

# Kitaev 模型与拓扑量子相变\*

封晓勇<sup>1</sup> 张广铭<sup>2,†</sup> 向涛<sup>3,‡</sup>

(1 中国科学院理论物理研究所 北京 100080)

(2 清华大学物理系 北京 100084)

(3 中国科学院物理研究所 北京 100080)

**摘要** 文章通过在一种准一维路径上引入自旋算符的约当-维格纳(Jordan-Wigner)变换,证明了 Kitaev 自旋模型完全等价于一个不含任何非物理自由度的自由 Majorana 费米子模型。通过对偶变换,进一步证明了这个系统中存在的量子相变可用非定域的拓扑序参量来描述;并且,这些非定域的拓扑序参量在对偶空间变成成为定域的朗道类型的序参量。文章作者的工作揭示了传统的量子相变和拓扑量子相变的内在关系,扩展了朗道二级相变理论的适用范围。

**关键词** 拓扑量子相变, Kitaev 模型, 约当-维格纳变换, 对偶变换

## Kitaev model and topological quantum phase transitions

FENG Xiao-Yong<sup>1</sup> ZHANG Guang-Ming<sup>2,†</sup> XIANG Tao<sup>3,‡</sup>

(1 Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

(2 Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(3 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract** Applying the Jordan-Wigner transformation to spin-1/2 operators on special quasi-one dimensional paths, we show that the two-dimensional Kitaev model can be exactly mapped to a free Majorana fermion model without any redundant degrees of freedom. Via duality transformation, it can be further shown that the quantum phase transitions of the Kitaev model are described by non-local topological order parameters, which become Landau type local order parameters in the dual space. A closed relationship between conventional and topological quantum phase transitions is revealed, and the validity of conventional Landau phase transition theory with spontaneous symmetry breaking and local order parameters is also extended.

**Keywords** topological quantum phase transitions, Kitaev model, Jordan-Wigner transformation, duality transformation

## 1 引言

在绝对零温下,改变多粒子系统的某一参数,如粒子间的耦合强度、压力或外加磁场强度,可以将系统从一种无序的状态连续变化到一种有序的状态(图 1(a))。由于在临界点附近热力学涨落和量子涨落同等重要,这类相变与仅由温度所引起热力学相变完全不同,被称为量子相变<sup>[1]</sup>,相变的临界点在绝对零度。量子涨落是导致量子相变的根本原因,其来源是量子系统中物理量的非对易性。一个

典型的例子是,零温下受横向磁场作用的一维伊辛(Ising)模型,随着磁场的变化,该模型出现铁磁到顺磁的相变。这类相变,尽管是发生在绝对零度,但依然可以纳入朗道对称破缺的二级相变理论框架之中。该理论的基本要素是在相变的过程中,系统的对称性发生了自发破缺,所对应的状态可以用局域的序参量来刻画。

\* 国家自然科学基金(批准号:10347149,10474051)资助项目  
2007-05-04 收到

† 通讯联系人, Email: gmzhang@tsinghua.edu.cn

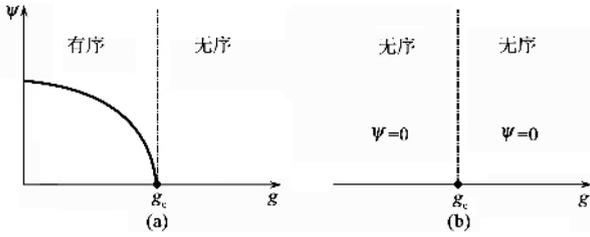


图1 (a) 朗道对称破缺理论刻画的典型量子相变。当  $g < g_c$  时, 对称性发生自发破缺, 存在一个局域序参量描述有序相及其相变过程 (b) 对于拓扑量子相变, 则不存在对称性自发破缺, 也没有可以表征序的局域物理量

