为:

$$\pm \sqrt{|u_{\mathbf{k}} \pm iv_{\mathbf{k}}|^2 + \omega_{\mathbf{k}}^2} \quad (2.64)$$

要使准粒子激发没有能隙, 在满足(2.41)的条件下, 还要求 $\omega_{\mathbf{k}} = 0$, 即 $k_1 = 0$ 或 π . 联立这两个条件可得存在无能隙准粒子激发的参数需要满足下列等式之一:

$$J_1 + J_2 = J_3 \quad (2.65)$$

$$|J_1 - J_2| = J_3 \quad (2.66)$$

事实上, 它们就是原先无能隙相的边界线. 于是, 加了破坏时间反演对称性的作用项 V 后, 原先无能隙的相区打开了一个能隙. 拓扑激发有可能成为最低能的准粒子激发.

2.7 小结

本章对Kitaev模型进行了较为全面细致的描写. 从对它的研究现状的简短描述中可以看到, Kitaev模型还处于研究的起步阶段, 在其中还可以做大量有意思的工作. 这个模型不仅仅是一个具有理论价值的玩具模型, 它有很多种在物理系统中实现的途径, 这赋予了模型很强的现实意义.

Kitaev模型具有性质良好的对称性和守恒量. 如类规范对称性的存在意味着拓扑序, 维数约化和大量的简并基态. 块算符是模型的一个重要的守恒量, 它是模型能够被严格求解的原因. 各耦合系数前面的正负号可以由某个 $U(1)$ 变换联系起来, 这不影响系统的能谱, 于是我们可以方便地将耦合系数都设为正数.

通过约旦-维格纳变换, 我们将Kitaev模型费米化, 这种变换是一一映射, 不带来多余的自由度. 费米化后, Kitaev模型等价于在 Z_2 磁场中运动的自由Majorana费米子模型. 这为我们分析这个模型带来了很大的方便, 可以轻松地得到基态相图, 较其他文献更简洁的方式计算动力学自旋关联函数, 以及讨论加入某种破坏时间反演对称性作用项的效果.

同时本章还给出了类规范对称性算符和块算符的费米化形式, 后者与拓扑激发有直接的联系, 通过翻转块算符的本征值可以产生涡旋激发. 我们用Majorana费米子构造了移动涡旋的么正演化算符. 值得注意的是, 在我们的费米子表示下, 演化算符只涉及其中一种Majorana费米子.

第三章 一维Kitaev模型

3.1 哈密顿量

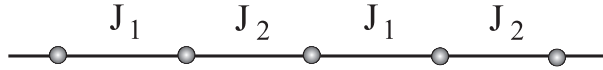


图 3.1: 一维Kitaev模型的构型示意图.

一维版本的Kitaev模型可以用如下的哈密顿量描写:

$$H = \sum_{n=1}^N (J_1 \sigma_{2n-1}^x \sigma_{2n}^x + J_2 \sigma_{2n}^y \sigma_{2n+1}^y) \quad (3.1)$$

$$= -i \sum_{n=1}^N (J_1 c_{2n-1} c_{2n} - J_2 c_{2n} c_{2n+1}) \quad (3.2)$$

如果自旋模型(3.1)取周期性边界条件, 费米化后的模型(3.2)中最后一项事实上为 $-iJ_2 \hat{O} c_{2N} c_1$, 其中 $\hat{O} = \prod_{n=1}^{2N} \sigma_n^z$. 正如之前分析过的, 算符 \hat{O} 是本征值为 ± 1 的守恒量. 其为1相当于对Majorana费米子模型(3.2)取反周期性边界条件, 而 -1 则为周期性边界条件. 这种讨论对后面的多条链情形也适用.

既然在热力学极限下边界条件不影响物理系统体的性质. 方便起见, 我们取 $\hat{O} = -1$, 即让费米子模型具有周期性边界条件.

傅立叶变换在奇数和偶数两套子晶格中分别进行,

$$c_{2n-1} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik(n-\frac{1}{2})} f_1(k) \quad , \quad c_{2n} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ikn} f_2(k) \quad (3.3)$$

逆变换为,

$$f_1(k) = \sqrt{\frac{1}{2N}} \sum_n e^{-ik(n-\frac{1}{2})} c_{2n-1} \quad , \quad f_2(k) = \sqrt{\frac{1}{2N}} \sum_n e^{-ikn} c_{2n} \quad (3.4)$$

其中 $k = 2\pi m/N$, m 取从0到 $N-1$ 的整数.

不同种傅立叶分量之间的反对易关系是显然的. 下面我们以第一种傅立叶为例验证 $k \neq 0$ 的分量满足常规费米子的反对易关系,

$$\begin{aligned} \{f_1(k), f_1^\dagger(k')\} &= \frac{1}{2N} \sum_{n,n'} e^{-ik(n-\frac{1}{2})+ik'(n'-\frac{1}{2})} \{c_{2n-1}, c_{2n'-1}\} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} e^{-ik(n-\frac{1}{2})+ik'(n'-\frac{1}{2})} \delta_{n,n'} \\ &= \frac{1}{N} \sum_n e^{-i(k-k')n} e^{i\frac{1}{2}(k-k')} = \delta_{k,k'} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \{f_1(k), f_1(k')\} &= \frac{1}{2N} \sum_{n,n'} e^{-ik(n-\frac{1}{2})-ik'(n'-\frac{1}{2})} \{c_{2n-1}, c_{2n'-1}\} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,n'} e^{-ik(n-\frac{1}{2})-ik'(n'-\frac{1}{2})} \delta_{n,n'} \\ &= \frac{1}{N} \sum_n e^{-i(k+k')n} e^{i\frac{1}{2}(k+k')} = \delta_{k,-k'} \end{aligned} \quad (3.6)$$

其中利用了Majorana费米子算符的代数关系 $\{c_n, c_{n'}\} = \delta_{n,n'}$, 以及它的自轭米性. (3.6)式说明: (1) $\{f_1(k), f_1(k)\} = 0$; (2) $f_1(-k) = f_1^\dagger(k)$. 的确,

$$f_1^\dagger(k) = \sqrt{\frac{1}{2N}} \sum_n e^{-i(-k)(n-\frac{1}{2})} c_{2n-1} = f_1(-k) \quad (3.7)$$

从这个关系式我们知道 $k = 0$ 的分量仍为Majorana费米子.

傅立叶变换以后, 哈密顿量在倒格子空间可以写成块对角的形式,

$$H = \sum_k \begin{pmatrix} f_1^\dagger(k) & f_2^\dagger(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -iu_k \\ iu_k^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(k) \\ f_2(k) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

其中 $u_k = J_1 e^{\frac{1}{2}ik} + J_2 e^{-\frac{1}{2}ik}$.

原则上 $k = 0$ 的傅立叶分量应该单独处理. 然而准动量为零的成分可写成对角化的形式,

$$-i(f_1(0)f_2(0) - f_2(0)f_1(0)) = F_0^\dagger F_0 - F_0 F_0^\dagger \quad (3.9)$$

其中 $F_0 \equiv f_1(0) - if_2(0)$ 是常规的费米子算符, 所以 $k = 0$ 的成分与 $k \neq 0$ 的成分对能谱的贡献是同一形式的. 于是我们将统一处理各种傅立叶成分. 将用 k 标记的二维方阵对角化, 得到上下两支能谱:

$$E_k^\pm = \pm \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos k} \quad (3.10)$$

系统在 $J_1 = J_2$ 时有无能隙的激发. 零温时, 下面的那支能谱 E_k^- 被填满得到基态. 其能量密度 $\varepsilon_0 = \frac{1}{N} \sum_k E_k^-$. 绝对零度时, 基态能量即为系统的自由能, 可以通过考察基态能量密度对参数的导数来研究系统的量子相变. ε_0 对 J_1 的一阶偏导数是连续的, 其两阶偏导数为:

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_0}{\partial J_1^2} = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{J_2^2 \sin^2 k}{(J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos k)^{\frac{3}{2}}} \quad (3.11)$$

从图(3.2)中可以知道在 $J_1 = 1$ (即 $J_1 = J_2$) 处基态能量密度对耦合强度的二阶导数发散. 所以 $J_1 = J_2$ 是两级量子相变点. 当 $|J_1 - J_2| \ll 1$ 时, 求和式的主要贡献来自 $k = \pi$ 附近的成分, 以 $k = \pi$ 为中心将 $\sin k$ 展开到一阶项, $\cos k$ 展开到二阶项, 并求和化积分得,

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_0}{\partial J_1^2} \sim \frac{\ln |J_1 - J_2|}{(J_1 J_2)^{3/2}} \quad (3.12)$$

由此可知, 当 J_2 趋近 J_1 时, 自由能的两阶导数以对数的形式发散.

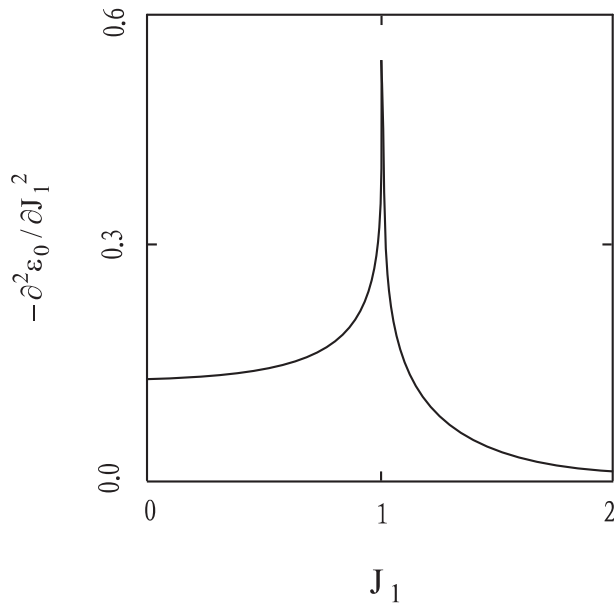


图 3.2: 基态能量密度对耦合强度的二阶导数, 在 $J_1 = 1$ 处导数值发散. 图中已将 J_2 设为为单位的.

3.2 重整化群分析

为了对系统的低能行为有进一步认识, 接下来用动量空间重整化群的方法来研究这个模型[78]. 它的主要思想是将系统的高频部分(即细节)积掉, 重新标

度参数使作用量形式保持不变, 这样就能看到, 在能量逐渐降低的过程中哪些作用项变得重要, 哪些可以被忽略. 参看附录中关于动量重整化的过程, 我们得到一组重整化群方程,

$$\begin{cases} \frac{d}{dl} \ln |J_1 - J_2| = 1 \\ \frac{d}{dl} (J_1 J_2) = 0 \end{cases} \quad (3.13)$$

这里 l 是跑动参数, l 逐渐增大表示重整的进行. 根据方程我们得到如下解,

$$J_1/J_2 = \begin{cases} \frac{1}{4c_2} (\sqrt{(c_1 e^l)^2 + 4c_2} + c_1 e^l)^2, & J_1^0 > J_2^0 \\ \frac{1}{4c_2} (\sqrt{(c_1 e^l)^2 + 4c_2} - c_1 e^l)^2, & J_1^0 < J_2^0 \end{cases} \quad (3.14)$$

其中 $c_1 \equiv J_1^0 J_2^0$, $c_2 \equiv |J_1^0 - J_2^0|$, J_1^0 和 J_2^0 为重整化前的参数值. 当初始的耦合参数 J_1^0 大于 J_2^0 时, J_1/J_2 将重整到无穷大, 也就是说, J_2 所在的那一项是无关算符, 而 J_1 所在的那一项是相关算符, 系统的低能行为由它体现. 反之, J_1^0 大于 J_2^0 时, J_1/J_2 将重整到零, 也就是说, 此时 J_2 所在的那一项是主要的. 从以上分析我们看到, $J_1/J_2 = 1$ 是不稳定不动点, 重整化流在点的右侧向右边流, 在点的左侧向左边流; $J_1 = 0$ 是稳定不动点, 重整化流只流进不流出(见图3.3的横轴).

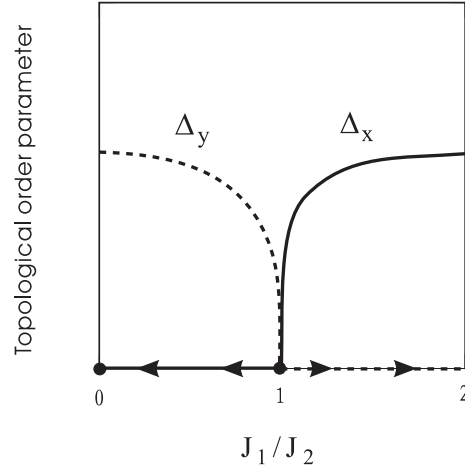


图 3.3: 横轴上的箭头表示重整化流的方向, 在 $J_1/J_2 = 1$ 处的点是不稳定不动点; 纵轴表示拓扑序参数的大小, 实线代表 Δ_x , 虚线代表 Δ_y . 注意 $J_1/J_2 > 1$ 处 $\Delta_y = 0$, $J_1/J_2 < 1$ 处 $\Delta_x = 0$.

3.3 拓扑序参数

系统序参数的一个直观的选择是:

$$\langle \hat{m} \rangle_0 = \langle \sigma_{2n-1}^x \sigma_{2n}^x - \sigma_{2n}^y \sigma_{2n+1}^y \rangle_0 \quad (3.15)$$

它在对称性变换 $\hat{O} \equiv \prod_{k=1}^{2N} \sigma_k^z$ 的作用下保持不变(因为 $\hat{O} \hat{m} \hat{O}^{-1} = \hat{m}$). $\langle \hat{m} \rangle_0$ 表征偶数键和奇数键耦合的相对大小, 并且在临界点 $J_1 = J_2$ 处等于零. 这种序参数类似于轨道罗盘模型(orbital compass model)中的向列状序参数[59]. 但它不是真正意义上的序参数, 真正的序参数应该定量上表征系统在参数空间中某个序的强弱, 于是经过相变序参数将有从零到非零的转变(相变意味着一种序的消亡或产生). 而 $\langle \hat{m} \rangle_0$ 只在相变点为零不满足序参数的基本特征.

事实上我们找不到能表征发生在 $J_1 = J_2$ 处相变的局域序参量. 也就是说相变点两边都是自旋无序相, 并且这种相变不伴随对称性的破缺. 如何来刻画这两种不同的自旋无序相呢? 可以利用对偶变换来寻找答案.

对偶变换是一种非局域的么正变换, 在这种变换下[79, 80],

$$\sigma_j^x \rightarrow \tau_{j-\frac{1}{2}}^z \tau_{j+\frac{1}{2}}^z, \quad \sigma_j^z \rightarrow \prod_{k=j}^{2N} \tau_{k+\frac{1}{2}}^x \quad (3.16)$$

其逆变换为,

$$\tau_{j+\frac{1}{2}}^x \rightarrow \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z, \quad \tau_{j+\frac{1}{2}}^z \rightarrow \prod_{k=1}^j \sigma_k^x \quad (3.17)$$

其中 $\tau_{j+\frac{1}{2}}^x$ 是定义在对偶空间格点 $\{j + \frac{1}{2}\}$ 上的自旋算符. 从定义式可知, $\tau_{j+\frac{1}{2}}^x$ 测度原来空间的近邻自旋排列, $\tau_{j+\frac{1}{2}}^z$ 在原来空间中的作用是反转所有格点坐标小于等于 j 的自旋的指向, 即产生一个kink. 对偶空间中的自旋有序, 对应原来空间的扭结(kink)凝聚.

为了方便做对偶变换, 让模型中的自旋算符绕自旋空间x轴旋转 90° , 即做如下规范变换,

$$\sigma_j^z \rightarrow \sigma_j^y, \quad \sigma_j^y \rightarrow -\sigma_j^z, \quad \sigma_j^x \rightarrow \sigma_j^x \quad (3.18)$$

于是, 自旋哈密顿量变为

$$H = \sum_{n=1}^N (J_1 \sigma_{2n-1}^x \sigma_{2n}^x + J_2 \sigma_{2n}^z \sigma_{2n+1}^z) \quad (3.19)$$

经过对偶变换,并且重新标记格点: $\{2n + \frac{1}{2}\} \rightarrow \{n\}$, 我们得到对偶的哈密顿量

$$H_{dual} = \sum_{n=1}^N (J_1 \tau_{n-1}^z \tau_n^z + J_2 \tau_n^x) \quad (3.20)$$

这是一个标准的横场依辛模型. 它经常被作为最小可解量子模型来澄清概念和理论计算. 已知的结果告诉我们[13], 它在 $J_1 = \pm J_2$ 处有两个规范等价的临界点. 在临界点附近准粒子激发具有相对论形式: $E^2 = m^2 + v^2 k^2$. 其中质量 $m = |J_1 - J_2|$, 速度 $v = J_1$. 由于我们对模型做的是规范变换和么正变换, 以上结果与从原来模型得到的完全一致.

交错的z方向磁化强度 $M = (-1)^n \langle \tau_n^z \rangle_0$ 可以作为横场依辛模型的局域序参数. 当 $J_1 < J_2$ 时是自旋无序相, 即 $M = 0$. 当 $J_1 > J_2$ 时, 模型拥有长程的自旋关联[81]

$$\lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \tau_n^z \tau_{n'}^z \rangle_0 = (-1)^{n-n'} (1 - J_2^2/J_1^2)^{\frac{1}{4}} \quad (3.21)$$

这意味着, 当某一位置的自旋极化方向确定后, 离它足够远的无穷多个自旋的极化方向也同时确定了, 系统具有长程序. 一旦 Z_2 对称性破缺后, 就出现一个非零的局域序参数 $M \equiv \langle \tau \rangle$, M 即为磁化强度. 此时 $\langle \tau_n^z \tau_{n'}^z \rangle_0 \sim M^2$. 也就是说,

$$M \sim (J_1 - J_2)^{\frac{1}{8}} \quad (3.22)$$

在量子相变中耦合强度的地位等同于热力学相变中的温度, 从上式可知, 磁化强度的临界指数 $\beta = \frac{1}{8}$, 与二维依辛模型的相应临界指数一致[82]. 这是自然的, 因为它们属于同一普适类(关于这两类模型的等价性在文献[83]中有详细的说明).

横场依辛模型的对偶模型没有明显的对称性自发破缺, 为了研究它的相变性质, 我们不事先破缺横场依辛模型的 Z_2 对称性, 直接处理自旋的长程关联函数. 首先改回格点的标记: $\{n\} \rightarrow \{2n + \frac{1}{2}\}$, 然后对关联函数 $\langle \tau_{2n+\frac{1}{2}}^z \tau_{2n'+\frac{1}{2}}^z \rangle_0$ 中的自旋算符做逆对偶变换. 在对偶空间的两体关联在原先空间对应一串算符的关联:

$$\Delta_x \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{k=2n+1}^{2n'} \sigma_k^x \rangle_0 = (-1)^{n-n'} (1 - J_2^2/J_1^2)^{\frac{1}{4}} \quad (3.23)$$

这个关联函数的算符由从奇数格点连乘到偶数格点的自旋算符 σ^x 构成(其中 σ^x 是最原始模型中的算符), 并且要求算符串足够长. 这是一种非局域的物理量, 它的作用是产生一对相距无穷远的扭结和反扭结, 反映了基态波函数的拓扑

结构,称之为拓扑序参数. 以上表达式在 $J_1 > J_2$ 时成立, 当 $J_1 < J_2$ 时, $\Delta_x = 0$. 我们可以看到, $J_1 = J_2$ 正是序参量从零到非零的转变点, 标志一个连续相变的发生. 拓扑序参数 Δ_x 可以用来刻画 $J_1 > J_2$ 相区. 如果取 σ^x 的本征矢作为基矢, 在这个相区中基态倾向于取某类基矢, 这些基矢具有共同的特征: 从奇数格点到偶数格点的自旋算符 σ^x 的本征值连乘为同号.

