Точно-решаемые модели
статистической механики *(2018)*

Пугай Я.П. ИТФ РАН

Свободные фермионы. Преобразование Jordan-Wigner

7. Свободные фермионы

Возвратимся к диагонализации обычной ряд в ряд трансфер матрицы. Мы попытаемся представить трансфер матрицу в терминах матриц Паули, затем применим преобразование Йордана-Вигнера и покажем, что результируюший Гамильтониан квадратичен по фермионам. Диагонализация фермионного выражения выполняется с помощью преобразования Боголюбова (вращения).

Рассмотрим алгебру n фермионов $\{\psi_1, \ldots, \psi_n\}$, удовлетворяющих каноническим антикоммутационным соотношениям вида [1]

$$\{\psi_j^\dagger, \psi_k\} = \delta_{i,j}\,, \quad \{\psi_j, \psi_k\} = 0, \quad \{\psi_j^\dagger, \psi_k^\dagger\} = 0\,.$$

Важным следствием данных коммутационных соотношений является то, что квадрат каждого такого опера-

[1] Нас будет также интересовать случай бесконечгого n.

тора является 0

$$\psi_j^2 = 0, \quad {\psi_j^\dagger}^2 = 0$$

что свидетельствует о фермионной природе операторов и существенно упрощает многие вычисления. Мы думаем о таких операторах как о матрицах, действуюших на векторах представления старшего веса. Рассмотрим нормированный ваккуумный вектор $|vac\langle$, характеризуемый условиями

$$\begin{aligned} &\psi_j|vac\rangle = 0\,, \quad for\ j = 1, \ldots, n \\ &\langle vac|vac\rangle = 1\,. \end{aligned}$$

Все вектора представления нарождаются действием повышающих операторов $\psi_j^\dagger$ на вакуумный вектор.

В теории представлений свободных фермионов важную роль играет оператор числа частиц. Это сумма операторов вида

$$n_k = \psi_k^\dagger \psi_k$$

Такие операторы являются унитарными, имеет собственные значения $0, 1$ и, в силу их взаимной коммутации, допускают общие собственные вектора. Базис в пространстве представлений фермионной алгебры задается векторами вида

$$|\psi\rangle = \psi_1^{\dagger a_1} \cdots \psi_n^{\dagger a_n} |vac\rangle$$

которые являются собственными векторами оператора $\sum \psi_k^\dagger \psi_k$ с собственным значением $\sum a_k$. Также, заметим, что $a_j \in \{0, 1\}$.

Стандартный Гамильтониан системы свободных фермионов имеет простой вид

$$H_{free} = \sum \epsilon_j \psi_j^\dagger \psi_j \ .$$

Базисные вектора фермионного представления являются сосбтвенными векторами для такого простого гамильтониана.

В общем случае, в точно решаемых задачах мы имеет квадратичный гамильтониан более сложной формы. Чтобы диагонализовать такие гамильтонианы, нужно применить унитарные вращения преобразования базисов.

Например, рассмотрим Гамильтониан вида

$$H = \sum \epsilon_{j,k} \eta_j^\dagger \eta_k \ ,$$

системы свободных фермионов η_k, удовлетворяющих каноническим анти-коммутационным соотношениям. Для эрмитовости наложим условие $\epsilon_{j,k} = \epsilon_{k,j}^*$. Попробуем применить преобразование вида

$$\eta_j = \sum \beta_{j,k} \psi_k \ .$$

Если операторы ψ_j удовлетворяли каноническим коммутационным соотношениям, то легко проверить, что матрица $\{\beta\}$ должна быть унитарной. В случае, который мы рассмотрим ниже, преобразование будет немного сложнее, но по смыслу оно такое же.

Преобразование Йордана-Вигнера

В упражнении 10 к занятию 3, мы записали ряд в ряд трансфер матрицу в терминонах матриц Паули, действующих на тензорном произведении $\mathcal{H} = \otimes_1^n \mathcal{H}_j$, пространств $\mathcal{H}_i$ покрываемых линейными комбинациями векторов

$$\text{spin up} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$
$$\text{spin down} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

В таком тензорном произведении операторы вставки и обращения i-го спина имели вид

$$s_i = 1 \otimes 1 \cdots \otimes \sigma^z \otimes \cdots \otimes 1$$
$$c_i = 1 \otimes 1 \cdots \otimes \sigma^x \otimes \cdots \otimes 1\,.$$

Здесь матрицы σ^z и σ^x действуют только на i-ую компоненту и имеют вид (для полноты, приведем здесь и σ^y)

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Используя эти обозначения, мы можем записать ряд-в-ряд трансфер матрицу модели Изинга на квадратной решетке, как оператор на $\mathcal{H}$. Для упрощения картинки, рассмотрим предел малых L^* или больших L. Тогда трансфер матрица еще более упрощается.

$$T_{\sigma',\sigma} = (2\sinh 2L)^{\frac{n}{2}} \langle \sigma' | \exp(H) | \sigma \rangle,$$

$$H = K\sum \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + L^* \sum \sigma_j^x \,,$$

где $\sinh 2L \sinh 2L^* = 1$ и $L >> 1$. Заметим здесь, что гамильтониан сейчас выглядит как квантовый гамильтониан одномерной модели Изинга в поперечном магнитном поле. Именно, суммирование идет по одному направлению, но суммирование теперь - не по спиновым переменным, а по матрицам Паули, операторам в пространстве спиновых переменных. Соответственно, сами спиновые переменнные теперь - собственные значения операторов σ^z. Вместо вычисления простой суммы по спинам, в данной задаче необходимо вычислять следы по всем матрицам Паули.