但是, 零温下, 一个量子系统可能还存在另外一种量子相变。如图 1(b) 所示, 在这种量子相变过程中, 不存在朗道类型的对称自发破缺, 系统在相变点两边均处于无序相之中, 也不存在描述和区分这两个相的局域序参量。这类相变我们称之为拓扑量子相变。之所以是拓扑性的, 是因为这类相变的行为是由系统基态波函数的整体性质决定的, 不存在定域的序参量, 但可能存在非定域的序参量。在分数量子霍尔效应中, 电导量子平台之间的相变就是一个典型的拓扑量子相变<sup>[2]</sup>。在这个相变过程中, 不同分数量子霍尔态之间对称性并没有发生变化, 但它们的内部结构通常也称之为拓扑序发生了变化, 例如, 基态简并度或有限系统边缘激发态的物理性质。但要强调的是, 拓扑量子相变与拓扑序并不完全是一个概念。后者只是刻画前者的一种方式, 不能完全描述拓扑量子相变的动力学行为。

如何刻画拓扑有序和拓扑量子相变不仅仅是一个重要的理论问题, 同时也与目前非常活跃的量子计算的研究密切相关。量子计算是利用量子态的可叠加性来解决经典计算机无法企及的大量计算问题, 有非常诱人的前景。但量子计算到目前为止还很难实现, 其中一个最大的障碍是量子态退相干性。为了克服这种障碍, 1997 年 Kitaev<sup>[3]</sup> 指出, 可以利用量子系统的整体拓扑性质不受局域扰动影响的特点, 用具有非阿贝尔 (non-Abelian) 统计性质的准粒子激发 (简称为非阿贝尔任意子) 来模拟一个基本的量子比特, 对其进行量子操作, 以实现容错量子计算。

要实现拓扑量子计算, 首先是要从实验上获得非阿贝尔任意子。目前已知的可能具有非阿贝尔任意子的物理系统包括填充因子为  $5/2$  或  $12/5$  的分数量子霍尔态<sup>[4]</sup> 和自旋极化的  $p_x + ip_y$  超导涡旋态<sup>[5]</sup>。最近 Kitaev 构造了一个二维量子自旋模

型<sup>[6]</sup> 并通过微扰计算, 证明这个系统中也存在非阿贝尔任意子。除此之外, 这个模型还有一个更为诱人的地方, 那就是, 它是一个二维可严格求解的量子系统, 其基态相图非常丰富, 不同相之间的相变是拓扑型的。因此, 这个模型是研究拓扑量子相变的一个理想模型。

## 2 Kitaev 模型

如图 2(a) 所示, Kitaev 模型是一个定义在二维六角格子上的自旋相互作用模型, 其哈密顿量为

$$H = J_1 \sum_{x\text{-link}} \sigma_j^x \sigma_k^x + J_2 \sum_{y\text{-link}} \sigma_j^y \sigma_k^y + J_3 \sum_{z\text{-link}} \sigma_j^z \sigma_k^z \quad (1)$$

式中  $\sigma_{x,y,z}$  为泡利算符。在六角格子的每一个键上, 自旋之间的耦合都是伊辛相互作用, 但在不同的方向上, 伊辛相互作用自旋的极化方向不同, 相互之间不对易。

这类涉及高度各向异性自旋极化的耦合模型, 可以利用现有的实验手段, 通过调节作用在冷原子或极化分子上的囚禁激光的强度、频率和极化方向, 使冷原子或极化分子排列成蜂窝状的晶格结构, 并且产生所要求的极化耦合相互作用<sup>[7,8]</sup>。此外, 超导约瑟夫森结组成的二维点阵也可以用来构造这类有效的自旋模型<sup>[9]</sup>。

