



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

理学博士学位论文

一类一维量子模型的研究

作者姓名: 秦明普

指导教师: 向涛 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别: 理学博士

学科专业: 理论物理

研究所: 中国科学院物理研究所

2013年5月

A study on a set of one dimensional quantum models

By

Ming-Pu Qin

A Dissertation Submitted to
The University of Chinese Academy of Sciences
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of
Doctor of Science

Institute of Physics
Chinese Academy of Sciences

May, 2013

摘 要

相和相变的研究是凝聚态领域的重要课题。关于自旋模型的研究对人们认识新的相起到了重要的作用。一维的模型由于量子涨落较大，更容易表现出新奇的相。同时，一维的模型也更容易严格求解。因此对一维量子模型的研究是凝聚态领域的一个重要方面。海森堡链是一类常见的一维量子模型。关于半整数自旋的反铁磁海森堡链，我们知道有著名的Lieb-Schultz-Mattis定理：一维半整数的反铁磁海森堡模型的激发，一般不存在能隙，如果有能隙一定是破坏了某种离散的对称性，使得基态变得简并。对于整数自旋的反铁磁海森堡链，我们知道有著名的AKLT (Affleck, Lieb, Kennedy and Tasaki) 模型。AKLT模型的基态没有破坏体系的任何对称性，但是我们可以定义非局域的序参量来描述这个相。虽然体内的激发存在能隙，但对于开放的AKLT链在两端存在无能隙的激发，即所谓的边缘态。后来的研究表明AKLT的基态破坏了某种隐藏的对称性。

Haldane通过研究一维反铁磁海森堡模型的低能有效模型：非线性 σ 模型，提出了著名的Haldane猜想。他指出整数和半整数自旋的反铁磁海森堡模型的基态存在本质区别。整数自旋的反铁磁海森堡链的激发存在能隙，基态的关联函数随着距离增加指数衰减。而半整数反铁磁自旋链的激发无能隙，基态的关联函数随着距离幂次衰减。在非线性 σ 模型中有一个拓扑项 (Θ term)，正是这项的存在导致了半整数情况下能隙的关闭。

一直以来，我们认为朗道对称性破缺理论可以描述所有的相和相变。但是后来人们发现了朗道理论不能解释的拓扑序。最近，文小刚等人引入量子信息里纠缠和局域么正变换的概念，将所有的有能隙的相进行了分类。这样的分类加深了我们对于序的理解。

数值方法在模型求解中有着重要的作用，因为能够严格解析求解的模型很少。密度矩阵重正化群方法是一种能够精确求解一维模型的方法。本质上，密度矩阵重正化群方法给出的基态是一类叫作矩阵乘积态的态。从纠缠熵的角度，矩阵乘积态可以严格的描述一维短程相互作用的量子模型的基态（如AKLT模型的基态就可以严格的写成一个维度为3的矩阵乘积态）。这也是密度矩阵重正化群能够给出一维模型的精确基态的原因。如今，随着量子信息的

各种思想和概念逐渐融入凝聚态领域，很多基于张量网络态（矩阵乘积态是张量网络态在一维的例子）的算法被提出，数值结果表明这是一类很有潜力的算法。

本文分为两部分。第一部分，通过将自旋在球面上的磁平移定义推广到环面，我们得到了不同于 $SU(2)$ 的对称群的生成元。通过新的生成元算符，我们构造了一个类似海森堡模型的一维模型：Quantum Torus Chain。首先，我们详细的分析了它的对称性，根据对称群的表示给出了所有可能的能级简并度。然后我们利用精确对角化，密度矩阵重正化群和基于矩阵乘积态的时间演化块消减算法详细的研究了 $m = 3$ （ m 是模型中一个类似于自旋大小的参数）的相图。在不同区域我们发现了有能隙相和无能隙相。对于有能隙的相，我们发现了基态都因破坏了体系的对称性而简并。这和文小刚等人关于一维体系分类的结果相吻合。对于临界相，我们通过纠缠熵和链长的关系 $S \sim c/6 \log(L)$ 拟合出了对应的共形场论的中心荷（ c ）。数值结果表明，在两个临界相，中心荷都为2。小尺寸的精确对角化的结果往往能给出临界体系对应的共形场的信息。但在Quantum Torus Chain中，由于较强的有限尺寸效应，我们没能最终确定临界相对应的共形场。在相图中我们发现了两个一级相变点和一个连续相变点。在发生连续相变的点，能量的二级导数没有出现奇异。因此我们判断这是一个Kosterlitz-Thouless类型的相变。最后，我们将 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain的低能有效模型用 $S = 1$ 的自旋算符表述。对应的模型相比Lai-Sutherland模型多出一项。Lai-Sutherland模型具有 $SU(3)$ 对称性。它严格可解，低能激发对应的共形场是 $c = 2$ 的 $SU(3)_1$ 的Wess-Zumino-Novikov-Witten模型。我们期待在自旋1的表象下研究临界相的低能有效理论能够最终确定其对应的共形场。

在第二部分我们提出了一种在量子化学的密度矩阵重正化群计算中优化Hartree-Fock轨道的方法。密度矩阵重正化群方法在提出后不久，就被应用到了量子化学的计算中并显示了很高的计算精度。在密度矩阵重正化群的计算中，由于计算资源有限，能够处理的Hartree-Fock轨道的数目也有限。通过不断的对轨道作么正变换，我们能够在数目较大的Hartree-Fock轨道中选择出给定数目下，基态能量最低的轨道。

我们利用新的方法研究了单个水分子的基态，在172个Hartree-Fock轨道基矢下选取61个优化轨道，得到了水分子的精确基态能量。得到的结果与利

用92个轨道的蒙特卡洛和耦合簇展开的结果可以比拟。这种轨道优化的方法不仅仅局限于密度矩阵重正化群的计算，我们可以将得到的优化的轨道作为其它的量子化学方法（例如精确对角化）的输入，从而得到更精确的基态。

关键词： 量子相和量子相变，自旋，磁平移，密度矩阵重正化群，矩阵乘积态，量子化学

Abstract

Phase and phase transitions are important issues in condensed-matter physics. The researches on spin models play an important role in the understanding of new phases. For the large quantum fluctuation, one dimensional systems usually show exotic behavior. Moreover, some one dimensional models can be solved exactly. Heisenberg chain is a widely studied model. For the half integer antiferromagnetic Heisenberg spin chain, we have the well-known Lieb-Schultz-Mattis Theorem: the excitation should be either gapless or gapped due to the breaking of some discrete symmetry and the ground state is degenerate. The AKLT(Affleck, Lieb, Kennedy and Tasaki) model is a well-known example for the integer spin chain whose ground state is known exactly. Its ground state doesn't break any symmetry of the model. However, we can still define a non-local order parameter to characterize it. Though the bulk excitation is gapped, at the boundary, the excitation is gapless. Further study shows that the ground state breaks some hidden symmetry of the system.

By studying the low energy effective model of the one dimensional antiferromagnetic Heisenberg model: non-linear sigma model, Haldane proposed the famous Haldane conjecture: The ground state for half integer and integer antiferromagnetic Heisenberg chain are different. The excitation for integer chain is gapped and the correlation in ground state decays exponentially with distance, while the excitation for half-integer chain is gapless and the correlation in ground state decays algebraically with distance. The close of gap in the half-integer chain is due to the presence of the topological Θ term in the non-linear sigma model.

For a long time, we believed all phases and phase transitions were described by Landau symmetry breaking theory. But new topological orders beyond Landau theory were found. X. G. Wen and his collaborators proposed a classification for all the gapped phases by introducing the concept of entanglement and non-local unitary transformations from quantum information. This classification gives us a systematic and deeper understanding of topological orders.

Numerical methods are crucial for the solution of models because there are only a small amount of models which can be solved analytically. DMRG(Density Matrix Renormalization Group) is a method by which we can get the ground state of one dimensional system with very high accuracy. The underlying structure for the wave functions got by DMRG is a class of states called MPS(Matrix Product State). MPS can capture the entanglement of one dimension system exactly (The ground state of AKLT model can be rigorously represented by a MPS with dimension 3). This is the reason why we can get precise ground state for one dimensional system with DMRG. Now, with the combination of quantum information and condensed matter physics, many new numerical methods based on tensor network state(MPS is the one dimension tensor network state) are proposed. The precise results got by these methods indicate they are promising.

There are two parts in this thesis. In the first part, by extending the magnetic translation definition of spin, we introduce a new one dimension Heisenberg-like model: Quantum Torus Chain. First, we explore the symmetry of the model and figure out all the possible degeneracy for the energy levels from the representations of the symmetry group. Then we study the phase diagram for $m = 3$ (m is a parameter in the model similar to the value of spin in Heisenberg model) case by Exact Diagonalization, DMRG and the infinite time-evolving block decimation method. We find both gapped and gapless phases in the phase diagram. For all the gapped phase, the ground states are degenerate due to the breaking of discrete symmetry which are self-consistent with Wen's theory. We get central charge for the two gapless phase by the scaling of entanglement entropy with the length of the chain: $S \sim c/6 \log(L)$. For the huge finite size effect in the model, we can't determine the conformal field theory for the critical phase from the exact diagonalization data. We find two first order and one continuous phase transitions in the phase diagram. The continuous transition is Kosterlitz-Thouless type for there is no singularity in the second derivative of the ground state energy with respect to the parameter θ . At last we write down the low energy effective hamiltonian by the $S = 1$ spin operator. It is related to the Lai-Sutherland model by adding an extra term to it. The Lai-Sutherland model has $SU(3)$ symmetry and is exactly solvable. The low energy effective conformal field

theory for it is the Wess-Zumino-Novikov-Witten model. We expect to pin down the conformal field theory for the critical phase of the Quantum Torus Chain by the study of the low energy effective hamiltonian .

In the second part, we propose a method to optimize the Hartree-Fock orbital when applying DMRG for quantum chemistry calculation. Shortly after White proposed the DMRG method for one dimension lattice system, he extended it to the quantum chemistry calculation and demonstrated its potential in this field. With the limited resource, the number of Hartree-Fock orbital we can handle is small. With the proposed method, we can pick out a part of orbital in which the ground state energy is lowest from a large amount of orbital if the number of orbital is fixed.

We study the ground state of water molecular as a benchmark. The ground state energy we get by picking out 61 optimized orbital from 172 orbital is comparable with that got by quantum monte carlo and coupled cluster method with 92 orbital. This method is not limited to DMRG calculation. The optimized orbital can serve as input of other quantum chemistry method and the result should be more accurate.

Keywords: quantum phase and quantum phase transition, spin, magnetic translation, DMRG, MPS, quantum chemistry

目 录

摘要	i
Abstract	v
目录	ix
第一章 引言	1
1.1 量子相和量子相变	1
1.2 密度矩阵重正化群方法	4
1.3 一类新的模型: Quantum Torus Chain	8
1.4 密度矩阵重正化群方法在量子化学中的应用	15
1.5 论文安排	17
第二章 有磁场情况下的平移对称性	19
2.1 磁平移算符 (MTO) 和磁平移群 (MTG)	19
2.1.1 Bloch定理	19
2.1.2 有外磁场情况下的Bloch电子	20
2.2 球面上的电子和自旋	25
2.3 环面上电子	27
第三章 密度矩阵重正化群和矩阵乘积态	31
3.1 密度矩阵重正化群方法	31
3.1.1 数值重正化群及其局限性	31
3.1.2 从数值重正化群到密度矩阵重正化群	32
3.2 矩阵乘积态及相关算法	39

第四章	Quantum Torus Chain—一类新的模型	49
4.1	哈密顿量	49
4.1.1	对称性	53
4.2	关于一般 m 的讨论	58
4.3	数值的结果和讨论	60
4.3.1	$\theta = 0$ 附近的临界相	61
4.3.2	$0 < \theta < \pi/2$ 的临界区域	63
4.3.3	$\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 的临界区域	70
4.3.4	$\theta \sim 0.6\pi$ 的连续相变	71
4.3.5	有能隙的区域	72
4.3.6	相变点 $\theta = 5\pi/4$	74
4.4	Quantum Torus Chain和SU(3)反铁磁海森堡模型的联系	81
4.5	小结	82
第五章	DMRG在量子化学中的应用	83
5.1	动量空间的DMRG	83
5.2	动量空间的DMRG在量子化学中的应用	85
5.3	基于DMRG的对Hartree-Fock轨道的优化方法	86
5.4	数值结果	89
5.5	小结	92
第六章	结语	95
附录 A	群的投影表示	99
A.1	群的简介	99
A.1.1	群的定义	99
A.1.2	子群	99
A.1.3	陪集,不变子群和商群	100
A.1.4	中心	100
A.1.5	同态与同构	101

A.1.6 扩张和中心扩张	101
A.2 群的线性表示	101
A.3 群的投影表示	102
A.3.1 投影表示的定义	102
A.3.2 不可约投影表示的构造方法	104
参考文献	109
发表文章目录	125
简历	127
致谢	129

第一章 引言

1.1 量子相和量子相变

对于相和相变的研究一直是物理领域的重要的课题。朗道 (L. D. Landau) 提出的基于对称性破缺的二级相变理论[1, 2]指出可以通过体系的对称性来区分不同的相。体系由高对称性相变化到低对称性相时, 自由能二阶导数存在奇异性, 体系会发生相变。描述超导的唯象理论: 金兹堡-朗道 (Ginzburg-Landau) 理论[3], 就是二阶相变理论的成功例子, 至今仍然是研究超导现象的一个重要工具。

一维的体系相对高维体系量子涨落更强, 更容易出现不同于经典的相。一维的反铁磁海森堡模型是研究较广的体系, 一方面, 它比较简单, 另一方面, 存在一些严格求解的例子。自旋1/2的各向同性反铁磁海森堡模型可以利用Bethe-Ansas方法严格求解[4]。它的基态没有长程序, 关联函数是幂次衰减的, 表现出准长程序的行为, 体系的激发无能隙, 携带1/2的自旋, 叫做自旋子 (spinon) [5], 以区别于携带自旋数为1的自旋波的激发: 磁振子 (Magnon)。

对于自旋1/2的链, 我们知道还有一个严格可解的模型: Majumdar-Ghosh模型[6], 哈密顿量为:

$$H^{MG} = \sum_{i=1}^N (S_i \cdot S_{i+1} + \frac{1}{2} S_i \cdot S_{i+2}) \quad (1.1)$$

其中 i 是一维链中的编号为偶数的点。我们通过分析可以知道这个体系的基态可以表示如下:

$$|d\rangle_{\pm} = \prod_{n=1}^{N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2n}\downarrow_{2n\pm 1}\rangle - |\downarrow_{2n}\uparrow_{2n\pm 1}\rangle) \quad (1.2)$$

这两个态是相邻的自旋组成的自旋单态的直积态。他们通过平移算符连接起来。体系的能级在这两个基态之上有一个有限大小的能隙。我们注意到基态破坏了体系的平移不变性。

Lieb等人推广了Marshall定理[7], 得到了著名的Lieb-Schultz-Mattis定理[8, 9]: 一维的半整数的反铁磁模型, 基态一般是无能隙的, 如果有能隙一定

是破坏了某种离散的对称性（连续对称性破缺会导致无能隙的的激发：Goldstone模），从而使得基态变得简并。自旋1/2的各项同性的海森堡模型和Majumdar-Ghosh模型正是分别对应着Lieb-Schultz-Mattis定理的两种情况。

早在二十年前，人们就发现在一个一维的严格可解的自旋 $S = 1$ 的模型：AKLT模型。对应的哈密顿量为：

$$H^{AKLT} = \sum_{\langle ij \rangle} [S_i S_j + \frac{1}{3}(S_i S_j)^2 + \frac{2}{3}] \quad (1.3)$$

它的基态是所谓的价键固态（Valance Bond Solid）。 $S = 1$ 的自旋可以看成由两个 $S = 1/2$ 的自旋耦合而来。将所有相邻的1/2自旋组成一个自旋单态，即形成了价键固态。虽然价键固态没有破坏任意的对称性，但是人们发现在价键固态中存在一种隐藏的序（Hidden Order），可以通过定义一个非局域的序参量：弦序（String order）[10–14]，来描述这类序。传统意义上的序参量往往是描述体系局域性质的量，但是弦序却是描述体系整体性质的序参量。从价键固态的构造过程可以看出，对于开放边界条件的一维链，在它的边缘存在着自由的1/2自旋，这对应着体系无能隙的边缘激发，尽管在体内的激发存在有有限大小的能隙。后来的研究表明虽然固态价键态没有显式的破坏哈密顿量的对称性，但是破坏了体系隐藏的 $Z_2 \times Z_2$ 的对称性[15, 16]。

以往人们认为所有的相和连续相变都可以用朗道对称性破缺理论来理解（如晶体的分类，二维Ising模型的有限温相变，铁磁性等）。但是最近发现事实并非如此。越来越多的朗道理论无法解释的相被发现（如不同的分数量子霍尔态就不能通过对称性破缺理论来解释）。

最近文小刚及其合作者基于张量网络态（Tensor Network state），从量子纠缠和局域么正变换的角度出发，对有能隙的相作了一个详细的分类[17–21]。具体的结论如下：

对于有能隙的体系，如果不考虑任何的对称性，所有的相可以分为两类：短程纠缠态和长程纠缠态。

1. 短程纠缠态是所有能够通过局域的么正变换变到直积态的态。所有的短程纠缠态都可以通过局域的么正变换相互变换，因此在不考虑对称性的情况下所有的短程纠缠态属于一个相。
2. 长程纠缠态是一类不能通过局域的么正变换变到直积态的态。所有能通过局域的么正变换相互转化的态属于同一个相，而不能通过局域么正

变换转化的态属于不同的相。这些态正是所谓的有拓扑序的态。如分数量子霍尔态，手征自旋液体， Z_2 自旋液体，非阿贝尔的分数量子霍尔态等等。对于拓扑序的分类涉及到的数学是张量范畴理论 (tensor category theory)。

对于考虑对称性的有能隙的态，则有更多的可能性。

1. 短程纠缠的态不再属于同一个相。传统的朗道对称性破缺理论给出的不同的相的分类属于短纠缠态这一类。除此之外还有更重要的一类相，它们不破坏体系的任何对称性。Haldane相和拓扑绝缘体正属于这一类。这一类相超出了朗道的对称性破缺理论，我们将它们叫做对称性保护的拓扑相 (symmetry protected topological phase)。通过对应体系的对称群的上同调群 (Second Cohomology group)，可以将不同的对称性保护的拓扑相进行分类。
2. 对于有对称性的长程纠缠态，相的种类要比没有对称性时丰富。我们将这一类相叫做对称性扩充相 (Symmetry Enriched Topological Phases)。投影对称群 (Projective Symmetry Group) 可以用来研究这一类相。至今还没有对这类态比较系统的认识。

具体到一维的自旋体系，文小刚等人发现在一维的情况下没有长程纠缠的有能隙的态。他们对所有有能隙的相做了一个完整的分类。

如果不考虑平移对称性，

1. 如果不考虑对称性，所有一维的有能隙的态都属于同一个相，它们之间可以通过局域的么正变换联系。
2. 在考虑对称性的情况下，如果体系格点上的对称群是 G ，格点上的物理状态构成 G 的线性表示，则所有没有对称性破缺的态可以通过 G 的上同调群 $H^2(G, C)$ 中的等价类来分类。
3. 在考虑对称性的情况下，如果体系格点上的对称群是 G ，格点上的物理状态构成 G 的投影表示，则所有没有对称性破缺的态同样可以通过 G 的上同调群 $H^2(G, C)$ 中的等价类来分类。

如果考虑平移对称性

1. 如果不考虑其它对称性，所有一维的平移不变的有能隙的态都属于同一个相。
2. 如果体系格点上的对称群是 G ，格点上的物理状态构成 G 的线性表示，则所有没有对称性破缺的态可以通过 G 的上同调群 $H^2(G, C)$ 中的等价类和所有群 G 的一维表示来分类。
3. 如果体系格点上的对称群是 G ，格点上的物理状态构成 G 的投影表示，则不存在不破坏任何对称性的有能隙的态。

文小刚等人的分类指出了传统意义上的朗道对称性破缺相和拓扑相的区别。同时在这个框架下也能理解各种拓扑序的不同，加深了我们对于量子相和量子相变的认识。

1.2 密度矩阵重正化群方法

密度矩阵重正化群 (Density Matrix Renormalization Group) 是 S. R. White 在 1992 年提出的求解一维量子模型的数值方法[22, 23]。它是在数值重正化群 (Numerical Renormalization Group) 的基础上发展而来。数值重正化群是由 K. G. Wilson 提出的重正化群方法[24–26]。在具体计算时，每次系统由上一步的系统自身直积得到。为了保持体系希尔伯特空间的维数不变，需要将直积基矢作截断。截断的标准是能量：将体系的哈密顿量对角化，仅仅保留能量较低的态对应的基矢。重复这个过程直到物理量收敛即完成了数值重正化的计算。K. G. Wilson 利用数值重正化群方法成功的解决了一维的单杂质的近藤 (Kondo) 问题。但是将其推广到一维的量子模型的求解时却发现求出的基态精度不够高[27–32]。后来人们知道原因在于数值重正化群没能正确的处理边界条件。我们知道，小尺寸下的体系的基态未必是大尺寸下基态的重要组成部分。为了减少边界效应，向涛和 G. A. Gehring 提出了一种改进的数值重正化群算法[33]。这个算法和传统的算法的不同在于每次新的系统是上一步的系统与单个格点直积得到，而不是每次将系统与自身直积。这样做能够较好的处理边界效应，同时也可以减小切断误差。因为此时只需要将希尔伯特空间的维数从 $d \times D$ 截断到 D (D 是在重正化中保留的状态数， d 是每个格点上的

粒子的状态数), 而在传统的数值重正化群的过程中, 每次需要从 D^2 截断到 D 。在1992年, S. R. White进一步在截断基矢时引入了环境的影响。提出了密度矩阵重正化群算法。

密度矩阵重正化算法包含无穷链长算法和有限链长算法。在无穷链长算法中, 我们把一个大的体系分成两部分: 系统和环境。每次我们在系统和环境中加入两个格点, 构成新的总系统。利用极端本征值求解算法(如Lanczos算法)求得总系统的基态后, 利用它构造出系统和环境块的约化密度矩阵。将约化密度矩阵对角化, 得到的本征态可以看成初始基矢经过么正变换得到的新的基矢。在截断的过程中, 利用约化密度的本征值作为截断的判据: 仅仅保留约化密度矩阵本征值较大的 D 个值对应的基矢。重复上面的过程, 直到体系的长度达到设定的长度。此时我们可以进行有限链长的算法: 每次系统块的长度增加1, 环境块的长度减少1, 保持体系的总长度不变。通过反复的来回扫描可以进一步的提高计算的精度。

对于具体模型的数值计算结果表明密度矩阵重正化群对于一维的量子体系, 特别是有能隙的开放系统, 能够给出非常精确的基态[34]。现在, 它已经是处理一维量子体系的“标准”算法。通过后来的研究人们知道, 实际上密度矩阵重正化群算法求出的基态是一类叫做矩阵乘积态的态[35]。矩阵乘积态的形式为:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} (A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (1.4)$$

在每个格点上, 有一个依赖于格点物理状态 $|\sigma\rangle$ 的矩阵。当给定所有格点上的状态 $\sigma_i, i = 1, 2, \dots, L$ 后, 波函数 $|\psi\rangle$ 在这个基矢上的展开系数就是 L 个矩阵的乘积(对于开放边界条件的体系, 最左和最右边的矩阵分别是行矢量和列矢量, 对于周期性边界条件的体系, 需要对最后得到的矩阵求迹)。可以证明, 价键固态的波函数就可以用矩阵乘积态的形式严格的表述, 而每个点上的矩阵的维数仅仅为3。

在量子信息和量子计算领域, 纠缠是很重要的概念。一个简单的纠缠态的例子就是自旋单态: $\frac{1}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ 。我们不可能通过对单个格点的基矢作么正变换将自旋单态变成一个经典的直积态。纠缠熵是一种来衡量纠缠大小的量。如果将一个体系分成系统和环境两部分, 给定一个态 $|\psi\rangle$, 求系统或者环境的约化密度矩阵, 它对应的冯·诺依曼熵就是态 $|\psi\rangle$ 在给定的划分下的纠缠熵。

对于上文的自旋单态，由于只有两粒子，只存在一种划分方式，对应的纠缠熵为 $\log 2$ 。

量子体系基态的纠缠熵有面积定律（Area Law）[36]。它指出对于只有短程相互作用的体系，将它分成两部分时，系统和环境的纠缠只是线性的依赖于它们的边界的尺度。对于 d 维的量子体系，如果线性尺度为 L ，纠缠熵满足

$$S \sim L^{d-1} \quad (1.5)$$

如果体系是临界的（激发没有能隙），则通常会有对数修正项，即：

$$S \sim L^{d-1} \log L \quad (1.6)$$

对于一维的开放边界条件的体系，如果将其分成两个部分，纠缠熵就是一个常数，因为两部分的边界只是一个点（维度为0）。如果体系是临界的，它们之间的纠缠熵为 $S \leq \log L$ 。而我们知道将一个矩阵乘积态描述的体系分成两部分，他们之间的纠缠熵的上限是

$$S \leq \log D \quad (1.7)$$

因此，从纠缠熵的角度，矩阵乘积态可以描述一维有能隙量子体系的基态。而如果体系处于临界相，对于有限大小的系统，如果能够满足：

$$\log(D) > c \log(L) \Rightarrow D > L^c \quad (1.8)$$

则矩阵乘积态也可以描述相应的体系的基态。

进一步我们可以知道，对于任意一个矩阵乘积态，我们都可以构造一个母体哈密顿（Parent Hamiltonian），使得给定的矩阵乘积态是它的基态[37, 38]。同时母体哈密顿量只包含局域的相互作用，没有阻错（Frustration Free），即对应的基态能够使得哈密顿量中的所有的项的能量都能达到最低。母体哈密顿量的激发是有能隙的，基态是唯一的或者是存在有限的简并。作为一个例子，我们可以证明价键固态对应的母体哈密顿量就是AKLT模型。我们注意到，最近Gonzalez等人证明了，对于给定的矩阵乘积态，同样可以构造另外一个哈密顿量（Uncle Hamiltonian）[39]，它和母体哈密顿量有相同的性质，但是它的激发却是无能隙的。一般情况下，我们认为如果基态的关联指数衰减，则体系的激发有能隙，反之则无能隙。但是从上面的讨论我们可以看出，体系基态的

性质和体系的激发没有必然的联系，因为同样一个矩阵乘积态，既可以作为有能隙的哈密顿量的基态，也可以是无能隙的哈密顿量的基态。

上面的讨论告诉我们，矩阵乘积态能够严格的描述一维体系基态的纠缠。因为利用密度矩阵重正化群算法得出的体系的基态本质上是一个矩阵乘积态，所以密度矩阵算法也能严格描述一维体系基态的纠缠。这也正是利用密度矩阵重正化群算法能够得到精确基态的原因。同时我们也能理解为什么在同样的保留状态数下，研究临界体系时得到的基态的精度不如有限能隙体系基态的精度高。因为临界体系的纠缠熵比有限能隙的体系要大，为了精确表述临界体系，保留的状态数也应该增加。同时我们也能理解为什么开放边界条件相比周期边界条件更容易处理。对于周期性边界条件的一维链，如果将它分成两部分，它们之间的边界为两个点，而对应的开放边界条件则为一个点，因此为了达到同样的精度，我们有：

$$S^p \sim 2S^o \Rightarrow D^p = (D^o)^2 \quad (1.9)$$

所以要达到同样的精度，周期性边界的体系的保留状态数应该为对应开放边界条件的平方。

如今，随着量子信息领域的概念和思想与凝聚态领域的结合，各种基于矩阵乘积态的算法被提出，能够处理各种问题。对于周期性边界条件，发展了优于密度矩阵重正化群的算法[40–42]，基于MPS的变分的算法[40, 43]，能处理连续体系和场的算法[44–46]，处理时间演化的算法[47–49]，处理有限温度性质的算法[50]，能够处理基态的基于投影的无穷大时间演化块消减(infinite time-evolving block decimation)算法[51, 52]。

对于二维体系的研究在凝聚态物理中有很重要的意义。例如与高温超导有密切关系的 $t - J$ 模型[53, 54]的求解对于最终理解高温超导机制有重要作用。而二维的量子模型往往不能严格求解，因此对这些模型的求解是计算物理很重要的课题。一般在利用密度矩阵重正化方法求解二维格点模型时，我们将二维的格点进行排序，将它变成一维链，再利用一维的算法处理相应的体系[55]。向涛等人提出了在处理二维问题时的直接做法，而不是把二维的体系变成一维的链来处理[56]。这样能够在一定程度上提高计算的精度。随后S. R. White利用密度矩阵重正化群算法尝试的处理了许多准二维（多条链）的体系[57–64]。但是密度矩阵重正化群在求解这些二维的模型的时候没有显示出处理一维体系时的精度。在[55]中，Shoudan Liang 和Hanbin Pang指出，密度矩阵重正化群方

法在研究二维体系时存在着本征的困难。如果要使得数值精度在重正化过程中保持不变，则需要保留的状态数随着格点的数目指数增长。

这从纠缠熵的角度能够很好的理解。对于二维体系 ($L \times L$)，根据面积定律，将体系分成两部分时的纠缠熵随着体系的线性尺度 (L) 增长。而密度矩阵重正化群得到的态只能给出固定大小的纠缠熵。因此直接将密度矩阵重正化群方法推广到二维有着本征的缺陷。

但是将矩阵乘积态推广到二维，却是一个很自然的过程。矩阵乘积态向二维的推广叫做投影纠缠对态 (projected entanglement pair states)。在投影纠缠对态中，每个格点上都有一个依赖于格点物理状态的张量。张量的阶数一般和每个点的配位数相同。对于正方格子，就是一个四阶张量。给定一组所有格点的构型，将所有相邻的张量的相同指标求和就能给出投影纠缠对态在这个基上的展开系数。我们可以证明，在一个大的投影纠缠对态中取出一部分时，取出的部分和剩余部分的纠缠熵是和取出部分的周长成正比。这表明投影纠缠对态是一类满足面积定理的态。我们注意至今为止基于投影纠缠对态的算法得到了很大的发展[65–70]。

1.3 一类新的模型：Quantum Torus Chain

对自旋模型的研究让我们加深了对量子态的认识，下面我们将自旋作一个推广，提出一类新的模型。我们期待这类新的哈密顿量能够进一步扩充我们对于量子态的认识。

磁平移的概念很早就被J. Zak提出[71]。在非零磁场的作用下，矢势不可能在空间均匀分布。体系的哈密顿量不再是平移不变的，因此动量算符也不再是体系的对称操作。但我们可以定义磁平移算符：

$$T^m(\mathbf{R}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)\right] \quad (1.10)$$

如果我们选取对称规范：

$$\mathbf{A} = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2 \quad (1.11)$$

对于二维平面上的自由电子，我们可以证明，上面定义的磁平移算符和哈密顿量对易。但是和普通的平移算符不同是，磁平移算符在 \mathbf{R} 不同时并不对易：

$$[T^m(\mathbf{R}_1) T^m(\mathbf{R}_2)] \neq 0, \forall \mathbf{R}_1 \neq \mathbf{R}_2 \quad (1.12)$$

一般情况下，体系的基态构成其对称群的线性表示，但在有磁场的情况，体系的基态往往构成的是相应对称群的投影表示。

现在考虑一个在球面上运动的自由电子，在球的中心放上一个磁单极子。T. T. Wu和C. N. Yang[72, 73]在1970年代给出了这个量子力学问题的解。求解这个体系的薛定谔方程，我们可以知道，穿过球面的磁通量子数 $2Q$ 是量子化的（取整数）。轨道角动量的取值是 Q ，所以除了整数外，它也可以取半整数。因此在这个体系中轨道角动量和自旋的代数结构是一样的：都是SU(2)群的生成元。体系的最低的朗道能级的简并度为 $2Q + 1$ ，构成了SU(2)群的 $S = Q$ 的线性表示，同时也是SO(3)群的投影表示。从这个例子可以看出，投影表示可以导致量子数的分数化。

当我们将球面换成一个环面时，和球面一样，穿过环面的磁通量子数（ m ）也是量子化的。对应体系的磁平移群变成了离散群： $Z_n \times Z_n$ 群。体系的基态构成了 $Z_n \times Z_n$ 群的投影表示。类似于自旋的三个生成元 S^x , S^y , S^z ，这个体系的对称群的生成元是 U^x 和 U^y ，他们满足：

$$(U^x)^m = I, (U^y)^m = I \quad (1.13)$$

它们之间的对易关系是：

$$U^x U^y = e^{i2\pi/m} U^y U^x, \quad (1.14)$$

其中 m 是穿过环面的磁通量子数。类似于海森堡模型，假设一条链上每个格点上都存在一个有磁场的环面，在环面上有一个自由电子，将相邻格点上的 U^x , U^y 算符耦合起来，我们可以构成一个新的一维模型：

$$H = \sum_i (\cos \theta U_i^x U_{i+1}^{x\dagger} + \sin \theta U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c.). \quad (1.15)$$

我们将它称为Quantaum Torus Chain，这就是本文中要研究的模型。

对于反铁磁的海森堡链，我们知道有著名的Haldane猜想[74, 75]：通过研究反铁磁海森堡链的低能有效模型：非线性 σ 模型（Nonlinear Sigma Model），Haldane发现整数自旋链和半整数自旋链的基态性质有本质的区别。整数自旋的反铁磁海森堡链的激发是有能隙的，基态的关联函数指数衰减。而半整数的反铁磁自旋链的激发无能隙，基态的关联函数是幂次衰减的。我们知道在非线性的 σ 模型中有一个拓扑项（ Θ term），正是这项的存在导致了半整数情况下能隙

的关闭。在这之后，大量的数值结果证实了Haldane猜想的正确性[34, 76–79]。现在Quantaum Torus Chain也有一个参数 m ，我们想知道对于奇数和偶数的 m ，是否存在着类似Haldane猜想的结果。这是我们研究Quantaum Torus Chain 的动机之一。

我们对这个模型做了简要的分析，发现奇数和偶数 m 的情况下体系的基态存在本质的区别。在 $\theta = 0$ 时，体系退化成一个经典的模型。对于 m 为偶数的情况，基态没有阻错，为类似于Neel态的反铁磁态，简并度为 m ，激发存在有限大小能隙。而对于 m 为奇数的情况，基态是无穷简并的，简并度为 $N \times m^{N-1}$ (N 是链长)，因此在 $\theta = 0$ 附近， m 为偶数时，由微扰论我们知道，体系的激发存在能隙； m 为奇数情况下，基态的激发不能给出定论，但在有限的 θ 下，无穷简并的基态将发生劈裂，我们预测此时体系的激发不存在能隙 ($m = 3$ 的数值结果证实了这一点)。

在具体的计算之前，我们详细的分析了Quantum Torus Chain模型的对称性。根据对称群的表示，我们得到了体系可能的能级简并情况。同时我们知道，在Quantum Torus Chain模型中， U^x 和 U^y 是可以通过离散的傅立叶变换互相转换的，我们称之为对偶对称性。因此，体系在 θ 平面的相图关于一三象限的对角线对称。

我们利用精确对角化，密度矩阵重正化群以及基于矩阵乘积态的无穷大时间演化块消减算法对 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain进行了详细的研究。因为Quantum Torus Chain模型在链长不为 m 倍数的情况下，所有能级都至少是 m 重简并的。为了消除这种简并，我们必须取体系的链长为 $L = km$ (k 是一个正整数)。而我们知道，在传统的密度矩阵重正化群算法中，体系的长度都为 $2k$ 。为此，我们改变了传统密度矩阵重正化群方法中链长增长的方式，使得每一步的总链长都是 $3k$ 。

我们发现变化 θ 时，模型中既存在着有能隙相也有无能隙相。在不同的相之间存在一级相变，也存在连续相变。

在 $0 < \theta < \pi/2$ 的区域，对于小尺寸的链长，我们做了精确对角化。我们发现体系的能级在不同的链长下相对位置会发生变化。这表明在这个体系中，有限尺寸的效应很明显。通过改进的密度矩阵重正化群方法，我们研究了体系的激发。结果表明在热力学极限下，体系的激发是没有能隙的。同时，我们利用无穷大时间演化块消减算法计算了体系的关联。我们发现 U^x 和 U^y 的关联都是

准长程的。这和体系的基态无能隙是一致的。

一维的临界体系一般是可以用品形场论（Conformal Field Theory）来描述[80–82]。我们知道对于开放的边界条件，如果切断出一段长度为 l 的部分，记作 A ，共形场论给出纠缠熵的表达式为：

$$S_A = (c/6) \log((2L/\pi a) \sin(\pi\ell/L)) + g + c_0 \quad (1.16)$$

其中 c 是对应的临界行为的中心荷。 a 是晶格中相邻两点的长度（我们设为1）， g 是边界熵， c_0 是一个非普适的常数。在具体计算中，我们将体系从中间分成了长度相同的两部分，即 $l = L/2$ ，因此我们有：

$$S_A \simeq (c/6) \log(L) \quad (1.17)$$

密度矩阵重正化群给出的结果表明体系的纠缠熵和体系长度的对数有很好的线性关系。通过对它们的线性拟合，我们得到在临界区域 $0 < \theta < \pi/2$ 的中心荷为2。