在Majonara费米子表示下, 拓扑序参数可以写为:

$$\Delta_x \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} (-i)^{n-n'} \langle \prod_{k=2n+1}^{2n'} C_k \rangle_0 \quad (3.24)$$

同样的过程可以得到刻画 $J_1 < J_2$ 相区的拓扑序参数. 这一点在对一维Kitaev模型(3.1)做了如下规范变换后变得非常明显,

$$\sigma_j^x \rightarrow \sigma_j^y, \quad \sigma_j^y \rightarrow -\sigma_j^x, \quad \sigma_j^z \rightarrow \sigma_j^z \quad (3.25)$$

与规范变换前的区别是, J_1 和 J_2 的位置互换了, 并且自旋 x 分量的耦合从偶数格点开始. 于是, $J_2 > J_1$ 时存在拓扑序参数

$$\begin{aligned} \Delta_y &\equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{k=2n}^{2n'-1} \sigma_k^y \rangle_0 = \lim_{n-n' \rightarrow \infty} i^{n-n'} \langle \prod_{k=2n}^{2n'-1} C_k \rangle_0 \\ &= (-1)^{n-n'} (1 - J_1^2/J_2^2)^{\frac{1}{4}} \end{aligned} \quad (3.26)$$

值得注意的是这个关联函数的算符由从偶数格点连乘到奇数格点的自旋算符 σ^y 构成(其中 σ^y 是最原始模型中的算符). 序参数 Δ_y 在 $J_2 > J_1$ 时不为零, 在 $J_2 \leq J_1$ 时为零. 如图(3.3), 序参数在接近相变点时以很陡的方式($\Delta_{x(y)} \sim |J_1 - J_2|^{\frac{1}{4}}$)趋向于零.

以上这些严格结果是从一维Kitaev模型的对偶模型横场依辛模型中得到的(当然我们也可以通过别的途径计算拓扑序, 见附录E). 横场依辛模型是最小的呈现量子相变的模型. 在这个意义上讲, 作为它的对偶模型一维Kitaev模型是最小的呈现拓扑量子相变的模型.

3.4 拓扑数

我们还可以通过计算动量空间的拓扑数来说明用 Δ_x 和 Δ_y 描写的这两个相具有不同的拓扑结构.

对于一个 $2n$ 维实哈密顿量, 如果它与某个矩阵, 比如说 τ_2 , 反对易, 则存在整数不变量[84]

$$N_2 = -\frac{1}{4\pi i} \text{tr} \oint dk \tau_2 H^{-1} \nabla_k H \quad (3.27)$$

动量积分的回路取动量在哈密顿量中的一个周期. 加入任何不破坏时间反演对称性的相互作用, 即保持哈密顿量与虚数矩阵 τ_2 的反对易关系是不会改变这个整数不变量的. 如果它不等于零, 则拓扑序参数空间的路径不能连续收缩到一点, 反映哈密顿量在积分回路中的零点(哈密顿量在动量空间可以没有零点, 积分回路中的零点存在于复平面中.), 称之为匝数(winding number)[85].

我们的哈密顿量通过一个么正变换可以写成以下形式

$$H_k = g_x \sigma^z + g_y \sigma^x \quad (3.28)$$

其中 $g_x = (J_1 - J_2) \sin \frac{k}{2}$, $g_y = (J_1 + J_2) \cos \frac{k}{2}$. 显然哈密顿量与 σ^y 反对易. 动量回路取 -2π 到 2π . 经过化简,

$$\begin{aligned} N_2 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-2\pi}^{2\pi} dk \frac{g_x g'_y - g_y g'_x}{g_x^2 + g_y^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk \frac{J_1^2 - J_2^2}{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos k} \end{aligned}$$

令 $z = e^{ik}$, 则 $\cos k = \frac{1}{2}(z + z^{-1})$, $dk = -iz^{-1} dz$, 对 z 的积分回路为单位圆.

$$N_2 = \frac{1}{2\pi i} \oint dz \frac{J_1^2 - J_2^2}{J_1 J_2 z^2 + (J_1^2 + J_2^2)z + J_1 J_2}$$

在复平面上存在两个一阶极点 $z_1 = -\frac{J_1}{J_2}$ 和 $z_2 = -\frac{J_2}{J_1}$. 当 $J_1 > J_2$, z_2 在积分回路中, 对应留数1; 当 $J_2 > J_1$, z_1 在积分回路中, 对应留数-1. 也就是说, $J_1 > J_2$ 相区的匝数为1. 相应地, $J_2 > J_1$ 相区的匝数为-1. 它们具有不同的拓扑示性数.

3.5 关于拓扑序的一些讨论

以上分析说明, 对于一维Kitaev模型, 它具有隐藏的 Z_2 对称性, 无需破缺这个对称性(从不存在局域序参量的意义上说它不会发生自发的对称性破缺, 否则根据朗道的相变理论, 破缺将产生一个局域的序参量, 它在原先高对称性时为零, 破缺以后不为零), 我们得到一个可以用来表征不同相的序参量, 只不过它不是局域量的期望值, 而是一串算符的期望值. 它的大小表示拓扑序的强弱(虽然

拓扑示性数也可以区分不同的相, 但它不具有表示序强弱的性质). 另外从对偶空间看, 横场依辛模型在零温将发生 Z_2 对称性的自发破缺, z 方向的磁化强度即为通常意义上的朗道序参量. 我们知道对偶模型具有相同的能谱结构, 从这里看到能谱不蕴含特定的拓扑结构[74](或参看[86]). 具有拓扑序的系统与不具有拓扑序的系统可以有相同的能谱. 它们由一个么正变换联系起来. 往往这样变换是非局域的. 这是可以理解的, 因为拓扑结构包含在基态波函数里, 而波函数是表象依赖的, 在某些表象下波函数可以呈现特定的拓扑结构. 拓扑序并不是很神秘的东西, 它只是某种表象编织起来的结构. 换一种表象, 这种结构自然可能被瓦解, 此时相变又可以用对称性破缺的机制来描述, 正如将一维Kitaev模型对偶到横场依辛模型时所表现的, 其它一个已知的例子是三维 Z_2 规范理论对偶到三维依辛模型[87]. 后者当温度低于临界值时拥有局域磁序.

那么为什么对偶模型中一个发生对称性的自发破缺另一个可以不发生呢? 我们知道对称性的自发破缺是一种物理过程(数学上并没有这样的要求), 它反映在物理观测量上. 是否发生自发破缺可以由下面的式子判断[60]:

$$\langle f(\phi_i) \rangle = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f(\phi_i) \rangle_{h,N} \quad (3.29)$$

其中热力学极限($N \rightarrow \infty$)和对称性破缺场的微扰极限($h \rightarrow 0$)的顺序是至关重要的. 局域的物理量 $f(\phi_i)$ 在完整对称群下的平均值为零. 如果 $f(\phi_i)$ 在如上极限过程后有非零值, 则系统发生了自发的对称性破缺. 现在来回答提出的问题. 在对偶模型中, 场量发生了变化, 局域量 $f(\phi_i)$ 在对偶模型中可能变成非局域的, 关于是否自发破缺的判断式就无效了. 需要在对偶模型中找局域物理量进行判断, 这样就可能得到性质不同的结果.

3.6 零模及其对应的边缘态

边缘态是一种无能隙激发的模式. 它不影响物理系统整体的性质, 但会带来可观测的物理效应. 量子霍尔效应中的边缘态承载两个电极之间疏运的电流[88]. 用扫描隧道显微镜可以观测到铜(111)平面中台阶处的边缘态[89]. 边缘态还存在于满足锯齿型(zigzag)边界条件的单层石墨带中[90], 但如果把边界条件改为扶手椅型(armchair)则不存在边缘态.

下面我们将通过对费米化后的一维Kitaev模型(3.2)的系统研究来分析边缘

态存在的条件和形式. 具有奇数格点的哈密顿量为:

$$H_{odd} = -i \sum_{n=1}^N (J_1 c_{2n-1} c_{2n} + J_2 c_{2n+1} c_{2n}) \quad (3.30)$$

用Majorana费米子算符构造常规的费米子算符: $\eta_k = \sum_{n=1}^{2N+1} f_{k,n} c_n$, 使得哈密顿量可以表示为对角形式

$$H = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + constant \quad (3.31)$$

η_k 与哈密顿量的对易式即为本征方程,

$$[\eta_k, H] = \Lambda_k \eta_k \quad (3.32)$$

如果我们关心零模(zero mode), 将 Λ 设成0(为了方便,不引起误会的情况下已将区分不同本征值的下标 k 省略), 再将 η 的表达式代入本征方程, 得

$$\sum_{n=1}^{N+1} [(J_1 f_{2n} + J_2 f_{2n-2}) c_{2n-1} - (J_1 f_{2n-1} + J_2 f_{2n+1}) c_{2n}] = 0 \quad (3.33)$$

其中令超出定义域的 f_n 为零. 要使等式成立, 每个 c 算符前面的系数必须为零, 从而得到一组递推方程,

$$\begin{aligned} J_1 f_{2n} + J_2 f_{2n-2} &= 0 \\ J_1 f_{2n-1} + J_2 f_{2n+1} &= 0 \end{aligned}$$

其中 n 从1取到 $N+1$, 并且满足边界条件: $f_0 = 0$ 和 $f_{2N+2} = 0$. 从 $n = 1$ 的方程得 $f_2 = 0$, 再根据递推关系得所有偶数下标的系数 $f_{2n} = 0$. 对于奇数下标的系数有:

$$f_{2n+1} = \left(-\frac{J_1}{J_2}\right)^n f_1 \quad (3.34)$$

其中 f_1 作为归一化的系数取作: $\frac{1}{2} \left(\sum_{j=0}^N \left(-\frac{J_1}{J_2}\right)^j\right)^{-1}$.

以上分析可知, 当 $J_1 < J_2$ 时, 零模对应从链首指数振荡衰减的边缘态; 当 $J_1 > J_2$ 时, 零模对应从链尾指数振荡衰减的边缘态. 数值结果参看图(3.4). 其中a图为本征值谱, 可以看到在能量为零的地方有一个能级, 其它的态都被

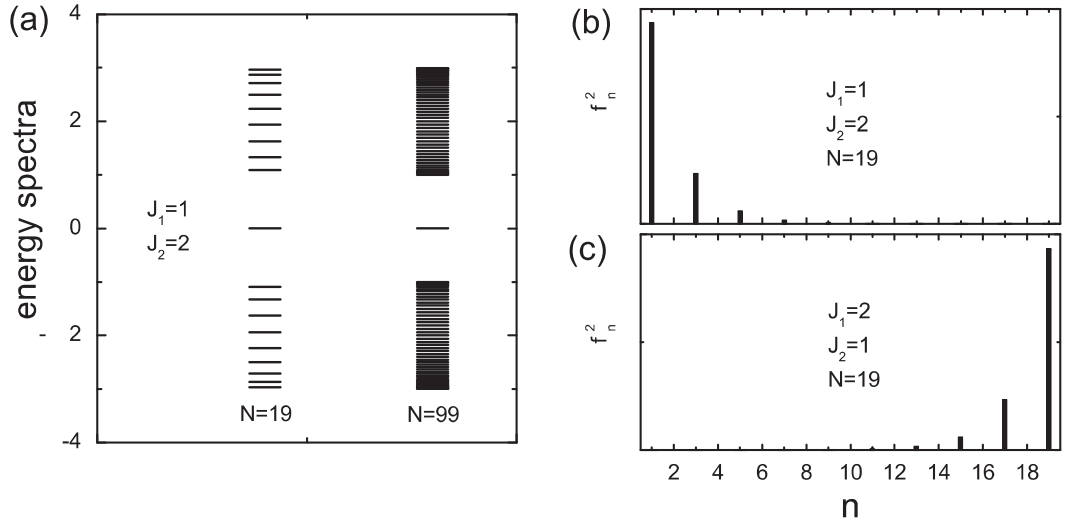


图 3.4: 奇数格点链的本征谱和边缘态. (a)19和99个格点的能谱, 各有一个零模存在; (b),(c)零模所对应的波函数模方(没有归一化).

一个有限的能隙隔开. 当 $J_1 < J_2$ 时, J_1 打头的链首是软化的, 存在一个指数衰减的边缘态; 当 $J_1 > J_2$ 时, 链首是刚性的, 边缘态存在于以 J_2 结束的链尾. 值得注意的是这里边缘态对应的准粒子算符满足 $\eta^\dagger = \eta$, 即它是实费米子算符或称Majorana费米子算符.

对于偶数格点的自旋链, 只需在奇数格点链的最后加上一项即可,

$$H_{\text{even}} = H_{\text{odd}} + J_1 c_{2N+1} c_{2N+2} \quad (3.35)$$

此时零模的递推方程为

$$\begin{aligned} J_1 f_{2n-1} + J_2 f_{2n+1} &= 0 \\ J_1 f_{2n+2} + J_2 f_{2n} &= 0 \end{aligned}$$

n 从1取到 $N+1$, 并且满足边界条件: $f_0 = 0$ 和 $f_{2N+3} = 0$. 对于任何有限的 N 不存在非零解, 只存在一个平庸的零解 $f_n = 0 (n=1, \dots, 2N+2)$.

为了研究热力学极限下 ($N \rightarrow \infty$) 的零模, 我们需要考察能量绝对值为最小的本征态随系统尺度的变化. 为此我们写下哈密顿量以实空间Majorana算符为

基底的矩阵.

$$iB = i \begin{pmatrix} 0 & J_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -J_1 & 0 & -J_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & J_2 & 0 & J_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_1 & 0 & -J_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -J_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J_2 & 0 & J_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -J_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

显然B是实矩阵,并且 $B^T = -B$,而*i*B为厄米矩阵.

本征方程可以写为: $iB(u + iv) = \lambda(u + iv)$. 其中u和v都是实矢量. 实部和虚部分别相等得到两个方程,

$$Bu = \lambda v \quad (3.37)$$

$$Bv = -\lambda u \quad (3.38)$$

做变换 $v \rightarrow -v, \lambda \rightarrow -\lambda$, 以上方程组形式保持不变. 于是如果 $u + iv$ 是 *i*B 的本征值为 λ 的本征矢, 则 $u - iv$ 是 *i*B 的本征值为 $-\lambda$ 的本征矢.

由属于具有本征值的本征矢 $u + iv$ 与 $u - iv$ 的正交性:

$$(u + iv)^\dagger (u - iv) = u^T u - v^T v - i(v^T u + u^T v) = 0 \quad (3.39)$$

可知 $|u| = |v|, u \cdot v = 0$. 于是 u, v 可以同时被归一化, 并且 u 和 v 正交.

以上分析告诉我们, 对于这样的系统本征值总是正负成对出现. 如果存在能量无限接近零的一对本征能级, 它们的本征矢就可以通过重新组合变成一对实本征矢 $\sqrt{2}u, \sqrt{2}v$. 而实本征矢对应的准粒子算符为 Majorana 费米子算符. 也就是说, 如果存在一对零模, 则它们可以被看作是一对 Majorana 费米子态.

将哈密顿矩阵(3.36)数值对角化可以得到本征谱和相应本征值对应的本征矢. 图3.5.(a)是各种偶数格点链的本征值谱, 从中可以看到, 有限链长时不存在零模, 但在准连续能带的带隙中间存在一对孤立的态, 称之为能隙态(mid-gap state). 随着链长的增加, 这对能隙态向零能靠拢, 最后成为简并的零模态. 它们的波函数可以表示为 $u_0 \pm iv_0$, 表示粒子出现几率密度的波函数模方 $u_0^2 + v_0^2$ 在实

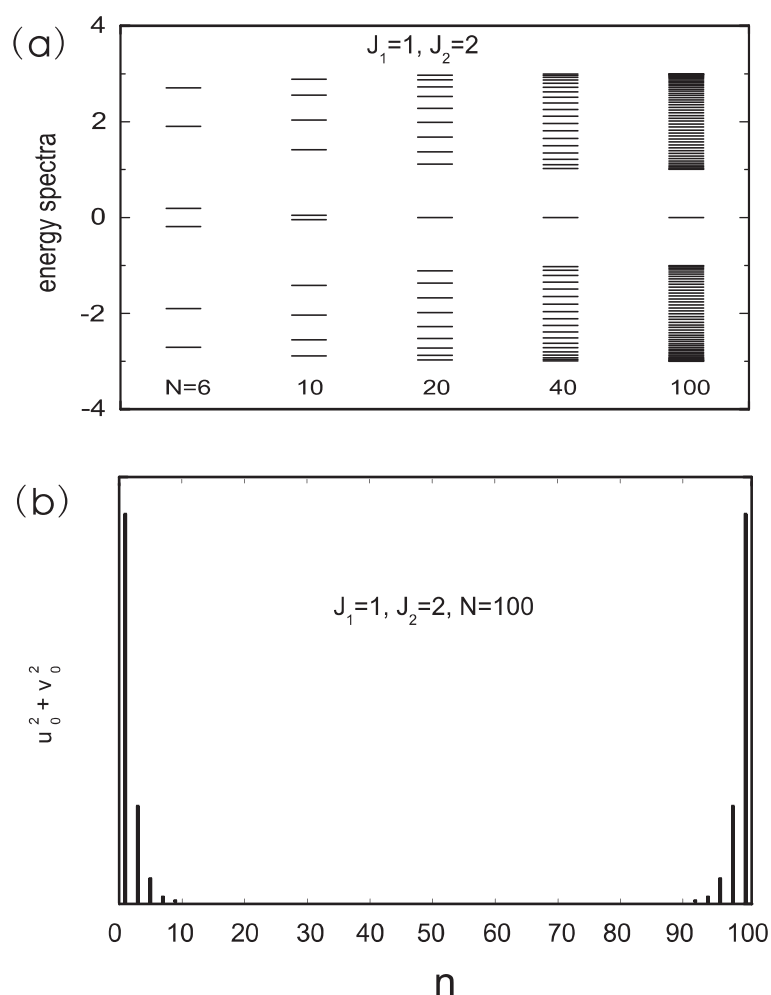


图 3.5: (a)偶数格点链的本征谱;(b)边缘态波函数模方在格点空间的分布.

空间的分布如图3.5.(b)所示. 可见, 这是一对边缘态, 同时存在于链的两端. 几率分布是指数衰减的. 其衰减速率与链长无关(很小的有限尺寸效应).

以上结果对 $J_1 < J_2$ 时成立, 因为自旋链的两端都是以 J_1 结束的. J_1 小于 J_2 使得链的两端被软化了形成边缘态. 于是我们可以推断, 当 $J_1 > J_2$ 时将不存在边缘态. 事实上更强的结论是连能隙态也不存在, 这一点可以从图3.6的数值结果中看出来.

对这一节的总结如下.

对于奇数格点, 任何链长都存在一个对应边缘态的零模. 当 $J_1 < J_2$ 时边缘态局域在链首, 当 $J_1 > J_2$ 时: 边缘态局域在链尾.

