

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院 博士学位论文

两类量子格点模型的精确求解

杨丽平

指导教师 _____ 向涛研究员

_____ 中国科学院理论物理研究所

申请学位级别 _____ 博士 _____ 学科专业名称 _____ 凝聚态理论

论文提交日期 2008年12月 论文答辩日期 _____ 2008年12月

培养单位 _____ 中国科学院理论物理研究所

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Accurate solutions of two kinds of quantum lattice models

Li-Ping Yang

Supervisor:

Prof. Tao Xiang

Institute of Theoretical Physics
Chinese Academy of Sciences

January, 2009

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

摘 要

在这篇论文中,我们将讨论两类量子格点模型的精确解。一个是一维自旋为1具有单离子各向异性的量子Ising模型,另一个是描述受晶场和磁场共同作用的二维电子行为的Hofstadter模型。

对于前者,我们提出了一种空穴分解方案,将 $S = 1$ 的量子模型映射到一系列由非极化状态 $S_z = 0$ (空穴)数目刻画的自旋为1/2的横场Ising模型。在约化的 $S = 1/2$ 模型基础上发展了迭代方法求解系统的配分函数。这个迭代技巧极大地简化了对所有空穴构型的求和,使得热力学极限下物理量可以被严格确定,而且它有普遍性,对于其他有掺杂的一维系统也适用。我们就此讨论了均匀和二聚化情形下的基态相图以及热力学性质。相较于 $S = 1/2$ 的横场Ising模型, $S = 1$ 的量子模型多出了中性极化状态 $S_z = 0$ 这一自由度,使得系统除了费米型准粒子激发外,还有空穴数目变化带来的激发。系统的低温行为由空穴激发和每个自旋1/2横场Ising段内的费米激发共同主导,空穴激发强烈地抑制了原来 $S = 1/2$ 模型中的量子临界行为。晶场产生的单离子各向异性项起着调节空穴数目的作用,这丰富了基态的相图,系统除了我们熟知的磁有序无序的二级相变外,还出现了磁有序相与空穴凝聚相之间的一阶相变行为。两种激发形成了这一模型中两个特征能量尺度,从比热图形的双峰结构中可以清晰地看到这点。

当二聚化引入后,原胞的特征长度加倍,能带发生劈裂。通过对模型的奇偶格点区分给出的波函数Ansatz加上均匀链求解的方式求解了二聚化情形。对比均匀情况的 $S = 1$ 量子模型,我们将能带劈裂后的带隙定义为二聚化能隙,这个能量尺度也反映在比热的峰值结构中。

对于后者,我们发展了一个新颖的量子转移矩阵方法,这一方法可以有效求解任意一维无相互作用的格点依赖(或键依赖)的费米子模型(包括一维无序Anderson模型)。我们解析处理的是模型的配分函数,利用温度倒数定义的Trotter空间的平移不变性,将配分函数约化为随系统尺寸线性增长 2×2 矩阵的乘积,使得模型的热力学极限行为得以讨论。而Hofstadter模型在选取朗道规范后,哈密顿量可以写为一维哈密顿量求和。这个一维哈密顿量可以由量子转移矩阵方法获得其配分函数。

没有周期势场时,随着磁场强度的变化费米能级在朗道能级间移动,使得能量周期变化呈现典型的de Haas-van (dHvA) Alphen振荡。在引入周期势场后,在磁化强度随磁场倒数的变化曲线中,随着温度降低和磁场增强,我们看到在dHvA振荡背景上出现的精细结构,这源自于格点的修正效应。Hofstadter模型有着特殊的蝴蝶分形能谱,构成蝴蝶原胞包含多阶可分的子原胞,能带逐级劈裂,只有低温对应的小的能量窗口可以探测更低的能隙,从而看到精细的振荡行为。磁化率对态密度的改变很敏感。如果费米能级处的态密度表现为van Hove奇异性,那么磁化率呈现一个顺磁峰,而费米面为Dirac 点则表现为抗磁谷。由此可知,对于磁化强度的测量不仅是一个有效探测Hofstadter蝴蝶能谱的有效手段,还能判断该模型的态密度行为。除了磁化强度的振荡外,还可看到比热的振荡行为。这些振荡都源自于内能随磁场的周期性变化。测量比热同样是一个好的探测分形能谱的方式。

关键词: 量子伊辛模型,空穴激发,二聚化,蝴蝶能谱,磁振荡,格点修正

Abstract

In this thesis, we will discuss the accurate solutions of two kinds of quantum lattice models. One is one-dimensional $S = 1$ quantum Ising model with single-ion anisotropy. The other is about the Hofstadter model interplayed by crystal field and magnetic field perpendicular to the surface.

For the former, we propose the hole-decomposition scheme, which maps the system into a series of $S = 1/2$ transverse Ising model(TIM), characterized by neutral polarized state $S_z = 0$ (called hole). We develop the recursion formula to further solve the partition function based on TIM, which greatly simplifies the calculation for all possible hole configurations. Therefore, we can obtain physical quantities in the thermodynamic limit. This method is general, adaptable to other 1-dimensional systems with impurities. we analyze the ground state diagram and thermodynamic behaviors in both uniform and dimerized cases. Compared to $S = 1/2$ TIM, there is extra degree of freedom, $S_z = 0$, which brings hole excitations except for the fermion quasi-particle excitations. The low temperature behavior is governed by the interplay between the hole excitations and the fermionic excitations within each spin-1/2 transverse Ising segment. The quantum critical fluctuations around the Ising critical point of the transverse Ising model are strongly suppressed by the hole excitations. The single-ion anisotropy parallel to the Ising coupling direction generated by crystal field plays the role of chemical potential to control the number of holes. It enriches the ground state diagram of the system. Excepting for the second-order phase transition from magnetically ordered to disordered phases, the system exhibits the first-order phase transition between magnetically ordered phase and hole-condensation phase. The two kinds of excitations correspond to the characteristic energy scale, which can be seen clearly from the double-peak structure in the specific heat curve.

In the presence of dimerization, the length of a cell doubles and the energy bands split. By introducing wave function Ansatz distinguishing the odd/even sites, we get the exact solutions of dimerized cases by the same method used in

the uniform chain. We define the separation of split two bands as dimerization gap. This energy scale is also discerned from specific heat curve.

For the latter, we develop a novel quantum transfer matrix(QTM) method, which can be used to solve effectively any 1D site(or bond)-dependent fermion model without interaction(including 1D Anderson disordered model). Our starting point is the partition function of systems. utilizing the translational invariance of Trotter space defined by the inverse of the temperature, we reduce the partition function to the product of many 2×2 matrices which are linearly increasing with the system size. In the Landau gauge, the Hofstadter model can be rewritten as a sum of 1D Hamiltonians, which enters into the application of QTM method. Thus, we can obtain the partition function of Hofstadter model.

In the absence of crystal field, the Fermi level moves among different Landau levels with magnetic field changing, leading to the periodical change of the energy. As a result, typical de Haas-van Alphen(dHvA) oscillations appear. After the crystal field is introduced, in the curve of the magnetization vs magnetic field, the subtle structures appear above the conventional dHvA curve with decreasing temperature and increasing the magnetic field magnitude, which results from the lattice correction. The Hofstadter butterfly shows peculiar fractal structure. The cell includes many sub-cells which can be divided further. Only the small energy “window” with $k_B T$ can detect the mini-gaps to observe fine oscillation behaviors. The magnetic susceptibility is sensitive to the change of the density of states. It shows a paramagnetic peak if the density of states has a van Hove singularity at the Fermi level or a diamagnetic deep if the Fermi surface is a Dirac point. Thus the measurement of magnetic susceptibility can reveal not only the fractal structure of spectra, but also the density of states of the Hofstadter model. In addition, the specific heat shows oscillation behaviors with the magnetic field. These oscillations share the same origin that the internal energy change periodically with the magnetic field. Thus it is also applicable method to prove the fractal structure through the measurement of the specific heat.

Keywords: Quantum Ising model, hole excitations, dimerization, butterfly energy spectrum, magnetic oscillation, lattice correction

目 录

摘要	1
Abstract	3
目录	9
摘要	1
Abstract	3
第一章 引言	5
1.1 量子Ising模型	6
1.2 Hofstadter 模型	9
1.3 论文安排	11
第一部分 自旋为1的量子Ising模型的精确解	13
第二章 自旋为1的晶场Ising模型	15
2.1 空穴分解方案	17
2.2 映射到自旋1/2 横场Ising模型	18
2.3 求配分函数的迭代方法	21
2.4 不同的边界条件	24
第三章 均匀链	25
3.1 两种激发	26
3.2 相图	28
3.3 自由能	29

第四章 二聚化链	33
4.1 模型求解	33
4.1.1 零空穴情形	33
4.1.2 单空穴系统	38
4.1.3 多空穴系统	40
4.2 低能谱	40
4.2.1 $p = 0$ 单元的费米激发	40
4.2.2 单空穴激发	41
4.2.3 多空穴激发	43
4.2.4 相图	45
4.3 热力学性质	47
4.3.1 二聚化自旋链	47
4.3.2 空穴凝聚: 非零 D_z	49
4.4 关联函数	50
4.4.1 零温	51
4.4.2 有限温	52
4.4.3 自旋磁化率	53
4.5 小结	53
 第二部分 Hofstadter模型中的量子振荡	 57
第五章 量子转移矩阵方法	59
5.1 模型介绍	59
5.2 转移矩阵	60
5.3 对角无序结果	68
5.3.1 高斯型无序	68
5.3.2 交错无序势	70
5.4 小结	73

目录	11
第六章 Hofstadter 蝴蝶能谱	75
6.1 模型哈密顿量	75
6.2 蝴蝶型能谱结构	78
6.3 Hofstadter蝴蝶与霍尔电导	81
第七章 Hofstadter模型的热力学性质	83
7.1 转移矩阵对配分函数的表达	83
7.2 磁场强度和磁化率的振荡	85
7.3 平均能量	89
7.4 比热的振荡行为	91
7.5 小结	93
第八章 总结	97
附录 A 第二章中定理2的证明	99
附录 B M-矩阵的对角化	101
B.1 $(r_1, r_2) = (odd, even)$	101
B.2 $(r_1, r_2) = (odd, odd)$	102
B.3 $(r_1, r_2) = (even, even)$	103
B.4 $(r_1, r_2) = (even, odd)$	103
B.5 段配分函数	104
附录 C 均匀段的格林函数	105
附录 D 二聚化段的格林函数	109
附录 E 有限温下段的自旋-自旋关联函数	111
附录 F 指数算符的矩阵元	113
参考文献	115

博士期间的工作	127
致谢	129

摘 要

在这篇论文中,我们将讨论两类量子格点模型的精确解。一个是一维自旋为1具有单离子各向异性的量子Ising模型,另一个是描述受晶场和磁场共同作用的二维电子行为的Hofstadter模型。

对于前者,我们提出了一种空穴分解方案,将 $S = 1$ 的量子模型映射到一系列由非极化状态 $S_z = 0$ (空穴)数目刻画的自旋为1/2的横场Ising模型。在约化的 $S = 1/2$ 模型基础上发展了迭代方法求解系统的配分函数。这个迭代技巧极大地简化了对所有空穴构型的求和,使得热力学极限下物理量可以被严格确定,而且它有普遍性,对于其他有掺杂的一维系统也适用。我们就此讨论了均匀和二聚化情形下的基态相图以及热力学性质。相较于 $S = 1/2$ 的横场Ising模型, $S = 1$ 的量子模型多出了中性极化状态 $S_z = 0$ 这一自由度,使得系统除了费米型准粒子激发外,还有空穴数目变化带来的激发。系统的低温行为由空穴激发和每个自旋1/2横场Ising段内的费米激发共同主导,空穴激发强烈地抑制了原来 $S = 1/2$ 模型中的量子临界行为。晶场产生的单离子各向异性项起着调节空穴数目的作用,这丰富了基态的相图,系统除了我们熟知的磁有序无序的二级相变外,还出现了磁有序相与空穴凝聚相之间的一阶相变行为。两种激发形成了这一模型中两个特征能量尺度,从比热图形的双峰结构中可以清晰地看到这点。

当二聚化引入后,原胞的特征长度加倍,能带发生劈裂。通过对模型的奇偶格点区分给出的波函数Ansatz加上均匀链求解的方式求解了二聚化情形。对比均匀情况的 $S = 1$ 量子模型,我们将能带劈裂后的带隙定义为二聚化能隙,这个能量尺度也反映在比热的峰值结构中。

对于后者,我们发展了一个新颖的量子转移矩阵方法,这一方法可以有效求解任意一维无相互作用的格点依赖(或键依赖)的费米子模型(包括一维无序Anderson模型)。我们解析处理的是模型的配分函数,利用温度倒数定义的Trotter空间的平移不变性,将配分函数约化为随系统尺寸线性增长 2×2 矩阵的乘积,使得模型的热力学极限行为得以讨论。而Hofstadter模型在选取朗道规范后,哈密顿量可以写为一维哈密顿量求和。这个一维哈密顿量可以由量子转移矩阵方法获得其配分函数。

没有周期势场时，随着磁场强度的变化费米能级在朗道能级间移动，使得能量周期变化呈现典型的de Haas-van (dHvA) Alphen振荡。在引入周期势场后，在磁化强度随磁场倒数的变化曲线中，随着温度降低和磁场增强，我们看到在dHvA振荡背景上出现的精细结构，这源自于格点的修正效应。Hofstadter模型有着特殊的蝴蝶分形能谱，构成蝴蝶原胞包含多阶可分的子原胞，能带逐级劈裂，只有低温对应的小的能量窗口可以探测更低的能隙，从而看到精细的振荡行为。磁化率对态密度的改变很敏感。如果费米能级处的态密度表现为van Hove奇异性，那么磁化率呈现一个顺磁峰，而费米面为Dirac 点则表现为抗磁谷。由此可知，对于磁化强度的测量不仅是一个有效探测Hofstadter蝴蝶能谱的有效手段，还能判断该模型的态密度行为。除了磁化强度的振荡外，还可看到比热的振荡行为。这些振荡都源自于内能随磁场的周期性变化。测量比热同样是一个好的探测分形能谱的方式。

关键词： 量子伊辛模型，空穴激发，二聚化，蝴蝶能谱，磁振荡，格点修正

Abstract

In this thesis, we will discuss the accurate solutions of two kinds of quantum lattice models. One is one-dimensional $S = 1$ quantum Ising model with single-ion anisotropy. The other is about the Hofstadter model interplayed by crystal field and magnetic field perpendicular to the surface.

For the former, we propose the hole-decomposition scheme, which maps the system into a series of $S = 1/2$ transverse Ising model(TIM), characterized by neutral polarized state $S_z = 0$ (called hole). We develop the recursion formula to further solve the partition function based on TIM, which greatly simplifies the calculation for all possible hole configurations. Therefore, we can obtain physical quantities in the thermodynamic limit. This method is general, adaptable to other 1-dimensional systems with impurities. we analyze the ground state diagram and thermodynamic behaviors in both uniform and dimerized cases. Compared to $S = 1/2$ TIM, there is extra degree of freedom, $S_z = 0$, which brings hole excitations except for the fermion quasi-particle excitations. The low temperature behavior is governed by the interplay between the hole excitations and the fermionic excitations within each spin-1/2 transverse Ising segment. The quantum critical fluctuations around the Ising critical point of the transverse Ising model are strongly suppressed by the hole excitations. The single-ion anisotropy parallel to the Ising coupling direction generated by crystal field plays the role of chemical potential to control the number of holes. It enriches the ground state diagram of the system. Excepting for the second-order phase transition from magnetically ordered to disordered phases, the system exhibits the first-order phase transition between magnetically ordered phase and hole-condensation phase. The two kinds of excitations correspond to the characteristic energy scale, which can be seen clearly from the double-peak structure in the specific heat curve.

In the presence of dimerization, the length of a cell doubles and the energy bands split. By introducing wave function Ansatz distinguishing the odd/even sites, we get the exact solutions of dimerized cases by the same method used in

the uniform chain. We define the separation of split two bands as dimerization gap. This energy scale is also discerned from specific heat curve.

For the latter, we develop a novel quantum transfer matrix(QTM) method, which can be used to solve effectively any 1D site(or bond)-dependent fermion model without interaction(including 1D Anderson disordered model). Our starting point is the partition function of systems. utilizing the translational invariance of Trotter space defined by the inverse of the temperature, we reduce the partition function to the product of many 2×2 matrices which are linearly increasing with the system size. In the Landau gauge, the Hofstadter model can be rewritten as a sum of 1D Hamiltonians, which enters into the application of QTM method. Thus, we can obtain the partition function of Hofstadter model.

In the absence of crystal field, the Fermi level moves among different Landau levels with magnetic field changing, leading to the periodical change of the energy. As a result, typical de Haas-van Alphen(dHvA) oscillations appear. After the crystal field is introduced, in the curve of the magnetization vs magnetic field, the subtle structures appear above the conventional dHvA curve with decreasing temperature and increasing the magnetic field magnitude, which results from the lattice correction. The Hofstadter butterfly shows peculiar fractal structure. The cell includes many sub-cells which can be divided further. Only the small energy “window” with $k_B T$ can detect the mini-gaps to observe fine oscillation behaviors. The magnetic susceptibility is sensitive to the change of the density of states. It shows a paramagnetic peak if the density of states has a van Hove singularity at the Fermi level or a diamagnetic deep if the Fermi surface is a Dirac point. Thus the measurement of magnetic susceptibility can reveal not only the fractal structure of spectra, but also the density of states of the Hofstadter model. In addition, the specific heat shows oscillation behaviors with the magnetic field. These oscillations share the same origin that the internal energy change periodically with the magnetic field. Thus it is also applicable method to prove the fractal structure through the measurement of the specific heat.

Keywords: Quantum Ising model, hole excitations, dimerization, butterfly energy spectrum, magnetic oscillation, lattice correction

第一章 引言

多体关联问题一直是凝聚态物理研究的兴趣和难点所在。自然界呈现出的种种关联带来了多样性和复杂性。将万事万物还原成简单的基本规律，并不蕴含着从这些规律出发重建宇宙的能力[1]。不能依据少数粒子的性质作简单外推来解释由大量粒子构成的复杂集聚体的行为。对称性破缺作为自然现象的一个重要机制，深刻地揭示了相变过程和系统在不同层次上演生(emergence) [2]出的各种不同行为，也为新物质的寻找带来重要的契机和理论支撑。对称性破缺这一源自于凝聚态研究的深刻物理思想带来了粒子物理的重大突破，因此获得了2008年的诺贝尔物理学奖。

事实上，对关联多体研究兴趣远不止凝聚态领域，随着研究愈加深入，就会在不同领域间发现更多的对应，不同的只是我们对问题的命名。比如粒子物理中的Anderson-Higgs机制就与超导的Meissner效应有着相似之处。“宇宙弦”假定类似于第二类超导体中的磁场涡旋线。而 He^3 中的金兹堡-朗道理论就与强子-介子相互作用有共通之处[3]。

多体间的关联呈现着大量新奇的物理现象：超导、超流、液氦相图、量子霍尔效应、约瑟夫逊效应、高温超导等等。这些让我们用以描述世界的单体语言遭受到了重大失败，即便是Landau-Fermi液体理论范式下的准粒子语言也不能给出满意的答案。“ $1+1=2$ ”的线性递推模式在处理强关联系统时，如何实现已知到未知的加法成了了解其物理机制的巨大挑战。多体物理中不同的标度都有不同的物理现象出现，展示的是一个有层次的物理世界，这也使得我们从基本物理规律来构建整个世界的梦想幻灭[1]。天下大同无疑是个美丽梦想，寻找大统一理论或事物普遍描述的努力从来没有停止，但事物的外延和内涵同时辐射的广度和深度往往不可兼得。

从微观出发的Schrödinger 方程，一度被视为描述世界的终极理论，但如果关注的系统具有不同层次的演生，有着更高阶的组织规律，这样一种还原宗旨并不能获得对于系统的正确认识[4]。也许，正是由于还原为最基本规律这一指导原则过于“基本”，而成为我们对于知识认知的最大壁垒[5]。诚然，计算机的发展使得我们可以从各种数值解中获得对系统的了解，但是由于牢不可破的指数墙，这一维度灾难使得我们能迈出的步伐非常有限，这样对于热力学极限的

探寻仍然面临极大困难。

在多粒子的层次世界里，相和相变是被提炼的妙笔，成为系统重要的描述和揭示，同时也是我们理解的方向和道路。在对强关联体系的解析处理中，平均场的初衷还是想将其还原成单体语言。可是因为“平均”擦除的涨落和关联，这一理论只有在四维以上的空间才表现出其正确性。平均场在对于相变的描述中，即使有时有定性的判断，可是临界指数却相去甚远，而更多的时候连定性的结果都会与实验相左。

现阶段，有两种方法来处理强关联体系。一种是将复杂相互作用通过可能的方式以弱相互作用的形式重新表示，这样我们就可以用微扰论或平均场的方法进行处理。问题是强关联却并不那么容易被弱化，或者通向弱化的入口并不易见。另一种则是对于精确解的研究，毫无疑问可解的关联问题少之又少，幸运的是毕竟存在一些有趣的情形可以精确求解。可解模型在多体物理的研究中发挥着巨大作用，二维经典Ising模型的Onsager解带来统计物理的新篇章，一维横场Ising模型的精确解推动了量子相变的理解。这些少量的可解模型虽然只是多彩自然的小小窗口，对其深入分析却大大丰富了我们对于复杂而新奇物理现象的认识。各种更为复杂的现象或模型也有可能通过对可解模型的转化和逼近而了解现象后的本质。

在当前凝聚态理论物理的研究工作中，精确求解某些量子格点模型的工作产生了越来越大的影响。这主要是由于电子之间的库仑相互作用导致的关联效应，从解析计算的角度来看很难系统地加以处理的。而从物理理解的角度看，它们的低能行为又可以用一些可解的低能有效哈密顿量加以描述。这使得我们可以通过精确求解这些模型得到的结果来理解更为复杂的系统内的物理过程。本文将着眼于两个量子模型的精确解研究，在其求解过程中，都有新颖的方法来实现其可解性。模型之一是一维具有单离子各向异性的 $S = 1$ 的量子Ising模型，之二是受晶场和磁场共同作用的Hofstadter模型[6]。

1.1 量子Ising模型

自旋模型是可解模型中讨论最广的元素，也是磁性研究的重要对象。对它的研究从经典到量子，从低维到高维，一直是凝聚态物理研究中的一个活跃分支。

1925年，E. Ising在其导师W. Lenz建议5年之后给出了一维经典自旋模型的

严格解。附加外场项后的模型哈密顿量为

$$H = -J \sum_i s_i s_{i+1} - B \sum_i s_i. \quad (1.1)$$

其中, J 是相邻自旋的交换积分, B 为外磁场。现在这一模型求解的重要性已远超出最初提出模型的认识, 它能很好地描述各向异性很强的磁性晶体[7]。Ising当年采用的组合方法已被其他方法取代, 沿用最广的是由Kramers和Wannier提出的转移矩阵方法[8], 这一方法处理一维问题非常有效, 也为三年后Onsager对于二维问题的求解作了重要铺垫。1944年, Onsager给出了第一个用于求解二维无外场Ising模型的方法, 接着杨振宁解决了含外场的二维Ising问题。Onsager解书写了统计物理上的重要篇章, 它揭示了应用统计物理的原则和方法可以解释相变, 极大地推动了对相变临界现象、量子磁性、量子磁性、量子纠缠和许多其它基本物理问题的研究。

Ising证明了一维情况下没有相变, 而外推空间维度 $D \geq 2$ 也不存在相变, 这个为解释铁磁相变而提出的Ising模型又被他本人所否定。二维模型Onsager解的出现清晰地回答了Ising模型的相变问题, 从二维到一维的过渡, 是通过临界温度 $T_c \rightarrow 0$ 来实现的。一维情形下, Ising模型的临界温度是 $T_c = 0$, 没有有限温度的相变。

量子涨落本质上不同于热涨落。然而, 二者都能驱动有序-无序相变。通常 d 维零温量子相变与 $d + 1$ 维纯经典模型由热驱动的相变有一一对应关系[9]。这个对应中已经默认动力学指数 $z = 1$, 在某些量子系统中, 静态和动力学的混合以及能量与尺寸的线性标度关系, 使得动力学指数为1。更为一般的对应关系是 d 到 $d + z$ 维[10]。一维横场Ising模型就与二维经典Ising模型有着对应关系, 从经典模型和量子模型的配分函数表达式可以看到, 温度进入到量子模型的耦合参数中, 空间维度的降低付出了引入对易关系这一代价。就这样, 热涨落与量子涨落相关, 而由温度驱动的热力学相变与量子涨落驱动的量子相变关联了起来。这种对应无疑为我们研究量子相变开了一扇门。

迄今为止, 已被严格求解的量子自旋模型非常稀少, 但它们在理解量子临界性上扮演着重要角色。在这些为数不多的量子自旋可积系统中, 一维自旋为 $1/2$ 的横场Ising模型可以说是最为典型的范例, 其哈密顿量为

$$H = -J \sum_i s_i^z s_{i+1}^z - D \sum_i s_i^x, \quad (1.2)$$

它等价于二维的经典Ising模型。作为一个最小的量子相变模型，它体现了量子相变和热力学相变的本质[11, 12, 13, 14, 15]。对于这一模型的量子临界点，在精确解未知情形下也可以通过其自对偶性得知[16]。实验上，这种格点模型可以在某些电子材料[17, 18, 19]以及冷原子或极化分子的光格子[20, 21]上得以实现。然而，在许多实际情形中，局域磁矩大于1/2并且受到晶场产生的单离子各向异性的相互作用[22]。尤其是对于整数自旋系统，局域自旋可以处于中性极化状态。

不妨来看反铁磁的Heisenberg模型，

$$H = -J \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1}. \quad (1.3)$$

H.A.Bethe在1931年给出的 $S = 1/2$ 情形的严格解表明系统的基态是多体的自旋单态，与激发态间没有能隙，自旋关联函数按距离的幂次率缓慢衰减，其色散关系也与经典自旋波类似。这似乎意味着更高自旋的Heisenberg模型也能朝经典情形平滑过渡。事实不然，1983年，F. D. M. Haldane预言半整数自旋系统保持 $S = 1/2$ 自旋链的特性，但对于整数自旋情形给出了著名的猜想[23]：系统基态唯一；基态和激发态间存在大的能隙；自旋关联函数按指数函数快速衰减。对于整数和半整数自旋，相差的自由度就是 $S^z = 0$ 状态，但物性却发生了根本改变。那么，自旋这个额外的自由度对 $S = 1/2$ 横场Ising模型所表现出的量子临界性又如何影响呢？要了解这个问题，就期待找到高自旋横场Ising模型的精确解。

在二维或更高维，对具有单离子各向异性的量子Ising模型的大量研究主要基于平均场近似[24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31]。在基态下， $S = 1$ 晶场Ising模型等价于 $S = 1/2$ 的横场Ising模型[32]。这个对等性对于有几何阻挫的量子Ising模型仍然有效，比如[33]中的一个完全的阻挫的Ising链。这个对等性也成为寻找 $S = 1$ 晶场Ising模型严格解的突破口。

在低维系统中，二聚化相对于均匀情形是最常见的扰动。具有二聚化的量子自旋模型的理论研究已经进行了几十年，比如，二聚化的Ising模型[34, 35]，XY模型[36, 37]，Heisenberg模型[38, 39, 40]，以及XYZ模型[41]。二聚化的 $S = 1/2$ 横场Ising模型可以由Jordan-Wigner变换精确求解[34]。文章[42]给出二聚化的 $S = 1/2$ 横场Ising模型基态的波函数形式。如果 $S = 1$ 晶场Ising模型严格解已知，将可以自然推广到二聚化情形。

1.2 Hofstadter 模型

自由电子受到周期势场或磁场作用反映的是Bloch能带[43]或朗道能级[44]的基本单粒子谱问题。而当二者共同作用于自由电子引发的问题有趣得多, 作为一个特殊的解, Hofstadter蝴蝶能谱[6]已经成为此类问题的重要标签[45]。Hofstadter模型的二次量子化哈密顿量是

$$\begin{aligned} H &= \sum_k H_k \\ &= \sum_k \left[t \sum_j \left(c_{j+1,k}^\dagger c_{j,k} + c_{j,k}^\dagger c_{j+1,k} + 2 \cos(2\pi j\phi - k) c_{j,k}^\dagger c_{j,k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.4)$$

在朗道规范的选取下, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = H(0, x, 0)$, 这个模型的哈密顿量脱耦成由 y 方向傅立叶变换后的 k 来标记的一维哈密顿量的求和形式。其中, $\phi = a^2 H / 2\pi(\hbar c/e)$, 这一无维参量表征穿过一个原胞的磁通(以磁通量子 $\hbar c/e$ 为单位)。还可以视为两个特征时间尺度的比值: 一个是携带晶格动量 $2\pi\hbar/a$ 的电子经过一个晶格常数 a 的运动周期 $a^2 m / 2\pi\hbar$, 另一个是电子回旋频率 $\omega_c = eH/mc$ 的倒数。

当 ϕ 取有理数, 设 $\phi = p/q$, 其中 p, q 是互质整数。M.Ya.Azbel等人[46]在1964年就讨论过用于描述这个模型的分形特点, 而Bloch能带在磁场下的劈裂也早在文献[47]中有所讨论。1976年, Hofstadter在其著名论文[6]中, 从能带电子的紧束缚近似出发, 应用Peierls替换, 得到描述磁场下Bloch电子行为的Harper方程, 给出了清晰的蝴蝶能谱结构, 探讨了模型的自相似性质, 说明这个对称的美丽蝴蝶具有自相似的特点, 从能谱中取一合适的部分可以得到能谱的全貌, 并大胆提出了增大晶格常数实现实验观测的可能。自此以后, 这个有着对称审美价值和自相似的单粒子能谱结构同时受到了理学家和数学家的极大关注, 几乎找不到还有什么其他的单电子问题有如此长期的生命力和关注度。