因为 $\theta = 0$ 时，体系的基态是无穷简并的。在简并的基态上存在有限大小的能隙。因此在 $\theta = 0$ 附近，将Quantum Torus Chain的哈密顿量投影到 $\theta = 0$ 时的简并的基态空间，我们就能得到体系的低能有效模型。通过分析我们知道在低能有效模型中存在着两个衍生的 $U(1)$ 的对称性，对应于两个衍生的守恒量。我们猜测这和体系的中心荷为2可能会有联系。

因为中心荷为2的共形场有很多种[83]。共形场论指出，对于周期性的一维量子系统，体系的能级有如下的行为[84]：

$$E = E_1 L + \frac{2\pi\nu}{L} \left(-\frac{c}{12} + h_L + h_R \right) \quad (1.18)$$

其中 E_1 和 ν 是两个非普适的常数。 c, h_R, h_L 是由相应的共形场论给出。 c 是中心荷， h_R 和 h_L 表示能级：

$$\begin{aligned} h_R &= h_R^{(0)} + m_R \\ h_L &= h_L^{(0)} + m_L \end{aligned} \quad (1.19)$$

其中 $h_{R/L}^{(0)}$ 是共形场论对应场的左右标度维度， $m_{R/L}$ 是一个非负的整数。

对于基态，我们有：

$$E_{Gs} = E_1 L - \frac{2\pi\nu}{L} \frac{c}{12} \quad (1.20)$$

如果我们将各个激发能级的值减去基态能，则有：

$$E - E_{Gs} = \frac{2\pi\nu}{L}(h_L + h_R) \quad (1.21)$$

我们在上面通过纠缠熵和体系长度的拟合已经得到 $c = 2$ 。我们通过对基态能量对长度倒数的线性拟合，可得到 ν 的大小。

在共形场论中，标度算符是通过主要场（primary field）和它的衍生场来分类。它们分别对应的总标度维度为 $h_R + h_L = \Delta_p$ 和 $h_R + h_L = \Delta_p + n$ ， n 是一个正整数。原则上我们可以从精确对角化的能级中确定主要场的 Δ_p 和与之相关的一系列能级。但对于 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain我们很难从精确对角化的结果中做出这样的结论。因为在前面我们看到，在有限尺寸链长的结果中能级随着体系的长度变化有移动的行为，这说明在这个体系中有限尺寸的效应还是很明显。在目前的情况下，我们只能算到 $L = 18$ 的结果。因此，我们暂时不能确定具体对应于临界区域 $0 < \theta < \pi/2$ 的共形场论。

同样，我们分析了 $\pi/2 < \theta < 0.61\pi$ 的区域。我们发现这区域体系也是临界的。通过纠缠熵的拟合我们知道中心荷为2。我们通过分析知道，在 $\theta = 0$ 附近，体系的能级是关于 $E = 0$ 对称的。所以当 θ 变成 $-\theta$ 时，体系的能级不发生变化。这也能说明为什么体系在 $\pi/2 < \theta < 0.61\pi$ （由于对偶对称性， $\pi/2 < \theta < 0.61\pi$ 和 $-0.11\pi < \theta < 0$ 表示同样的相）区域的临界行为和 $0 < \theta < \pi/2$ 区域一致。在 θ 反转的时候会发生能级的交错，因此在 $\theta = \pi$ 和 $\theta = 0$ ，体系会出现一个一级相变。数值结果也证实了这一点。

在 $0.61\pi < \theta < 5\pi/4$ 的区域，体系的基态是一个对称性破缺的铁磁相。基态是3重简并的。同样，由于对偶对称性，体系在 $5\pi/4 < \theta < 1.89\pi$ 具有同样的性质。在连接两个相变的自对偶点 $\theta = 5\pi/4$ ，我们发现了一个一级相变。在这个相变点，体系的激发有一个很小的能隙。我们通过密度矩阵重正化群方法详细的研究了在这一点体系的基态的纠缠熵。在短尺度下，体系的纠缠熵和长度的对数表现出线性的关系。继续增加体系的尺寸，纠缠熵会下降 $\log 2$ ，然后趋向一个稳定的值。这说明体系的关联长度很长，和体系的激发能隙很小是自洽的。同时，在正文中我们也通过分析不同的能级在这一点交错行为，解释了纠缠熵为什么会下降 $\log 2$ 。

我们发现在 $m = 3$ 时，在 $\theta = 0$ 附近的有效哈密顿量可以用自旋1的算符来

表示:

$$H = \frac{2}{3}(\alpha - \beta) \sum_{\langle ij \rangle} \cos\left[\frac{2\pi}{3}(S_z^i - S_z^j)\right] + \beta \sum_{\langle ij \rangle} [\hat{S}^i \hat{S}^{i+1} + (\hat{S}^i \hat{S}^{i+1})^2] \quad (1.22)$$

上式的第二项是所谓的Lai-Sutherland模型[85, 86], 它具有SU(3)的对称性。同时Lai-Sutherland模型严格可解, 激发无能隙, 可以用 $c = 2$ 的SU(3)₁的Wess-Zumino-Novikov-Witten模型来描述[87–89]。通过分析第一项的影响, 我们期待能够最后确定 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain在临界相对应的共形场论。

综上所述, 我们研究了Quantum Torus Chain在 $m = 3$ 时的相图。在 θ 的相图上, 既有有能隙的相, 也存在临界的相。我们发现所有的有能隙的相都破坏了体系的 $U^x(U^y)$ 的对称性, 基态为三重简并。这和文小刚等人关于一维体系的分类是相吻合的[20]。在Quantum Torus Chain模型中, 由于每个点上的状态是系统对称群的投影表示, 因此在这个体系中不会出现平移不变的对称性保护的拓扑相。所有平移不变的有能隙相都能在朗道对称性破缺理论框架内解释。对于两个临界相, 由于较强的有限尺寸效应, 我们只知道他们的中心荷为2, 暂时还不能确定描述它们的具体共形场论。

以上我们研究的是一维的Quantum Torus Chain。我们也可以将这个模型定义在高维空间的格点上。我们注意到已经有人研究了类似的二维的模型。

Schulz等人在[90]中研究了一个 Z_N plaquette模型。这个模型定义在一个正方格子上,

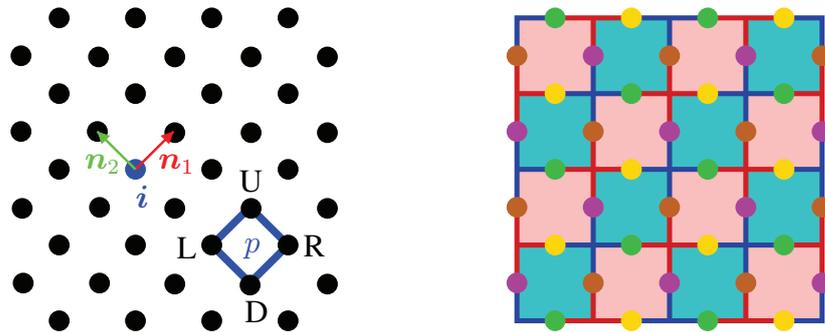


图 1.1: 来自于文献[90], 左边plaquette模型定义在正方格子的格点上。右边toric code模型定义在正方格子的键上。

哈密顿量为

$$H = -J \sum_p (W_p + W_p^\dagger) \quad (1.23)$$

其中

$$W_p = U_D^x U_R^y U_U^x U_L^y \quad (1.24)$$

其中 D , R , U , L 分别对应于四个点 $(i, i + n_1, i + n_1 + n_2, i + n_2)$, 如图1.1所示。 U^x 和 U^y 是在上文定义的环面上电子的磁平移群的生成元。这个模型可以看成是对标准 Z_2 plaquette[91]模型的推广。

Z_2 plaquette模型是定义在正方格子上的严格可解模型，体系的哈密顿量为： $H = 16g \sum_i S_i^y S_{i+\hat{x}}^x S_{i+\hat{x}+\hat{y}}^y S_{i+\hat{y}}^x$ 。 $g > 0$ 和 $g < 0$ 的基态有不同的拓扑序。在 $g = 0$ 体系会有一个相变。这是一种新的相变，因为相变两侧的态的对称性是一样的。

如果我们将正方格子上的所有点用四种颜色标记，如图1.1右图所示。然后定义下面的么正变换：

$$\begin{aligned} X_{i \in \text{brown, magenta}} &\rightarrow Z_i \\ X_{i \in \text{yellow, green}} &\rightarrow X_i \\ Z_{i \in \text{brown, magenta}} &\rightarrow X_i^\dagger \\ Z_{i \in \text{yellow, green}} &\rightarrow Z_i \end{aligned} \quad (1.25)$$

则上面定义的 W 算符变成：

$$\begin{aligned} W_{p \in \text{red}}^\dagger \rightarrow A_{s \in \text{red}} &= U_D^y U_R^y U_U^y U_L^y \\ W_{p \in \text{cyan}} \rightarrow B_{p \in \text{cyan}} &= U_D^x U_R^x U_U^x U_L^x \\ W_{p \in \text{blue}} \rightarrow A_{s \in \text{blue}} &= U_D^{y\dagger} U_R^y U_U^{y\dagger} U_L^y \\ W_{p \in \text{pink}}^\dagger \rightarrow B_{p \in \text{pink}} &= U_D^{x\dagger} U_R^{x\dagger} U_U^{x\dagger} U_L^{x\dagger} \end{aligned} \quad (1.26)$$

则 Z_N plaquette模型可以映射到推广的toric code 模型[92]：

$$H_{tc} = -J \sum_s (A_s + A_s^\dagger) - J \sum_p (B_p + B_p^\dagger) \quad (1.27)$$

toric code是一个严格可解的二维模型，体系存在着拓扑序，激发是非阿贝尔的任意子（anyonic）。Schulz等人在文章中指出这推广的toric code模型同样存在着拓扑序和任意子（anyonic）统计。他们研究了 $N = 2$ 情形下磁场的扰动对推广toric code模型基态的影响，发现了一个由拓扑序到激化态的相变。作者用数值方法详细的研究了 $N = 3$ 情形下的微扰的影响，在不同的微扰下发现了一级和二级相变。

1.4 密度矩阵重正化群方法在量子化学中的应用

S.R.White提出的实空间密度矩阵重正化群方法[22, 23]取得了很大的成功，成为现在研究一维模型的“标准”算法。同时密度矩阵重正化群方法也被不断的推广。向涛在1996年将它推广到了动量空间[93]。将研究的模型（一般选取周期性边条件）通过傅立叶变换变到动量空间后，可以将动量空间的离散点按照一定的规则排成一维的链。我们就可以利用标准的密度矩阵重正化群的方法来求解体系的基态。但是动量空间的相互作用不再是短程的，任意两个动量点之间都存在着相互作用。因此相比实空间的算法，动量空间算法需要消耗更多的资源。在[93]中，向涛通过定义组合算符，大大降低了计算所需的资源。

量子化学领域一般研究的是少体问题（如各种分子的性质）。如果我们选择一组正交归一的基矢，就能将体系的哈密顿量写成二次量子化的形式。然后，我们也可以利用动量空间的重正化群方法来求解这类问题。

S. R. White和R. L. Martin在1999年第一次将动量空间的密度矩阵重正化群方法应用到了水分子（ H_2O ）的计算中[94]。他们比较了不同的方法给出的在25个基矢下的水分子的能量。仅仅保留70个态，度矩阵重正化群方法给出的基态能就比其它的方法要低（因为密度矩阵重正化群方法是变分的方法，能量越低说明精度越高）。在保留状态数为200时，度矩阵重正化群方法得到的基态的能量就很接近于精确对角化的的结果。这样的结果表明度矩阵重正化群方法在量子化学领域有很大的潜力。

在密度矩阵重正化群方法第一被用到了量子化学计算并取得成功之后，它被广泛的应用到了量子化学的计算中：CsH的能级的计算[95]，多烯类（polyenes）的研究[96]，对过渡金属及其团簇的研究[97]，过渡金属化合物的研究[98]，对铬（Cr）和镍（Ni）的基态的研究[99]等等。同时，对于度矩阵重正化群方法方法本身，也出现了很多的改进[100–105]。

我们知道对于近邻相互作用的体系，有纠缠熵的面积定律。但是对于实际的化学体系，给定一组基矢（往往是Hartree-Fock给出的轨道），他们对应的哈密顿量写在二次量子化形式下具有长程相互作用。和二维的近邻相互作用体系一样，虽然我们能将所有的轨道排列成一条链，但是实际体系的纠缠却不是对应一维体系的面积定律给出的纠缠。虽然我们目前无法严格的知道分子体系的纠缠，但是可以肯定的是密度矩阵重正化群方法不能有效的描述体系的纠缠。我们注意到最近有人利用一类基于树结构的张量网络态来解决量子化学问题[106, 107]。这类波函数相对于密度矩阵重正化群方法，能给出更多的纠缠。

在量子化学中，给定的基矢数目越大，往往计算能够得到更精确的波函数。这从变分原理的角度能够很好的理解。但是随着轨道数的增加，计算的代价也越大。为了解决这个问题，我们发展了一种优化Hartree-Fock轨道的方法[108]。

如果我们选取的轨道数目是无穷多，原则上我们能够得到体系的严格基态。但是由于计算资源有限，我们能够处理的轨道数目也是有限的。因此如何从一组Hartree-Fock轨道中选择出给定数目的轨道，使得在这组轨道基矢下面，得到的体系的基态能量最低，是一个很重要的问题。

在量子化学中有自然轨道（nature orbital）的概念。自然轨道指当我们求得体系的基态后，利用体系基态构造的单粒子约化密度矩阵的本征态。它是在是初始基矢的一个幺正变换，变换矩阵就是将约化密度矩阵对角化的幺正矩阵。从定义上可以看出，单粒子约化密度矩阵的本征值描述了对应的自然轨道在基态中占的比重。

因此我们将自然轨道和密度矩阵重正化群方法结合起来，发展了本论文中将要介绍的Hartree-Fock轨道优化方法。给定一组数目较大的Hartree-Fock轨道（数目为 N_t ），由于计算资源有限，我们只能处理 N_0 个轨道。因此我们从 N_t 个轨道中选择出中间能量的 N_0 个轨道，称之为活跃轨道。剩下的轨道中能量较高的轨道称为虚轨道；能量较低的称为冻结轨道，设置成双占据，对应于内层的核电子。在选定的活跃轨道下完成常规的密度矩阵重正化群计算，得到体系的基态。利用基态构造单粒子约化密度矩阵，将其对角化，得到的本征态为原轨道的幺正变换。将接近于0的本征值对应的轨道和虚轨道交换，将接近于1的本征值对应的轨道和冻结轨道交换。重复上面的过程直到要求的物理量收敛。

可以看出，计算过程实际上是在不断的对所有的轨道做幺正变换，寻找能

给出最低基态能的轨道集合。数值计算的结果表明这种轨道优化的密度矩阵重正化群方法是高效和精确的。我们目前知道的水分子的基态能量的最精确的结果是Garnet Kin-Lic Chan 和Martin Head-Gordon利用密度矩阵重正化群方法得到的[109]。他们通过保留41个Hartree-Fock轨道，在密度矩阵重正化群计算中保留6000个态，得到水分子的基态能量为 $-76.314715(E_h)$ 。我们发现，利用上面介绍的轨道优化的方法，选取一组Hartree-Fock轨道基矢（数目大于41），在活跃轨道数为41的情况下，我们仅仅保留128个态就能够得到比文献[109]中更低的基态能量。

以上介绍的利用密度矩阵重正化群方法优化Hartree-Fock轨道的方法也能和其它方法结合。我们得到的优化轨道可以作为其它量子化学方法的输入。在这组优化的轨道下，应该能够得到更精确的基态。

1.5 论文安排

在第二章，我们首先详细的介绍了磁平移群的概念。从晶格上的电子体系出发，我们定义了磁平移群。然后回顾了磁单级子作用下的自由电子在球面上的薛定谔方程的求解。得到了自旋的另一种解释。通过将球面推广到环面，导出了对应的磁平移群的生成元 U^x 和 U^y 。

在第三章，我们详细的介绍了密度矩阵重正化群方法和矩阵乘积态。

在第四章，我们利用 U^x 和 U^y 构造了和海森堡链类似的模型:Quantum Torus Chain。详细的分析了这个模型的对称性。通过对称群的表示给出了体系能级可能的简并。最后通过计算激发能的大小，关联函数等研究了模型的相图。在临界相我们利用纠缠熵随体系尺寸的变化关系拟合出对应共形场的中心荷。通过基态能量的导数我们确定了相图中相变的阶数。

在第五章。我们先回顾了密度矩阵重正化群方法在量子化学领域的应用。然后详细的介绍了我们提出的Hartree-Fock轨道优化方法。通过对水分子的基态能量的计算以及和其它量子化学方法的比较，证实了方法的有效性。

第六章是对本论文的总结。

第二章 有磁场情况下的平移对称性

2.1 磁平移算符 (MTO) 和磁平移群 (MTG)

对于一个完美的晶格体系，平移操作与系统的哈密顿量对易，因此是体系的一个对称操作。通过对平移操作构成的阿贝尔群进行简单的分析就可以导出Bloch定理[110]。如果对系统外加一个磁场，此时磁场产生的矢势不可能在空间均匀。因此普通的平移操作不再与系统的哈密顿量对易。在这种情况下我们可以定义磁平移算符(Magnetic Translation Operator)使得它们与系统的哈密顿量对易[71]。而此时所有磁平移算符够成的集合由于不满足乘法的封闭性，不够成群。通过分析可以知道它们实际上构成一个投影群(Projective Group/Ray Group)[111]。同时我们可以由磁平移算符构造一个群，叫做磁平移群 (Magnetic Translation Group)[71, 112]。下面我们简要的介绍一下磁平移群和磁平移算符的基本概念。

2.1.1 Bloch定理

对于完美晶格上的电子系统，晶格上的所有对称操作与体系的哈密顿量对易。对晶格的对称性（空间群）通过群论的分析，可以用对应的空间群的不可约表示来标记不同的单粒子态。如果仅仅考虑晶格的平移不变性，这就是Bloch定理[110]。因为一个方向的平移算符构成一个循环群，而循环群只有一维的表示。对于一个 N 阶的循环群，所有的一维表示为：

$$\lambda_m = e^{im2\pi/N}, m = 1, \dots, N \quad (2.1)$$

在周期性晶格势的作用下，单粒子的波函数应该构成平移算符构成群的表示（即为平移算符的本征态）。

$$T_{R_n} \psi(r) = \psi(r + R_n) = e^{ik \cdot R_n} \psi(r) \quad (2.2)$$

其中 $\psi(r)$ 是单粒子的波函数， R_n 是布拉维格矢。对于周期性边界条件的要求（即是平移群构成 N 阶循环群的要求）

$$T_N \psi(r) = \psi(r) \quad (2.3)$$

其中 N 是晶格在一个方向的长度。可以知道对于动量 k 的限制为

$$k = \frac{2\pi}{N}n, n = 1, \dots, N \quad (2.4)$$

这样就从平移群的角度简要地推出了Bloch定理。

2.1.2 有外磁场情况下的Bloch电子

对于有磁场情况下的晶格体系。单电子的哈密顿量为:

$$H = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}]^2 + V(r) \quad (2.5)$$

因为有矢势 \mathbf{A} 的存在, 晶格的平移算符不再与哈密顿量对易, 即 $[T_{R_n}, H] \neq 0$ 。在下面的推导中我们会重新定义平移算符, 使之与单电子的哈密顿量对易。

磁平移群最早是由J.Zak在1964年提出的[71]。下面根据[71]我们简要的介绍一下磁平移群的概念。我们考虑由如下定义的矢量构成的布拉维格子。

$$\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (2.6)$$

其中 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是布拉维格子的基矢, n_1, n_2, n_3 是整数。上面定义的每一个矢量代表着晶格上的点。考虑一条从原点到 \mathbf{R}_n 的路径: 从原点出发, 我们移动到另外一个格点 \mathbf{R}_1 。从 \mathbf{R}_1 出发, 我们移动矢量 \mathbf{R}_2 , 到达格点 $\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2$ 。依此一直进行直到我们到达格点 \mathbf{R}_n 。显然, 对于上面要求的路径, 我们的选择不是唯一的。假设其中的一条路径由矢量 $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i$ 构成。我们用下面的符号来表示这条路径:

$$|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i\rangle \quad (2.7)$$

由定义我们有

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \dots + \mathbf{R}_i \quad (2.8)$$

下面我们定义一个同时依赖于 \mathbf{R}_n 和从原点到 \mathbf{R}_n 的路径的算符:

$$\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}_n \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\right] \times \exp\left[\frac{i}{2}(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_3 + \dots + \mathbf{R}_{i-1} \times \mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{h}\right] \quad (2.9)$$

其中 $\mathbf{h} = \frac{e\mathbf{H}}{\hbar c}$, \mathbf{H} 是外加磁场的大小。 \mathbf{A} 是对应磁场的矢势, \mathbf{p} 是电子的动量算符, e 是电子的电量。在(2.9)中矢量外积的顺序由(2.7)给出。其中表达式

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_3 + \dots + \mathbf{R}_{i-1} \times \mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{h} \quad (2.10)$$

有一简单的解释。考虑(2.7)中的路径在垂直于磁场平面上的投影：

$$|\mathbf{R}_1^p, \mathbf{R}_2^p, \dots, \mathbf{R}_i^p\rangle \quad (2.11)$$

其中 \mathbf{R}_k^p 是 \mathbf{R}_k 在垂直于 \mathbf{h} 平面的投影。我们可以得到如下的关系式：

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_3 + \dots + \mathbf{R}_{i-1} \times \mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{h} = \frac{1}{2}(\mathbf{R}_1^p \times \mathbf{R}_2^p + \mathbf{R}_1^p \times \mathbf{R}_3^p + \dots + \mathbf{R}_{i-1}^p \times \mathbf{R}_i^p) \cdot \mathbf{h} \quad (2.12)$$

在上面等式右边括号里的项给出的是由

$$\mathbf{R}_1^p, \mathbf{R}_2^p, \dots, \mathbf{R}_i^p, -\mathbf{R}_n^p \quad (2.13)$$

围成的多边形的面积。

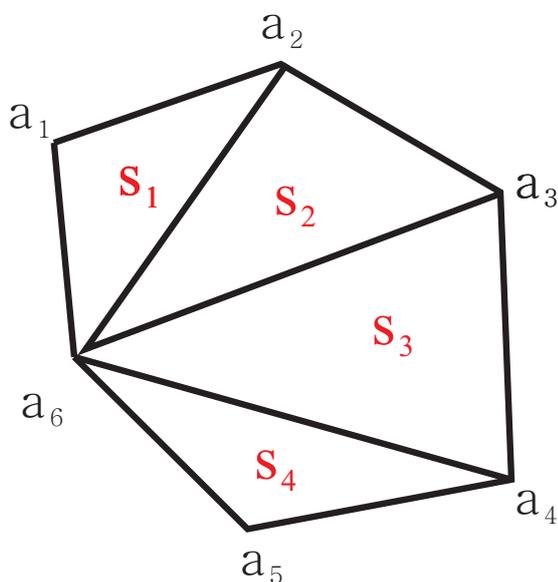


图 2.1: 图示(2.12)中右边的项是由 $\mathbf{R}_1^p, \mathbf{R}_2^p, \dots, \mathbf{R}_i^p, -\mathbf{R}_n^p$ 围成的多边形的面积。详细的讨论见正文。

这点可以从图2.1中清楚的看到。我们假设 $\mathbf{R}_k^p = a_{k+1} - a_k, k = 2, 3, \dots, 6,$

$\mathbf{R}_n^p = a_6 - a_1$ 。由于

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\mathbf{R}_1^p \times (\mathbf{R}_2^p + \mathbf{R}_3^p + \mathbf{R}_4^p + \mathbf{R}_5^p) &= \frac{1}{2}(a_2 - a_1) \times (a_6 - a_2) = S_1 \\ \frac{1}{2}\mathbf{R}_2^p \times (\mathbf{R}_3^p + \mathbf{R}_4^p + \mathbf{R}_5^p) &= \frac{1}{2}(a_3 - a_2) \times (a_6 - a_3) = S_2 \\ \frac{1}{2}\mathbf{R}_3^p \times (\mathbf{R}_4^p + \mathbf{R}_5^p) &= \frac{1}{2}(a_4 - a_3) \times (a_6 - a_4) = S_3 \\ \frac{1}{2}\mathbf{R}_4^p \times \mathbf{R}_5^p &= \frac{1}{2}(a_5 - a_4) \times (a_6 - a_5) = S_4\end{aligned}\quad (2.14)$$

因此有

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R}_1^p \times \mathbf{R}_2^p + \mathbf{R}_1^p \times \mathbf{R}_3^p + \dots + \mathbf{R}_{i-1}^p \times \mathbf{R}_i^p) = S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = S \quad (2.15)$$

其中 S 是由 $\mathbf{R}_1^p, \mathbf{R}_2^p, \dots, \mathbf{R}_i^p, -\mathbf{R}_n^p$ 围成的多边形的面积。从而，在定义(2.9)中右边指数里的项即为磁场 \mathbf{H} 穿过由

$$\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i, -\mathbf{R}_n \quad (2.16)$$

组成的多边形的磁通量子数（以 $\frac{e}{hc}$ 为单位）。

因此我们可以将定义(2.9)重新写成：

$$\tau(\mathbf{R}_n | \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}_n \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\right] \times \exp[i\phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)] \quad (2.17)$$

其中 $\phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 是由磁场穿过由(2.16)中的矢量围成的多边形的磁通。

下面我们证明取适当的规范可以使得定义在(2.9)或者(2.17)中的算符和磁场中布洛赫电子的哈密顿量(2.5)对易。我们可以容易的得到下面的对易关系：

$$[p_i + \frac{e}{c}A_i, p_k + \frac{e}{c}A_k] = i\hbar\left[\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k}\right] \quad (2.18)$$

因此只要我们选择的矢势能满足下面的关系

$$\frac{\partial A_k}{\partial x_i} + \frac{\partial A_i}{\partial x_k} = 0; i, k = 1, 2, 3 \quad (2.19)$$

就能保证 $\tau(\mathbf{R}_n | \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 和哈密顿量 $H = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}]^2 + V(\mathbf{r})$ 对易。可以验证，如果我们取对称规范：

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{H} \times \mathbf{r}] \quad (2.20)$$

就能使得矢势满足关系(2.19)。

对于(2.17)中定义的两个算符 $\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 和 $\tau(\mathbf{R}'_n|\mathbf{R}'_1, \mathbf{R}'_2, \dots, \mathbf{R}'_i)$ ，它们的乘积为：

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)\tau(\mathbf{R}'_n|\mathbf{R}'_1, \mathbf{R}'_2, \dots, \mathbf{R}'_i) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}'_n) \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\right] \times \\ &\exp\left[\frac{i}{2}(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \dots + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}'_k + \dots + \mathbf{R}'_{k-1} \times \mathbf{R}'_k) \cdot \mathbf{h}\right] \end{aligned} \quad (2.21)$$

其中右边等式第二部分指数里的矢量积的顺序由下面定义：

$$|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}'_1, \mathbf{R}'_2, \dots, \mathbf{R}'_i\rangle \quad (2.22)$$

我们可以看到上面的等式右边是满足算符 τ 的定义(2.9)。因此上面的式子可以写成

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)\tau(\mathbf{R}'_n|\mathbf{R}'_1, \mathbf{R}'_2, \dots, \mathbf{R}'_i) &= \\ \tau(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}'_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i, \mathbf{R}'_1, \mathbf{R}'_2, \dots, \mathbf{R}'_i) & \end{aligned} \quad (2.23)$$

因此对于定义在(2.9)中的算符 τ ，我们定义了一个乘法，同时所有的 τ 关于这个乘法是封闭的。同时，我们容易知道算符 $\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 和算符 $\tau(-\mathbf{R}_n|-\mathbf{R}_1, -\mathbf{R}_2, \dots, -\mathbf{R}_i)$ 互为逆算符。单位算符 I 即为恒等算符。因此所有算符 τ 的集合够成一个群—磁平移群 (MTG)。

我们注意到如下的算符

$$T^m(\mathbf{R}_n) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}_n \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})\right] \quad (2.24)$$

(上标 m 用来表示磁平移，以区别于普通的平移操作) 构成的集合不是一个群。可以验证此集合中的元素关于乘法不封闭。在后面我们将会看到， $T^m(\mathbf{R}_n)$ 构成的是一个投影群 (Projective Group or Ray Group)。下面我们将简要分析一下以上定义的磁平移群的结构以及它与普通的平移群的关系。显然，当磁场 $\mathbf{H} = 0$ 时，磁平移算符 $\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 只依赖于 \mathbf{R}_n ，此时磁平移群退化为普通的平移群。

我们定义所有由 \mathbf{R}_n 生成的算符 $\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 构成的集合为 $H(\mathbf{R}_n)$ 。我们把 $H(\mathbf{R}_n)$ 当成群的一个元素。通过简单的计算，我们可以得到。

$$H(\mathbf{R}_n)H(\mathbf{R}'_n) = H(\mathbf{R}_n + \mathbf{R}'_n) \quad (2.25)$$

$H(\mathbf{0})$ 是不变算符, $H(\mathbf{R}_n)$ 和 $H(-\mathbf{R}_n)$ 互为逆元。因此由所有 $H(\mathbf{R}_n)$ 组成的集合构成一个群 H 。显然这是一个阿贝尔群, 它和普通的平移群通过 \mathbf{R}_n 是一一对应的关系, 因此它们是同构关系。而由 $\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i)$ 组成的群和群 H 是多对一个关系。因此它们之间是同态的关系:

$$\tau(\mathbf{R}_n|\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_i) \rightarrow H(\mathbf{R}_n) \quad (2.26)$$

以上我们对于磁平移算符和磁平移群有了一个简要的介绍。在文献[71, 112]中,通过引入类似波恩-冯-卡门 (Born-von Karman) 的边界条件, 将磁平移群由无限群变成一个有限大小的群, 从而给出了磁平移群的线性表示。

下面我们要讨论由 $T^m(\mathbf{R}_n) = \exp[\frac{i}{\hbar}\mathbf{R}_n \cdot (\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A})]$ 组成的集合。在上面我们提到, 这个集合不构成群, 因为里面的元素对于乘法不封闭。如果我们取对称规范(2.20),由(2.18)我们可以得到:

$$[T^m(\mathbf{R}_n), H] = 0 \quad (2.27)$$

其中 H 是系统的哈密顿量, 在(2.5)中定义。即磁平移算符与系统的哈密顿量是对易的。磁平移算符满足的乘法关系如下:

$$T^m(\mathbf{R}_1)T^m(\mathbf{R}_2) = T^m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2) \exp[-i/2(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2) \cdot \mathbf{h}] \quad (2.28)$$

其中 $\mathbf{h} = \frac{e\mathbf{H}}{\hbar c}$ 。两次应用上面的关系我们能够得到如下的对易关系:

$$T^m(\mathbf{R}_1)T^m(\mathbf{R}_2) = T^m(\mathbf{R}_2)T^m(\mathbf{R}_1) \exp[-i(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2) \cdot \mathbf{h}] \quad (2.29)$$

从上面我们可以看到, $T^m(\mathbf{R}_n)$ 在不考虑算符前面的因子的情况下是封闭的。并且我们有:

$$\begin{aligned} [T^m(\mathbf{R}_1)T^m(\mathbf{R}_2)]T^m(\mathbf{R}_3) &= T^m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2)T^m(\mathbf{R}_3) \exp[-i/2(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2) \cdot \mathbf{h}] \\ &= T^m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3) \exp[-i/2(\mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_3 + \mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_3) \cdot \mathbf{h}] \end{aligned} \quad (2.30)$$

和

$$\begin{aligned} T^m(\mathbf{R}_1)[T^m(\mathbf{R}_2)T^m(\mathbf{R}_3)] &= T^m(\mathbf{R}_1)T^m(\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3) \exp[-i/2(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_3) \cdot \mathbf{h}] \\ &= T^m(\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3) \exp[-i/2(\mathbf{R}_2 \times \mathbf{R}_3 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_3) \cdot \mathbf{h}] \end{aligned} \quad (2.31)$$

由上面我们可以知道:

$$[T^m(\mathbf{R}_1)T^m(\mathbf{R}_2)]T^m(\mathbf{R}_3) = T^m(\mathbf{R}_1)[T^m(\mathbf{R}_2)T^m(\mathbf{R}_3)] \quad (2.32)$$

即 $T^m(\mathbf{R}_n)$ 构成的集合满足结合律。由上面的性质我们可以知道 $T^m(\mathbf{R}_n)$ 构成一个投影群（投影群和投影表示的概念参见附录）。假设 H 的某一能级是 M 重简并的，对应的波函数由 ψ_m 标记。我们有

$$\mathbf{T}^m(\mathbf{R}_n)\psi_m = \sum_{l=1}^M D_{lm}(\mathbf{R}_n)\psi_l \quad (2.33)$$

由上面的式子我们可以清晰的看到， ψ_m 构成了普通平移算符的投影表示（投影群和投影表示的概念参见附录）。

在文献[111, 113–118]中作者详细的讨论了磁平移群的表示。在文献[119]中作者讨论了同时存在电场和磁场的情况下的平移群的性质。

2.2 球面上的电子和自旋

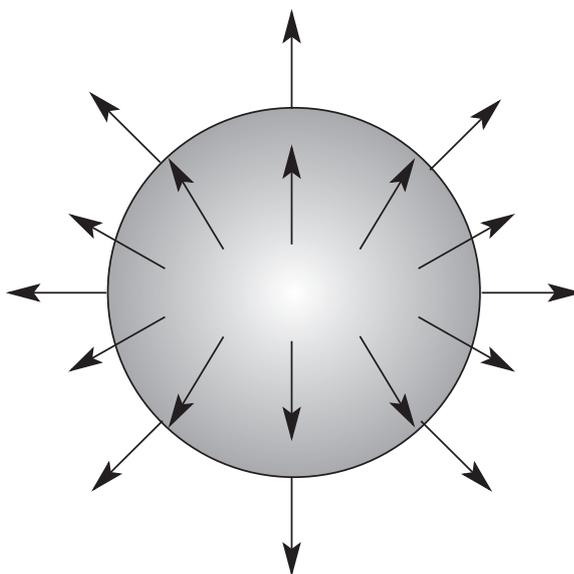


图 2.2: 自由电子限制在二维球面上。在球的中心有一个磁单极子，产生垂直于球面的磁场，如图中的箭头所示。

在上面的讨论中我们考虑了晶格上的电子在有磁场的情况下的对称操作和对称群。如果我们考虑二维平面上的自由电子，在外加磁场的作用下，电子的能级会劈裂成简并的朗道能级。下面我们考虑一个自由电子在径向磁场的作用

下的运动[120]。如图2.2所示，自由电子限制在球面上运动。在球面的中心有一个磁单极子，产生径向的磁场。T.T.Wu和C.N.Yang[72, 73]在1970年代给出了这个量子力学问题的解。在下面的讨论中我们会发现，这样一个体系的磁平移群的生成元就是 $SU(2)$ 的自旋算符 S 。在下面的讨论中我们会用到下面的量：

$$\begin{aligned}\phi &= -\sin\theta\mathbf{x} + \cos\theta\mathbf{y} \\ \theta &= \cos\theta\cos\phi\mathbf{x} + \cos\theta\sin\phi\mathbf{y} - \sin\theta\mathbf{z} \\ \mathbf{r} = \boldsymbol{\Omega} &= \sin\theta\cos\phi\mathbf{x} + \sin\theta\sin\phi\mathbf{y} + \cos\theta\mathbf{z}\end{aligned}\quad (2.34)$$

假设球面的半径为 R ，穿出球面的磁通为 $2Q\phi_0$ （ ϕ_0 是磁通量子）。这样的磁单极子产生的磁场为：

$$\mathbf{B} = \frac{2Q\phi_0}{4\pi R^2}\mathbf{r}\quad (2.35)$$

其中 \mathbf{r} 是径向的单位矢量。对于上面的磁场可以定义矢势如下：

$$\mathbf{A} = -\frac{\hbar c Q}{eR}\cot\theta\boldsymbol{\phi}\quad (2.36)$$

其中的 \mathbf{r} 和 $\boldsymbol{\phi}$ 的定义见(2.34)。系统的哈密顿量为：

$$H = \frac{\hbar^2}{2mR^2}|\boldsymbol{\Lambda}|^2\quad (2.37)$$

其中

$$\boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{R} \times \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\boldsymbol{\Omega})\right)\quad (2.38)$$

$\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{R}/|\mathbf{R}|$ 是在球坐标系下的径向方向的单位矢量。在球坐标系下我们有：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Lambda} &= \mathbf{R} \times \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\boldsymbol{\Omega})\right) \\ &= \boldsymbol{\Omega} \times \left[-i\left(\boldsymbol{\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{\phi}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) - Q\cot\theta\boldsymbol{\phi}\right] \\ &= -i\left(\boldsymbol{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) + Q\cot\theta\boldsymbol{\theta}\end{aligned}\quad (2.39)$$

通过计算我们可以知道

$$\frac{2mR^2H}{\hbar^2} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \left(Q\cot\theta + \frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2\quad (2.40)$$