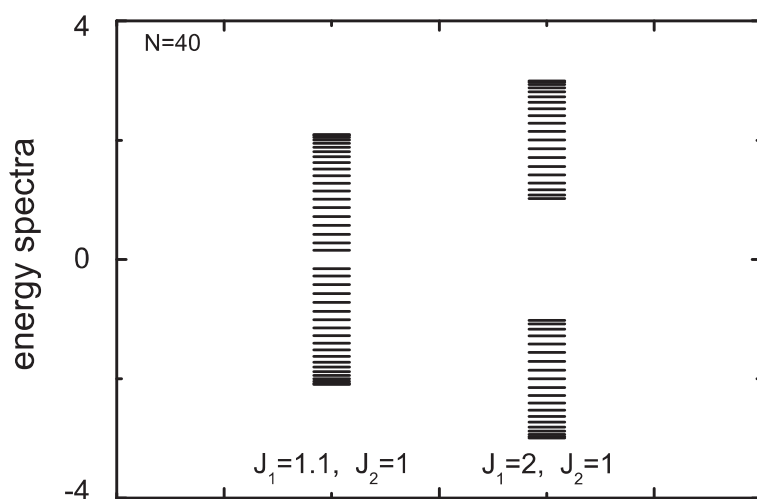


图 3.6: J_1 大于 J_2 时偶数格点链的本征谱

对于偶数格点, 有限格点不存在零模态. 当 $J_1 < J_2$ 时, 存在一对能隙态, 在无限格点情况下能隙态成为零模态, 对应局域在链两端的边缘态. 当 $J_1 > J_2$ 时, 不存在零模态或能隙态.

3.7 小结

本章对Kitaev模型的一维形式进行了研究. 在沿着链的方向自旋x方向的耦合和y方向的耦合交替发生. 在两个耦合强度相等时系统处于量子临界态. 但不存在一个局域的序参数来表征量子相变.

通过对偶变换-某种非局域的么正变换-可以将此模型的转化为横场依辛模型. 把横场依辛模型的两点关联函数对偶回原先的自旋空间即得可表征一维Kitaev模型量子相变的序参数. 它在相变处发生零与非零的转变. 这是一串算符的期望值, 具有非局域性, 表征体系拓扑序的强弱.

对拓扑量子数的计算表明不同的相区具有不同的拓扑结构. 但拓扑序参数较之于拓扑量子数包含很多的信息, 更符合我们对相变的描述方式.

最后, 我们计算了开边界条件下, 自旋链的零模和对应的边缘态, 并且总结了边缘态存在的条件.

第四章 自旋梯子模型

4.1 哈密顿量

两条链时,自旋耦合的构型犹如一把梯子(如图4.1). 由于链间的耦合作用,系统将呈现比一条链更加丰富的性质.

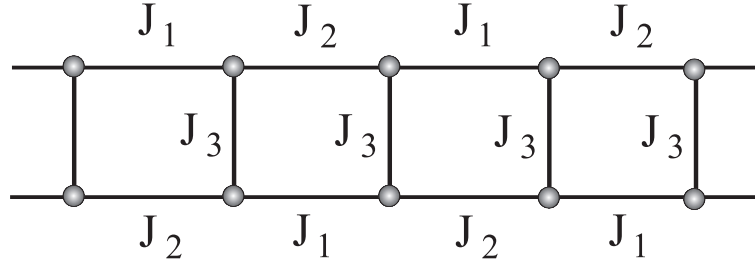


图 4.1: 自旋梯子模型的构型示意图.

自旋哈密顿量为:

$$H = \sum_{n=1}^N \left(J_1 \sigma_{2n-1,1}^x \sigma_{2n,1}^x + J_2 \sigma_{2n,1}^y \sigma_{2n+1,1}^y + J_2 \sigma_{2n-1,2}^y \sigma_{2n,2}^y \right. \\ \left. + J_1 \sigma_{2n,2}^x \sigma_{2n+1,2}^x + J_3 \sigma_{2n-1,1}^z \sigma_{2n-1,2}^z + J_3 \sigma_{2n,1}^z \sigma_{2n,2}^z \right) \quad (4.1)$$

在自旋格点系统中, 我们可以定义块算符(plaquette operators), 它由构成连接(bond)的自旋算符按顺序围绕基本单元连乘一圈得到.

$$W_{2n-1} \equiv (\sigma_{2n-1,1}^x \sigma_{2n,1}^x) (\sigma_{2n,1}^z \sigma_{2n,2}^z) (\sigma_{2n,2}^y \sigma_{2n-1,2}^y) (\sigma_{2n-1,2}^z \sigma_{2n-1,1}^z) \quad (4.2)$$

$$= -\sigma_{2n-1,1}^y \sigma_{2n,1}^y \sigma_{2n,2}^x \sigma_{2n-1,2}^x \quad (4.3)$$

$$W_{2n} \equiv (\sigma_{2n,1}^y \sigma_{2n+1,1}^y) (\sigma_{2n+1,1}^z \sigma_{2n+1,2}^z) (\sigma_{2n+1,2}^x \sigma_{2n,2}^x) (\sigma_{2n,2}^z \sigma_{2n,1}^z) \quad (4.4)$$

$$= -\sigma_{2n,1}^x \sigma_{2n+1,1}^x \sigma_{2n+1,2}^y \sigma_{2n,2}^y \quad (4.5)$$

自旋哈密顿量经过约旦-维格纳变换, 用Majonara费米子算符表示为:

$$H = -i \sum_{n=1}^N \left(J_1 c_{2n-1,1} c_{2n,1} - J_2 c_{2n,1} c_{2n+1,1} - J_2 c_{2n-1,2} c_{2n,2} + J_1 c_{2n,2} c_{2n+1,2} \right. \\ \left. + J_3 D_{2n-1} c_{2n-1,1} c_{2n-1,2} + J_3 D_{2n} c_{2n,1} c_{2n,2} \right) \quad (4.6)$$

其中 $D_n = id_{n,1}d_{n,2}$ 是本征值为 ± 1 的好量子数.

块算符用Majorana费米子算符表示为 $W_n = -D_n D_{n+1}$. 于是块算符也是本征值为 ± 1 的好量子数. 它度量穿过所在单元的磁通, $+1$ 表示磁通量为 0 , -1 表示磁通量为 π .

4.2 π 磁通分布和基态相图

有两种磁通分布可以作为基态磁通分布的候选者. 一种选择是每个方格都通过 π 个磁通量, 即 $\{D_n\}$ 同时取 $+1$ 或同时取 -1 , (都取 -1 相当于在都取 1 的基础上改变 J_3 的符号, 由模型的对称性可知这不影响能谱). 另一种选择是每个方格都通过 0 个磁通量, 它要求 $\{D_n\}$ 交错地取 1 和 -1 . 至于其它的磁通分布, 后面我们可以知道, 相当于在其中某个分布基础上的 Z_2 型涡旋激发, 是需要消耗能量的.

做傅立叶变换:

$$\begin{aligned} c_{2n-1,\alpha} &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ik(n-\frac{1}{2})} f_{1,\alpha}(k) \\ c_{2n,\alpha} &= \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_k e^{ikn} f_{2,\alpha}(k) \end{aligned} \quad (4.7)$$

其中 α 是行指标, 取 1 或 2 . 动量 $k = 2\pi j/N$, j 从 0 取到 $N-1$.

两种磁通分布下, 哈密顿量可以统一写成如下的矩阵形式,

$$H = \sum_k \psi^\dagger(k) \mathbf{M}_k \psi(k) \quad (4.8)$$

$$\psi^\dagger(k) = (f_{11}^\dagger(k), f_{21}^\dagger(k), f_{12}^\dagger(k), f_{22}^\dagger(k)) \quad (4.9)$$

$$\mathbf{M}_k = \begin{pmatrix} 0 & -iu_k & -i\mu J_3 & 0 \\ iu_k^* & 0 & 0 & -iJ_3 \\ i\mu J_3 & 0 & 0 & iu_k^* \\ 0 & iJ_3 & -iu_k & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

其中 u_k 的定义与自旋链的一样. 引入的参数 $\mu = 1$ 对应 π 磁通分布, $\mu = -1$ 对应零磁通分布.

对于 π 磁通分布, 矩阵的四个本征值为 $\pm |u_k \pm iJ_3|$, 明显的表示为:

$$E_k^{\pm\pm} = \pm \sqrt{(J_+ \cos \frac{k}{2})^2 + (J_3 \pm J_- \sin \frac{k}{2})^2} \quad (4.11)$$

其中 $J_+ = J_1 + J_2$, $J_- = J_1 - J_2$.

为正的两支即为准粒子激发能谱. 可知系统在 $J_2 = J_1 \pm J_3$ 处存在无能隙激发. 基态能量由填充负能的费米子得到. 类似一条链的情形, 它对耦合参数的二阶导数在接近无能隙激发处以对数形式发散[如图4.3(b)], 也就是说 $J_2 = J_1 \pm J_3$ 是二级量子相变线. 它将参数空间划为三个相区: (1) $J_1 > J_2 + J_3$, (2) $J_2 > J_1 + J_3$ 以及 (3) $J_3 > |J_1 - J_2|$.

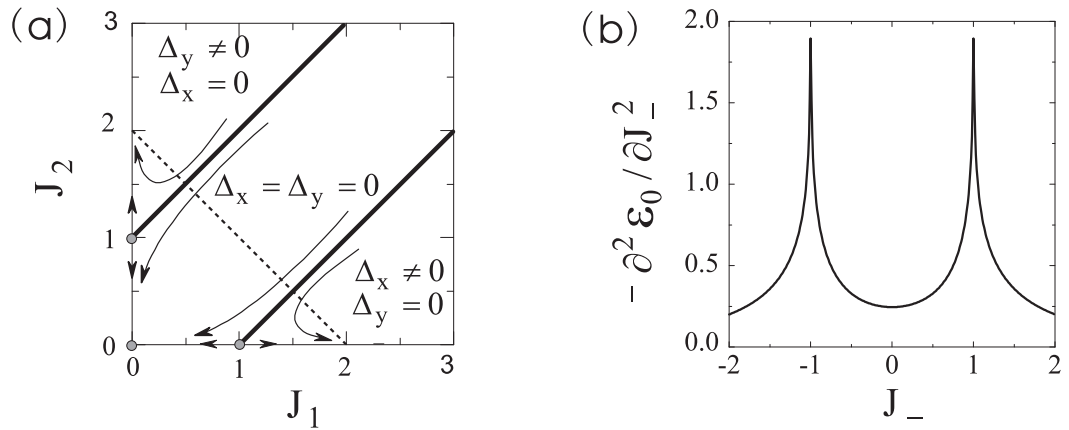


图 4.2: (a)相图和重整化流. J_3 作为单位一. 粗线表示二阶相变线, 坐标轴上的灰色实心点表示不稳定不动点, 坐标原点是稳定不动点, 箭头表示重整化流的方向; (b)基态能量密度对 J_- ($J_- \equiv J_1 - J_2$) 的二阶导数, J_- 沿着(a)中的虚线取值.

对于零磁通分布, 哈密顿矩阵的本征值为 $\pm |u_k \pm J_3|$. π 磁通分布和零磁通分布的基态能量可以统一表示成

$$E = - \int_{-2\pi}^{2\pi} dk \sqrt{J_3^2 + |u_k|^2 + 2xJ_3 \sin \frac{k}{2}} \quad (4.12)$$

对于 π 磁通分布 $x = x_\pi = J_-$, 对于零磁通分布 $x = x_0 = J_+$, 显然 $x_\pi < x_0$. 对能量关于 x 求导有

$$\frac{dE}{dx} = - \int_0^{4\pi} dk \frac{J_3 \sin \frac{k}{2}}{\sqrt{J_3^2 + |u_k|^2 + 2xJ_3 \sin \frac{k}{2}}} \quad (4.13)$$

可知 x 取负值时的被积函数绝对值要大取正值时的. 于是能量关于 x 的导数是正的, 也就是说它是 x 的单调递增函数. 因为 $x_\pi < x_0$, 所以 π 磁通分布对应的能量要低于零磁通分布对应的能量. 系统的基态要求取通过每个方格的磁通量为 π .

比较Kitaev模型的基态哈密顿量矩阵(2.38)和自旋梯子的基态哈密顿量矩阵(4.10), 它们的唯一差别是后者中的 J_3 在前者中为 $J_3 e^{ik_2/2}$. 于是, Kitaev模型可以看作一系列自旋梯子模型的叠加, 这些自旋梯子所带有的磁通分布分别为 $\pi + k_2$.

4.3 重整化群分析

为了考察自旋梯子模型的低能行为, 对它做重整化群的分析. 由于模型具有交换 J_1 和 J_2 的对称性, 我们只需计算 J_1 大于 J_2 时的情形.

能谱(4.11)的最小值位置在 $\sin \frac{k}{2} = 1$. 令 $x^2 = 1 - \sin \frac{k}{2}$ (这个代换在低能部分不影响作用量的积分测度), 得:

$$E_k^2 = (J_3 - J_-)^2 + 2(J_- J_3 + J_+^2 - J_-^2)x^2 - (J_+^2 - J_-^2)x^4 \quad (4.14)$$

当积去高频成分后, 要使作用量保持形式不变, 需要对耦合参数重新标度, 使得:

$$J_3 - J_- = c_1 e^t \quad (4.15)$$

$$J_- J_3 + J_+^2 - J_-^2 = c_2 \quad (4.16)$$

$$J_+^2 - J_-^2 = c_3 e^{-2t} \quad (4.17)$$

其中 c_1, c_2 和 c_3 为常数, 由 $t = 0$ 时的耦合参数确定.

利用数值方法解重整化群方程组, 我们得到如图4.2(a)中的重整化流. 在 $J_1 = J_2 + J_3$ 附近, (J_1, J_2) 贴着相变线流向横轴上的不稳定不动点, 并在快接近不稳定不动点时分道扬镳. 在 $J_1 > J_2 + J_3$ 区域, (J_1, J_2) 有流向 $(+\infty, 0)$ 的趋势; 在 $J_2 < J_1 < J_2 + J_3$ 区域, (J_1, J_2) 有流向坐标原点 $(0, 0)$ 的趋势. 结合对 $J_2 > J_1$ 区域的分析可知, 在相区(1)中 J_2 的作用可忽略, J_1 和 J_3 共同决定系统的低能行为; 在相区(2)中 J_1 的作用可忽略, 由 J_2 和 J_3 来决定系统的低能行为. 这两个相描写的是一条有效的自旋链(见图4.3). 在相区(3)中情况有所不同. 如果直接从重整化流的分析我们得到系统的低能行为相当于一组独立的极化耦合自旋对.

而需要引起注意的是, 从基态哈密顿量出发得到的激发谱只有在临界线附近是有意义的. 远离临界线时系统真实的低能激发将是 $\{D_n\}$ 构型中的扭结激发. 因此, 基于激发谱的重整化群分析也只在临界线附近有效. 虽然有这样的局限性, 重整化群分析还是给了我们比较明确的信息.

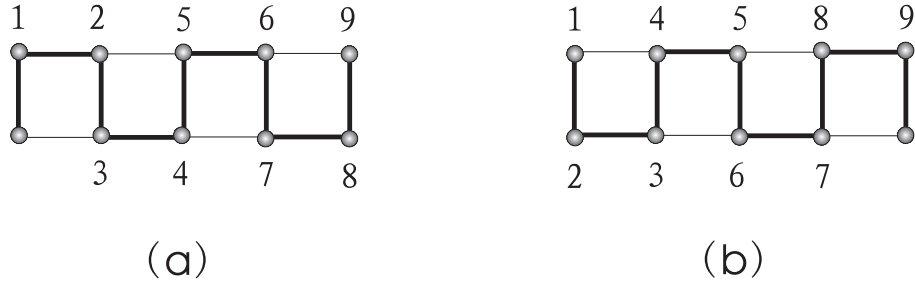


图 4.3: (a) $J_1 > J_2 + J_3$ 时, 算符链的选取方式; (b) $J_2 > J_1 + J_3$ 时, 算符链的选取方式. 其中, 自旋梯子中如图中细线所示的最近邻耦合在新标记的自旋链中成为第三近邻耦合.

4.4 拓扑序参数

两条腿的自旋梯子可以通过重新标记格点序号表示成具有第三邻耦合的自旋单链. 以图4.3(a)的标记方式, 自旋哈密顿量可以表示成:

$$H = \sum_{n=1}^{2N} (J_1 \sigma_{2n-1}^x \sigma_{2n}^x + J_3 \sigma_{2n}^z \sigma_{2n+1}^z + J_2 \sigma_{2n}^y \sigma_{2n+3}^y) \quad (4.18)$$

它的对偶形式为:

$$H_{dual} = \sum_{n=1}^{2N} (J_1 \tau_{2(n-1)+\frac{1}{2}}^z \tau_{2n+\frac{1}{2}}^z + J_3 \tau_{2n+\frac{1}{2}}^x + J_2 W_{2n}^d \tau_{2n+\frac{1}{2}}^y \tau_{2(n+1)+\frac{1}{2}}^y) \quad (4.19)$$

其中 $W_{2n}^d = \tau_{2n-1+\frac{1}{2}}^z \tau_{2n+1+\frac{1}{2}}^x \tau_{2n+3+\frac{1}{2}}^z$ 与哈密顿量对易, 是系统的守恒量.

在新标记下的块算符按定义写为:

$$W'_n = \sigma_{2n}^z \sigma_{2n+1}^z \sigma_{2n+1}^x \sigma_{2n+2}^x \sigma_{2n+2}^z \sigma_{2n+3}^z \sigma_{2n+3}^y \sigma_{2n}^y \quad (4.20)$$

$$= -\sigma_{2n}^x \sigma_{2n+1}^y \sigma_{2n+2}^y \sigma_{2n+3}^x \quad (4.21)$$

W_{2n}^d 经过逆对偶变换到原先的空间为 $-\sigma_{2n}^x \sigma_{2n+1}^y \sigma_{2n+2}^y \sigma_{2n+3}^x$. 正如其名字暗示的那样, W_{2n}^d 就是块算符 W'_n 的对偶形式. 低能哈密顿量要求穿过每个方格单元的磁通为 π , 即取所有的 W_{2n}^d 为 -1. 我们注意到在对偶模型中只出现块算符, 而不是原来模型的 D 算符. 另外我们知道块算符与 D 算符的关系是一对二的, 即 $\{W_n\} \longleftrightarrow \pm\{D_n\}$. 于是原来模型中由于 D 算符而引入的规范自由度不进入对偶模型. 也就是说原来模型的本征态是两重简并的, 而其对偶模型是不简并的. 这种性质在对偶的模型之间经常出现[91].

重新标记格点: $\{2n + \frac{1}{2}\} \rightarrow \{n\}$. 并做自旋空间转动, 转动后的自旋算符满足: $\tau_n^{lx} = -\tau_n^z$, $\tau_n^{lz} = \tau_n^x$ 以及 $\tau_n^{ly} = \tau_n^y$. 于是自旋哈密顿量变成我们熟悉的形式, 即描写在垂直磁场中的各向异性 xy 模型.

$$H_{dual} = \sum_{n=1}^{2N} (J_1 \tau_{n-1}^{lx} \tau_n^{lx} - J_2 \tau_{n-1}^{ly} \tau_n^{ly} + J_3 \tau_n^{lz}) \quad (4.22)$$

我们注意到 J_2 前面的符号是负的, 如果经过自旋空间的转动把它转移到磁场的强度上去, 原来均匀的磁场就变成交错的磁场. 0磁通与 π 磁通的区别就在于, 前者得到正耦合系数下的均匀磁场, 而后者是交错磁场. 从已知的结果看, 交错磁场更有利于降低 xy 模型的能量.