实际上, 对于受磁场和晶场共同的二维电子系统, 不论是Bloch电子在磁场下的行为(紧束缚极限), 还是朗道量子化的电子在弱周期势调制下(不考虑不同朗道能级间的耦合)[48]的规律都可以统一为求解Harper方程[49]。二者的差别在于对Harper方程中的参量 $\phi = p/q$ 意义的描述: 从紧束缚近似出发得到的方程中该参量对应于磁场的强度; 而从朗道极限出发得到的参量 ϕ 则对应于磁场强度的倒数。能带的劈裂也由前者的 q 条变为后者的 p 条, 这两种极限都同样给出这一特殊的蝴蝶能谱结构。

从能带的劈裂行为可以看到：Hofstadter模型非常特殊，从中能反映它有理数与无理数之间差别[6]，其差异可由实验来探测[50, 51]。对于Bloch电子，磁场的引入使得原来所有的Bloch能带劈裂成 q 条子带，对于无理数 ϕ ，子带的数目趋于无穷形成Cantor集，带宽为0。大家普遍接受的事实是某一参量为无理数并不会带来物理效应，因为任何一个极其微小的改变会使得参量变为有理数，而处处不连续情况下带来可观测的物理效应并非一个合理的物理图像。唯一可以协调的理解就是参量为有理数和无理数只带来数学意义上的差别，但可观测的物理量仍然是连续的。对于零温情形，由于能谱的分形特点，Hofstadter模型的基态能量不是外加磁场的解析函数。因此，零温下的轨道磁化率不是一个良好定义的物理量。然而，热起伏能消除磁的非解析性并恢复自由能的解析性。有限温下的磁化强度和磁化率因而成为能被定义的物理量。

在Hofstadter模型提出后的三十多年的时间里，对于均匀磁场和周期晶格势共同作用于二维电子气的问题有着大量的研究[52, 53, 54, 55, 56]，关于Hofstadter模型的求解和研究不断地在尝试和深入中。在实验上，紧束缚电子系统用来模拟周期势[49, 52]，再将其置于均匀磁场中就成了Hofstadter模型问题。

因为量子霍尔效应与电子结构的能隙密切关联，周期势场对朗道能级的影响成为一个重要问题。在这方面的努力成效显著，问题的答案使得我们对量子霍尔效应的理解更加深入。Streda[57]利用Kubo公式表明Hall电导可以分为经典的Drude/Zener结果（如果费米能 E_F 在能隙内此项消失）和量子修正作和。费米能下的态密度对外磁场的偏导决定量子修正的大小。态密度依赖于子带能隙，这样，对于量子霍尔效应的观测成为我们探测Hofstadter精细结构的手段，在超晶格[51]下的二维电子气的霍尔电导测量中，能谱的拓扑特性得到证实。

对于Hofstadter能谱结构的实验观测，直接的能态密度测量尚不可行。外磁场的一点微小改变会使得 q 发生剧烈振荡，带来基态的重构。如果考虑典型的真实晶体格点间距（ 2\AA ），要使得穿过一个原胞为一个量子磁通则要求一个巨大的磁场（量级为10亿高斯），已远超出现有的技术水平。但是却存在一个很自然的绕行方法，正如Hofstadter在[6]所指出，通过增大晶格常数（超晶格）来降低磁场要求，从而实现这一特殊能谱结构的实验观测。在分数量子霍尔效应或量子磁性中已经能获取对于分形能谱的证明。具有高迁移率的超晶格设计带来许多实验上对于Hofstadter蝴蝶能谱的观测。磁阻振荡[58, 59, 60] 便是一个典型的

蝴蝶能谱的证明。在文章[61]中，作者在能用Harper方程描述的一维散射体阵列中的微波传导实验中也观测到了特殊的蝴蝶能谱，这是对于Hofstadter分形结构间接而巧妙的证明。零温时，磁化强度随化学势振荡被讨论[62]。实验上的观测基本集中在电子输运行为的讨论，而对于这种分形的能谱结构给系统的热力学行为带来的影响却知之甚少。

当 ϕ 为有理数且 q 较小时，这一问题可被Bethe Ansatz[63, 64]和严格对角化方法[65]求解。然而，要想了解其热力学性质，尤其是格点对于磁场下运动电子的量子振荡效应的修正，就必须对任意 ϕ 值条件的模型哈密顿量进行求解。一般而言，Bethe Ansatz和严格对角化方法所能求解的 q 的最大值不超过1000，要对任意的 ϕ 值求解是一个富有挑战意义的难题。

没有周期势场，Hofstadter模型退化为电子在磁场中的运动问题。二维电子气在与之垂直的磁场中的量子理论早在上个世纪三十年代由Landau给出，在Landau规范或对称规范下，系统在平面内对应简谐振动，能量呈现量子化。因为费米面在不同Landau能级间的移动造成能量随磁场周期变化，从而导致电子气的轨道磁化随着外加磁场的变化振荡，也就是de Haas-van Alphen(dHvA)振荡。如果以dHvA振荡作为参考对象，晶格势场的加入，格点修正将带来怎样的影响是一个值得探讨的问题。对于朗道能级由与周期势场调制发生劈裂的直接实验证据首先源自于[66]。

文章[65]指出：晶场的引入使得系统能量出现比自由电子能量更低的极小值，这样除了我们所熟知的dHvA效应中的朗道抗磁性外，系统中会出现顺磁响应。他们还发现平均基态能的最小值出现在每个电子分配一个磁通量子的情形，这也激发了对高温超导磁通相的研究兴趣[67, 68, 69, 70]。

1.3 论文安排

本文将分为两个部分来探讨上面所述两个可解模型。第一部分包含第二、三、四章。我们求解了一类晶场作用下具有单离子各向异性项的自旋为1的一维量子模型。利用中间极化状态（定义为空穴）这一守恒量，发展了空穴分解方案，实现了在已知的 $S = 1/2$ TIM基础上求解的模式。加上我们提出的迭代方法，使得对于配分函数中系统所有空穴构型的求和大为简化，使得模型的热力学极限行为的讨论成为可能。这一迭代技巧对于有阻挫和非磁参杂系统同样适用，具有普遍意义。

在求取配分函数后，对系统的能隙，相图，临界行为进行了深入而细致的讨论。通过热力学量的计算发现了空穴激发导致的比热尖峰效应和对量子临界涨落的压制行为，这对进一步研究高自旋模型中的量子相变与临界行为有指导意义。通过对奇偶格点波函数Ansatz的引入，我们将均匀情形下的解推广到了二聚化情形，引入二聚化参数，对其基态相图和低能激发以及热力学行为作了分析。在第二章里，我们说明这一类模型的普适性质，讨论了决定模型求解的空穴分解方案和迭代技巧。第三、四章分别就均匀链和二聚化链做了热力学行为的讨论。

第二部分包含五、六、七章。我们提出了新颖的量子转移矩阵方法，用一维的无序Anderson模型示意了其过程。这一方法从求解系统的配分函数开始，利用Trotter-Suzuki分解，对温度倒数 β 进行分割，引入Trotter空间。无序使得系统失去了实空间的平移不变性，给一般的解析处理带来了困难。在我们的量子转移矩阵方法中，通过局域转移矩阵的引入，将配分函数表达了由局域转移矩阵的乘积，利用Trotter空间的平移不变性，在相应的傅立叶变换后，将配分函数表示为一系列 2×2 矩阵的乘积。所需计算资源与系统的尺寸成线性关系，使得我们可以讨论足够大的系统来分析其热力学极限行为。

对于Hofstadter模型，在选取Landau规范后，二维哈密顿量约化为在一个方向傅立叶变换后用特征动量 k 标示的一维哈密顿量的求和，形如一维对角无序的Anderson模型。利用量子转移矩阵方法，我们得到了晶格势场对磁场下电子运动的格点修正，讨论了磁化强度和磁化率随磁场变化的规律。利用得到的配分函数，我们还对平均能量和比热行为进行了讨论。第五章利用一维的无序Anderson模型来展示了量子转移矩阵方法的应用。第六章介绍了Hofstadter模型的基本特点，第七章对模型的磁化强度，磁化率和比热行为做了深入的分析 and 讨论。

最后一章对全文作了总结。

第一部分

自旋为1的量子Ising模型的精确解

第二章 自旋为1的晶场Ising模型

在多体物理的研究中，由量子涨落驱动相变问题是一个基本研究对象。低温下，大量与这种转变相关的新现象在凝聚态材料中得到观测[71, 72, 73, 74]。这也推动了在量子格点系统中与此转变相关的量子临界行为研究[13, 14]。一维横场Ising模型[18]，作为一个原始模型，已清晰地阐明量子相变的本质。其哈密顿量的定义式为

$$H_{TIM} = - \sum_j (JS_j^z S_{j+1}^z - hS_j^x), \quad (2.1)$$

其中， J 是相邻自旋的交换积分， \vec{S}_j 是格点 j 处的自旋算符， L 是格点长度。在外场 $h \rightarrow 0$ 极限下，基态是铁磁/反铁磁序依赖于 J 值正/负。这个横场项引入了量子起伏，从而带来量子相变。横场取在临界值 $h_c = J/2$ 之上，系统是顺磁相。这个模型等价于一个无自旋的费米子模型，可以通过Jordan-Wigner变换[11, 12]精确求解。这样，所有的物理量，包括基态能，低能激发，比热以及其他热力学量都可以求得。这样，我们可以对系统的量子临界行为有深入的理解。

最近，将精确解推广到或更高自旋Ising系统问题上有大量的努力和尝试。对于 $S = 1$ 的自旋链，与自旋为 $1/2$ 的不同之处在于：除了两个自旋极化状态 $S^z = \pm 1$ 外，存在一个未极化状态 $S^z = 0$ （我们称其为空穴）。一个自旋可以转变为一对极化状态，反之亦然。

在这章里，我们将详细探讨晶场下的 $S = 1$ 量子Ising模型，其哈密顿量为

$$H = - \sum_j (J_j S_j^z S_{j+1}^z + f_j), \quad (2.2)$$

其中，

$$f_j = D_j^x (S_j^x)^2 + D_j^y (S_j^y)^2 + D_j^z (S_j^z)^2 \quad (2.3)$$

是格点依赖的单离子各向异性项， D_j^α ($\alpha = x, y, z$)。对于任一格点，

$$(S_j^x)^2 + (S_j^y)^2 + (S_j^z)^2 = 2.$$

因此, 这三项 D_j^α 中只有两项独立。不失其一般性, 我们假设 $D_j^y = 0$ 。当 $D_j^x = 0$ 时, 模型变成经典情形, 对应为 Blume-Capel 模型[75, 76]。我们要研究的模型可视为 Blume-Capel 模型的量子版本。最为简单的量子情形是

$$H_{QIM} = - \sum_j [JS_j^z S_{j+1}^z + D(S_j^x)^2]. \quad (2.4)$$

在基态下, 由式 (2.4) 定义的模型等价于由式 (2.1) 描述的 $S = 1/2$ 的横场 Ising 模型[32]。二聚化的 $S = 1/2$ 横场 Ising 模型可以由 Jordan-Wigner 变换精确求解[34]。文章[42]给出二聚化的 $S = 1/2$ 横场 Ising 模型所有本征态的波函数形式。 $S = 1/2$ 横场 Ising 模型等价于由方程 (2.2) 定义的空穴的 $S = 1$ 情形, 这成为寻找二聚化的 $S = 1$ 量子自旋模型精确解的突破口。然而, 我们下面将要看到, 要考虑有空穴情况的精确解, 这并不是个简单的推广。

求解的关键在于将 $S = 1$ 系统的 Hilbert 空间划分为由空穴数目标记的子空间, 这也是空穴分解方案得名的原因。这个模型的重要性质就是每个格点处的空穴数目是守恒量。基于此, 这个模型能被映射成为一套 $S = 1/2$ 的横场 Ising 模型。Lieb-Mattis 定理[77]告诉我们, 均匀情形下的 $S = 1$ 的 Ising 系统 ($D_z = 0$) 的基态没有空穴。事实上, 只要保证 D_z 大于临界值 $D_{z,c}$ 即可。这一定理还可以推广到格点或键依赖的耦合情形 (包括二聚化)。

均匀的自旋为 $1/2$ 横场 Ising 模型可以在低维的磁性材料中实现[17, 19]。而实际材料中原子的磁矩往往大于 $1/2$ 。而且, 二聚化和由晶场产生的单离子各向异性变得重要[22]。晶场劈裂下的 $S = 1$ 横场 Ising 模型已被用于探测 SrTiO_3 [29] 材料中的铁电转变。在一类准一维自旋链中, 比如 $[\text{Ni}_2(\text{Medpt})_2(\nu\text{-ox})(\text{H}_2\text{O})_2](\text{ClO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, 磁性 Ni^{2+} 离子不仅表现出单离子各向异性[78, 79], 而且键能在两个值间交替出现。这里, Medpt 是二 (3-氨基丙基) 甲胺[80, 81]。其它二聚化系统包括反铁磁材料 NH_4CuCl_3 [82], $\text{Sr}_2\text{Cu}(\text{BO}_3)_2$ [83], $\text{Ba}_3\text{Mn}_2\text{O}_8$ [84, 85], 以及 $\text{Ba}(\text{V}_{1-x}\text{Mn}_x)_2\text{O}_8$ [86] 等等。最近, 光格子中的冷原子或极化分子系统成为实现各种量子自旋模型的理想选择[21]。尤其是自旋为 1 的模型可以由捕获极化分子来实现, 其自旋自由度由超精细振动态来描述[87]。

我们在空穴分解方案基础上发展了迭代方法精确求解模型的热力学性质。在论文中, 我们将详细讨论这个方法。对于一个给定的空穴构型, 被空穴隔开的只包含极化自旋状态的子系统都可以被求解。其本征波函数和激发谱都可以从相应的 $S = 1/2$ Ising 系统中得知。我们将在后面章节讨论二聚化和单离子各

向异性如何影响量子相变和热力学性质。受二聚化影响，系统会经历量子相变，其临界性与均匀的 $S = 1/2$ 横场Ising模型相似。

本章安排如下：在2.1中，和2.2小节中，我们讨论模型的普遍性质并介绍空穴分解方案。在小节2.3给出我们在空穴分解方案基础上用来简化配分函数计算的迭代方法这一重要技巧。

2.1 空穴分解方案

我们首先考虑有方程 (2.2) 定义的具有单离子各向异性的 $S = 1$ Ising 格点模型。 (S_j^x, S_j^y, S_j^z) 是 $S = 1$ 在格点 $j = 1, 2, \dots, L$ 处的自旋算符，满足 $SU(2)$ 代数

$$[S_j^a, S_l^b] = i\delta_{j,l}\epsilon_{abc}S_j^c. \quad (2.5)$$

单离子各向异性项可以有三种不同的表达：

$$\begin{aligned} f_j &\equiv D_j^x(S_j^x)^2 + D_j^y(S_j^y)^2 + D_j^z(S_j^z)^2 \\ &= (D_j^x - D_j^z)(S_j^x)^2 + (D_j^y - D_j^z)(S_j^y)^2 + 2D_j^z \\ &= (D_j^x - D_j^y)(S_j^x)^2 + (D_j^z - D_j^y)(S_j^z)^2 + 2D_j^y. \end{aligned}$$

均匀的经典Blume-Capel 模型[75, 76] 对应对称情形 $D_j^x = D_j^y = D$ 。不失其一般性，我们考虑量子情形， $D_j^x = D_j$ ， $D_j^y = D_j^z = 0$ 。 $J_j = J$ ， $D_j = D$ 对应于均匀自旋链，其基态在文章[24, 32]中已被研究。简单起见，我们假设链长 L 是偶数。从表达式

$$(S_j^x)^2 = \frac{1}{4}(S_j^+ S_j^+ + S_j^- S_j^- + S_j^+ S_j^- + S_j^- S_j^+), \quad (2.6)$$

可以看到，项 $(S_j^x)^2$ 不会耦合 $S_j^z = 0$ 态自旋极化状态 $S_j^z = \pm 1$ ，因此 $(S_j^x)^2$ 与 $(S_j^z)^2$ 对易，这导致下面的定理：

定理1. 对于任意格点依赖的参数 J_j 和 D_j ，总的空穴数 $\hat{N}_0 = L - \sum_{j=1}^L (S_j^z)^2$ 与哈密顿量对易。

$$[\hat{N}_0, H] = 0. \quad (2.7)$$

这意味着空穴总数 N_0 是一个守恒量，哈密顿量 H 的本征态可以由 \hat{N}_0 的本征值来分类。在下面的讨论中，我们将有 N_0 个空穴的子系统成为第 N_0 单元。

用 \mathcal{H}_{N_0} 来标记第 N_0 单元的Hilbert 空间, 那么总的Hilbert 空间可以写为所有子空间的直和:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \cdots \oplus \mathcal{H}_L. \quad (2.8)$$

N_0 单元的一套完备本征态构成整个能谱的一个子带。将一个空穴添加到基态将产生一个有限大小的激发能隙。一般而言, N_0 单元的最低本征能量满足下面的定理:

定理2. 在 N_0 单元内, $E(N_0, L)$ 对应于 H 的本征态 $|N_0, L\rangle$ 的本征能量, 而 $E_0(N_0, L)$ 是最低的本征能量, 那么存在下面的不等式

$$E_0(N_0, L) < E_0(N_0 + 1, L). \quad (2.9)$$

这是铁磁Ising 耦合下均匀系统Lieb-Mattis 定理[77]的推广(具体证明参见附录A)。定理无论是铁磁或反铁磁耦合均成立。这表明基态在 $N_0 = 0$ 单元里, 其能谱有层次结构。

系统里有两类激发。一个是给定单元里的费米激发, 相应的激发能由 $E(p, L) - E_0(p, L)$ 给定; 另一个是空穴激发, 相对于基态的激发能量是 $E(p, L) - E_0(0, L)$ 。这两类激发分别有其最小的激发能隙:

$$\Delta_0^{(p)} \equiv E_1(p, L) - E_0(p, L), \quad (2.10)$$

$$\Delta_h^{(p)} \equiv E_0(p, L) - E_0(0, L). \quad (2.11)$$

图2.1 示意了系统的系统带结构的层次。在每个带中, 存在费米激发, 最小能隙标示为 $\Delta_0^{(p)}$ 。当纵向的各向异性 $D_j^z = 0$, 最小的空穴激发能隙 $\Delta_h^{(p)}$ 随空穴数目 p 增大而增长。

不论 D_j 符号正负, 定理2 都成立。然而, 能谱在变换 $D_j \rightarrow -D_j$ 下并非不变。这可以从求解两点问题看出。基态与 D_j 符号无关, 激发态则不然。

2.2 映射到自旋1/2 横场Ising模型

式(2.2) 定义的哈密顿量的本征函数可以表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_{m_j} F_{m_1, m_2, \dots, m_L} |m_1, m_2, \dots, m_L\rangle, \quad (2.12)$$

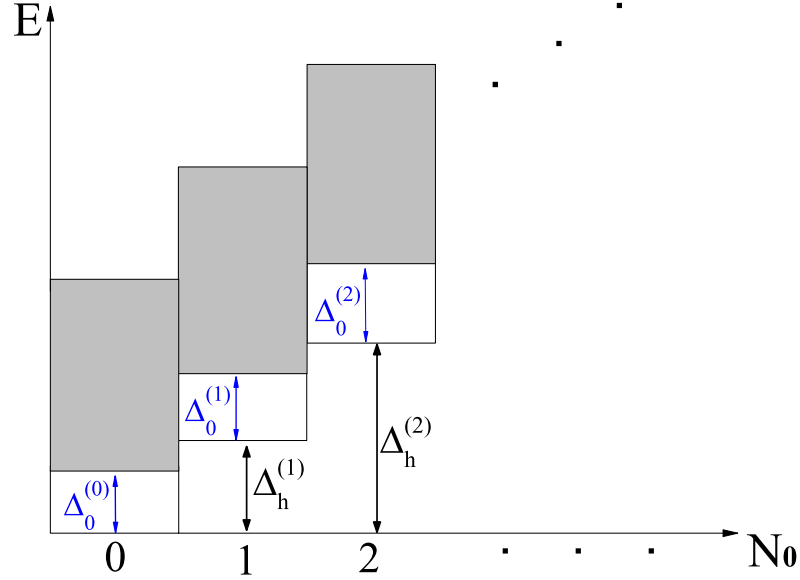


图 2.1: 层次结构的能带示意图。 $\Delta_0^{(p)}$ 和 $\Delta_h^{(p)}$ 分别是费米激发和空穴激发的最小能隙。这些能隙的确切结果将在4.2.3中给出。

其中, F_{m_1, m_2, \dots, m_L} 是波函数。总自旋及其 z 分量都不是守恒量, 本征态不能由此而划分。方程 (2.12) 的求和遍及所有 $m_j = 0, \pm 1$ 状态。前面已经提到, 局域空穴数目是好量子数, 空穴可被视为嵌在 $S = 1/2$ Ising 系统里的非磁局域杂质。这样, 如果空穴位于格点 x_q 处 ($q = 1, 2, \dots, p$), 那么上面的波函数可以简写为

$$|\Psi_{(p)}\rangle = \sum_{\tilde{m}_j} F_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2, \dots, \tilde{m}_L}^{(p)} \prod_{j=1}^L \otimes |\tilde{m}_j\rangle, \quad (2.13)$$

这里, $\tilde{m}_{x_q} = 0$, 如果 $j \neq x_q$, 那么 $\tilde{m}_j = \pm 1$ 。

在零空穴 $p = 0$ 单元, 每个格点只有两个自旋状态, 即 $\tilde{m}_j = \pm 1$ 。这两个态可看作泡利矩阵 σ_j^z 的本征态。

$$S_j^z |\tilde{m}_j\rangle \Leftrightarrow \sigma_j^z |\tilde{m}_j\rangle = \tilde{m}_j |\tilde{m}_j\rangle,$$

而且, 我们直接得到如下对应:

$$\begin{aligned} S_j^+ S_j^+ |\tilde{m}_j\rangle &\Leftrightarrow 2\sigma_j^+ |\tilde{m}_j\rangle, \\ S_j^- S_j^- |\tilde{m}_j\rangle &\Leftrightarrow 2\sigma_j^- |\tilde{m}_j\rangle, \\ S_j^+ S_j^- |\tilde{m}_j\rangle &\Leftrightarrow (1 + \sigma_j^z) |\tilde{m}_j\rangle, \\ S_j^- S_j^+ |\tilde{m}_j\rangle &\Leftrightarrow (1 - \sigma_j^z) |\tilde{m}_j\rangle. \end{aligned}$$

因此, 下面的映射是有效的:

$$S_j^+ S_j^- - 1 \Rightarrow \sigma_j^z, \quad (2.14)$$

$$S_j^+ S_j^+ \Rightarrow 2\sigma_j^+, \quad (2.15)$$

$$1 - S_j^- S_j^+ \Rightarrow \sigma_j^z, \quad (2.16)$$

$$S_j^- S_j^- \Rightarrow 2\sigma_j^-. \quad (2.17)$$

从上面的映射可以看出, 在 $p = 0$ 子空间, $(S_j^x)^2$ 作用类似 $(1 + \sigma_j^x)/2$, 约化的哈密顿量为

$$H_{(0,L)} = - \sum_j J_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \frac{1}{2} \sum_j D_j (1 + \sigma_j^x). \quad (2.18)$$

这恰恰是键依赖的Ising耦合, 格点依赖的横场下的自旋1/2 模型。

如果考虑 $p = 1$ 单元, 空穴位于格点 x_1 , 相应的本征方程可以写为

$$|\Psi_{(1)}\rangle = \sum_{\tilde{m}_j} F_{\tilde{m}_1, \dots, \tilde{m}_{x_1-1}, 0, \tilde{m}_{x_1+1}, \dots, \tilde{m}_L}^{(1)} |\tilde{m}_1 \cdots \tilde{m}_{x_1-1} 0_{x_1} \tilde{m}_{x_1+1} \cdots \tilde{m}_L\rangle. \quad (2.19)$$

哈密顿量的映射相似于 $p = 0$ 情形。连接到空穴的键耦合消失, 其哈密顿量表达式变为

$$H_{(1,L)} = H'_{(0,x_1-1)} + H'_{(0,L-x_1)} - D_{x_1}, \quad (2.20)$$

这里, $H'_{(0,l)}$ 是长度为 l 自旋为1/2 横场Ising模型的哈密顿量, 由 (2.18) 定义, 但对应开放边界条件。设 $|\psi'(x_1 - 1)\rangle$ 和 $|\psi'(L - x_1)\rangle$ 分别是 $H'_{(0,x_1-1)}$ 和 $H'_{(0,L-x_1)}$ 的本征态, 那么 $H_{1,L}$ 的本征态为

$$|\Psi_{(1)}\rangle = |\psi(x_1 - 1)\rangle \otimes |0_{x_1}\rangle \otimes |\psi(L - x_1)\rangle. \quad (2.21)$$

我们可以将上述的空穴分解方案直接推广到多空穴系统。对于有 p 个空穴的系统，哈密顿量为

$$H_{(p,L)} = H'_{(0,x_1-1)} + H'_{(0,x_2-x_1-1)} + \cdots + H'_{(0,L-x_p)} - \sum_{i=1}^p D_{x_i}, \quad (2.22)$$

其中， x_{qs} 是空穴位置。相应的本征态表示为

$$\begin{aligned} |\Psi_{(p)}\rangle &= |\psi'(x_1-1)\rangle \otimes |0_{x_1}\rangle \otimes |\psi'(x_2-x_1-1)\rangle \\ &\quad \otimes |0_{x_2}\rangle \cdots \otimes |0_{x_p}\rangle \otimes |\psi'(L-x_p)\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

因此，量子Ising模型 (2.2) 的所有本征态可以通过求解一套自旋1/2的横场Ising模型而获得。对于 p 空穴单元， $S=1/2$ 横场Ising段的数目是 $p+1$ 或 p ，取决于原始链是周期链还是开放链。要注意空穴位置可以沿着链变化，因此在给定的空穴单元里，存在许多不同的空穴构型。形式上总的Hilbert空间可按下式分解为子空间的直和

$$[2 \oplus 1]^{\otimes L} = 2^{\otimes L} \oplus 2^{\otimes(L-1)} \otimes 1 \oplus 2^{\otimes(L-2)} \otimes 1^{\otimes 2} \oplus \cdots \oplus 1^{\otimes L}, \quad (2.24)$$

而 $S=1$ 系统的维度是

$$\dim \mathcal{H} = (2+1)^L = \sum_{p=0}^L 2^{L-p} C_p^L = \sum_{p=0}^L \dim \mathcal{H}_p. \quad (2.25)$$

2.3 求配分函数的迭代方法

系统的配分函数 $Z(L)$ 等于所有子系统的配分函数之和，

$$Z(L) = \sum_{p=0}^L Z(p, L). \quad (2.26)$$

$Z(p, L)$ 是 p 个空穴单元的配分函数。它可以进一步写成空穴数固定的所有可能构型的配分函数之和

$$Z(p, L) = \sum_{x_1 \cdots x_p} Z(x_1, \cdots, x_p). \quad (2.27)$$

对于开放链, 对于一个给定的空穴构型 $\{x_{qs}, p\}$, 有 $p+1$ 段(包括空穴相邻以致长度为0的段)。假设这些空穴位于格点 $\{x_1, \dots, x_p\}$ 处, 且有 $1 \leq x_1 < \dots < x_p \leq L$, 因此, 这个构型的配分函数表达式为

$$Z(x_1, \dots, x_p) = \text{Tr} \exp[-\beta(\sum_{n=1}^{p+1} H'(l_n) - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^p D_{x_n})],$$

其中, $\beta = 1/k_B T$.