我们发现有如下的对易关系：

$$[\Lambda_i, \Lambda_j] = i\epsilon_{ijk}(\Lambda_k - Q\Omega_k)\quad (2.41)$$

和

$$[\Lambda_i, \Omega_j] = i\epsilon_{ijk}\Omega_k \quad (2.42)$$

为了研究球面的旋转对称性，我们定义如下的算符：

$$L = \Lambda + Q\Omega \quad (2.43)$$

它们满足如下的角动量的对易关系：

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}L_k \quad (2.44)$$

同时我们可以定义升降算符：

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (2.45)$$

满足如下的关系：

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm L_{\pm} \quad (2.46)$$

我们在球坐标系下写下 L_z 和 L_{\pm} 的表达式如下：

$$\begin{aligned} L_z &= -i\frac{\partial}{\partial\phi} \\ L_{\pm} &= e^{\pm i\phi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{Q}{\sin\theta}\right] \end{aligned} \quad (2.47)$$

求解这个量子力学问题我们会发现，物理的解要求穿过球面的磁通是量子化的： $2Q$ 必须是整数。到此我们可以看到，我们定义的算符 \mathbf{L} 和自旋算符 S 是等价的。体系的最低的朗道能级给出 $SU(2)$ 群的 $S = Q$ 表示。算符 \mathbf{L} 正是在上章里我们提到的磁平移群的生成元。对于没有磁场的情况。系统的对称性为 $SO(3)$ ，由此定义的轨道角动量算符只能取整数。但是在有磁场的情况下，体系的对称群变成了 $SU(2)$ 。角动量可以取半整数，这是一种分数化。

在这里我们主要是研究了在有磁场情况下的球面电子的对称群（磁平移群）的特性。需要指出的是这样的结构在研究分数量子霍尔效应时很有用[121, 122]。

2.3 环面上电子

上面我们讨论了自由电子在球面上运动的磁平移群，下面我们考虑一个环面，如图2.3所示，自由电子在环面上运动，有一个磁场垂直穿过环面，下面我们考虑这个体系的磁平移群[123]。如果我们取朗道规范：

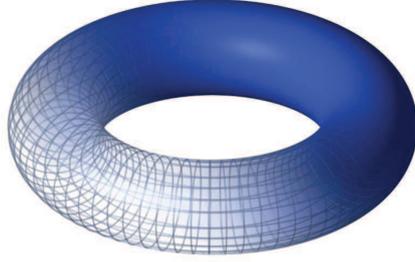


图 2.3: 自由电子限制在二维环面上。

$$A = Bx\hat{y} \quad (2.48)$$

系统的薛定谔方程为:

$$H\psi = \left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial y} - iBx\right)^2\right]\psi(x, y) = E\psi \quad (2.49)$$

如下定义的算符:

$$\tilde{P}_x = -i\frac{\partial}{\partial x} - By, P_y = -i\frac{\partial}{\partial y} \quad (2.50)$$

与系统的哈密顿量对易。

环面实际上是在一个平面上取两个方向的周期性边界条件。即如下的点:

$$(x, y) \sim (x + 1, y) \sim (x, y + 1) \quad (2.51)$$

实际上是一个点。如果我们取如下的边界条件:

$$\psi(x + 1, y) = e^{iBy}\psi(x, y), \psi(x, y + 1) = \psi(x, y) \quad (2.52)$$

系统的哈密顿量是良好定义的。为了使得(2.52)自洽, 我们有:

$$\psi(x + 1, y + 1) = e^{iB(y+1)}\psi(x, y + 1) = e^{iB}e^{iBy}\psi(x, y) = \psi(x + 1, y) = e^{iBy}\psi(x, y) \quad (2.53)$$

从上式我们有: $e^{iB} = 1$ 。因此, 磁场强度有如下的限制:

$$B = 2\pi\nu \quad (2.54)$$

其中 ν 是一个整数, 即穿过环面的磁通量子数。我们可以看到, 这里得到的磁通量子化的条件和在球面上得到的类似。在(2.50)中定义的算符作用到满

足(2.52)的波函数上面时，并不会回到原来的波函数：

$$\begin{aligned} P_y \psi(x+1, y) &= e^{iBy} (P_y + B) \psi(x, y) \\ \tilde{P}_x \psi(x, y+1) &= (\tilde{P}_x - B) \psi(x, y) \end{aligned} \quad (2.55)$$

由此我们可以看到，对于这个体系无穷小的平移的生成元不存在，但是我们仍然可以构造有限的平移算符

$$\begin{aligned} U_x(a) &= e^{-i\tilde{P}_x a} \\ U_y(b) &= e^{-iP_y b} \end{aligned} \quad (2.56)$$

来满足(2.52)：

$$\begin{aligned} (U_x(a)\psi(x, y+1)) &= e^{iBa(y+1)} \psi(x-a, y+1) \\ &= e^{iBa} e^{iBay} \psi(x-a, y) \\ &= e^{i2\pi\nu a} (U_x(a)\psi(x, y)) \\ (U_y(b)\psi(x, y+1)) &= \psi(x+1, y-b) \\ &= e^{iB(y-b)} \psi(x, y-b) \\ &= e^{-iBb} e^{iBy} \psi(x, y-b) \\ &= e^{-i2\pi\nu b} e^{iBy} (U_y(b)\psi(x, y)) \end{aligned} \quad (2.57)$$

因此，波函数 $U_x(a)\psi$ 和 $U_y(b)\psi$ 能够满足边界条件(2.52)，如果

$$\nu a, \nu b \in Z \quad (2.58)$$

因此，平移的长度 a 和 b 被限制到 $1/\nu$ 的整数倍。另外，满足边界条件(2.52)在单位长度的平移算符作用下满足：

$$\begin{aligned} (U_x(1)\psi(x, y)) &= e^{iBy} \psi(x-1, y) = \psi(x, y) \\ (U_y(1)\psi(x, y)) &= \psi(x, y-1) = \psi(x, y) \end{aligned} \quad (2.59)$$

因此 $U_x(1)$ 和 $U_y(1)$ 是单位算符。因此算符 $U_x(1/\nu)$ 和 $U_y(1/\nu)$ 是循环群 Z_ν 的生成元。但是它们交换之后会产生一个相因子：

$$U_x(a)U_y(b)(U_x(a))^{-1}(U_y(b))^{-1} = e^{iBab} \quad (2.60)$$

因此我们知道，在有磁场的情况下，环面上的电子的磁平移群是由 $Z_m \times Z_m$ 的投影表示来描述的。我们可以看到，这个群是一个有限群。我们可以选取基 $\{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |\nu - 1\rangle\}$ 来构造这个群的投影表示。磁平移算符在这组基上面的作用是：

$$\begin{aligned} U_x(n_x/\nu)|q\rangle &= e^{i2\pi n_x q/\nu}|q\rangle \\ U_y(n_y/\nu)|q\rangle &= |q + n_y(\text{mod } \nu)\rangle \end{aligned} \quad (2.61)$$

第三章 密度矩阵重正化群和矩阵乘积态

在具体的模型和结果讨论之前，我们先介绍一下本论文中采用的数值方法。

3.1 密度矩阵重正化群方法

3.1.1 数值重正化群及其局限性

Wilson 提出的数值重正化群（NRG）方法成功地解决了单杂质的近藤问题[24–26]。

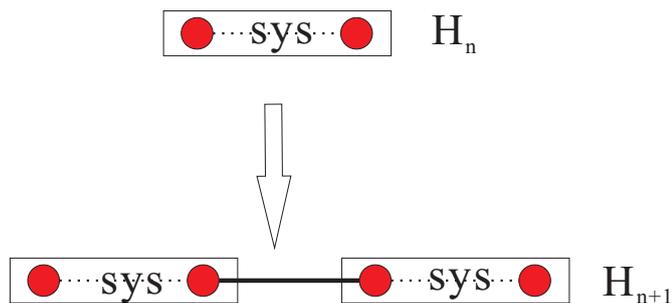


图 3.1: NRG流程中的一步，每一步的系统是由上一步系统和自身直积得到。

在图3.1中我们显示了NRG的流程。假设我们在第 n 步已经知道了此时系统的哈密顿量和各个算符在已知基底 $|\alpha\rangle$ (维数为 M)下的形式。在第 $N + 1$ 步，我们将系统和自身直积，构成新的系统，因为我们知道各个算符在各自基底下的形式，两部分系统之间的相互作用项也可以在直积的基矢下表示出来：

$$\langle \alpha_1, \alpha_2 | O_1 O_2 | \alpha'_2, \alpha'_1 \rangle = \langle \alpha_1 | O_1 | \alpha'_1 \rangle \langle \alpha_2 | O_2 | \alpha'_2 \rangle \quad (3.1)$$

这样，整个新系统的哈密顿量就可以在新的基矢 $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ 下表示出来。

但是此时系统的希尔伯特空间的维数变成了 M^2 ，如果重复这样的过程，希尔伯特空间的维数会发散，超出我们的计算资源。这就是我们通常说的指数墙。

为了降低新系统的希尔伯特空间维数，我们将新的系统的哈密顿量 H_{n+1} 对角化，得到系统的全部能级。同时基矢 $|\alpha_1, \alpha_2\rangle$ 也可以按照对角化的幺正矩阵线性组合成新的基矢 $|\beta\rangle$ ，

$$|\beta\rangle = \sum_{\alpha_1 \alpha_2} U_{\alpha_1 \alpha_2, \beta} |\alpha_1, \alpha_2\rangle \quad (3.2)$$

每个基矢对应新系统的一个能级。我们将新的基矢 $|\beta\rangle$ 做一个切断，保留能量较小的 M 个能级对应的基矢。这样我们得到了截断的基矢 $|\beta'\rangle$ 。将新系统的哈密顿量和所有的算符投影到截断的基矢下，得到切断后的新系统。

重复上面的过程，我们很快就能处理热力学极限的系统，因为在上面介绍的过程中，系统的尺寸是指数增长的。

在单杂质的问题中，各晶格格点和杂质点的耦合是随着它和杂质点的距离指数衰减的，这使得NRG方法能够得到很高的精度。在Wilson 成功的用NRG解决了单杂质的近藤问题之后，有很多人试图将NRG应用到其它的晶格模型[27-32]，但是计算的精度都不是很高。

现在我们知道，NRG之所以在处理一般的一维晶格模型时精度不是很高，是因为边界条件在重正化的过程中没有很好的处理。在图3.2中我们演示了NRG处理一维无穷深势阱中的自由粒子的情形。求解这个体系的薛定谔方程，我们知道基态的波函数只在势阱的两个边界上有节点。在NRG中我们做一步重正化时，将两个系统直积，这时在新的系统的中心会出现一个节点。但实际上，新的系统的基态波函数同样只有在边界上有节点，在中心取极大值。因此在NRG的过程中，这种边界条件没有得到正确的反映。这正是NRG方法在一般的格点体系中不成功的原因。

3.1.2 从数值重正化群到密度矩阵重正化群

上面我们提到，由于没能正确地处理边界条件，NRG方法虽然在处理单杂质的近藤问题时精度很高，但是在处理一般的晶格系统时却不是很成功。

为了减少边界效应，向涛和G. A. Gehring提出了一种改进的NRG算法[33]。这个算法和传统的NRG的不同在于每次新的系统是上一步的系统和一个点直积而来，如图3.3所示。这样做的好处一是可以减少边界效应，因为此时波函数节点和最大值的位置在经过一步重正化后基本不变。二是可以减小切断误差。在传统的NRG过程中，我们需要将希尔伯特空间的维数从 M^2 截断到 M ，而此时

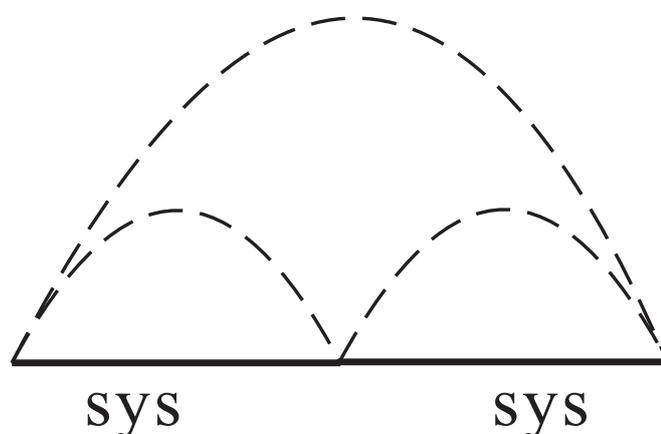


图 3.2: 无限深势阱中的自由粒子的波函数。无论体系大小, 基态波函数只在边界存在两个节点。由同样大小的小体系构成大体系时, 基态波函数在中心点幅度最大, 但由小体系的基态直积得到的波函数却在中心存在节点。

我们只需要从 qM (q 是格点上局域的希尔伯特空间的维数) 截断到 M , 需要截断的态的比例明显减少。

向涛和G. A. Gehring利用改进的NRG方法研究了自旋1/2和自旋1的反铁磁海森堡链[33, 124]。他们得到了比较精确的基态能量, 但是能量随着保留状态数 M 的收敛速度太慢。

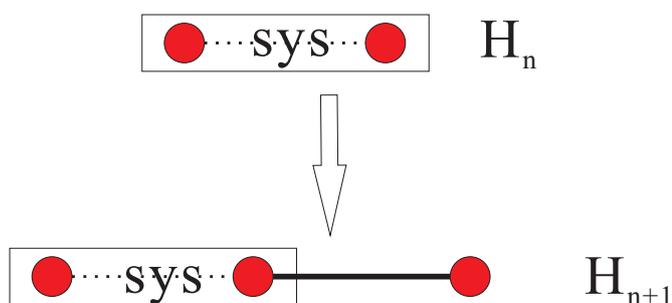


图 3.3: 改进后NRG流程中的一步, 每一步的系统是由上一步系统和单个点直积而来。

S. R. White 和R. M. Noack在研究了边界条件对NRG的影响之后[125], 提出了密度矩阵重正化群方法 (DMRG)[22, 23]。DMRG 主要考虑了在重正化的过程中考虑到环境对系统的影响。在图3.4中, 我们给出了无穷链长DMRG的流程图。我们以自旋1/2的开放边界条件的海森堡链为例说明整个流程, 分为

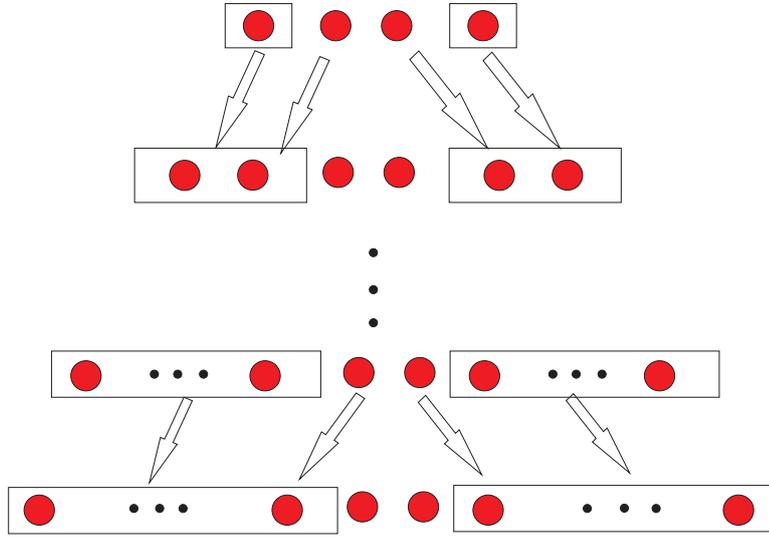


图 3.4: 无穷链长DMRG 流程图。

以下几个步骤:

1. 将一条链上的四个点分成四部分，左边的系统块 (sys)，右边的环境块(env)，中间是两个点(l, r)。此时，各部分的基矢都一个粒子的希尔伯特空间。我们可以构造出这四个点组成的总系统的哈密顿量，包含 $H_{sys}, H_{env}, H_{sys,l}, H_{l,r}, H_{r,env}$ 几部分。因为我们知道各个块的哈密顿量和所有的算符在各自的基下的表示，所有可以据此构造出整个系统的哈密顿量。
2. 通过数值方法得到以上四个点组成的体系的基态 $|\psi_0\rangle$ 。然后将系统块和在中间的左边的点直积起来称为新的系统块,基矢为:

$$|s'\rangle = |s\rangle \otimes |l\rangle \quad (3.3)$$

同样将环境块和在中间的右边的点直积起来称为新的环境块,基矢为:

$$|e'\rangle = |e\rangle \otimes |r\rangle \quad (3.4)$$

通过体系的基态 $|\psi_0\rangle$ 构造出体系的密度矩阵:

$$\rho = |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \quad (3.5)$$

对环境(系统)求迹 (trace), 得到系统 (环境) 的约化密度矩阵:

$$\begin{aligned}\rho_{s'} &= \text{tr}_{e'} |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \\ \rho_{e'} &= \text{tr}_{s'} |\psi_0\rangle\langle\psi_0|\end{aligned}\quad (3.6)$$

将得到的约化密度矩阵对角化, 得到两个幺正变化矩阵 U_s, U_e , 我们可以证明, $\rho_{s'}$ 和 $\rho_{e'}$ 的本征谱相同。用幺正矩阵 U_s, U_e 将基矢 $|s'\rangle$ 和 $|e'\rangle$ 作线性变换:

$$\begin{aligned}|s^{new}\rangle &= U_s[s', s^{new}]|s'\rangle \\ |e^{new}\rangle &= U_e[e', e^{new}]|e'\rangle\end{aligned}\quad (3.7)$$

这样得到的新的基矢正是约化密度矩阵的本征矢。如果此时基矢 $|s'\rangle = |s\rangle \otimes |l\rangle$ 的维数, 超过设定的维数 M , 则对系统和环境的新基矢 $|s^{new}\rangle$ 和 $|e^{new}\rangle$ 进行切断。因为每一个基矢对应着约化密度矩阵的本征值, 我们按照约化密度矩阵的本征值从小到大进行切断, 直到剩下 M 个基矢为止。

3. 计算出新的系统和环境中, 哈密顿量和各算符在各自切断基矢下的表示, 为下一步的重正化作准备。
4. 在系统和环境之间加入两个点, 重复上面的过程直到整个体系达到设定的长度。

我们知道整个体系的长度在每一步的重正化过程中会增加2。对于局域相互作用的体系, 内存的消耗不会随着链长的增长而增长, 计算的复杂度是随着链长线性增长的。在实际的计算中, 我们发现计算精度会随着链长的增加而下降。为了克服这个问题, 引入了有限链长的DMRG算法。

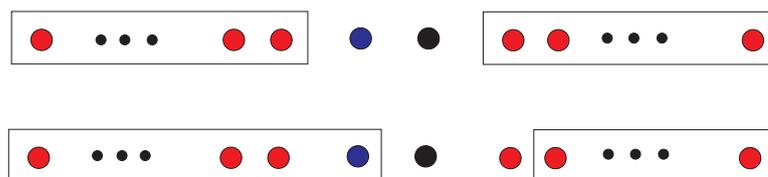


图 3.5: 有限链DMRG 流程图。

在图3.5中，我们给出了有限链长DMRG的流程图。当利用无穷链长算法使得体系的长度达到一定的长度后，我们将保持体系的长度不变。此时我们从环境块中拿出一个点，系统块仍然增加一个点。此时在新的系统和环境中间仍然有两个自由的点。向无穷链长算法一样做一步重正化。我们将这样增加系统块长度减小环境块长度的过程叫做扫描。重复上面的步骤直到环境块中的点已经能在 M 个态下严格表示。此时将系统和环境块的作用互换，从右向左开始扫描。重复上面的过程左右来回扫描直到所求的物理量达到预设的收敛精度。

从上面的过程可以看出，DMRG方法实际上是在给定基矢的数目下，寻找最适合描述体系基态的基矢的过程。因此它是一个变分的方法。在DMRG的每一步都需要求解体系的基态，我们可以用各种求最大（小）本征值的方法（Lanczos）。相对于精度对角化，它能处理的体系更大，因为我们每次处理的只是体系基矢的一部分。

通过DMRG我们不仅能研究系统的基态，同时我们也可以研究系统较低的激发态[34, 76, 126]，这时密度矩阵形式如下：

$$\rho = \sum_{i=1}^k \frac{1}{k} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (3.8)$$

它对应于 k 个能量最低的态 $|\psi_i\rangle$ 等权重构成的混态。通过计算激发态和基态的能量，我们就可以判断系统的激发是否存在能隙。

DMRG相比于NRG的优势在于引进了环境块的概念，以约化密度矩阵的本征值作为切断基矢的根据。这样充分的考虑了环境对于系统的影响。我们可以证明对于一个体系，如果将它分成两部分，对于给定的在系统和环境的直积态表示下的态

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \quad (3.9)$$

其中 $|i\rangle$ ， $i = 1, \dots, l$ 是系统的一组正交归一基矢， $|j\rangle$ ， $i = 1, \dots, s$ 是环境的一组正交归一基矢，要求得一组新的系统的维数为 m ($m < l$) 的基矢，使得近似的波函数

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha_j} \alpha_{\alpha_j} |a\rangle |j\rangle \quad (3.10)$$

与初始的波函数 $|\psi\rangle$ 最靠近。即：

$$\Delta(\psi, \tilde{\psi}) = \|\psi - \tilde{\psi}\|^2 \quad (3.11)$$

最小。满足上面条件的基矢正是对应于系统的约化矩阵 $\rho_{s'}$ 的 m 个较大的本征态。

在下章中我们会发现，对于将要研究的模型：Quantum Torus Chain，如果系统的长度不是 m 的整数倍，各个能级都会是 m 重简并的(4.17)。为了解除这种简并，需要取格点长度 $N = km$ (k 是一个整数)。我们的工作主要集中在 $m = 3$ 的情形。在传统的DMRG的计算中，系统和环境总是一样大小，不能满足体系的长度是3的整数倍。为此，我们改进了一下DMRG无穷链长算法中系统和环境块增长的方式，如图3.6所示。假设我们保留的状态数 M 最多能

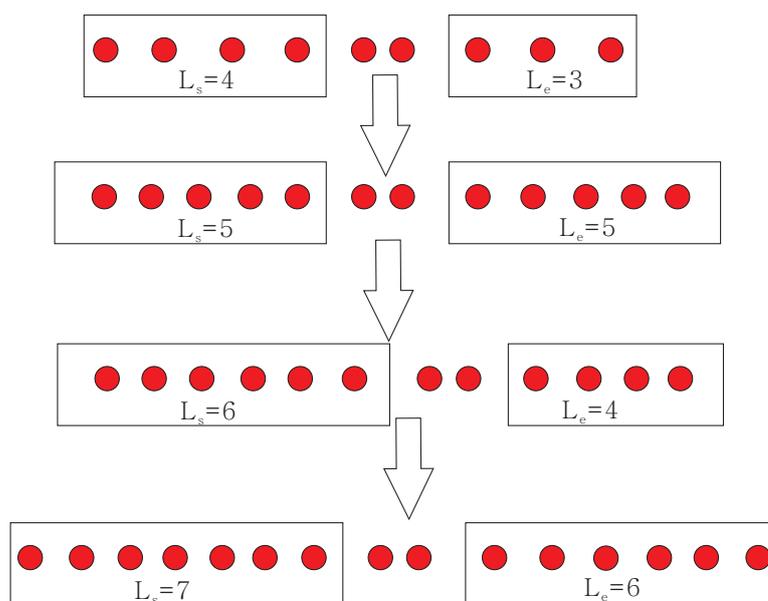


图 3.6: 适应于 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain的DMRG算法的流程图，在每一步中始终保持体系的总长度为3的倍数。

精确描述4个格点的体系。则在第一步，我们取系统的长度为4，环境的长度为3，此时体系的总长度为 $N = 3 + 4 + 2 = 9$ ，是3的倍数。经过一步标准的重正化，能够得到长度为5的块的信息。在下一步，我们取系统和环境的长度均为5，此时体系的总长度为 $N = 5 + 5 + 2 = 12$ 。然后我们做一步有限长度的算法，保证总系统的长度为12不变，将系统块的长度增加1，变成6，环境块的长

度减少1, 变为4。做一步标准的重正化。这样做的目的是为了得到长度为7的块的信息。下一步我们取系统的长度为7, 环境的长度为6, 此时体系的总长度为 $N = 6 + 7 + 2 = 15$, 仍然是3的倍数。而长度为7和6的块的信息已经在上一步重正化之后准备好。这样下去, 我们就一直能保证系统的总长度总是3的倍数。当体系的长度达到我们想要的长度的时候, 我们就可以利用标准的有限链长的DMRG扫描算法进一步提高精度。

在图3.7中, 给出了改进的DMRG无穷链长算法和传统的DMRG无穷链长算法得到的基态能量差随着体系的变化。可以看出改进后的算法得到的基态能量在尺度较大时有明显的改善。

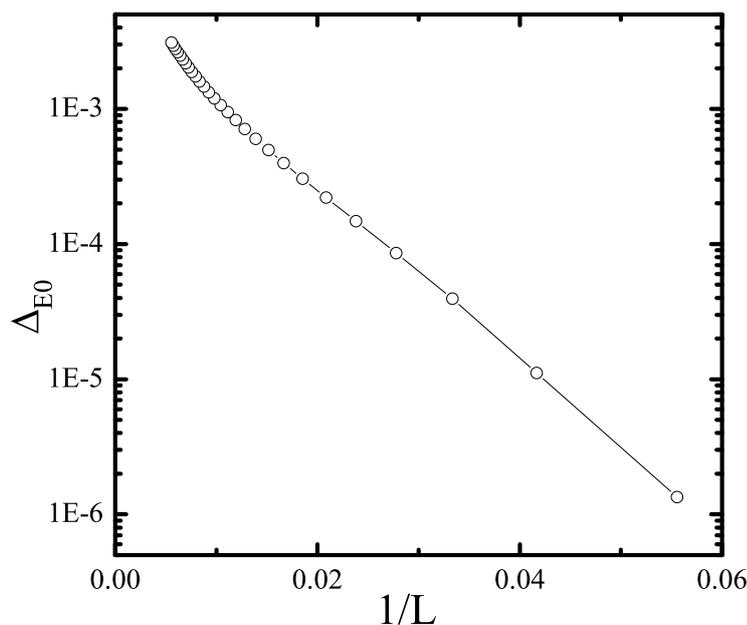


图 3.7: $\Delta_{E_0} = E_0^t - E_0^m$ 。 E_0^t 是传统的DMRG的算法给出的基态能量, E_0^m 是改进后的DMRG的算法给出的基态能量。

DMRG算法从被提出后[22, 23], 被广泛的应用到各种一维的体系, 数值结果表明DMRG有着很高的精度[127, 128]。到现在, DMRG已经是研究一维体系应用最广的方法之一。

3.2 矩阵乘积态及相关算法

一般在研究格点模型时，人们倾向于采用周期性边界条件。因为在这样的情况下，有限尺寸效应比开放边界条件要小。同时在周期边界条件下，动量是好量子数，有利于研究不同动量的激发。对于开放的边界条件，通常会有边界态的出现。这些态往往会和基态混在一起，降低计算的精度。DMRG方法虽然在研究一维开边界问题时取了重要的成功。但是对于周期性边界的体系，利用DMRG得到的精度往往不能达到开放边界的精度[129]。

人们对高温超导体体系的研究中提出了很多的二维的模型[53, 54]。对这些模型的求解是一个很重要的课题。一般在利用DMRG求解二维的模型时，我们将二维的链进行排序，将它变成一个一维的链，再利用一维的算法处理相应的体系[55],如图3.8所示。

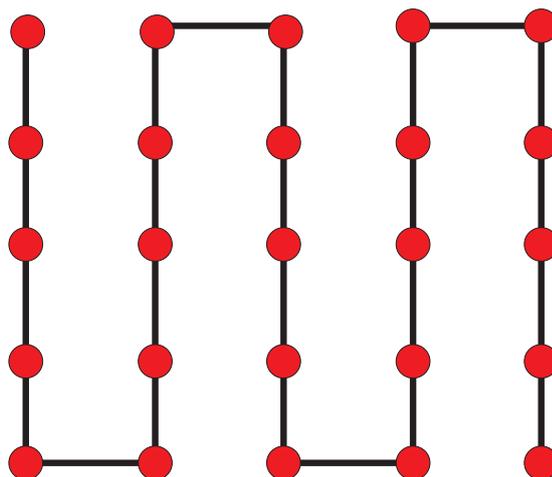


图 3.8: DMRG在处理二维体系时，往往按照上图将二维的格子变成一条一维链。

向涛等人提出了在处理二维问题时的直接做法，而不是把二维的体系变成一维的链来处理[56]。这样能提高计算的精度。随后S. R. White利用DMRG算法尝试处理了许多准二维（多条链）的体系[57–64]。但是DMRG在求解这些二维的模型的时候没有显示出处理一维体系时的精度。

在[55]中，Shoudan Liang 和Hanbin Pang指出，DMRG方法在研究二维体系时存在着本征的困难。如果要使得数值精度在重正化过程中保持不变，需要保留的状态数(M)随着格点的数目指数增长。

下面我们将发现，DMRG在上面体系中遇到的困难，无论是周期性边界条件下精度的下降，还是向二维推广遇到的本征困难，都可以在矩阵乘积态的框架下进行解释。

矩阵乘积态是一类变分波函数，有如下的形式[130]：

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} (A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_L}) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (3.12)$$

其中 A^{σ_i} 是定义在格点 i 上的一系列矩阵。在 i 格点上的每个基矢 $|\sigma_i\rangle$ 对应一个矩阵。我们一般记这个矩阵的维数为 $D \times D$ 。给定一个基矢 $|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$ ，态 $|\psi\rangle$ 在这个基下展开的系数对应于将所有格点上的对应矩阵 A^{σ_i} 的乘积。如果是周期边界条件，就将得到的矩阵求迹；如果是开放边界条件，则第一个格点上的矩阵为 $1 \times D$ 维（行向量），最后一个格点上的矩阵为 $D \times 1$ 维（列向量）。

我们在图3.9中用图表示了上面定义的MPS。每一点的垂直的键代表着物理的状态 $|\sigma_i\rangle$ ，在格点方向的左右两个键代表着矩阵的指标。

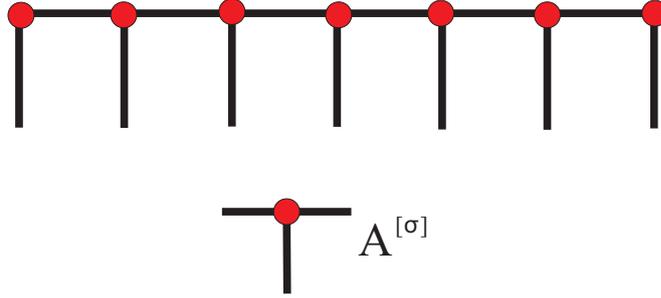


图 3.9: MPS的示意图，每个点上有一个依赖于格点物理状态的矩阵。

可以证明，任意一个态

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (3.13)$$

通过不断的对系数 $c_{\sigma_1 \dots \sigma_L}$ 做SVD分解[130]：

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \Psi_{\sigma_1, (\sigma_2 \dots \sigma_L)} = \sum_{a_1}^{r_1} U_{\sigma_1, a_1} S_{a_1, a_1} (V^\dagger)_{a_1, (\sigma_2 \dots \sigma_L)} \equiv \sum_{a_1}^{r_1} U_{\sigma_1, a_1} c_{a_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} \quad (3.14)$$

最后总可以将它写成矩阵乘积的形式：

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}} A_{a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots A_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} A_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \quad (3.15)$$

这样我们就将任意一个在直积表象下的态 $|\psi\rangle$ 变换成了MPS形式(3.12)。

我们知道AKLT模型的基态是严格可解的[131, 132]，它的基态是价键固体态，如图4.2所示。我们可以严格的证明，价键固体态可以用一个MPS严格的表示。我们知道价键固体态的物理空间是 $S = 1$ 。可以看成是两个自旋 $S = 1/2$ 的自旋耦合后投影到自旋三重态（ $S=1$ 的子空间）上：

$$\begin{aligned} |+\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |0\rangle &= \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \\ |-\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.16)$$

相邻的格点之间的 $1/2$ 自旋组成自旋单态：

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.17)$$

最终，我们可以将价键固体态写成(3.12)的形式，每个点上的矩阵为：

$$A^+ = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad A^0 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \quad A^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

因此MPS是可以描述一类物理系统的基态波函数，用MPS来描述物理体系的基态是合适的。

对于每一个MPS，存在着规范的自由度，给定可逆的矩阵 X ，我们如果对格点上的矩阵作如下的变换：

$$A^{\sigma_i} \rightarrow A^{\sigma_i} X, \quad A^{\sigma_{i+1}} \rightarrow X^{-1} A^{\sigma_{i+1}}. \quad (3.19)$$

不改变MPS对应的态。因此对于给定的态可以有很多的不同的MPS表示。我们给MPS加上一定的限制，可以得到一个态对应的唯一的MPS。这就是MPS的正则形式（canonical form）[133]。对于(3.12)中定义的MPS，假设 A^{σ_i} 是一个 $D_i \times D_{i+1}$ 的矩阵，记 $D = \max_i D_i$ 。如果满足以下的条件：

1. $\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} = I_{D_m}$ 对于所有的 $1 \leq i \leq L$ 。
2. $\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} \Lambda^{i-1} A^{\sigma_i} = \Lambda^i$ ，对于所有的 $1 \leq i \leq L$ 。

3. $\Lambda^0 = \Lambda^L = 1$, 每一个 $\Lambda^{[m]}$ 是一个 $D_{m+1} \times D_{m+1}$ 正定的对角矩阵。并且是满秩的, 同时满足 $\text{tr}\Lambda^i = 1$ 。

则称此MPS满足正则形式。正则形式的MPS有以下的性质:

1. 对于给定的态 $|\psi\rangle$, 满足正则形式的MPS是唯一的。
2. 如果在格点 i 和格点 $i+1$ 的中间将态 $|\psi\rangle$ 分成两部分, 则 Λ^i 是对应划分下的约化密度矩阵的非零的本征值。

在量子信息领域, 衡量体系的各部分关联的一个量是纠缠熵 (Entanglement Entropy)。对于任意一个态 $|\psi\rangle$, 如果我们将它分成两部分: 系统和环境。在系统和环境的直积表象下有:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j} |i\rangle |j\rangle \quad (3.20)$$

其中 $|i\rangle$, $|j\rangle$ 分别是系统和环境的基矢。对 $|\psi\rangle$ 做Schmidt分解 (即对系数 $a_{i,j}$ 做奇异值分解):

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha} |\omega_{\alpha}^s\rangle |\omega_{\alpha}^e\rangle \quad (3.21)$$

在新的系统和环境的基矢 $|\omega_{\alpha}^s\rangle$, $|\omega_{\alpha}^e\rangle$ 下, 系统和环境对应的约化密度矩阵分别为:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_s &= \text{Tr}_E |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 |\omega_{\alpha}^s\rangle \langle \omega_{\alpha}^s| \\ \hat{\rho}_e &= \text{Tr}_S |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 |\omega_{\alpha}^e\rangle \langle \omega_{\alpha}^e| \end{aligned} \quad (3.22)$$

因此, 对于纯态, 系统和环境的约化密度矩阵的本征谱是相同的。如果基矢 $|\omega_{\alpha}^s\rangle$, $|\omega_{\alpha}^e\rangle$ 是正交归一的, 态 $|\psi\rangle$ 是归一的:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (3.23)$$

我们可以推出:

$$\sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 = 1 \quad (3.24)$$

在满足上面的情况下我们可以定义纠缠熵：

$$S = -Tr[\hat{\rho}_s \log(\hat{\rho}_s)] = -\sum_{\alpha=1}^x \lambda_{\alpha}^2 \log(\lambda_{\alpha}^2) \quad (3.25)$$

实际上它是Renyi熵：

$$S_n = \frac{1}{1-n} [Tr(\hat{\rho}_s^n)] = \frac{1}{1-n} \sum_{\alpha=1}^x \lambda_{\alpha}^n \quad (3.26)$$

在 $n = 1$ 极限下的值。我们知道，对于只存在局域相互的物理体系，如果把它分成系统和环境两部分，按照上面的定义我们来计算基态中系统和环境的纠缠熵，会发现它们一般满足面积定律（Area Law for the Entanglement Entropy）[36]：

$$S \sim L^{d-1} \quad (3.27)$$

其中 L 是系统或者环境的线性尺度， d 是整个体系所在的空间维度。如果系统是临界体系一般会有一个对数修正项：

$$S \sim L^{d-1} \log(L) \quad (3.28)$$

纠缠熵的面积定律说明系统和环境的纠缠只和他们界面的尺度有关。对于一维的开放边界的体系，界面的尺度就是单个的点。因此一维有能隙体系的纠缠熵随着系统（环境）的增长会到达一个饱和值[134]：

$$S \sim Constant \quad (3.29)$$

对于AKLT模型的基态，价键固态是有能隙的。它的纠缠熵不超过 $\log(3)$ 。对于临界体系，纠缠熵随着系统（环境）的尺度对数增长：

$$S \sim \log(L) \quad (3.30)$$

对于一个MPS，如果每个矩阵的维数不超过 D ，由正则形式的性质我们知道，无论从体系的哪一部分将体系分成两部分，它们之间的纠缠最大的情形是约化密度矩阵的 N 个本征值均为 $1/N$ ，它们之间的纠缠熵都不会超过：

$$S_{max} \leq -\frac{1}{D} \sum_{\alpha=1}^D \log \frac{1}{D} = \log D \quad (3.31)$$