当 $J_1 > J_2 + J_3$ 时, 存在长程自旋关联[92],

$$\lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \tau_n^{lx} \tau_{n'}^{lx} \rangle > 0 = (-1)^{n-n'} \left[1 - \left(\frac{J_2}{J_1} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - \left(\frac{J_3}{J_1 - J_2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}} \quad (4.23)$$

转回不带撇的对偶空间算符, 并且改回原来对偶格点的标记, 即 $\{n\} \rightarrow \{2n + \frac{1}{2}\}$, 再对算符作逆对偶变换, 我们得到在原始自旋空间中的关联函数. 它是一种非局域算符的真空期望值, 其中 σ_k^x 从奇数格点连乘到偶数格点, 并且让链长趋向无穷大.

$$\Delta_x = \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{k=2n+1}^{2n'} \sigma_k^x \rangle > 0 \quad (4.24)$$

它可以作为表征从 $J_1 > J_2 + J_3$ 到 $J_1 < J_2 + J_3$ 时发生相变的序参数. 当 $J_1 > J_2 + J_3$ 时它不为零, 趋近相变线时它趋近于零, 当 $J_1 < J_2 + J_3$ 时则为零. 需要说明的是这种序参数不同与朗道相变理论中的序参数. 那里的序参数由局域的物理量表示, 而这里的序参数不是局域的, 刻画了系统的整体结构.

当 $J_2 > J_1$ 时, 以图4.3(b)的方式标记格点. 类似的分析可知, 在 $J_2 > J_1 + J_3$ 时, 存在非零的关联函数

$$\Delta_y = \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{k=2n}^{2n'-1} \sigma_k^y \rangle > 0 \quad (4.25)$$

当 J_2 趋向于 $J_1 + J_3$ 时, 它连续地逼近0, 并在 $J_2 < J_1 + J_3$ 时为零.

于是, 第一象限的三个相区就可以由一对拓扑序参数 (Δ_x, Δ_y) 来标记.

- 相区I ($J_- > J_3$): Δ_x 不为零, 而 Δ_y 为零;
- 相区II ($|J_-| < J_3$): Δ_x 和 Δ_y 都为零;
- 相区III ($-J_- > J_3$): Δ_x 为零, 而 Δ_y 不为零.

4.5 拓扑数

接下来我们计算一下各个相区的动量空间拓扑量子数.

通过对算符的线性组合, 哈密顿量矩阵可以表示为以下形式

$$H_k = g_x \sigma^z + g_y \sigma^x \quad (4.26)$$

其中 $g_x = J_+ \cos(k/2)$, $g_y = J_- \sin(k/2) + J_3$, 动量 k 在一个周期内取值, 即从 -2π 取到 2π . 拓扑量子数可通过计算下式得到,

$$\begin{aligned} N_2 &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-2\pi}^{2\pi} dk \frac{g_x g'_y - g_y g'_x}{g_x^2 + g_y^2} \\ &= \frac{1}{4\pi i} \oint dz \frac{J_+(-J_3 z^2 + 2J_- z - J_3)}{J_1 J_2 (z - z_{1,+})(z - z_{1,-})(z - z_{2,+})(z - z_{2,-})} \end{aligned} \quad (4.27)$$

其中积分回路为单位圆, $z_{1,\pm} = \frac{J_3 \pm \sqrt{J_3^2 + 4J_1 J_2}}{2J_1}$, $z_{2,\pm} = \frac{J_3 \pm \sqrt{J_3^2 + 4J_1 J_2}}{2J_2}$ 为被积函数在复平面中的四个一阶极点. 对应的留数分别为: $\text{res}(z_{1,\pm}) = \frac{1}{2}$, $\text{res}(z_{2,\pm}) = -\frac{1}{2}$.

- 当 $J_- > J_3$ 时, 即在相区I, $|z_{1,\pm}| < 1$, $|z_{2,\pm}| > 1$, 积分回路包含 $z_{1,+}$ 和 $z_{1,-}$ 两个极点, 于是 $N_2 = 1$;
- 当 $-J_- > J_3$ 时, 即在相区III, $|z_{1,\pm}| > 1$, $|z_{2,\pm}| < 1$, 积分回路包含 $z_{2,+}$ 和 $z_{2,-}$ 两个极点, 于是 $N_2 = -1$;
- 当 $|J_-| < J_3$ 时, 即在相区II, $|z_{1,+}| > 1$, $|z_{2,+}| > 1$, $|z_{1,-}| < 1$, $|z_{2,-}| < 1$, 积分回路包含 $z_{1,-}$ 和 $z_{2,-}$ 两个极点, 于是 $N_2 = 0$.

4.6 边缘态及拓扑激发

$2N+1$ 个格点的自旋梯子在开边界条件下以 $(a_1, a_2, \dots, a_{2N+1}, b_1, b_2, \dots, b_{2N+1})$ 为基底的矩阵形式为,

$$-i \begin{pmatrix} B_1 & D \\ -D & B_2 \end{pmatrix} \quad (4.28)$$

其中 B_1 和 B_2 分别两条梯子腿对应的矩阵. B_1 与单链的矩阵 B 有相同的构造(B 的具体形式见3.36), B_2 可以通过交换 J_1 和 J_2 在 B_1 中的位置得到. D 是对角矩阵表示链间耦合, 其对角元依次为 $D_1, D_2, \dots, D_{2N+1}$.

已知系统的基态是双重简并的. 对于基态我们不妨取所有的 D_n 都为1, 我们知道基态相图在 J_1 - J_2 平面的第一象限分为三个区域. 见图4.2.(a), 其中我们称用 $(\Delta_x \neq 0, \Delta_y = 0)$ 标识的相区为第一相区, 用 $(\Delta_x = 0, \Delta_y = 0)$ 标识的相区称为第二相区, 而用 $(\Delta_x = 0, \Delta_y \neq 0)$ 标识的相区为第三相区. 第一和第三相区可以通过 J_1 和 J_2 的互换联系起来.

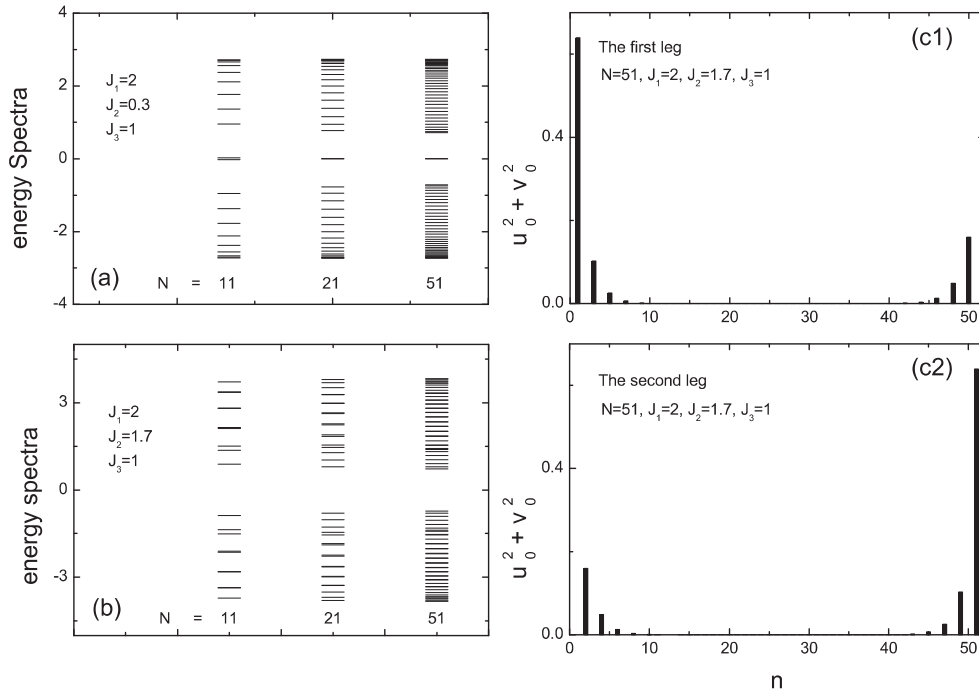


图 4.4: (a),(b):第一和第二相区代表点的能谱, (c1),(c2):第一相区中零模对应的边缘态分别在两条梯子腿中的几率分布

分别选取 $J_1 = 2, J_2 = 0.3$ 和 $J_1 = 2, J_2 = 1.7$ 作为第一和第二相区的代表点, 求得它们的本征谱. 如图4.4所示, 在第二相区不存在零模, 而在第一相区当格点数取热力学极限时存在一对零模(事实上每条腿的格点数为51时能隙态的本征值已经非常接近零了). 可以这样理解零模的有无: 在重整化群的意义下, 在第一和第二相区的边界附近 J_2 是无关量, 可以有效地把 J_2 设为零(即将参数空间限制在横轴上), 然后将自旋梯子拉成一条 J_3 和 J_1 相间的格点数为偶数的自旋链,

J_3 总是处于链的头和尾. 利用偶数格点自旋链的已知结果, 当 $J_3 < J_1$, 存在零模, 它处于第一相区; 当 $J_3 > J_1$, 不存在零模, 它处于第二相区. 第一相区中的零模对应边缘态, 它的波函数如图4.4.(c1,c2)所示.

考察完了基态, 我们来考察一下除了对角哈密顿量对应的准粒子激发外的另一种激发. 它可以通过翻转 D_n 得到. 为了讨论的方便, 自旋梯子沿着梯子方向取周期性边界条件, 这样边缘态就不出现了. 在这种边界条件下, 翻转一段 D_n 将至少在 D_n 构型中形成一个扭结和一个反扭结. 在扭结或反扭结处原来通过的 π 磁通变成了零磁通, 对应一个 Z_2 涡旋. 我们首先来考察一下产生一对 Z_2 涡旋的能量与它们间距之间的关系. 为此我们如分析边缘态那样选取 $J_1 = 2, J_2 = 0.3$ 和 $J_1 = 2, J_2 = 1.7$ 作为第一和第二相区的代表点.

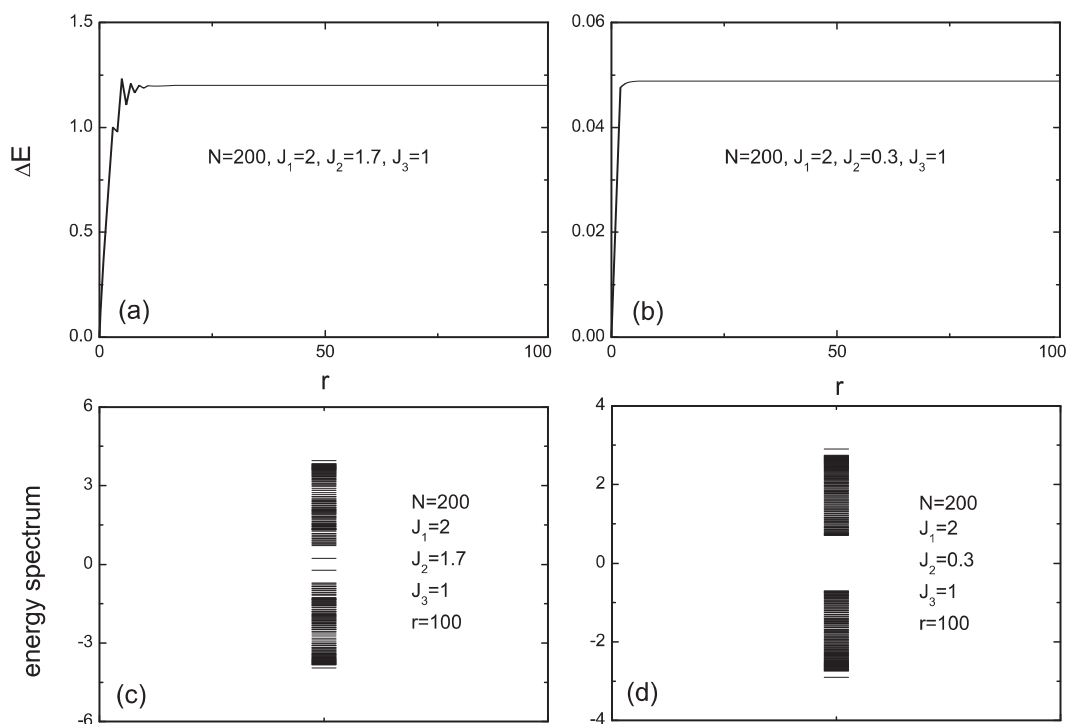


图 4.5: (a),(b)分别为第二和第一相区中涡旋对之间的距离与所需的能量之间的函数关系;(c),(d)分别为第二和第一相区中涡旋对距离足够远时的能量本征谱

如图4.5所示(链长 N 取为200其有限尺寸效应已经可以被忽略), 产生涡旋对是需要能量的, 开始时需要的能量随着它们的分开而增加, 但经过十多个格点之后就饱和了(由于周期性边界条件, 当 r 过了100时, 它们的距离事实上是在减

小), 因此可以把它们看作一对短程作用的正反粒子(Z_2 涡旋的反粒子是其自身), 在 $r = 0$ 处产生, 在 $r = N$ 处湮灭. 涡旋对的能量在饱和后不会随着它们之间距离的增加而增加说明它们是退禁闭的. 从涡旋对的产生, 分开到融合将原来的 D_n 从1都变成了 -1 , 这个过程将系统从一种基态变成了另一种基态, 说明拓扑激发联系了系统两个不同的拓扑基态. 需要说明的是 D_n 为好量子数, 不同 D_n 构型的态之间是正交的, 准粒子不具有动力学性质, 所以必须要有外界的作用来控制准粒子的位置.

能量本征谱4.5.(c,d)中的一个显著特征是, 在第一相区价带与导带之间有一个能隙, 在第二相区则存在能隙态, 其中负能的状态总是被占据, 正能的状态无占据从数值结果可以知道这对能隙态是二重简并的, 并且在热力学极限下不会成为零模. 能隙态二重简并来自于两个涡旋, 其中每个涡旋贡献一对能隙态. 将两个涡旋交换两次, 系统回到原来的状态, 这说明涡旋所带的拓扑准粒子是费米子. 由于能级的二重简并, 这个费米子由两个携带二分之一电荷的阿贝尔任意子复合而成.

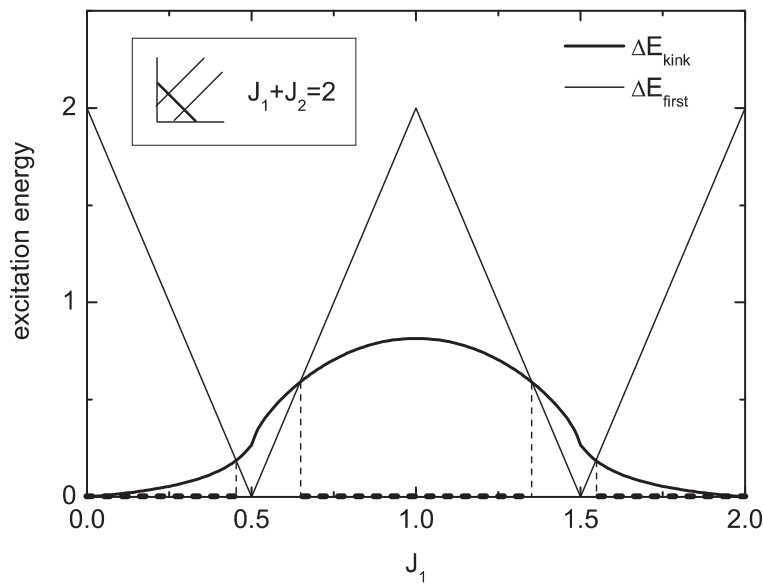


图 4.6: 能量比较. 耦合参数的在 $J_1 + J_2 = 2$ 上取值. ΔE_{kink} 表示激发一对独立的涡旋需要的能量, ΔE_{first} 表示准粒子第一激发态与基态的能量差.

哈密顿量具有粒子数保持奇数或偶数的不变性. 对角哈密顿量的准粒子激发在相变线上是无能隙激发. 一旦离开相变线, 激发一个准粒子所需要的能量

不能小于价带与导带之间能量差. 这份能量与产生一对独立涡旋的能量是可比的. 我们发现(见图4.6)在相变线附近, 对角哈密顿量的准粒子激发具有较低的能量, 低能激发性质由它主导, 如连续量子相变和相变线附近的重整化性质. 在横轴上粗点线段所示的区域, 拓扑激发具有较低的能量, 所以此时拓扑激发主导低能行为. 最后我们看一下这种拓扑激发的准粒子是怎样的.

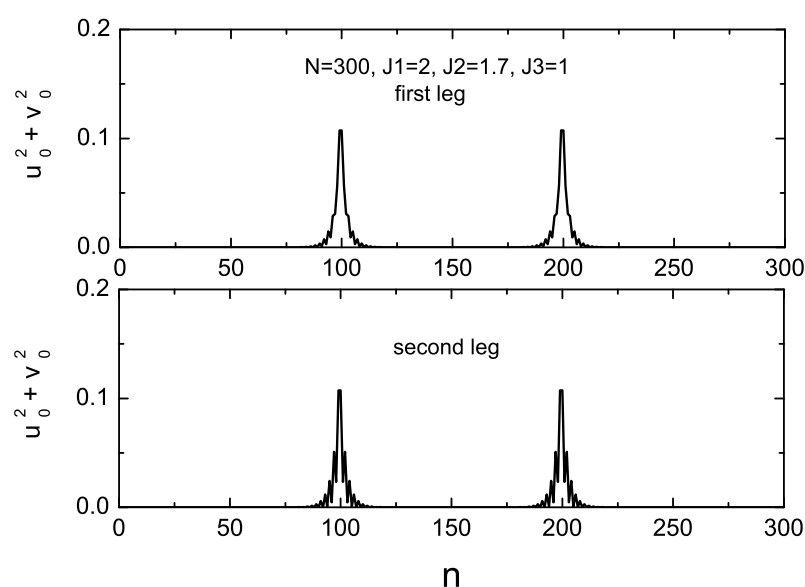


图 4.7: 能隙态的波函数模方. 拓扑缺陷的位置在 $n=100$ 和 200 .

如图4.7所示, 能隙态的波函数分别局域在两个拓扑缺陷附近, 这两部分在空间上是完全分开的. 我们可以换一种更直观的方式来看拓扑准粒子. 因为能隙态是二重简并的, 我们可以在简并态构成的Hilbert空间中做转动, 新的正交态分别局域在 D_n 构型中的扭结和反扭结上. 这样的局域态带有一个费米子的量子数. 这与聚合物中的孤子态不同[93]. 孤子态位于能隙正中间, 由于哈密顿量的粒子空穴对称性, 在每个拓扑缺陷附近价带和导带中各有二分之一一个态贡献给了能隙态, 如果原先价带是被占据的, 就有量子数为二分之一的准粒子占据在能隙态上. 如果作用一个局域的电场, 它的响应与半个电荷一样. 也就是说存在量子数的分数化现象.

对这一节做一个总结: 在开边界条件下, 在相区I存在零模对应边缘态, 在相区II则不存在零模. 取周期性边界条件使得边缘态不进入. 翻转 D_n 以产生一对 Z_2 型涡旋, 在相区I不存在零模, 在相区II产生两对能隙态分别对应局域在两个涡旋上的拓扑型准粒子.

4.7 小结

本章研究了自旋梯子模型. 对零磁通和 π 磁通情况下能量表达式的直接比较发现, π 磁通对应系统的基态. 动量空间重整化群的分析定出了系统的不稳定固定点以及它的低能行为. π 磁通条件下的自旋梯子模型与处在z方向磁场中的xy模型对偶. 与一维模型类似的分析, 我们找到了刻画拓扑型量子相变的弦状序参量. 存在两个这样的序参量可用以刻画参数空间第一象限中的三个相区. 对拓扑量子数的计算也给出了类似上一章中的结果.