将配分函数按照被空穴分离的块配分函数 $z(l_n)$ 来表达是一个直观的做法, $z(l_n)$ 即长度为 l_n 的自旋为1/2的横场Ising段。对于均匀链, $Z(L)$ 可表示为

$$Z(L) = \sum_{p=0}^L \sum_{\{l_n\}} z(l_1) \alpha z(l_2) \alpha \dots \alpha z(l_{p+1}),$$

其中, $\alpha = \exp(\beta D/2)$ 是一个空穴的配分函数。我们还可以直接得到

$$z(0) \equiv 1, \quad z(1) = 2 \cosh(\beta D/2). \quad (2.28)$$

上面的求和对象要满足条件

$$\sum_{n=1}^{p+1} l_n = L - p.$$

对于给定的空穴数目 p , 配分函数可分为两个部分: 来自于所有空穴的 α^p ; 另一个是非空穴部分, 其表达式为

$$Z^{(p)}(L - p) \equiv z(l_1) z(l_2) \dots z(l_{p+1}).$$

因此配分函数改写为

$$Z(L) = \sum_{p=0}^L \alpha^p Z^{(p)}(L - p). \quad (2.29)$$

初看之下, 即使 $h(l)$ 能被求解, 可是严格计算热力学量要计算指数多种空穴构型仍是极为困难的事情。然而, 我们发现系统的配分函数可由下面的迭代方式获取

$$Z^{(p)}(l) = \sum_{j=0}^l z(j) Z^{(p-1)}(l - j), \quad (2.30)$$

其中,

$$Z^{(-1)}(l) \equiv \delta_{l,0}, \quad Z^{(0)}(l) \equiv z(l). \quad (2.31)$$

因此配分函数可以由方程 (2.30) 从没有空穴的情形开始迭代求解。对于某一给定的 $z(l)$, 所需的计算时间随着格点尺寸平方增长而不是指数增长。这样就极大地简化了运算, 使得足够大尺寸系统 (比如, $L = 10^4$) 的热力学量可以讨论, 其有限尺寸效应可以忽略, 进而分析热力学极限行为。所能计算的 L 值实际上大于用 Bethe-Ansatz 方程所能求解的系统尺寸。

基于这种迭代, 我们可以从配分函数的基本块 $z(l_n)$ 来计算系统的配分函数。对于一个二聚化的自旋链, 有四种基本块构型, 依赖于两个端点所处位置的奇偶性。将其标示为 $z_{r_1 r_2}(l_n)$, 其中, $r_{1,2} = o, e$ 分别对应左右两个端点。无论边界的奇偶性, $S = 1/2$ 横场 Ising 段都能被精确求解。附录 B 中给出了 $z_{r_1 r_2}(l_n)$ 的详细表达。

这一迭代方法也可以直接运用到周期性边界条件情形。以均匀自旋链为例, 我们有

$$Z_{PBC}(L) = \sum_{p=0}^L \alpha^p Z_{PBC}^{(p)}(L-p). \quad (2.32)$$

相应的迭代方程是

$$Z_{PBC}^{(p)}(l) = \sum_{j=0}^l Z_{PBC}^{(p-1)}(l-j) z(j), \quad (2.33)$$

还有

$$Z_{PBC}^{(1)}(l) = (l+1) z(l).$$

其中,

$$\begin{aligned} Z_{PBC}^{(0)}(l) &= z(l), \\ Z_{PBC}^{(p)}(0) &= z(0). \end{aligned}$$

值得注意的是: 只有当 $l = L$, $z(l)$ 的特征动量 k 由周期性边界条件决定。对于 $p \neq 0$, 两个不同边界条件的配分函数 $Z^{(p)}(L-p)$ 和 $Z_{PBC}^{(p)}(L-p)$ 有如下关系式:

$$Z_{PBC}^{(p)}(L-p) = \frac{L}{p} Z^{(p-1)}(L-p). \quad (2.34)$$

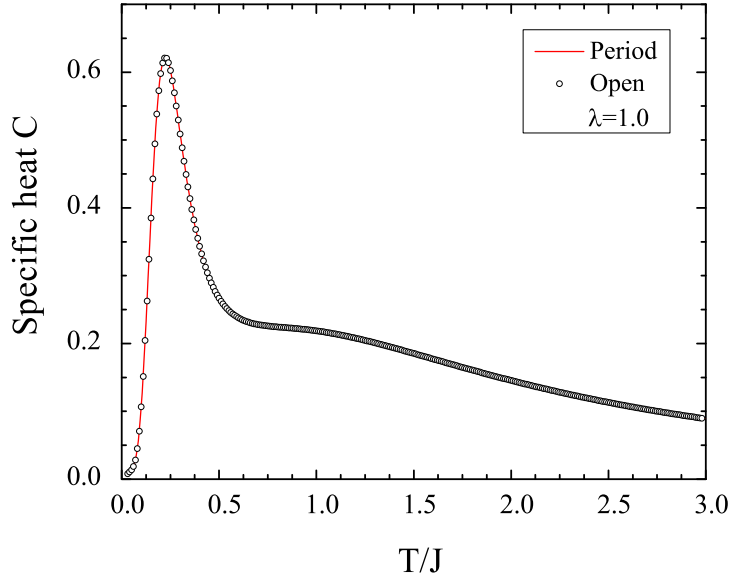


图 2.2: 两种不同边界条件下临界点 ($\lambda = 1$) 处比热随温度变化的比较。周期性边界条件用实线示意, 圆圈表示开放边界条件情形。

L/p 是长度为 L 空穴数目为 p 的系统的简并度。

在求得配分函数后, 热力学量可以通过相应的公式得到:

$$\begin{aligned} F &\equiv -T \ln Z(L), \\ \mathcal{S} &\equiv -\frac{\partial F}{\partial T}, \\ U &\equiv F + T\mathcal{S}, \\ C &= \frac{\partial}{\partial T} U. \end{aligned}$$

2.4 不同的边界条件

在上一小节里, 我们给出了配分函数在周期性边界条件和开放边界条件下的表达式, 还建立其对应关系 (2.34)。图2.2比较了不同边界条件下比热的温度依赖关系, 我们发现即使在不大的格点尺寸 $L = 100$, 两种边界条件下的结果几乎一致, 边界条件带来的影响已经可以忽略。

第三章 均匀链

对于均匀链情形，哈密顿量表达为

$$H = - \sum_{j=1}^L [JS_j^z S_{j+1}^z + 2D_x (S_j^x)^2 + D_z (S_j^z)^2], \quad (3.1)$$

其中， L 是格点长度。要注意这个表达式里 D_x 前附加了系数2，是为了下面表达简洁。我们在文章[88]中给出了这一模型的解析结果。

系统的空穴在自旋链中扮演着非磁参杂的角色，它们将系统分割成许多独立的相互作用的 $S=1/2$ 段。在一个有 p 个空穴的系统中，最多有 $p+1$ 个 $S=1/2$ 自旋段。假设这些空穴位于格点 $\{x_1, \dots, x_p\}$ 处，且有 $1 \leq x_1 < \dots < x_p \leq L$ ，那么方程 (3.1) 等价于下面的哈密顿量附加一个动力学无关常量。（设 $x_0 = 0$ 和 $x_{p+1} = L+1$ ）

$$H(\{x_i, p\}) = \sum_{n=1}^{p+1} h(l_n) + p(D_z - D_x), \quad (3.2)$$

其中，

$$h(l_n) = - \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-2} J\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-1} D_x \sigma_j^x, \quad (3.3)$$

σ_μ ($\mu = x, z$) 是泡利矩阵， $l_n = x_n - x_{n-1} - 1$ 是段长。

上一章的讨论表明：要对角化这个模型，只需要对角化由式 (3.3) 定义的每个独立段的哈密顿量。 H 的本征函数是所有段哈密顿量 $h(l_n)$ 本征波函数的直积。相应地， H 的本征值即为 $h(l_n)$ 的本征值之和。 $D_z - D_x$ 相当于调节空穴数目的化学势。因此，可以通过改变 D_z 来控制基态的空穴数目。

方程 (3.3) 定义的 $h(l)$ 是 $S=1/2$ 横场Ising模型的哈密顿量，P. Pfeuty在1970年已经给出了其严格解[12]。求解过程先由Jordan-Wigner变换约化为无相互作用的费米子模型，进一步采用Bogoliubov变换（或傅立叶变换[14]）对角化这个费米子模型，可以得到激发谱。其费米激发的色散关系为

$$\varepsilon(l) = \pm |D_x| \sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}, \quad (3.4)$$

其中, $\lambda = J/D_x$, 而 k 由下面的久期方程确定:

$$\frac{\sin(l+1)k}{\sin lk} = -\lambda. \quad (3.5)$$

这个方程具有反射对称性, 如果 k 是一个解, 那么 $-k$ 也是该方程的一个解。对于 $|\lambda| < 1$, k 在范围 $(-\pi, \pi]$ 有 $2l$ 个实根。然而, 对于 $|\lambda| > 1$, k 有 $2l-2$ 实根和两个互为相反数的复根。对应于 k 的这两个复根解的本征态是局域态, 被束缚在链的两个边界。

3.1 两种激发

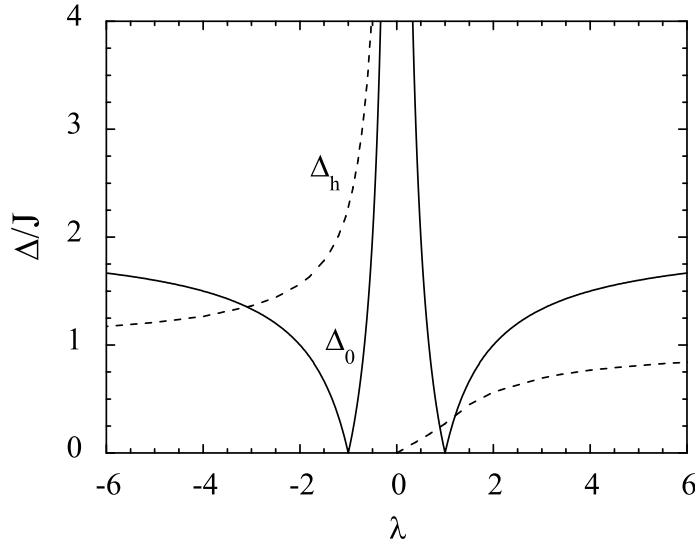


图 3.1: $D_z = 0$ 时, 激发一个费米型准粒子所需的最低能量为 Δ_0 , 而激发一个空穴的最低能量是 Δ_h 。

哈密顿量 (3.1) 包含两种激发。一个是每个片段内部的费米激发, 另一个空穴激发。除了临界点 $|\lambda| = 1$ 外, 费米激发是有能隙的, 对应的最低激发能隙为

$$\Delta_0 = 2|J| \left| \frac{1}{|\lambda|} - 1 \right|. \quad (3.6)$$

最低的空穴激发能隙对应在一个自旋链的末端产生一个空穴，表达式为

$$\Delta_h = E_0(L-1) - E_0(L) + D_z - D_x, \quad (3.7)$$

这里， $E_0(l)$ 是 $h(l)$ 的基态能量。方程(3.7)在 $\Delta_h > 0$ 时有效。在 $\Delta_h < 0$ 情形，空穴将出现在基态，空穴数目变多将系统变成许多个 $S = 1/2$ 自旋段。此时，空穴激发是无能隙的。

图3.1示意了 $D_z = 0$ 时两种激发能隙 Δ_0 和 Δ_h 对参数 λ 的依赖。 $h(L)$ 的能谱在 λ 变成 $-\lambda$ 时保持不变。因此， Δ_0 在 λ 反演下具有对称性。而空穴激发能隙是非对称的。当 $\lambda > 0$ 时，除了在临界点 $\lambda = 1$ 附近一个很窄的区域外， Δ_h 低于 Δ_0 。在临界点 $\lambda = 1$ ， $\Delta_h = 0.273J$ 。当 $\Delta_h < \Delta_0$ ，低能激发完全由空穴激发主导。

当 $D_z = 0$ 时，基态没有空穴。基态要么是 z 方向磁有序（铁磁序或反铁磁序依赖于 J 的符号），要么是没有任何长程自旋序的量子无序相。两个相在 $|\lambda| = 1$ 处的转变对应量子临界性。

通过配分函数以及其温度偏导关系，可以计算自由能及其他热力学量。然而，我们也可以通过已知的独立段借助于迭代方式来计算内能，自旋磁化率以及其他可测量。例如，内能也可以这么计算

$$U = \sum_{p=0}^L \alpha^p (p+1) \sum_{l=0}^{L-p} \frac{u(l)z(l)Z^{(p-1)}(L-p-l)}{Z(L)} + (D_z - D_x) N_h, \quad (3.8)$$

这里，

$$\begin{aligned} Z^{(-1)}(l) &\equiv \delta_{l,0}, \\ u(l) &= z^{-1}(l) \text{Tr} h(l) \exp[-\beta h(l)], \end{aligned} \quad (3.9)$$

$u(l)$ 是片段的内能， N_h 是空穴数目的热力学平均，其表达式为

$$N_h = \frac{1}{Z(L)} \sum_{p=0}^L p \alpha^p Z^{(p)}(L-p). \quad (3.10)$$

比热可由内能的一阶偏导获得。图3.2示意了不同 λ 取值下比热和空穴数目对温度偏导后的温度依赖关系。当 $T \ll \min(\Delta_0, \Delta_h)$ ，除了在量子临界点，比热随着温度的下降指数降为0。在比热指数依赖区域之上的温度范围，当 $0 < \lambda < 1.5$ 时，比热曲线呈现两个峰。这两个峰分别对应于空穴激发和费米激发，出现

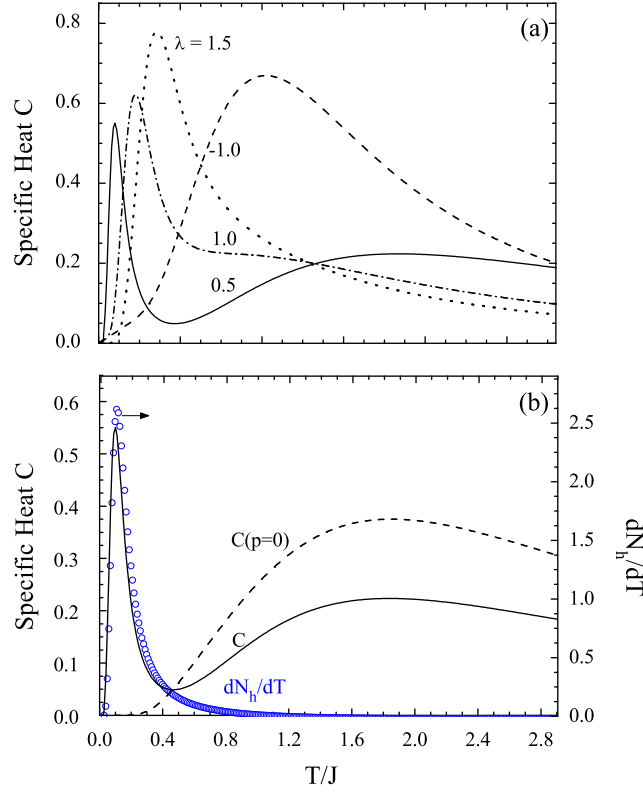


图 3.2: (a)几个不同的 λ 参数下, 比热 C 的温度依赖; (b) $S = 1$ 自旋链(3.1)的比热 C 和空穴数目的温度偏导 dN_h/dT 参数为 $\lambda = 0.5$, $J = 1$, $D_z = 0$ 。同一模型但没有空穴激发情形下的比热 $C(p = 0)$ 被画用于比较。

在 $T \sim \Delta_h$ 和 $T \sim \Delta_0$ 处。这一点从图3.2(b)看得更为清楚, 其中, $\lambda = 0.5$ 参数下比热的温度依赖与相应的没有空穴激发的比热 $C(p = 0)$ 曲线以及空穴数目的温度偏导 dN_h/dT 作了比较。对于 $\lambda = 0.5$, $\Delta_h < \Delta_0$, 低能激发由空穴激发主导, 低温比热峰源自于空穴激发。

3.2 相图

当 $\Delta_h > 0$, 即存在一个有限的空穴激发能隙时, $|\lambda| > 1$ 对应磁有序的相, $J > 0$ 为铁磁序, $J < 0$ 为反铁磁序, 反之, $|\lambda| < 1$, 系统的基态是顺磁相。当 D_z 取负值使得 Δ_h 为负时, 静态空穴将凝聚在基态。空穴凝聚相的边界线对

应 $\Delta_h = 0$ 。

我们将磁化强度定义为 $m = \sqrt{\sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle} / L$ ，图3.3中给出了磁化强度和空穴数目在 D_z 取不同值时随标度温度 T/J 变化的情形，此时， $J = 1, \lambda = 1.5$ 。当 $D_z = 0$ 时 $\Delta_h = 0.447974J$ ，这两个物理量在跨越空穴凝聚相边界线 $\Delta_h = 0$ 时取值变化不连续，也就是说，从磁有序相到空穴凝聚相是一级相变。而磁有序相到顺磁相的转变，则如同自旋为1/2的横场Ising模型是二级相变。

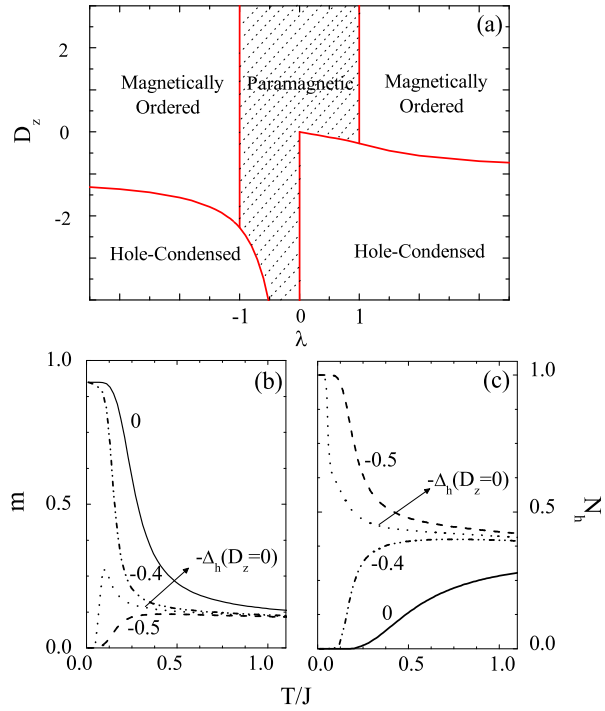


图 3.3: (a) 基态相图。(b)和(c)中， $J = 1, \lambda = 1.5, \Delta_h(D_z = 0) = 0.447974J$ 。(b)示意了磁化强度 $m = \sqrt{\sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle} / L$ 对温度的依赖关系，(c)表示在几个不同 D_z 下相应的空穴激发数目 N_h 对温度的依赖关系。

3.3 自由能

当 $D_z = 0$ ，基态对应的自旋链没有空穴，也就是说零温时此模型的量子临界行为不会受到空穴激发的影响。对于有限温情况，空穴激发会加强热起

伏并且会抑制量子临界性所能保持的最高温度。Kopp等人在论文[15]中计算了 $S = 1/2$ 横场Ising模型的标度自由能系数

$$\Phi(T) = \frac{2|J|\sqrt{|\lambda|}[F(0) - F(T)]}{T^2}, \quad (3.11)$$

这里， $F(T)$ 是自由能， $2|J|\sqrt{|\lambda|}$ 是低能元激发的速度。在临界点 $\lambda = 1$ 处，他

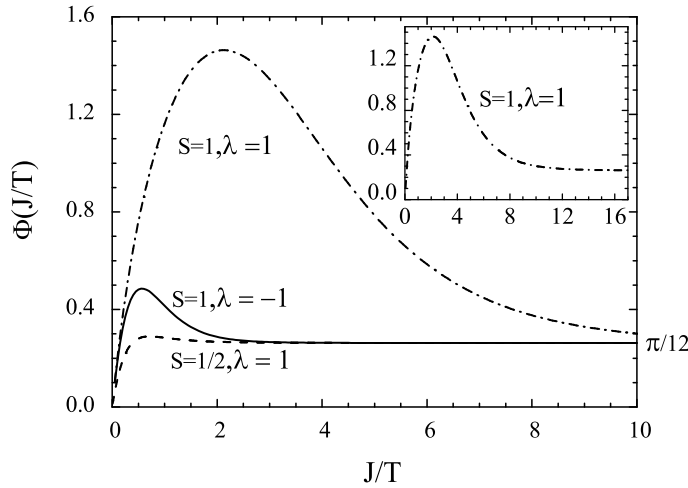


图 3.4: 图示为标度自由能 $\Phi(T)$ 对温度的依赖关系。当 $\lambda = 1$ ， $S = 1$ 时，插图示意了在更宽温度范围内 $\Phi(T)$ 随 J/T 变化情况。

们发现当 $T^* \lesssim J/2$ 时 $\Phi(T)$ 进入量子临界标度区域 $\Phi(T) \approx \Phi(0) = \pi/12$ 。这表明 $S = 1/2$ 的横场Ising模型的量子临界性能保持到相当高的温度，而一旦空穴出现，量子临界行为的持续性会被修改。图3.4比较了临界点 $\lambda = \pm 1$ 处 $S = 1$ 单离子各向异性晶场模型和相应的 $S = 1/2$ 的横场Ising模型分别对应的 $\Phi(T)$ 随比值 J/T 变化的图。当 $\lambda = 1$ ， Φ 在 $T \sim J/2$ 附近呈现一个较宽的峰，而量子临界性的持续温度 T^* 因为空穴激发被压制了差不多一个数量级。然而， $\lambda = -1$ 时的压制弱了很多，因为此时的空穴激发远大于 $J/2$ ，对低温临界性影响不大。接下来的图3.5，3.6都可以清晰地看到这一点。

图3.5示意了不同 λ 下比热的温度依赖关系。 λ 从 -1.5 变化到 1.5 ，系统经历了三个不同的相，即无序相 ($|\lambda| < 1$)，有序相 ($|\lambda| > 1$) 以及临界相 ($|\lambda| = 1$)。对比自旋 $1/2$ 横场Ising模型，比热曲线的差异在于空穴激发的贡献。 $\lambda < 0$ 的比热

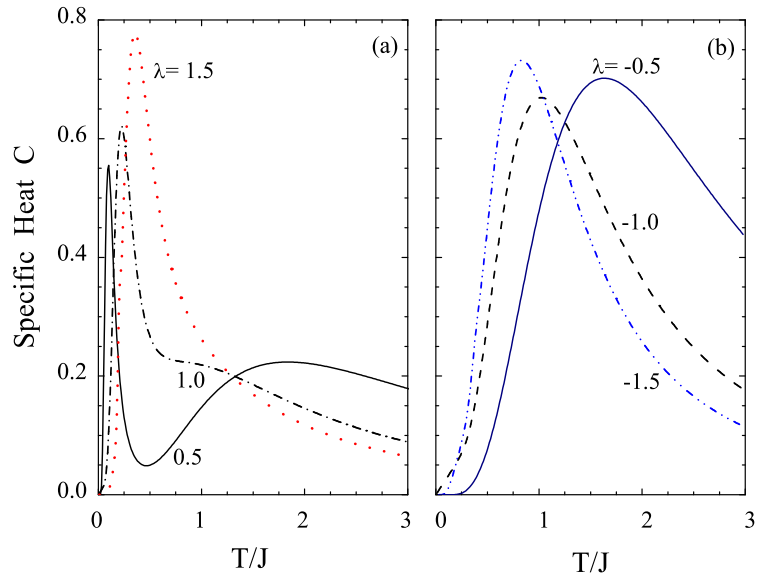


图 3.5: 比热的温度依赖(a) $\lambda > 0$; (b) $\lambda < 0$.

曲线的峰值较之于 $\lambda > 0$ 出现温度更高的位置，空穴激发对应的特征能量更大，因此对量子临界性在低温范围内的压制要弱得多。

图 3.6(a) 示意了由式 (3.10) 定义的 N_h 的温度依赖情况在低温区域，对于小的正 λ ， N_h 随着温度的升高而快速增长。然而，当 $\lambda = -1$ 时变化缓慢，因为此时的空穴激发能隙要大得多。与前面的讨论一致。

图 3.6(b)示意了三个不同的 λ 下熵随温度的变化。当 $\lambda > 0$ 时，在 $\lambda = 1$ 处发生相变。大的 λ 取值对应的空穴激发造成的熵压制更为强烈，从图3.1可以看到空穴激发能隙随着 λ 的增大而增大。对于负值 λ ，空穴激发能隙变得更大，低温熵的压制更为显著。在高温极限下，对于所有的 λ ， N_h 的值接近 $1/3$ ，这刚好是 S^z 的三个分量 $\pm 1, 0$ 等权重出现对应的值。相应地，高温极限下的熵值饱和在 $\ln 3$ 。

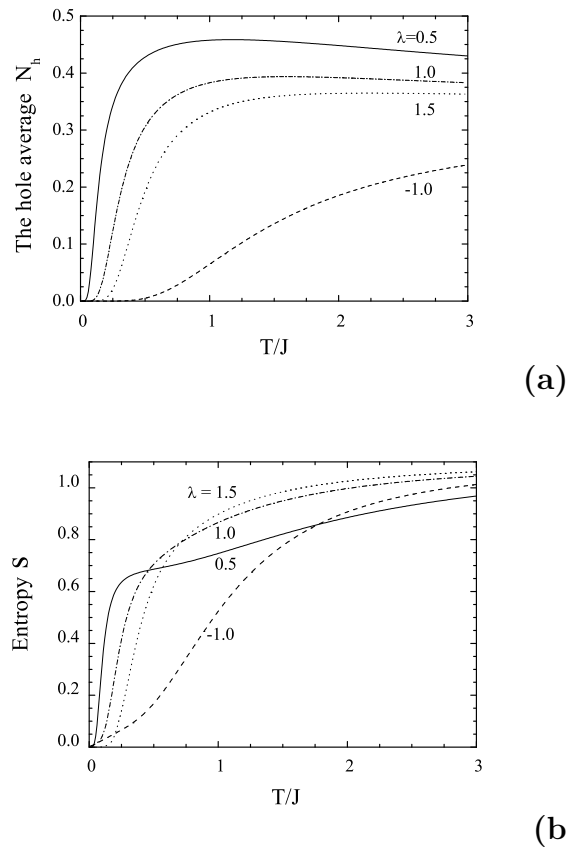


图 3.6: 三个不同参数 $\lambda = -1, 0.5, 1, 1.5$ 下的均匀链: (a) 空穴凝聚数 N_h 的温度依赖; (b) 熵 S 的温度依赖。

第四章 二聚化链

在这章里，我们先讨论一般形式哈密顿量的求解过程，指出二聚化情形在引入区分奇偶格点的波函数假设后，如同均匀情形也是可解的。在得到二聚化解后，我们讨论了其低能激发谱、基态相图、热力学性质以及关联函数。

4.1 模型求解

下面，我们从一般形式的哈密顿量出发，利用Jordan-Wigner变换将模型由费米子算符来表达，进而采用Bogoliubov变换将哈密顿量对角化，由对角化所满足的条件和准粒子算符满足的运动方程来求取系统的准粒子谱。最后的问题转化为对哈密顿量模型参数表达的 M 矩阵的对角化处理。对于大而有限的系统，数值处理是可行的。我们发现：除了均匀链，还可以解析处理二聚化情形[89]。

4.1.1 零空穴情形

$S = 1$ 模型的 $p = 0$ 单元等价于等长的由式(2.18)定义的自旋1/2 横场Ising模型。引入 $S = 1/2$ 自旋算符， $\vec{s} = \vec{\sigma}/2$ ，方程(2.18)可表示为

$$H_{(0,L)} = - \sum_j (4J_j s_j^z s_{j+1}^z + D_j s_j^x) - \frac{1}{2} \sum_j D_j. \quad (4.1)$$

将自旋算符沿着 y 轴旋转 $\pi/2$ ，方程(4.1)被改写为

$$H_{(0,L)} = - \sum_j (4J_j s_j^x s_{j+1}^x + D_j s_j^z) - \frac{1}{2} \sum_j D_j. \quad (4.2)$$

接下来采用Jordan-Wigner 变换[90]表示自旋算符

$$s_j^- = c_j K_j, \quad (4.3)$$

$$s_j^+ = K_j^\dagger c_j^\dagger, \quad (4.4)$$

$$K_j = \exp \left(-i\pi \sum_{l=1}^{j-1} c_l^\dagger c_l \right) \quad (4.5)$$

这里, c_j 和 c_j^\dagger 是费米子算符, 方程 (4.2) 变为

$$H_{(0,L)} = - \sum_j J_j \left(c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_j^\dagger c_{j+1} - c_j c_{j+1}^\dagger - c_j c_{j+1} \right) - \sum_j D_j c_j^\dagger c_j + H_{PB}, \quad (4.6)$$

其中,

$$H_{PB} = J_L (c_L^\dagger c_1^\dagger + c_L^\dagger c_1 - c_L c_1^\dagger - c_L c_1) (K_{L+1} + 1) \quad (4.7)$$

这项只有在周期性边界条件下才出现, 而且在热力学极限下可被忽略, 那么哈密顿量变为

$$H_{(0,L)} = \sum_{j,l} \left[c_j^\dagger A_{jl} c_l + \frac{1}{2} \left(c_j^\dagger B_{jl} c_l^\dagger - c_j B_{jl} c_l \right) \right], \quad (4.8)$$

其中,

$$\begin{aligned} A_{jl} = A_{l,j} &= -D_j \delta_{j,l} - J_j \delta_{j+1,l} - J_{j-1} \delta_{j-1,l}, \\ B_{jl} = -B_{lj} &= -J_j \delta_{j+1,l} + J_{j-1} \delta_{j-1,l}. \end{aligned}$$

方程 (4.8) 可由Bogoliubov 变换对角化。

$$\eta_k = \sum_j (g_{kj} c_j + h_{kj} c_j^\dagger), \quad (4.9)$$

$$\eta_k^\dagger = \sum_j (g_{kj}^* c_j^\dagger + h_{kj}^* c_j), \quad (4.10)$$

其中, η_k 和 η_k^\dagger 是准粒子算符, 满足费米子的反对易关系

$$\{\eta_k, \eta_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}. \quad (4.11)$$

式中 g_{kj} 和 h_{kj} 构成么正矩阵。对角化后, $H_{(0,L)}$ 表示成

$$H_{(0,L)} = \sum_k \Lambda(k) \eta_k^\dagger \eta_k + C, \quad (4.12)$$

上式中附加常数即 (4.8) 的迹。

$$C = \frac{1}{2} \sum_j A_{jj} - \frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k).$$

k 值由运动方程决定:

$$[\eta_k, H] - \Lambda(k)\eta_k = 0. \quad (4.13)$$

将方程组 (4.9) 和 (4.10) 代入式 (4.13), 可以得到

$$\Lambda(k)g_{kl} = \sum_j (g_{kj}A_{jl} - h_{kj}B_{jl}), \quad (4.14)$$

$$\Lambda(k)h_{kl} = \sum_j (g_{kj}B_{jl} - h_{kj}A_{jl}). \quad (4.15)$$

这也可以表示为

$$\Phi_k(A - B) = \Lambda(k)\Psi_k, \quad (4.16)$$

$$\Psi_k(A + B) = \Lambda(k)\Phi_k, \quad (4.17)$$

其中,

$$(\Phi_k)_j = g_{kj} + h_{kj}, \quad (4.18)$$

$$(\Psi_k)_j = g_{kj} - h_{kj}. \quad (4.19)$$

$\Lambda(k)$ 的本征值由下面的方程求解,

$$M_{jl}\Phi_{kl} = \Lambda^2(k)(\Phi_k)_j, \quad (4.20)$$

$$M_{jl}\Psi_{kl} = \Lambda^2(k)(\Psi_k)_j, \quad (4.21)$$

这里,

$$M = (A - B)(A + B) \quad (4.22)$$

是个对称矩阵, 其矩阵元为

$$M_{jl} = (D_j D_l + 4J_{j-1} J_{l-1})\delta_{jl} + 2D_l J_{j-1} \delta_{j-1,l} + 2D_j J_{l-1} \delta_{j,l-1}. \quad (4.23)$$

因此只要对角化 M 矩阵, 问题便得以解决. 这个简化使得大而有限的系统 (有任意的 J_j , D_j^a , $a=x, y, z$) 可以通过对 M 矩阵的数值对角化来求解. 在某些特殊的情形, 对于任意 L 获得系统的精确解析解也是可行的. 最为简单的情形自然是均匀链, $J_j = J$, $D_j = D$, 这正好是均匀的 $S = 1/2$ 横场Ising模型.