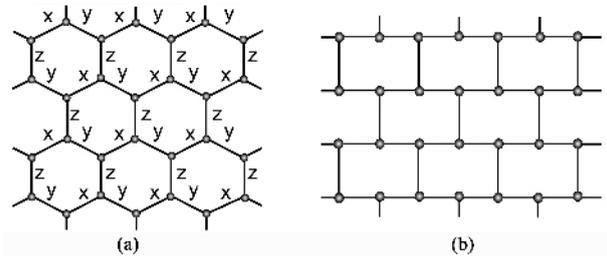


图2 (a) 二维六角格子  $x, y, z$  表示 Kitaev 模型中 Ising 相互作用自旋的极化方向 (b) 为与 (a) 拓扑等价的砖墙格子

为了求解这个模型, Kitaev 提出用四种 Majorana 费米子来表示一个自旋为  $1/2$  的算符:  $\tilde{\sigma}_j^\alpha = ib_j^\alpha c_j$ , 其中  $b_j^{x,y,z}$  和  $c_j$  为 Majorana 费米子算符。平均而言, 每个 Majorana 费米子的自由度为  $\sqrt{2}$ , 四个 Majorana 费米子总的自由度为 4。但每个自旋只有 2 个自由度, 因此, 对每个自旋而言, 这种表示包含了两个非物理的自由度。要去掉非物理的自由度, 必须对这些算符加上约束条件。根据泡利算符满足的等式:  $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$ , 可以证明这些 Majorana 算符的乘积必须满足如下约束条件  $P_j \equiv b_j^x b_j^y b_j^z c_j = 1$ 。  $P_j$  是系统的一组彼此之间对易的守恒量, 并且  $P_j^2 = 1$ 。

原则上,可以先在不受约束的空间中求出 Kitaev 模型的波函数,然后通过投影,得到真实物理空间中的波函数。但在实际的计算中,得到投影后的波函数是很难的,而且与不受约束的四种 Majorana 费米子所生成的空间维数相比,物理的子空间的维数几乎是忽略不计的。因此,绝大多数状态是要被投影掉的,这使得我们很难对系统的一些重要性质做出正确的判断。

那么,能否找到一种没有多余自由度的自旋算符的表示呢?最近,我们经过研究,发现可以通过约当-维格纳变换,在保持这个模型的可积性前提下,做到这一点<sup>[10]</sup>。这种新的表示,极大地简化了这个模型,使得物理图象变得清晰,对全面分析和求解这个模型奠定了基础。为了引入约当-维格纳变换,让我们首先将蜂窝构型做一下变形,使其成为如图 2(b)所示的与其拓扑等价的砖墙构型。在这种新的坐标系中,系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{j+l=\text{偶数}} (J_1 \sigma_{j,l}^x \sigma_{j+1,l}^x + J_2 \sigma_{j-1,l}^y \sigma_{j,l}^y + J_3 \sigma_{j,l}^z \sigma_{j,l+1}^z). \quad (2)$$

下面我们对自旋算符做约当-维格纳变换,将其用费米子表示出来:

$$\begin{aligned} \sigma_n^+ &= 2a_n^\dagger \exp\left[i\pi \sum_{k=1}^n a_k^\dagger a_k\right], \\ \sigma_n^z &= 2a_n^\dagger a_n - 1, \end{aligned} \quad (3)$$

其中对应于格点坐标 $(j, l)$ ,  $n = N(l-1) + j$ ,  $N$ 为水平方向格点的数目。对每一对共轭的费米子算符 $(a, a^\dagger)$ ,可以对应定义出一对 Majorana 费米子算符 $c$ 和 $d$ 。在此,我们做如下定义:当 $j+l$ 为偶数时,

$$c_{j,l} = i(a_{j,l}^\dagger - a_{j,l}), d_{j,l} = a_{j,l}^\dagger + a_{j,l};$$

当 $j+l$ 为奇数时,

$$d_{j,l} = i(a_{j,l}^\dagger - a_{j,l}), c_{j,l} = a_{j,l}^\dagger + a_{j,l}.$$

通过这些定义式,经过简单的计算,我们就可以将 Kitaev 模型简化成如下的 Majorana 费米子模型:

$$H = -i \sum_{j+l=\text{偶数}} (J_1 c_{j,l} c_{j+1,l} - J_2 c_{j-1,l} c_{j,l} + J_3 D_{j,l} c_{j,l} c_{j,l+1}), \quad (4)$$

式中 $D_{j,l} = id_{j,l}d_{j,l+1}$ 与哈密顿量对易,可取 1 或 -1 两个值,是一个好量子数。

对于相互作用二维平方格子上的费米子系统, Lieb 曾严格证明<sup>[11]</sup>,半填充时,基态下每个最小方格的轨道磁通必须为 $\pi$ 。将其推广到 Majorana 费米子系统,可以证明,对于蜂窝格子(每个最小六边形可看作是由两个方格构成),基态下每个六角格子的轨道磁通为 0。对应于 Kitaev 模型公式(4),这就