对边缘态的研究发现梯子模型可以用单链的图像来理解, 只不过此时的单链是蜿蜒曲折状的. 一个有意思的对象是梯子模型中的拓扑激发. 将某些方块中的 π 磁通变为零磁通就会形成拓扑缺陷, 反映在能谱中则为能隙态, 它的能量不为零, 但明显离开其它的连续能级. 能隙态的波函数权重集中在拓扑缺陷附近. 可以设想能隙态能量不为零的原因是垂直梯子方向上尺度的限制, 如果在二维系统中它将以零模的形式出现.

另外我们还比较了拓扑激发和费米子激发的能量, 发现在相变线附近拓扑激发需要更高的能量, 而在离开相变线的某些参数空间拓扑激发则是系统的低能激发.

第五章 多腿梯子模型

5.1 哈密顿量

前面我们研究了二维Kitaev模型, 然后是它的一维形式一条链的自旋模型, 接着又研究了两条腿的自旋梯子模型. 那么多条腿的梯子模型将会是怎样的呢? 又多腿梯子模型随腿数目的增加是怎样过渡到二维Kitaev模型的呢? 为了适合在垂直梯子的方向取周期性边界条件, 让腿的数目为偶数. 当腿的数目趋向无穷时, 奇偶性对整体的性质没有影响.

为了便于查看, 我们将类似(2.7)式的哈密顿量写成如下形式:

$$H = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M [J_1 (\sigma_{2n-1,2m-1}^x \sigma_{2n,2m-1}^x + \sigma_{2n,2m}^x \sigma_{2n+1,2m}^x) + J_2 (\sigma_{2n,2m-1}^y \sigma_{2n+1,2m-1}^y + \sigma_{2n-1,2m}^y \sigma_{2n,2m}^y) + J_3 (\sigma_{2n-1,2m-1}^z \sigma_{2n-1,2m}^z + \sigma_{2n,2m}^z \sigma_{2n,2m+1}^z)] \quad (5.1)$$

其中梯子腿的数目等于 $2M$. 在沿着梯子的方向和垂直梯子的方向都取周期性边界条件.

对这样一个哈密顿量我们的处理方式: 取 N 为无穷大, 逐渐增加 M , 使得系统从准一维过渡到二维. 如果当 M 取到无穷大, 这个模型就成为Kitaev首先引入的用于拓扑量子计算的模型.

由于在有限条腿时, J_3 与 J_1, J_2 的地位是不等同的. 为了方便问题的阐述, 下面在我们得到的相图中往往令 J_3 为单位一. 这样处理的好处是我们可以清楚地看到相图怎样从有限条腿的情形过渡到二维情形.

自旋模型经过约旦-维格纳变换后, 成为Majorana费米子模型,

$$H = -i \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M [J_1 (c_{2n-1,2m-1} c_{2n,2m-1} + c_{2n,2m} c_{2n+1,2m}) - J_2 (c_{2n,2m-1} c_{2n+1,2m-1} + c_{2n-1,2m} c_{2n,2m}) + J_3 (D_{2n-1,2m-1} c_{2n-1,2m-1} c_{2n-1,2m} + D_{2n,2m} c_{2n,2m} c_{2n,2m+1})] \quad (5.2)$$

5.2 四条腿的梯子情形

5.2.1 有限尺寸效应与一级量子相变

Kitaev模型的基态要求零磁通分布. 对于四条腿的模型:

$$D_{2n-1,1} = -D_{2n,2} = D_{2n-1,3} = -D_{2n,4} = 1 \quad (5.3)$$

$$D_{2n-1,1} = D_{2n,2} = D_{2n-1,3} = -D_{2n,4} = 1 \quad (5.4)$$

对应两种可能的零磁通选取方式, 分别标记为 D_1 和 D_2 . 然而它们并不对应相同的能量. 这似乎与附录F中证明的定理不一致. 其原因是附录中的证明只涉及局部的磁通性质, 没有考虑全局的磁通性质. 由于自旋模型的周期性边界条件, 第一条腿与第四条腿是耦合的, D_1 和 D_2 不能通过规范变换联系起来. D_1 对应 c 算符表示的自由费米子模型取周期性边界条件, 而 D_2 则对应取反周期性边界条件. 它们造成在梯子腿围成的管子中有一个 π 磁通的差别, 这是一种整体性质. 对于有限条腿的模型, 这种差别以有限尺寸效应的方式存在. 它造成的能量差正比于梯子的长度.

一个很重要的推论就是, 如果 D_1 磁通分布对应基态, 此时产生一对蜗旋相当于插入一段 D_2 磁通分布, 于是随着蜗旋对距离的增加所消耗的能量是线性增长的, 这样的蜗旋激发是禁闭的(类似于夸克禁闭). 当腿的数目趋向无穷大时, 分配到每条腿上的能量差趋向于零. 也就是说二维Kitaev模型在能量上不存在 D_1 和 D_2 的差别, 它的蜗旋激发是退禁闭的.

为了分析这种有限尺寸效应, 我们比较了选取 D_1 和 D_2 时的基态能量密度, 发现在参数空间的有些区域内其中之一的选取方式得到更低的基态能量. 如图5.1.(c), 第一象限的参数空间被划分为三个区域, D_2 在中间区域得到更低的能量, 而 D_1 在两边的区域得到更低的能量. 经过这些区域的分界线, 能量的一阶导数不连续, 系统将发生一级量子相变. 图5.1.(a)(b)分别为取 D_1 和 D_2 得到的相图. 综合图5.1.(c)的结果, 最后我们得到四条腿自旋模型的相图5.1.(d), 其中既有二阶相变又有一级相变.

下面我们将固定 $D_{2n-1,2m-1} = -D_{2n,2m} = 1$, 研究由此得到的自由Majorana费米子模型. 随着腿数目的增加, 它将最终过渡到二维Kitaev模型.

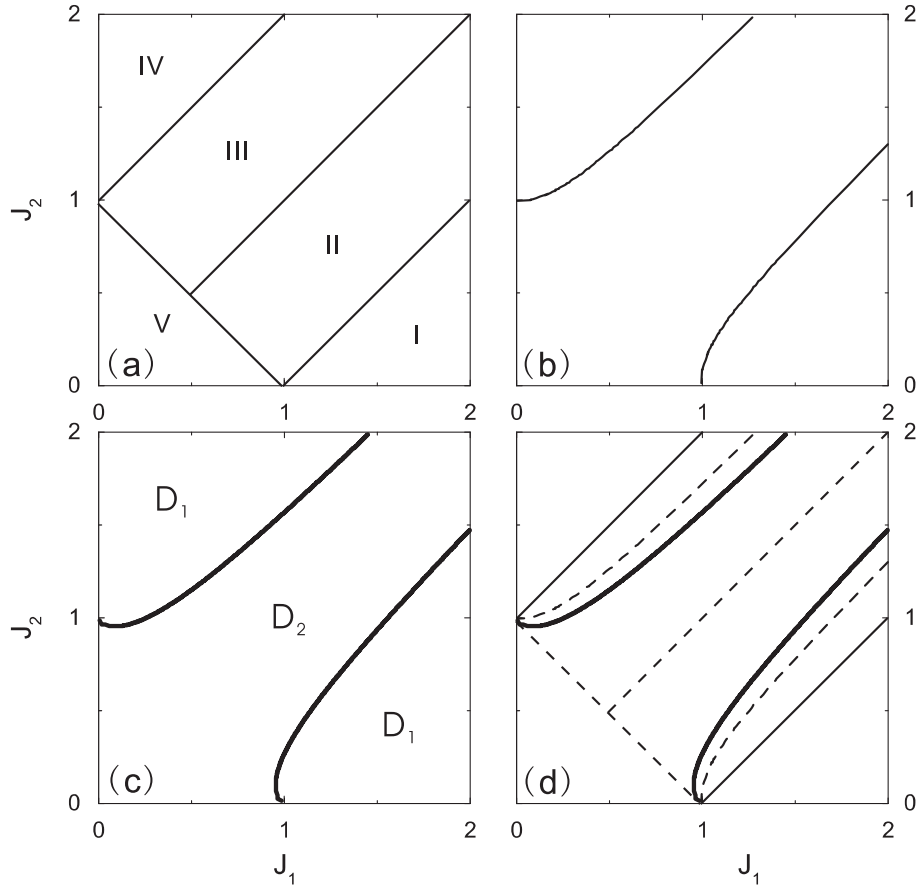


图 5.1: (a)取 D_1 时的相图; (b)取 D_2 时的相图; (c) D_1 和 D_2 对应基态能量的比较; (d)四条腿自旋梯子模型的相图. 细线表示二级量子相变线, 粗线表示一级量子相变线, 虚线表示在 D_1 或 D_2 情形下出现而在自旋模型相图中不出现的相变线.

5.2.2 等价模型与拓扑序参数

重新标记四条腿梯子模型中的格点编号(如图5.2). 哈密顿量在新的格点编号下可以写为:

$$H = -i \sum_j (J_1 c_{2j-1,1} c_{2j,1} + (-1)^j J_3 c_{2j,1} c_{2j+1,1} - J_2 c_{2j,1} c_{2j+3,2} + J_1 c_{2j-1,2} c_{2j,2} + (-1)^j J_3 c_{2j,2} c_{2j+1,2} - J_2 c_{2j,2} c_{2j+3,1}) \quad (5.5)$$

这里链1和链2是耦合在一起的. 对Majorana费米子 $c_{j,1}$ 和 $c_{j,2}$ 做线性组合:

$$g_{j,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{j,1} + c_{j,2}) \quad , \quad g_{j,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{j,1} - c_{j,2}) \quad (5.6)$$

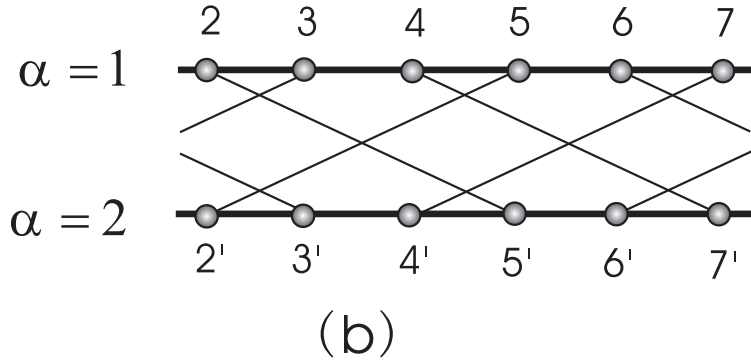
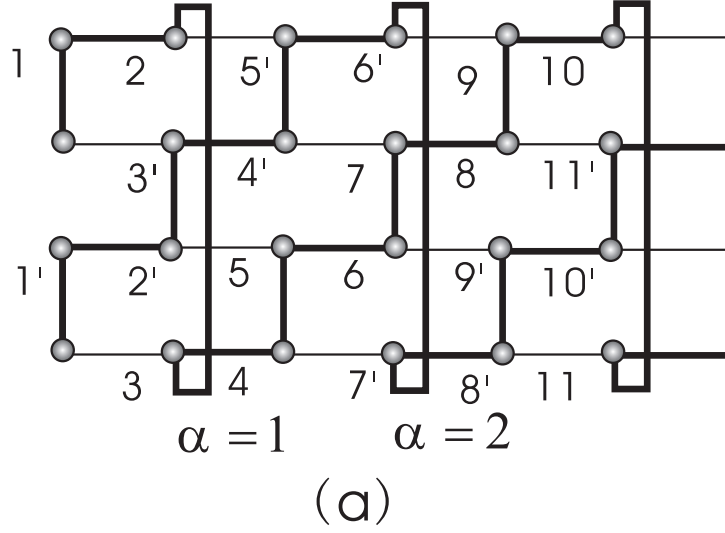


图 5.2: 四条腿模型的格点标记方式.

显然 $g_{j,1}$ 和 $g_{j,2}$ 也是Majorana费米子算符. 从上式反解出 c 算符用 g 算符表达的关系式,

$$c_{j,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(g_{j,1} + g_{j,2}) \quad , \quad c_{j,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(g_{j,1} - g_{j,2}) \quad (5.7)$$

代入到哈密顿量的表达式中, 得:

$$\begin{aligned} H &= H_1 + H_2 & (5.8) \\ H_1 &= -i \sum_j [J_1 g_{2j-1,1} g_{2j,1} + (-1)^j J_3 g_{2j,1} g_{2j+1,1} - J_2 g_{2j,1} g_{2j+3,1}] \\ H_2 &= -i \sum_j [J_1 g_{2j-1,2} g_{2j,2} + (-1)^j J_3 g_{2j,2} g_{2j+1,2} + J_2 g_{2j,2} g_{2j+3,2}] \end{aligned}$$

可见用 g 算符表示的哈密顿量是退耦合的. H_1 正是 π 磁通分布的两腿梯子模型的哈密顿量. 在耦合系数空间存在二级量子相变线 $J_1 = J_2 \pm J_3$. 将 H_1 的 J_2 反号即为 H_2 , 可见 H_2 为零磁通分布的两腿梯子模型的哈密顿量. 它的二级量子相变线的位置在 $J_1 + J_2 = J_3$ 以及 $J_1 = J_2 > J_3/2$.

四条腿梯子模型的相图由图5.1.(a)所示. 它在第一象限被分为五个相区. 如何来刻画这些不同的相呢? 类似两腿梯子模型的做法, 我们找到了以下一组非局域的弦状序参数:

$$\Delta_1^x \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \left\langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} g_{j,1} \right\rangle \quad (5.9)$$

$$\Delta_1^y \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \left\langle \prod_{j=2n}^{2n'-1} g_{j,1} \right\rangle \quad (5.10)$$

$$\Delta_2^x \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \left\langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} g_{j,2} \right\rangle \quad (5.11)$$

$$\Delta_2^y \equiv \lim_{n-n' \rightarrow \infty} \left\langle \prod_{j=2n}^{2n'-1} g_{j,2} \right\rangle \quad (5.12)$$

用这些弦状序参数, 我们可以将各个相区表征如下:

- 相区I($J_1 > J_2 + J_3$): Δ_1^x 和 Δ_2^x 不为零, 而 Δ_1^y 和 Δ_2^y 为零;
- 相区II($J_3 < J_1 + J_2$ 且 $J_2 < J_1 < J_2 + J_3$): Δ_2^x 不为零, 其余都为零;
- 相区III($J_3 < J_1 + J_2$ 且 $J_1 < J_2 < J_1 + J_3$): Δ_2^y 不为零, 其余都为零;
- 相区IV($J_2 > J_1 + J_3$): Δ_1^y 和 Δ_2^y 不为零, 而 Δ_1^x 和 Δ_2^x 为零;
- 相区V($J_3 > J_1 + J_2$): 所有的弦状序参数都为零.

5.3 多条腿的梯子情形

当 $M > 2$ 时, 对梯子构型做类似四条腿梯子构型的格点编号. 以 $M = 3$ 为例(见图5.3), 以沿着折线的顺序标记格点, 由于垂直梯子方向采用了周期性边界条件, 折线到达最上面的格点时将回到最下面的格点.

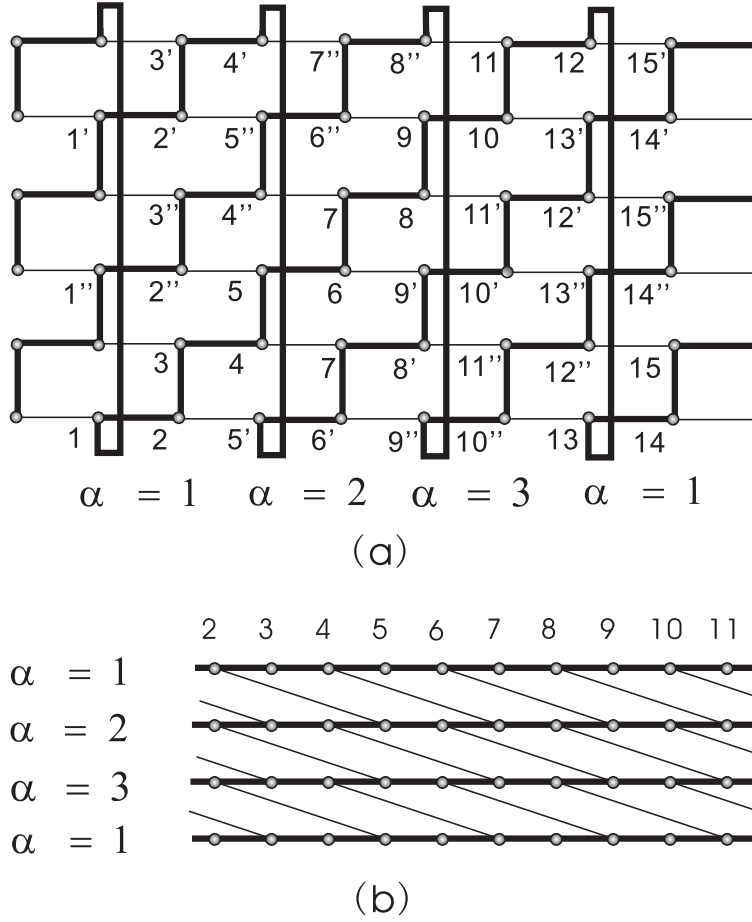


图 5.3: 以六条腿梯子为例说明格点编号的方式.

对于 $2M$ 条腿的梯子, 其格点将被 M 条折线遍历. 新编号下的哈密顿量可以写为:

$$H = -i \sum_j \sum_{\alpha=1}^M [J_1 c_{2j-1, \alpha} c_{2j, \alpha} + J_3 (-1)^j c_{2j, \alpha} c_{2j+1, \alpha} - J_2 c_{2j, \alpha} c_{2j+3, \alpha+1}] \quad (5.13)$$

对算符 c 关于指标 α 做傅立叶变换,

$$c_{j, \alpha} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_q e^{i\alpha q} c_{j, q} \quad (5.14)$$

于是哈密顿量(5.13)变成 $H = \sum_q H_q$, 其中

$$H_q = -i \sum_j [J_1 c_{2j-1, -q} c_{2j, q} + J_3 (-1)^j c_{2j, -q} c_{2j+1, q} - J_2 e^{iq} c_{2j, -q} c_{2j+3, q}] \quad (5.15)$$

准动量 q 为 $2\pi/M$ 的整数倍, 求和式中 q 在一个周期内取值.