我们将考虑另一种可解情形，即键和格点都有二聚化。二聚化被施加于键耦合和各向异性项：

$$J_{2j-1} = J_1, \quad J_{2j} = J_2, \quad (4.24)$$

$$D_{2j-1} = D_1, \quad D_{2j} = D_2. \quad (4.25)$$

M 矩阵依赖于边界条件的选取（周期性或开放边界）和链长 L 的奇偶性。下面考虑偶数 L 及周期链情形。其他情况的 M 矩阵的对角化参见附录B。

对于周期性的自旋链， M 矩阵为

$$M = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 & b_2 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_1 & b_1 \\ b_2 & 0 & 0 & \cdots & b_1 & a_2 \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

其中，

$$\begin{aligned} a_1 &= D_1^2 + 4J_2^2, \\ b_1 &= 2D_1J_1, \\ a_2 &= D_2^2 + 4J_1^2, \\ b_2 &= 2D_2J_2. \end{aligned} \quad (4.27)$$

要对角化这个矩阵，我们假设：

$$\begin{aligned} (\Phi_k)_{2j} &= A_e \exp[ik(2j)], \\ (\Phi_k)_{2j+1} &= A_o \exp[ik(2j+1)]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

幅度 A_o 和 A_e 的比值标记为 τ ， $\tau = A_o/A_e$ 是二聚化强度量。从本征方程可得

$$\tau = \frac{a_1 - a_2 \pm W}{2[b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik}]}, \quad (4.29)$$

其中，

$$W \equiv \sqrt{(a_2 - a_1)^2 + 4(b_1 - b_2)^2 + 16b_1b_2 \cos^2 k}. \quad (4.30)$$

对于均匀情形, $a_1 = a_2$, $b_1 = b_2$, 则 $\tau = \pm 1$ 。

波函数满足周期性边界条件, 由此可得 k 值的量子化形式

$$e^{ik(j+L)} = e^{ikj}, \quad (4.31)$$

于是,

$$k = \frac{2\pi m}{L}, \quad (m = -L/2, \dots, L/2 - 1). \quad (4.32)$$

本征值 $\Lambda^2(k)$ 由下式确定:

$$\Lambda^2(k) = \Gamma^2 \pm \frac{W}{2}, \quad (4.33)$$

其中,

$$\Gamma^2 = \frac{a_1 + a_2}{2} = \frac{1}{2}(D_1^2 + D_2^2 + 4J_1^2 + 4J_2^2).$$

一旦 Φ_k 得解, 波函数 Ψ_k 就可以由方程 (4.21) 确定

$$\Psi_{kj} = \frac{1}{\Lambda(k)}(-D_j \Phi_{kj} - 2J_j \Phi_{kj+1}). \quad (4.34)$$

当 $\Lambda(k) = 0$ 时, $\Psi_{ki} = \pm \Phi_{ki}$ 。

由方程 (4.33), 我们得到四支准粒子激发:

$$\Lambda_1(k) = \Gamma \sqrt{1 + \sqrt{1 - P + Q \cos 2k}}, \quad (4.35)$$

$$\Lambda_2(k) = \Gamma \sqrt{1 - \sqrt{1 - P + Q \cos 2k}}, \quad (4.36)$$

$$\Lambda_3(k) = -\Gamma \sqrt{1 + \sqrt{1 - P + Q \cos 2k}}, \quad (4.37)$$

$$\Lambda_4(k) = -\Gamma \sqrt{1 - \sqrt{1 - P + Q \cos 2k}}, \quad (4.38)$$

其中, P 和 Q 定义为

$$P\Gamma^4 = D_1^2 D_2^2 + 16J_1^2 J_2^2,$$

$$Q\Gamma^4 = 8D_1 D_2 J_1 J_2.$$

引入二聚化后, 原胞常数变为原来的两倍, 周期由 2π 变为 π , 能谱 $\Lambda_a(k)$ ($a = 1, \dots, 4$) 在 $k \rightarrow k + \pi$ 保持不变, 图示为一个扩展的能谱, 不妨将 k 划分为如下两个区域: (1) $k \in [-\pi/2, \pi/2]$; (2) $k \in [-\pi, -\pi/2] \cup [\pi/2, \pi]$ 。为方便与均匀链 ($J_1 = J_2$, $D_1 = D_2$) 情形的比较, 我们将能谱 $\Lambda_{1,3}(k)$ 的 k 取值选在区域 (1), 能谱 $\Lambda_{2,4}(k)$ 的 k 取值选在区域 (2)。图4.1 给出了二聚化系统的典型色散关系。

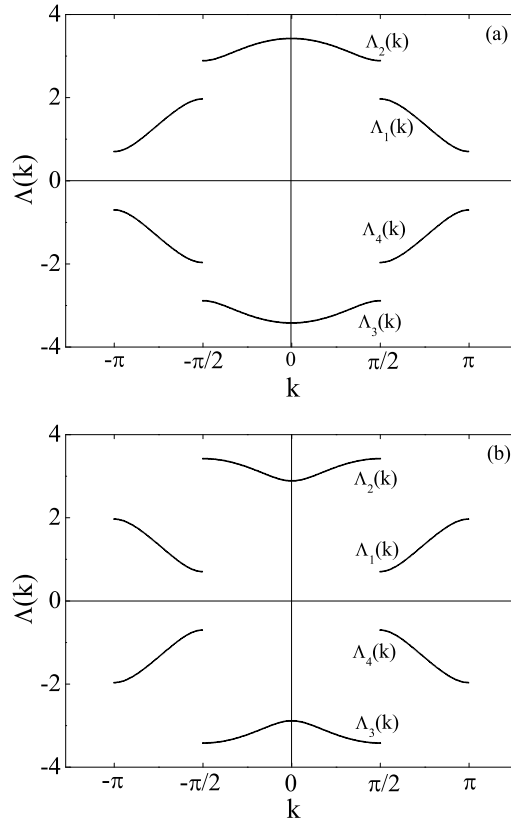


图 4.1: $S = 1$ 量子自旋链的费米型激发谱(a) $Q > 0$, $J_1 = 1.01$, $J_2 = 1$, $D_1 = 1.82$, $D_2 = 0.9$; (b) $Q < 0$, $J_1 = 1.01$, $J_2 = 1$, $D_1 = 1.82$, $D_2 = -0.9$.

4.1.2 单空穴系统

在 $p = 1$ 单元, 空穴破坏了与之相连的两个 J 键耦合。因此, 在周期性边界条件下, 长度为 L 的单空穴链等同于开放边界条件下长度为 $(L - 1)$ 的无空穴链。讨论与空穴所处位置无关, 假定空穴位于点 L 处, 那么 $N_0 = 1$ 系统的哈密顿量为

$$H_{(1,L)} = \tilde{H}_{(0,L-1)} - D_L, \quad (4.39)$$

其中, $\tilde{H}_{(0,L-1)}$ 与定义式 (4.6) 类似, 不同的是现在对应开放边界条件, 即没有 H_{PB} 项。这个哈密顿量也可以由 Jordan-Wigner 变换对角化。对角化 $\tilde{H}_{(0,L-1)}$ 的手续与前面处理 $H_{(0,L)}$ 一样。差别在于长度变为 $(L-1)$ 且没有边界项。 $\tilde{H}_{(0,L-1)}$ 由方程 (4.8) 右边定义的 Jordan-Wigner 费米算符来表达。其本征值和本征方程

也由方程 (4.20) 和 (4.21) 决定, M 现在是一个 $(L-1) \times (L-1)$ 的矩阵:

$$M_{(L-1) \times (L-1)} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_2 & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_2 & a_1 \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

相比于 (4.26), 右顶和左底的两个边界项变为0。

由于开放边界条件的选取, 系统不再是平移不变的。因此本征函数的平面波假设 (方程 (4.28)) 不再有效。除了入射波 e^{ikj} 外, 反射波 e^{-ikj} 也要被考虑其中。为求解本征方程, 我们做如下假设:

$$\begin{aligned} \Phi_{2j}(k) &= A_e (e^{2ikj} - t_e e^{-2ikj}), \\ \Phi_{2j+1}(k) &= A_o (e^{ik(2j+1)} - t_o e^{-ik(2j+1)}). \end{aligned} \quad (4.41)$$

将这一假设代入方程 (4.20), 我们发现 $\tau = A_o/A_e$ 和本征值 $\Lambda(k)$ 与 $p=0$ 情形相同, 分别由方程 (4.29) 和 (4.33) 决定。反射系数 t_o 和 t_e 表达如下:

$$t_e = \frac{e^{iLk}}{e^{-iLk}}, \quad (4.42)$$

$$t_o = \frac{(b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik}) e^{iLk}}{(b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik}) e^{-iLk}}. \quad (4.43)$$

于是我们得到关于 k 的久期方程:

$$\begin{aligned} 2b_2 [b_1^2 + b_2^2 + 2b_1 b_2 \cos(2k)] \sin Lk = \\ (a_0 - a_1) [b_1 \sin(L-2)k + b_2 \sin Lk] \times [(a_1 - a_2) \pm W]. \end{aligned} \quad (4.44)$$

这一方程在 $k \rightarrow -k$ 变换下是对称的。因此我们只需考虑正根 (参见附录B)。

当 $b_1 = b_2 = b$ ($D_1 J_1 = D_2 J_2$) 时, 矩阵 M 具有中心反射对称性。此时, 两个反射系数相等, $t_o = t_e = t$, 其久期方程简化为:

$$\frac{\sin Lk}{\sin(L-2)k + \sin Lk} = \frac{(a_0 - a_1) [(a_1 - a_2) \pm W]}{8b^2 \cos^2 k}. \quad (4.45)$$

4.1.3 多空穴系统

前面的讨论很容易推广到多空穴情形。空穴破坏了Ising耦合，产生一系列自旋1/2横场Ising段。段的数目即空穴数目 p （包含长度为0的块）。

如果空穴位于 (x_1, x_2, \dots, x_p) ，那么相应的哈密顿量表达为

$$H_{(p,L)}(x_1 \cdots x_p) = \sum_{n=1}^p H'(l_n) - \sum_{n=1}^p D_{x_n}, \quad (4.46)$$

这里， $l_n = x_n - x_{n-1} - 1$ （考虑周期性边界条件）， $H'(l_n)$ 是第 n 段的哈密顿量

$$\begin{aligned} H'(l_n) = & - \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-2} J_{j,j+1} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \\ & - \frac{1}{2} \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-1} D_j \sigma_j^x - \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-1} \frac{D_j}{2}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

$H'(l_n)$ 可以由小节4.1.2中的方法对角化。

$$H'(l_n) = \sum_k \Lambda(k) \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right) - \sum_{j=x_{n-1}+1}^{x_n-1} \frac{D_j}{2}, \quad (4.48)$$

这里， k 是满足久期方程 (4.44) 长度为 $L = l_n$ 链的准动量。某一段的两个末端（或空穴）所处格点的奇偶性，有四种不同的情况（附录B中有详细讨论）。

4.2 低能谱

4.2.1 $p = 0$ 单元的费米激发

我们讨论了用Jordan-Wigner 变换来对角化哈密顿量。对于由方程 (4.35-4.38) 定义的四支准粒子能谱，在基态能量负支 ($a = 3, 4$) 被填满。

在 $p = 0$ 单元，基态表示为

$$|\psi_0\rangle = \prod_{kk'} \eta_{3,k}^\dagger \eta_{4,k'}^\dagger |0\rangle, \quad (4.49)$$

其中， $\eta_{a,k}^\dagger$ ($a = 3, 4$) 是第 a 支激发谱的费米子算符。 k 和 k' 分别为第3和4支的允许动量。相应的基态能为

$$E_0(p = 0, L) = \frac{1}{2} \sum_k \Lambda_3(k) + \frac{1}{2} \sum_{k'} \Lambda_4(k') \quad (4.50)$$

加上一个常数。

系统具有粒子空穴对称性。 $\Lambda_3(k)$ 能量低于 $\Lambda_4(k')$ ，最低的能量激发可由算符 η_2^\dagger 或 η_4 施加于基态而获得，即在费米面上产生一个粒子或在费米面下湮灭一个空穴。相应的激发能表达为 $\Lambda_2(k') (= -\Lambda_4(k'))$ 。

当 $D_1 D_2 J_1 J_2 > 0$ 时，最低的能量激发出现在 $k = 0$ 处。我们标记

$$\delta_{\pm} = \sqrt{|D_1 D_2 \pm 4J_1 J_2|}, \quad (4.51)$$

则最低的激发能隙为

$$\Delta_0 = \sqrt{\Gamma^2 - \sqrt{\Gamma^4 - \delta_-^4}}. \quad (4.52)$$

当 $|D_1| = |D_2| = |D|$ 且 $|J_1| = |J_2| = |J|$ 时，我们有

$$\Delta_0 = \sqrt{D^2 + 4J^2 - 4|DJ|} = 2|J| \left| \frac{1}{|\lambda|} - 1 \right|, \quad (4.53)$$

其中， $\lambda = 2J/D$ 。

第支能谱的带宽分别是：

$$\begin{aligned} W_1 &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Gamma^2 + \sqrt{\Gamma^4 - \delta_-^4}} - \sqrt{\Gamma^2 + \sqrt{\Gamma^4 - \delta_+^4}} \right), \\ W_2 &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Gamma^2 - \sqrt{\Gamma^4 - \delta_+^4}} - \sqrt{\Gamma^2 - \sqrt{\Gamma^4 - \delta_-^4}} \right). \end{aligned}$$

我们将能量支1和2间的最小能隙定义为二聚化能隙，其表达式为

$$\Delta_d = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Gamma^2 + \sqrt{\Gamma^4 - \delta_+^4}} - \sqrt{\Gamma^2 - \sqrt{\Gamma^4 - \delta_+^4}} \right). \quad (4.54)$$

图4.2 和4.3 示意了对于几个给定的 D_1 取值费米激发能 Δ_0 和二聚化能隙 Δ_d 如何随 D_2 变化。从图4.2可知，在临界点 ($D_1 D_2 = 4J_1 J_2$) 处，能隙为0。从图4.3可以看到，当二聚化链变到均匀情形，二聚化能隙消失。

4.2.2 单空穴激发

对于一个均匀自旋链， $p = 1$ 单元的基态是 L 重简并的，因为空穴可以位于链中任意位置。二聚化出现后，基态的简并度变成 $L/2$ 。与没有空穴的情形相

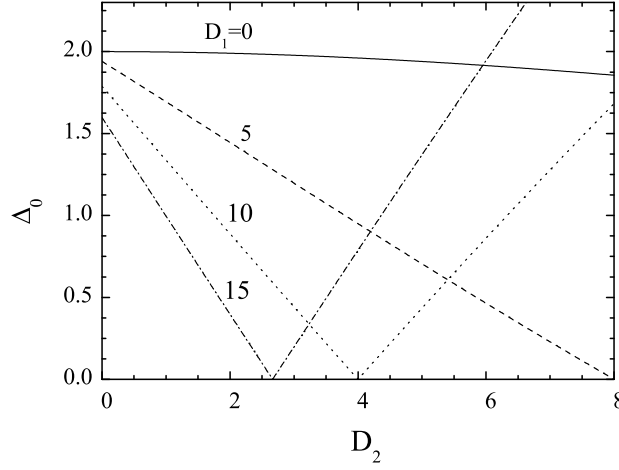


图 4.2: 费米激发能隙 Δ_0 随 D_2 的变化。 $J_1 = 10$, $J_2 = 1$ 。

似，准粒子能谱也可以由波函数假设求取。准动量 k 由开放边界条件下相应的久期方程决定。有效的格点长度是 $L - 1$ 。

在基态，第3和4支能带填满。相应的能量为

$$E_0(1, L) = \frac{1}{2} \sum_k \Lambda_3(k) + \frac{1}{2} \sum_{k'} \Lambda_4(k') - \frac{1}{2} \max(D_1, D_2),$$

附加一个常数。最后一项 $-\max(D_1, D_2)/2$ 来源于空穴可位于奇或偶格点处。

没有纵向各向异性时， $D_z = 0$ ，基态在 $p = 0$ 单元。除了费米型激发外，改变系统的空穴数目会带来空穴激发这个特征能量。最小的空穴激发能是

$$\Delta_h = E_0(1, L) - E_0(0, L). \quad (4.55)$$

图4.4示意了 Δ_h 随 D_2 变化的典型行为。图中， $J_1 = 10$, $D_1 = 2.0$ ，三个不同的 J_2 值情形被比较。

在均匀系统， $D_1 = D_2 = D$ ， $J_1 = J_2 = J$ ，能谱表达式为

$$\Lambda(k) = -|D| \sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}. \quad (4.56)$$

在临界点 $\lambda = 2J/D = 1$ ， Δ_h 可以显式计算，周期性边界条件下的准动量为

$$k = \frac{2m\pi}{L}, \quad (m = -L/2, \dots, L/2 - 1)$$

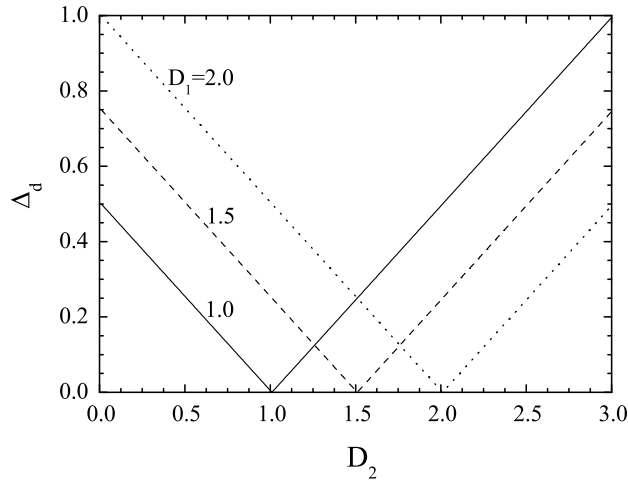


图 4.3: 二聚化能隙 Δ_d 随 D_2 的变化, $J_1 = J_2 = 1.0$ 。

而

$$k = \frac{2m\pi}{2L+1}, \quad (m = 1, \dots, L)$$

对应开放边界条件。开放边界条件下的空穴激发的表达式是

$$\begin{aligned} \Delta_h &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2m\pi}{2L-1}\right) - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^L \Lambda\left(\frac{2m\pi}{2L+1}\right) - \frac{1}{2}D \\ &\approx 0.136D \end{aligned} \quad (4.57)$$

如果初始链是周期的, 那么临界点的空穴激发能隙为

$$\begin{aligned} \Delta_h &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2m\pi}{2L-1}\right) - \frac{1}{2} \sum_{m=-L/2}^{L/2-1} \Lambda\left(\frac{2m\pi}{L}\right) - D/2 \\ &\approx 0.318D. \end{aligned} \quad (4.58)$$

不同边界条件下的 Δ_h 的差异被定义为表面能。

4.2.3 多空穴激发

可以将上述讨论直接拓展到多空穴激发情形。我们不妨先从 $p = 2$ 开始。 $p = 2$ 单元的本征函数是两个 $p = 1$ 单元(长度分别为 $x-1$ 和 $L-x-1$) 波函数的直积。这里, $x \equiv x_2 - x_1$ 是位于格点 x_1, x_2 处的两个空穴间距。 $p = 2$ 单

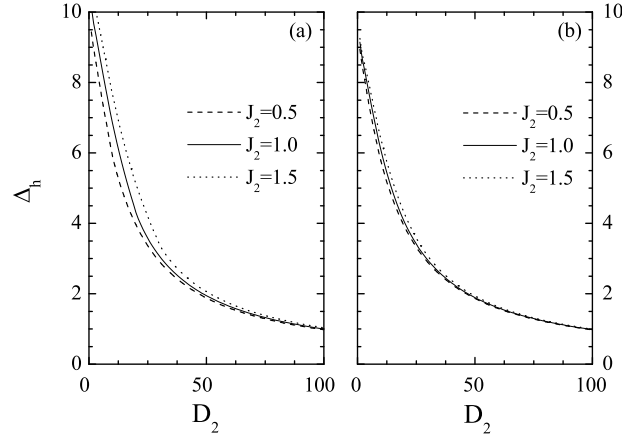


图 4.4: 空穴激发能隙 Δ_h 随 D_2 的变化情况。(左图) 周期性边界条件; (右图) 开放边界条件。图中, $J_1 = 10$, $D_1 = 2.0$ 。

元的最低能量态, 两个空穴将靠在一起降低表面能。 $p = 2$ 单元的最低空穴激发能是

$$\Delta_h^{(2)} = E_0(2, L) - E_0(0, L). \quad (4.59)$$

对于均匀自旋链, 在开放边界条件下, 临界点 $\lambda = 1$ 处的两空穴激发能为

$$\begin{aligned} \Delta_h^{(2)} &= \sum_{m=1}^{L-2} \Lambda\left(\frac{2m\pi}{2L-3}\right)/2 - \frac{1}{2} \sum_{m=1}^L \Lambda\left(\frac{2m\pi}{2L+1}\right) - D \\ &\approx 0.273D. \end{aligned} \quad (4.60)$$

对于 $p > 2$ 的单元, 可以进一步发现 p 单元的最低能量态是对应所有空穴聚在一起的结构。在均匀系统中, 久期方程已知为

$$\frac{\sin(L-p+1)k}{\sin(L-p)k} = -\lambda. \quad (4.61)$$

当 $p \ll L$ 且 $L \rightarrow \infty$ 时, 有限尺寸效应可以忽略, 开放边界条件下, 存在如下的关系式:

$$\Delta_h^{(p)} \approx p\Delta_h. \quad (4.62)$$

表格4.1 示意了开放边界条件下 p 个空穴 ($p = 1, 2, 3$) 的激发能。

表 4.1: 开放边界条件下, 均匀系统中的空穴激发能隙随 λ 的变化情况。 $J = 1.0$, $L = 500$ 。

λ	Δ_h/J	$\Delta_h^{(2)}/J$	$\Delta_h^{(3)}/J$
-5.0	1.21003	2.42005	3.63008
-4.0	1.26569	2.53137	3.79706
-3.0	1.36131	2.72262	4.08393
-2.0	1.56354	3.12709	4.69063
-1.0	2.27324	4.54643	6.81968
0	0	0	0
0.5	0.127089	0.254178	0.381266
1.0	0.273236	0.546453	0.819679
1.5	0.447951	0.895902	1.34385
2.0	0.563544	1.12709	1.69063
3.0	0.694643	1.38929	2.08393
4.0	0.765687	1.53137	2.29706
5.0	0.810025	1.62005	2.43008

4.2.4 相图

二聚化出现时, 如前面所讨论能带进一步发生劈裂。而且, 二聚化将改变量子临界点的位置。临界点由零能隙条件决定, 即 $\Delta_0 = 0$ 。按照方程 (4.52), 临界点有下面的方程确定

$$D_1 D_2 = \pm 4 J_1 J_2. \quad (4.63)$$

在临界点附近, 低能的费米激发近似为

$$\Lambda(k) = \frac{4\sqrt{2}J_1 J_2}{\Gamma} |\sin k|, \quad (4.64)$$

这里, 如果 $D_1 D_2 = 4 J_1 J_2$, k 靠近0; 如果 $D_1 D_2 = -4 J_1 J_2$, k 则接近 $\pi/2$ 。因此, 低能激发能由实的Majorana费米子场描述, 具有Ising临界性其中心荷为 $c = 1/2$ 。

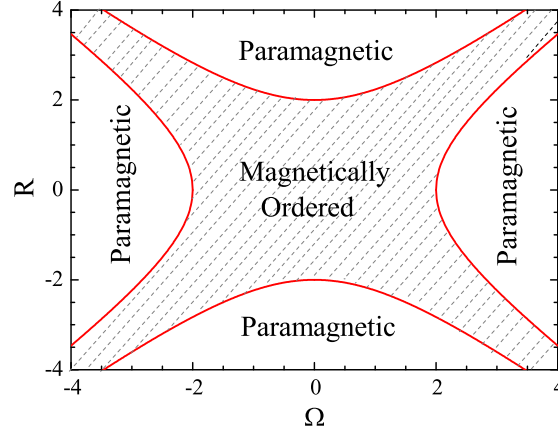


图 4.5: $S = 1$ 量子Ising模型的基态相图。

为描述基态相图，先引入两个参量（假设 $J_1 J_2 > 0$ ）：

$$R = \frac{D_1 + D_2}{2\sqrt{J_1 J_2}},$$

$$\Omega = \frac{D_1 - D_2}{2\sqrt{J_1 J_2}},$$

其中，与均匀情况相似， R 代表 D_j 和 J_j 之间的竞争，而 Ω 是二聚化强度量。当系统回到均匀情形，竞争参数 $R = 2/\lambda$ ，二聚化参数 $\Omega = 0$ 。因此临界条件 $D_1 D_2 = \pm 4 J_1 J_2$ 和相应的相变可以在参数空间 (R, Ω) 描述。下面，按照不同 $|\Omega|$ 的取值分别讨论。

(1) 在弱二聚化区域， $|\Omega| < 2$ ，存在两个对称的临界点 $\pm R_c$ ，还有

$$R_c = \sqrt{\Omega^2 + 4}.$$

当 $|R| < R_c$ 时，基态是磁有序的。

(2) 在强二聚化区域， $|\Omega| > 2$ ，存在两对对称的临界点 $\pm R_{c1}, \pm R_{c2}$ ，且有

$$R_{c1} = \sqrt{\Omega^2 + 4}, R_{c2} = \sqrt{\Omega^2 - 4}.$$

磁有序相出现在 $R_{c2} < R < R_{c1}$ 区域。

(3) 当 $|\Omega| = 2$ ($R_{c2} = 0$)，存在三个临界点，取值分别为 $\pm 2\sqrt{2}, 0$ 。当 $|R| > 2\sqrt{2}$ ，基态是磁无序的，而 $|R| < 2\sqrt{2}$ 时，是磁有序状态（铁磁或

反铁磁依赖于 $J_{1,2}$ 的符号)。注意 $R = 0$ 点对应一个单离子各向异性的交错链, $(D, -D, \dots, D, -D)$ 。 $D = \pm 2\sqrt{J_1 J_2}$ 即为临界点。

相变与二聚化强度密切相关。如图4.5所示, 随着二聚化 $|\Omega|$ 由弱变强, 系统的临界点 R_c 数目经历序列2-3-4。

4.3 热力学性质

在这个小节里, 我们来研究 $S = 1$ 量子Ising模型的热力学性质。前面已经说明, 不仅模型的基态可解, 其激发态也是可以求解的。然而, 要去计算热力学量, 要实现所有可能构型的求和仍然不易。在文章[88]中, 我们提出了一种迭代方法去计算配分函数, 这一方法极大地简化了计算克服了求和困难, 使得我们可以对热力学性质进行讨论。

4.3.1 二聚化自旋链

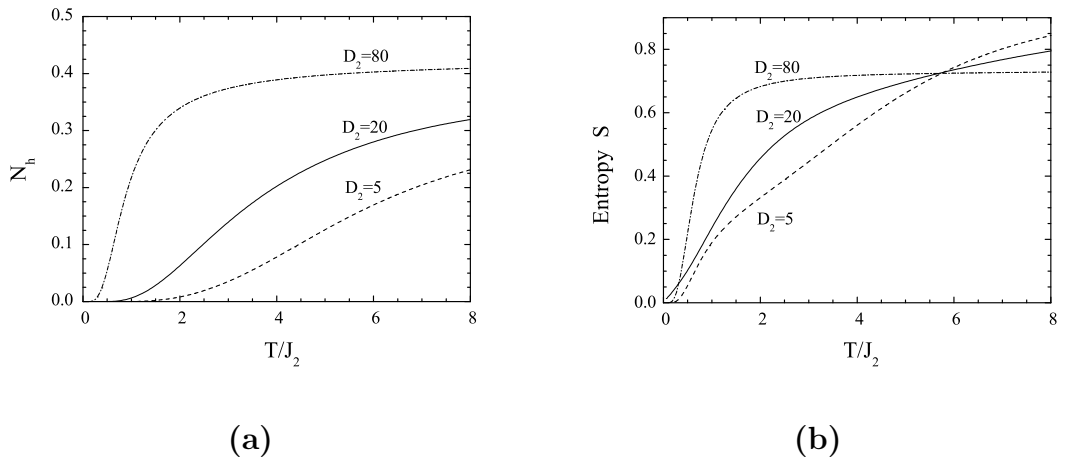


图 4.6: 二聚化自旋链中三个不同的相: $D_1 D_2 = J_1 J_2$ (虚线), $4 J_1 J_2$ (实线), $16 J_1 J_2$ (虚点线), 其他参数为 $J_1 = 10$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$ 。(a) 空穴浓度在不同相中的温度依赖; (b) 熵 S 在不同相中的温度依赖。