因此对于一维的有能隙的量子系统，将其分成两部分后的纠缠熵不会超过一个常数 ($S \leq S_0$)。对于一个MPS，如果 $D > \exp(S_0)$ ，则从纠缠熵的角度来看，这个MPS可以严格描述这个量子体系的基态[135, 136]。对于一维的临界体系，因为纠缠熵的增长随着体系的增长对数增长，如果体系的尺度不是很大，对于一个MPS，只要 D 足够大，总能描述此体系的纠缠。

Rommer Stefan 和Ostlund Stellan [35]最先发现利用DMRG得到的基态本质上是一个MPS。每次在系统（环境）中加入一个点之后，我们要将系统的基矢和新加的点的基矢做么正变换：

$$|i'\rangle = \sum_{i,s} U_{s,i}^{i'} |i, s\rangle \quad (3.32)$$

其中 $|i'\rangle$ 是新的新系统的基矢， $|i\rangle$ 是初始系统的基矢， $|s\rangle$ 是单个格点的基矢。如果我们定义：

$$A_{i,i'}^s = U_{s,i}^{i'} \quad (3.33)$$

那么DMRG的每一步对应的波函数都是一个形式为(3.12)的MPS。在DMRG计算过程中变换矩阵 U 的么正性保证了对应MPS满足正则形式。

我们回到DMRG遇到的困难[41]。对于周期边界条件，如果将一个体系分成两部分，则这两部分之间的边界的尺度是2，而对于开放边界条件，边界的尺度是1。因此从面积定律来看，一个周期性的体系的基态的纠缠熵是开放边界条件的两倍。因为在MPS 框架下有 $S \sim \log D$ 。因此要描述一个周期性的体系的基态，对应的MPS的保留状态数(D_p)应是对应的开放体系的(D_o)平方：

$$\log D_p = 2 \log D_o \Rightarrow D_p = D_o^2 \quad (3.34)$$

所以，在DMRG的计算中，保留同样的状态数的情况下，周期性边界条件的体系的精度会远低于开放边界体系的精度。

对于二维有能隙的体系，如果将体系 ($L \times L$) 分成两部分，此时两部分的边界不再是孤立的点，而是一条线。我们由面积定律可以知道此时体系的纠缠熵正比于体系的线性尺度：

$$S \sim L \quad (3.35)$$

因此要准确的描述二维的体系，保留状态数应该随着体系大小指数增长：

$$\log D \sim L \Rightarrow D \sim \exp(L) \quad (3.36)$$

这样，我们就能解释Shoudan Liang 和Hanbin Pang在[55]中的发现：如果要使得数值精度在重正化过程中保持不变，需要保留的状态数(M)是随着格点的数目指数增长的。

同样我们可以理解，为什么在DMRG的计算中，在相同的保留状态数下自旋 $S = 1/2$ 的反铁磁海森堡链的数值精度不如自旋 $S = 1$ 的高[34]。因为自旋 $1/2$ 的基态是无能隙的[137]，相比于自旋 $S = 1$ 的有能隙的基态，纠缠熵会有对数的修正。因此要保证同样的数值精度，必须在自旋 $S = 1/2$ 的计算中，保留状态数随着系统的尺寸增长：

$$\log D_{S=1/2} \sim \alpha \log L \Rightarrow D_{S=1/2} = L^\alpha \quad (3.37)$$

如今，人们发展了很多基于MPS的数值算法，能够处理各种物理问题。对于周期性边界条件，发展了优于DMRG的算法[40–42]，基于MPS的变分算法[40, 43]，能处理连续体系和场的算法[44–46]，处理时间演化的算法[47–49]以及处理有限温度性质的算法[50]。

下面介绍一下我们在文章中用到的算法：无穷大时间演化块消滅(infinite time-evolving block decimation)算法，简称为iTEBD算法[51, 52]，是一种基于虚时演化的MPS算法。对于一个只有最近邻相互作用的哈密顿量：

$$H = \sum_r h^{[r,r+1]} \quad (3.38)$$

如果将虚演化算符：

$$U = \exp(-\tau H) = \exp(-\tau \sum_r h^{[r,r+1]}) \quad (3.39)$$

不断的作用到任意一个和基态不正交的态 $|\psi_0\rangle$ 上，就可以的得到系统的基态。

当 τ 很小的时候，对于虚时演化算法可以作Suzuki-Trotter分解：

$$\exp(-\tau \sum_r h^{[r,r+1]}) = \exp(-\tau \sum_{r=odd} h^{[r,r+1]}) \exp(-\tau \sum_{r=even} h^{[r,r+1]}) + O(\tau^2) \quad (3.40)$$

我们记：

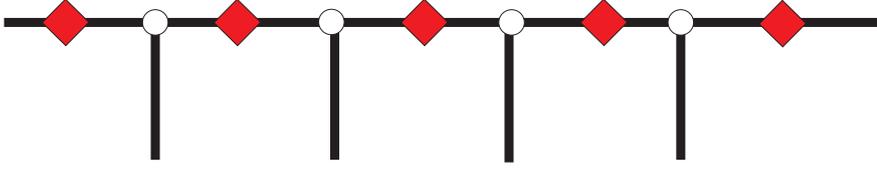


图 3.10: 在上图MPS中, 我们将约化密度矩阵的本征值显式的写入。红色的正方形代表着(3.42)中的 λ , 白色的点代表 Γ 矩阵, 三个和它相邻的键代表着它的三个指标。

$$\begin{aligned}
 U^{AB} &= \exp(-\tau \sum_{r=odd} h^{[r,r+1]}) = \prod_{r=odd} \exp(-\tau h^{[r,r+1]}) = \prod_{r=odd} U^{[r,r+1]} \\
 U^{BA} &= \exp(-\tau \sum_{r=even} h^{[r,r+1]}) = \prod_{r=even} \exp(-\tau h^{[r,r+1]}) = \prod_{r=even} U^{[r,r+1]} \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

在iTEBD算法中我们用到的MPS的形式和(3.12)中的不一样。我们将约化密度矩阵的本征值显示的写在MPS的形式里:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_n} (\Gamma^{[1]i_1} \lambda^{[1]} \Gamma^{[2]i_1} \lambda^{[2]} \dots \Gamma^{[n]i_n}) |i_1, \dots, i_n\rangle \quad (3.42)$$

我们将(3.42)中表示的MPS图示在3.10中。

下面我们介绍iTEBD算法的步骤:

1. 给定一个初始的MPS, 维数为 D 。如图3.11(a)所示, 在这里我们考虑一个无穷大的双子格的MPS。
2. 将投影算符(虚时演化算符)作用到这个MPS上, 如图3.11(a), 得到一个新的MPS, 如图3.11(b)所示。在图3.12中我们演示了局域的矩阵是如何演化的。将局域的投影算符作用到相应的矩阵上, 将左右两边的 λ_B 吸收后形成一个四阶的张量 Θ 。将张量 Θ 的指标分成左右两部分, 将其做奇异值分解得到么正矩阵 X, Y 和奇异值 $\bar{\lambda}_A$ 。最后将之前吸收的 λ_B 显式的写出来, 就可以得到和原来的MPS形式一样的结构。我们知道 $\bar{\lambda}_A$ 的维数为 Dd (d 是单个物理点的希尔伯特空间的维数)。为了保证MPS的维数在投影之后不变, 我们可以根据奇异值的大小进行切断。
3. 不断的交替将 U^{AB} 和 U^{BA} 作用到MPS上, 直到相应的物理量达到收敛的精度。

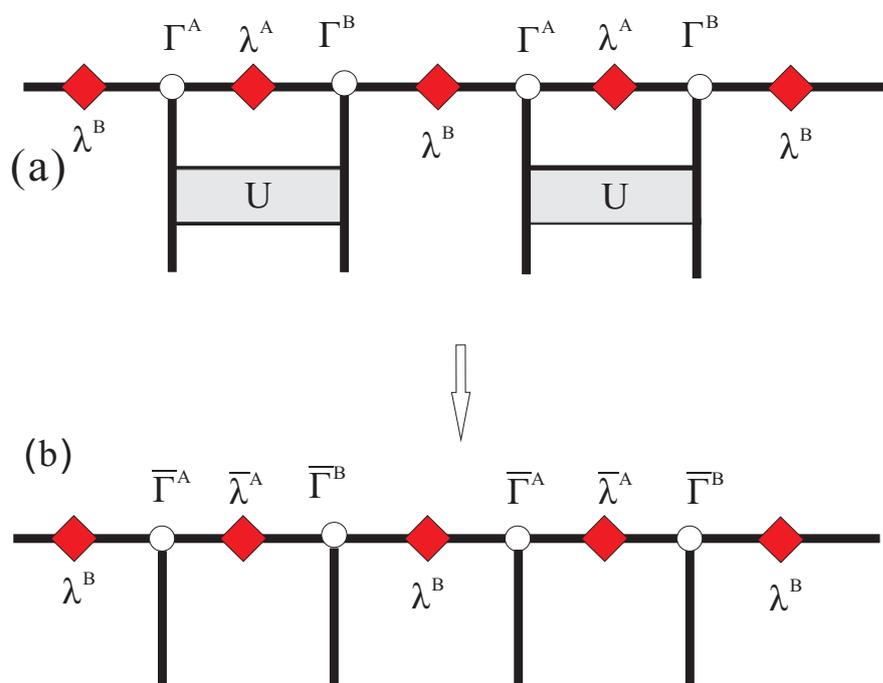


图 3.11: iTEBD算法中, 将局域演化算符作用到MPS上, 最终仍然得到一个MPS。

可以证明iTEBD算法的计算复杂度是 $O(d^3 D^3)$, 存储的复杂度是 $O(d^2 D^3)$ 。iTEBD相对于DMRG的一个好处在于它直接处理无穷大小的系统。而DMRG只能处理有限大小的体系, 为了得到无穷的体系的性质, 往往需要做有限尺度的标度。

上面提到MPS能描述非临界的一维体系, 但是对于临界体系, 往往需要保留状态数 D 比较大。我们注意到G. Vidal等人提出了一类新的变分波函数:多尺度纠缠重正化假设 (multiscale entanglement renormalization ansatz), 简称MERA[138–141]。从纠缠熵的角度来看, 这类变分波函数能给出临界体系的对数修正。但是由于其计算复杂度过高, 现在并没有得到广泛的应用。

通过将MPS推广到二维, 我们可以得到投影纠缠对态 (projected entanglement pair states), 简称PEPS。PEPS 相比二维DMRG的优势由PEPS表示的波函数满足二维体系的面积定律。我们注意至今为止基于PEPS的算法得到了很大的发展[65–70]。在这里不详细介绍。

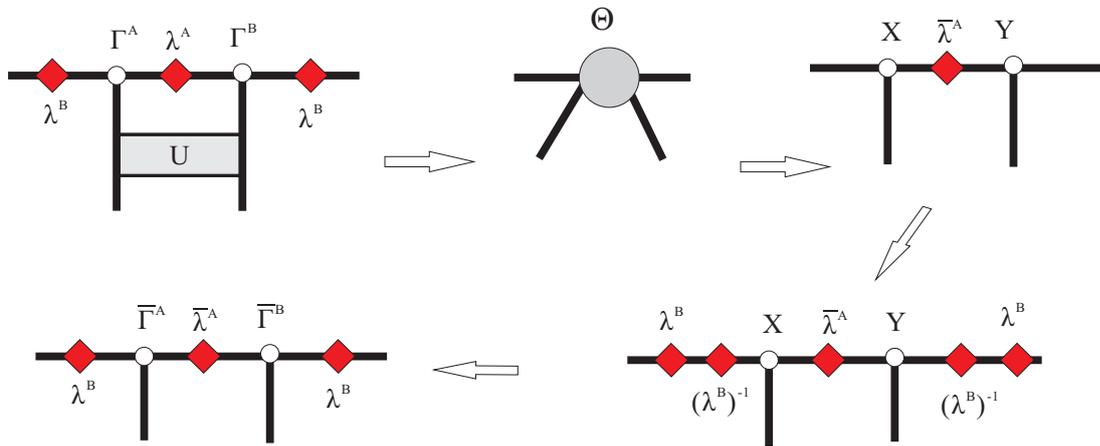


图 3.12: iTEBD算法的流程图。

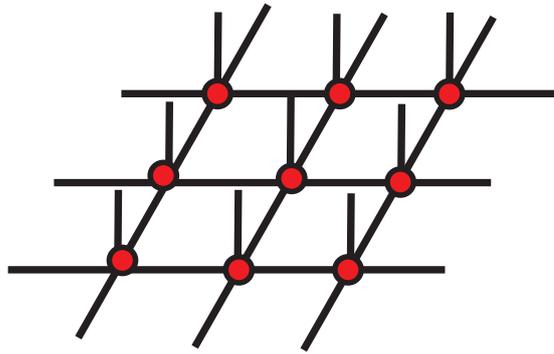


图 3.13: PEPS的图形表示。PEPS是MPS向二维的直接推广。每个点上的矩阵变成四阶的张量，将所有张量的指标求和，就能得到在相应的基矢下展开的系数。

第四章 Quantum Torus Chain—一类新的模型

4.1 哈密顿量

在上面我们介绍了磁平移算符，并且分别考虑了电子在球面和环面上运动的情形。下面我们将要从环面上电子的磁平移群的生成元出发，考虑一类和自旋类似的模型。

首先我们回顾一下由自旋算符构成的海森堡模型。

把相邻的自旋耦合起来，就能构成海森堡模型，哈密顿量如下所示：

$$H_{XYZ} = \sum_i (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z) \quad (4.1)$$

其中 S^x, S^y, S^z 代表自旋的三个分量， J_x, J_y, J_z 代表三个方向的耦合常数。

对于各向同性的反铁磁($J > 0$)海森堡模型，我们知道有Haldane猜想[74, 75]。Haldane 通过把 d 维量子反铁磁海森堡模型的有效作用量映射到 $d + 1$ 维的非线性 σ 模型，得到了如下的结论：对于半整数的反铁磁自旋链，系统的激发无能隙，关联函数幂次衰减，存在准长程的序。对于整数自旋的反铁磁链，系统的激发存在能隙(Haldane能隙)，关联函数指数衰减。我们知道在非线性 σ 模型中有一个拓扑项。这一项只对半整数的海森堡链起作用，正是这一项导致了haldane能隙的关闭。

半整数自旋链最简单的例子就是 $S = 1/2$ 的自旋链。Marshall定理[142, 143]告诉我们，双子格的反铁磁海森堡模型的基态在适当的旋转局域基矢下，可以是正定的（展开系数全为正）。后来Lieb等人推广了Marshall定理[7]，得到了著名的Lieb-Schultz-Mattis定理[8, 9](我们注意到最近对于此定理有一个高维的成功推广[144])，证明了半整数的自旋的反铁磁链的激发是没有能隙的。 $S = 1/2$ 的自旋链可以通过Bethe ansatz严格求解。J.des Cloizeaux等人修正了之前的近似结果[4]，得到了自旋 $1/2$ 的反铁磁海森堡链的严格的激发为[137]：

$$\omega_k = (\pi/2) |\sin k| \quad (4.2)$$

如4.1所示。

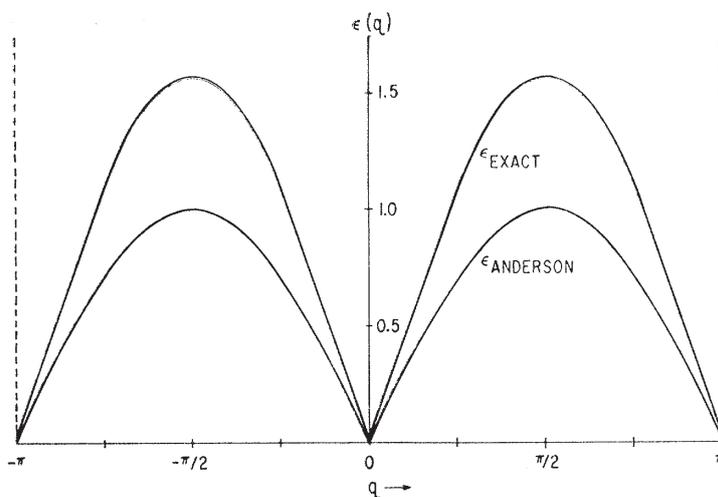


图 4.1: 来自于J.des Cloizeaux等人的文章[137],图中显示了Anderson通过近似方法得到的激发谱和Bethe ansatz的严格解的结果。

需要指出的是这不是自旋波的结果,因为它的基态没有Neel序。 $S = 1/2$ 的自旋链的激发实际上是spion, 携带 $1/2$ 的自旋[5]。

对于自旋 $1/2$ 的链, 我们还有一个严格可解的模型:Majumdar-Ghosh模型[6], 哈密顿量为:

$$H^{MG} = \sum_{i=1}^N (S_i \cdot S_{i+1} + \frac{1}{2} S_i S_{i+2}) \quad (4.3)$$

其中 i 是一维链中的编号为偶数的点。我们通过分析可以知道这个体系的基态可以表示如下:

$$|d\rangle_{\pm} = \prod_{n=1}^{N/2} (|\uparrow_{2n}\downarrow_{2n\pm 1}\rangle - |\downarrow_{2n}\uparrow_{2n\pm 1}\rangle) / \sqrt{2} \quad (4.4)$$

这两个态即是相邻的自旋组成的自旋单态的直积态。它们通过平移算符连接起来。在这两个简并的基态之上有一个有限的能隙。显然, 这两个态都破坏了体系的平移不变性。

我们知道, 半整数的自旋链的激发一般无能隙, 如果有能隙只可能是破坏了某种离散的对称性[145, 146]。Majumdar和Ghosh模型的基态由于破坏了系统的平移不变形, 因此它的激发谱必然存在能隙。

对于整数自旋的反铁磁海森堡链,一个著名的例子就是自旋 $S = 1$ 的AKLT模型, 哈密顿量为:

$$H^{AKLT} = \sum_{\langle ij \rangle} [S_i S_j + \frac{1}{3}(S_i S_j)^2 + \frac{2}{3}] \quad (4.5)$$

这个模型的基态严格可解[131, 132], 如图4.2所示。每个自旋 $S = 1$ 可以分解成两个自旋 $1/2$ 的自旋, 每个 $1/2$ 的自旋分别与相邻的自旋形成一个自旋单态。我们把这一类的态叫做价键固体态 (VBS)。从基态的示意图4.2我们可以知道, 对于开放边界条件, AKLT模型的基态是四重简并的, 因为在基态的末端, 存在两个孤立的 $S = 1/2$ 的自旋。系统的基态满足平移不变性, 关联函数是指数衰减的[131, 132, 147]:

$$\langle S_0^a S_r^b \rangle = \delta^{ab} (-1)^r \frac{4}{3} 3^{-r} \quad (4.6)$$

体系的激发存在能隙的[148–150], 大小约为 $\Delta = 0.4105$ [34, 151–153]。

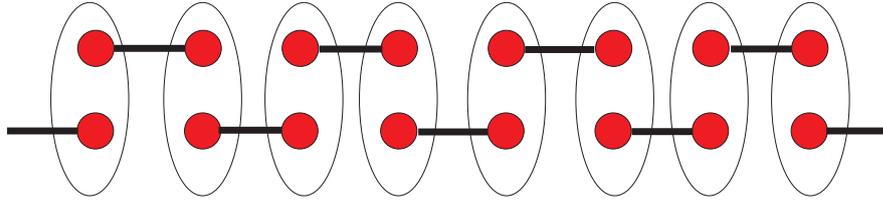


图 4.2: AKLT模型的基态, 每个点上的自旋 $S = 1$,可以分解成两个自旋 $1/2$ 的自旋, 它们分别与相邻的自旋组成自旋单态。

虽然AKLT模型中系统的关联是短程的, 不存在长程序。但是我们可以定义一个非局域的序参量: 弦序[10–14]:

$$g(l) = \left\langle S_0^z \left(\prod_{k=1}^{l-1} e^{i\pi S_k^z} \right) S_l^z \right\rangle \quad (4.7)$$

来描述这个相, 即所谓的Haldane相。我们注意到弦序不同于通常意义上的序参量, 它是描述体系全局性质的量。

后来发现实际上AKLT模型的基态破坏了一个隐藏的 $Z_2 \times Z_2$ [15, 16]的对称性。弦序和隐藏对称性的破缺概念可以推广到任意的整数自旋[77, 154]。

我们可以按照4.3(a)中的图示来理解海森堡模型。在每个点上的自旋 S 的 $2S+1$ 个状态数可以理解成球面电子在狄拉克磁单级子的作用下的最低的朗道能级。

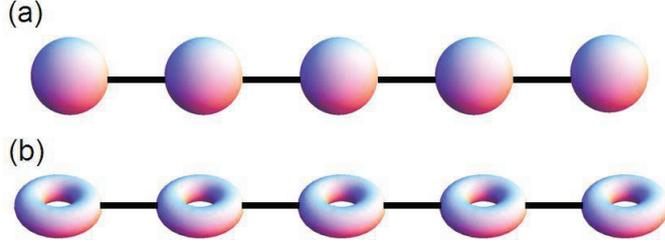


图 4.3: 在(a)中, 每个点上有一个自旋 S , 它的 $2S + 1$ 个状态可以看成是球面电子在狄拉克磁单级子的作用下的最低的朗道能级。把相邻的能级耦合起来, 就是海森堡模型。在(b)中, 我们将球面换成环面, 类似的就能构成我们研究的Quantum Torus Chain模型。

将相邻的电子的能级耦合起来, 就构成了海森堡模型。如果我们球面换成环面4.3(a), 则可以构造一个类似的哈密顿量:

$$H = \sum_i (\cos \theta U_i^x U_{i+1}^{x\dagger} + \sin \theta U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c.). \quad (4.8)$$

其中 U^x 和 U^y 是环面上电子在磁场的作用下的磁平移群的生成元(2.61)。它们满足如下的对易关系:

$$U^x U^y = e^{i2\pi/m} U^y U^x, \quad (4.9)$$

并且

$$(U^x)^m = (U^y)^m = I \quad (4.10)$$

其中 m 是穿过环面的磁通量子数, 在这里作为模型的一个参数。我们把(4.8)描述的模型叫做Quantum Torus Chain。我们知道在反铁磁的海森堡链存在着Haldane猜想[74, 75], 不同的模型呈现出丰富的相和相变。对此我们期待新

构造的Quantum Torus Chain模型也能出现类似的性质，这也是我们研究这个模型的动机。

4.1.1 对称性

下面我们将要讨论Quantum Torus chain模型的对称性。

首先我们写出算符 U_x, U_y 的具体表示，在(2.61)中我们给出了一组基 $\{|q\rangle\} = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |\nu-1\rangle\}$ ，在这组基下我们有：

$$\begin{aligned} U^x &= \sum_{q=0}^{m-1} e^{i2\pi q/m} |q\rangle \langle q|, \\ U^y &= \sum_{q=0}^{m-1} |q+1\rangle \langle q| \end{aligned} \quad (4.11)$$

我们可以选择另外一组基 $|\tilde{q}\rangle$ ，它是 $|q\rangle$ 的傅立叶变换：

$$|\tilde{q}\rangle = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{q=0}^{m-1} e^{2\pi i q \tilde{q}/m} |q\rangle. \quad (4.12)$$

在这组新的基下面，符 U_x, U_y 的具体形式为：

$$\begin{aligned} U^x &= \sum_{\tilde{q}=0}^{m-1} |\tilde{q}+1\rangle \langle \tilde{q}|, \\ U^y &= \sum_{\tilde{q}=0}^{m-1} e^{-2\pi i \tilde{q}/m} |\tilde{q}\rangle \langle \tilde{q}|. \end{aligned} \quad (4.13)$$

4.1.1.1 内禀对称性

由上面可以看到，Quantum Torus Chain模型存在对偶对称性：

$$\theta \leftrightarrow \pi/2 - \theta \pmod{2\pi}, U^x \leftrightarrow U^y \quad (4.14)$$

这个对称性表明，Quantum Torus Chain关于 θ 的相图是关于一三象限的对角线轴对称的。这将在后面的相图中体现。

类似于海森堡链的 S_z^{tot} 守恒，我们可以定义如下的量 \mathcal{U}^x 和 \mathcal{U}^y ：

$$\begin{aligned} \mathcal{U}^x &= \prod_{i=1}^L U_i^x \\ \mathcal{U}^y &= \prod_{i=1}^L U_i^y \end{aligned} \quad (4.15)$$

可以验证它们和哈密顿量对易:

$$[\mathcal{U}^x, H] = 0, [\mathcal{U}^y, H] = 0 \quad (4.16)$$

但是

$$\mathcal{U}^x \mathcal{U}^y = e^{2\pi i N/m} \mathcal{U}^y \mathcal{U}^x \quad (4.17)$$

其中 N 是链的总长度。即虽然这 \mathcal{U}^x 和 \mathcal{U}^y 都和哈密顿量对易,但它们本身并不对易,它们交换之后会产生一个相因子。如果链长 N 不为 m 的整数倍,对于任何一个 H 和 \mathcal{U}^x 的本征态 ψ ,我们会有:

$$\psi, \mathcal{U}^y \psi, (\mathcal{U}^y)^2 \psi, \dots, (\mathcal{U}^y)^{m-1} \psi \quad (4.18)$$

均为 H 的本征态,并且它们相互正交。在这种情况下, H 的所有的能级都是 m 重简并的。为了消除这种简并,我们在以后的讨论中都取链长为 m 的整数倍: $N = km$,此时有:

$$\mathcal{U}^x \mathcal{U}^y = \mathcal{U}^y \mathcal{U}^x \quad (4.19)$$

我们可以定义在 $|q\rangle, |\tilde{q}\rangle$ 基矢上的复共轭算符 K 和 \tilde{K} ,它们是反对易的。因为哈密顿量在 $|q\rangle, |\tilde{q}\rangle$ 基矢上是实的,所以算符 K 和 \tilde{K} 都和哈密顿对易。

对于上面提到的基矢的傅立叶变换,我们可以定义算符 S :

$$S|q\rangle = |\tilde{q}\rangle, S^\dagger|q\rangle = |-\tilde{q}\rangle \quad (4.20)$$

它们和哈密顿量对易(4.13)。在自对偶点, $\theta = \pi/4, 5\pi/4$, S 和哈密顿量对易。 $S, K, \mathcal{U}^x, \mathcal{U}^y$ 构成了系统的对称群。这个群中的元素满足以下的乘法关系:

$$\begin{aligned} S^2 &= S^{\dagger 2}, S^3 &= S^\dagger \\ S^4 &= I, K^2 &= I \\ \mathcal{U}^x \mathcal{U}^y &= \mathcal{U}^y \mathcal{U}^x, (\mathcal{U}^x)^m &= (\mathcal{U}^y)^m = I \\ SK &= KS^\dagger, SK^\dagger &= KS \\ \tilde{K} &= SKS^\dagger &= S^\dagger KS \\ S\mathcal{U}^x S^\dagger &= (\mathcal{U}^y)^\dagger, S\mathcal{U}^y S^\dagger &= (\mathcal{U}^x) \\ K\mathcal{U}^x K &= (\mathcal{U}^x)^\dagger, K\mathcal{U}^y K &= (\mathcal{U}^y) \end{aligned} \quad (4.21)$$

这个群是和周期性正方格子的对称性同构的。其中 U^x , U^y 对应于晶格上两个方向的平移操作, S 是两个垂直方向的转动, K 是绕轴的反射操作。

在非自对偶的点, S 不再是对称操作, 但是 S^2 , K , U^x , U^y 依旧是系统的对称操作, 这时, 系统的对称群退化到长方晶格的对称性 (x, y 两个方向的长度不一样)。

在 $m = 2$ 的情况下, U^x , U^y 和海森堡自旋有如下的对应:

$$U^x = \sigma^x, U^y = \sigma^y \quad (4.22)$$

Qunatum Torus Chain模型退化到海森堡自旋的 xy 模型:

$$H = \sum_i (\cos \theta \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sin \theta \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) \quad (4.23)$$

在自对偶点, (4.21)中的对称操作会扩展到 x, y 平面内的转动:

$$S(\phi) = \exp(i \frac{\phi}{2} \sum_i \sigma_i^z) \quad (4.24)$$

4.1.1.2 格点对称性

对于一维链, 我们定义的哈密顿量(4.8)关于平移操作 $T : i \rightarrow i+1$ 是对称的。同时有反射对称性: P_k 。当 k 是整数的时候, P_k 是以 k 为中心的反射, 当 k 是半整数的时候, P_k 是以点 $k - 1/2$ 和 $k + 1/2$ 的中点为中心的反射。关于平移和反射我们有如下的乘法关系:

$$\begin{aligned} T^N &= I, P_k^2 = I \\ TT^\dagger &= I, P_k^\dagger = P_k \\ TP_k &= P_{k+1/2}, TP_k T^\dagger = P_{k+1} \\ TP_k &= P_k T^\dagger = P_k T^{N-1} \end{aligned} \quad (4.25)$$

4.1.1.3 能级的简并度

因为在格点的长度是 m 倍数的情况下, 对称操作 U^x 和 U^y 相互对易。我们可以定义守恒量($e^{2\pi i Q/m}, e^{-2\pi i \tilde{Q}/m}$), 简写为 (Q, \tilde{Q}) 。在 q_i 和 \tilde{q}_i 基下我们有:

$$\begin{aligned} Q &= \sum_i q_i \pmod{m} \\ \tilde{Q} &= \sum_i \tilde{q}_i \pmod{m} \end{aligned} \quad (4.26)$$

因此, 哈密顿量是分块对角的。我们可以用 (Q, \tilde{Q}) 来标记希尔伯特空间中不同的块, 同样, 它也是态的一个标记。

对称算符 K 和 S 作用在态 $\begin{pmatrix} Q \\ \tilde{Q} \end{pmatrix}$ 上有:

$$\begin{aligned} K \begin{pmatrix} Q \\ \tilde{Q} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} Q \\ -\tilde{Q} \end{pmatrix} \\ S \begin{pmatrix} Q \\ \tilde{Q} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \tilde{Q} \\ -Q \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.27)$$

将对称算符连续的作用在态 $\begin{pmatrix} Q \\ \tilde{Q} \end{pmatrix}$ 上我们可以得到如下的八重态:

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Q_1 \\ -Q_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q_1 \\ -Q_2 \end{pmatrix} \\ &\begin{pmatrix} Q_2 \\ Q_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q_2 \\ Q_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Q_2 \\ -Q_1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q_2 \\ -Q_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.28)$$

对于一些特殊的 Q_1, Q_2 的取值, 存在一些低重的简并态:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

$$\begin{pmatrix} 0 \\ Q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -Q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Q \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q \\ 0 \end{pmatrix}, Q \neq 0 \quad (4.30)$$

$$\begin{pmatrix} Q \\ Q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q \\ Q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} Q \\ -Q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -Q \\ -Q \end{pmatrix}, Q \neq 0 \quad (4.31)$$

上面的简并度关系只是在 $m > 4$ 的情况下成立。对于 $m = 3$ 的情形, 只有(4.29)中的单态, (4.30)中的四重态和(4.31)中的四重态存在。对于 $m = 2$ 的情形, 因为 $Q = -Q$, (4.30)中的四重态变成一个二重态, (4.31)中的四重态变成一个单态。

以上是关于自对偶点 $\theta = \pi/4, 5\pi/4$ 上的能级的简并的讨论。如果在非自对偶点, 系统的对称性会下降, 同时(4.28), (4.30)中的多重态会分裂成重数更小的简并态。(4.28)中的八重态会分裂成两个四重态, (4.30)中的四重态会分裂成两个二重态, (4.31)中的四重态依然是一个四重态。

下面考虑格子的平移和反射操作对能级简并度的影响。我们从平移算符 T 的一个本征态出发:

$$T|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \eta = \exp(2\pi i \frac{n}{N}) \quad (4.32)$$

其中 n 用来标记不同的动量。因为对于周期性边界条件，平移群就是 Z_N 群，只有一维的表示 $T = \exp(2\pi i \frac{n}{N})$ 。将 T 作用到态 $P|\eta\rangle$ 上面，利用等式 $TP = PT^{N-1}$ 我们可以得到：

$$TP|\eta\rangle = PT^{N-1}|\eta\rangle = \eta^{N-1}P|\eta\rangle = \eta^*P|\eta\rangle \quad (4.33)$$

上面的式子表明，如果 η 是实数，即 $n = 0$ ， $N/2$ (仅仅当 N 是偶数的情况)， $P|\eta\rangle$ 和 $|\eta\rangle$ 可能是同一个态，因为它们都是 T 的本征值为 η 的本征态。但是如果 η 是一个复数，它们是不同的态。所以在第一种情况下，由 T 和 P 生成的表示是一维的，在第二种情况下是二维的。

4.1.1.4 在 $m = 3$ 情形下的衍生对称性

在后面的部分我们将主要考虑 $m = 3$ 的情形。

我们首先考虑4.8中的 $U_i^x U_{i+1}^{x\dagger} + h.c$ 项，有

$$(U_i^x U_{i+1}^{x\dagger} + h.c)|q_i, q_{i+1}\rangle = 2 \cos(2\pi i(q_i - q_{i+1})/m)|q_i, q_{i+1}\rangle \quad (4.34)$$

因为 $\cos \frac{2\pi}{3} = \cos \frac{4\pi}{3} = -\frac{1}{2}$ ，所以 $m = 3$ ，当 $\theta = 0$ 时，系统的基态是无穷简并的为：

$$|q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle, q_i \neq q_{i+1} \quad (4.35)$$

简并度为 $2 \times 3^{N-1}$ 。我们将(4.35)中的态构成的空间叫作投影空间。因为在简并的基态上有一个有限的能隙，我们在考虑 $\theta = 0$ 附近的情况时，有效的哈密顿量就是限制在投影空间中的投影哈密顿量：

$$H = \sin \theta \mathcal{P} \sum_i H_y \mathcal{P}. \quad (4.36)$$

其中 H_y 为4.8中的第二项 $U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c$ ，我们考虑在投影空间下它的形式：

$$\begin{aligned} U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |0, 1\rangle &= |1, 0\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |0, 1\rangle = |2, 2\rangle \\ U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |0, 2\rangle &= |1, 1\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |0, 2\rangle = |2, 0\rangle \\ U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |1, 0\rangle &= |2, 2\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |1, 0\rangle = |0, 1\rangle \\ U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |1, 2\rangle &= |2, 1\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |1, 2\rangle = |0, 0\rangle \\ U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |2, 0\rangle &= |0, 2\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |2, 0\rangle = |1, 1\rangle \\ U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} |2, 1\rangle &= |0, 0\rangle, U_i^{y\dagger} U_{i+1}^y |2, 1\rangle = |1, 2\rangle \end{aligned} \quad (4.37)$$

我们可以看到，当我们把哈密顿量投影到投影空间后， $U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c$ 实际上就是交换算符 $P_{i,i+1}$ ：

$$P_{i,i+1}|q_i, q_{i+1}\rangle = |q_{i+1}, q_i\rangle, q_i \neq q_j \quad (4.38)$$

因此在 $\theta = 0$ 附近有效的哈密顿量为：

$$H = \sin \theta \mathcal{P} \sum_i P_{i,i+1} \mathcal{P}. \quad (4.39)$$

在上一节4.26我们知道 Q 是好量子数。但是现在在投影空间，我们可以知道在基矢 $|q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle$ 中0, 1, 2的个数：

$$\begin{aligned} N_0 &= \sum_i \delta(q_i, 0) \\ N_1 &= \sum_i \delta(q_i, 1) \\ N_2 &= \sum_i \delta(q_i, 2) \end{aligned} \quad (4.40)$$

是守恒量。但是它们之间有一个粒子总数为 N 的限制：

$$N_0 + N_1 + N_2 = N \quad (4.41)$$

所以它们之中只有两个是独立。这种对称性是原来哈密顿量(4.8)的低能有效模型中的对称性，因此这两个守恒量对应的 $U(1)$ 的对称性是一种衍生(Emergent)对称性。

同时，我们可以证明，上面的讨论不仅仅局限于 $m = 3$ 的情形。对于奇数的 $m = 2n + 1$ ，在 $\theta = 0$ 附近，低能的有效哈密顿量都是将哈密顿量(4.8)投影到 $\theta = 0$ 的基态的子空间。而这时我们将一共有 $m - 1$ 个衍生的守恒量。

4.2 关于一般 m 的讨论

在上面我们讨论了Quantum Torus Chain模型的对称性，在这一章，我们将要讨论对于一般的 m 下的一些性质。在前面我们提到，对于反铁磁的海森堡自旋链，有Haldane[74, 75]猜想。在这里我们将发现，奇数和偶数的 m 对应的模型的性质和反铁磁海森堡自旋链一样，有很大的不同。

在[18–20]中文小刚等人对于一维的自旋系统的相进行分类时指出：如果系统的态空间够成是系统对称群 G 的投影表示，那么这个系统没有平移不变的保持系统对称性的有能隙的态。一个例子就是半整数的自旋链，它的基态要么是无能隙的，要么破坏系统的某些离散的对称性，基态变成简并的。自旋1/2的反铁磁海森堡链[137]和Majumdar-Ghosh[6]模型分别对应于上面的两种情况。