要求在基态同一行( $l$ 相同)中的 $D_{j,l}$ 必须取相同的值,即都取 1 或都取 -1。由于每一行中 $D_{j,l}$ 取值都有两种可能性,因此系统的基态是高度简并的。

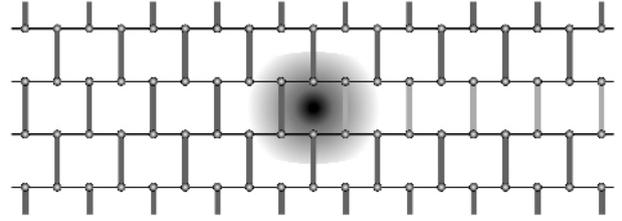


图 3 Kitaev 模型中的拓扑激发态

这些简并的基态之间可以通过拓扑型的准粒子激发联系起来。例如,对某一行一半的 $\{D_{j,l}\}$ 做翻转(如图 3 所示),就可以将左边区域和右边区域分别对应的两种简并基态联系起来。但在它们的结合处,由于 $D_{j,l}$ 的不同,产生了一个 $\pi$ 磁通。这等效于在原来均匀的背景中引入了一个拓扑缺陷——磁通涡旋。这种拓扑缺陷在一定的参数区间,可以产生定域的零能激发态<sup>[12]</sup>,这些零能激发态与 $p_x + ip_y$ 超导涡旋中的 Majorana 费米子激发行为一样,满足非阿贝尔统计。对其进行辫子群操作,原则上就可实现一些基本的量子计算操作,这方面还有许多的问题有待深入研究。

### 3 量子相变及其表征

通过求解费米子化的 Kitaev 模型公式(4),我们发现这个系统的基态相图非常丰富,而且不同相之间的相变是连续的。但是,这些相变不存在对称性的破缺,也不存在区分和表征它们的局域序参量。因此,这些相变属于拓扑量子相变。

拓扑有序相的刻画,通常一种方式是用整数型的拓扑指数来表征它们。但这种表征方式无法反映相变的动力学行为,也无法反映不同拓扑有序相之间的关联。要克服这种困难,需要找到一种新的表征拓扑量子相变的方式。在朗道的连续相变理论中,序参量对表征不同相的性质及其相变过程起到了根本作用。对于 Kitaev 模型,我们发现其拓扑量子相变也可用序参量来表征。不过,这里的序参量是拓扑型的,不再是一个定域算符的期望值,而是沿某个一维充分长的路径所有自旋算符连续乘积的期望值。这种拓扑序参量,我们称为非定域弦序参量(non-local string order parameter)。在对偶空间中,这些弦序参量可以完全变为朗道型的定域序参量。

下面,我们以一条链的 Kitaev 自旋系统为例,说明如何构造和表征 Kitaev 模型中的非定域弦序参量。对于单条链的讨论,数学处理比较简单,也比较容易把握其物理图象。但要强调的一点是,这里的讨论具有普适性,不仅仅只是对一条链的自旋系统成立,对于多条链,特别是二维系统(对应于无穷条链极限),经过简单推广也是成立的。有关多条链的详细讨论,可参见文献 [10]。

对于一条链的 Kitaev 模型,只有  $J_1$  和  $J_2$  自旋耦合项,系统的哈密顿量为

$$H_{\text{chain}} = \sum_j (J_1 \sigma_{2j-1}^x \sigma_{2j}^x + J_2 \sigma_{2j}^y \sigma_{2j+1}^y). \quad (5)$$

对其进行约当-维格纳变换后,可以严格求得其费米子激发能谱。由此,可进一步确定其基态的相图。随着参数的变化,相图上存在两种拓扑不等价的相。在这两个相的临界点处,系统基态能量的二阶导数发散,表明存在一个二级量子相变,如图 4(a)所示。但相变过程不伴随有对称性自发破缺,也找不到一个局域的序参数来刻画相变过程,的确,如前面所说,该相变属于拓扑型量子相变。