迭代方法同样适用于二聚化情形。图4.6-4.7 示意了热力学量熵 S , 平均空穴浓度 N_h 以及比热 C 在有序、无序、临界相的温度依赖关系。空穴浓度随 D_2 的增加而增加, 在于空穴激发特征能隙随 D_2 增加而减小。当 D_2 分别取值5, 20, 80时, 相应地, $\Delta_h = 7.450, 3.902, 1.202$ 。

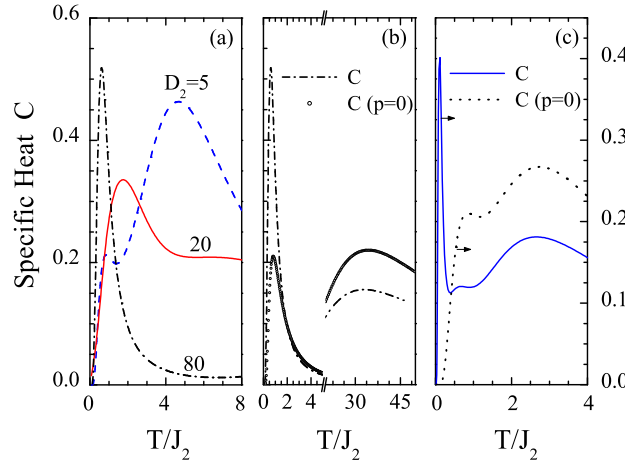


图 4.7: (a) 三组参数下的比热行为: $D_1 D_2 = J_1 J_2$, $D_2 = 5$ (虚线示意), $D_1 D_2 = 4J_1 J_2$, $D_2 = 20$ (实线), $D_1 D_2 = 16J_1 J_2$, $D_2 = 80$ (虚点线), 其他参数为 $J_1 = 10$, $J_2 = 1$ 和 $D_1 = 2$; (b) 比热 C (虚点线) 和相应的 $p = 0$ 子系统 (圆圈) 的比热 $C(p=0)$ 图像。这里, $D_1 D_2 = 16J_1 J_2$, $J_1 = 10$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 80$ 。 (c) 比热 C (实线) 和 $C(p=0)$ (点线) 比较。参数为 $J_1 = J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 7$ 。

系统的低温行为由空穴激发和费米激发决定, 而二聚化则影响着高温行为。二聚化的特征能量远大于空穴激发和费米激发能。这一特征从图4.7(b)和(c)可以看得非常清楚。(b)中圆圈示意的峰值位置相距很远, 二聚化的特征能量很大, 用了分段取值才将两个比热峰值靠近, 虚点线有空穴激发, 所以低温比热峰值尖锐。(c)中参数为 $J_1 = J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 7$ 。三种不同的特征能量分离, $\Delta_h < \Delta_0 < \Delta_d$, 相应地, 比热呈现三峰结构。第一个尖峰对应 $T \sim \Delta_h$ (此处涉及空穴所处的奇偶格点的差异, 将其中更小的空穴能隙定义为 Δ_h), 来自于空穴激发贡献。另两个在 $T \sim \Delta_0$ 和 $T \sim \Delta_d$ 处, 分别对应于费米和二聚化激发。没有空穴型激发, 图4.7(c)中点线示意的比热图形只有两个峰。

图4.8示意了二聚化自旋链在临界点 $D_1 D_2 = 4J_1 J_2$ 处的标度自由能。与均匀自旋链[88]相似, 可以看到临界区域被空穴激发压制。图中比较了 $S = 1$ 时两组不同参数(i) $J_1 = 3$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 6$; (ii) $J_1 = 10$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 20$ 对于自旋 $S = 1/2$ 情形临界性的改变。前者的空穴能隙远小于后者, 对低温的影响更为显著, 因此, 前者对临界性的压制更强, 这与[88]中的讨论一致。

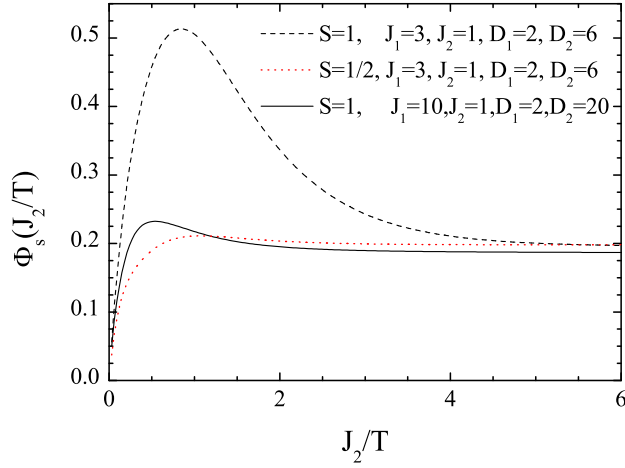


图 4.8: 二聚化系统在临界点出的标度自由能。参数为 $D_1 D_2 = 4J_1 J_2$, $J_2 = 1D_1 = 2$ 。

4.3.2 空穴凝聚: 非零 D_z

现在我们考虑 D_z 不为零的情形。在 $S = 1$ 的量子 Ising 模型中, D_z 扮演着空穴的化学势这个角色。非零 D_z 时 p 空穴系统的基态能量与 $D_z = 0$ 情形的关系如下:

$$E_0^{(p)}(D_z) = E_0^{(p)}(0) + pD_z, \quad (4.65)$$

其中, $E_0^{(p)}(0) = E_0(p, L)$ 。费米激发谱保持不变, 但是最低的空穴激发能隙变成

$$\Delta_h(D_z) = \Delta_h(0) + D_z. \quad (4.66)$$

这里, $\Delta_h(0)$ 表示 $D_z = 0$ 情形下的空穴能隙, 区别于 $D_z \neq 0$ 的情况。

系统的基态强烈地依赖于 D_z 的取值。当 $D_z > -\Delta_h(0)$, 空穴激发能为正, 基态仍然处于 $p = 0$ 单元。然而, 当 $D_z < -\Delta_h(0)$, 由式 (4.66) 定义的空穴激发能隙为负, 基态中出现空穴。从方程 (4.62) 可知, p 单元的最低能量近似为

$$E_0^{(p)}(0) \approx E_0^{(0)}(0) + p\Delta_h(0). \quad (4.67)$$

对于有限 D_z , 上式变成

$$E_0^{(p)}(D_z) \approx E_0^{(0)}(D_z) + p[\Delta_h(0) + D_z]. \quad (4.68)$$

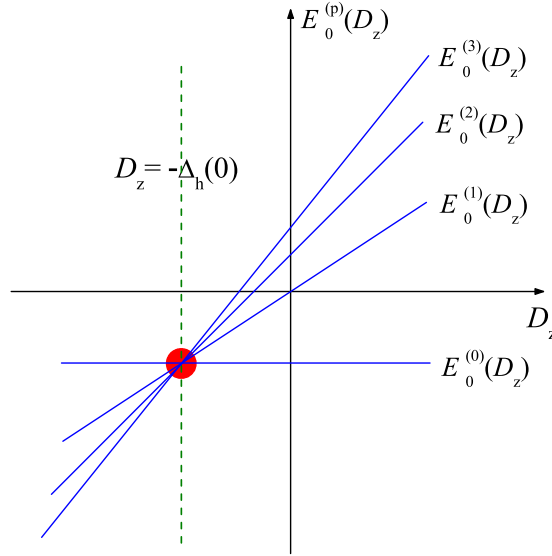


图 4.9: 空穴激发谱对 D_z 的依赖关系。

当 $D_z < -\Delta_h(0)$, 我们有

$$E_0^{(L)}(D_z) \lesssim \cdots \lesssim E_0^{(1)}(D_z) \lesssim E_0^{(0)}(D_z). \quad (4.69)$$

因此当 $D_z < -\Delta_h(0)$, 能带的层次结构完全被颠覆 (图4.9)。此时基态完全是所有的格点被空穴占据[88], 系统处于 $p = L$ 单元。这也可从图4.10里关于空穴浓度 N_h 的温度依赖关系看出。在零温极限, 当 $D_z \leq -\Delta_h(0)$ 时, N_h 等于1, 而 $D_z > -\Delta_h(0)$ 时, N_h 为0。

在图4.11中, 我们比较三种情形下的比热行为: (1) $D_z = 0$ (虚线); (2) $D_z \leq -\Delta_h(0)$ (实线) 和 (3) $D_z = 0$ 且没有空穴激发 ($p = 0$, 点线)。 $D_z = 0$ 曲线中第一个峰值温度对应于费米激发能隙 $\Delta_0 \simeq 1.4454$ 。在空穴凝聚相中, 比热的低温行为几乎不随 D_z 改变 (参见插图)。

4.4 关联函数

静态和动力学的 S^z 自旋-自旋关联函数也可以在空穴分解方案下进行计算。下面我们给出计算所需公式。

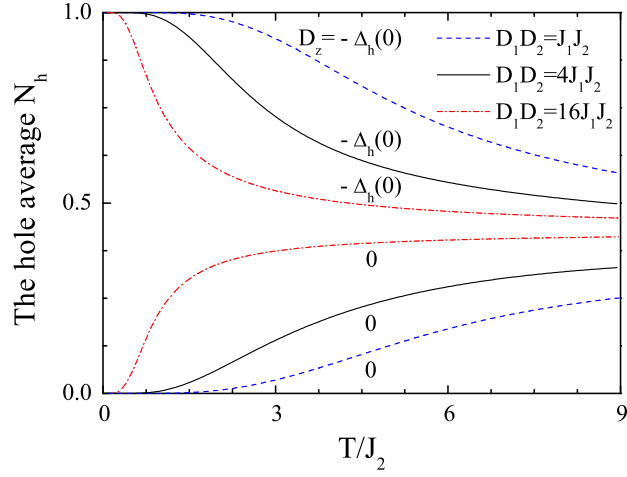


图 4.10: 空穴浓度 N_h 在 $D_z = 0$ 和 $D_z = -\Delta_h(0)$ 时的温度依赖。参数为 $J_1 = 10$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$ 。

4.4.1 零温

在基态, S^z 的自旋-自旋关联函数定义为

$$C_{mn}^z = \langle \Psi_0 | S_m^z S_n^z | \Psi_0 \rangle, \quad (4.70)$$

其中, $|\Psi_0\rangle$ 是哈密顿量归一化的基态。当 $D_z > -\Delta_h(0)$ 时, 没有空穴处于基态, 关联函数可用 Jordan-Wigner 费米算符表示为

$$C_{mn}^z = \langle \Psi_0 | F_m^{(-)} F_{m+1}^{(+)} F_{m+1}^{(-)} \cdots F_{n-1}^{(-)} F_n^{(+)} \rangle, \quad (4.71)$$

其中,

$$F_j^{(+)} \equiv c_j^\dagger + c_j, \quad (4.72)$$

$$F_j^{(-)} \equiv c_j^\dagger - c_j. \quad (4.73)$$

当 $m = n$, 容易看出 $C_{mn}^z = 1$ 。

基于 Bogoliubov 粒子的守恒关系, 我们可以直接得到

$$\langle \Psi_0 | F_j^{(+)} F_l^{(+)} | \Psi_0 \rangle = \delta_{jl}, \quad (4.74)$$

$$\langle \Psi_0 | F_j^{(-)} F_l^{(-)} | \Psi_0 \rangle = -\delta_{jl}. \quad (4.75)$$

进一步采用Wick 定理, 对于 $n > m$ 可得

$$C_{mn}^z = \begin{vmatrix} G_{m,m+1} & G_{m,m+2} & \cdots & G_{m,n} \\ G_{m+1,m+1} & G_{m+1,m+2} & \cdots & G_{m+1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{n-1,m+1} & G_{n-1,m+2} & \cdots & G_{n-1,n} \end{vmatrix}, \quad (4.76)$$

其中,

$$G_{jl} = \langle \Psi_0 | F_j^{(-)} F_l^{(+)} | \Psi_0 \rangle = -\langle \Psi_0 | F_j^{(+)} F_l^{(-)} | \Psi_0 \rangle. \quad (4.77)$$

上面的表达式可由固定 $F^{(-)}$'s 而内部置换 $F^{(+)}$'s 得到。在 $F^{(+)}$'s 置换次数为 p' , 相应的符号则为 $(-1)^{p'}$ 。

均匀系统下的 G_{jl} 的具体推导见附录C, 二聚化情形参见附录D。一般而言, G_{jl} 可表达为

$$G_{jl} = D_j Y[j, l] + 2J_j Y[j+1, l], \quad (4.78)$$

其中, $Y[j, l]$ 由方程 (D.9) 给出。

对于均匀系统, $Y[j, l] = Y[l, j]$ 的表达式为

$$\begin{aligned} Y[j, l] &= \sum_{k \in (0, \pi)} \frac{2}{D \sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}} \cos(l-j)k \\ &= \frac{1}{D} L_{l-j}, \end{aligned} \quad (4.79)$$

其中, L_r 如[11, 12]中所定义。

4.4.2 有限温

在有限温下, $N_0 \neq 0$ 的贡献应被计入。基于迭代公式(2.30), 我们得到了关联函数的迭代表达式:

$$\sum_{m,n}^L C_{mn}^z(\beta) = \frac{1}{Z(L)} \sum_{p=0}^L \sum_{l=0}^{L-p} \sum_{m,n}^l \alpha^p (p+1) \rho_{mn}^z(l) Z^{(p-1)}(L-p-l), \quad (4.80)$$

其中, ρ_{ij}^z 是如附录E所定义的段的关联函数。

图4.12 示意了每个点的自旋-自旋关联函数 $\sum_{m,n}^L C_{mn}^z(\beta)/L$ 的温度依赖关系。当 $D_z \leq -\Delta_h(0)$, 在极限 $T \rightarrow 0$ 下, 关联函数趋于0, 而基态即空穴凝聚相。当 $D_z > -\Delta_h(0)$, 零温极限下的关联函数为有限值 (大约0.85, 如图所示)。

4.4.3 自旋磁化率

$S = 1$ 量子Ising模型的自旋磁化率能通过前面介绍的迭代方法来计算。要做到这点,首先要计算在外场 ξ 下的每个 $S = 1/2$ Ising 段的配分函数,即 $z(l_n, \xi)$ 。整个系统的配分函数可以由此表达为

$$Z(L, \xi) = \sum_{p=0}^L \sum_{\{l_n\}} \prod_{n=1}^{p+1} z(l_n, \xi) \alpha^p. \quad (4.81)$$

这里,第二个求和满足限制条件 $\sum_{n=1}^{p+1} l_n = L - p$ 。按照每段的磁化强度 $m(l_n, T)$ 和磁化率 $\chi(l_n, T)$,

$$m(l_n, T) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln z(l_n, \xi)}{\partial \xi}, \quad (4.82)$$

$$\chi(l_n, T) = \frac{\partial m(l_n, T)}{\partial \xi}, \quad (4.83)$$

零磁场下总的磁化率 $\chi(T)$ 表达为

$$\chi(T) = \frac{1}{Z(L)} \sum_{p=0}^L \sum_{l=0}^{L-p} \alpha^p (p+1) \chi(l, T) z(l) Z^{(p-1)}(L-p-l). \quad (4.84)$$

空穴分解方案和迭代方法帮助我们完成了从 $S = 1/2$ 到 $S = 1$ 情形的过渡。 $S = 1/2$ 横场Ising模型的磁化率已被大量研究[91, 92, 93], 其结果可以用于我们对 $S = 1$ 量子Ising模型的计算之中。

4.5 小结

我们研究了一类具有单离子各向异性的可解 $S = 1$ 量子Ising模型。利用局域的空穴数目守恒,我们发展了空穴分解方案将模型映射到一套被空穴隔开的 $S = 1/2$ 横场Ising模型。量子Ising模型呈现层次阶梯型能带结构。系统存在两种低能激发。一个是在每个空穴段内的费米激发,另一个有不同空穴数目的单元间的空穴激发。空穴激发能隙可由纵向晶场 D_z 加以调节。当 D_z 等于 $-\Delta_h(0)$, 能隙变为零。

量子Ising模型的基态呈现三个不同的相。当 $D_z > -\Delta_h(0)$, 系统可以是磁有序或无序相, 而 $D_z < -\Delta_h(0)$ 时为空穴凝聚相。磁有序无序间的转变是二阶的, 但磁有序相与空穴凝聚相之间的转变是一阶相变[42, 88]。

我们已经发展了一种迭代方式去高效求和所有的空穴构型。这提供了一个准确计算量子Ising模型在热力学极限下的所有热力学量以及静态和动态关联函数的有效途径。这一方法不仅对我们已经研究的模型有效,它还可以很方便推广到其他哈密顿量能写成被非磁参杂隔开的独立自旋段作和的物理系统。比如Pd或Zn参杂的准一维反铁磁材料 $\text{Sr}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Pd}_x)\text{O}_3$ 或 $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ [94, 95]。

空穴激发强烈影响着系统的低温行为。它们加强了热起伏降低了量子临界性所能保持的特征温度。除了由于热起伏导致的常规的平滑峰外,比热在低温区域呈现对应空穴激发的尖峰结构。

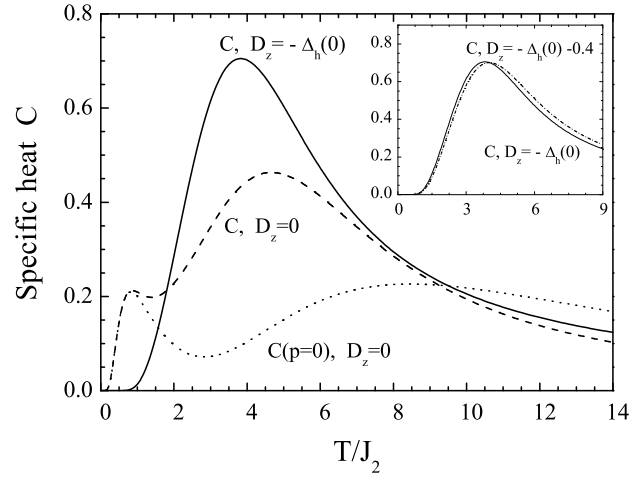


图 4.11: 当 $D_z = 0$ 以及 $D_z = -\Delta_h(0)$ 时, 比热作为 T/J_2 的函数。其中, $J_1 = 10$, $J_2 = 1$, $D_1 = 2$, $D_2 = 5$ 。 $C(p=0)$ 是相应的 $S = 1/2$ 的横场Ising模型所对应的比热行为。

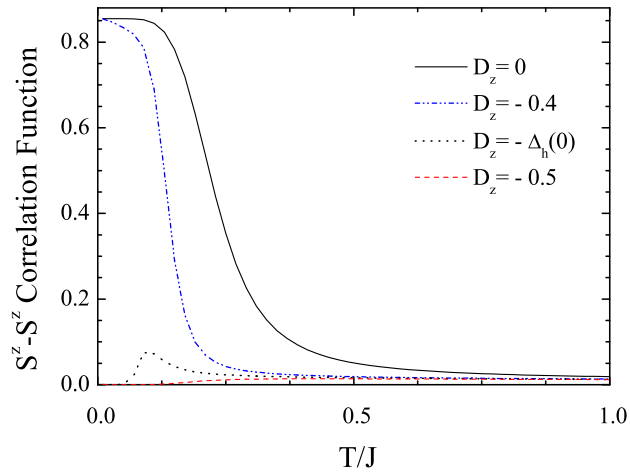


图 4.12: 当 $\lambda = 1.5$ 时, 均匀链中的自旋-自旋关联函数 $\sum_{m,n}^L C_{mn}^z(\beta)/L$ 的温度依赖关系。

第二部分

Hofstadter模型中的量子振荡

第五章 量子转移矩阵方法

对于转移矩阵这一名词，我们并不陌生。早在上个世纪三十年代对于一维经典Ising模型的求解[96]中已经引入这一概念。矩阵行列分别由相邻两个格点的特征自由度（比如自旋朝向）来标示，矩阵连接不同格点，这便是转移的由来。1944年，Onsager利用转移矩阵方法得到了二维Ising模型的严格解，这个解析结果对统计物理中相变问题的讨论产生了极其深远的影响。在对于无序电子系统求解的解析方法中，也有名为转移矩阵的解析处理，但那是对于波函数[97]的转移处理。需要说明的是，比如用转移矩阵来求解的一维经典Ising模型，用自旋取值个数来对应矩阵阶数，将自旋构型的求和转化为矩阵乘法中行列指标的缩并，这种处理在量子模型中会因为不对易关系而失效。另外，对于经典的一维均匀Ising链，由于其平移不变性，因而在热力学极限下，配分函数直接写为简单矩阵最大本征值的幂次。而下面我们将要介绍的量子转移矩阵[98]，是在Trotter-Suzuki公式[9, 99]下插入完备基引入。

5.1 模型介绍

1958年，在一篇题为“某些无规格中扩散的缺席”的文献[100]中，Anderson开创性地提出了无序会导致电子局域化的概念，为波函数的定域化描述奠定了基础。在低温情况下，对比晶体和无序固体，强的无序会使得固体的输运性质发生显著的改变，从呈现有限电阻的导体行为到无限大电阻的绝缘体行为，这种现象称之为由无序驱动的金属—绝缘体转变[97]。时至今日，关于Anderson无序模型，其局域化长度、电导行为仍是最受关注的方向。因为无序的引入，破坏了系统的平移不变性，使得解析处理变得非常困难。而我们发展的量子转移矩阵方法解决了这一难题，有效求解了无序模型配分函数，从而可以讨论其热力学性质。这一方法类似于转移矩阵重正化群理论的方法[101, 102]。我们的出发点是用转移矩阵解析表达配分函数，而不是对本征值或本征波函数求迹[97]。

我们发展的量子转移矩阵方法可以处理任意任意一维无相互作用的格点依赖（或键依赖）的费米子模型，下面以一维Anderson无序模型作为例子来演示

这一量子转移矩阵方法，其哈密顿量为

$$H = - \sum_i t_i (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.}) + \sum_i (U_i - \mu) c_i^\dagger c_i, \quad (5.1)$$

这里，跃迁系数 t_i 是相邻格点 $i, i+1$ 之间的跃迁能， U_i 是无序的对角势能，都是格点依赖的参量。 $c_i(c_i^\dagger)$ 是格点 i 处费米子的产生湮灭算符。 μ 为化学势， t_i 和 U_i 可以是满足任意分布的随机数。

5.2 转移矩阵

参照转移矩阵重整化群 (TMRG) [103]做法，将哈密顿量 H 分为两个部分，即 $H = H_1 + H_2$ ，每个部分是相互对易项的求和形式

$$H_1 = \sum_{i=\text{odd}} h_{i,i+1}, \quad H_2 = \sum_{i=\text{even}} h_{i,i+1}, \quad (5.2)$$

其中，

$$h_{i,i+1} = -t_i (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.}) + (U_i - \mu) c_i^\dagger c_i \quad (5.3)$$

TMRG 取Trotter-Suzuki 公式[9, 99]的二阶近似

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}) = \text{Tr} (V_1 V_2)^M + O(\epsilon^2), \quad (5.4)$$

这里， $\beta = 1/k_B T$ ， T 对应温度。 β 被 M 等分，即 $\epsilon = \beta/M$ ， M 是相应的Trotter数。在方程(5.4)中，

$$\begin{aligned} V_1 &= e^{-\epsilon H_1} = \prod_{i=\text{odd}} v_{i,i+1}, \\ V_2 &= e^{-\epsilon H_2} = \prod_{i=\text{even}} v_{i,i+1}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

其中， $v_{i,i+1}$ 是局域的演化算符，被定义为

$$v_{i,i+1} = e^{-\epsilon h_{i,i+1}}. \quad (5.6)$$

在方程(5.4)里相邻的 V_1 和 V_2 间插入 $2M$ 次完备性条件

$$\sum |n_1 \cdots n_N\rangle \langle n_1 \cdots n_N| = 1 \quad (5.7)$$

并将这些完备基依次标记为 $l \in [1, 2M]$ (也叫虚时片段), 配分函数可以写为

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\{n_i^l\}} \prod_{l=1}^M \langle n_1^{2l-1} \cdots n_N^{2l-1} | V_1 | n_1^{2l} \cdots n_N^{2l} \rangle \\ &\quad \langle n_1^{2l} \cdots n_N^{2l} | V_2 | n_1^{2l+1} \cdots n_N^{2l+1} \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\{n_i^l\}} \prod_{k=1}^M (v_{1,2}^{2l-1,2l} \cdots v_{N-1,N}^{2l-1,2l}) (v_{2,3}^{2l,2l+1} \cdots v_{N,1}^{2l,2l+1}), \end{aligned} \quad (5.8)$$

其中,

$$v_{i,i+1}^{l,l+1} = \langle n_i^l, n_{i+1}^l | v_{i,i+1} | n_i^{l+1}, n_{i+1}^{l+1} \rangle \quad (5.9)$$

是算符 $v_{i,i+1}$ 的矩阵元, N 是实空间的格点数目。 n 和 v 中的上下标 l 和 i 分别代表 Trotter 空间和实空间的坐标。将具有同样 $(i, i+1)$ 指标的项 $v_{i,i+1}^{l,l+1}$ 放在一起, 配分函数就可以写列转移算符的形式[9, 104]

$$Z = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Tr} \{ T_{1,2} T_{2,3} \cdots T_{N,1} \}. \quad (5.10)$$

方程(5.10)中有 N 个格点依赖的列转移算符 $T_{i,i+1}$, 在实空间和 Trotter 空间分别采用周期性边界条件 $n_1^l = n_{N+1}^l$ 和 $n_i^1 = n_i^{2M+1}$, 将 $T_{i,i+1}$ 定义成 Trotter 空间中 M 个局域转移算符的乘积,

$$\begin{aligned} T_{2i-1,2i} &= \prod_l \tau_{2i-1,2i}^{2l-1,2l} \\ T_{2i,2i+1} &= \prod_l \tau_{2i,2i+1}^{2l,2l+1}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

而局域算符 τ 与算符 $v_{i,i+1}$ 由矩阵元关系来定义,

$$\tau_{i,i+1}^{l,l+1} \equiv \langle n_i^l, 1 - n_i^{l+1} | v_{i,i+1} | 1 - n_{i+1}^l, n_{i+1}^{l+1} \rangle. \quad (5.12)$$

图5.1示意了两个算符矩阵变换过程。算符 $h(i, i+1)$ 保证了格点 i 和 $i+1$ 的总占据数守恒, 由此定义的 $v_{i,i+1}$ 相应地有同样的守恒关系。在式子 $1 - n_i^l$ 里, 负符号的引入是为了这一守恒关系转换到 Trotter 方向。附加的 1 使得这一式子仍可视作占据数。也因为相邻格点总占据数守恒这一特点, 占据数表象下的子空间 $\{|1, 1\rangle\}$, $\{|0, 0\rangle\}$ 和子空间 $\{|0, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$ 是脱耦的。因此, 在占据数表象下, 对

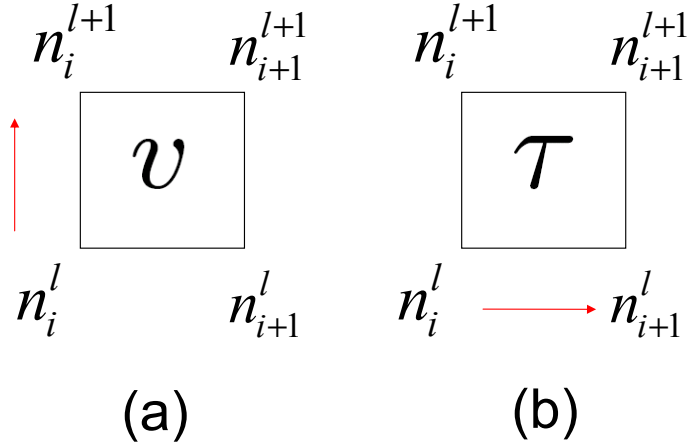


图 5.1: 图(a) 表示实空间的两个相邻格点沿Trotter方向的占据数演化, 图(b)对应Trotter方向的相邻格点沿实空间的占据数演化。

于算符 $h(i, i+1)$ 只需要计算如下矩阵元,

$$\begin{aligned}
 \langle 1, 1 | h(i, i+1) | 1, 1 \rangle &= 2m_i, \\
 \langle 0, 0 | h(i, i+1) | 0, 0 \rangle &= 0, \\
 \langle 1, 0 | h(i, i+1) | 1, 0 \rangle &= 2m_i, \\
 \langle 1, 0 | h(i, i+1) | 0, 1 \rangle &= -t_i, \\
 \langle 0, 1 | h(i, i+1) | 1, 0 \rangle &= -t_i, \\
 \langle 0, 1 | h(i, i+1) | 0, 1 \rangle &= 0.
 \end{aligned}$$

其中, $m_i = (U_i - \mu)/2$, 在总粒子数为1的子空间 $\{|0, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$ 中, $h(i, i+1)$ 的矩阵形式为

$$\begin{aligned}
 h_{i,i+1} &= \begin{pmatrix} 0 & -t_i \\ -t_i & 2m_i \end{pmatrix} = m_i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - m_i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - t_i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
 &= m_i \cdot \mathbf{1} - m_i \cdot \sigma_z - t_i \cdot \sigma_x.
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