我们在上一章中指出，基矢 $|q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle$ 够成的是 $Z_\nu \times Z_\nu$ 的投影表示。因为有对易关系 $U^x U^y = e^{i2\pi/m} U^y U^x$ 。因此上面的关于基态性质的判断适用于Quantum Torus Chain模型。

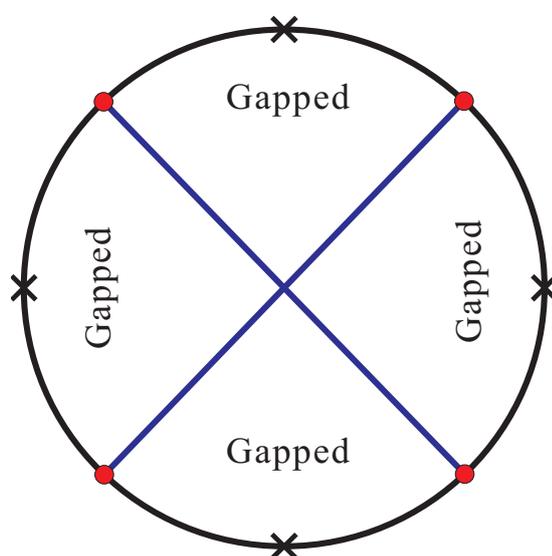


图 4.4: xy 模型的相图，在叉代表的点，系统退化成经典体系。红色的点是临界点，同时也是相边界。除了红色的点外，在整个相图上，系统的激发都存在能隙

我们先考虑 $m = 2$ 的情形。 $m = 2$ 时，Quantum Torus Chain退化成自旋的 xy 模型(4.23)。这个模型是可以通过Jordan-Wigner变换[155]变成一个自由的费米子模型[156]。

在4.4中我们画出来 xy 模型的相图。这个模型在除了 $\theta = \pm\pi/4$ 和 $\theta = \pm5\pi/4$ 的点是无能隙外，其它的点都是有能隙的。在有能隙的相， U^x/U^y 或平移的对称性自发破缺，在无能隙的临界点，系统的基态是保持体系的所有的对称性。这是符合[18–20]中关于一维体系基态的结论。

为了知道体系的相图怎样随着 m 变化，我们考虑四个特殊的点。

首先, 在 $\theta = \pi$, 哈密顿量(4.8)退化到经典情形。系统的基态是 m 重简并的铁磁直积态:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N |q\rangle, q = 0, 1, \dots, m-1 \quad (4.42)$$

显然上面的三个态破坏了 U^y 的对称性。在这三个简并基态上存在能隙。因此, 在 $\theta = \pi$ 附近, 系统都应该是有能隙的。对于 $m = 2$ 的情形, 这个有能隙的相延伸到 $3\pi/4 < \theta < 5\pi/4$, 由于有对偶的对称性(4.14), 在关于一三象限对角线轴对称的区域 $5\pi/4 < \theta < 7\pi/4$, 系统也是有能隙的。

当 $\theta = 0$ 时, 体系退化成一个经典系统, 但是此时的耦合常数是反铁磁的。如果 m 是偶数, 体系依然没有阻错, 基态同样是 m 重简并的:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{i=1}^N |(-1)^i q\rangle, q = 0, 1, \dots, m-1 \quad (4.43)$$

在这 m 重简并的基态之上有有限大小的能隙。因此在 $\theta = 0$ 附近, 系统都应该存在一个有能隙的区域。对于 $m = 2$ 的情形, 这个相延伸到 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$, 由于对偶对称性, 系统在 $\pi/4 < \theta < 3\pi/4$ 也是有能隙的。

但是, 当 m 是奇数时, 基态和偶数的情形不一样。在 $\theta = 0$ 这个点, 系统的基态是无穷简并的

$$|\psi_0\rangle = |q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle, q_i - q_{i+1} = (m \pm 1)2(\text{mod } m) \quad (4.44)$$

从上面可以看出基态的简并度为 $2^{N-1}m$ 。当偏离 $\theta = 0$ 时, 哈密顿量(4.8)中的第二项 $U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c$ 会将它们混起来, 从而解除系统的简并度。这和有阻错的磁性系统类似。同样, 由于对偶对称性(4.14), 在 $\theta = \pi/2$ 时也有同样的结论。此时, 我们无法像偶数 m 的情况那样对系统的激发给一个确定的判断。

从上面的分析可以看出, m 的奇偶性在反铁磁区域 $\theta = 0$ 附近能造成体系基态的本质区别。

4.3 数值的结果和讨论

我们主要研究了 $m = 3$ 的情形。在下面除非我们提到 m 的值, 否则都是针对 $m = 3$ 的情形。

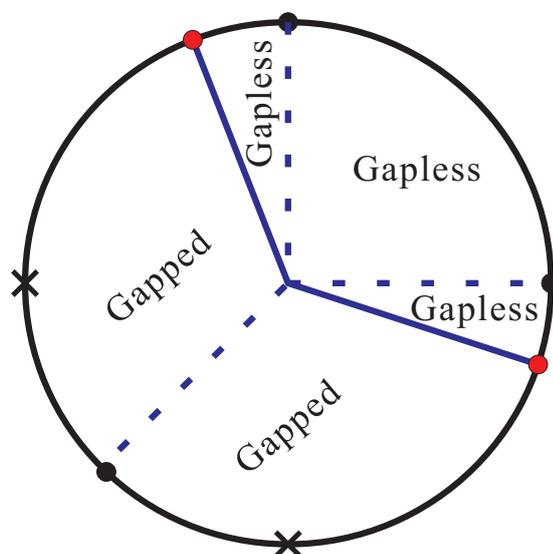


图 4.5: $m = 3$ 的Quantum Torus Chain的相图。红色的点代表连续相变，实心的黑点代表一级相变。又代表退化到经典的铁磁模型的点。由于对偶对称性(4.14)，相图关于一三象限的对角线轴对称。

在图4.5中，我们给出了 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain的相图。可以看到随着 θ 的变化，体系的基态表现出不同的行为。由于Quantum Torus Chain的对偶对称性(4.14)，我们只用考虑一半的相图。从0到 $\pi/2$ ，体系是无能隙的。在 $\pi/2$ 这一点，体系经过一个一级相变到达另外一个无能隙的相。在 0.6π 附近，体系经过一个连续的相变进入一个有能隙的相。最后在 $5\pi/4$ 这一点，一个一级相变将两个对偶的有能隙的相连接起来。

在图4.6中我们给出了 $L = 12$ 的体系的精确对角化的结果。从图中我们可以明显的看到在 $\pi/4$ 这一点，体系有一个一级相变。同时在 $5\pi/4$ 这一点，我们能够看到相变的迹象。

在下面我们将对各个相分别讨论。

4.3.1 $\theta = 0$ 附近的临界相

在前面关于对称性的讨论中，我们知道对于奇数的 m ，在 $\theta = 0$ 附近，体系的低能有效模型是将哈密顿量(4.8)投影到 $\theta = 0$ 的基态子空间： $H = \sin\theta \mathcal{P} \sum_i P_{i,i+1} \mathcal{P}$ 。

我们发现，在 $\theta = 0$ 两侧，有效哈密顿量的能级关于 $E = 0$ 是对称的，即如

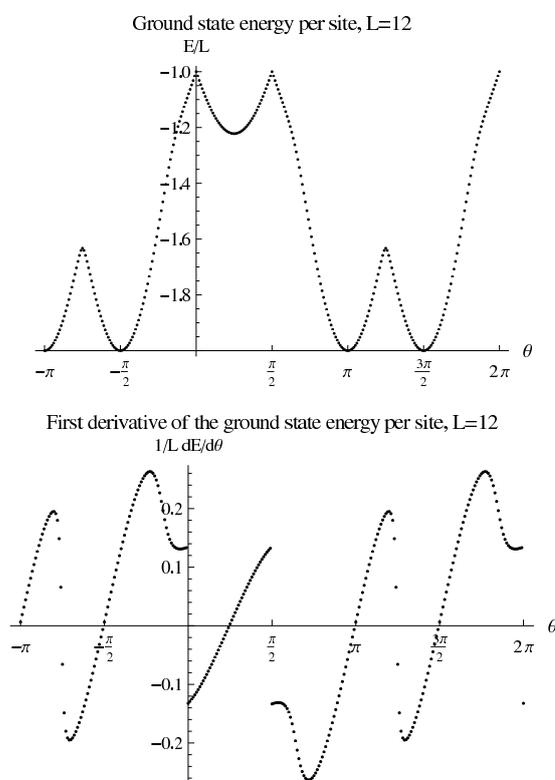


图 4.6: 经过精确对角化方法得到的 $m = 3$ 的 Quantum Torus Chain 的基态能量, 体系的长度 $L = 12$ 。上图显示的是基态的能量, 下图给出了能量对于 θ 的一阶导数。

果基态中有一个能级 ϵ_i , 则必然存在另一个能级 $-\epsilon_i$ 。在下面给出了一个严格的证明。

因为低能的有效哈密顿量是交换算符 $P_{i,i+1}$ 的叠加, 所以在 q 的直积表象 $|q_0, q_1, \dots, q_{N-1}\rangle, q_i \neq q_{i+1}$ 下, $0, 1, 2$ 的个数 N_0, N_1, N_2 是守恒的。我们可以将基矢通过 N_0, N_1, N_2 分成不同的类, 记作 (N_0, N_1, N_2) , 哈密顿量在不同的块之间的矩阵元是 0 (分块对角)。在同一 (N_0, N_1, N_2) 类中, 基矢是可以通过交换算符 $P_{i,i+1}$ 连接。我们进一步将 (N_0, N_1, N_2) 类分成两块, 从中选出任一基矢, 将所有通过偶数次交换能和它等价的归为一类, 记作 $[N_0, N_1, N_2]_{\text{even}}$; 将所有通过奇数次交换能和它等价的归为另一类, 记作 $[N_0, N_1, N_2]_{\text{odd}}$ 。定义一个

算符 Γ_z :

$$\begin{aligned}\Gamma_z|i\rangle &= |i\rangle, \forall |i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{even} \\ \Gamma_z|i\rangle &= -|i\rangle, \forall |i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{odd}\end{aligned}\quad (4.45)$$

我们知道 $H = \sin\theta \mathcal{P} \sum_i P_{i,i+1} \mathcal{P}$ 只包含交换算符的线性组合, 因此我们可以得到:

$$\begin{aligned}H\Gamma_z|i\rangle &= H|i\rangle, \forall |i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{even} \\ \Gamma_z H|i\rangle &= -H|i\rangle, \because H|i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{odd}\end{aligned}\quad (4.46)$$

同时我们也有:

$$\begin{aligned}H\Gamma_z|i\rangle &= -H|i\rangle, \forall |i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{odd} \\ \Gamma_z H|i\rangle &= H|i\rangle, \because H|i\rangle \in [N_0, N_1, N_2]_{even}\end{aligned}\quad (4.47)$$

因此我们有:

$$[\Gamma_z H]_+ = 0 \quad (4.48)$$

即 Γ_z 和投影哈密顿量反对易。因此对于任一 H 的本征态:

$$H|\epsilon\rangle = \epsilon|\epsilon\rangle \quad (4.49)$$

我们有:

$$H\Gamma_z|\epsilon\rangle = -\Gamma_z H|\epsilon\rangle = -\epsilon\Gamma_z|\epsilon\rangle \quad (4.50)$$

因此, $\Gamma_z|\epsilon\rangle$ 也是 H 的本征态, 对应的能量为 $-\epsilon$, 所以系统所有的能级是关于 $E = 0$ 对称的。

因为有 $\sin\theta = -\sin(-\theta)$, 所有在 $\theta = 0$ 的两侧, 体系有效哈密顿量的能级完全相同。上面的推导同样适用于其它奇数 m 的情况。

4.3.2 $0 < \theta < \pi/2$ 的临界区域

4.3.2.1 精确对角化的结果和能级相对位置随链长增长的移动

在图4.7中, 我们给出了 $L = 12$ 的开放边界条件下的精确对角化的结果。在对称性的分析中, 我们知道, 可以用 (Q, \tilde{Q}) 来标记每个态(4.26)。因为

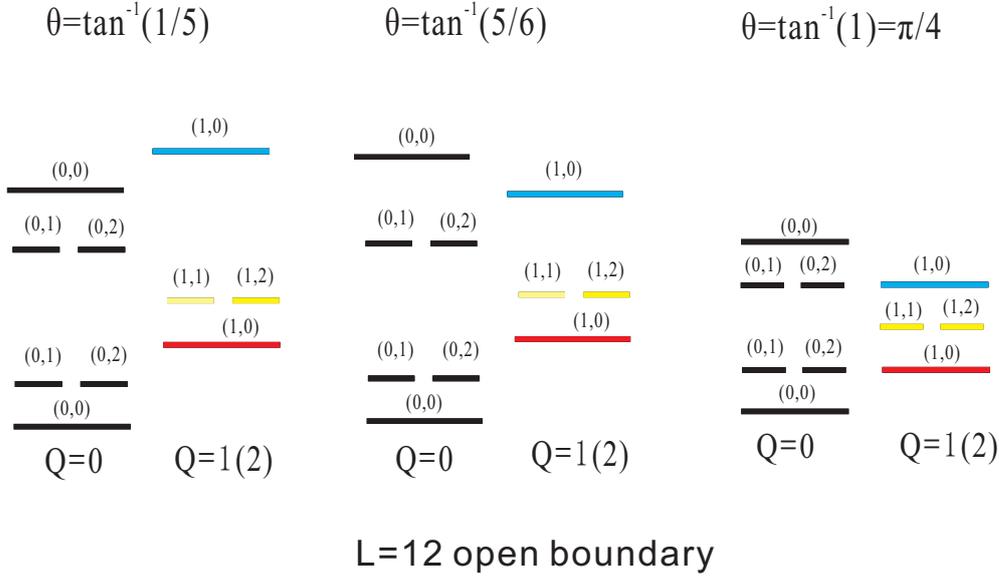


图 4.7: 对长度为12的开放边界体系作精确对角化得到的结果。每个能级上的数字表示着对应的量子数(Q, \tilde{Q})

对于 $m = 3$, 有 $-1 \pmod{3} = 2$, 根据对称性分析中的结论(4.28), (4.29), (4.30), (4.31)我们知道, 对于(Q, \tilde{Q})标记的态, 将其中的1,2互换, 得到的态是与其简并的态。

在图4.7中, 我们根据 Q 的值将能级分类, 每个能级上的两个数字代表着对应的量子数(Q, \tilde{Q})。从左至右我们演示了能级如何从 $\theta = 0$ 演化到 $\theta = \pi/4$ (由于对偶对称性, 在 $0 < \theta < \pi/2$, 我们只需研究 $0 < \theta < \pi/4$ 的区域)。因为在 $\theta = \pi/4$, 体系是自对偶的, 相比于其它的点, 增加了 Q 和 \tilde{Q} 交换的对称性, 所以能级的简并度变高。图4.7清楚的显示了这一点。

在图4.8中, 我们给出了在 $\theta = \pi/4$ 时能级随着链长的变化情况, 随着链长 L 的增加, 会出现能级的交错。

在后面DMRG计算的结果中, 我们将会发现, 在 $\theta = \tan^{-1}(1/5)$ 时能级也会发生移动。最后, 在图4.9中, 我们给出了热力学极限下的能级的分布。

从上面的讨论我们知道, 在整个区间, 有限尺寸的效应很大。为了更好的研究体系的能隙, 我们采用了DMRG方法研究了更大的体系。

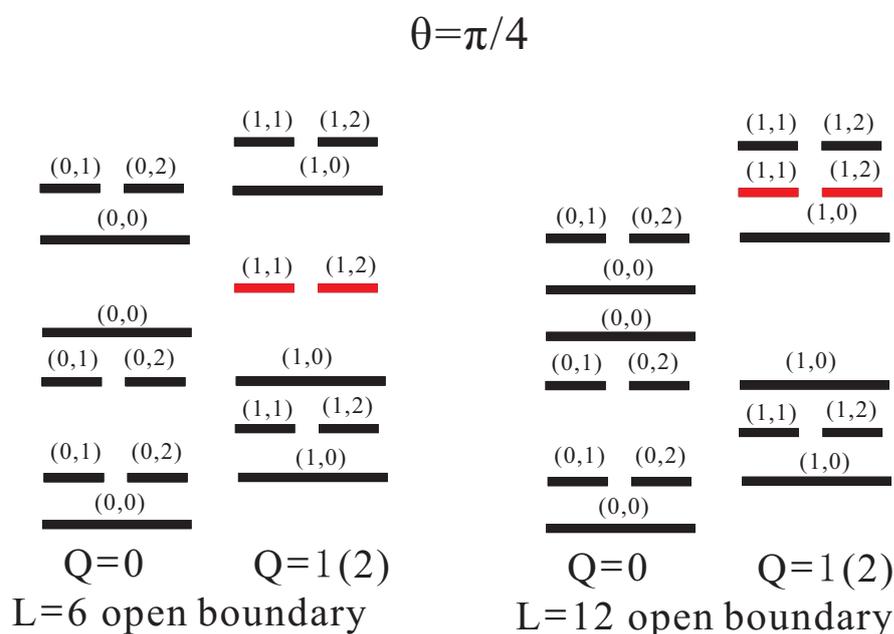


图 4.8: 精确对角化的结果。当 L 增加时, 图中红色的能级上移。每个能级上的数字表示着对应的量子数 (Q, \tilde{Q})

4.3.2.2 DMRG和MPS的结果

在图4.10(a)中, 我们给出了在 $Q = 1$ 子空间的激发能随着系统尺寸的变化情况。在图4.10(b)中, 我们给出了在 $Q = 0$ 子空间的第一激发态随系统尺寸的变化情况。可以看到, 所有研究的激发能都随着尺寸变大趋近于0。由此可以判断, 在 $\theta = \pi/4$ 体系是没有能隙的。

同样, 在图4.11中我们给出了在 $\theta = \tan^{-1}(1/5)$ 时的各个激发能的大小。随着链长的增加, 它们都趋近于0。

从上面的结果我们知道在 $0 < \theta < \pi/2$ 的区域, 体系应该是无能隙的。下面我们考虑关联函数。我们定义关联函数如下:

$$\begin{aligned}
 C_x^l &= \langle U_1^x U_{l+1}^{x\dagger} + h.c \rangle \\
 C_y^l &= \langle U_1^y U_{l+1}^{y\dagger} + h.c \rangle
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

在图4.12中, 我们给出了 $\theta = \pi/4$ 时, C_y^l 随着长度 l 变化的情况。我们可以看到它呈现三周期的行为: C_y^l 的符号满足 $- - + - - + \dots$ 的结构。为此我们定义均

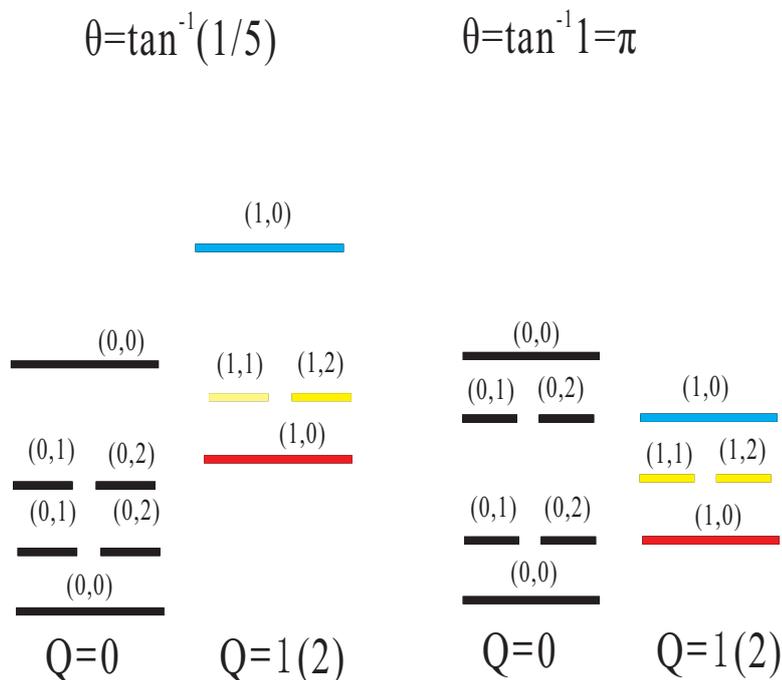


图 4.9: 在热力学极限下的能级的分布情况。每个能级上的数字表示着对应的量子数(Q, \tilde{Q})。

匀 (uniform) 关联函数和交错 (staggered) 关联函数:

$$\begin{aligned}
 C_u^l &= (C_u^{l-1} + C_u^l + C_u^{l+1})/3 \\
 C_u^l &= C_u^l - C_u^{l+1}/2 - C_u^{l-1}/2
 \end{aligned} \tag{4.52}$$

在图4.13中, 我们给出了 $\theta = \pi/4$ 时均匀关联函数和交错关联函数随距离的变化情况。在 $\theta = \pi/4$ 时, 由于对偶对称性, U_x 和 U_y 的关联函数是等价的。从图中我们可以看到它们都是满足幂次衰减的关系。这与上面得到的在 $0 < \theta < \pi/2$ 区域系统是临界(无能隙)的结论自治。

无论是直接从能隙, 还是从关联函数的幂次衰减, 我们都可以看到, 体系在 $0 < \theta < \pi/2$ 区域是临界的。为了更好的研究这个临界区域的性质, 我们研究了对应的共形场论的中心荷 (Central Charge) c 。在图4.14中, 我们给出了在 $\theta = \pi/4, \tan^{-1}(1/5), \tan^{-1}(1/4), \tan^{-1}(1/10)$ 时纠缠熵随着尺寸的变化。在DMRG的计算中, 我们最大的保留的状态数是 $M = 1000$, 从图4.14 (a)中我们可以看到当 $M = 1000$ 时, 纠缠熵基本收敛。纠缠熵的定义见(3.25)。

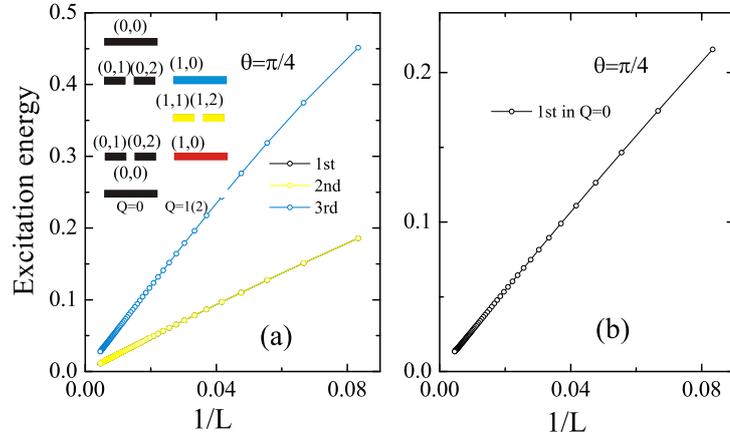


图 4.10: $\theta = \pi/4$, (a) 图给出了 $Q = 1$ 的子空间的激发能随着链长 L 的变化。(b) 图给出了在 $Q = 0$ 的子空间第一激发能的大小。可以看出, 在链长为无穷大的时候, 所有的激发都趋近于 0。

在 DMRG 的计算中, 我们采用的是开放边界条件。在计算纠缠熵时, 我们将体系从正中间分成长度相同的两部分。

我们可以看到纠缠熵和体系长度的对数表现出很好的线性关系。这说明在临界区域 $0 < \theta < \pi/2$, 体系是可以用共形场论 (Conformal Field Theory) 来描述[80–82]。我们知道对于开放边界条件的体系, 如果切断出一段长度为 l 的部分, 记作 A , 共形场论给出纠缠熵的表达式为:

$$S_A = (c/6) \log((2L/\pi a) \sin(\pi\ell/L)) + g + c_0 \quad (4.53)$$

其中 c 是对应的临界行为的中心荷。 a 是晶格中相邻两点的长度 (我们设为 1), g 是边界熵, c_0 是一个非普适的常数。我们是将体系从中间分成了长度相同的两部分: $l = L/2$, 因此我们有:

$$S_A \simeq (c/6) \log(L) \quad (4.54)$$

在图 4.14 中, 我们通过拟合知道在临界区域 $0 < \theta < \pi/2$, 中心荷的值都为 2。我们知道在 θ 接近于 0 时, 体系有两个衍生的守恒量, 对应于两个衍生的 $U(1)$ 对称性。这或许和中心荷为 2 有关系。我们知道, 对于三条链的相互作用玻色体系, 在 $1/3$ 填充时, 有一个类似的中心荷为 2 的临界相[157, 158]。

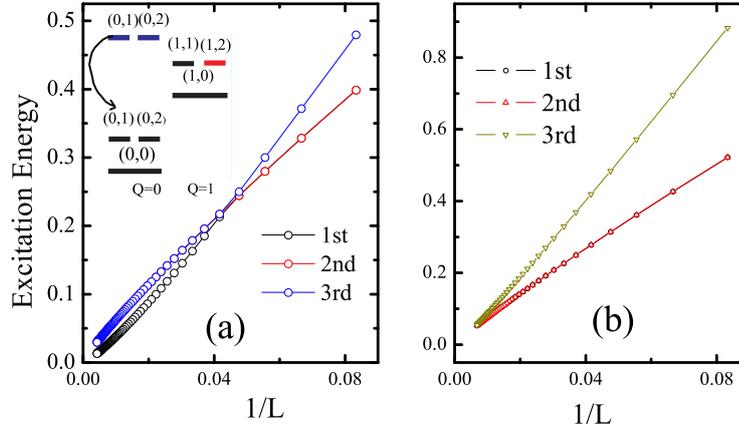


图 4.11: $\theta = \tan^{-1}(1/5)$, (a) 图给出了 $Q = 1$ 的子空间的激发能随着链长 L 的变化。(b) 图给出了在 $Q = 0$ 的子空间第一激发能的大小。可以看出, 在链长为无穷大的时候, 所有的激发能都趋近于 0。

为了进一步的证实系统的临界性, 我们用 DMRG 研究了纠缠谱 λ_i (约化密度矩阵的本征值) 的分布。如果记在所有的纠缠谱中大于 λ 的个数为 $n(\lambda)$, 它们有如下的关系[159]:

$$n(\lambda) = I_0(2\sqrt{b \ln(\lambda_{\max}/\lambda)}), \quad (4.55)$$

其中 $I_k(x)$ 是修正的第一类贝塞尔函数 (modified Bessel function)。 $b = -\ln(\lambda_{\max})$, λ_{\max} 是约化密度矩阵的最大本征值。

在图 4.15 中, 我们给出了在 $\theta = \pi/4$ 和 $\theta = \tan^{-1}(-3)$ 的纠缠谱的分布。可以看到, 它们和共形场论的结果符合的很好。这进一步证实了区域 $0 < \theta < \pi/2$ 可以用共形场来描述, 因此也是临界的。

至此, 我们知道了在临界区域可以用 $c = 2$ 的共形场来描述, 但是 $c = 2$ 的共形场有很多种[83]。共形场论指出, 对于周期性的一维量子系统, 体系的能级有如下的行为[84]:

$$E = E_1 L + \frac{2\pi\nu}{L} \left(-\frac{c}{12} + h_L + h_R \right) \quad (4.56)$$

其中 E_1 和 ν 是两个非普适的常数。 c, h_R, h_L 是由相应的共形场论给出。 c 是中心

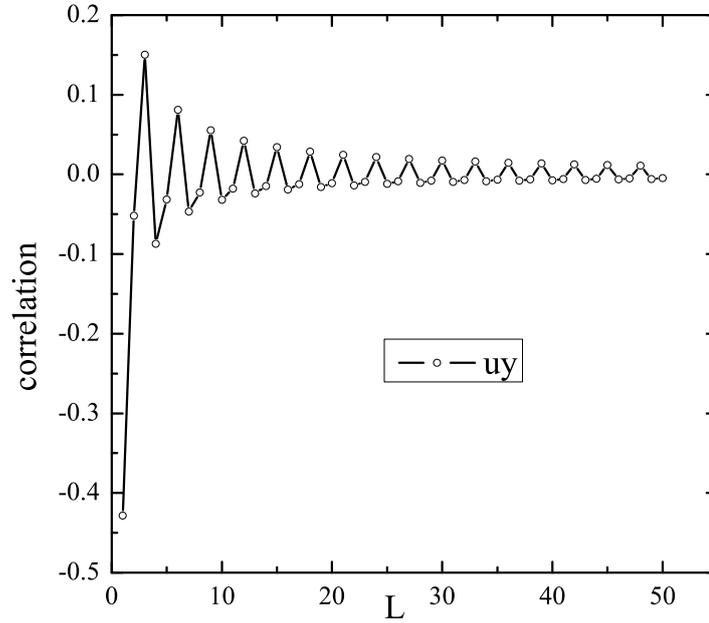


图 4.12: $\theta = \pi/4$, C_y^l 随着长度 l 的变化。

荷, h_R 和 h_L 表示能级:

$$\begin{aligned} h_R &= h_R^{(0)} + m_R \\ h_L &= h_L^{(0)} + m_L \end{aligned} \quad (4.57)$$

其中 $h_{R/L}^{(0)}$ 是共形场论对应场的左右标度维度, $m_{R/L}$ 是一个非负的整数。

对于基态, 我们有:

$$E_{Gs} = E_1 L - \frac{2\pi\nu}{L} \frac{c}{12} \quad (4.58)$$

用各激发态的能量减去基态能, 可以得到:

$$E - E_{Gs} = \frac{2\pi\nu}{L} (h_L + h_R) \quad (4.59)$$

我们在上面通过纠缠熵和体系长度的拟合已经得到 $c = 2$ 。通过对基态能量对长度倒数的线性拟合(4.58)可得到 ν 的大小。在图4.16中, 我们给出了长度 L 为18的周期边界条件的精确对角化的结果。各个能级是以 $\frac{2\pi\nu}{L}$ 标度后的值。

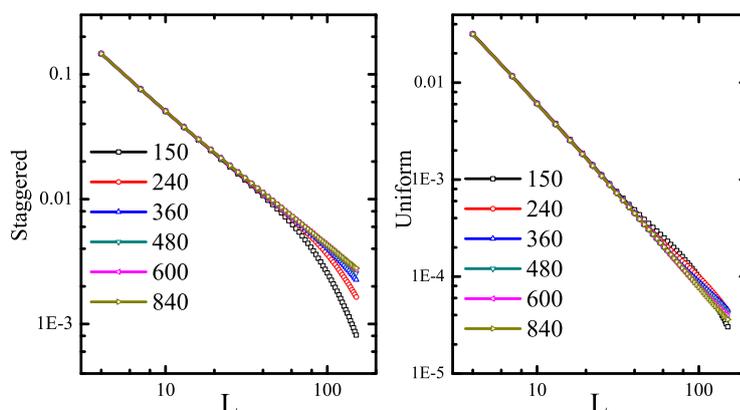


图 4.13: $\theta = \pi/4$, 均匀关联函数和交错关联函数随着长度 l 的变化。

在共形场论中, 标度算符是通过主要场 (primary field) 和它的衍生场来分类的, 对应的总标度维度分别为 $h_R + h_L = \Delta_p$ 和 $h_R + h_L = \Delta_p + n$, n 是一个正整数。原则上我们可以从精确对角化的能级中确定主要场的 Δ_p 和与之相关的一系列能级。但从图4.16中, 我们很难做出这样的结论。在前面的讨论中我们知道, 随着链长的变化, 能级的相对位置会发生变化, 这说明在这个体系中有限尺寸的效应很明显。目前, 我们只能算到 $L = 18$ 的结果。因此, 我们暂时不能确定具体对应于临界区域 $0 < \theta < \pi/2$ 的共形场论。

4.3.3 $\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 的临界区域

同样, 我们在 $\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 区域我们发现体系是临界的。在图4.17中, 我们像上一节一样做了纠缠熵和体系长度的拟合(4.54)。我们发现在这个临界区域, 对应的中心荷也是2。

在上面关于能级的讨论中, 我们知道在 $\theta = 0$ 附近的低能有效模型中, 体系的能级是关于 $E = 0$ 对称的。因此改变 θ 的符号体系的能级不发生改变。因此, 在这两个区域: $0 < \theta < \pi/2$ 和 $\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 低能性质相同是可以理解的。

在图4.15中, 我们同样给出了在这个区域的纠缠谱的分布情况, 和临界区域 $0 < \theta < \pi/2$ 的结果一样, DMRG计算的结果和共形场论的结果吻合得很好。

我们注意到, 区域区域 $0 < \theta < \pi/2$ 和 $\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 通过一个一级相变联系起来, 如图4.6 (能量一阶导数在 $\theta = 0, \pi/2$ 处不连续)。因为在 $\theta = 0$ 附近,

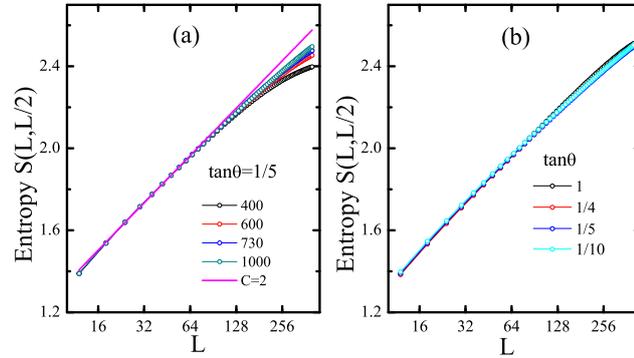


图 4.14: 纠缠熵随着体系长度的变化, 在 (a) 中 $\theta = \tan^{-1}(1/5)$, 我们增加DMRG计算中保留状态数直到纠缠熵收敛。通过对收敛部分的拟合, 可以得到中心荷 $c = 2$ 。在 (b) 中我们比较了不同的 θ 点的情况, 发现在临界区域 $0 < \theta < \pi/2$, 中心荷的值都为2。

θ 反号后会出现低的能级和高的能级的交错 (crossing)。所以在 $\theta = 0, \pi/2$ 时有一个一级相变。

4.3.4 $\theta \sim 0.6\pi$ 的连续相变

DMRG的计算中, 我们发现, 在 $\theta \sim 0.6\pi$ 时, 体系会从临界区域通过一个相变进入一个有能隙的区域。由于对偶性, 在 $\theta \sim -0.1\pi$ 会出现同样的相变。

在图4.18中, 我们给出了在相变点附近的数值结果。图(a)我们给出了两个最低的激发态随着体系尺寸变化时相对位置变化的情况。"gap in $Q=0$ sector"是 $Q = 0$ 的子空间, 第一激发态和基态的能量的差。"Eg($Q=1$)-Eg($Q=0$)"是 $Q = 1$ 的子空间的基态能量和 $Q = 0$ 子空间的基态能量的差。从图中我们可以看到。在临界区域 ($\theta < 0.6\pi$), $Q = 1$ 子空间的基态的能量要小于 $Q = 0$ 子空间的第一激发能。但是在有能隙的区域 ($\theta > 0.6\pi$), 情况正好相反。因此对于给定的长度 L , 它们的能量会出现一个交叉。我们将交叉的点延伸到 L 趋向于无穷大, 可以得到相变点大概在 $\theta = 0.61\pi$ 。

在图4.18 (b) 中我们给出了MPS计算的基态能量的二阶导数随着尺寸变化的情况。我们可以看到在相变点附近没有发现奇异性。因此这是一类似于Kosterlitz-Thouless的连续相变。

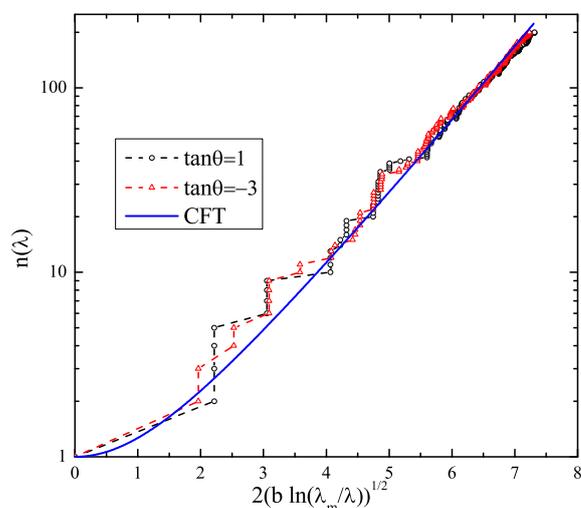


图 4.15: 纠缠谱的分布情况。其中实线是共形场论的结果。可以看到DMRG计算的结果和共形场论的结果能够很好的吻合。

4.3.5 有能隙的区域

我们发现在 $0.6\pi < \theta < 1.9\pi$ 区域，体系的激发存在能隙。它们通过一个一级相变点 ($\theta = 5\pi/4$) 分成由对偶变换联系起来的两个区域。为了研究在这两个区域的性质。我们可以先研究两个特殊的点。