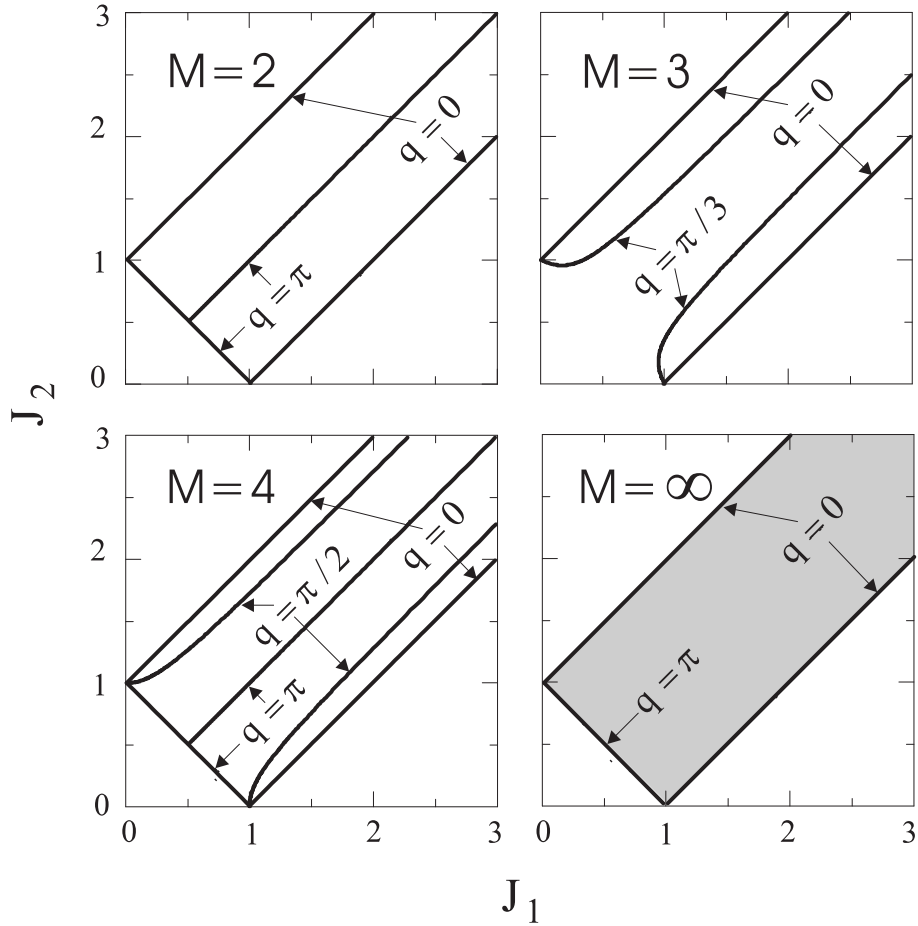


图 5.4: 多腿梯子模型的相图. 如图的每对相变线与一个准动量对应. 当梯子的腿趋向无穷大时, 各条临界线汇合成一个临界区域, 此时得到Kitaev模型在二维情况下的基态相图. 图中设 J_3 为单位一

当 q 不等于0或 π 时, $\frac{1}{\sqrt{2}}c_{j,q}$ 为费米子算符. 而当 q 等于0或 π 时, 傅立叶分量 $c_{j,0}$, $c_{j,\pi}$ 仍为Majorana费米子算符, 分别对应原来Majorana费米子算符的对称和反对称组合:

$$c_{j,0} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\alpha=1}^M c_{j,\alpha} \quad (5.16)$$

$$c_{j,\pi} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{\alpha=1}^M (-1)^\alpha c_{j,\alpha} \quad (5.17)$$

H_0 和 H_π 负责如四条腿梯子相图中的相变线. 准动量不等于0或 π 的一对 H_q 和 H_{-q} 则负责如图5.4中的一对二级相变的临界线.

这些临界线互不相交. 随着腿数目的增加, 临界线逐渐增多. 当 M 趋向无穷大时, 临界线将图5.4.(d)中的阴影部分填满, 使之成为一个临界区域, 相变只发生在临界区域的边界上. 我们知道图5.4.(d)就是二维Kitaev模型的相图. 在这里我们看到了准一维模型的相图是怎样连续过渡到二维模型的相图的.

对于有限条腿的梯子模型, 临界线划分出很多的相区. 其中每条相变线都可以找到一种拓扑序参数来刻画. 为此, 我们用两种Majorana费米子算符表示一对具有相反动量的费米子算符:

$$c_{j,q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{j,q} + ib_{j,q}) \quad (5.18)$$

$$c_{j,-q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{j,q} - ib_{j,q}) \quad (5.19)$$

哈密顿量成为,

$$H = \sum_{j,q} (H_{j,q}^a + H_{j,q}^a + H_{j,q}^a) \quad (5.20)$$

$$H_{j,q}^a = -i[J_1 a_{2j-1,q} a_{2j,q} + J_3 (-1)^j a_{2j,q} a_{2j+1,q} - J_2 (\cos q) a_{2j,q} a_{2j+3,q}]$$

$$H_{j,q}^b = -i[J_1 b_{2j-1,q} b_{2j,q} + J_3 (-1)^j b_{2j,q} b_{2j+1,q} - J_2 (\cos q) b_{2j,q} b_{2j+3,q}]$$

$$H_{j,q}^{ab} = -iJ_2 (\sin q) (a_{2j,q} b_{2j+3,q} - b_{2j,q} a_{2j+3,q})$$

如果满足(1) $J_2 \ll J_1, J_3$, 或者(2) $q \approx 0, \pi$, 我们可以把 $H_{j,q}^{ab}$ 当作小量而忽略. 于是, 系统退耦合为独立的两腿梯子模型. 与原先的梯子模型相比, 原来的 J_2 变成了这里的 $J_2 \cos q$. 相应地, 相变线为 $J_1 = J_3 - J_2 \cos q$. 当 q 从 π 变到0时, 它从 $J_1 = J_3 + J_2$ 绕 J_1 - J_2 平面中的(1,0)点逆时针转到 $J_1 = J_3 - J_2$, 这与真实的相变线在定性上是一致的, 并且在接近(1,0)处定量上一致. 当 $J_1 > J_3 - J_2 \cos q$ 时, 存在两种非零的弦状序参数

$$\Delta_q^a = \lim_{n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} a_{j,q} \rangle = \lim_{n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} \frac{c_{j,q} + c_{j,-q}}{\sqrt{2}} \rangle \quad (5.21)$$

$$\Delta_q^b = \lim_{n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} b_{j,q} \rangle = \lim_{n' \rightarrow \infty} \langle \prod_{j=2n+1}^{2n'} \frac{c_{j,q} - c_{j,-q}}{i\sqrt{2}} \rangle \quad (5.22)$$

这意味着, 发生在 $J_1 = J_3 - J_2 \cos q$ 处的相变由一个两分量的拓扑序参数(Δ_q^a, Δ_q^b)描写. 这是自然的, 因为一个复费米子算符对应两个Majorana费米子算符.

5.4 小结

通过将蜂窝构型变形到砖墙构型,不但为执行一维类型的约旦-维格纳变换提供了方便,还使我们能够将Kitaev模型进行推广,研究其有限尺寸的情形. 当在垂直梯子的方向取周期性边界条件时,有限条腿的自旋模型的基态磁通分布不光由块算符的取值决定,还取决于 D 算符, D 算符决定了通过由梯子腿围成的管子的磁通量. 在自旋模型的相图中不仅有二级量子相变,还有参数改变引起 D 改变的一级量子相变. 这种现象是由于有限尺寸效应造成的,当腿的数目无穷大时,基态唯一地由块算符决定. 固定一组得到零磁通分布的 D ,我们新的格点标记方式下分析了偶数条腿的Majorana费米子模型,它在二维收敛到取零磁通分布的Kitaev模型. 随着梯子腿的增加,相图中的量子临界线也随之增加. 最终这些临界线以不相交的方式填充了耦合参数满足三角形关系的区域,即得到了Kitaev模型的相图. 对四条腿的梯子模型,通过算符的重新组合它可以等价于两个梯子模型. 我们找到了一组拓扑序参数的严格表达式,它们可以用来表征不同相之间发生的量子相变和各个相的拓扑结构. 对于多条腿的情形,相图中的每条相变线都对应一种拓扑序参数. 通过在 J_2 很小情况下的分析,我们发现一般动量值标记的相变线对应一个二分量的拓扑序参数.

第六章 新参数下的Kitaev模型

在Kitaev模型中, 耦合参数在六边形基本单元中是对边相等的. 如果耦合类型保持不变, 而选取如图6.1的一组耦合参数, 这样的模型也是可以严格求解的. 模型将具有一些新的性质. 比如说建立在轮胎构型上的四条腿模型, 如果取通过每个六边形的磁通量为零, 则它具有二维Kitaev模型一样的相图, 并且其相图随着腿数目的增加发生显著的变化.

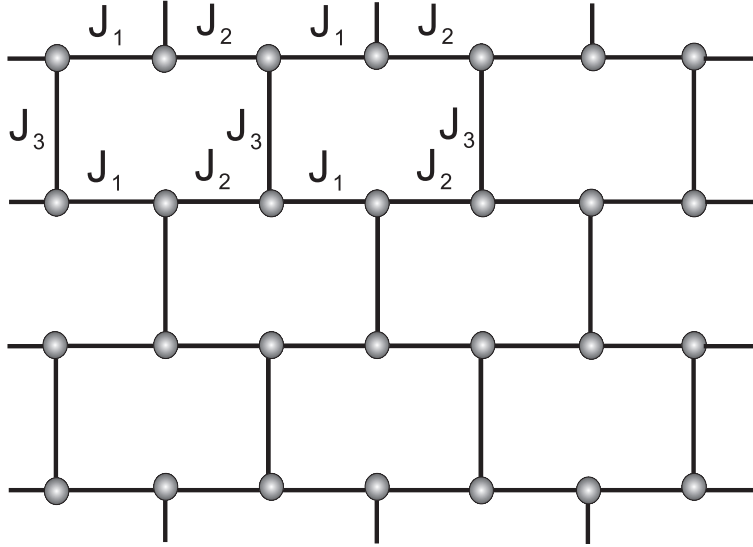


图 6.1: 新耦合参数的图示. 其中模型的相互作用形式不变.

新参数下的模型哈密顿量可以写为:

$$H = J_1 \sum_{n=odd} \sigma_{n,m}^x \sigma_{n+1,m}^x + J_2 \sum_{n=even} \sigma_{n+1,m}^y \sigma_{n+2,m}^y + J_3 \sum_{n+m=even} \sigma_{n,m}^z \sigma_{n,m+1}^z \quad (6.1)$$

经过与前面Kitaev模型一样的处理, 我们同样得到一个描写在 Z_2 场中运动的自由Majorana费米子的模型. 零磁通分布由下面的一组 Z_2 场确定:

$$D_{n,2m-1} = 1, \quad D_{n,2m} = -1 \quad (6.2)$$

于是自旋模型在这个希尔伯特空间的对角块中成为自由Majorana费米子模型. 其激发谱为:

$$E_k^\pm = \sqrt{|u_{\mathbf{k}}|^2 + J_3^2 \pm 2J_3|u_{\mathbf{k}}| \sin \frac{1}{2}k_2} \quad (6.3)$$

其中 $|u_{\mathbf{k}}| = \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1J_2 \cos k_1}$

$k_2 = 0$ 对应取 π 磁通分布的两腿梯子模型(其中基本单元从六角晶格变为正方晶格是由于垂直方向上的周期性边界条件). 此时激发谱存在一个最小的激发能隙 J_3 . 也就是说新参数下的梯子模型不存在量子相变.

进一步观察本征值的表达式发现, 当 $\sin \frac{1}{2}k_2 = 1$ 时, 根号下面的表达式可以配成完全平方的形式, 否则本征值对于任何耦合参数都取不到零. 也就是说如果动量 k_2 取不到 π 则系统的准粒子激发总是有能隙的(或者说准粒子是有质量的). 这样的情况发生在 M 为奇数时. 因为要使 j 对于 $k_2 = 2\pi j/M = \pi$ 有解 M 必须为偶数. 当然当 M 趋向无穷大时, k_2 可以取到非常接近 π 的值, 于是整个参数空间中最小的能隙趋向于零. 这一点可以从最小能隙的表达式看出来:

$$\Delta_{min} = J_3 \sin \frac{\pi}{2(2m+1)}, \quad (6.4)$$

其中 $2m+1 = M$.

下面我们来确定 k_2 能取到 π 的情况下, 要使系统具有无质量的准粒子参数之间应该满足的关系. 将激发谱根号下的表达式配成

$$(|u_{\mathbf{k}}| - J_3)^2 + 2J_3|u_{\mathbf{k}}|(1 - |\sin \frac{1}{2}k_2|), \quad (6.5)$$

要使它等于零, 当且仅当 $1 - |\sin \frac{1}{2}k_2|$ 和 $|u_{\mathbf{k}}| - J_3$ 同时为零. 前者由 $k_2 = \pi$ 保证, 后者定出参数之间应该满足的关系. 从 $|u_{\mathbf{k}}| - J_3 = 0$ 可以解得

$$\cos k_1 = \frac{J_3^2 - J_1^2 - J_2^2}{2J_1J_2} \quad (6.6)$$

这是三角形的余弦公式. J_1, J_2 和 J_3 分别对应三角形三条边的长度. 于是它们满足三角形关系: $J_1 + J_2 > J_3$, $|J_1 - J_2| < J_3$. 在这个参数区域内无能隙激发的模式为

$$(k_1, k_2) = (\pm \arccos \frac{J_3^2 - J_1^2 - J_2^2}{2J_1J_2}, \pi), \quad (6.7)$$

其中只有 k_1 是参数依赖的。) 由此可知, 当 N 取无穷大(即链长取热力学极限), 只要 M 为偶数或者无穷大系统的相图就如图2.4所示. 也就是说如果只是为了得到这样的相图, 并不一定要构建一个二维的Kitaev模型, 最少用4条链($M = 2$)就可以完成这样的任务. 这一点暗示着Kitaev的二维模型存在某种维数约化的性质. 关于维数约化的理论分析可以参看[60], 它指出对于具有 d 维类规范对称性的系统, 任何不保持规范不变性的局域量的平均值可以被从有效的 d 维理论求得的相应物理量限定. d 维类规范对称性成为有效理论的全局对称性. 参考文献[94]给出了一个呈现维数约化的实际物理系统, 通过分析一个BEC系统中临界温度关于约化磁场的临界指数, 发现随着温度的降低临界指数从三维约化到二维普适类. 维数约化现象也存在于各种物理模型中, 如超导阵列和阻错磁体中[73], 具有烧绿石结构的自旋模型中[95].

对于新耦合参数下的费米子模型, 我们可以形成这样一个物理图象: 随着 M 的增长, 系统在耦合参数空间中的相图发生交替的巨大变化. 当 M 为奇数时相图中不存在无能隙激发; 当 M 为偶数时, 相图中有一个有限的区域(由三角形关系确定), 在其中存在无能隙的激发. 这种分奇偶的性质与海森堡自旋梯子很类似[96]. 在那里梯子有奇数条腿时, 自旋激发是无能隙的; 反之, 如果梯子有偶数条腿时, 自旋激发就是有能隙的; 腿的数目趋向无穷大时, 模型成为二维的海森堡模型, 此时一般认为激发是无能隙的.

以上我们对一个新耦合参数下的模型进行了研究, 发现它的相图具有很强的系统尺度依赖. 其四条腿模型与二维Kitaev模型具有相同的相图, 也就是说Kitaev模型的相图不是二维模型独有的. 这一方面暗示了Kitaev模型具有维数约化的性质, 另一方面说明相图与系统的拓扑序没有直接的联系.

第七章 结语

本论文对Kitaev模型进行了系统的研究. 此研究之所以能够在这里顺利而清晰的展开得益于我们的一个有意思的发现, 就是这个二维模型经过一维约旦-维格纳变换后具有可严格求解的性质. 这个可严格求解性来自于哈密顿量中出现的守恒量, 它使得哈密顿量成为二次型. 每组守恒量标记了彼此独立的希尔伯特子空间. 同时守恒量与决定系统能量的磁通分布具有已知的多对一的关系. 这种多对一的关系告诉我们系统是多重简并的. 基态相图由在最佳磁通分布下的哈密顿量给出. 它在耦合参数空间由四个相区构成, 其中三个是有能隙相, 具有满足阿贝尔统计的拓扑激发; 还有一个是无能隙相, 在这个相区中拓扑激发满足非阿贝尔统计.

除了得到基态相图, 我们的求解方法在计算动力学自旋关联函数, 展示破坏时间反演项在无能隙相中打开一个能隙的作用, 表达各种对称性算符以及刻画拓扑激发等方面显示了很大的清晰和简洁的优点.

沿着从一到二再到无穷的思路, 本文具体分析了模型的一维形式, 两条腿的梯子构型和多条腿的梯子构型. 前两种情况下的模型分别与量子依辛模型和磁场中的 xy 模型对偶. 众所周知, 这两种模型中的量子相变可以用朗道的对称性破缺理论来描写. 但是在对偶前的模型中却找不到用以刻画相变的局域序参数. 我们找到了一种非局域的序参数, 它由一串算符连乘的期望值表达, 在相变点的一侧它不为零, 接近相变点时趋向于零, 并且在相变点的另一侧总为零. 在多腿梯子的情形, 还无法给出描写各条临界线的序参数的解析值, 但通过极限情况下的讨论, 我们给出了序参数的算符表达式, 其具体的值原则上可以通过数值的方法求解.

Kitaev模型在物理系统中的实现已经有了具体的方案. 鉴于它对拓扑量子计算和拓扑量子相变两大领域的重要性, 人们对它的兴趣日益增长, 在短时间内涌现了很多关于它的有意思的文章. 但还有很多问题有待解决. 与本文内容密切相关的一个问题就是, 如何刻画Kitaev模型中从有能隙相到无能隙相的拓扑量子相变.

附录 A 泡利算符

泡利算符是 $SU(2)$ 群二维不可约表示的生成元,满足以下对易关系:

$$[\sigma^\alpha, \sigma^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma \quad (\text{A.1})$$

其中 α, β 和 γ 代表一组 x, y 和 z . $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 是三阶完全反对称张量, 定义为 $\epsilon_{xyz} = 1$, 奇数次交换指标的顺序出一个负号.

同时,泡利算符是么正的厄米算符

$$(\sigma^\alpha)^\dagger = \sigma^\alpha, \quad (\sigma^\alpha)^2 = 1, \quad \alpha = x, y, z \quad (\text{A.2})$$

利用以上关系,我们还可以得到以下有用的关系式:

$$\{\sigma^\alpha, \sigma^\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta} \quad (\text{A.3})$$

$$\sigma^\alpha\sigma^\beta = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma^\gamma \quad (\text{A.4})$$

可以用三个二维无迹矩阵将泡利算符的三个分量表示出来:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

任何一个二维的无迹矩阵都可以表示成它们的实线性组合.

泡利算符满足自旋量子数为 $\frac{1}{2}$ 的算符的所有代数性质, 它们只相差一个系数:

$$s^\alpha = \frac{\hbar}{2}\sigma^\alpha \quad (\text{A.6})$$

所以可以方便的用泡利算符来表示自旋 $\frac{1}{2}$ 算符来进行运算.

附录 B 约旦-维格纳变换

约旦-维格纳变换是一种非局域的变换,它将具有不同统计性质的自旋算符与无自旋的费米子算符联系起来,其变换公式为:

$$\sigma_j^+ = 2a_j^\dagger K(j), \quad \sigma_j^z = 2a_j^\dagger a_j - 1 \quad (\text{B.1})$$

其中

$$K(j) \equiv \exp \left[i \frac{\pi}{2} \sum_{k=1}^{j-1} (\sigma_k^z + 1) \right] = \prod_{k=1}^{j-1} (1 - 2a_k^\dagger a_k) \quad (\text{B.2})$$

为非局域算符,具有厄米性 $K^\dagger(j) = K(j)$ 和么正性 $K^\dagger(j)K(j) = 1$,并且满足对易关系 $[K(i), K(j)] = 0$,以及与格点指标大于或等于 j 的自旋算符对易.它的作用是将格点数小于 j 的自旋绕自旋空间的 z 轴旋转 180° ,即同时翻转 x 方向和 y 方向的自旋.

下面证明由变换公式定义的 $a(a^\dagger)$ 算符满足费米子算符的代数关系.