这样, 利用泡利矩阵的特点, 我们可以得到 $v_{i,i+1}$ 在总粒子数为1的子空间里的矩

阵形式, 其具体推导参见附录F。 $v_{i,i+1}$ 在总粒子数为2和0的子空间的矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle 1, 1 | \exp[-\epsilon h(i, i+1)] | 1, 1 \rangle &= e^{-2\epsilon m_i}, \\ \langle 0, 0 | \exp[-\epsilon h(i, i+1)] | 0, 0 \rangle &= 1;\end{aligned}$$

为表达简洁起见, 下面我们来引入一组格点依赖的变量

$$\begin{aligned}\alpha_i &= -\epsilon m_i, & \gamma_i &= \sqrt{\alpha_i^2 + \epsilon^2 t_i^2}, \\ b_i &= e^{\alpha_i}, & u_i &= \frac{\epsilon t_i \sinh \gamma_i}{\gamma_i}, \\ a_i &= \cosh \gamma_i, & w_i &= \frac{\alpha_i \sinh \gamma_i}{\gamma_i},\end{aligned}\tag{5.14}$$

来表示 $v_{i,i+1}$ 在占据数表象下 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 的矩阵元

$$v_{i,i+1}^{l,l+1} = b_i \begin{pmatrix} b_i^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_i - w_i & u_i & 0 \\ 0 & u_i & a_i + w_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_i \end{pmatrix}.\tag{5.15}$$

根据局域算符的定义表达式(5.12), Trotter方向上相邻点 l 和 $l+1$ 的转移矩阵也是块对角的, 相应的矩阵元为

$$\tau_{i,i+1}^{l,l+1} = b_i \begin{pmatrix} u_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_i - w_i & b_i^{-1} & 0 \\ 0 & b_i & a_i + w_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_i \end{pmatrix}.\tag{5.16}$$

在这个量子转移矩阵求解方法中, 至关重要的一步是用费米子算符来定义局域的转移矩阵。 $\tau_{i,i+1}^{l,l+1}$ 的算符表达式为

$$\begin{aligned}\frac{\tau_{i,i+1}^{l,l+1}}{u_i b_i} &= 1 + \left(\frac{a_i}{u_i} - 1\right)(d_l^\dagger d_l - d_{l+1}^\dagger d_{l+1})^2 + \frac{b_i}{u_i} d_l^\dagger d_{l+1} \\ &\quad + \frac{b_i^{-1}}{u_i} d_{l+1}^\dagger d_l + \frac{w_i}{u_i} (d_l^\dagger d_l - d_{l+1}^\dagger d_{l+1}),\end{aligned}\tag{5.17}$$

其中, d 's 是定义在Trotter空间的费米子算符。用费米子算符表达的矩阵元与式(5.16)吻合。 $\tau_{i,i+1}^{l,l+1}$ 是费米算符的二次函数形式。而且, 因为费米子的

泡利不相容原理还可以将局域转移矩阵的费米算符表达形式指数化。标记 $C_i = u_i b_i$, $s_i \equiv \sqrt{p_i q_i + r_i^2}$, $n_l = d_l^\dagger d_l$,

$$A = p_i d_l^\dagger d_{l+1} + q_i d_{l+1}^\dagger d_l + r_i (n_l - n_{l+1}) \quad (5.18)$$

局域转移矩阵的指数二次型表示为

$$\begin{aligned} \frac{\tau_{i,i+1}^{l,l+1}}{C_i} &\equiv \exp[p_i d_l^\dagger d_{l+1} + q_i d_{l+1}^\dagger d_l + r_i (n_l - n_{l+1})] \\ &= 1 + (\cosh s_i - 1)(n_l - n_{l+1})^2 + \frac{\sinh s_i}{s_i} A. \end{aligned} \quad (5.19)$$

这个指数上的二次算符型成立的条件是方程(5.17)和(5.19)里四个二次算符项 $(n_l - n_{l+1})^2$, $(n_l - n_{l+1})$, $d_l^\dagger d_{l+1}$ 和 $d_{l+1}^\dagger d_l$ 的系数分别对应相等, 这样得到系数 (p_i, q_i, r_i, s_i) 满足的四个方程

$$\begin{aligned} \cosh s_i &= \frac{a_i}{u_i}, & \frac{\sinh s_i}{s_i} p_i &= \frac{b_i}{u_i}, \\ \frac{\sinh s_i}{s_i} q_i &= \frac{b_i^{-1}}{u_i}, & \frac{\sinh s_i}{s_i} r_i &= \frac{w_i}{u_i}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

三个独立参数 (p_i, q_i, r_i) 满足四个方程。方程的不独立性与方程(5.14)中定义四个格点参量 a_i, b_i, u_i, w_i 关联性一致。由Trotter方向引入的费米算符, 可以将方程(5.11)中的列转移算符 $T_{2i,2i+1}$ 写为

$$T_{2i,2i+1} = C_{2i}^M \exp \left[\sum_{l=1}^M p_i d_{2l}^\dagger d_{2l+1} + q_i d_{2l+1}^\dagger d_{2l} + r_i (n_{2l} - n_{2l+1}) \right]. \quad (5.21)$$

列转移矩阵 $T_{2i,2i+1}$ 具有Trotter方向的平移不变性, 因而引入Trotter方向的傅立叶变换

$$d_\omega^\dagger = \begin{pmatrix} d_{\omega,1}^\dagger \\ d_{\omega,2}^\dagger \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{l=1}^M e^{i\omega R_l} \begin{pmatrix} d_{2l-1}^\dagger \\ d_{2l}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

那样列转移矩阵可以改写为

$$\begin{aligned}
T_{2i-1,2i} &= C_{2i-1}^M \exp \left[\sum_{\omega} d_{\omega}^{\dagger} \begin{pmatrix} r_{2i-1} & p_{2i-1} \\ q_{2i-1} & -r_{2i-1} \end{pmatrix} d_{\omega} \right], \\
T_{2i,2i+1} &= C_{2i}^M \exp \left[\sum_{\omega} d_{\omega}^{\dagger} \begin{pmatrix} -r_{2i} & e^{-i\omega} q_{2i} \\ e^{i\omega} p_{2i} & r_{2i} \end{pmatrix} d_{\omega} \right].
\end{aligned} \tag{5.23}$$

将转移矩阵的表达式代入方程式(5.10)，配分函数 Z 可以写为

$$Z = \prod_i C_i^M \prod_{\omega} \text{Tr} [2 + T_{\omega}], \tag{5.24}$$

其中，

$$T_{\omega} = \prod_{i=1}^{N/2} t_{2i-1} t_{2i,\omega}, \tag{5.25}$$

这里， t_{2i-1} 和 $t_{2i,\omega}$ 是 2×2 的矩阵，定义式为

$$\begin{aligned}
t_{2i-1} &= \frac{1}{u_{2i-1}} \begin{pmatrix} a_{2i-1} - w_{2i-1} & b_{2i-1}^{-1} \\ b_{2i-1} & a_{2i-1} + w_{2i-1} \end{pmatrix}, \\
t_{2i,\omega} &= \frac{1}{u_{2i}} \begin{pmatrix} a_{2i} + w_{2i} & e^{-i\omega} b_{2i} \\ e^{i\omega} b_{2i}^{-1} & a_{2i} - w_{2i} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.26}$$

得到上面的表达式利用了 $\tau_{l,l+1}^{i,i+1}/u_i$ 在子空间 $\{|1, 1\rangle\}$, $\{|0, 0\rangle\}$ 是单位矩阵这一特点。在方程(5.25)中，所有相乘的矩阵都是零迹矩阵的指数形式，其行列式为1。因此，连乘出来最终的矩阵本征值一定具有 $\exp[\pm\lambda(\omega)]$ 的形式。在热力学极限下，那个大于1的本征值 $\exp[\lambda(\omega)]$ 对配分函数起主导作用，常数2可以被忽略。

需要说明的是 ω 的取值与 M 的奇偶性相关。对于奇数 M ，

$$\omega = \frac{2m\pi}{M}, \quad m = -\frac{M-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{M-1}{2}. \tag{5.27}$$

而对于偶数 M

$$\omega = \frac{(2m+1)\pi}{M}, \quad m = -\frac{M}{2}, \dots, -1, 0, \dots, \frac{M}{2} - 1. \tag{5.28}$$

方程(5.25)中转移矩阵 T_{ω} 对应的子空间是 $\{|0, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$ ，也就是说，沿着Trotter方向的每两个格点的占据数和是1。一个列转移矩阵计算对应的态空间是

$$d_1^{\dagger} d_2^{\dagger} \dots d_{2M-1}^{\dagger} d_{2M}^{\dagger} |0\rangle \tag{5.29}$$

粒子占据总数为 M 。而Trotter方向的周期性要求在态空间

$$d_2^\dagger d_3^\dagger \dots d_{2M}^\dagger d_{2M+1}^\dagger |0\rangle \quad (5.30)$$

的计算是等价的。费米算符 d_1^\dagger 挪动到 d_{2M}^\dagger 之后，将与 $(M-1)$ 个占据费米子交换产生因子 $(-1)^{M-1}$ ，因此，我们有等式

$$(-1)^{M-1} d_1^\dagger = d_{2M+1}^\dagger \quad (5.31)$$

对于奇数 M 有 $d_1^\dagger = d_{2M+1}^\dagger$ ，而对于偶数 M 有 $d_1^\dagger = -d_{2M+1}^\dagger$ ，相应地， ω 分别按照表达式(5.27)和(5.28)来取值。

R.Shankar和G.Murthy在文章[105]里指出，方程(5.25)中的矩阵 T_ω 形式上可视为下面磁场下一维Ising模型的转移矩阵：

$$Z = \sum_{S_i} \exp\left\{ \sum_i [J_i(S_i S_{i+1} - 1) + h_i S_i + f_i] \right\}. \quad (5.32)$$

对应于相应的一维Ising模型，其奇数格点参数是不依赖频率 ω ，表达式为

$$f_{2i-1} = -\frac{1}{2}(\ln |b_{2i-1}|), \quad (5.33)$$

$$h_{2i-1} = \ln \frac{(a_{2i-1} - w_{2i-1})}{(b_{2i-1} + w_{2i-1})}, \quad (5.34)$$

$$J_{2i-1} = \frac{1}{4} \ln \frac{2u_{2i-1}}{|b_{2i-1}|}. \quad (5.35)$$

而对于偶数格点，对应参数 J_i 和 f_i 是依赖于 ω 的，相应表达式为

$$f_{2i} = \frac{1}{2}(\ln |b_{2i}| + i\omega), \quad (5.36)$$

$$h_{2i} = \ln \frac{(a_{2i} + w_{2i})}{(a_{2i} - w_{2i})}, \quad (5.37)$$

$$J_{2i} = \frac{1}{4}(2 \ln(u_{2i}|b_{2i}|) + i\omega). \quad (5.38)$$

因为有沿着Trotter方向的傅立叶变换而引入的复数，这一对应并不能直接映射到一个真正的一维Ising模型，只是有形式上的对应。同样因为复数因子 $e^{i\omega}$ ，转移矩阵存在关系式

$$T_\omega^* = T_{-\omega} \quad (5.39)$$

我们可以将方程(5.25)中的转移矩阵 T_ω 取迹后取模方，相当于实现了配分函数中 ω 和 $-\omega$ 两个频率的连乘。

实际运算中，这个有复共轭关系的对乘可以节省一半的计算资源。用方程(5.25)去计算配分函数，对于一个给定的频率 ω 所需的只是将 N 个二阶矩阵乘起来。这是一个简单的编程工作。在得到配分函数 Z 以后，根据相应的热力学表达式 $F = -k_B T \ln Z$ 得到自由能，从而一些热力学量：比热、内能、熵可以得到。这样，我们可以得到模型的热力学信息。

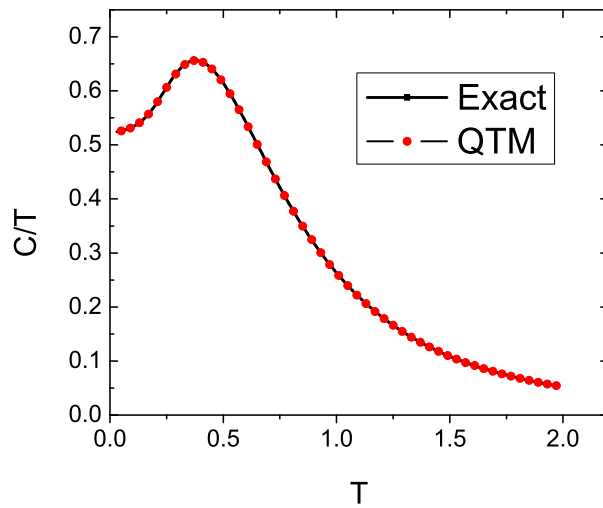


图 5.2: 当 $t = 1$, $U = 0$ 时，图比较了用精确的能谱计算和量子转移矩阵方法得到的比热系数 C/T 随温度变化。

作为对这一解析计算方法可靠性的简单证明，可以考虑哈密顿量(5.1)的特殊情形，即无序消失， $U_i = U, t_i = t$ ，这样解析能谱表达变为非常熟悉的形式，

$$\varepsilon_k = 2t \cos k + U - \mu, \quad (5.40)$$

这样通过能谱可以直接得到系统的配分函数，进而得到热力学量，用转移矩阵方法同样可以计算热力学量。我们在图5.2中比较了这两种不同渠道得到的比热系数 C/T 随温度的变化。图中两条曲线吻合得非常好，其中链长 $N = 2^{17}$ 。以下的物理量计算中选择的也是这个尺寸大小。

5.3 对角无序结果

5.3.1 高斯型无序

选用高斯型函数 $P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma^2}}$ 作为 U_i 的无序分布。其中, a 和 σ 分别对应变量 x 的平均值和标准方差。下面给出四个热力学量: 比热 C 、比热系数 C/T 、内能 E 和熵 S 随温度变化的曲线。其中, 参数设置是 $t = 1$, $a = 0$, $\mu = 0$, 变化参量是描述对角无序程度的 σ 。在下面示意的四张图中, 用红色曲线表示无序消失即均匀情形, 即 $U_i = 0, \sigma = 0$, 来与有无序的情形 $\langle U \rangle = 0, \sigma \neq 0$ 进行对比。

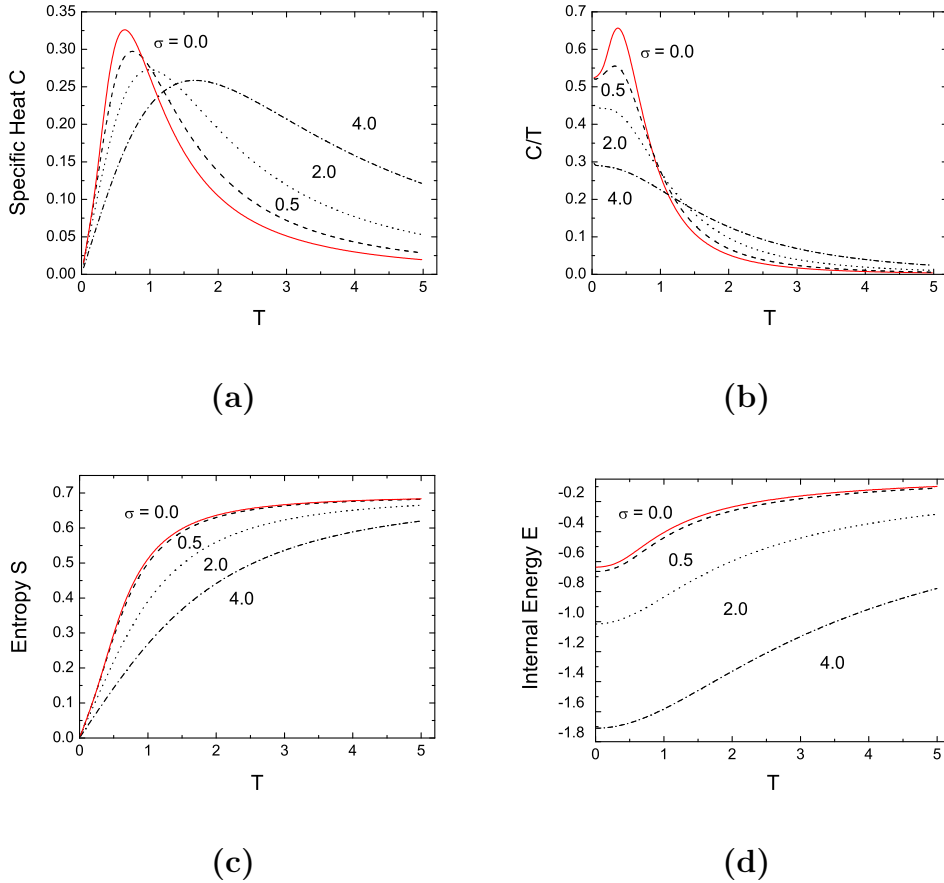


图 5.3: 当无序度取不同值 $\sigma = 0.5, 2, 4$, 和 0 (红线示意) 时, (a) 比热 C 随温度 T 的变化; (b) 比热系数 C/T 随温度 T 的变化; (c) 熵 S 随温度 T 的变化; (d) 内能 U 随温度 T 的变化。

如图5.3所示, 将 $\sigma = 0.5$ 与图中实线示意的 $\sigma = 0$ 情形相比较, 各物理量的差异很小。当 σ 增大时, 差异变得显著。无序使得能带变宽, 态密度在更广的能量范围内重新分布, 因此, 随着无序程度的加大, 比热曲线的峰值变小, 峰的位置向更高温度挪动。无序加强了热起伏, 将 C/T 的峰值移到更低的温度。

其他参量保持不变, 内能 E 和熵 S 会随着无序度的增大而减小, 从玻尔兹曼因子 $e^{-\beta E}$ 来看, 低能权重增大, 导致总能量减小。在高温区域, 物理量熵的曲线互相靠近, 来自于无序的影响变弱。高温下的能量尺度 $k_B T$ 已不能识别系统的精细能级。零温下的比热系数 C/T 正比于费米能 E_F 附近的态密度, 即

$$\frac{C}{T} \Big|_{T \rightarrow 0} \propto \rho(E_F) \quad (5.41)$$

图5.3(b) 表明费米能级附近的态密度随着无序度的增加而减小。

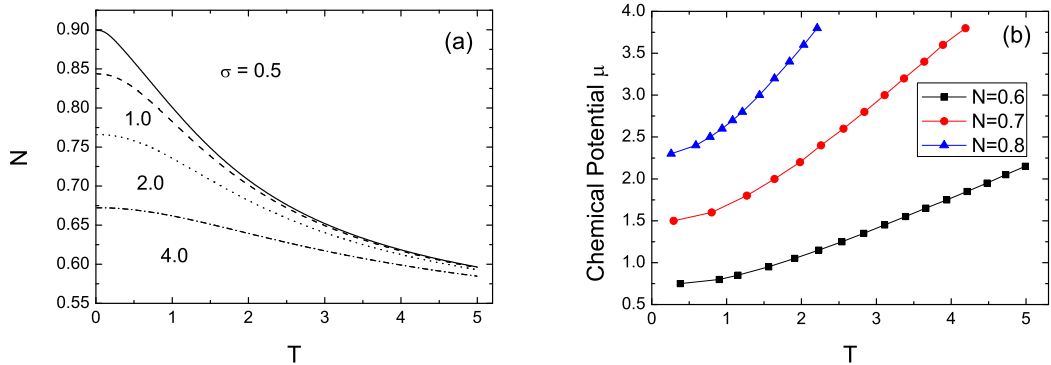


图 5.4: (a)当无序度取不同值 $\sigma = 0.5, 1, 2, 4$, 粒子数 N 随温度 T 的变化。其中, $\mu = 2, t = 1, \langle U \rangle = 0$; (b) 对于三个给定的粒子平均占据数 $N = 0.6, 0.7, 0.8$, 化学势 μ 随温度的变化。其中, $a = 0, \sigma = 2, t = 1$ 。

图5.4(a)示意了当化学势固定 ($\mu = 2$), σ 取不同值时粒子数 N 随温度 T 的变化情况。随着无序度的增加, N 减小。对于一个给定的 σ , 粒子数 N 是温度的减函数。图5.4(b)考虑在粒子数固定的情况下, 化学势随温度的变化情况。温度不变时 N 随着化学势的增大而增大, 化学势不变时温度上升粒子数开始减小。要保持粒子数固定, 化学势和温度变化方向一致, 是单调的增函数。在高温区域, 二者呈线性关系。

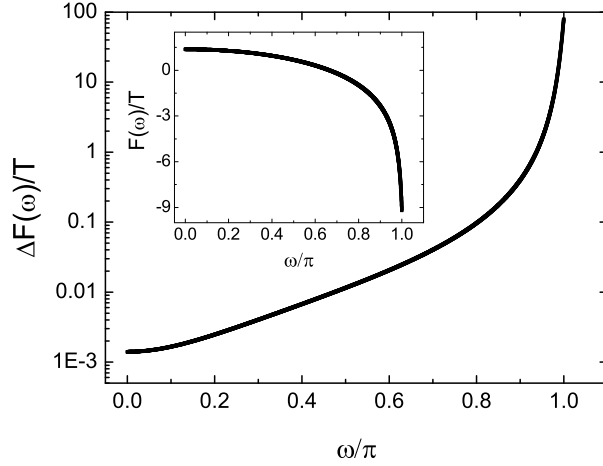


图 5.5: 均匀和无序情况下的自由能之差 $\Delta F(\omega)/T$ 随 ω/π 的变化情况。纵轴是对数坐标, 其中, $T = 0.01$, $t = U = 1$, $\sigma = 2$ 。插图是均匀 (没有无序) 情况下 $F(\omega)/T$ 随 ω/π 的变化。

如前文所述, 方程 (5.24) 中的配分函数可以表示为不同 ω 成分的乘积。相应地, 自由能 F 可以看作所有 ω 成分之和。对于一个给定温度 T , $F(\omega)$ 随着 ω 的增加而变大。当无序被引进, 除了在 $\omega \sim \pi$ 的邻域, $F(\omega)$ 改变很小。图5.5示意了无序 ($\sigma = 2$) 和均匀情形下自由能的差值随 ω 的变化。其中, 纵坐标是被温度标度过的自由能差值 $\Delta F(\omega)$, 显然只有当 ω 接近 π 时, 自由能之差才变得显著。文[105]中针对某些特殊的 ω 值引发的奇异性讨论了相变问题。

5.3.2 交错无序势

现在我们来考虑对角势按格点排序交替出现两个值的特殊情形, 即

$$t_i = t, \quad U_i = (-1)^i U + \Delta U_i. \quad (5.42)$$

当 $\Delta U_i = 0$, 能谱可以由下面的傅立叶变换得到:

$$c_i = \sum_k e^{iki} c_k, \quad c_i^\dagger = \sum_k e^{-iki} c_k^\dagger. \quad (5.43)$$

其结果是两带色散关系:

$$E_\pm = -2\mu \pm \sqrt{U^2 + 4t^2 \cos^2 k} \quad (5.44)$$

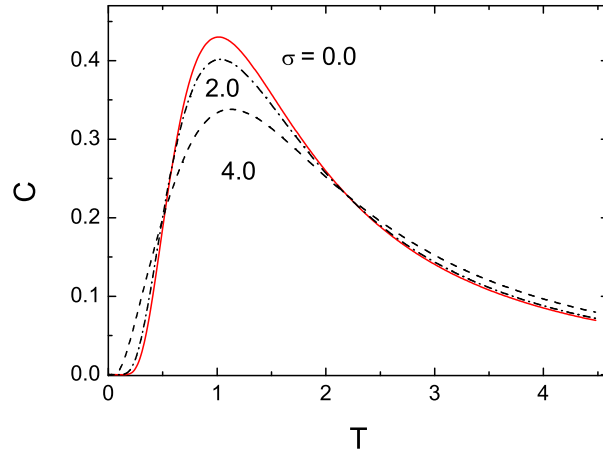


图 5.6: 无序增量为连续分布的情况下, 无序度取不同值 $\sigma = 0, 2, 4$ 时比热随温度的变化情况。这里, $t = 1, U = 2, \mu = 0$ 。

其带隙是 $2U$ 。

不妨选择均匀的直方分布 $P(x) = \frac{1}{\sigma}$ 作为对角能的随机增量 ΔU_i 。这里, σ 是直方分布的宽度, 满足如下的关系式:

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma}, & \text{如果 } -\frac{\sigma}{2} \leq x \leq \frac{\sigma}{2} \\ 0, & \text{其他情况} \end{cases} \quad (5.45)$$

当出现无序时, 带隙会随着无序度 σ 的增大而逐渐降低。从图5.6可以看到, 当 σ 为 0 和 2 时, 由于带隙的存在, 低温下的比热是指数衰减的。

我们也考虑了无序增量是等几率出现的两个离散能级: $-\sigma/2, \sigma/2$ 。比较在 $-\sigma/2$ 到 $\sigma/2$ 间均匀分布的无序增量, 这是一个有更多奇异性情形。我们称其为增量的离散分布, 而前面的直方分布称为连续分布。

图5.7显示了两种不同的增量分布在低温 $T = 0.01$ 时比热系数 C/T 随无序度 σ 变化的差异。离散分布对应更高比热系数峰值。当无序度增大到 4 附近, 带隙消失, 两个边界值 $-\sigma/2, \sigma/2$ 各为 $1/2$ 的几率引发了离散分布下低能激发更大的态密度, 因而呈现更高的比热峰值。随着 σ 的进一步增大, 因为能隙的再次打开离散分布下比热 C 降为 0。这个现象有一个直观的理解。当无序加入时, 两个

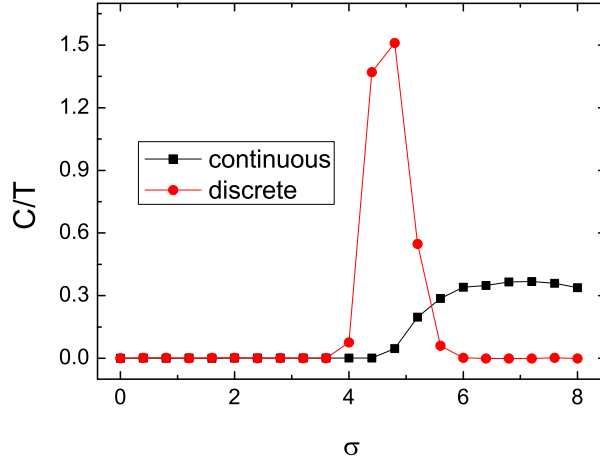


图 5.7: 比较连续分布和离散分布对比热系数 C/T 随无序度 σ 变化的差异。其中, $t = 1, U = 2, \mu = 0, T = 0.01$.