在 $\theta = \pi$ ，我们体系只有 U^x 项，哈密顿量退化到铁磁的经典情形。此时基态是三重简并的，为：

$$\prod_{i=1}^L |q\rangle, q = 0, 1, 2 \quad (4.60)$$

对于偏离 $\theta = \pi$ 的点，体系的基态对于有限尺寸不再是简并的。但在热力学极限下，基态仍然是三重简并的。在图 4.19 (b) 中我们给出了在 $Q = 0$ 子空间的激发态的能量随着体系增加的变化情况。可以看到，随着链长的增长，能隙是指数衰减的，这说明基态在热力学极限下是三重简并的 ($Q = 0$ 子空间的第一激发态是两重简并的)。

同时，我们计算了纠缠熵随着链长变化的情况，如图 4.19 (a) 所示。随着链长的增长，纠缠熵出现饱和的趋势。这说明了在这个区域体系是非临界的 (激发存在能隙)。

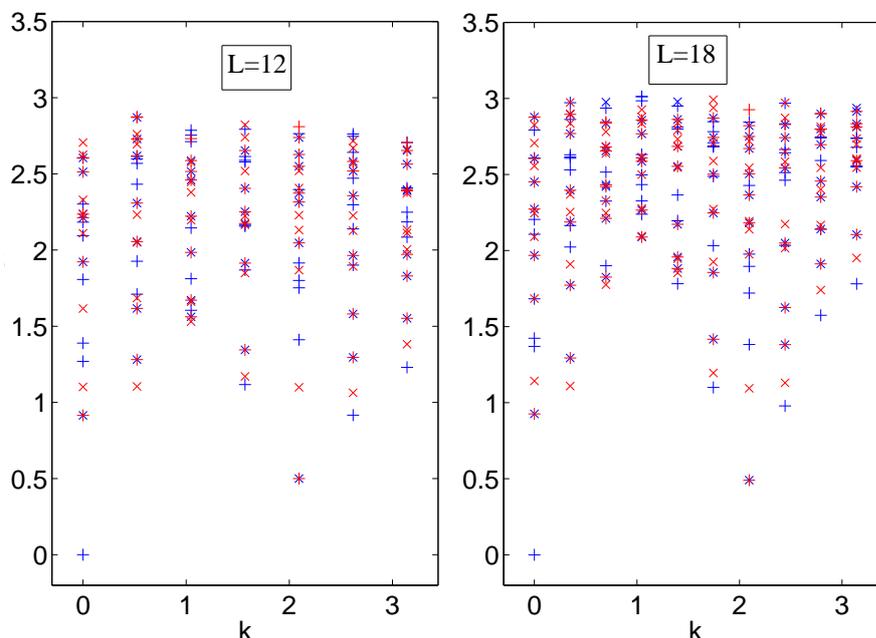


图 4.16: $\theta = \pi/4$, 我们通过精确对角化得到的周期边界条件的能级。每个能级的对应的动量 k 为横坐标。蓝色的十字代表着单态 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$, 红色的叉代表着四重态 $(Q, \tilde{Q}) = (1, 1)(1, 2)(2, 1)(2, 2)$, 蓝色的叉和红色十字的组合代表这四重态 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 1)(0, 2)(1, 0)(1, 2)$ 。

在 $\theta = \pi$ 这一点, 基态是铁磁态, 因此关联函数 $\langle U_i^{x\dagger} U_j^x \rangle$ 是常数, 而 U^y 的关联函数除了距离为0时不为0, 其它情况都为0。在偏离 $\theta = \pi$ 时, 我们同样发现了类似的结论。 U^x 的关联是长程的, 而 U^y 的关联是随着体系的长度指数衰减。因此这个相破坏了 U^x 对称性。

由于对偶性, 在 $\theta = 3\pi/2$, 体系的基态是:

$$\prod_{i=1}^L |\tilde{q}\rangle, \tilde{q} = 0, 1, 2 \quad (4.61)$$

此时 U^x 和 U^y 的作用是相互交换的。在 $\tilde{Q} = 0$ 的子空间, 基态三重简并。 U^y 的关联函数是一个非零常数, 而 U^x 的关联函数为0。在 $\theta = 3\pi/2$ 附近, 任意链长下的三重简并变为热力学极限下三重简并。 U^x 的关联函数变成随着链长指数衰减到0, 如图4.20所示。这个相破坏了 U^y 对称性。

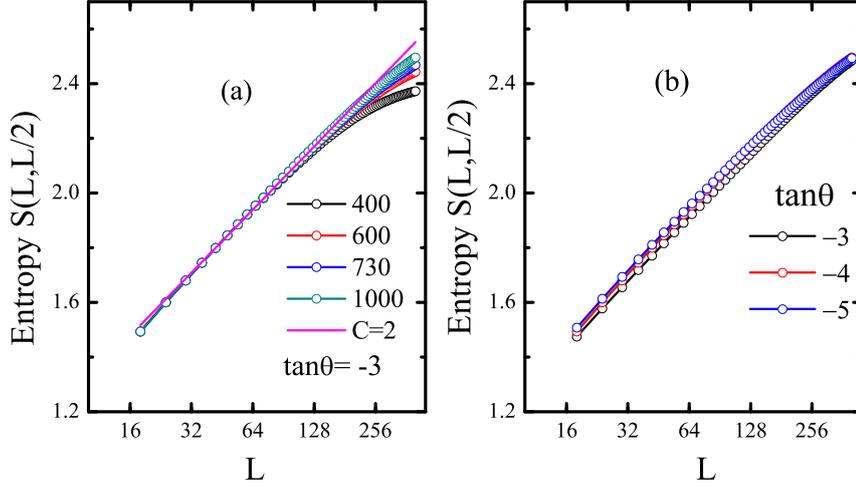


图 4.17: 在 $\pi/2 < \theta < 0.6\pi$ 区域, 通过DMRG计算的纠缠熵随着链长 L 的变化。通过拟合可以知道 $c = 2$ 。

在相变点 ($\theta = 5\pi/4$), 体系自对偶, U^x 和 U^y 等价。我们从图4.20可以看到, 它们的关联都是长程的。随着两点的距离增加, 关联趋向于一个有限的值。这说明在相变点, 基态是分别破缺了 U^x 和 U^y 态的等权重线性叠加。

4.3.6 相变点 $\theta = 5\pi/4$

两个有能隙的相在 $\theta = 5\pi/4$ 这一点汇合。两边分别破缺 U^x 和 U^y 的对称性。在上一节, 从 $\theta = 5\pi/4$ 时的关联函数我们知道, 在相变点体系仍然是长程有序, 基态同时破坏了 U^x 和 U^y 的对称性。

我们发现在 $\theta = 5\pi/4$ 附近, 有六个很重要的能级: 两个 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 单态, 一个双重态 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 1); (0, 2)$ 和另一个双重态 $(Q, \tilde{Q}) = (1, 0); (2, 0)$ 。数值的结果表明, 在相变点 $\theta = 5\pi/4$ 及其附近, 能级是这样移动的: 对于 $\theta < 5\pi/4$, 基态在热力学极限下是三重简并的。这三个态分别是 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 的单态和 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 1); (0, 2)$ 的双重态。对于 $\theta > 5\pi/4$, 基态在热力学极限下也是三重简并的。这三个态分别是另外一个 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 的单态和 $(Q, \tilde{Q}) = (1, 0); (2, 0)$ 的双重态。在 $\theta = 5\pi/4$ 这一点, 两个三重简并的态重合到一起, 导致在热力学极限下系统的基态为六重简并。其中两个双重态 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 1); (0, 2)$ 和 $(Q, \tilde{Q}) = (1, 0); (2, 0)$ 构成一个四重态。因为在自对偶点, 系统对称性增加, 这四个态够成了扩大的对称性的一个四维表示。两

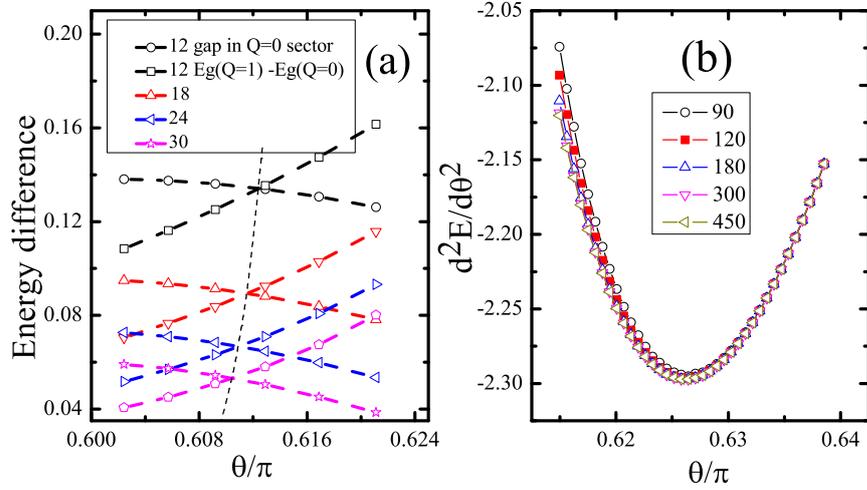


图 4.18: 图 (a) 给出了在 $Q=0$ 子空间的第一激发态和 $Q = 1$ 子空间的基态的相对位置随着 θ 的变化情况。它们在 0.6π 附近会出现相对位置的变化。图 (b) 给出了利用 MPS 计算的基态能量的二阶导数随 θ 的变化情况。

个 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 的单态在有限尺寸下会有有限大小的能隙。

在图 4.21 中，我们展示了在不同的保留状态数 M 的情况下，较低的激发态是如何变化的。上面的分析指出， $\theta = 5\pi/4$ 时，链长有限的情况下，体系的基态是 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 的单态，第一激发态是 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 1); (0, 2); (1, 0); (2, 0)$ 的四重态。第二激发态是另外一个 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ 的单态。在图中，我们用 Δ_1 表示第一激发态与基态能量的差， Δ_2 表示第二激发态与基态能量的差。可以看到，在不同的保留状态数下，DMRG 计算出激发能基本收敛。 Δ_1 和 Δ_2 都表现出随链长增加而指数衰减的行为。这证实了在有限尺寸下的第一激发态和第二激发态与基态在热力学极限下是简并的，从而系统基态有六重简并。

在图 4.22 (a) 中，我们给出了在 $Q = 1$ 子空间中最低的两个能级的能量的差。同通过对 DMRG 结果的拟合，我们发现在热力学极限下，这个能隙不趋向 0。我们知道，在热力学下极限下， $Q = 1$ 的子空间的最低的态是六个简并的基态之一。因此，我们可以得出结论：在 $\theta = 5\pi/4$ 点体系的基态是六重简并的，在这之上，存在有限大小的能隙。

在图 4.22 (b) 中，我们给出在 $\theta = 5\pi/4$ 附近能量对于 θ 的一阶导数。我们采用了两种方法。一种是用 iTEBD 直接算出系统基态的能量，然后对 θ 求数值

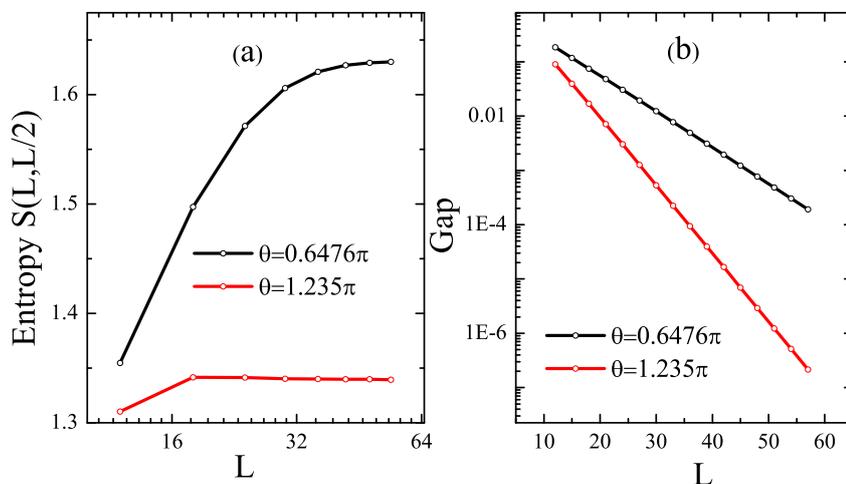


图 4.19: 在两个有能隙的区域中, 我们选择了两个点: 0.6476π 和 0.1235π 。图 (a) 给出了它们的纠缠熵随着链长变化的情况。当链长达到一定的长度时, 纠缠熵都出现饱和。这证实了在这个区域, 体系是有能隙的。图 (b) 给出了在有限链长下能隙 (第一激发态为一个二重态) 随链长的变化。可以看到, 能隙随链长都是指数衰减到0。这说明基态是三重简并的。

导数, 另外是利用Fenyman-Hellman定理:

$$\frac{\partial E_0}{\partial \theta} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \theta} \right\rangle \quad (4.62)$$

直接求基态能的一阶导数。从图中我们可以看出, 两种方法得到的结果符合得很好, 在 $\theta = 5\pi/4$ 处, 体系的基态能的一阶导数出现了不连续性。说明在 $\theta = 5\pi/4$ 点, 体系发生了一级相变。

我们进一步研究在相变点 $\theta = 5\pi/4$ 及其很小的领域内的体系的纠缠熵。

在图4.23中每条线的图例前面的数代表体系偏离相变点 $\theta = 5\pi/4$ 的大小。后面的数字代表在DMRG计算中保留状态数 M 的大小。最后的一条线是通过iTEBD方法得到的无穷长链的纠缠熵。

在图4.23中, 我们可以看到, 当链长较小时 ($L < 256$) 时, 从纠缠熵的行为判断, 体系在这一点表现为一个 $c = 2$ 的临界点。但随着体系长度的继续增长, 纠缠熵趋向于饱和, 最后随着链长的继续增加, 纠缠熵会下降到一个收敛的值。这个值和通过iTEBD方法计算的无穷大尺寸的结果一致。

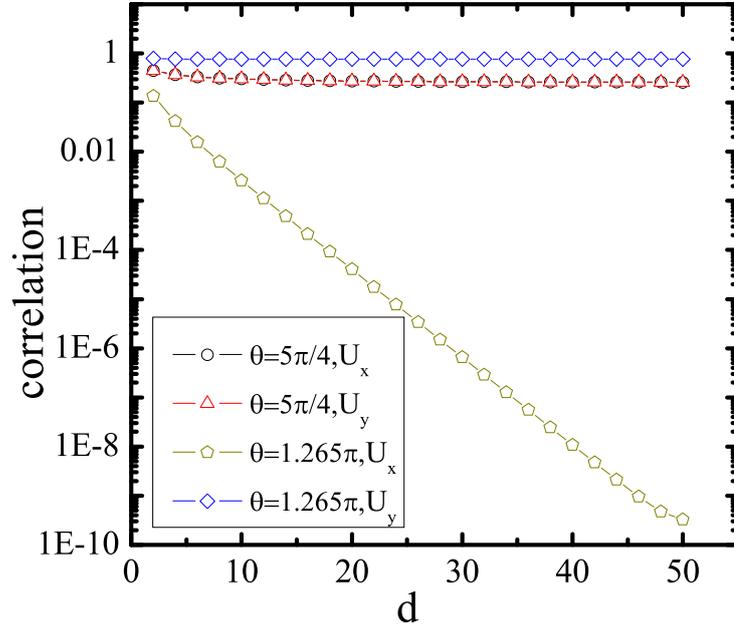


图 4.20: 在 $\theta = 5\pi/4$ 和 $\theta = 1.265\pi$, U^x 和 U^y 的关联函数。由于在 $\theta = 5\pi/4$ 点体系的自对偶性, U^x 和 U^y 的关联函数相同, 它们都表现出长程关联的行为。在 $\theta = 1.265\pi$ 时, U^y 的关联是长程的。而 U^x 随着距离的增加指数衰减到 0。

纠缠熵在小尺寸下表现的临界行为说明在临界点 $\theta = 5\pi/4$ 附近, 体系的关联长度很长。因为当体系的长度 L 小于关联长度 ξ 时, 纠缠熵的面积定律仍然成立。当体系的长度超过关联长度后, 纠缠熵不会继续增长, 而是保持一个常数 (由关联长度的值确定) [36]。

对于纠缠熵在链长达到某一值后下降的行为, 我们可以这样来理解: 在靠近临界点 $\theta = 5\pi/4$ 的过程中, 有两个单态 $(Q, \tilde{Q}) = (0, 0)$ (分别为 $\theta > 5\pi/4$ 和 $\theta < 5\pi/4$ 的基态) 的能量发生了交叉, 将他们分别记作 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$, 其中 $|\psi_-\rangle$ ($|\psi_+\rangle$) 是 $\theta < 5\pi/4$ ($\theta > 5\pi/4$) 时体系的基态。当 $\theta = 5\pi/4$ 时, 对于有限的链长, 真正的基态是它们的线性叠加。远离相变点的时, 它们迅速的变回各自的基态 $|\psi_-\rangle$ ($|\psi_+\rangle$)。这个过程的速度随着 L 的增加变得更快。因此在 $L \rightarrow \infty$, $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 的交叉变得尖锐, 这也是为什么在 $\theta = 5\pi/4$, 体系会有一个一级相变的原因。

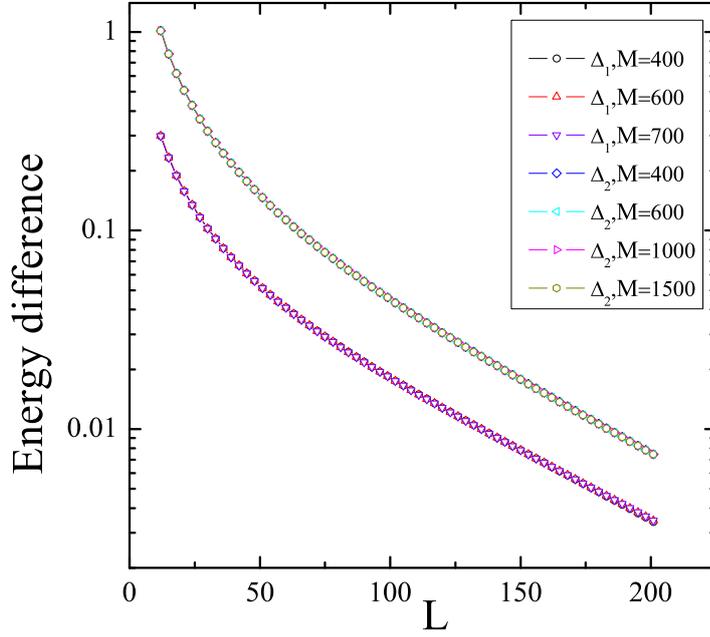


图 4.21: 在 $\theta = 5\pi/4$, 体系的第一激发能(四重态) Δ_1 和第二激发能 Δ_2 (单态)随着链长的变化。可以看出它们都随链长指数衰减到0, 这说明在热力学极限下, 体系的基态是六重简并的。

假设我们选取的 θ 略小于 $5\pi/4$ 。当 L 较小时, 体系的基态是 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 的等权重叠加。但是当 L 增大时, 体系的基态会迅速的变回到 $|\psi_-\rangle$ 。态 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 的纠缠熵, 显然的要小于 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 的线性叠加态的纠缠熵。因此我们在图上会看到纠缠熵的下降。

由于 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 在 $\theta = 5\pi/4$ (自对偶点)的对偶对称性, 以及它们在 L 趋向无穷时的正交性。我们可以计算出纠缠熵在链长较大时的跳跃的幅度。

因为 $|\psi_-\rangle$ 和 $|\psi_+\rangle$ 对称, 所以它们对应的施密特分解的谱是相同的:

$$\begin{aligned}
 |\psi_-\rangle &= \sum_{i=1}^n \lambda_i |s_i^-\rangle |e_i^-\rangle \\
 |\psi_+\rangle &= \sum_{i=1}^n \lambda_i |s_i^+\rangle |e_i^+\rangle
 \end{aligned} \tag{4.63}$$

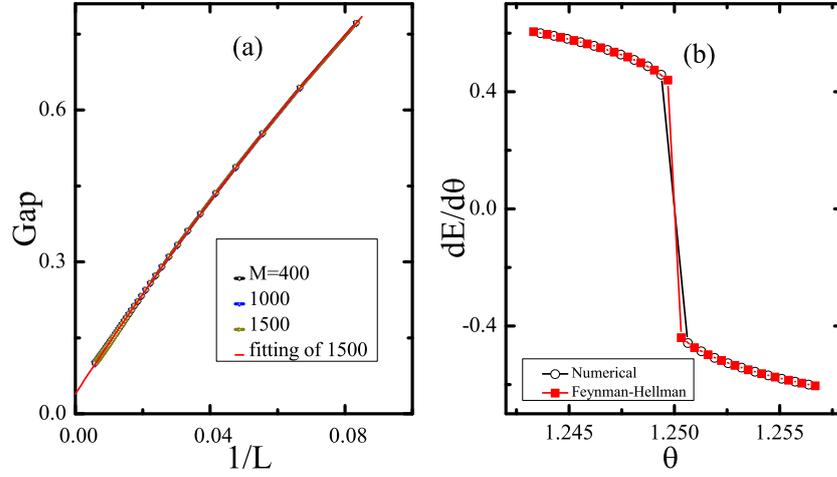


图 4.22: 图 (a) 给出了在六个简并基态之上的激发能随链长变化的趋势。通过对DMRG计算中保留状态数为1500的结果的拟合发现在热力学极限下, 体系是有能隙的 (~ 0.04)。 (b) 给出了能量的一阶导数随 θ 的变化。数值导数和利用Feynman-Hellman定理得到的结果吻合地很好。在 $5\pi/4$ 这个点, 体系表现出一个一级相变。

取的归一化的条件是约化密度矩阵本征值的和为1:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i^2 = 1 \quad (4.64)$$

它们对应的纠缠熵是:

$$S^{+(-)} = - \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \log(\lambda_i^2) \quad (4.65)$$

将 $|\psi_{-}\rangle$ 和 $|\psi_{+}\rangle$ 作线性组合之后, 我们可以得到:

$$|\psi_{-}\rangle + |\psi_{+}\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i |s_i^{-}\rangle |e_i^{-}\rangle + \sum_{i=1}^n \lambda_i |s_i^{+}\rangle |e_i^{+}\rangle \quad (4.66)$$

如果我们有

$$\begin{aligned} \langle e_i^{-} | e_j^{+} \rangle &= 0, \quad \forall i, j \\ \langle s_i^{-} | s_j^{+} \rangle &= 0, \quad \forall i, j \end{aligned} \quad (4.67)$$

在重新归一化之后，我们有

$$S^m = -2 \sum_{i=1}^n (\lambda_i^2/2) \log(\lambda_i^2/2) = - \sum_{i=1}^n \lambda_i^2 \log(\lambda_i^2) + \log(2) \quad (4.68)$$

所以态 $|\psi_-\rangle + |\psi_-\rangle$ 的纠缠熵(S^m)比它们单独的纠缠熵 $S^{+(-)}$ 大 $\log(2)$ 。我们从DMRG得到的结果和 $\log(2)$ 非常的接近。

综上所述，我们确定了在 $\theta = 5\pi/4$ 点体系存在一个一级相变。在这个点两侧，体系的基态为三重简并，在这之上的激发存在能隙。在相变点，这三个态合在一起够成六重简并的基态。在相变点，我们发现在六个简并的基态之上的激发有一个小的能隙。我们注意到，如果仅仅考虑较小的链长，会认为相变点是一个可以用共形场论描述的 $c = 2$ 的临界相。但是在更长的链长下，纠缠熵会出现饱和。这也说明在相变点 $\theta = 5\pi/4$ 体系是非临界的。

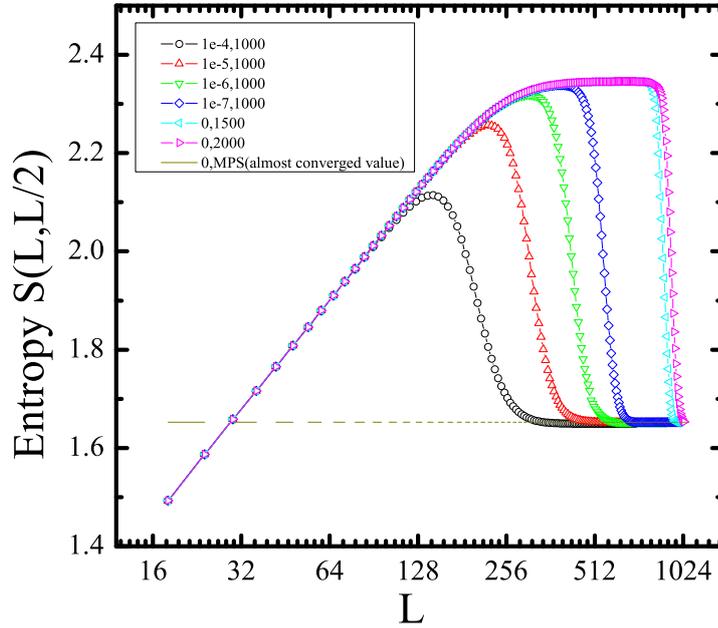


图 4.23: 在一阶相变点, $\theta = 5\pi/4$ 及其附近的纠缠熵。图例上第一个数代表偏离临界点的大小, 第二个数是DMRG计算中保留状态数的大小。

4.4 Quantum Torus Chain和SU(3)反铁磁海森堡模型的联系

下面我们将 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain模型写到费米子表象下。每个点上的物理状态可以写为:

$$f_0^\dagger|0\rangle, f_1^\dagger|0\rangle, f_2^\dagger|0\rangle \quad (4.69)$$

其中 f_i^\dagger 为产生一个 i 类的费米子。则系统的哈密顿量(4.8)为:

$$H = \alpha \sum_{i,a} f_{i,a}^\dagger f_{i,a} f_{i+1,a}^\dagger f_{i+1,a} + \beta \sum_{i,a,b} f_{i,a+1}^\dagger f_{i,a} f_{i+1,b-1}^\dagger f_{i+1,b} + h.c \quad (4.70)$$

我们知道SU(3)的生成元为:

$$L_b^a = f_a^\dagger f_b - \frac{\delta_{ab}}{3} \sum_c f_c^\dagger f_c \quad (4.71)$$

因为每个点上的粒子数为1, 上式的第二项为一个常数, 则

$$L_b^a = f_a^\dagger f_b \quad (4.72)$$

此时体系的哈密顿量可以写为:

$$H = \alpha \sum_{i,a} (L_{a,i}^a L_{a,i+1}^a) + \beta \sum_{i,a,b} (L_{a,i}^{a+1} L_{b,i+1}^{b-1} + h.c) \quad (4.73)$$

此时的哈密顿量并不是SU(3)对称的。如果我们将体系的哈密顿量投影到 $\theta = 0$ 的基态的子空间, 则可以得到投影哈密顿量为:

$$H = \alpha \sum_{i,a} (L_{a,i}^a L_{a,i+1}^a) + \beta \sum_{i,a \neq b} (L_{a,i}^b L_{b,i+1}^a + h.c) \quad (4.74)$$

上面的哈密顿量是SU(3)不变的。在以上的形式下, 投影空间的两个U(1)对称性的生成元是:

$$L_1^1 - L_2^2, L_1^1 + L_2^2 - 2L_0^0 \quad (4.75)$$

我们可以将以上的哈密顿量看成是SU(3)反铁磁海森堡模型

$$H = \sum_{i,a,b} L_{a,i}^b L_{b,i+1}^a \quad (4.76)$$

的XXZ形式。

同样我们也可以将投影到 $\theta = 0$ 的基态的子空间的哈密顿量写到自旋1的表象下：

$$H = \frac{2}{3}(\alpha - \beta) \sum_{\langle ij \rangle} \cos\left[\frac{2\pi}{3}(S_z^i - S_z^j)\right] + \beta \sum_{\langle ij \rangle} [\hat{S}^i \hat{S}^{i+1} + (\hat{S}^i \hat{S}^{i+1})^2] \quad (4.77)$$

我们注意到上式中的第二项，

$$H = \beta \sum_{\langle ij \rangle} [\hat{S}^i \hat{S}^{i+1} + (\hat{S}^i \hat{S}^{i+1})^2] \quad (4.78)$$

就是所谓的Lai-Sutherland模型[85, 86]，它和SU(3)的反铁磁海森堡模型(4.76)是可以相互转换的，它严格可解，激发无能隙，可以用 $c = 2$ 的SU(3)₁的Wess-Zumino-Novikov-Witten模型来描述[87–89]。

$m = 3$ 的Quantum Torus Chain在SU(3)的反铁磁海森堡模型的基础上引入了其它的项。对于(4.74)的研究也许能够给出 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain 的具体的 $c = 2$ 的共形场论。

4.5 小结

在这一章中我们推广了海森堡模型，得到了一类新的模型：Quantum Torus Chain，其中有一个类似于自旋的参数 m 。我们首先详细的分析了这个模型的对称性。然后分析了奇数 m 和偶数 m 的情况下体系性质的不同。奇数情况下，在反铁区域，体系一般无能隙。但在偶数情况下体系的激发却是有能隙的。这和Haldane猜想关于半整数和整数自旋的反铁磁自旋链的论断类似。

我们着重分析了 $m = 3$ 时体系的相图。发现了交替的有能隙相和无能隙相，以及各个相之间的相变。对于临界相，我们分析了对应的共形场。目前我们只能确定临界区域的中心荷是 $c = 2$ 。由于较大的有限尺寸效应，我们没能分析出具体的共形场。

在相图中所有的有能隙的相都是破坏了体系的对称性，这和文小刚等人对于一维模型分类[17–20]的结果是一致的。

我们还研究了 $m = 3$ 的Quantum Torus Chain和SU(3)的反铁磁海森堡模型的关系。

第五章 DMRG在量子化学中的应用

5.1 动量空间的DMRG

在S.R.White提出了实空间DMRG[22, 23]算法后, 向涛将它推广到了动量空间[93]。下面我们以Hubbard模型为例简要介绍一下动量空间的DMRG算法。

Hubbard模型的哈密顿量为:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (5.1)$$

其中第一项是跃迁项, t 是跃迁常数, 第二项是同位排斥项, 当一个格点上占据两个电子时, 体系的能量会上升 U 。通过傅立叶变换:

$$c_{m,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in BZ} c_{k,\sigma} \cdot \exp(i.m.k) \quad (5.2)$$

我们可以得到动量空间的哈密顿量:

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{k_1, k_2, k_3} c_{k_1, \uparrow}^\dagger c_{k_2, \uparrow} c_{k_3, \downarrow}^\dagger c_{k_1 - k_1 + k_3, \downarrow} \quad (5.3)$$

其中 N 是体系中格点的个数, ϵ_k 是动量空间的色散关系, 为:

$$\epsilon_k = -2t \cos k \quad (5.4)$$

对于每一个动量 k , 有四个自由度:

$$|0\rangle, c_{k,\uparrow}^\dagger |0\rangle, c_{k,\downarrow}^\dagger |0\rangle, c_{k,\uparrow}^\dagger c_{k,\downarrow}^\dagger |0\rangle \quad (5.5)$$

分别是空占据, 占据一个向上的电子, 占据一个向下的电子, 以及同时占据两个电子。

在实空间的DMRG中, 我们是每次将两个点加入环境和系统块的中心。在动量空间的DMRG中, 动量空间的 k 点就像实空间中的点。将动量空间中的动

量 k 按照一定的顺序排列，就形成了一条一维的链，我们就可以利用实空间的DMRG算法来求解对应的体系的基态。

对于实空间中只有局域相互作用的哈密顿量(5.1)，在DMRG的计算过程中，我们只需记录环境块和系统块最边缘的点的信息。因为新加入的点只和与之近邻的点（系统或环境块的边缘）发生相互作用。但是实空间只有局域相互作用的哈密顿量，通过傅立叶变换转换到动量空间后，哈密顿量不在是局域的。每一个点都和另外的所有的点发生作用(5.2)。

因此，在动量空间的DMRG的计算中，我们需要保留系统或环境块中的每一个点上的算符的全部信息。在加入两个点之后，新增的哈密顿量的项数也比实空间中的多。因此动量空间的DMRG的计算相比相同保留状态数下的实空间的DMRG，内存和计算量都要增加。

对于Hubbard模型，每个 k 点对应的自由度是4，这样在加入两个点之后，总的体系的基矢的维度是 $M^2 4^2$ （ M 是DMRG计算中的保留状态数）。最终我们需要求解系统的基态，计算量为 $(M^2 4^2)^2$ 。为了减少计算复杂度，可以减少单个点的物理维数。为此，我们将每个点分成两部分：

$$|0\rangle, c_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle \quad (5.6)$$

即把同一个 k 点分成自旋朝上和朝下的两个点。这样每个点的自由度变为2，能够减少计算的时间。

由于长程的相互作用，在动量空间的哈密顿量(5.2)中的项数为 N^3 （由于有动量守恒的要求）。为了减少项数，我们可以定义如下的组合算符：

$$\begin{aligned} a_0(p\sigma) &= c_{p\sigma} \delta_{(p\sigma) \in A} \\ a_1(p\sigma) &= \sum_q a_0^\dagger(q\sigma) a_0(p+q\sigma) \\ a_2(p) &= \sum_q a_0^\dagger(q \uparrow) a_0(p+q \downarrow) \\ a_3(p\sigma) &= \sum_{q_1 q_2} a_0^\dagger(q_1 \bar{\sigma}) a_0(q_2 \bar{\sigma}) a_0(p+q_1-q_2\sigma) \delta_{(p\sigma) \notin A} \\ a_4(p) &= \sum_q a_0(q \downarrow) a_0(p-q \uparrow) \end{aligned} \quad (5.7)$$

其中 $\bar{\sigma} = -\sigma$ 。此时，哈密顿量中的项数减少到了 N 项。使得计算的复杂度能够减少。

在[93]中，向涛利用上面介绍的动量空间DMRG方法研究了 4×4 和 8×8 的二维的Hubbard模型。得到了较高精度的基态能量。

5.2 动量空间的DMRG在量子化学中的应用

上面介绍的动量空间的DMRG方法，相比于实空间的DMRG并没有太大的优势，但是却为量子化学计算提供了新的途径。我们考虑一个原子，它的哈密顿量为：

$$H = \sum_i h(i) + \sum_{i < j} g_{ij} \quad (5.8)$$

其中第一项为单体的作用项，

$$h(i) = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (5.9)$$

分别为电子的动能项和原子核对于电子的吸引相互作用。第二项为电子之间的相互作用项为：

$$g_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \quad (5.10)$$

当我们选择一组正交归一的单粒子基 i ，可以将上面的哈密顿量写到二次量子化的表象。

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijrt,\sigma\sigma'} V_{ijrt} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{t\sigma'} c_{r\sigma} \quad (5.11)$$

第一项是单体作用项，包含电子的动能和原子核的吸引，第二项为电子之间的相互作用项。(5.11)所表示的哈密顿量，不仅可以表示单个原子，对于任何一个有相互作用的多体系统，都能由它表示。将正交归一的基 i 按照一定的顺序排列成一条链，这个体系的基态就可以用动量空间的DMRG来求解。

精确的求解分子体系的基态是量子化学中很重要的课题。S. R. White和R. L. Martin在1999年第一次将动量空间的DMRG方法应用到了水分子(H_2O)的计算中[94]。在图5.1中，他们比较了不同的方法给出的在25个基矢下的水分子的能量。可以看到，仅仅保留70个态，DMRG给出的基态能就比其它的方法要低（因为DMRG是变分的方法，能量越低说明精度越高）。在保留状态数为200时，DMRG得到的基态的能量就非常接近于精确对角化的的结果。

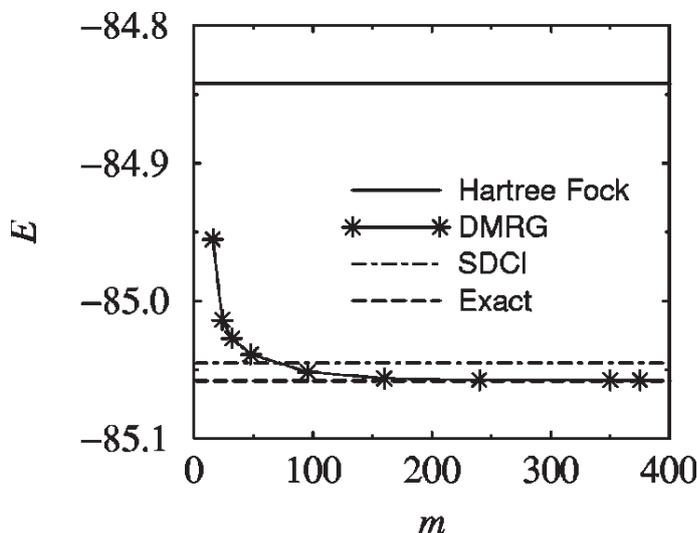


图 5.1: 来自于S. R. White和R. L. Martin的文章[94]。各种不同的方法计算的水分子的基态能量。Hartree-Fock轨道的数目是25。

DMRG在第一被用到了量子化学计算并取得成功之后，被广泛的应用到了量子化学的计算中：CsH的能级的计算[95]，多烯类（polyenes）的研究[96]，对过渡金属及其团簇的研究[97]，过渡金属化合物的研究[98]，对铬（ ^{48}Cr ）和镍（ ^{56}Ni ）的基态的研究[99]等等。同时，对于DMRG方法本身，也出现了很多的改进[100–105]。