Операторы σ_j^z, σ_j^x довольно простые, но если бы мы свели их к свободным фермионам, то задача даигонализации таких трансфер матриц была бы технически еще проще.

Наивная идея - посмотреть на матрицы Паули следующего вида

$$\sigma^+ = \frac{\sigma^x + i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\sigma^- = \frac{\sigma^x - i\sigma_y}{2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

Такие матрицы, вместе с матрицей σ^z удовлетворяют соотношениям группы $su(2)$ и можно было бы попытаться отождествить $\sigma_j^\pm$ с фермионными операторами рождения уничтожения. Более того, выполняются условия нильпотентности $\sigma_j^{\pm 2} = 0$. Однако есть небольшое препятствие. Рассмотрим соотношения для операторов, действующих на разных узлах

$$[\sigma_i^+, \sigma_j^+] = 0, for \quad i \neq j\,.$$

Разница с алгеброй фермионов в том, что здесь стоит коммутатор, а не антикоммутатор. В каком-то смысле, нам нужно из антикоммутируюших фермионов сделать коммутирующие бозоны, подправив статистику. Это осуществляется изящным преобразованием Jordan-Wigner. Определим операторы рождения уничтожения фермионной алгебры как

$$\begin{aligned} C_j &= \left(e^{i\pi\sum_{i<j}\sigma_i^+\sigma_i^-}\right)\sigma_j^-\,, \\ C_j^+ &= \left(e^{-i\pi\sum_{i<j}\sigma_i^+\sigma_i^-}\right)\sigma_j^+\,. \end{aligned}$$

Можно проверить, что данные операторы удовлетворяют каноническим фермионным коммутационным соотношениям. Обратное преобразование имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_j^+ &= \left(e^{i\pi\sum_{i<j}{C_i}^\dagger C_i}\right){C_j}^\dagger\,, \\ \sigma_j^- &= \left(e^{-i\pi\sum_{i<j}{C_i}^\dagger C_i}\right)C_j\,, \\ \sigma_j^z &= 1 - 2{C_j}^\dagger C_j\,. \end{aligned}$$

Равенство здесь понимается в том смысле, что коммутационные соотношения операторов в LHS и в RHS совпадают. После этого можно отождествить вакуумные вектора в соответствуюших предаставлениях, возбуждения, и сделать утверждение о совпадении соответствующих матричных элементов.

Дополнительный шаг, который существенно облегчит нам вычисления состоит в том, чтобы произвести вращение в Гамильтонаине

$$H = K\sum \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + L^* \sum \sigma_j^x$$

сделав замену

$$\sigma^z \longrightarrow -\sigma^x \,, \sigma^x \longrightarrow \sigma^z \,, \sigma^y \longrightarrow \sigma^y$$

После этой замены

$$H = K\sum \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + L^* \sum \sigma_j^z$$

и применения преобразования Йордана-Вигнера получим, что результирующий фермионный Гамильтониан становится квадратичным. Поэтому его диагонализация не представляет проблемы. Результат имеет вид

$$H = \sum_j K(C_{j+1}C_j + C_{j+1}^\dagger C_j + C_j^\dagger C_{j+1} + +C_j^\dagger C_{j+1}^\dagger) + \\ + \sum 2L^* C_j^\dagger C_j - L^* \,.$$

Для того, чтобы свести задачу диагонализации на n узлах к задаче диагонализации на одном узле, сделаем преобразование Фурье

$$\eta_k = \frac{1}{n^{1/2}} e^{-i\pi/4} \sum C_j e^{i\pi jk} \,.$$

В силу периодических граничных условий, можно найти, что фурье компоненты η_k так же удовлетворяют фермионным каноническим коммутационным сооотношениям. Мы игонориуем детали вклада от граничных членов, интересуясь только свободной энергией в термодинамическом пределе. Однако, учет граничных членов может быть сделан аккуратно.

На языке η_k задача диагонализации эффективно факторизуется и сводится к диагонализации на каждом из узлов

$$H_k = 2(L^* - K\cos k)\eta_k^\dagger \eta_k + K\sin k(\eta_{-k}^\dagger \eta_k^\dagger - \eta_{-k}\eta_k) - L^* \,.$$

Чтобы привести данный гамильтониан к канонической диагональной форме, удобно произвести преобразование Боголюбова

$$\begin{aligned}\psi_k &= \cos\phi\ \eta_k - \sin\phi\ \eta_{-k}^\dagger\,,\\ \psi_k^\dagger &= \cos\phi\ \eta_k^\dagger - \sin\phi\ \eta_k\,,\end{aligned}$$

подбирая угол ϕ так, чтобы Гамильтониан привелся к виду

$$H = -\sum \epsilon_k(\psi_k^\dagger \psi_k - 1/2)\,.$$

В базисе возмужденных состояний, порожденных операторами $\psi^\dagger$, энергии ϵ_k определяют собственные значения соответствующих собственных векторов $|\psi\rangle$.