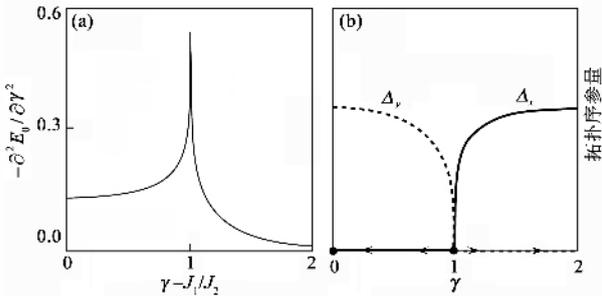


图 4 单条链模型中的量子相变<sup>[10]</sup>(a)基态能量的二阶导数;(b)拓扑序参量随  $J_1/J_2$  的变化关系

为了证明存在非局域的拓扑弦序参量,我们对原来的自旋模型做如下对偶变换<sup>[13]</sup>:

$$\sigma_j^x = \tau_{j-1}^x \tau_j^x, \sigma_j^y = \prod_{k=j}^N \tau_k^y, \quad (6)$$

变换之后的哈密顿量则变为横向磁场作用下的一维铁磁伊辛模型,

$$H_d = \sum_j (J_1 \tau_{2j-2}^x \tau_{2j}^x + J_2 \tau_{2j}^y). \quad (7)$$

这个对偶模型仅包含了定义在偶数格点上的对偶自旋,而在奇数点上的对偶自旋不参与动力学过程。

横向磁场作用下的一维铁磁伊辛模型,作为一个典型的量子相变模型,由于存在严格解的原因,已被广泛研究<sup>[1]</sup>。当  $J_1 > J_2$  时,系统存在非零的长程自旋关联:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \tau_0^x \tau_{2n}^x \sim [1 - (J_2/J_1)^2]^{1/4}, \quad (8)$$

对应于自旋  $x$  方向上对偶自旋的长程铁磁有序。而当  $J_1 \leq J_2$  时,对偶自旋的长程关联为零。因此,横场伊辛模型中发生的量子相变可以用朗道对称性破缺理论来描述:在有序相是  $\tau^x$  具有的  $Z_2$  对称性发生自发破缺,局域序参量为  $x$  方向的磁化强度为

$$\tau^x \sim [1 - (J_2/J_1)^2]^{1/8}, \quad (9)$$

当我们返回到原来的自旋空间时,由(8)式所定义的关联函数则变为如下非定域的自旋关联函数:

$$\Delta_x = \lim_{j \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^{2j} \sigma_k^x \sim \begin{cases} [1 - (J_2/J_1)^2]^{1/4}, & J_1 > J_2 \\ 0, & J_1 < J_2 \end{cases}. \quad (10)$$

这是一种非局域性弦状自旋的关联函数,也就是系统的拓扑弦序参量。 $\Delta_x$  由零到非零的转变表征了这个系统中的拓扑量子相变过程。

由于模型(4式)在  $J_1$  和  $J_2$  交换下是自对偶的,这个系统的拓扑量子相变也可以用另一个拓扑弦序参量  $\Delta_y = \lim_{j \rightarrow \infty} \prod_{k=2}^{2j+1} \sigma_k^y$  来描述。两者是完全等价的,反映了无序和有序的相对性。

上面的分析说明,在一个拓扑量子系统中,通过选取合适的对偶表象,其拓扑量子相变依然可以用朗道对称性破缺相变理论来描述。我们发现这个结论不仅只是对单条链成立,而且对任意条链(包括二维)的 Kitaev 模型也是成立的。我们相信这个结论具有普适性,但对于一个一般性的多粒子系统,目前还不能给出严格的证明。

## 4 总结与展望

Kitaev 模型作为一个可严格求解的二维量子模型拥有新奇和丰富的物理内容,是研究拓扑量子相变的理想模型。通过约当-维格纳变换,我们证明了这个模型完全等价于一个无约束的自由 Majorana 费米子系统,这为严格求解 Kitaev 模型和研究其基态及激发态的性质奠定了基础。这个系统的量子相变过程,没有自发的定域对称性的破缺。通过对偶变换,我们发现这个系统的量子相变可用非定域的拓扑弦序参量来描述。而这些非定域的弦序参量在对偶空间变为定域的序参量,所对应的量子相变过程存在(对偶空间中的定域)对称性自发破缺。这个结果说明,朗道的二级连续相变理论在描述拓扑量子相变也是成立的,但这是在对偶空间,而不是在原始的自旋空间。