我们在2010年提出了一种能够提高DMRG精度的方法[108]。下面主要介绍这种方法和展示得到的结果。

5.3 基于DMRG的对Hartree-Fock轨道的优化方法

在2003年，Garnet Kin-Lic Chan 和Martin Head-Gordon对水分子的基态能量做了一个基准（benchmark）的计算[109]。他们用了41个Hartree-Fock轨道，DMRG 计算中的保留状态数达到了6000，给出了当时情况下在41个轨道下最精确的水分子的能量值（一般来说，在能够处理的范围内，轨道基矢的数目越多，得到的基态越精确，因此不同方法的比较一般在相同数目的轨道下进行）。

为了提高计算的精度，我们可以增加单电子Hartree-Fock轨道的数目，也

可以增加在DMRG计算中保留状态的数目。但同时这对于计算资源的要求也大大的提高。

在下面我们将介绍一种轨道优化的方法，能够在数目较小的Hartree-Fock轨道下，得到较精确的基态。

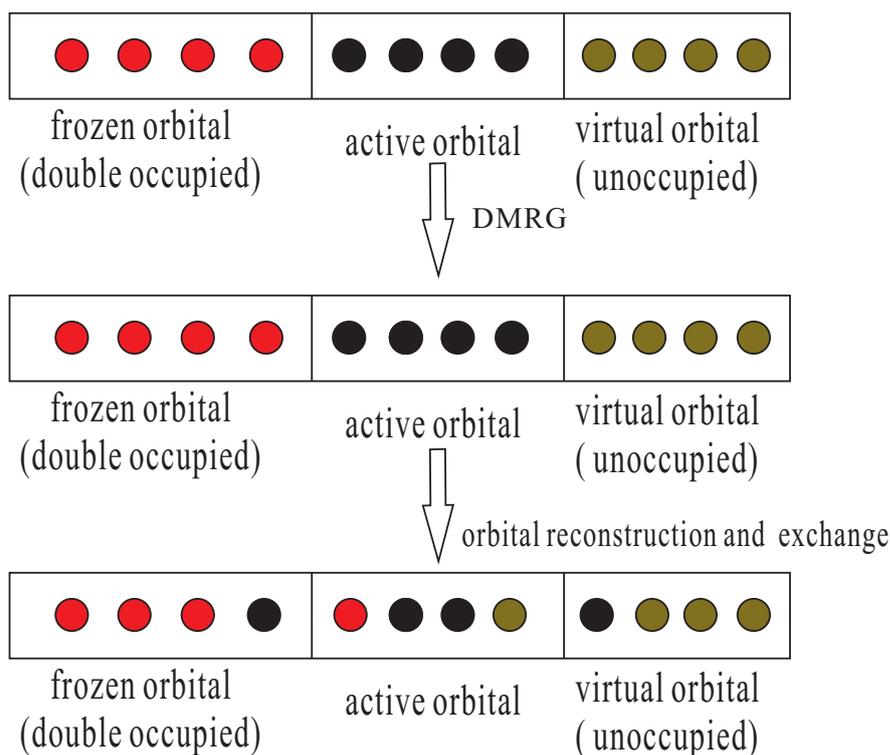


图 5.2: 轨道优化的流程图。

在图5.2中，我们给出了轨道优化的流程图。在图中，每个点代表着一个单电子的Hartree-Fock轨道，我们按照一定的规则将它们排列成一条链。

1. 首先，选择一组单电子的Hartree-Fock轨道。我们将所有的轨道分成三部分。将能量较低的轨道设置成双占据，对应于内层电子（如 H_2O 中的O的 $2s$ 电子），这部分轨道叫做冻结轨道。将能量较高的轨道设置成空占据，叫做空轨道。将中间能量的轨道用来做DMRG计算，这部分轨道叫做活跃轨道。
2. 对于活跃轨道的部分进行标准的动量空间DMRG计算，得到系统的基态。通过基态构造出单粒子的约化密度矩阵（one particle reduced density

matrix), 将其对角化。这样我们就将所有的活跃轨道做了一个幺正变换, 得到了一组新的轨道。这组轨道正是约化密度矩阵的本征态。

3. 将单粒子约化密度矩阵的本征值从小到大做一个排序。将对应本征值接近于1的轨道和冻结轨道部分交换, 将对应于小本征值的轨道和虚轨道部分交换。这样就完成了一次活跃轨道的更新。
4. 在新的活跃轨道下做标准的动量空间DMRG计算。重复上面的过程, 直到冻结轨道和虚轨道部分中的所有轨道都涉及到一遍。
5. 重复上面的过程直到相应的物理量收敛。

在DMRG计算中, 如果我们能够处理的单电子的Hartree-Fock轨道的数目是 N_0 , 但是通过对轨道进行分类, 我们能够处理更大数目的Hartree-Fock轨道 $N_1(N_1 > N_0)$ 。由于DMRG的变分性质, 涉及的轨道数越多, 得到的基态也越准。因此我们也预期这种方法在同样的条件下能够比传统的动量空间的DMRG方法得到更精确的基态。

本质上, 轨道优化的过程是在寻找在给定基矢数目时能够表示系统基态的最优基矢的过程。在这个过程中单电子约化密度矩阵起着判定性的作用。

对于在给定单电子的Hartree-Fock轨道 $|i\rangle$ 下的波函数 $|\psi\rangle$, 单粒子的约化密度矩阵为:

$$\rho_{i,j} = \langle \psi | c_i^\dagger c_j | \psi \rangle \quad (5.12)$$

它是一个 $N \times N$ 的对称矩阵。将其做本征值分解:

$$\rho_{i,j} = \sum_k U_{ik} \Lambda_k U_{jk} \quad (5.13)$$

其中 U 是幺正矩阵。用 U 对轨道 $|i\rangle$ 做线性变换:

$$|i'\rangle = \sum_i U_{ii'} |i\rangle \quad (5.14)$$

得到重组后的轨道 $|i'\rangle$, 在新的轨道下, 单电子约化密度矩阵是对角的。即新的轨道基矢 $|i'\rangle$ 是波函数 $|\psi\rangle$ 对应的单电子约化密度矩阵的本征态。我们注意到, 在传统的量子化学中, 也存在类似的概念, 叫做自然轨道 (Natural Orbital) [160]。

单粒子约化密度矩阵的本征值可以理解为在给定的波函数 $|\psi\rangle$ 中，对应的自然轨道在其中的重要性。如果本征值接近于1，则说明其占的比重较大，如果接近于0，则说明它在波函数 $|\psi\rangle$ 中占的比重较小。因此，在轨道优化的过程中，用单粒子约化密度矩阵和自然轨道作为轨道选择的判据是很自然的做法。

5.4 数值结果

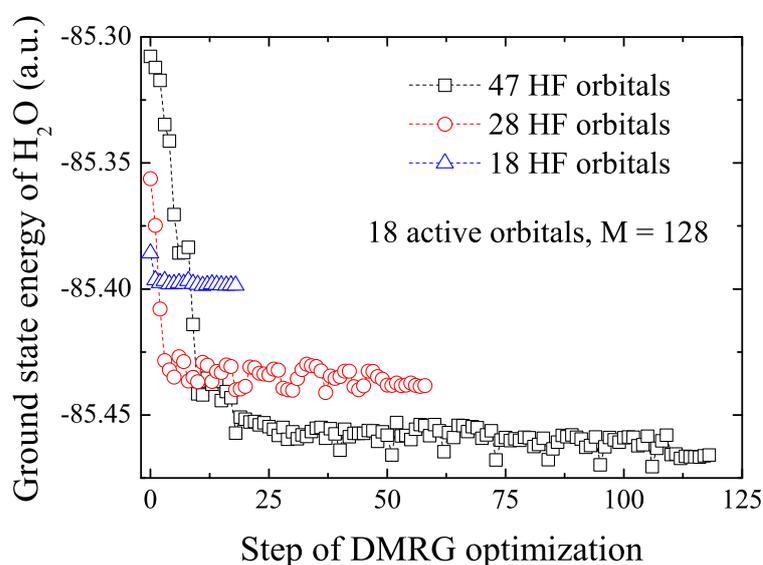


图 5.3: 水分子的能量随着DMRG步数的变化情况。三条线中活跃轨道数都为18，总轨道数分别为47，28，18。在刚开始的几步，随着步数的增加，基态能有很大的改善。在所有的轨道都被涉及到一次之后，基态能的改善变小。

在图5.3中我们做了一个简单的测试。我们选取了三组单电子的Hartree-Fock轨道，6-311++G(2d, 2p)，6-311+G*和6-31G*。他们分别包含47，28和18个单电子的Hartree-Fock轨道。在计算中，我们选取的是活跃轨道数是18，考虑了所有水分子（H₂O）的10个电子。对于6-31G*基矢，因为它只包含18个轨道，因此在这组基下的计算就是一个标准的动量空间的DMRG的计算。在其它的两组基矢下，做完一次DMRG之后，我们每次将活跃轨道中占据数最低的3个轨道和虚轨道部分的轨道交换。因此分别经过4次和10次DMRG计算之后我们能将所有的轨道都涉及到一次。所有轨道都涉及到一次的计算叫做一次循环。

在图5.3中每个点代表着一次DMRG的计算。在图中我们可以看到。在一次循环内基态能量的改善是很明显的。在进一步的计算中，能量的改善不是很明显。因为在第一次循环之后，所有的轨道都被涉及到，得到的基态已经很接近于在给定轨道下的严格基态能量。

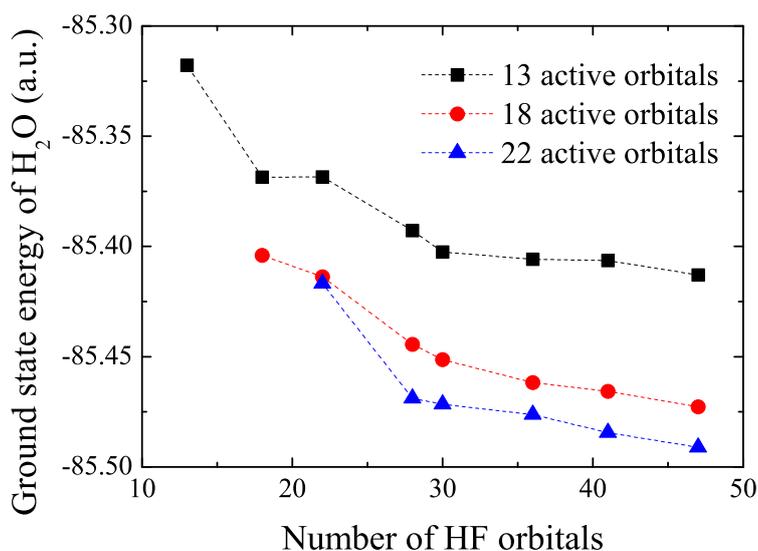


图 5.4: 水分子的基态能随着总轨道数的变化情况。在三条线中活跃轨道数分别为13, 18, 22。随着总轨道数的增加, 基态能变小。

在图5.3中我们可以看到, 总的Hartree-Fock轨道数目越多, 最后收敛得到的能量也越低, 这和上面的讨论是一致的。在图5.4中可以明显的看到这一点。在图中, 我们画出了水分子的基态能随着总的Hartree-Fock轨道数目的变化趋势。三条不同的线中活跃轨道的数目分别为: 13, 18, 22。可以看到, 水分子的基态的能量几乎是随着轨道数目增加线性降低。这说明对轨道进行优化是很有必要的。同时, 我们注意到, 轨道优化的时间随着总轨道数是线性增长的。这说明我们提出的优化方法十分高效。

因此我们知道, 在内存允许的条件下, 我们应该尽量的增加体系的轨道数。因为基态能量随着总轨道数的增加改善明显, 而计算时间只是线性增长。

同时, 我们研究了DMRG计算中, 保留状态数 M 对基态能量的影响。在图5.5中, 我们选择了28个Hartree-Fock轨道, 活跃轨道的数目是18。三条不同

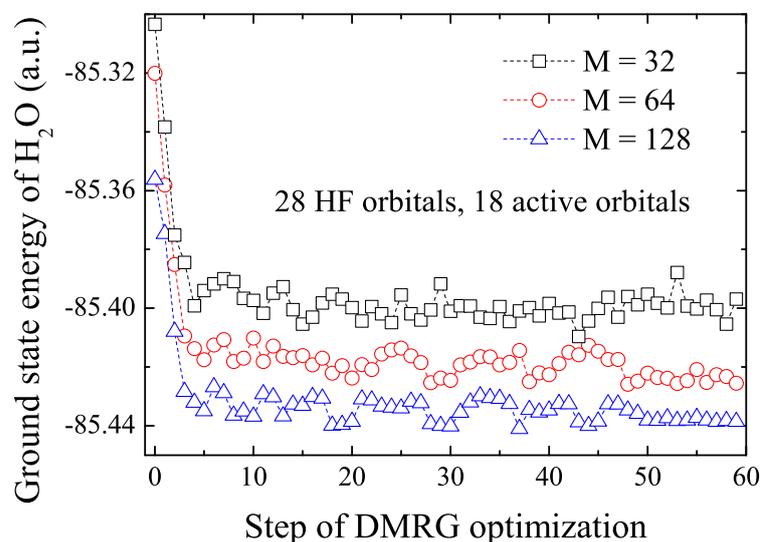


图 5.5: 水分子的基态能在不同的保留状态数下随DMRG步数的变化情况。总的轨道数为28, 活跃轨道数为18。三条线代表的保留状态数分别为32, 64, 128。可以看出, 在DMRG计算中保留状态数越大, 得到的基态能量越低。

的线分别代表的着保留状态数为 $M = 32, 64, 128$ 。可以看到, 随着保留状态数的增加, 基态的能量逐渐下降。进一步的增加保留状态数, 基态的能量也会下降, 但是幅度会越来越小。

所以在给定资源(内存和CPU计算时间)下, 并不是保留状态数 M 越大越好。因为当 M 增加到一定的程度时, 同等条件下, 继续增加 M 带来的基态能量的改善可能会比增加总的Hartree-Fock轨道数和活跃轨道数带来的改善小。

我们目前知道的水分子的基态能量的最精确的结果是Garnet Kin-Lic Chan 和Martin Head-Gordon的结果[109]。他们通过保留41个Hartree-Fock轨道, 在DMRG计算中保留 $M = 6000$ 个态, 得到水分子的能力为 $-76.314715(E_h)$ 。我们利用上面介绍的轨道优化的方法, 选取一组Hartree-Fock轨道基矢(数目大于41), 在活跃轨道数为41的情况下, 仅仅保留几百个态就能够得到更低的基态能量。

在图5.6中, 我们固定活跃轨道的数目为41, 选取了两组Hartree-Fock轨道, 轨道的数目分别是92和172。从图中可以看到, 在DMRG计算中, 仅仅保留128

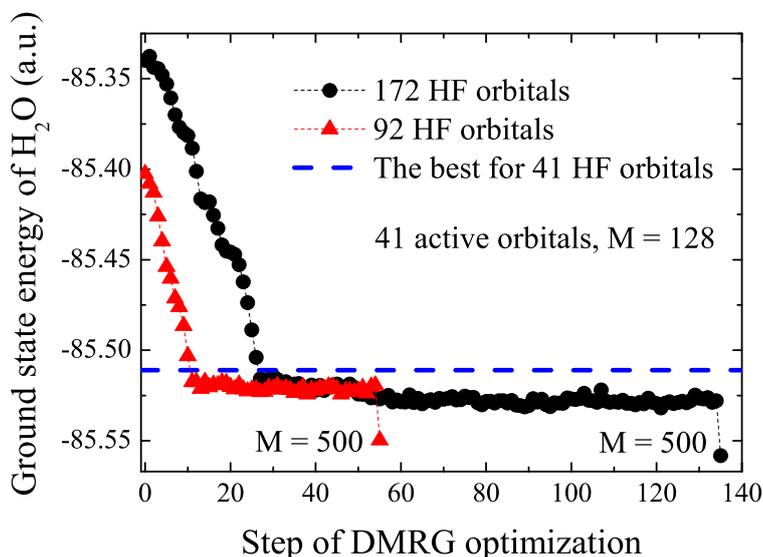


图 5.6: 在41个活跃轨道下水分子的基态能随DMRG步数的变化情况。红线和黑线中总轨道数分别为92和172。除了最后一步在DMRG 计算中的保留状态数为500外, 其它步的保留状态数都为128。虚线是[109]中的结果。

个态, 我们就能得到比[109]中的结果更低的基态能量。在最后一步, 当我们将保留状态数进一步提高到500的时候, 基态的能量进一步下降。这说明轨道优化的方法在量子化学的计算中是有很大的潜力的。

为了进一步的提高计算精度, 我们选择了总数为172的Hartree-Fock 轨道, 设置活跃轨道数的数目是61个。在DMRG的计算中, 我们保留了150个态, 在最后一步的计算中, 我们将保留态的数目增加到300。我们得到的水分子的基态能量为: $-85.567(E_h)$ 。这个值已经可以和92个轨道的Monte Carlo和电子耦合簇 (Coupled Cluster) 展开的结果相比拟, 见表5.1。但是需要强调的是, DMRG的计算是变分的。

5.5 小结

在这章中, 我们了一种在量子化学DMRG计算中的轨道优化方法。我们根据各个轨道在单粒子约化密度矩阵的本征值来区分他们在基态中的比重, 从一组数目较大的Hartree-Fock轨道中选择出最能表述基态的轨道。这种方法相比

表 5.1: 不同方法得到的水分子基态能的比较。我们的结果是从172个Hartree-Fock轨道中选择了61个活跃轨道得到。除了最后一步保留的状态数是300, 其它步的保留状态数是150。

方法	轨道数	基态能量
HF	92	-85.256
CCSD(T)	92	-85.563
QMC (Ref. [161])	92	-85.567
DMRG (Ref. [109])	41	-85.512
DMRG (present work)	61	-85.567

传统的动量空间的DMRG方法, 在相同的计算资源下能够得到更精确的基态。我们研究了水分子的基态, 通过从172个Hartree-Fock轨道中选择61个轨道, 计算出的水分子的基态能和92个轨道的Monte Carlo和耦合簇 (Coupled Cluster) 展开的结果可以比拟。

第六章 结语

本论文分为两个部分。第一部分我们讨论了一个推广的海森堡模型，并详细的研究了一维情况下这个模型的性质。第二部分，我们提出了在量子化学计算中一种基于密度矩阵重正化群的优化Hartree-Fock轨道的方法，并通过单个水分子的计算，证实了这个方法的有效性。

首先，我们回顾了自旋的另外一种解释：在中心存在磁单极子的球面上运动的自由电子的对称群（磁平移群）的生成元，即这个单粒子体系对应的角动量算符。求解这个量子力学问题我们知道，穿过球面的磁通量子数（ $2Q$ ）必须是量子化的（取整数）。 Q 是轨道角动量的取值，因此，由于磁单极子的作用，轨道角动量除了能取整数值外，还能取半整数。

当我们把球面推广到环面后，对应的磁平移群变成一个有限群。它的生成元是 U^x 和 U^y 。由 U^x 和 U^y 可以生成 $Z_m \times Z_m$ 群。对应的薛定谔方程的解够成了 $Z_m \times Z_m$ 群的投影表示。 m 是穿过环面的磁通量子数，它也是量子化的。

将海森堡链中的自旋算符推广到 U^x 和 U^y ，可以得到一类新的一维模型—Quantum Torus Chain，哈密顿量为： $H = \sum_i (\cos \theta U_i^x U_{i+1}^{x\dagger} + \sin \theta U_i^y U_{i+1}^{y\dagger} + h.c.)$ 。我们知道对于反铁磁的海森堡链，整数和半整数自旋对应体系的性质有很大的不同。整数自旋反铁磁海森堡链的激发存在能隙，基态关联函数指数衰减。而半整数反铁磁自旋链的激发无能隙，关联函数幂次衰减。这正是Haldane猜想的内容。通过研究自旋对应的低能有效模型：非线性 σ 模型，Haldane发现在有效模型中存在一个拓扑项，这一项仅仅在半整数自旋时起作用，正是这一项的出现导致了能隙的关闭。

虽然Quantum Torus Chain的对称性是离散的，但我们也发现了类似Haldane猜想的结论。对于模型中的一个参数 m （穿过环面的磁通量子数），奇数和偶数对应的模型的性质也大为不同。在 $\theta = 0$ 附近， m 为偶数时，体系的激发存在能隙。而 m 为奇数时，体系的激发一般无能隙。

我们详细的研究了 $m = 3$ 的情形。通过分析模型的对称性，我们得到了所有可能的能级简并度。进而我们通过精确对角化，密度矩阵重正化群和基于矩阵乘积态的算法，研究了它的相图。在 θ 的不同区域我们发现了有能隙相和无

能隙相。对于有能隙的相，我们发现了基态都是简并的。这和文小刚等人关于一维体系的分类的结果相吻合。对于临界相，我们通过纠缠熵和链长的关系 $S \sim c/6 \log(L)$ 拟合出了对应的共形场论的中心荷 (c)。数值结果表明，在两个临界相，中心荷都为2。小尺寸的精确对角化的结果往往能给出临界体系对应的共形场的信息。但在Quantum Torus Chain中，由于较强的有限尺寸效应，我们没能最终确定临界相对应的具体的共形场。在相图中我们发现了两个一级相变点和一个连续相变点。在连续相变点，能量的二级导数没有出现奇异。因此我们判断这是一个Kosterlitz-Thouless类型的相变。

在一维格点体系中，如果每个格点的物理状态是体系对称性的投影表示，则不存在对称性保护的相。这正对应于我们研究的模型。所以在Quantum Torus Chain中，有能隙的相都是对称性破缺的相。原则上，我们可以构造一个新的哈密顿量，使得单个格点的物理状态构成 $Z_m \times Z_m$ 的线性表示，在这样的体系中会出现类似AKLT模型基态的对称性保护的拓扑相。在本论文中，我们仅仅研究了一维的情形，我们将向二维的推广留作以后研究的课题。

自从S. R. White提出了密度矩阵重正化群方法后，它就被迅速推广到各个领域。至今为止密度矩阵重正化群在量子化学领域得到了迅速的发展。我们提出了一种在量子化学密度矩阵重正化群计算中优化Hartree-Fock轨道的方法。将密度矩阵重正化群方法应用到具体化学体系（分子等）时，由于对应的二次量子化的哈密顿量存在长程相互作用，我们能够处理的Hartree-Fock轨道数目有限。为了在有限的轨道数下寻找最能精确描述体系基态的轨道，我们将数目较大的Hartree-Fock轨道分成三部分：冻结轨道部分，活跃轨道部分和虚轨道部分。冻结轨道对应于双占据的内层电子。虚轨道对应于占据数为0的轨道。密度矩阵重正化群计算仅仅是在活跃轨道部分进行。在得到系统的基态后，利用它构造出单粒子约化密度矩阵。将单粒子约化密度矩阵对角化，利用得到的幺正矩阵对轨道做线性变换就能得到一组新的轨道，在量子化学中叫做自然轨道。相应的本征值的大小代表着各自然轨道在基态中的比重。我们将占据数接近1的自然轨道和冻结轨道交换，将占据数接近于0的自然轨道和虚轨道交换。重复这样的过程就能找到给定轨道数下最能精确表示体系基态的轨道。

我们研究了单个水分子的基态。在172个Hartree-Fock轨道基矢下选取61个轨道作为活跃轨道，得到了水分子的精确的基态能量。我们得到的结果和利用92个轨道的蒙特卡罗和耦合簇展开的结果是可以比拟的。

这种轨道优化的方法不仅仅局限于密度矩阵重正化群的计算。我们可以将得到的优化的轨道作为其它的量子化学方法（例如精确对角化）的输入，从而得到更精确的基态。

附录 A 群的投影表示

在这章里，我们主要介绍一下群的投影表示有关的概念。我们主要参考[162, 163]。

A.1 群的简介

在这章我们简要介绍一下群的基本概念。

A.1.1 群的定义

对于一个集合 G ，我们对集合中的元素定义了乘法规则。如果这个集合满足以下要求：

1. 封闭性：如果 $a \in G, b \in G$,则有 $ab \in G$ 。
2. 结合性： $\forall a, b, c \in G, a(bc) = (ab)c$ 。
3. 存在一个恒元 $e, \forall a, \in G, ea = a$ 。
4. 存在逆元素： $\forall a \in G, \exists a^{-1} \in G$ 使得 $a^{-1}a = e$ 。我们就说集合 G 是一个群 (group)。关于群的定义有很多种，以上只是给出了群的一种常用的定义。

群中元素的个数叫做群的阶，用 $|G|$ 表示。阶有限的群叫做有限群，阶无穷大的群叫无限群。如果对于群 G 中的任何两个元素 a, b ，满足

$$ab = ba \tag{A.1}$$

则称群 G 为阿贝尔群，否则成为非阿贝尔群。

A.1.2 子群

子群是群的一个子集。如果 $H \subset G$,而且 G 本身也构成一个群，满足在 H 中乘法的定义和对应的元素在 G 中的定义一样。则成 H 是 G 的子群。

A.1.3 陪集,不变子群和商群

假设阶数为 g 的群 G 有一个阶数为 h 的子群 H 。 H 为:

$$H = \{s_1, s_2, \dots, s_h\}, s_1 = e \quad (\text{A.2})$$

对于群 G 中的任意一个不属于 H 的元素 r_j ,把它左乘或者是右乘到子群 H 上,得到群 G 的两个子集:

$$\begin{aligned} r_j H &= \{r_j, r_j s_2, \dots, r_j s_h\} \\ Hr_j &= \{r_j, s_2 r_j, \dots, s_h r_j\} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$r_j H$ 和 Hr_j 叫做子群 H 的左陪集和右陪集。因为陪集不含有恒元 e , 陪集不是子群。可以证明, 陪集和子群没有公共的元素, 陪集中也没有重复的元素。

一般情况下左陪集和右陪集: $r_j H$ 和 Hr_j 是不相同的。但是如果子群 H 满足以下的条件:

$$r_i H = Hr_i, \forall r_i \in G \quad (\text{A.4})$$

则我们把子群 H 叫做不变子群或者正规子群, 即对于群 G 中的任何不属于子群 H 的元素与 H 构成的左陪集和右陪集都相同。

如果我们把不变子群 H 和所有的陪集组成一个集合, H 和陪集都是这个集合的元素。按照元素在群 G 中定义的乘法, 我们可以定义不变子群和陪集之间的乘法。可以验证这个集合满足群的定义。我们把这个群叫做 G 关于不变子群 H 的商群。记作 $\frac{G}{H}$ 。显然不变子群 H 是商群 $\frac{G}{H}$ 的单位元。不变子群和商群的阶满足如下的关系。

$$\left| \frac{G}{H} \right| |H| = |G| \quad (\text{A.5})$$

A.1.4 中心

假设 H 和 G 是两个群, 同时定义了它们元素之间的乘法。我们把 G 中和所有 H 的元素对易的元素组成的集合叫做 H 在 G 中的中心。记作

$$Z(H|G) = \{g : ghg^{-1} = h, \forall h \in H, g \in G\} \quad (\text{A.6})$$

H 可以是 G 的子群，也可以不是 G 的子群。如果 $H = G$,则记作:

$$Z(G) = Z(G|G) \quad (\text{A.7})$$

称作 $Z(G)$ 是 G 的中心。显然 $Z(G)$ 是 G 的子群。它是由与 G 的一切元素对易的元素组成的集合。可以证明它是 G 的不变子群，同时它是一个阿贝尔群。

A.1.5 同态与同构

对于两个群 $G = \{g_i\}$ 和 $G' = \{g'_i\}$ ，如果存在一个映射 f ，使得 $f : G \rightarrow G'$, $f(g_i) = g'_i$ 且满足:

$$f(g_i g_j) = f(g_i) f(g_j), \forall g_i, g_j \in G \quad (\text{A.8})$$

则称 f 是 $G \rightarrow G'$ 的同态映射，简称同态。 G 和 G' 的关系称为 G' 同态于 G ，记作 $G' \sim G$ 。如果映射 f 是一个一一映射，则称 G 和 G' 是同构的，记作 $G' \approx G$ 。

在 G 中所有与 G' 中的恒元 e' 对应的元素的集合 H 叫做同态对应的核，它是群 G 的不变子群。在 G 中所有与 G' 中的其它任一非恒元素对应的元素的集合构成 G 的陪集。因为同态对应的核 H 是 G 的不变子群，则群 G' 与群 G 关于 H 的商群同构:

$$G' \approx \frac{G}{H} \quad (\text{A.9})$$

A.1.6 扩张和中心扩张

对于两个群 G 和 G' ，如果它们之间存在一个同态关系 $G' \sim G$ ，同态的核为 $H \subset G$ 。则称群 G 是群 G' 按照 H 的扩张。由同态和扩张的定义可以看出，他们互为逆操作。同态把一个高阶群映射到一个低阶群，而扩张则把一个低阶群映射到一个高阶群。

如果 $H \subset Z(G)$ ，即 H 是 G 的中心的子群，则称 G 是 G' 按照 H 的中心扩张。

A.2 群的线性表示

如果行列式不为0的 $m \times m$ 的的集合构成群 $D(G)$ 与给定的群 G 同态，则称 $D(G)$ 为群 G 的一个 m 维的线性表示:

$$D(G) \sim G \quad (\text{A.10})$$

与 G 中元素对应的矩阵 $D(R)$ 称为 R 的表示矩阵，它的迹 $Tr(D(R))$ 称为 R 的特征标。如果从 G 的映射 $D(G)$ 是一个一一映射，即 $D(G) \approx G$ 。则此表示为真实表示。

如果群 G 中的所有的元素 R 在两个不同的表示 $D(G)$ 和 $\bar{D}(G)$ 中的表示矩阵存在如下的相似变换：

$$\bar{D}(R) = X^{-1}D(R)X \quad (\text{A.11})$$

其中 X 是幺正矩阵。则称表示 $D(G)$ 和表示 $\bar{D}(G)$ 等价，记作 $D(R) \simeq \bar{D}(R)$ 。

如果群 G 的表示 $D(G)$ 中的每一个元素 $D(R)$ 都可以通过一个相似变换 X 化成同一形式的阶梯矩阵：

$$X^{-1}D(R)X = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & M(R) \\ 0 & D^{(2)}(R) \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

则称此表示是可约表示，否则称为不可约表示。

A.3 群的投影表示

A.3.1 投影表示的定义

上面我们介绍了群的群表示的基本概念，下面我们着重介绍下群的投影表示的概念。

当我们讲到群 G 的线性表示 $D(G)$ 时，意味着 G 和 $D(G)$ 之间存在一个映射关系：

$$D(g_i g_j) = D(g_i)D(g_j), g_i, g_j \in G \quad (\text{A.13})$$

对于一个量子体系，对称操作可以构成一个群。体系的任一能级对应的波函数将构成这个群的表示。但我们知道在量子力学中，态 ψ 和态 $a\psi$ （ a 是一个复数）是等价的。所以物理上可以存在一类表示 $D(g) = a(g)D(g)$ ，带入(A.13)我们可以得到：

$$\hat{D}(g_i)\hat{D}(g_j) = \frac{a(g_i g_j)}{a(g_i)a(g_j)}\hat{D}(g_i g_j), g_i, g_j \in G \quad (\text{A.14})$$

我们定义 $\frac{a(g_i g_j)}{a(g_i)a(g_j)} = \omega(g_i, g_j)$ ，可以得到：

$$\hat{D}(g_i)\hat{D}(g_j) = \omega(g_i, g_j)\hat{D}(g_i g_j), g_i, g_j \in G \quad (\text{A.15})$$

我们把满足(A.15)的表示称为投影表示。我们可以看到投影表示由两部分组成，矩阵 \hat{D} 和因子 $\omega(g_i, g_j)$ 。当对于任意的 $g_i, g_j, \omega(g_i, g_j) = 1$ 恒成立时，投影表示退化成正常的线性表示。需要注意的是 $\omega(g_i, g_j)$ 中的顺序 i, j 不能交换。

和一般的线性表示一样，我们可以定义投影表示的等价，可约，不可约表示。显然，等价表示的因子 $\omega(g_i, g_j)$ 是相同的。

一个投影表示，一共有 $|G|^2$ 个因子 $\omega(g_i, g_j)$ 。这 $|G|^2$ 个数必须满足一系列的性质。可以证明， $|G|^2$ 个数 $\omega(g_i, g_j)$ 能作为投影表示的充要条件是满足如下的 $|G|^3$ 个等式：

$$\omega(i, j)\omega(ij, k) = \omega(i, jk)\omega(j, k) \quad (\text{A.16})$$

在上面的等式中我们用 $\omega(i, j)$ 代替 $\omega(g_i, g_j)$ 以简化表达式。可以看到，上面的等式即是满足群的定义中的结合律要求。

我们做变换：

$$\hat{G}'(g_i) = \epsilon_i \hat{G}(g_i), \forall g_i \in G \quad (\text{A.17})$$

其中 ϵ_i 是个常数。我们称这样的变换叫做规范变换。 \hat{G}' 和 \hat{G} 称为规范等价的投影表示，他们的因子之间的关系为：

$$\omega'(i, j) = \epsilon_i \epsilon_j \epsilon_{ij}^{-1} \omega(i, j) \quad (\text{A.18})$$

在一般的情况下， $\omega(e, e) \neq 1$ 。但是总可以通过一个规范变换使得 $\omega'(e, e) = 1$ 。我们作规范变换：

$$\hat{G}'(e) = \omega(e, e)^{-1} \hat{G}(e) \quad (\text{A.19})$$

可以得到：

$$\hat{G}'(e)\hat{G}'(e) = \omega(e, e)^{-1}\omega(e, e)\hat{G}'(e) = \hat{G}'(e) \quad (\text{A.20})$$

上面的等式即表示 $\omega'(e, e) = 1$ 。我们称满足 $\omega'(e, e) = 1$ 的投影表示为标准形式的投影表示。在标准形式下有：

$$\hat{G}(e)\hat{G}(e) = \hat{G}(e) \Rightarrow \hat{G}(e) = I \quad (\text{A.21})$$

即在标准形式下，单位元素的投影表示是一个单位矩阵。进一步我们有：

$$\hat{G}(e)\hat{G}(g) = \omega(e, g)\hat{G}(g) = \hat{G}(g) \Rightarrow \omega(e, g) = 1, \forall g \in G \quad (\text{A.22})$$

同时:

$$\begin{aligned}\hat{G}(g)\hat{G}(g^{-1}) &= \omega(g, g^{-1})\hat{G}(e) \\ \hat{G}(g^{-1})\hat{G}(g) &= \omega(g^{-1}, g)\hat{G}(e) \\ \Rightarrow \omega(g, g^{-1}) &= \omega(g, g^{-1})\end{aligned}\quad (\text{A.23})$$

如果我们进一步取规范变换:

$$\hat{G}'(g_i) = \epsilon_i \hat{G}(g_i), \epsilon_i^{|\hat{G}|} = (\det \hat{G}(g_i))^{-1}, \forall g_i \in G \quad (\text{A.24})$$

可以证明:

$$\omega^{|\hat{G}|}(g_i, g_j) = 1 \quad (\text{A.25})$$

也就是说所有的因子 $\omega(g_i, g_j)$ 都是1的 $|G|$ 次根。我们称满足(A.25)和 $\omega(e, e) = 1$ 的因子组称为标准归一化的因子组。任何一个投影表示,总可以通过规范变换将它的因子组转化成标准归一化的因子组。我们称这样的投影表示叫标准归一化的投影表示。

A.3.2 不可约投影表示的构造方法

上面我们简要的介绍了投影表示和因子组的一些性质,下面我们介绍怎样构造投影表示。

为了寻找群 G 的不可约投影表示,我们引进群 G 的覆盖的概念。我们定义:如果存在群 G' ,它的不可约线性表示 \hat{G}' 也是群 G 的不可约投影表示 \hat{G} ,那我们称群 G' 是群 G 的覆盖群。

于是,寻找群 G 的投影表示的问题就变成了如何由群 G 来构造它的覆盖群 G' 的问题。因为一旦我们找到了覆盖群 G' ,留下的问题就是寻找 G' 的线性不可以表示的问题了。群的线性表示理论原则上已经解决了这个问题。下面我们来介绍如何由群 G 构造覆盖群的几个定理。

定理 A.3.1.