不失一般性,假定 $k < j$,我们有

$$K^\dagger(j)\sigma_k^- K(j) = \exp \left(-i \frac{\pi}{2} \sigma_k^z \right) \sigma_k^- \exp \left(i \frac{\pi}{2} \sigma_k^z \right) = -\sigma_k^- \quad (\text{B.3})$$

第二个等号可以通过作用 z 表象的完备基矢 $|\pm\rangle$ 来验证.因为 $K^\dagger(j) = K(j)$,由上式可知,当 $k < j$ 时 $K(j)$ 与 σ_k^- 交换位置要出一个负号.

$$\begin{aligned} \{a_j, a_k\} &= \frac{1}{4} [\sigma_j^- K(j) \sigma_k^- K(k) + \sigma_k^- K(k) \sigma_j^- K(j)] \\ &= \frac{1}{4} [\sigma_k^-, \sigma_j^-] K(j) K(k) = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

上式对于 $k = j$ 时也成立.同理

$$\begin{aligned} \{a_j, a_k^\dagger\} &= \frac{1}{4} [\sigma_j^- K(j) \sigma_k^+ K(k) + \sigma_k^+ K(k) \sigma_j^- K(j)] \\ &= \frac{1}{4} [\sigma_k^+, \sigma_j^-] K(j) K(k) = \delta_{jk} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

上面两式就是费米子算符应该满足的反对易关系.

下面利用约旦-维格纳变换给出几个有用的等式

$$\sigma_j^x = \frac{1}{2}(\sigma_j^+ + \sigma_j^-) = (a_j^\dagger + a_j)K(j) \quad (\text{B.6})$$

$$\sigma_j^y = \frac{1}{2i}(\sigma_j^+ - \sigma_j^-) = -i(a_j^\dagger - a_j)K(j) \quad (\text{B.7})$$

$$\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x = (a_j^\dagger - a_j)(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) \quad (\text{B.8})$$

$$\sigma_j^y \sigma_{j+1}^y = -(a_j^\dagger + a_j)(a_{j+1}^\dagger - a_{j+1}) \quad (\text{B.9})$$

附录 C 动量空间重整化

重整化群的思想是利用物理系统在相变点上关联长度无穷大, 其作用量的形式在标度变换下保持不变. 在不稳定不动点附近, 标度变换使系统向所在相区的内部移动. 由此, 可以判断相变点和系统在目前参数选取下所处的相区, 而且由参数在重整化过程中的变化趋势可以定性的知道系统的低能行为.

动量空间重整化的处理对象是动量空间的生成泛函. 其中我们关心的作用量具有如下形式,

$$S = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Phi^\dagger(\omega, k) [i\omega - E(k)] \Phi(\omega, k) \quad (\text{C.1})$$

$E(k)$ 即为准粒子激发的能谱. 因为低能行为是重要的, 具体处理时将 $E(k)$ 在最小值处展开, Λ 是以最小值处的动量为中心的截断.

做重整化, 首先将一部分高频部分积掉. 因为作用量由自由场构成, 积分得到的常数可以被吸收到归一化系数里. 所得的有效作用量为

$$S' = \int_{-\Lambda'}^{\Lambda'} dk' \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \Phi'^\dagger(\omega', k') [i\omega' - E(k')] \Phi'(\omega', k') \quad (\text{C.2})$$

$$\Lambda' = \Lambda/s \quad (\text{C.3})$$

$$s = 1 + dl \quad (\text{C.4})$$

l 是跑动参数, dl 表示微小的增量.

接下来, 为了恢复积分限, 令 $k' = k/s$ 以及 $\omega' = \omega/s$, 并对场做如下标度,

$$\Phi' = s^{3/2} \Phi \quad (\text{C.5})$$

于是,

$$S = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Phi^\dagger(\omega, k) [i\omega - sE(k/s)] \Phi(\omega, k) \quad (\text{C.6})$$

为了让作用量保持不变, 最后要做的工作, 就是对能谱中的参数进行重整.

下面以一个具体的激发谱为例来说明如何得到重整化群方程,

$$E = \sqrt{J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 J_2 \cos k} \quad (\text{C.7})$$

当 $k = \pi$ 时它取到最小值. 以 π 为中心将 $\cos k$ 展开到二阶项,得

$$E = \sqrt{(J_1 - J_2)^2 + J_1 J_2 k^2} \quad (\text{C.8})$$

如果令重整化以后的参数 $[(J_1 - J_2)^2]' = (J_1 - J_2)^2 s^2$ 以及 $(J_1 J_2)' = J_1 J_2$ 就可以保证作用量的形式在重整化以后保持原来的形式.

这样我们就得到一组重整化群方程,

$$\frac{d}{dl} \ln |J_1 - J_2| = 1 \quad (\text{C.9})$$

$$\frac{d}{dl} (J_1 J_2) = 0 \quad (\text{C.10})$$

方程的解是跑动参数 l 的函数,从中我们就能够知道耦合强度 J_1 和 J_2 在重整化过程中的变化趋势. 在正文中有对这组重整化群方程的解的具体分析.

附录 D 对偶变换

考虑一条自旋量子数为二分之一的自旋链 $\{1, 2, \dots, M\}$. 对偶变换就是通过么正变换将这个系统的一个状态映射成对偶空间 $\{1 + \frac{1}{2}, 2 + \frac{1}{2}, \dots, M + \frac{1}{2}\}$ 的一个状态.

在原始空间中定义基矢:

$$|+\rangle_j^x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_j^z + |-\rangle_j^z), \quad |-\rangle_j^x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_j^z - |-\rangle_j^z) \quad (\text{D.1})$$

其中 $|\pm\rangle_j^z$ 是z表象下的标准基矢.

用 $c_j = \pm 1$ 构造集合 $c = \{c_j | j = 1, \dots, M\}$, 并且定义

$$|c\rangle^x = \bigotimes_{j=1}^M |c_j\rangle_j^x \quad (\text{D.2})$$

定义对偶空间中的基矢

$$|c^*\rangle^z = \bigotimes_{j=1}^M |c_{j+\frac{1}{2}}^*\rangle_{j+\frac{1}{2}}^z, \quad c_{j+\frac{1}{2}}^* = \prod_{k=1}^j c_k \quad (\text{D.3})$$

原始空间与对偶空间的状态由下面的变换联系起来

$$\tilde{D} \sum_c \varphi_c |c\rangle^x = \sum_c \varphi_c |c^*\rangle^z \quad (\text{D.4})$$

其中 φ_c 为任意使状态归一的复数. 等式的左右各自作用它们的共轭, 由于 φ_c 是任意的, 可得 $\tilde{D}^\dagger \tilde{D} = 1$, 即这样定义的变换 \tilde{D} 是么正的.

对偶变换则为

$$D = \tilde{D} \exp \left[i \frac{\pi}{4} \sum_{j=1}^M \sigma_j^x \right] \quad (\text{D.5})$$

显然这是一个么正变换.

用泡利矩阵表示的自旋算符有以下变换性质

$$D\sigma_j^x D^{-1} = \sigma_{j-\frac{1}{2}}^z \sigma_{j+\frac{1}{2}}^z \quad (\text{D.6})$$

$$D\sigma_j^z D^{-1} = \prod_{k=j}^M \sigma_{k+\frac{1}{2}}^x \quad (\text{D.7})$$

$$D^{-1}\sigma_{j+\frac{1}{2}}^x D = \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \quad (\text{D.8})$$

$$D^{-1}\sigma_{j+\frac{1}{2}}^z D = \prod_{k=1}^j \sigma_k^x \quad (\text{D.9})$$

其中 $j = 1$ 时 $D\sigma_1^x D^{-1} = \sigma_{\frac{3}{2}}^z$, $j = M$ 时 $D^{-1}\sigma_{M+\frac{1}{2}}^x D = \sigma_M^z$. 对 σ^y 的变换可以利用恒等式 $\sigma^y = -i\sigma^z\sigma^x$.

下面是对第四个等式的验证

$$\begin{aligned} D^{-1}\sigma_{j+\frac{1}{2}}^z D|c\rangle^x &= D^{-1}\sigma_{j+\frac{1}{2}}^z \exp\left[i\frac{\pi}{4}\sum_{k=1}^M c_k\right]|c^*\rangle^z \\ &= \exp\left[-i\frac{\pi}{4}\sum_{j=1}^M \sigma_j^x\right] \tilde{D}^\dagger \exp\left[i\frac{\pi}{4}\sum_{k=1}^M c_k\right] c_{j+\frac{1}{2}}^* |c^*\rangle^z \\ &= \exp\left[-i\frac{\pi}{4}\sum_{j=1}^M c_j\right] \exp\left[i\frac{\pi}{4}\sum_{k=1}^M c_k\right] \prod_{k=1}^j c_k |c\rangle^x \\ &= \prod_{k=1}^j \sigma_k |c\rangle^x \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

因为 $|c\rangle^x$ 是任意基矢, 所以等式成立.

附录 E 转移矩阵方法计算拓扑序参数

本文中指的拓扑序参数具有如下形式：

$$\langle A_{i,i+1}A_{i+2,i+3}A_{i+4,i+5} \cdots A_{j,j+1} \rangle \quad (\text{E.1})$$

其中 $\langle \dots \rangle$ 表示真空期望值. $A_{i,i+1}$ 为某种算符对, 例如 $c_i c_{i+1}$ (c 为Majorana费米子算符). j 远大于 i , 也就是说这是一个无穷长串算符的期望值.

计算这种串状算符的期望值, 可以用Wick定理将其表示成Pfaffins, 然后求解特殊行列式在无穷维数极限下的渐近值[92]. 这种解析计算过程是相当复杂的. 下面我们提供一种新的求解方案, 它特别适合数值计算.

假定我们关心的物理系统可以用以下形式的哈密顿量描述,

$$H = \sum_i h_{i,i+1} \quad (\text{E.2})$$

取周期性边界条件, 求和式包含 N 项. 它的配分函数可以表示成

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \text{Tr}(V_1 V_2)^M + O(\epsilon^2) \quad (\text{E.3})$$

其中 $\epsilon = \beta/M$ 为无穷小量, $V_{1(2)} = \prod_{i \in \text{odd}(\text{even})} e^{-\epsilon h_{i,i+1}} = \prod_{i \in \text{odd}(\text{even})} v^{i,i+1}$.

在每个 V 之间插入一组完备基, 配分函数变成,

$$Z = \sum_{\{s_k^i\}} \langle s_1^1 \cdots s_1^N | V_1 | s_2^1 \cdots s_2^N \rangle \langle s_2^1 \cdots s_2^N | V_2 | s_3^1 \cdots s_3^N \rangle \cdots \langle s_{2M-1}^1 \cdots s_{2M-1}^N | V_1 | s_{2M}^1 \cdots s_{2M}^N \rangle \langle s_{2M}^1 \cdots s_{2M}^N | V_2 | s_1^1 \cdots s_1^N \rangle \quad (\text{E.4})$$

定义 $v_{k,k+1}^{i,i+1} = \langle s_k^i s_{k+1}^{i+1} | v^{i,i+1} | s_{k+1}^i s_{k+1}^{i+1} \rangle$, 则

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{s_k^i\}} (v_{1,2}^{1,2} v_{1,2}^{3,4} \cdots v_{1,2}^{N-1,N}) (v_{2,3}^{2,3} v_{2,3}^{4,5} \cdots v_{2,3}^{N,1}) \cdots \\
&\quad (v_{2M-1,2M}^{1,2} v_{2M-1,2M}^{3,4} \cdots v_{2M-1,2M}^{N-1,N}) (v_{2M,1}^{2,3} v_{2M,1}^{4,5} \cdots v_{2M,1}^{N,1}) \\
&= \sum_{\{s_k^i\}} (v_{1,2}^{1,2} v_{3,4}^{1,2} \cdots v_{2M-1,2M}^{1,2}) (v_{2,3}^{2,3} v_{4,5}^{2,3} \cdots v_{2M,1}^{2,3}) \cdots \\
&\quad (v_{1,2}^{N-1,N} v_{3,4}^{N-1,N} \cdots v_{2M-1,2M}^{N-1,N}) (v_{2,3}^{N,1} v_{4,5}^{N,1} \cdots v_{2M,1}^{N,1}) \\
&= \sum_{\{s_k^i\}} \langle s_1^1 \cdots s_{2M}^1 | T_1 | s_1^2 \cdots s_{2M}^2 \rangle \langle s_1^2 \cdots s_{2M}^2 | T_2 | s_1^3 \cdots s_{2M}^3 \rangle \cdots \\
&\quad \langle s_1^{N-1} \cdots s_{2M}^{N-1} | T_1 | s_1^N \cdots s_{2M}^N \rangle \langle s_1^N \cdots s_{2M}^N | T_2 | s_1^1 \cdots s_{2M}^1 \rangle \\
&= \text{Tr}(T_1 T_2)^{N/2} = \text{Tr}(T_M)^{N/2} \tag{E.5}
\end{aligned}$$

其中 $T_{1(2)} = \prod_{k \in \text{odd}(\text{even})} \tau_{k,k+1}$, 而 $\tau_{k,k+1}$ 由下式定义,

$$\langle s_k^i s_{k+1}^i | \tau_{k,k+1} | s_k^{i+1} s_{k+1}^{i+1} \rangle = \langle s_k^i s_k^{i+1} | v^{i,i+1} | s_{k+1}^i s_{k+1}^{i+1} \rangle \tag{E.6}$$

我们知道通过配分函数可以求各种热力学量,例如自由能密度 $F = -\frac{1}{\beta N} \ln Z$. 在热力学极限下(即 $N \rightarrow \infty$), $F = -\frac{\ln \lambda_{max}}{2\beta}$, λ_{max} 为 T_M 的最大本征值(假设它不简并).

对于, 我们关心的量

$$\begin{aligned}
&\text{Tr}(A_{i,i+1} A_{i+2,i+3} A_{i+4,i+5} \cdots A_{j,j+1} e^{-\beta H}) \\
&= \sum_{\{s_k^i\}} \langle s_1^1 \cdots s_1^N | A_{i,i+1} \cdots A_{j,j+1} V_1 | s_2^1 \cdots s_2^N \rangle \langle s_2^1 \cdots s_2^N | V_2 | s_3^1 \cdots s_3^N \rangle \\
&\quad \cdots \langle s_{2M-1}^1 \cdots s_{2M-1}^N | V_1 | s_{2M}^1 \cdots s_{2M}^N \rangle \langle s_{2M}^1 \cdots s_{2M}^N | V_2 | s_1^1 \cdots s_1^N \rangle \\
&= \sum_{\{s_k^i\}} (v_{1,2}^{1,2} v_{1,2}^{3,4} \cdots \tilde{v}_{1,2}^{i,i+1} \tilde{v}_{1,2}^{i+2,i+3} \cdots \tilde{v}_{1,2}^{j,j+1} \cdots v_{1,2}^{N-1,N}) (v_{2,3}^{2,3} v_{2,3}^{4,5} \cdots v_{2,3}^{N,1}) \\
&\quad \cdots (v_{2M-1,2M}^{1,2} v_{2M-1,2M}^{3,4} \cdots v_{2M-1,2M}^{N-1,N}) (v_{2M,1}^{2,3} v_{2M,1}^{4,5} \cdots v_{2M,1}^{N,1}) \\
&= \sum_{\{s_k^i\}} (v_{1,2}^{1,2} v_{3,4}^{1,2} \cdots v_{2M-1,2M}^{1,2}) (v_{2,3}^{2,3} v_{4,5}^{2,3} \cdots v_{2M,1}^{2,3}) \\
&\quad \cdots (\tilde{v}_{1,2}^{i,i+1} v_{3,4}^{i,i+1} \cdots v_{2M-1,2M}^{i,i+1}) (v_{2,3}^{i+1,i+2} v_{4,5}^{i+1,i+2} \cdots v_{2M,1}^{i+1,i+2}) \\
&\quad \cdots (\tilde{v}_{1,2}^{j,j+1} v_{3,4}^{j,j+1} \cdots v_{2M-1,2M}^{j,j+1}) (v_{2,3}^{j+1,j+2} v_{4,5}^{j+1,j+2} \cdots v_{2M,1}^{j+1,j+2}) \\
&\quad \cdots (v_{1,2}^{N-1,N} v_{3,4}^{N-1,N} \cdots v_{2M-1,2M}^{N-1,N}) (v_{2,3}^{N,1} v_{4,5}^{N,1} \cdots v_{2M,1}^{N,1}) \\
&= \text{Tr}(\tilde{T}_M^{(j-i)/2+1} T_M^{[N-(j-i)]/2-1}) \tag{E.7}
\end{aligned}$$

于是,拓扑序参数

$$\begin{aligned} & \langle A_{i,i+1} A_{i+2,i+3} A_{i+4,i+5} \cdots A_{j,j+1} \rangle \\ &= \langle \tilde{\Psi}_R^{max} | \Psi_L^{max} \rangle \langle \Psi_R^{max} | \tilde{\Psi}_L^{max} \rangle \left(\frac{\tilde{\lambda}_{max}}{\lambda_{max}} \right)^{(j-i)/2+1} \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

其中 $j-i$ 取作无穷大,上面式子中出现的 $\tilde{v}_{1,2}^{i,i+1} = \langle s_1^i s_1^{i+1} | A_{i,i+1} v^{i,i+1} | s_2^i s_2^{i+1} \rangle$,其它带弯弯的符号定义如前.

从拓扑序参数表达式可以看到,它不为零要求:(1)带弯弯和不带弯弯的最大本征值对应的波函数重叠积分不为零,并且(2) $\tilde{\lambda}_{max} = \lambda_{max}$ (从期望值不发散可以知道 $\tilde{\lambda}_{max}$ 总是不大于 λ_{max}).

附录 F Majorana费米子基态的 π 磁通条件

Lieb证明了一条关于磁通与电子系统能量的定理. 定理说对于在一个方向具有周期性和反射对称性的正方双格子(bipartite square lattice)中跳跃的电子系统, 电子占据数为半满时,由磁通决定的系统最低能量是每个单位正方形通过一个大小为 π 的磁通. 由于证明方法的优点, 这个定理适用于有限温,还可以加入某些有意义的相互作用. 一个六角格点可以看作两个正方格点衔接而成, 于是这个定理用于六角格点系统时每个六边形通过零个磁通为最小能量情形. 但Kitaev模型并不满足定理成立的条件, 首先这是一个Majorana费米子系统, 如果将其映射到无自旋的电子系统, 在这个系统中有电子的超导配对, 也就是说电子数是不守恒的. 而Lieb的证明只对于纯粹的电子跳跃,而且要求电子数为半满填充. 另外, Kitaev模型不具有反射对称性. 那么,在这种情形下, 能量最优化的磁通条件是什么呢? 我们论证每个六边形通过零个磁通是能量最低的状态.

首先我们证明在Lieb的定理中将电子换成Majorana费米子其仍然成立. 证明的过程沿用Lieb的思路, 并且为了增加可参照性符号将尽量地保持一致.

我们关心的跳跃项具有如下形式,

$$K = -i \sum_{\langle xy \rangle} t_{xy} c_x c_y \quad (\text{F.1})$$

其中 c 是Majorana费米子算符满足反对易关系: $\{c_x, c_y\} = 2\delta_{xy}$, $\langle \dots \rangle$ 表示近邻跳跃. 由跳跃项的厄米性: $K^\dagger = K$ 得跳跃矩阵元 t_{xy} 为实数, 并且 $t_{yx} = -t_{xy}$.

哈密顿量可以表示为,

$$H = H_L + H_R + H_{int} \quad (\text{F.2})$$

其中 H_{int} 为割线通过的作用项, 而 H_L 和 H_R 分别处于割线的左边和右边(关于割线的表示请参看Lieb的文章[75]).

构造复合算符 Θ 使得 $\Theta(A) = [R(A)]^*$. 其中 A 为任意作用项, R 为作用在算符上的关于割线地几何反射, $*$ 为作用在数上的复共轭. 它具有一些有用的性质: $\Theta^2 = 1$, $\Theta(AB) = \Theta(A)\Theta(B)$, $\Theta(K_L) = -R(K_L)$. 最后一式的负号来自于复共轭操作. 可以证明下面的不等式成立,

$$Z(H_L, H_R)^2 \leq Z(H_L, \Theta(H_L))Z(\Theta(H_R), H_R) \quad (\text{F.3})$$

其中 $Z(H_1, H_2) \equiv \text{Tr} \exp [H_1 + H_2 + H_{int}]$ 为配分函数.