除了拓扑量子相变, Kitaev 模型还存在丰富的拓扑型准粒子激发,特别是存在非阿贝尔任意子。发现和操控这些非阿贝尔任意子是实现拓扑量子计算的基础,这方面的研究现在才刚刚起步,有大量的研究工作有待进行。

### 参 考 文 献

[ 1 ] Sachdev S. Quantum Phase Transitions. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.  
 [ 2 ] Laughlin R B. Phys. Rev. Lett., 1983, 50: 1395  
 [ 3 ] Kitaev A. Ann. Phys. (N. Y.), 2003, 303: 2  
 [ 4 ] Moore G, Read N. Nucl. Phys. B, 1991, 360: 362

[ 5 ] Ivanov D A. Phys. Rev. Lett., 2001, 86: 268  
 [ 6 ] Kitaev A. Ann. Phys. (N. Y.), 2006, 321: 2.  
 [ 7 ] Duan L-M, Demler E, Lukin M D. Phys. Rev. Lett., 2003, 91: 090402  
 [ 8 ] Micheli A, Brennen G K, Zoller P. Nature Physics, 2006, 2: 341  
 [ 9 ] Doucot B *et al.* Phys. Rev. B, 2005, 71: 024505  
 [ 10 ] Feng X Y, Zhang G M, Xiang T. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 087204  
 [ 11 ] Lieb E H. Phys. Rev. Letter., 1994, 73: 2158  
 [ 12 ] Lee D H, Zhang G M, Xiang T. preprint, cond - mat/07053499  
 [ 13 ] Fradkin E, Susskind L. Phys. Rev. D, 1978, 17: 2637



### · 书评和书讯 ·

## 科学出版社物理类新书推荐

书 名	作(译)者	定 价	出版日期
电磁波述论	盛新庆	38.00	2007年7月
大气声学	杨训仁 陈宇	52.00	2007年6月
d 波超导体	向涛	48.00	2007年5月
场论中的路径积分导引(影印)	U. Mosel	45.00	2007年4月
表面物理原理(影印)	F. Bechstedt	58.00	2007年4月
半导体光学(第三版)(影印)	C. F. Klingshirn	118.00	2007年4月
自组织纳米材料(影印)	Motonari Adachi D. J. Lockwood	56.00	2007年4月
远程通信中的非线性光学(影印)	T. Schneider	68.00	2007年4月
物理学中的拓扑和几何(影印)	E. Bick, F. D. Steffen	65.00	2007年4月
量子光学——降噪、囚禁离子、量子路径和退相干(影印)	M. Orszag	58.00	2007年4月
光学与激光——光纤与光波导(第五版)(影印)	M. Young	79.00	2007年4月
飞秒激光脉冲——原理及实验(第二版)(影印)	C. Rulliere	68.00	2007年4月
薄膜材料——应力、缺陷的形成和表面演化	卢磊	86.00	2007年1月
亚稳金属材料	胡壮麒	160.00	2006年12月
高等原子分子物理学(第二版)	徐克尊	54.00	2006年9月
半导体异质结物理(第二版)	虞丽生	52.00	2006年5月
实验物理中的概率和统计(第二版)	朱永生	72.00	2006年3月
物理学中的群论(第二版)	马中骥	68.00	2006年2月
微分几何入门与广义相对论(上册,第二版)	梁灿彬, 周彬	59.00	2005年12月
相互作用的规范理论(第二版)	戴元本	68.00	2005年6月
窄禁带半导体物理学	褚君浩	120.00	2005年5月
物理学家用微分几何(第二版)	侯伯元, 侯伯宇	98.00	2005年3月

凡购书者免邮费,请按以下方式联系我们:

电 话 010-64017957 64033515 电子信箱: mlhukai@yahoo.com.cn dpyan@cspg.net

通讯地址 北京东黄城根北街16号 科学出版社 100717 联系人: 胡凯 鄢德平

主页 <http://www.sciencep.com>