设群 G' 是群 G 按照子群 N' 的中心扩张(关于中心扩张的定义见前面),并且在映射 $f: G' \rightarrow G$ 的同态 f 上加上一个辅助条件:每个元素 $g \in G$,都有唯一的原像 $g' \in G'$,那么 G' 可以作为 G 的覆盖群。

此定理也告诉我们如果构造覆盖群 G' 。实际上覆盖群 G' 就是服从辅助条件的 G 按照 $N'(\subset Z(G'))$ 的中心扩张。

我们选择标准归一化的因子组，可以把 $\omega(i, j)$ 写成：

$$\omega(i, j) = \exp\left(\frac{2\pi i z_{i,j}}{n}\right) \quad (\text{A.26})$$

这里 n 和 $z_{i,j}$ 都是正整数。 n 是投影表示的维数。由(A.26)可以知道对于每一个因子 $\omega(i, j)$ ，可以找到一个正整数和它对应（正确到 n 的整数倍），我们记这种对应为

$$\omega(i, j) \leftrightarrow z_{i,j}, \quad \text{mod } n \quad (\text{A.27})$$

相对应的，因子组满足的条件变成：

$$\begin{aligned} z_{i,j} + z_{ij,k} &= z_{i,jk} + z_{j,k} \\ z_{e,e} = z_{e,g} &= z_{g,e} = 0 \quad \text{mod } n, \quad \forall g \in G \end{aligned} \quad (\text{A.28})$$

现在我们取一组正整数 $Z_n = \{0, 1, 2, \dots, (n-1)\}$ 。这 n 个数组成一个 $\text{mod } n$ 的 n 阶循环加法群，作 G 和 Z_n 的直积集合：

$$G' = G \times Z_n = \{(g, Z_i) : g \in G, Z_i \in Z_n\} \quad (\text{A.29})$$

G' 中元素的个数为 $|G'| = |G||Z_n|$ 。进一步我们对 G' 中元素定义乘法规则：

$$(g_i, z_l)(g_j, z_m) = (g_i g_j, z_l + z_m + z_{i,j}) \quad (\text{A.30})$$

这里 Z 的加法是在 $\text{mod } n$ 的意义下的加法。由(A.30)定义的乘法使得集合 G' 构成一个群。这一点可以很容易由群的定义验证。

G' 有一个子群：

$$\tilde{Z}_n = \{(e, z_l) : z_l \in Z_n\} \quad (\text{A.31})$$

\tilde{Z}_n 中的每一个元素与 G' 中的所有元素对易，所以：

$$\tilde{Z}_n \subset Z(G') \quad (\text{A.32})$$

由此可见 G' 是 G 按照 \tilde{Z}_n 的中心扩张。 \tilde{Z}_n 正好是 G' 到 G 的同态的核，整个集合 \tilde{Z}_n 对应于 G 中的恒元 e 。

现在我们把 G' 中的 $g' = (g, 0)$ 与 G 中的 g 之间建立唯一的对应:

$$g' = (g, 0) \leftrightarrow g, \forall g \in G \quad (\text{A.33})$$

那么我们有如下的对应:

$$g_i g_j = g_k \Rightarrow (g_i, 0)(g_j, 0) = (g_i g_j, z_{i,j}) = (e, z_{i,j})(g_i g_j, 0) \quad (\text{A.34})$$

因为有 $z_{e,g} = 0, \forall g \in G$ 。在定义了对应关系(A.33)后, G' 是 G 的覆盖群。

现在假设 \hat{G}' 是 G' 的线性表示。定义:

$$\hat{G}(g) = \hat{G}'(g') = \hat{G}'((g, 0)) \quad (\text{A.35})$$

我们可以知道 $\hat{G}(g)$ 是群 G 的投影表示。现在 $h'_{i,j} = (e, z_{i,j})$ 是 n 阶循环群 Z_n 的元素, 因此有:

$$\hat{G}'(h'_{i,j}) = \hat{G}'((e, z_{i,j})) = \exp(2\pi i p z_{i,j}/n) \hat{I} \quad (p = 1, 2 \cdots, n) \quad (\text{A.36})$$

不同的 p 对应于不同的不可约表示, 在所有这些不可约表示中, 仅当 $p = 1$ 时, 才可以由上式得到正确的因子 $\omega(i, j) = \exp(\frac{2\pi i z_{i,j}}{n})$ 。因此在 G' 的所有不可约线性表示中, 满足 $p = 1$ 的不可约表示, 才是 G 的投影表示。

由此可见, 求 G 的因子为 $\omega(i, j) = \exp(\frac{2\pi i z_{i,j}}{n})$ 的不可约投影表示的问题, 归结为求 G 的中心扩张 G' 的 $p = 1$ 的不可约线性表示的问题。因为由于:

$$\begin{aligned} (g_i, 0)(e, z_i) &= (g_i, z_i) \\ \Rightarrow \hat{G}'((g_i, z_i)) &= \hat{G}'((g_i, 0)(e, z_i)) \\ &= \hat{G}'((g_i, 0))\hat{G}'((e, z_i)) = \hat{G}(g_i)\hat{G}'((e, z_i)) \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

由于 $\hat{G}'((e, z_i))$ 是常数矩阵。因此可以立即知道, 若 \hat{G}' 是不可约的, 那么 \hat{G} 也是不可约的; 若 G' 是可约的, \hat{G} 也一定是可约的。反之亦然。并且由一切可能的 $p = 1$ 的不可约的线性表示 \hat{G}' 构成了 G 的具有一定的因子的所有的不可约表示。因为若存在一个不可约的投影表示 \hat{G} 不包含在内, 那么可以把它带入(A.37)式, 构造一个不可约的线性表示 \hat{G}_1 , 它已经包含在原先的所有 G 的不可约表示中了。反过来构造的 \hat{G} 也就不可能是新的不可约投影表示了。至此我们完成了如何寻找因子因子的所有的不可约投影表示的问题。

假设我们有群 G 的投影表示 $u_1(g)$,因子是 $\omega_1(g_1, g_2)$,在规范变换的意义下将这类表示记作 w_1 类, 同样有另外的一个投影表示记作 $u_2(g)$,因子是 $\omega_2(g_1, g_2)$, 记作 w_2 类。显然, $u_1(g) \otimes u_2(g)$ 也是群 G 的投影表示, 它的因子组是 $\omega_1(g_1, g_2)\omega_2(g_1, g_2)$ 。对应的投影表示类可以记作 $\omega_1 + \omega_2$ 。在这样的规则下, 投影表示的因子构成一个阿贝尔群。一般叫做群 G 的上同调群, 记作 $H^2(G, C)$ 。这个群中的恒元 e 就是群 G 的线性表示够成的类。

下面举几个简单的例子[18]:

1. 循环群 Z_n 没有非平庸的投影表示。即 $G = Z_n, H^2(G, C)$ 只包含恒元 e 。
2. 一个简单的有非平庸表示的群是阿贝尔的群 $D_2 = Z_2 \times Z_2$ 。对于其中的四个元素 $(0/1, 0/1)$, 考虑泡利矩阵, $g(0, 0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$, $g(0, 1) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $g(1, 0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$, $g(1, 1) = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ 。我们可以验证这些矩阵构成了 D_2 的一个投影表示。
3. 当 $G = SO(3), H^2(G, C) = Z_2$ 。这两个元素分别对应于 $SO(3)$ 群的整数和半整数表示。

更多上同调群的例子可以参考文献[21]。

参考文献

- [1] L. D. Landau. Theory of phase transformations. *i. Phys. Z. Sowjetunion*, 11:26, 1937.
- [2] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Statistical Physics, Course of Theoretical Physics Vol. 5*. Pergamon, London, 1958.
- [3] L. D. Landau V. L. Ginzburg. On the theory of superconductivity. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 20:1064, 1950.
- [4] P. W. Anderson. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state. *Phys. Rev.*, 86:694–701, Jun 1952.
- [5] L.D. Faddeev and L.A. Takhtajan. What is the spin of a spin wave? *Physics Letters A*, 85(6-7):375 – 377, 1981.
- [6] Chanchal K. Majumdar and Dipan K. Ghosh. On next-nearest-neighbor interaction in linear chain. i. *Journal of Mathematical Physics*, 10(8):1388–1398, 1969.
- [7] Elliott Lieb and Daniel Mattis. Ordering energy levels of interacting spin systems. *Journal of Mathematical Physics*, 3(4):749–751, 1962.
- [8] Elliott Lieb, Theodore Schultz, and Daniel Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Annals of Physics*, 16(3):407 – 466, 1961.
- [9] Ian Affleck and ElliottH. Lieb. A proof of part of haldane’s conjecture on spin chains. *Letters in Mathematical Physics*, 12(1):57–69, 1986.
- [10] Hal Tasaki. Quantum liquid in antiferromagnetic chains: A stochastic geometric approach to the haldane gap. *Phys. Rev. Lett.*, 66:798–801, Feb 1991.

- [11] Marcel den Nijs and Koos Rommelse. Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, 40:4709–4734, Sep 1989.
- [12] Y. Hatsugai and M. Kohmoto. Numerical study of the hidden antiferromagnetic order in the haldane phase. *Phys. Rev. B*, 44:11789–11794, Dec 1991.
- [13] Kazuo Hida. Crossover between the haldane-gap phase and the dimer phase in the spin-1/2 alternating heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 45:2207–2212, Feb 1992.
- [14] F. C. Alcaraz and Y. Hatsugai. String correlation functions in the anisotropic spin-1 heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 46:13914–13918, Dec 1992.
- [15] Tom Kennedy and Hal Tasaki. Hidden $z_2 \times z_2$ symmetry breaking in haldane-gap antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 45:304–307, Jan 1992.
- [16] Tom Kennedy and Hal Tasaki. Hidden symmetry breaking and the haldane phase ins=1 quantum spin chains. *Communications in Mathematical Physics*, 147(3):431–484, 1992.
- [17] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, and Xiao-Gang Wen. Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order. *Phys. Rev. B*, 82:155138, Oct 2010.
- [18] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, and Xiao-Gang Wen. Classification of gapped symmetric phases in one-dimensional spin systems. *Phys. Rev. B*, 83:035107, Jan 2011.
- [19] Zheng-Xin Liu, Xie Chen, and Xiao-Gang Wen. Symmetry-protected topological orders of one-dimensional spin systems with $D_2 + t$ symmetry. *Phys. Rev. B*, 84:195145, Nov 2011.

-
- [20] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, and Xiao-Gang Wen. Complete classification of one-dimensional gapped quantum phases in interacting spin systems. *Phys. Rev. B*, 84:235128, Dec 2011.
- [21] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, Zheng-Xin Liu, and Xiao-Gang Wen. Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group. *Phys. Rev. B*, 87:155114, Apr 2013.
- [22] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, Nov 1992.
- [23] Steven R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, 48:10345–10356, Oct 1993.
- [24] Kenneth G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47:773–840, Oct 1975.
- [25] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson. Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. i. static properties for the symmetric case. *Phys. Rev. B*, 21:1003–1043, Feb 1980.
- [26] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson. Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. ii. static properties for the asymmetric case. *Phys. Rev. B*, 21:1044–1083, Feb 1980.
- [27] Patrick A. Lee. Real-space scaling studies of localization. *Phys. Rev. Lett.*, 42:1492–1494, May 1979.
- [28] Patrick A. Lee and Daniel S. Fisher. Anderson localization in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 47:882–885, Sep 1981.
- [29] S. T. Chui and J. W. Bray. Computer renormalization-group technique applied to the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 18:2426–2430, Sep 1978.
- [30] J. W. Bray and S. T. Chui. Computer renormalization-group calculations of $2k_F$ and $4k_F$ correlation functions of the one-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B*, 19:4876–4882, May 1979.

- [31] Jorge E. Hirsch. Renormalization-group study of the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 22:5259–5266, Dec 1980.
- [32] C Dasgupta and P Pfeuty. Real-space renormalisation-group study of the one-dimensional hubbard model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 14(5):717, 1981.
- [33] Tao Xiang and G.A. Gehring. Real space renormalisation group study of heisenberg spin chain. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 104-107, Part 2(0):861 – 862, 1992. Proceedings of the International Conference on Magnetism, Part II.
- [34] Steven R. White and David A. Huse. Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic $S = 1$ heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 48:3844–3852, Aug 1993.
- [35] Stefan Rommer and Stellan Ostlund. Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 55:2164–2181, Jan 1997.
- [36] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. *Colloquium* : Area laws for the entanglement entropy. *Rev. Mod. Phys.*, 82:277–306, Feb 2010.
- [37] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R.F. Werner. Finitely correlated states on quantum spin chains. *Communications in Mathematical Physics*, 144(3):443–490, 1992.
- [38] Bruno Nachtergaele. The spectral gap for some spin chains with discrete symmetry breaking. *Communications in Mathematical Physics*, 175(3):565–606, 1996.
- [39] C. Fernández-González, N. Schuch, M. M. Wolf, J. I. Cirac, and D. Pérez-García. Frustration free gapless Hamiltonians for Matrix Product States. *ArXiv e-prints*, October 2012.

-
- [40] F. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac. Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: A quantum information perspective. *Phys. Rev. Lett.*, 93:227205, Nov 2004.
- [41] Peter Pippian, Steven R. White, and Hans Gerd Evertz. Efficient matrix-product state method for periodic boundary conditions. *Phys. Rev. B*, 81:081103, Feb 2010.
- [42] B. Pirvu, F. Verstraete, and G. Vidal. Exploiting translational invariance in matrix product state simulations of spin chains with periodic boundary conditions. *Phys. Rev. B*, 83:125104, Mar 2011.
- [43] A. Weichselbaum, F. Verstraete, U. Schollwock, J. I. Cirac, and Jan von Delft. Variational matrix-product-state approach to quantum impurity models. *Phys. Rev. B*, 80:165117, Oct 2009.
- [44] S. Iblisdir, R. Orus, and J. I. Latorre. Matrix product states algorithms and continuous systems. *Phys. Rev. B*, 75:104305, Mar 2007.
- [45] Tobias J. Osborne, Jens Eisert, and Frank Verstraete. Holographic quantum states. *Phys. Rev. Lett.*, 105:260401, Dec 2010.
- [46] F. Verstraete and J. I. Cirac. Continuous matrix product states for quantum fields. *Phys. Rev. Lett.*, 104:190405, May 2010.
- [47] Juan Jose Garcia-Ripoll. Time evolution of matrix product states. *New Journal of Physics*, 8(12):305, 2006.
- [48] Michael Zwolak and Guifre Vidal. Mixed-state dynamics in one-dimensional quantum lattice systems: A time-dependent superoperator renormalization algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 93:207205, Nov 2004.
- [49] M. C. Banuls, R. Orus, J. I. Latorre, A. Perez, and P. Ruiz-Femenia. Simulation of many-qubit quantum computation with matrix product states. *Phys. Rev. A*, 73:022344, Feb 2006.

- [50] F. Verstraete, J. J. Garcia-Ripoll, and J. I. Cirac. Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93:207204, Nov 2004.
- [51] G. Vidal. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 98:070201, Feb 2007.
- [52] R. Orus and G. Vidal. Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution. *Phys. Rev. B*, 78:155117, Oct 2008.
- [53] P. W. ANDERSON. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, 235(4793):1196–1198, 1987.
- [54] F. C. Zhang and T. M. Rice. Effective hamiltonian for the superconducting Cu oxides. *Phys. Rev. B*, 37:3759–3761, Mar 1988.
- [55] Shoudan Liang and Hanbin Pang. Approximate diagonalization using the density matrix renormalization-group method: A two-dimensional-systems perspective. *Phys. Rev. B*, 49:9214–9217, Apr 1994.
- [56] Tao Xiang, Jizhong Lou, and Zhaobin Su. Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 64:104414, Aug 2001.
- [57] Steven R. White and D. J. Scalapino. Ground-state properties of the doped three-leg t - j ladder. *Phys. Rev. B*, 57:3031–3037, Feb 1998.
- [58] Steven R. White and D. J. Scalapino. Ground states of the doped four-leg t - j ladder. *Phys. Rev. B*, 55:R14701–R14704, Jun 1997.
- [59] Steven R. White and D. J. Scalapino. Hole and pair structures in the t - j model. *Phys. Rev. B*, 55:6504–6517, Mar 1997.
- [60] S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino. Resonating valence bond theory of coupled heisenberg chains. *Phys. Rev. Lett.*, 73:886–889, Aug 1994.

-
- [61] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino. Correlations in a two-chain hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 73:882–885, Aug 1994.
- [62] Steven R. White and Ian Affleck. Density matrix renormalization group analysis of the nagaoka polaron in the two-dimensional $t - j$ model. *Phys. Rev. B*, 64:024411, Jun 2001.
- [63] Steven R. White and D. J. Scalapino. Stripes on a 6-leg hubbard ladder. *Phys. Rev. Lett.*, 91:136403, Sep 2003.
- [64] Steven R. White and D. J. Scalapino. Pairing on striped $t - t' - j$ lattices. *Phys. Rev. B*, 79:220504, Jun 2009.
- [65] F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Advances in Physics*, 57(2):143–224, 2008.
- [66] J. Ignacio Cirac Michael M. Wolf David Perez-Garcia, Frank Verstraete. Peps as unique ground states of local hamiltonians. *Quantum Inf. Comput*, 8:0650, 2008.
- [67] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Accurate determination of tensor network state of quantum lattice models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:090603, Aug 2008.
- [68] Philippe Corboz, Román Orús, Bela Bauer, and Guifré Vidal. Simulation of strongly correlated fermions in two spatial dimensions with fermionic projected entangled-pair states. *Phys. Rev. B*, 81:165104, Apr 2010.
- [69] Norbert Schuch, Ignacio Cirac, and David Perez-Garcia. Peps as ground states: Degeneracy and topology. *Annals of Physics*, 325(10):2153 – 2192, 2010.
- [70] Piotr Czarnik, Lukasz Cincio, and Jacek Dziarmaga. Projected entangled pair states at finite temperature: Imaginary time evolution with ancillas. *Phys. Rev. B*, 86:245101, Dec 2012.

- [71] J. Zak. Magnetic translation group. *Phys. Rev.*, 134:A1602–A1606, Jun 1964.
- [72] Tai Tsun Wu and Chen Ning Yang. Dirac monopole without strings: Monopole harmonics. *Nuclear Physics B*, 107(3):365 – 380, 1976.
- [73] Tai Tsun Wu and Chen Ning Yang. Some properties of monopole harmonics. *Phys. Rev. D*, 16:1018–1021, Aug 1977.
- [74] F. D. M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1153–1156, Apr 1983.
- [75] F.D.M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-d heisenberg antiferromagnet: Identification with the $o(3)$ nonlinear sigma model. *Physics Letters A*, 93(9):464 – 468, 1983.
- [76] Shaojin Qin, Tai-Kai Ng, and Zhao-Bin Su. Edge states in open antiferromagnetic heisenberg chains. *Phys. Rev. B*, 52:12844–12848, Nov 1995.
- [77] U. Schollwock and T. Jolicœur. Haldane gap and hidden order in the $s = 2$ antiferromagnetic quantum spin chain. *EPL (Europhysics Letters)*, 30(8):493, 1995.
- [78] Ulrich Schollwöck, Olivier Golinelli, and Thierry Jolicœur. $S = 2$ antiferromagnetic quantum spin chain. *Phys. Rev. B*, 54:4038–4051, Aug 1996.
- [79] Shoji Yamamoto. Spin correlations and haldane gap in the $s = 2$ antiferromagnetic heisenberg chain. *Physics Letters A*, 213(1-2):102 – 106, 1996.
- [80] Christoph Holzhey, Finn Larsen, and Frank Wilczek. Geometric and renormalized entropy in conformal field theory. *Nuclear Physics B*, 424(3):443 – 467, 1994.
- [81] V. E. Korepin. Universality of entropy scaling in one dimensional gapless models. *Phys. Rev. Lett.*, 92:096402, Mar 2004.

- [82] Pasquale Calabrese and John Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004(06):P06002, 2004.
- [83] Sayipjamal Dulat and Katrin Wendland. Crystallographic orbifolds: towards a classification of unitary conformal field theories with central charge $c = 2$. *Journal of High Energy Physics*, 2000(06):012, 2000.
- [84] Adrian Feiguin, Simon Trebst, Andreas W. W. Ludwig, Matthias Troyer, Alexei Kitaev, Zhenghan Wang, and Michael H. Freedman. Interacting anyons in topological quantum liquids: The golden chain. *Phys. Rev. Lett.*, 98:160409, Apr 2007.
- [85] C. K. Lai. Lattice gas with nearest-neighbor interaction in one dimension with arbitrary statistics. *Journal of Mathematical Physics*, 15(10):1675–1676, 1974.
- [86] Bill Sutherland. Model for a multicomponent quantum system. *Phys. Rev. B*, 12:3795–3805, Nov 1975.
- [87] Ian Affleck. Exact critical exponents for quantum spin chains, non-linear σ models at $\theta = \pi$ and the quantum hall effect. *Nuclear Physics B*, 265(3):409 – 447, 1986.
- [88] Ian Affleck. Critical behaviour of $su(n)$ quantum chains and topological non-linear σ -models. *Nuclear Physics B*, 305(4):582 – 596, 1988.
- [89] M. Aguado, M. Asorey, E. Ercolessi, F. Ortolani, and S. Pasini. Density-matrix renormalization-group simulation of the $SU(3)$ antiferromagnetic heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 79:012408, Jan 2009.
- [90] Marc Daniel Schulz, Sebastien Dusuel, Roman Orus, Julien Vidal, and Kai Phillip Schmidt. Breakdown of a perturbed z_n topological phase. *New Journal of Physics*, 14(2):025005, 2012.
- [91] Xiao-Gang Wen. Quantum orders in an exact soluble model. *Phys. Rev. Lett.*, 90:016803, Jan 2003.

- [92] A.Yu. Kitaev. Fault-tolerant quantum computation by anyons. *Annals of Physics*, 303(1):2 – 30, 2003.
- [93] T. Xiang. Density-matrix renormalization-group method in momentum space. *Phys. Rev. B*, 53:R10445–R10448, Apr 1996.
- [94] Steven R. White and Richard L. Martin. Ab initio quantum chemistry using the density matrix renormalization group. *The Journal of Chemical Physics*, 110(9):4127–4130, 1999.
- [95] Gerrit Moritz, Alexander Wolf, and Markus Reiher. Relativistic dmrg calculations on the curve crossing of cesium hydride. *The Journal of Chemical Physics*, 123(18):184105, 2005.
- [96] Garnet Kin-Lic Chan and Troy Van Voorhis. Density-matrix renormalization-group algorithms with nonorthogonal orbitals and non-hermitian operators, and applications to polyenes. *The Journal of Chemical Physics*, 122(20):204101, 2005.
- [97] Konrad H. Marti, Irina Malkin Ondik, Gerrit Moritz, and Markus Reiher. Density matrix renormalization group calculations on relative energies of transition metal complexes and clusters. *The Journal of Chemical Physics*, 128(1):014104, 2008.
- [98] Yuki Kurashige and Takeshi Yanai. High-performance ab initio density matrix renormalization group method: Applicability to large-scale multireference problems for metal compounds. *The Journal of Chemical Physics*, 130(23):234114, 2009.
- [99] B. Thakur, S. Pittel, and N. Sandulescu. Density matrix renormalization group study of ^{48}Cr and ^{56}Ni . *Phys. Rev. C*, 78:041303, Oct 2008.
- [100] S. Daul, I. Ciofini, C. Daul, and Steven R. White. Full-ci quantum chemistry using the density matrix renormalization group. *International Journal of Quantum Chemistry*, 79(6):331–342, 2000.

- [101] Gerrit Moritz, Bernd Artur Hess, and Markus Reiher. Convergence behavior of the density-matrix renormalization group algorithm for optimized orbital orderings. *The Journal of Chemical Physics*, 122(2):024107, 2005.
- [102] Gerrit Moritz and Markus Reiher. Construction of environment states in quantum-chemical density-matrix renormalization group calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 124(3):034103, 2006.
- [103] Jonathan J. Dorando, Johannes Hachmann, and Garnet Kin-Lic Chan. Targeted excited state algorithms. *The Journal of Chemical Physics*, 127(8):084109, 2007.
- [104] Debashree Ghosh, Johannes Hachmann, Takeshi Yanai, and Garnet Kin-Lic Chan. Orbital optimization in the density matrix renormalization group, with applications to polyenes and beta-carotene. *The Journal of Chemical Physics*, 128(14):144117, 2008.
- [105] Dominika Zgid and Marcel Nooijen. The density matrix renormalization group self-consistent field method: Orbital optimization with the density matrix renormalization group method in the active space. *The Journal of Chemical Physics*, 128(14):144116, 2008.
- [106] Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal. Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network. *Phys. Rev. A*, 74:022320, Aug 2006.
- [107] V. Murg, F. Verstraete, Ö. Legeza, and R. M. Noack. Simulating strongly correlated quantum systems with tree tensor networks. *Phys. Rev. B*, 82:205105, Nov 2010.
- [108] H.-G. Luo, M.-P. Qin, and T. Xiang. Optimizing hartree-fock orbitals by the density-matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 81:235129, Jun 2010.
- [109] Garnet Kin-Lic Chan and Martin Head-Gordon. Exact solution (within a triple-zeta, double polarization basis set) of the electronic schrodinger

- equation for water. *The Journal of Chemical Physics*, 118(19):8551–8554, 2003.
- [110] Felix Bloch. About the Quantum mechanics of Electrons in Crystal lattices. *Zeitschrift fur Physik*, 52(7-8):555–600, JUL 1929.
- [111] E. Brown. Bloch electrons in a uniform magnetic field. *Phys. Rev.*, 133:A1038–A1044, Feb 1964.
- [112] J. Zak. Magnetic translation group. ii. irreducible representations. *Phys. Rev.*, 134:A1607–A1611, Jun 1964.
- [113] A. Wal. The structure of magnetic translation group for a finite system. *Physica B-condensed matter*, 404(8-11):1040–1044, MAY 1 2009.
- [114] MH Boon. Representations of invariance group for a bloch electron in a magnetic-field. *Journal of Mathematical Physics*, 13(8):1268–1285, 1972.
- [115] E Brown and LV Meisel. Case for group-theory as applied to bloch electrons in a magnetic-field. *Physical Review B*, 13(12):5271–5283, 1976.
- [116] VA Geyler and IY Popov. Group-theoretical analysis of lattice hamiltonians with a magnetic-field. *PHYSICS LETTERS A*, 201(4):359–364, MAY 29 1995.
- [117] W Florek. Pairs of Bloch electrons and magnetic translation groups. *PHYSICAL REVIEW B*, 55(3):1449–1453, JAN 15 1997.
- [118] Andrzej Wal. Multielectron irreducible representations of the magnetic translation group. *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics*, 246(5):1024–1028, MAY 2009. 32nd International Conference on Theoretical Physics, Ustron, POLAND, SEP 05-10, 2008.
- [119] N. Ashby and S. C. Miller. Electric and magnetic translation group. *Phys. Rev.*, 139:A428–A436, Jul 1965.
- [120] Jainendra K . Jain. *Composite Fermions*. Cambridge University Press, 2007.

-
- [121] F. D. M. Haldane. Fractional quantization of the hall effect: A hierarchy of incompressible quantum fluid states. *Phys. Rev. Lett.*, 51:605–608, Aug 1983.
- [122] F. D. M. Haldane and E. H. Rezayi. Finite-size studies of the incompressible state of the fractionally quantized hall effect and its excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 54:237–240, Jan 1985.
- [123] Shogo Tanimura. Magnetic translation groups in an n-dimensional torus and their representations. *Journal of Mathematical Physics*, 43(12):5926–5948, 2002.
- [124] T. Xiang and G. A. Gehring. Numerical solution of $S = 1$ antiferromagnetic spin chains using a truncated basis expansion. *Phys. Rev. B*, 48:303–310, Jul 1993.
- [125] S. R. White and R. M. Noack. Real-space quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 68:3487–3490, Jun 1992.
- [126] M. Boman and R. J. Bursill. Identification of excitons in conjugated polymers: A density-matrix renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, 57:15167–15176, Jun 1998.
- [127] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. *Rev. Mod. Phys.*, 77:259–315, Apr 2005.
- [128] Karen A. Hallberg. New trends in density matrix renormalization. *Advances in Physics*, 55(5-6):477–526, 2006.
- [129] Steven R. White. Density matrix renormalization group algorithms with a single center site. *Phys. Rev. B*, 72:180403, Nov 2005.
- [130] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326(1):96 – 192, 2011.

-
- [131] Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. A two-dimensional isotropic quantum antiferromagnet with unique disordered ground state. *Journal of Statistical Physics*, 53(1-2):383–415, 1988.
- [132] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 59:799–802, Aug 1987.
- [133] M.M. Wolf, J.I. Cirac, D. Perez-Garcia, F. Verstraete. Matrix product state representations. *Quantum Inf. Comput.*, 7:401, 2007.
- [134] M B Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2007(08):P08024, 2007.
- [135] M. B. Hastings. Entropy and entanglement in quantum ground states. *Phys. Rev. B*, 76:035114, Jul 2007.
- [136] F. Verstraete and J. I. Cirac. Matrix product states represent ground states faithfully. *Phys. Rev. B*, 73:094423, Mar 2006.
- [137] Jacques des Cloizeaux and J. J. Pearson. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain. *Phys. Rev.*, 128:2131–2135, Dec 1962.
- [138] G. Vidal. Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated. *Phys. Rev. Lett.*, 101:110501, Sep 2008.
- [139] Robert N. C. Pfeifer, Glen Evenbly, and Guifré Vidal. Entanglement renormalization, scale invariance, and quantum criticality. *Phys. Rev. A*, 79:040301, Apr 2009.
- [140] G. Evenbly and G. Vidal. Algorithms for entanglement renormalization. *Phys. Rev. B*, 79:144108, Apr 2009.
- [141] G. Evenbly and G. Vidal. Frustrated antiferromagnets with entanglement renormalization: Ground state of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg model on a kagome lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 104:187203, May 2010.

-
- [142] W Marshall. ANTIFERROMAGNETISM. *Proceedings Of The Royal Society Of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, 232(1188):48–68, 1955.
- [143] W MARSHALL. The Spin-Wave Theory of Antiferromagnetism. *Proceedings Of The Royal Society Of London Series A-Mathematical And Physical Sciences*, 232(1188):69–77, 1955.
- [144] M. B. Hastings. Lieb-schultz-mattis in higher dimensions. *Phys. Rev. B*, 69:104431, Mar 2004.
- [145] Taku Matsui. The split property and the symmetry breaking of the quantum spin chain. *Communications in Mathematical Physics*, 218(2):393–416, 2001.
- [146] T. Hirano, H. Katsura, and Y. Hatsugai. Degeneracy and consistency condition for berry phases: Gap closing under a local gauge twist. *Phys. Rev. B*, 78:054431, Aug 2008.
- [147] Daniel P. Arovas, Assa Auerbach, and F. D. M. Haldane. Extended heisenberg models of antiferromagnetism: Analogies to the fractional quantum hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 60:531–534, Feb 1988.
- [148] Stefan Knabe. Energy gaps and elementary excitations for certain vbs-quantum antiferromagnets. *Journal of Statistical Physics*, 52(3-4):627–638, 1988.
- [149] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. F. Werner. Exact antiferromagnetic ground states of quantum spin chains. *EPL (Europhysics Letters)*, 10(7):633, 1989.
- [150] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R.F. Werner. Finitely correlated states on quantum spin chains. *Communications in Mathematical Physics*, 144(3):443–490, 1992.
- [151] J. B. Parkinson and J. C. Bonner. Spin chains in a field: Crossover from quantum to classical behavior. *Phys. Rev. B*, 32:4703–4724, Oct 1985.

- [152] Minoru Takahashi. Monte carlo calculation of elementary excitation of spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2313–2316, May 1989.
- [153] Shaolong Ma, Collin Broholm, Daniel H. Reich, B. J. Sternlieb, and R. W. Erwin. Dominance of long-lived excitations in the antiferromagnetic spin-1 chain nennp. *Phys. Rev. Lett.*, 69:3571–3574, Dec 1992.
- [154] Hong-Hao Tu, Guang-Ming Zhang, and Tao Xiang. Maximized string order parameters in the valence bond solid states of quantum integer spin chains. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 42(28):285202, 2009.
- [155] P. Jordan and E. Wigner. About the Pauli’s equivalence prohibited. *ZEITSCHRIFT FUR PHYSIK*, 47(9-10):631–651, SEP 1928.
- [156] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Springer, 2000.
- [157] Matthew S. Block, Ryan V. Mishmash, Ribhu K. Kaul, D. N. Sheng, Olexei I. Motrunich, and Matthew P. A. Fisher. Exotic gapless mott insulators of bosons on multileg ladders. *Phys. Rev. Lett.*, 106:046402, Jan 2011.
- [158] Ryan V. Mishmash, Matthew S. Block, Ribhu K. Kaul, D. N. Sheng, Olexei I. Motrunich, and Matthew P. A. Fisher. Bose metals and insulators on multileg ladders with ring exchange. *Phys. Rev. B*, 84:245127, Dec 2011.
- [159] Pasquale Calabrese and Alexandre Lefevre. Entanglement spectrum in one-dimensional systems. *Phys. Rev. A*, 78:032329, Sep 2008.
- [160] 徐光宪, 黎乐民, 王德民. 量子化学中册 (第二版). 科学出版社, 2009.
- [161] W. A. Al-Saidi, Shiwei Zhang, and Henry Krakauer. Auxiliary-field quantum monte carlo calculations of molecular systems with a gaussian basis. *The Journal of Chemical Physics*, 124(22):224101, 2006.
- [162] 马中骥. 物理学中的群论 (第二版). 科学出版社, 2006.
- [163] 陶瑞宝. 物理学中的群论 (*Group Theory in Physics*). 高等教育出版社, 2011.

发表文章目录

- [1] **M. P. Qin**, J. M. Leinaas, S. Ryu, E. Ardonne, T. Xiang, D.-H. Lee
The Quantum Torus Chain
Phys. Rev. B **86**, 134430 (2012), editor's suggestion
- [2] Z. Y. Xie, J. Chen, **M. P. Qin**, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang
Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition
Phys. Rev. B **86**, 045139 (2012).
- [3] H. H. Zhao, Cenke Xu, Q. N. Chen, Z. C. Wei, **M.P.Qin**, G. M. Zhang, and T. Xiang
Plaquette order and deconfined quantum critical point in the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on the honeycomb lattice
Phys. Rev. B **85**, 134416 (2012).
- [4] Li-Ping Yang, Wen-Hu Xu, **Ming-Pu Qin**, and Tao Xiang
Fractality of Hofstadter Butterfly in Specific Heat Oscillation
J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 044605 (2012)
- [5] Q. N. Chen, **M.P.Qin**, J. Chen, H. H. Zhao, B. Normand and T. Xiang
Partial Order and Finite-Temperature Phase Transitions in Potts Models on Irregular Lattices
Phys.Rev. Lett **107**, 165701 (2011).
- [6] J. W. Cai, Q. N. Chen, H. H. Zhao, Z. Y. Xie, **M. P.Qin**, Z. C. Wei, and T. Xiang

- Translation invariant tensor product states in a finite lattice system*
Chin. Phys. B **20**, 117501(2011)
- [7] H.-G. Luo, **M.-P. Qin**, T. Xiang
Optimizing Hartree-Fock orbitals by the density-matrix renormalization group
Phys. Rev. B **81**, 235129(2010)
- [8] L P Yang, Y J Wang, W H Xu, **M P Qin** and T Xiang
A quantum transfer matrix method for one-dimensional disordered electronic systems
J. Phys.: Condens. Matter **21**, 145407(2009)
- [9] W. H. Xu, L. P. Yang, **M. P. Qin**, and T. Xiang
Probing the Hofstadter butterfly with the quantum oscillation of magnetization
Phys. Rev. B **78**, 241102(R)(2008), rapid communication

简 历

基本情况

秦明普，男，湖北省监利县人，1987年6月出生，已婚，中国科学院物理研究所在读博士研究生。

教育状况

2004年9月至2008年7月，北京航空航天大学物理系，本科，专业：应用物理。

2008年9月至2013年7月，中国科学院物理研究所。硕博连读研究生，专业：理论物理。

奖励

2009-2010：中国科学院研究生院三好学生

2010：物理所所长奖学金表彰奖

2010-2011：中国科学院研究生院三好学生

2012：物理所所长奖学金优秀奖

工作经历

无。

研究兴趣

强关联体系，密度矩阵重正化群，张量网络算法，量子蒙特卡洛

联系方式

通讯地址：中国科学院物理研究所，北京中关村南三街8号，100190

E-mail: qinmingpu@gmail.com

致 谢

首先要感谢我的导师向涛研究员。还记得当初我进入物理所时遇到了阻力，是在向老师的帮助下，我才有机会进入物理所学习。也记得向老师曾亲自指导我修改程序，教我画图。向老师开阔的视野，扎实的基础，以及敏锐的物理直觉，让我学习到了很多。同时，向老师严谨的治学态度将让我终身受益。

感谢罗洪刚教授对我的指导。罗老师为人和蔼可亲，对于各种问题都能耐心的解答，给了我很大的帮助。

感谢李东海教授，Jon. Magne. Leinaas, Shinsei. Ryu, Eddy. Ardonne和Bruce Normand, 在和他们的合作中，我受益匪浅。

也感谢覃绍京老师在我遇到问题时的耐心解答。

感谢已经毕业的杨丽平师姐，徐文虎师兄，陈巧妮师姐，郭成师兄。感谢他们在我刚进入组里时对我的照顾。

感谢赵汇海，陈靖，谢志远，魏忠超，王顺，孔鑫，黄杰等师兄师弟。和他们的讨论让我受益良多。

感谢理论室篮球爱好者，张健敏，吴闲新，刘洋，王义林等。有了他们，我的业余生活不再枯燥。

我还要感谢所有在我求学路上帮助过我的人。特别是潘见智先生。如果没有他在我大学期间对我的资助，我不可能还有在科研道路上继续下去的勇气。也感谢他对我人生方向的指导。

我要感谢我的父母，岳父岳母以及所有的亲人。感谢他们给我无尽的关怀。没能有太多的时候陪伴在他们的身旁，我感到很遗憾。在我遇到困难的时候，家总是我最温暖的依靠，能给我无穷的力量。也感谢我的弟弟，在我人生低谷的时候，是他让我重新拾起希望。

最后，感谢我的爱人彭瑾。感谢她的一路陪伴。

.....