证明: 利用Trotter分解公式, 让 M 足够大使得 $\epsilon \equiv \beta/M$ 趋向于零, 于是 $\exp [-\beta H] = V^M$, $V = V_{int} V_L V_R$, 其中 $V_{int} = 1 - \epsilon H_{int}$, $V_L = \exp [-\epsilon H_L]$, $V_R = \exp [-\epsilon H_R]$. 将 V_{int} 中的各项乘开, V^M 可以表示成求和形式, 求和式中的每一项都可以表示成: $X = a_1 V_L V_R a_2 V_L V_R \cdots a_M V_L V_R$, 其中 a_m 或者为1或者为 $it_{lr} c_l c_r$, 如果有别的相互作用项, 只要可以表示成 $A_L \Theta(A_L)$ 的形式就不影响证明, t_{lr} 为割线经过的跳跃矩阵元 (l 表示割线的左邻, r 为右邻), 可以通过选取规范使得每个 t_{lr} 都大于零.

可以通过移动 c_{l_m} 将 X 中的算符左右分离.(移动过程中保持左边或者右边算符的相对位置不变.) 对配分函数有贡献的 X 必须包含偶数(比如 $2J$) 个 $c_l (c_r)$, 因为奇数个Majorana费米子算符的期望值必为零. 需要移动的次数为 $\sum_{m=0}^{2J-1} m$, 每次移动产生一个负号, 再加上 $2J$ 个 i 提供的 J 个负号, 总共产生 $2J^2$ 个负号. 于是, $X = X_L X_R$, $X_L = \sqrt{t} (f_{l_1} V_L f_{l_2} V_L \cdots f_{l_M} V_L)$, $X_R = \sqrt{t} (f_{r_1} V_R f_{r_2} V_R \cdots f_{r_M} V_R)$, f 表示1或者 c , t 为大于零的系数来自于跳跃矩阵元的连乘.

用 α 标记不同的 X , $Z(H_L, H_R)^2 = |\sum_{\alpha} \text{Tr} X^{\alpha}|^2 = 2^{-2N} |\sum_{\alpha} \text{Tr} X_L^{\alpha} \text{Tr} X_R^{\alpha}|^2$. 其中因子 2^{-2N} 用于约去对直积空间求迹带来的冗余 (N 为系统总的格点数). 根据Cauchy-Schwarz不定式: $|\sum_{\alpha} \text{Tr} (X_L^{\alpha} X_R^{\alpha})|^2 \leq \sum_{\alpha} |\text{Tr} X_L^{\alpha}|^2 \sum_{\alpha} |\text{Tr} X_R^{\alpha}|^2$. 又因为 $\text{Tr} \Theta(X_L) = (\text{Tr} X_L)^*$, 则 $Z(H_L, \Theta(H_L)) = \sum_{\alpha} \text{Tr} X_L^{\alpha} \Theta(X_L^{\alpha}) = 2^{-N} \sum_{\alpha} |\text{Tr} X_L^{\alpha}|^2$, $Z(\Theta(H_R), H_R) = \sum_{\alpha} \text{Tr} \Theta(X_R^{\alpha}) X_R^{\alpha} = 2^{-N} \sum_{\alpha} |\text{Tr} X_R^{\alpha}|^2$. 于是 $Z(H_L, H_R)^2 \leq Z(H_L, \Theta(H_L)) Z(\Theta(H_R), H_R)$. 命题得证.

对于跳跃矩阵的绝对值 $|T| = \{|t_{xy}|\}$ 具有反射对称性的系统, 可以令 $H_R = \Theta(H_L)$, 此时系统的配分函数取到最大值. 结合 $K_R = \Theta(K_L)$ 和 $\Theta(K_L) = -R(K_L)$, 能量最优化条件要求 $K_R = -R(K_L)$, 它意味通过割线经过的单位正方形的磁通为: $-\pi/2 + \varphi_r + \pi/2 + (-\varphi_r + \pi) = \pi$. 如果对于每一个位置的分割, 系统都具有反射对称性, 则能量最低的磁通条件是通过每个单位正方形的磁通量都为 π (对于六角晶格为0).

至此, 我们证明了能量最优化的 π 磁通条件适用于在一个方向具有周期性和反射对称性的正方双格子中跳跃的Majorana费米子系统. 一般情况下Kitaev模型的跳跃矩阵不具有反射对称性, 只当 $J_1 = J_2$ 时模型具有反射对称性. 此时系统的基态要求通过每个单位六边形的磁通为零. 连续地改变 J_2 , 系统的能量也将随之连续的变化. 而对于Majorana费米子磁通的改变只能是以 π 为单位的, 改

变磁通引起的能量改变也将是不连续的,并且大于零,不然与 $J_1 = J_2$ 时系统的基态是零磁通矛盾. 因此 J_2 的改变不会造成磁通的变化. 于是我们得出结论: 对于Kitaev模型,系统的基态要求通过每个单位六边形的磁通为零.

参考文献

- [1] J.C.Slater. Quantum theory of matter. *McGraw-Hill, New York*, 1968.
- [2] P.W.Anderson. More is different. *Science*, 177:393, 1972.
- [3] K.S.Novoselov et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in grapheme. *Nature*, 438:197, 2005.
- [4] D.C. Tsui, H.L. Stormer, and A.C. Gossard. Two-dimensional magneto-transport in the extreme quantum limit. *Phys.Rev.Lett.*, 48:1559, 1982.
- [5] R.B.Laughlin and David Pines. The theory of everything. *PNAS*, 97:28, 2000.
- [6] M.Levin and X.G.Wen. Photons and electrons as emergent phenomena. *Rev.Mod.Phys.*, 77:871, 2005.
- [7] Bardeen, Cooper, and Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys.Rev.*, 108:1175, 1957.
- [8] L.D.Laudau and E.M.Lifshitz. Statistical physics part 1, 3rd edition. *re-pinted by Beijing World Publishing Corporation*, 1999.
- [9] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys.Rev.*, 65:117, 1944.
- [10] John A. Hertz. Quantum critical phenomena. *Phys.Rev.B*, 14:1165, 1976.
- [11] D.Belitz and T.R.Kirkpatrick. Why quantum phase transitions are interesting. *cond-mat/010679*, 2001.
- [12] S.L.Sondhi et al. Continuous quantum phase transitions. *Rev.Mod.Phys.*, 69:315, 1997.

-
- [13] Subir Sachdev. quantum phase transitions. *Cambridge university press*, 1999.
- [14] Angela Kopp and Sudip Chakravarty. Criticality in correlated quantum matter. *Nature physics*, 1:63, 2005.
- [15] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. Roy.Soc.(London)*, 276:238, 1963.
- [16] Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. iii. an improved solution. *Proc. Roy.Soc.(London)*, 281:401, 1964.
- [17] H. Fukuyama and H. Kohno. The spin gap and extended t-j model. *Physica C*, 124:282, 1997.
- [18] R.M.Bradley and S.Doniach. Quantum fluctuations in chains of josephson junctions. *Phys.Rev.B*, 30:1138, 1984.
- [19] J.Orenstein and A.J.Millis. Advances in the physics of high-temperature superconductivity. *SCIENCE*, 288:468, 2000.
- [20] Markus Greiner et al. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415:39, 2002.
- [21] Matthew P.A.Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 40:546, 1989.
- [22] J.Goldstone. Broken symmetries. *Phys. Rev.*, 127:965, 1962.
- [23] Mermin N.D. and Wagner H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev.Lett.*, 17:1133, 1966.
- [24] Ben Simons. Phase transitions and collective phenomena. 1966.
- [25] Tom Kennedy and Hal Tasaki. Hidden $z_2 \times z_2$ symmetry breaking in haldane-gap antiferromagnets. *Phys. Rev.B*, 45:304, 1992.

-
- [26] X.G. Wen. Topological orders and chern-simons theory in strongly correlated quantum liquid. *Int. J. Mod. Phys. B*, 5:1641, 1991.
- [27] X.G. Wen. Continuous topological phase transitions between clean quantum hall states. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3950, 2000.
- [28] X.G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee. Chiral spin states and superconductivity. *Phys. Rev. B*, 39:11413, 1989.
- [29] X.G. Wen. Vacuum degeneracy of chiral spin states in compactified space. *Phys. Rev. B*, 40:7387, 1989.
- [30] D. Arovas et al. Fractional statistics and the quantum hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 53:722, 1984.
- [31] X.G. Wen. Theory of the edge states in fractional quantum hall effects. *Int. J. Mod. Phys. B*, 6:1711, 1992.
- [32] Alexei Kitaev and John Preskill. Topological entanglement entropy. *Phys. Rev. Lett.*, 96:110404, 2006.
- [33] A.J. Heeger et al. Solitons in conducting polymers. *Rev. Mod. Phys.*, 60:781, 1988.
- [34] W. K. Wootters and W. H. Zurek. A single quantum cannot be cloned. *Nature*, 299:802, 1982.
- [35] Peter W. Shor. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. *Phys. Rev. A*, 52:R2493, 1995.
- [36] D.P. DiVincenzo and Peter W. Shor. Fault-tolerant error correction with efficient quantum codes. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3260, 1996.
- [37] J. Preskill. Reliable quantum computers. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 454:385, 1998.
- [38] J. Preskill. Lecture notes for physics 219: Quantum computation. 2004.

-
- [39] D.A.Ivanov. Non-abelian statistics of half-quantum vortices in p-wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 86:268, 2001.
- [40] P. Bonderson et al. Probing non-abelian statistics with quasiparticle interferometry. *Phys. Rev. Lett.*, 97:016401, 2006.
- [41] G. Moore and N. Read. Nonabelions in the fractional quantum hall effect. *Nucl. Phys. B*, 360:362, 1991.
- [42] Sankar Das Sarma et al. Topological quantum computation. *Physics Today*, 32, July 2006.
- [43] J.S.Xia et al. Electron correlation in the second landau level: A competition between many nearly degenerate quantum phases. *Phys. Rev. Lett.*, 93:176809, 2004.
- [44] A. Kitaev. Anyons in an exactly solved model and beyond. *Ann. Phys.*, 321:2, 2006.
- [45] A. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Ann. Phys.*, 303:2, 2003.
- [46] H. Stormer, D. Tsui, and A. Gossard. The fractional quantum hall effect. *Rev. Mod. Phys.*, 71:s298, 1999.
- [47] X.Y. Feng, G.M. Zhang, and T. Xiang. Topological characterization of quantum phase transitions in a spin=1/2 model. *Phys. Rev. Lett.*, 98:087204, 2007.
- [48] Han-Dong Chen and Zohar Nussinov. Exact results on the kitaev model on a hexagonal lattice: spin states, string and brane correlators, and anyonic excitations. *cond-mat/0703633*, 2007.
- [49] Jiannis K. Pachos. The wavefunction of an anyon. *quantum-ph/0605068*, 2006.
- [50] D.H.Lee, G.M.Zhang, and T. Xiang. Edge soliton and charge fractionalization in a topological band insulator in two dimensions. *unpublished*, 2007.

-
- [51] G.Baskaran, Saptarshi Mandal, and R. Shankar. Exact results for spin dynamics and fractionization in the kitaev model. *cond-mat/0611547*, 2007.
- [52] H. Yao and S. A. Kivelson. An exact chiral spin liquid with non-abelian anyons. *unpublished*.
- [53] S. Yang, D.L.Zhou, and C.P.Sun. Mosaic spin models for topological orders. *cond-mat/0708.0676*, 2007.
- [54] Jeroen van den Brink. Orbital-only models: ordering and excitations. *New Journal of Physics*, 6:201, 2004.
- [55] L-M Duan, E.Demler, and M.D.Lukin. Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 91:090402, 2003.
- [56] A.Micheli, G.K.Brennen, and P.Zoller. A toolbox for lattice-spin models with polar molecules. *Nature Physics*, 2:341, 2006.
- [57] B. Doucot et al. Protected qubits and chern-simons theories in josephson junction arrays. *Phys. Rev. B*, 71:024505, 2005.
- [58] L.B.loffe and M.V.Feigel'man. Possible realization of an ideal quantum computer in josephson junction array. *Phys. Rev. B*, 66:224503, 2005.
- [59] Zohar Nussinov and Eduardo Fradkin. Discrete sliding symmetries, dualities, and self-dualities of quantum orbital compass models and $p + ip$ superconducting arrays. *Phys. Rev. B*, 71:195120, 2005.
- [60] C.D.Batista and Zohar Nussinov. Generalized elitzur's theorem and dimensional reductions. *Phys. Rev. B*, 72:045137, 2005.
- [61] Zohar Nussinov and Gerardo Ortiz. A symmetry principle for topological quantum order. *cond-mat/0702377*, 2007.
- [62] R.Moessner and J.T.Chalker. Properties of a classical spin liquid: The heisenberg pyrochlore antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 80:2929, 1998.

-
- [63] R.Moessner and J.T.Chalker. Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 58:12049, 1998.
- [64] R.Moessner. Magnets with strong geometric frustration. *Can. J. Phys.*, 79:1283, 2001.
- [65] J.Villain et al. Order as an effect of disorder. *Journal de Physique*, 41:1263, 1998.
- [66] E.F.Shender. Anti-ferromagnetic garnets with fluctuationally interacting sub-lattices. *Sov. Phys. JETP*, 56:178, 1982.
- [67] P. Jordan and E. Wigner. The pauli exclusion principle. *Z.Phys.*, 47:631, 1928.
- [68] Tchernyshyov et al. Bond order from disorder in the planar pyrochlore magnet. *Phys. Rev. B*, 68:144422, 2003.
- [69] C. D. Batista and S. A. Trugman. Exact ground states of a frustrated 2d magnet: Deconfined fractional excitations at a first-order quantum phase transition. *Phys. Rev. Lett.*, 93:217202, 2004.
- [70] A. B. Harris et al. Unusual symmetries in the kugel-khomskii hamiltonian. *Phys. Rev. Lett.*, 91:087206, 2003.
- [71] Z. Nussinov et al. Orbital order in classical models of transition-metal compounds. *Europhys. Lett.*, 67:990, 2004.
- [72] Cenke Xu and J. E. Moore. Strong-weak coupling self-duality in the two-dimensional quantum phase transition of $p + ip$ superconducting arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 93:047003, 2004.
- [73] Cenke Xu and J. E. Moore. Dimensional reduction in superconducting arrays and frustrated magnets. *cond-mat/0405271*, 2004.
- [74] Zohar Nussinov and Gerardo Ortiz. Sufficient symmetry conditions for topological quantum order. *cond-mat/0605316*, 2006.

-
- [75] E.H.Lieb. Flux phase of the half-filled band. *Phys. Rev. Lett.*, 73:2158, 1994.
- [76] C.Nayak and F.Wilczek. $2n$ quasi-hole states realize 2^{n-1} -dimensional spinor braiding statistics in paired quantum hall states. *Nucl. Phys. B*, 479:529, 1996.
- [77] Sankar Das Sarma et al. Topologically protected qubits from a possible non-abelian fractional quantum hall state. *Phys. Rev. Lett.*, 94:166802, 2003.
- [78] R.Shankar. Renormalization-group approach to interacting fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 66:129, 1994.
- [79] M. Kohmoto, M. den Nijs, and L. P. Kadanoff. Hamiltonian studies of the $d=2$ ashkin-teller model. *Phys. Rev. B*, 24:5229, 1981.
- [80] M. Kohmoto and H.Tasaki. Hidden $z_2 \times z_2$ symmetry breaking and the haldane phase in the $s=1/2$ quantum spin chain with bond alternation. *Phys. Rev. B*, 46:3486, 1992.
- [81] P.Pfeuty. The one-dimensional ising model with a transverse field. *Ann. of Phys.*, 57:79, 1970.
- [82] C.N.Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Phy. Rev.*, 85:808, 1952.
- [83] John B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, 51:659, 1979.
- [84] G.E.Volovik. Momentum space topology and quantum phase transitions. *cond-mat/0505089*, 2006.
- [85] N.D.Mermin. The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.*, 51:591, 1979.
- [86] Grigory E. Volovik. The universe in a helium droplet. *Clarendon Press, Oxford*, 2003.

-
- [87] F. J. Wegner. Duality in generalized ising models and phase transitions without local order parameters. *J. of Math. Phys.*, 12:2259, 1971.
- [88] B.I.Halperin. Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential. *Phys.Rev.B*, 25:2185, 1982.
- [89] Ludwig Bartels et al. Stm observations of a one-dimensional electronic edge state at step on cu(111). *Phys.Rev.B*, 67:205416, 2003.
- [90] Kyoko Nakada et al. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Phys.Rev.B*, 54:17954, 1996.
- [91] Robert Savit. Duality in field theory and statistical systems. *Rev.Mod.Phys.*, 52:453, 1980.
- [92] Eytan Barouch and Barry M.McCoy. Statistical mechanics of the xy model.ii.spin-correlation functions. *Phys. Rev. A*, 3:786, 1971.
- [93] Jeffrey Goldstone and Frank Wilczek. Fractional quantum numbers on solitons. *Phys. Rev. Lett.*, 47:986, 1981.
- [94] S.E.Sebastian et al. Dimensional reduction at a quantum critical point. *Nature*, 441:617, 2006.
- [95] Z.Nussinov et al. High-dimensional fractionalization and spinon deconfinement in pyrochlore antiferromagnets. *cond-mat/0602528*, 2006.
- [96] Elbio Dagotto and T. M. Rice. Surprises on the way from one- to two-dimensional quantum magnets: The ladder materials. *Science*, 271:618, 1996.

发表文章目录

- [1] Xiao-Yong Feng, Guang-Ming Zhang and Tao Xiang, *Topological characterization of quantum phase transitions in a $S=1/2$ spin model*, Phys. Rev. Lett. **98**, 087204 (2007);
- [2] Xiao-Yong Feng, Guang-Ming Zhang and Tao Xiang, *Jordan-Wigner transformation to Kitaev model and topological quantum phase transitions*, in preparation (2007);
- [3] Xiao-Yong Feng, Guang-Ming Zhang and Tao Xiang, *Kitaev model and topological quantum phase transitions*, Physics (in Chinese), 36(7) (2007)

致谢

这三年多在理论所的学习生活是我人生中一段极其宝贵的经历。出于内心的需要,我要感谢出现在我生活中的每一个人:闭上眼睛也历历在目的,转身瞥见就立即叫得上名字的,或者连名字也不知道的。但出于诚意,在这里我只感谢对我尤其重要而不能一笔带过的人。

我首先要感谢我的指导老师向涛研究员。没有他的悉心指导不会有这篇论文的产生。在读博期间,我可能是所里更换研究课题最勤快的学生。在导师的"纵容"和庇护下,我终于有所收获。

清华高等研究中心的张广铭教授是这个工作的主要合作者之一。他投入了大量的精力,提供了很多好的想法,给予了我很大的帮助和鼓励。在这里我衷心地谢谢他。

我要将这篇毕业文献给三个人:我的父母和妻子。父母永远是我的后盾。他们无私的付出和毫无保留的支持使我可以在人生的道路上自由驰骋。而对妻子的谢意将溶进我深深的歉意。这漫长的三年多时间中,我们大部分是在思念中度过。妻子无怨无悔的爱时刻温暖着我,也激励我奋发图强而不虚度时光。

最后我要感谢郭玲老师。她处处为学生着想,把我们的生活安排得井井有条。让我度过了愉快的读博生涯。