子带各自劈裂为两个带, 分别是原来的子带上下移动 $\sigma/2$ 。这样上子带劈裂的下带和下子带劈裂的上带互相靠近, 能隙慢慢合上。随着无序度的进一步加大, 当原来上子带劈裂的上带的顶部与零能量相接, 即 $\sigma/2 = \sqrt{6}$, 两个原始的子带再次完全分开, 出现能隙, 比热降为 0, 如图 5.7 所示。对于连续分布的增量情形则不一样, 使得离散分布下再次为 0 的大的 σ 取值, 连续分布下的比热仍保持一个有限值。这是因为连续增量带来的上下子带的劈裂只是加宽了能带, 当它们一旦相接就不会再分开。

为进一步理解离散分布下的比热行为, 我们选择了对应图 5.7 中分别属于三个比热取值段: 0, 非 0, 0 的无序度 $\sigma = 3.0, 4.8, 7.0$, 来观察在这些无序度取值下, 比热随温度的变化情况。

如图 5.8 所示, 当 $\sigma = 3.0, 7.0$ 时, C 在低温区域是指数衰减的, 这意味这能隙对低能激发的压制。比热的双峰结构可以从能带交迭来理解。离散分布情形下, 两个原始子带劈裂后的四条带两两相遇。热起伏看到能带重叠带来的比热双峰。

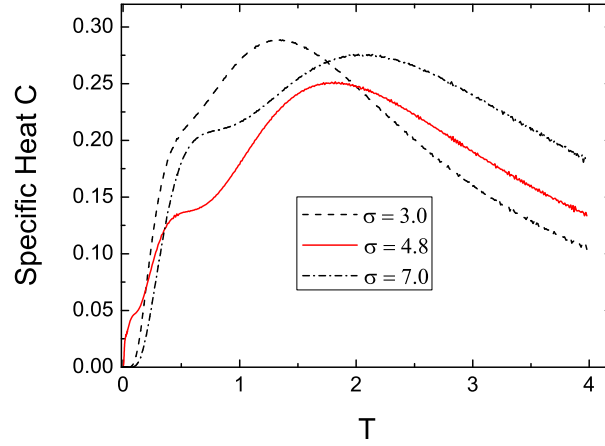


图 5.8: 无序增量为离散分布时, 无序度在三个不同的比热区间取值 $\sigma = 3.0, 4.8, 7.0$ 情况下, 比热随温度变化的曲线比较。图中, $t = 1, U = 2, \mu = 0$ 。

5.4 小结

对于1D系统, 量子转移矩阵方法可用于各种不同的无序分布和强度。非对角无序情形下的配分函数同样能由这一方法得到。配分函数 Z 能表达为格点依赖的转移矩阵的乘积。与对角无序情形相比较, 所需要修改只是 2×2 矩阵的矩阵元。

1D的Anderson无序模型被用来示意量子转移矩阵方法。我们讨论了对角无序模型。前者仅仅引入对角势的高斯分布, 讨论分布宽度, 即无序程度对于系统热力学行为的影响。无序的引入使得态密度的分布发生改变, 从而带来了热力学量的差异。从量子转移矩阵方法的应用过程可知, 自由能可以表示为Trotter方向傅立叶变化引入的 ω 组分的求和。将均匀和无序情形作比较可以看到, $F(\omega)$ 的差异仅仅在靠近 $\omega = \pi$ 的区域才变得显著, 而这一奇异性正是文章[105]讨论相变问题的出发点。后者讨论的是交错对角势下两种不同的随机增量对系统的影响。我们发现离散分布和连续分布这两种随机增量引发的比热行为有显著区别。这一差异源自于能带的不同劈裂。文中物理量的计算对应链长超过 10^5 , 这已远超出精确对角化的能力。而这一方法的实现在单个cpu下也只需要几个小时。计算资源随着系统尺寸是线性增长的, 所以我们能够通过这一

方法获取热力学极限下热力学行为的信息。

总的说来，对于任意一维无相互作用的格点依赖（或键依赖）的费米子模型，我们建立了局域转移矩阵的二次算符的指数函数表达式。在此基础上，配分函数表示为不同 ω 分量对应矩阵迹的乘积。局域转移矩阵的引入使得Trotter方向的平移不变性得以利用。转移矩阵的格点依赖性是可以处理无序系统的关键。这一方法有着广阔的应用前景，可以用于讨论各种不同的无序分布。在后面我们将看到这一方法在解析求解受周期势场和磁场共同作用的Hofstadter模型中的应用。在朗道规范下，Hofstadter模型脱耦成一维哈密顿量的求和形式，这样就进入了量子转移矩阵方法的应用范围。

第六章 Hofstadter 蝴蝶能谱

Hofstadter模型讨论二维方格子置于与该平面垂直的磁场下的电子行为。如引言所述，无论是Bloch电子在磁场下的行为（紧束缚极限）还是朗道量子化的电子受弱势场（不考虑不同朗道能级间的耦合）的影响都可以归结为求解Harper方程。这个方程形式简单，却对应着复杂的能谱结构。

6.1 模型哈密顿量

下面我们将从紧束缚近似出发，讨论仅限于Bloch单带，来推导Haper方程。对于二维正方格子，紧束缚近似的Bloch能谱是我们所熟知的表达式：

$$E(\mathbf{k}) = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a). \quad (6.1)$$

其中， a 是晶格常数。当引入外加磁场，我们采用Peierls替换来得到受晶场和磁场共同作用的单带有效哈密顿量。在利用这一替换前，不妨先改写能谱表达式，有效哈密顿量可视为包含平移算符的形式：

$$E(\mathbf{k}) = t [\exp(ik_x a) + \exp(-ik_x a) + \exp(ik_y a) + \exp(-ik_y a)]. \quad (6.2)$$

替换后的形式依赖于规范的选取，会有与磁场强度相关的相位因子与平移算符相乘。这里，我们选用朗道规范，即 $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = H(0, x, 0)$ 。作Peierls替换[106]，

$$\begin{aligned} k_x &\rightarrow \frac{1}{\hbar} \hat{\mathbf{p}}_x, \\ k_y &\rightarrow \frac{1}{\hbar} \left(\hat{\mathbf{p}}_y - \frac{e}{c} H x \right). \end{aligned}$$

得到有效哈密顿量为：

$$\begin{aligned} H_{eff} = & t \exp\left(i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_x\right) + t \exp\left(-i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_x\right) \\ & + t \exp\left(-i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \exp\left(i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_y\right) + t \exp\left(i \frac{e H a x}{\hbar c}\right) \exp\left(-i \frac{a}{\hbar} \hat{p}_y\right) \end{aligned}$$

将实空间的能量本征波函数标记为 $\psi(x, y)$ ，则能量本征方程 $H\psi(x, y) = E\psi(x, y)$ 可以写成：

$$\begin{aligned} \psi(x+a, y) + \psi(x-a, y) + \exp\left(-i\frac{eHax}{\hbar c}\right) \psi(x, y+a) \\ + \exp\left(i\frac{eHax}{\hbar c}\right) \psi(x, y-a) = \epsilon\psi(x, y). \end{aligned} \quad (6.3)$$

其中， $\epsilon = E/t$ 。因为我们考虑的是格点紧束缚模型，点 (x, y) 处的波函数只与它的四个最近邻相联系，为方便起见，将格点标记为

$$x = ma, \quad y = na. \quad (6.4)$$

本征值方程(6.3)中的相位项只与 x 有关， $\psi(x, y)$ 对 y 方向的依赖关系可通过傅立叶变换分离：

$$\psi(ma, na) = \exp(ikn) g(m) \quad (6.5)$$

将(6.4)和(6.5)代入本征方程(6.3)，得到

$$g(m+1) + g(m-1) + 2\cos(2\pi m\alpha - k)g(m) = \epsilon(m). \quad (6.6)$$

这就是Harper方程[49]，是一维的差分形式。这个方程的推导还可以从朗道能级开始，其具体过程参见文献[48]。在方程(6.6)中，

$$\alpha = \frac{a^2 H}{2\pi(\hbar c/e)}. \quad (6.7)$$

这是一个重要的无维参量，在引言部分介绍过可以看作穿过一个原胞的磁通（以磁通量子 $\hbar c/e$ 为单位），即 $\alpha = \phi$ 。还可以视为两个特征时间尺度的比值：一个是携带晶格动量 $2\pi\hbar/a$ 的电子经过一个晶格常数 a 的运动周期 $a^2 m/2\pi\hbar$ ，另一个是电子回旋频率 $\omega_c = eH/mc$ 的倒数。当然，如果是从朗道极限得到的harper方程，其参数 $\alpha = \phi_0/\phi$ 与紧束缚极限下互为倒数关系。由Harper方程(6.6)可知Hofstadter模型的二次量子化哈密顿量为

$$\begin{aligned} H &= \sum_k H_k \\ &= \sum_k \left[t \sum_j \left(c_{j+1,k}^\dagger c_{j,k} + c_{j,k}^\dagger c_{j+1,k} + 2\cos(2\pi j\alpha - k) c_{j,k}^\dagger c_{j,k} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

这个模型的哈密顿量脱耦成由 y 方向傅立叶变换 (6.5) 的 k 来标记的一维哈密顿量的求和形式。当 α 取有理数, 设 $\alpha = p/q$, 其中 p, q 互质, 且 $p < q$, 容易看出

$$2\pi(j+q)\frac{p}{q} + k = 2\pi j\frac{p}{q} + k. \quad (6.9)$$

那么一维哈密顿量可视为晶格常数为 qa 的超晶格问题。引入对应超晶格的傅立叶变换,

$$c_{mq+l,k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_K \exp[iKm(qa)] c_{l,k,K}, \quad (6.10)$$

$$c_{mq+l,k}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_K \exp[-iKm(qa)] c_{l,k,K}^\dagger. \quad (6.11)$$

其中, m 是超晶格中元胞的指标; l 是超晶格元胞中格点的指标, $l = 0, 1, \dots, q-1$; N 是 x 方向超晶格的个数, K 是超晶格的晶格动量, 对应的第一布里渊区的长度为 $2\pi/q$ 。于是式 (6.8) 可写成

$$H = \sum_{k,K} \begin{pmatrix} c_{0,k,K}^\dagger & c_{1,k,K}^\dagger & \cdots & c_{q-1,k,K}^\dagger \end{pmatrix} H_{k,K} \begin{pmatrix} c_{0,k,K} \\ c_{1,k,K} \\ \vdots \\ c_{q-1,k,K} \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

$H_{k,K}$ 是一个 $q \times q$ 的矩阵:

$$H_{k,K} = \begin{pmatrix} M_0(k, \phi) & 1 & \cdots & 0 & \exp[-iKqa] \\ 1 & M_1(k, \phi) & 1 & \vdots & 0 \\ \vdots & 1 & \ddots & 1 & \vdots \\ 0 & \vdots & 1 & M_{q-2}(k, \phi) & 1 \\ \exp[iKqa] & 0 & \cdots & 1 & M_{q-1}(k, \phi) \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

其中,

$$M_l(k, \phi) = 2 \cos \left(2\pi l \frac{p}{q} - k \right). \quad (6.14)$$

$H_{k,K}$ 的右上角和左下角的指数项是由于相邻超晶格的第 $q-1$ 个格点和第0个格点之间的跃迁引入的依赖于超晶格动量 K 的色散。对于一个给定的 (k, K) , 对角化后的哈密顿量有 q 个离散的单粒子能量本征值, 而不同的 (k, K) 使得单粒子能谱变为 q 个带, 相对于原来紧束缚模型的单带而言, 能带发生劈裂成为 q 个带。

6.2 蝴蝶型能谱结构

Hofstadter用数值方法计算了在 α 取有理数时Harper方程的解[52]，给出了系统能级随磁场变化的图像，这个能谱图像6.1里，大的能隙形成类似蝴蝶的图案，能谱图因此称为Hofstadter蝴蝶。从哈密顿量 (6.8) 中可以看出， $H(\phi) = H(\phi + N)$ 。因此，我们定义将 ϕ 取值在任意两个相邻整数之间的能谱图部分称之为一个**元胞**。在范围 $N \leq \phi \leq N + 1$ 内的能谱图即为第 N 个原胞。图6.1示意的是一个原胞所对应的能谱结构：

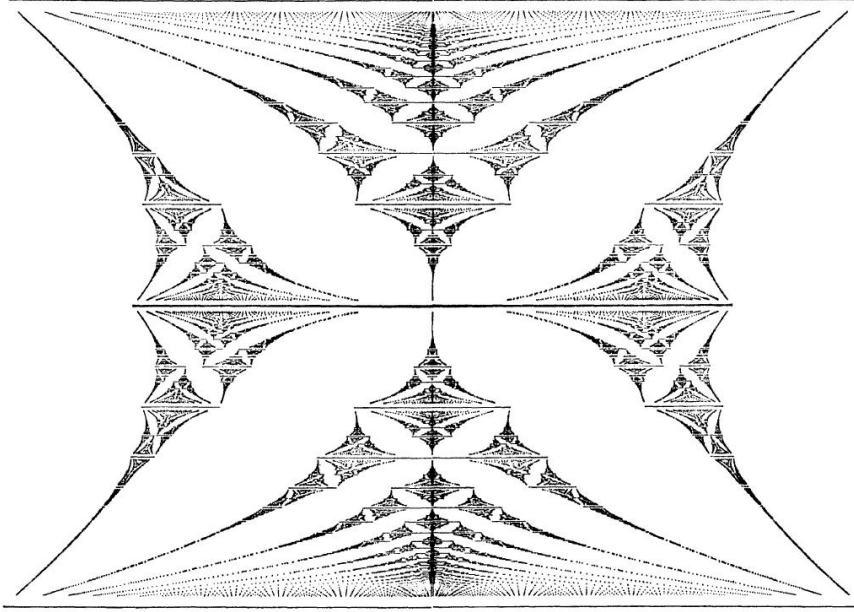


图 6.1: Hofstadter蝴蝶能谱图[52]，其中，横坐标是能量的变化范围（以跃迁能 t 为能量单位），从 -4 到 4 。纵坐标表示外磁场强度 ϕ 的小数部分 $\beta(= \{\phi\})$ ，范围从 0 到 1 。

$\beta = 0$ 对应的能带跨越整个原胞宽度，并将相邻的两个原胞分开，因此将其称为**元胞墙**。从图中还可以直接看出，Hofstadter蝴蝶关于 $\epsilon = 0$ 和 $\phi = 1/2$ 对称，这种对称性也很容易从哈密顿量 (6.8) 中看出。两类有理数 β 对于原胞结构

的描述扮演着重要角色，它们分别是：

$$1. \text{ 纯取值: } \beta = \frac{1}{N} \quad \text{或} \quad \phi = 1 - \frac{1}{N}, \quad N \geq 2 \quad (6.15)$$

$$2. \text{ 特殊取值: } \beta = \frac{N}{2N+1} \quad \text{或} \quad \phi = 1 - \frac{N}{2N+1}, \quad N \geq 2 \quad (6.16)$$

对应这两类 β 取值的能谱形成了整个蝴蝶图案的**骨架**，蝴蝶图的其他部分可视为悬挂在骨架之上。

嵌套 (nesting) 假设的第一条是：对于情况 (6.15)，在原胞的左右边界间共有 N 条子能带。要注意当 N 是偶数时，看上去只有 $N - 1$ 个子能带，因为最中间的两个子带在能量轴 $\epsilon = 0$ 处相接。当 N 趋于无穷大时，子能带的带宽和带隙的比值趋于零，而且子能带在 -4 到 4 的能量范围内趋向于均匀分布。对于情况 (6.16)，当 N 趋于无穷大时，第 $N + 1$ 条能带（即位于能量范围中间的能带）的带宽趋向于0。

下面由上述两类有理数的能谱构造的骨架图引入子元胞 (subcell) 这一概念，它是能谱结构中迭代描述的核心。从图 (6.1) 中能看出，由大能隙形成蝴蝶将整个原胞分为左、中、右三个部分。关于左和右两个部分的构建方法是：对于同属于 (6.15) 情形的任意两个相邻 β ，将它们所对应的最外面能带的两个边界用直线连接起来，由此形成的梯形盒子即为子原胞，它们的集合为**左链**、**右链**（位于整个原胞的左右两边）。对于中间部分，将属于 (6.15) 且 $N > 2$ 所对应次外边能带的最外沿用直线连接起来，这样形成两个大盒子。剩余部分将相邻的属于 (6.16) 情形对应的最中间能带的最外沿依次用直线连接起来。所有的中间部分的子原胞组成**中链**。就这样，我们得到如图6.2所示的Hofstadter蝴蝶的骨架图。

嵌套假设的第二条是：原胞内子元胞之外的区域是能隙（不包含能带也不包含能带组成部分）。

嵌套假设的第三条是：用迭代的方法将整个Hofstadter蝴蝶用骨架图构造出来。为了进行迭代，Hofstadter首先对子元胞引入**局域变量** (local variable) 的概念。当每个子原胞由自身的局域变量标识时，它就成了满足了nesting三条假设的原胞。初始的元胞的变量用 β 表示，其子元胞的局域变量用 β' 表示。 β 所对应的能谱在初始元胞的左、中、右三个部分中分别经过三个子元胞。

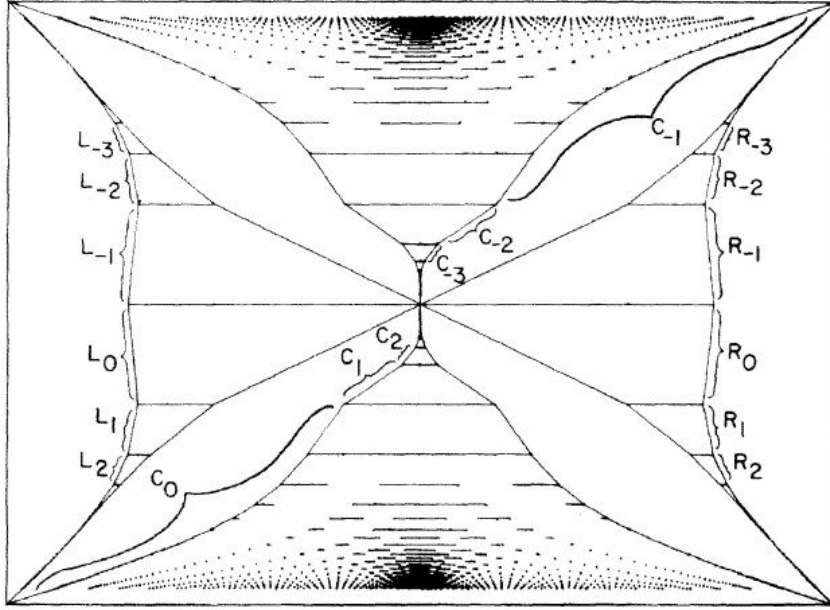


图 6.2: Hofstadter蝴蝶的骨架图[52]

当 $0 < \beta \leq 1/2$ 时, 对于左边和右边的子元胞, β 与其对应的局域变量 β' 的关系为:

$$\beta = (N + \beta')^{-1}. \quad (6.17)$$

其中,

$$N = \left[\frac{1}{\beta} \right],$$

表示小于或等于 β 倒数的最大整数。我们把这种迭代叫做 R (右) 或 L (左) 变换。对于中间子元胞, β 与其对应的局域变量 β' 的关系为:

$$\begin{aligned} \beta &= \left(2 + \frac{1}{\alpha'} \right)^{-1}, \\ \beta' &= \{\alpha'\}, \quad \beta' \text{ 是 } \alpha' \text{ 的小数部分.} \end{aligned} \quad (6.18)$$

我们把这种变换叫做 C (中间) 变换。在后面讨论 Hofstadter 模型在半满情况下的磁性质时, 要用到 C 变换。

当 $1/2 \geq \beta < 1$ 时, β' 通过 $1 - \beta$ 求出。

下面通过一个例子来示范这种迭代过程, 并说明正是这种迭代使得随磁场剧烈变化的能带结构并不会带来物理效应上的混乱。考虑 $\beta = 5/17$ 的情况。对

于左边和右边的子元胞，

$$\frac{5}{17} = (N + \beta')^{-1} = \left(3 + \frac{2}{5}\right)^{-1}. \quad (6.19)$$

于是， $\beta' = 2/5$ 。 β' 的分母是5，所以在左边和右边的子元胞中，分别有5条能带。对于中间子元胞，

$$\frac{5}{17} = \left(2 + \frac{1}{\alpha'}\right)^{-1} = \left(2 + \frac{1}{5/7}\right), \quad (6.20)$$

于是， $\beta' = \{5/7\} = 5/7$ 。 β' 的分母是7，所以在中间子元胞中，有7条能带。容易看出，对于 $\beta' = 2/5$ 和 $\beta' = 5/7$ ，还可以继续这种迭代，这表示在子元胞中划分出更小的子元胞。通过简单的计算可以得到，对于 $\beta' = 2/5$ ，下一级的左、中、右子元胞的局域变量分别为1/2、0和1/2，分别对应了2、1、2条子带；对于 $\beta' = 5/7$ ，下一级的左、中、右子元胞的局域变量分别为1/2、1/3和1/2，分别对应了2、3、2条子带。所以， $\beta = 5/17$ 下的能级结构可以表示为：

$$(2 - 1 - 2) - (2 - 3 - 2) - (2 - 1 - 2).$$

对于 β 等于其它的任一有理数，都可进行同样的迭代过程。每次迭代后的次级原胞都可以用相应的局域变量逐次往下迭代，直至最后子原胞的局域变量成为(6.15)的形式或0。换句话说，将初始元胞缩小，变形，填入到它的子元胞中，并将这个过程不断继续下去，我们将得到所有有理数磁场下的能级分布。每次迭代对元胞内子元胞外的能隙区域都不产生任何影响，可以看出，数值相近但分母相差悬殊的两个有理数磁场下的能级结构中最大的一系列能隙是相等的，数值越接近，存在差异的能隙结构所对应的能量尺度越小。Hofstadter在其论文中已证明：对于任意 α ，当 α' 靠近 α ，那么 α 对应能谱的所有点都被属于 α' 对应能谱的点靠拢。也就是说，有理数的分母的振荡仅是数学上的效果，并不产生可观测的物理效应。

对于外磁场为无理数的情况，Hofstadter指出，可以通过用有理数逼近的方法得到。无理数情况下做上述迭代永无休止，迭代过程中有限分立的能带将变成无穷多个点，这样不再有能带宽度，这些点形成Cantor集。

6.3 Hofstadter蝴蝶与霍尔电导

Hofstadter蝴蝶反映了受磁场和晶格势场共同作用下二维电子系统的分形能谱特点，这样一个特殊的能谱图案引发了大量的理论和实验关注。

D.J.Thouless等人[50]计算了朗道极限下Harper方程的输运性质。在朗道极限下，周期势不足以引起不同朗道能级间的耦合，那么系统的能级仍然具有图(6.1)的结构，只是纵轴的标记由 ϕ/ϕ_0 换成 ϕ_0/ϕ ，每条朗道能级劈裂成 p 条子带。在周期势场的调制下，在不同朗道能级间的霍尔电导是 e^2/h 的整数倍。但对于同一朗道能级内的小能隙，与经典理论所认为的劈裂子带携带分数倍霍尔电流的观点相悖，Laughlin的规范不变理论[107]认为小能隙也贡献整数倍的量子霍尔电导。Thouless等人提出在给定的磁场 ϕ/ϕ_0 下，能隙的序号 r 和与费米能位于该能隙处整个未填满的朗道带所贡献的霍尔电导 t_r （以 e^2/h 为单位）的关系由Diophantine方程所决定：

$$r = s_r q + t_r p, \quad |s| \leq \frac{p}{2}. \quad (6.21)$$

其中， r 取自然数，是一个朗道能级劈裂展宽形成的朗道能带中不同子带间能隙的序号，取值从1到 $p-1$ ， s_r 和 t_r 取整数。由第 r 个子带贡献的霍尔电导按照表达式

$$\sigma_H = \frac{e^2}{h}(t_r - t_{r-1}) \quad (6.22)$$

量子化，并不是经典理论对应的 e^2/ph 。如果费米面位于第 N 个朗道能级的第 r 个能隙处，总的霍尔电导等于

$$\sigma_H = \frac{e^2}{h}(t_r + N - 1). \quad (6.23)$$

除了 p 取偶数且 $r = p/2$ 的情形（此时无能隙），可由Diophantine方程可唯一确定 s_r, t_r 的取值。

当 $q = 1$ ，朗道能级的前半部分能隙处给出 $t = 0$ ，后半部分对应 $t = 1$ ，因此只有最中间的子带携带霍尔流对电导有贡献。当 $q = 2$ ， t 在1和0间轮流取值，那么子带轮流携带一个朗道能级霍尔电流的 ± 1 倍。例如， $\phi/\phi_0 = 3/2$ ，那么朗道带劈裂为三个子带，如果费米能级位于最低的带内小能隙 $r = 1$ 中，那么按照方程(6.21)可得 $s_r = -1, t_r = 1$ ，这样总的霍尔电导即 Ne^2/h 。如果位于 $r = 2$ 的带内小能隙中， $s_r = 1, t_r = 0$ ，那么部分填充的朗道带对电导并无贡献。Albrecht等人[51]将超晶格产生的周期性外势场作用在二维自由电子气上，通过测量霍尔电导，验证了Thouless等人理论工作的电导关系式，从而提供了不同朗道带间能隙和Hofstadter蝴蝶带内能隙的直接证据，成为蝴蝶能谱结构的实验实现。

第七章 Hofstadter模型的热力学性质

基于前面提到的转移矩阵方法，我们来研究有限温下Hofstadter模型中dHvA振荡的格点修正。在朗道规范下，模型的配分函数可以表示为一系列 2×2 的局域转移矩阵的乘积。这一新颖的方法避免哈密顿量的直接对角化可以对热力学极限进行可靠的研究。实现 2×2 系列矩阵的连乘并非难事，而由此得到的配分函数使得我们可以获取大量有关系统的热力学信息。在高温低场下，格点修正较小，与没有周期势情形相似。但是，反过来对于低温高场的条件，格点修正变得很重要。除了dHvA振荡外，在磁化强度和磁化率的曲线里会呈现许多额外不同等级的峰谷结构。这些结果源自于分形的能带色散，在实验上可用于探测Hofstadter蝴蝶的拓扑结构。Taut等人[108, 109]采用数值计算和半经典方法得到了磁化强度振荡行为，从求解的角度而言，这一新颖的量子转移矩阵方法有着准确的计算结果。除了探讨较多的磁性的振荡行为外，在量子转移矩阵方法的框架下，我们还得到了比热随磁场的振荡行为。

7.1 转移矩阵对配分函数的表达

Hofstadter模型描述的是均匀磁场下紧束缚电子的运动。在朗道规范下， $A = H(0, x, 0)$ ，矢势只有在沿 y 方向的键上非零，那么系统就有沿 x 方向的平移不变性，在该方向引入傅立叶变换，这一模型哈密顿量便可脱耦成一系列用 k 标记的一维哈密顿量 H_k 的求和。

$$H = \sum_k H_k, \quad (7.1)$$

$$H_k = \sum_y \left[t c_{k,y+1}^\dagger c_{k,y} + t c_{k,y}^\dagger c_{k,y+1} + 2t \cos(2\pi y \phi - k) c_{k,y}^\dagger c_{k,y} \right], \quad (7.2)$$

这里，

$$k = 2\pi n / N_x \quad (n = 0, 1, \dots, N_x - 1), \quad (7.3)$$

是电子沿着 x 方向的动量， N_x 是相应的格点数目。 y 是 y 方向的格点坐标， ϕ 是穿过二维平面每个方块的磁通。

对于一个给定的 k , H_k 的配分函数表达式为

$$Z_k = \text{Tr} \exp(-\beta H_k), \quad (7.4)$$

其中, $\beta = 1/k_B T$, T 表示温度. 因此, 系统的配分函数可以写为所有 k 动量对应的配分函数 Z_k 的乘积. 按照前面量子转移矩阵方法的计算手续, 利用虚时方向(温度倒数方向)的平移不变性, 将配分函数表示成 N_y 个 2×2 矩阵乘积形式,

$$Z_k = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{\omega} \text{Tr} \prod_y^{N_y/2} [t_{k,2y-1}^-(\omega) t_{k,2y}^+(0)]. \quad (7.5)$$

这里, $\epsilon = \beta/M$ 是一个由Trotter-Suzuki分解[9, 99]引入的小参量. $\omega = (2m+1)\pi/M$ ($m = 1, \dots, M$)是虚频, $t_{k,y}^{\pm}(\omega)$ 是一个 2×2 的矩阵, 由下式定义:

$$t_{k,y}^{\pm}(\omega) = u_{k,y} \begin{pmatrix} a_{k,y}^{\pm} & e^{-i\omega} b_{k,y}^{\pm} \\ e^{i\omega} b_{k,y}^{\mp} & a_{k,y}^{\mp} \end{pmatrix},$$

其中,

$$\begin{aligned} a_{k,y}^{\pm} &= \frac{\gamma_{k,y} \cosh \gamma_{k,y} \pm \alpha_{k,y} \sinh \gamma_{k,y}}{-\epsilon t \sinh \gamma_{k,y}}, \\ b_{k,y}^{\pm} &= \frac{\gamma_{k,y} \exp(\pm \alpha_{k,y})}{-\epsilon t \sinh \gamma_{k,y}}. \end{aligned}$$

a, b 表达式中的参数满足

$$\alpha_{k,y} = -\epsilon [t \cos(2\pi y \phi - k) - \mu/2], \quad (7.6)$$

$$\gamma_{k,y} = \sqrt{\alpha_{k,y}^2 + \epsilon^2 t^2}, \quad (7.7)$$

$$u_{k,y} = -\epsilon t \sinh \gamma_{k,y} \exp(\alpha_{k,y}) / \gamma_{k,y}. \quad (7.8)$$

配分函数的这个表达对于问题是一个极大的简化, 因为计算矩阵乘积所需时间与尺寸大小 N_y 呈线性关系. 而且, 并不需要预先储存这些转移矩阵, 只是需要做乘积结果运算可以步步更新, 以致于所需的内存很小. 因此, 处理一个真正大的系统比如 $N_y \sim 10^8$ 不会带来技术困难.

7.2 磁场强度和磁化率的振荡

在朗道规范下，格点的旋转对称性被破坏。表现在 x 方向的有限尺寸效应是小的。在我们所考虑的温度范围内， $N_x = 50$ 已经足够大。然而， y 方向表现出强的有限尺寸效应。当 $T = 0.02$ 时，将 N_y 从500调至160000的磁化强度计算表明，只有当 N_y 超过50000才会有收敛的结果。这意味着在讨论Hofstadter模型的热力学性质时必须考虑大的格点系统。在更高的温度区域，可以在更小的 N_y 值时得到收敛的物理结果。在文中所示的图7.1和7.2，为保证收敛，格点尺寸大小取值为 $N_x = 50$ ， $N_y = 80000$ 。为简单起见，这里我们只考虑半满情形，这样由于模型的粒子-空穴对称性，系统的化学势被固定在 $\mu = 0$ 。在下文中， $t = 1$ ， $\varepsilon = 0.02$ 。

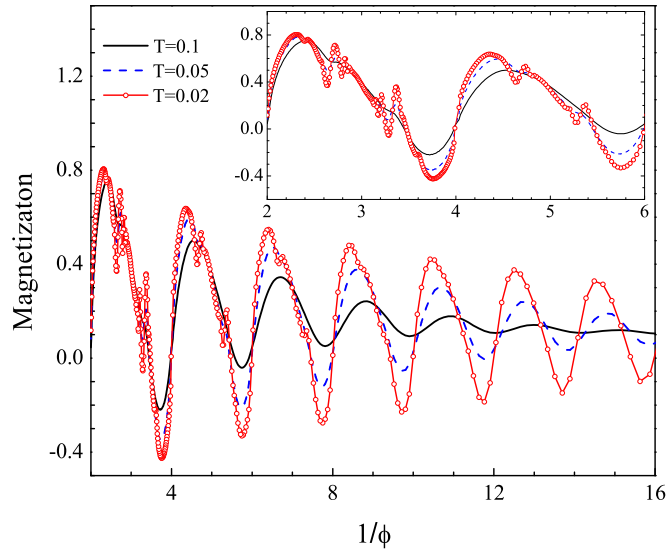


图 7.1: Hofstadter 模型在半满时的磁化强度。插图更清楚地示意了在强磁场区域格点对于dHvA 振荡的修正。

图7.1示意了三个不同温度下磁化强度的量子振荡。在低场极限，可以看到传统的dHvA振荡。振荡周期 $\Delta(1/\phi)$ 约等于2，与教科书[110]中公式所得结果一致。

$$\Delta(1/\phi) = \frac{4\pi^2}{S_F}, \quad (7.9)$$

这里, S_F 对应费米面积。半满情况下, $S_F = 4\pi^2/2 = 2\pi^2$ 。然而, 随着 ϕ 的增大, 一些精细结构会出现常规的 dHvA 曲线中 (参见图 7.1 中的插图)。这些细致结构当温度降低时愈加明显。而这些源于对能谱的格点修正。

热涨落对磁化强度曲线有着很大影响。在高温下, 比如 $T = 0.1$, Hofstadter 蝴蝶能谱中能量尺度小于 $k_B T$ 的精细分形结构会被热涨落抹掉。除非在高磁场极限, 高温时只有常规的 dHvA 振荡存留。但对于低温情形, 如 $T = 0.02$, Hofstadter 蝴蝶能谱与 $k_B T$ 相当的那些能量尺度便开始影响系统的磁响应行为, 会使得高场下的磁化率曲线出现很多额外的峰谷结构。进一步降低温度, 即使在低磁场条件, 也会有越来越多的峰谷从 dHvA 的振荡背景中涌现。

在每一个峰或谷的附近, 随着温度升高都会发生顺磁抗磁转换。例如, 在 $\phi \sim 0.3$ 周围, 当 $T = 0.02$ 磁化强度会随着 ϕ 值增加而变小, 表现为抗磁响应; 但当 $T = 0.1$, 系统磁化强度随 ϕ 增大而变大, 是顺磁响应。既然能谱与温度无关, 系统顺磁抗磁的转变行为明显源自能量分辨率的改变。这也是 Hofstadter 蝴蝶能谱分形结构的一个体现。

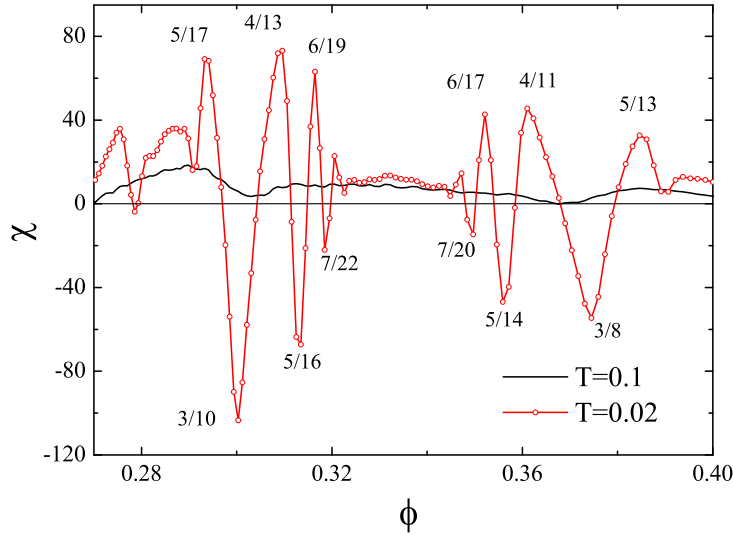


图 7.2: Hofstadter 图为模型在半满时的磁化率, 其中标识了在温度 $T = 0.02$ 时对应于磁化率极大极小情况下的 ϕ 值。

图 7.2 反映的是磁化率 χ 对磁场参量 ϕ 的依赖关系。其中, ϕ 的取值范围在 0.27 到 0.4 之间, 对比了两个不同的温度 $T = 0.1$ 和 $T = 0.02$ 。在高温 $T = 0.1$ 情

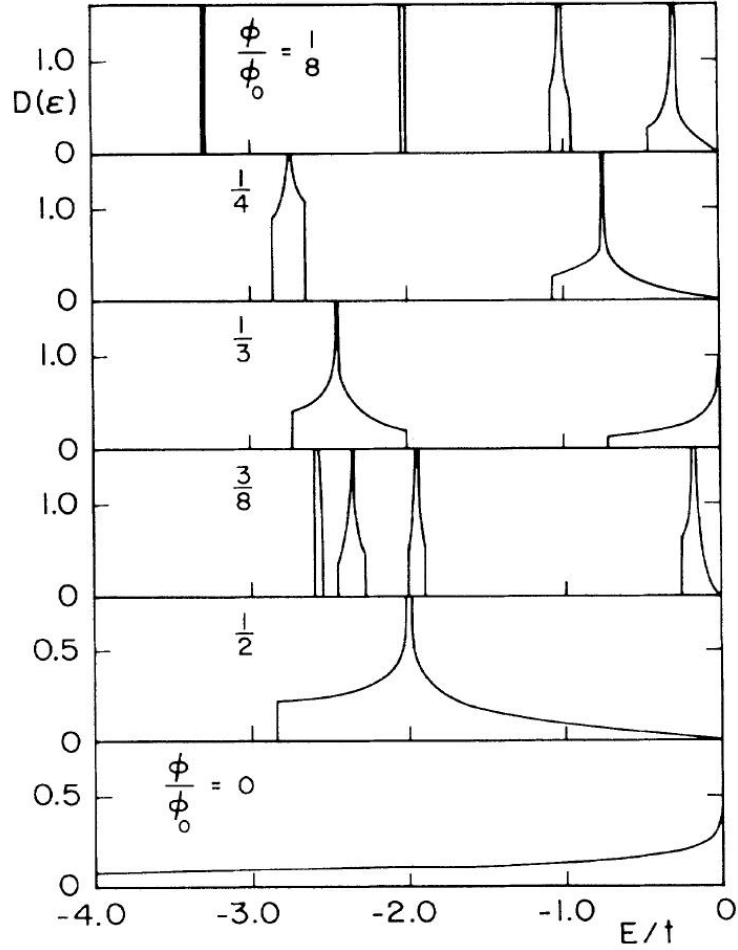


图 7.3: 电子态密度随 ϕ 的变化[112]。

形, χ 表现为顺磁。然而, 在低温 $T = 0.02$, χ 随磁场参量 ϕ 强烈振荡, 呈现出一系列局域的极大极小值, 分别对应顺磁抗磁的磁场响应。这些极值出现在磁通取有理数时, 即 $\phi = p/q$ (图 7.2 中已标示这些对应磁化率极值的有理数 ϕ)。这些极大值对应的 q 为奇数, 而极小值对应 q 为偶数。

这些极值的出现源于周期势场和磁场对电子的共同作用, 并与系统在费米能级处的态密度有密切联系。这个模型的态密度行为已被 Wannier 和其合作者计算过[111], Y.Hasegawa 等人[65], G.Montambaux[112] 和 Y.Hasegawa 等人[113] 计算了 Hofstadter 模型 (紧束缚极限) 的态密度和基态能。图 7.3 中显示的是几个不同取值 ϕ 对应的电子态密度。可以看出, 对于 $\phi = 1/q$, 当 q 是

大于零的偶数时，电子态密度在 $E/t = 0$ 处为零；当 q 是奇数时，电子态密度在 $E/t = 0$ 处发散。半满情形下[65]，当 q 是偶数时，态密度在费米能级处线性消失（即Dirac点）；而当 q 是奇数时，费米能级处有van Hove（范·霍夫）奇异性，其态密度发散。因此，如果 ϕ 接近范·霍夫奇异点，系统表现为顺磁响应，如果靠近狄拉克点，则呈现抗磁响应。

然而，考虑到对于任意足够小但有限的 ϕ 间隔，总能找到无穷多个有理数 p/q 对应分母 q 为奇数或偶数，那么上述极值与态密度的联系显得十分脆弱。换句话说，在任意一个有理数附近，比如 $\phi = 4/13$ ，存在无穷多个其他的有理数 ϕ 对应费米能级处要么为零要么发散的态密度。那么，我们自然要问：如何把 $4/13$ 处的轨道顺磁性归结于态密度的范·霍夫奇异性呢？

这个问题可以通过对Hofstadter蝴蝶的能谱的分级结构和温度效应的分析得到回答。在能谱分级结构的第一阶，Hofstadter蝴蝶可以被分成几个子原胞[52]。这些子原胞又可以往下分成子子原胞。这些分级的递推定义了一个相同的迭代变换。迭代变换结束后，任意有理数 ϕ 都能最终约化为一个简单的有理数 $1/q'$ 或 $1 - 1/q'$ (q' 是整数)。

例如， $\phi = 4/13$ 在第一次迭代后约化为 $4/5$ 。这意味着以费米能级为中心的第一阶子原胞有五个子带，中间的带跨越费米能级并具有发散的能态密度。另一方面，一个很接近于 $4/13$ 的数值 $\phi = 401/1300$ 在第19次迭代后约化为 $3/4$ 。这表明：第19阶子原胞有4个子能带并且中间的两个在费米能级处相遇。此时，费米能级处对应狄拉克点响应的态密度为零。然而，第19阶原胞的特征能量尺度相比于温度 $T = 0.02$ 时的热能量 $k_B T$ 很小。因此，当 $T = 0.02$ ，磁化率中来自于 $\phi = 401/1300$ 奇异性的贡献完全被热涨落抹掉，而只有 $\phi = 4/13$ 处的峰值能被看见。

这一点从态密度在费米能级附近 $k_B T$ 的能量间隔内的积分情况来看更为清楚。 $\phi = 401/1300$ 与 $\phi = 4/13$ 积分几乎相同。从图7.4可以看到，这两个数值相近分母差别悬殊的两个 ϕ 对应的比热曲线基本一致，即使在低温区域，也差异甚微。这与Hofstadter最初讨论两个相近的 ϕ 值其能谱上的能量点互相靠近是一致的。 $T = 0.02$ 下的能量分辨率看不见 $\phi = 401/1300$ 在费米能级处对应的态密度奇异性，表现出与 $\phi = 4/13$ 相近的积分结果。因此，在 $\phi \sim 4/13$ 范围内，费米能级处的态密度由 $4/13$ 的第一阶原胞的范·霍夫奇异性所决定。对具有偶数分母 q 的 ϕ 值的讨论类似，只是态密度性质变为由狄拉克点决定。

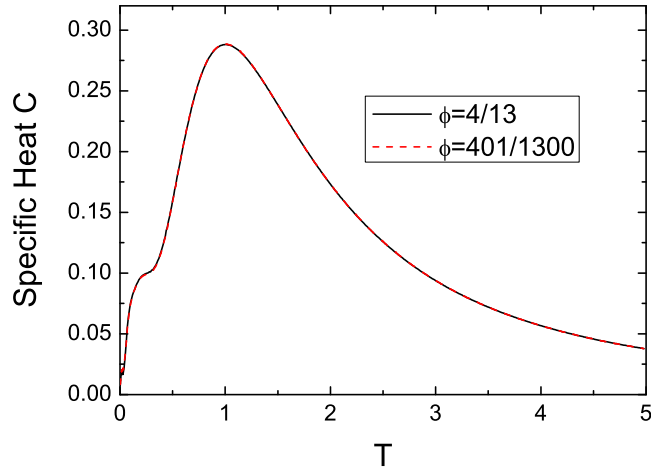


图 7.4: 半满情形下, 两个数值相近而分母差异悬殊的 $\phi = 4/13, 401/1300$ 对应的比热比较。

上面的讨论意味着可以通过增加能量分辨率来探测Hofstadter蝴蝶的更高阶原胞, 这样降低温度就可以辨别范·霍夫奇异性和狄拉克点。然而, 在零温极限下, 磁化率对无穷小的 ϕ 间隔在顺磁性和抗磁性间振荡, 不再是一个良好定义的物理量, 这点与基态能量对 ϕ 的不可微是自洽的。

7.3 平均能量

文献[65], [112] 和[113]中计算了Hofstadter模型在给定占据数下的平均基态能随 ϕ 变化的曲线, 并且当 ϕ 等于平均占据数时平均基态能有最小值[112]。对于一个给定的粒子数填充, 能量曲线中存在许多的极小点, 这些点的位置和对应的填充数满足关系: $\nu = M + N\phi/\phi_0$, 其中 ν 是粒子数, ϕ 是穿过一个晶格元胞的磁通 (以磁通量子 $\phi_0 = hc/e$ 为单位), 正比于磁场, 可视为表征磁场强弱的参量。 M 和 N 是整数。其中, 能量的最小点对应于 $\phi = \nu\phi_0$, 即每个电子分配一个磁通的情形。

在量子转移矩阵方法框架下, 有限温下的平均能量可以对自由能求偏导而获取。图7.5比较了Hofstadter模型在半满情形下有无各向异性时平均能量随磁场的变化, 其中, $T = 0.01$ 。当然, 由于温度的影响, 在基态能曲线中的其他极

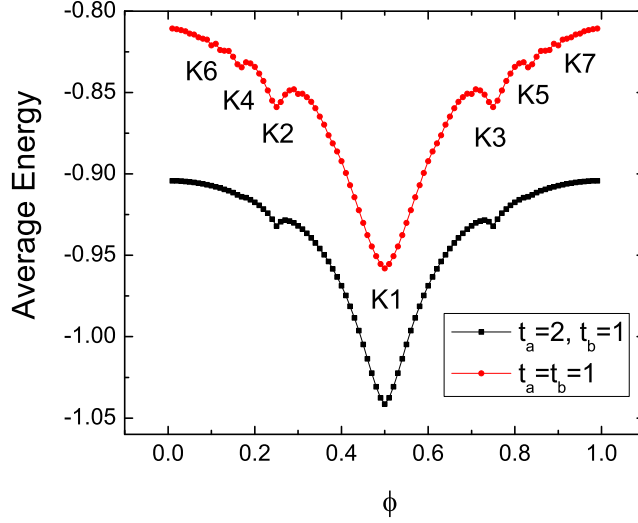


图 7.5: $T = 0.01$ 时, 半满占据下在均匀 (红色圆圈, $t_a = t_b = 1$) 和有各向异性情形 (黑色方块 $t_a = 2, t_b = 1$) 平均能量随磁场变化的比较。

小值点, 图7.5中即使在红色示意的均匀情形已经无法辨别出来。在引入各向异性后, 平均能量的极小值点会减少。也就是说, 在能量随磁场变化曲线中拐点减少, 这与后面各向异性情况下比热振荡减弱是一致的。黑色方块示意了各向异性引入后平均能量随磁场的变化情况。需要说明的是在图7.5中为方便两种情形的能量比较, 我们将黑色方块示意的有各向异性情况下的平均能量上移了0.45。

可以看到, 平均能量的最小值出现在 $\phi = 1/2$ 处, 此时 ϕ 值与占据数相等, 与文章[65]中的结论一致。均匀情形下曲线还包含一系列的极小值点 (用K 标记), 这些极小点满足上述关系[65, 112]

$$\nu = M + N\phi, \quad M, N \in \mathbb{Z}. \quad (7.10)$$

对于我们考虑的半满占据, 下表中给出几个明显的极小点处的 ϕ 值和相应的 M, N 的值。

	ϕ	M	N
K1	1/2	0	1
K2	1/4	0	2
K3	3/4	-1	2
K4	1/6	0	3
K5	5/6	-2	3
K6	1/8	0	4
K7	7/8	-3	4

表 7.1: 均匀情形下, 半满填充对应的平均能量的极小点处 ϕ 和整数 M, N 的取值列表。

7.4 比热的振荡行为

文[114]中对Hofstadter模型的有限尺寸效应做了讨论, 下面我们选取足够大的格点尺寸 $N_x = 100, N_y = 50000$ 来做计算。除了前面提到的磁性振荡外, 我们还发现了比热的振荡行为[115]。

图7.6示意了三个温度下比热随磁场强度的变化。考虑到能谱在磁场反号 ($\phi \rightarrow -\phi$) 的对称性和周期性 (周期为1), 我们选择如下范围做计算: $0 \leq \phi \leq 1/2$ ($1/\phi \geq 2$)。图中纵轴是 C/T (比热系数), 横轴是磁场强度倒数 $1/\phi$ 。随着温度降低, C/T 随 ϕ 的振荡加剧。在低温低场下, 可以看到这一振荡与传统的dHvA振荡有相同的周期 $\Delta(1/\phi) \simeq 2$, 与前面的磁化强度振荡一致。

当 $T = 0.1$, 可以很明显看到这个振荡周期 $\Delta(1/\phi) \simeq 2$, 然而, 对于更低的温度如 $T = 0.01$, 即使在低场范围, 更为精致的振荡还是嵌入了这个主要的振荡周期中。这些细致结构在磁场增大的情况下愈加明显。这其实是来自对能谱格点修正的自然结果。按照Hofstadter[52]的“嵌套假设”, 蝴蝶能谱中的层次结构逐级可分, 可通过迭代方式来形成这一特殊能谱。只有精细的能量分辨率 $k_B T$ 才能辨别小的能隙尺度。蝴蝶能谱中能量尺度小于 $k_B T$ 的细致分形结构被热涨落抹平。因此, 低温下的比热振荡更为剧烈。

从朗道极限出发来看, 晶格势场的引入使得朗道能级的简并被解除, 单个能级展宽成能带, 当势场不足以强到耦合不同的朗道能级时, 电子行为同样由Harper方程来描述[48]。这样系统除了占主导地位的不同朗道能带间的大能隙, 还有蝴蝶图案中一个展宽的朗道带内部的小能隙。两个相邻朗道带间大的

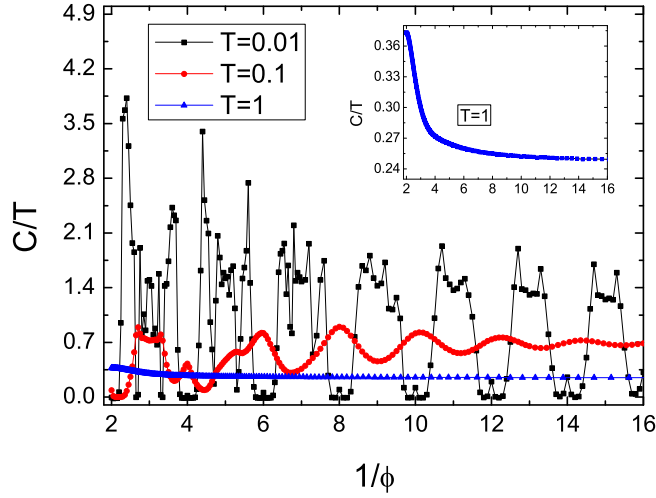


图 7.6: 半满时, 比热系数 C/T 随 ϕ 的变化。图中比较了三个不同的温度, 即 $T = 0.01, 0.1, 1$ 。插图示意的是 $T = 1$ 的情形。

能隙对应主要的振荡周期节点处的比热0值点。对于低温 $T = 0.01$ 下非周期节点处比热为0处的理解, 我们可以直接观察 Hofstadter 能谱在能量轴 $E = 0$ 的中心区域。对于一些 ϕ 取值, 纵向上相邻两个形如钻石部分的中间区域差不多变成一条细线, 横向看与相邻的子带被能隙隔开。这样当低温能量尺度 $k_B T$ 小于子带能隙时, 将会出现比热零点。插图示意的高温 $T = 1$ 情形, 其比热随着磁场的变小单调递减直至趋于一个稳定的常数。随着磁场减小, 朗道能级简并度变小, 晶场引发的能级劈裂带来的费米能级附近的态密度降低, 比热随之变小。此时大的能量尺度甚至超过了带间能隙, 已经完全“看不见” Hofstadter 蝴蝶的内部结构, 以至于高温下不出现振荡。

图7.7示意了在几个给定的磁场 ϕ 下, 比热随温度的变化情况。这几个 ϕ 值的选取属于文[52]中的“纯取值”, 即 $\phi = 1/N$ 或 $1 - 1/N$ ($N \geq 2$)。在高温区域, 比热曲线互相靠近, 热涨落使得蝴蝶能谱的精细结构模糊化。与前面的讨论一致, 能谱的精细结构并不能被高温下大的能量尺度 $k_B T$ 所识别。不同 ϕ 值在低温下的比热差异变得显著。在 $\phi = 1/3, 1/4$ 时, 比热曲线呈现双峰结构, 而 $\phi = 1/2$ 时比热是单峰曲线。

当 $\phi = 1/2$ 时, C 曲线类似于Bloch单带行为, 这与蝴蝶能谱是一致的。当 N 为偶数, 蝴蝶能谱看上去只有 $N - 1$ 个带, 因为最中间的两个带在正中心相遇, 即 $E = 0$ 处。这样 $\phi = 1/2$ 时只有一个能带, 不会出现比热的双峰结构。而当 $\phi = 1/3$, 原始的Bloch带会劈裂成三个带。蝴蝶能谱中相对较大的带内能隙导致了 C 曲线的谷。相似地, $\phi = 1/4$ 情形下两个最中间带相接, 也是相当于三带结构。然而, $\phi = 1/4$ 时的中间带比 $\phi = 1/3$ 时的宽, 也就是说, 中间带的带边离能量中心轴 $E = 0$ 更远。因此, 相较于 $\phi = 1/3$, 比热的转折点在更高的温度出现, 而这个转变更加温和, 有一个小谷出现在比热曲线中。

在文[113]中, 各向异性(不同转移积分)被讨论。有各向异性时, 哈密顿量有更一般的表达形式。

$$H_k = \sum_y \left[t_a c_{k,y+1}^\dagger c_{k,y} + t_a c_{k,y}^\dagger c_{k,y+1} + 2t_b \cos(2\pi y\phi - k) c_{k,y}^\dagger c_{k,y} \right]. \quad (7.11)$$

各向异性由比值 t_b/t_a 刻画。

在量子转移矩阵的框架下[98, 114], 对存在各向异性的处理并没有带来任何额外困难。如[113]所述, 当各向异性被引入, 每一个范·霍夫奇异性一分为二。因此, 原来的能带加宽而能隙变窄。各向异性使得原来均匀情形下的小能隙($\sim k_B T$)进一步变小以至于不能被特征能量尺度所识别。这就是图7.8中有各向异性时振荡减弱的原因, 所考虑的温度是 $T = 0.1$ 。更为直接的理解可以从文[113]中给定占据数下粒子的平均能量随 ϕ 的变化曲线得到。对于我们所考虑的半满情形, 各向异性的出现使得能量曲线的转折点减少, 如图7.5所示。相应地, 将能量对温度求偏导后的比热曲线中的峰谷数目会变少。

这样也说明Hofstadter蝴蝶中更高阶的子原胞可以通过比热测量来探测。通过降低温度, 即提高能量分辨率可以看到比热曲线剧烈的振荡行为, 它反映了不同朗道带间的大能隙和蝴蝶能谱中朗道带内部的小能隙。

7.5 小结

利用我们发展的量子转移矩阵方法, 二维格点上Hofstadter模型的热力学性质被讨论。在朗道规范下, 系统的配分函数能够简单地表示为一系列 2×2 的局域转移矩阵的乘积。这方法使得系统摆脱有限尺寸效应的约束, 准确有效地计算热力学量, 从而揭示振荡行为的许多有趣特性。在高温下, 格点修正小, 而在高场低温情形, 格点修正非常显著。在磁化强度的振荡曲线上, dHvA振荡背

景上出现许多额外顺磁峰和抗磁谷结构，这些峰谷都源于Hofstadter能带的蝴蝶分形结构。尤其是磁化率对态密度的变化非常敏感。如果费米能级处态密度具有范·霍夫奇异性磁化率呈现顺磁峰，如果费米面是狄拉克点，磁化率表现抗磁性的谷。对于可以在超晶格[51]和冷原子[116]系统中实现的磁化率测量，将不仅能得到能谱的分形结构也能得知Hofstadter模型的态密度情况。除了与磁有关的振荡，这一模型的比热也表现出了振荡行为。低温低场下，其振荡周期与传统的dHvA振荡一致，这些振荡拥有同样的根源：垂直于磁场下的二维电子气系统总能量随磁场周期性地发生改变。同样地，低温高场看到了显著的格点修正。随着温度降低，更多精细的振荡在dHvA振荡周期的背景下出现。许多来自于高阶原胞的能隙在比热行为中得到体现。当各向异性引入，收缩的能隙使得比热的振荡弱化。比热行为清晰地体现了Hofstadter蝴蝶的嵌套结构。对于比热振荡行为的测量可以确定这一特殊的分形能谱，还能辨别转移积分里的各向异性。另外，由于比热测量对样品的纯度要求不如其他物理量的测量要求高，在实验上是值得一试的。对于某一给定温度，在扣除声子背景后，将可以清晰地看到电子贡献的比热随磁场的振荡图像。

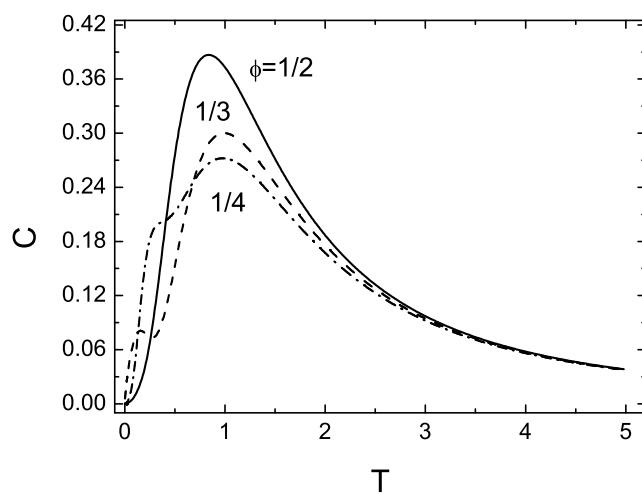


图 7.7: 半满时Hofstadter模型里比热 C 随温度变化情况。三个不同磁场强度 $\phi = 1/2, 1/3, 1/4$ 被比较。

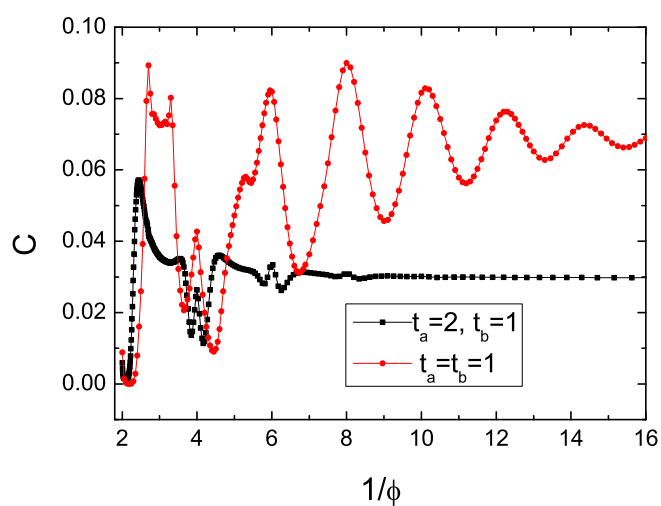


图 7.8: $T = 0.1$ 时, 半满占据下在均匀和各向异性情形比热随磁场倒数 $1/\phi$ 的变化比较。黑色方块代表有各向异性的情形 ($t_a = 2, t_b = 1$), 红色圆圈对应均匀情形 ($t_a = t_b = 1$)。

第八章 总结

这篇论文精确求解了两类量子格点模型：其一是一维的 $S = 1$ 具有单离子各向异性的量子Ising模型，其二是受晶格势场和磁场共同作用的Hofstadter模型。在两个模型的求解过程中，都发展了新颖的方法和技巧去推动模型的配分函数计算变得可行。

对于 $S = 1$ 晶场Ising模型的处理，因为非磁极化状态 $S_z = 0$ （空穴）是哈密顿量的守恒量，加上Lieb-Mattis 定理[77]对于基态的证明，Oitmaa等人发现了 $S = 1$ 晶场模型与一维横场Ising模型基态有着一一对应关系[32]。在这个工作基础上，我们以好量子数（空穴个数）来划分整个Hilbert空间，提出了空穴分解方案，将一条 $S = 1$ 的晶场Ising链视为被非磁参杂（空穴）隔开的许多的横场Ising模型片段，系统的配分函数写为空穴部分和 $S = 1/2$ 横场Ising段的乘积。因为一维横场Ising模型的求解已经知晓，那么我们只需实现所有空穴构型对应的配分函数求和即可。然而，这并不是件容易的事情，对于给定链长的系统，空穴数目可以从0变到链长大小，而每一个空穴数目固定的单元却有着所有可能的空穴占位，系统总的构型数目是随着链长指数增长的。如何实现所有可能构型的求和，我们发展的迭代方法解决了这个难题，从而可以讨论系统的热力学极限行为。这一迭代方式具有广泛的适用范围，就这个模型而言，只要我们知道一维横场Ising模型的任何物理量的表达，通过迭代方案就可以得到一维 $S = 1$ 晶场Ising模型的行为。

我们发现空穴激发对应一个特征的能量尺度，与一维 $S = 1/2$ 横场Ising模型的费米型激发一起主导着系统的低能激发行为，这可以从比热的双峰结构得以体现。哈密顿量中 z 方向的单粒子各向异性项起着调节空穴数目的作用，如同化学势，这丰富了该模型的基态相图，除了已经在一维横场Ising模型中看到的磁有序/无序的二阶相变行为外，从静态关联函数随 D_z 的变化可以看出磁有序相到空穴凝聚相的一阶转变行为。也因为空穴激发的影响，呈现在一维 $S = 1/2$ 横场Ising模型的量子临界性受到压制。当系统中出现二聚化时，通过对奇偶格点各自对应的波函数Ansatz，我们获得了其严格解。二聚化也引入了特征能量，即二聚化能隙。二聚化强度参数 Ω 和磁序竞争参数 R 组成的空间里有着磁有序和顺磁相由对称曲线隔开。在空穴方案和迭代方法的框架下，目前只求取了静态关

联函数，对于动态关联函数还不可行。

对于Hofstadter模型的求解，我们提出了新颖的量子转移矩阵方法，这个方法可用于有效求解任意一维无相互作用的格点依赖（或键依赖）的费米子模型。本文首先用一维的无序Anderson模型来演示了这一方法的求解过程。模型里的无序破坏了系统的平移对称性，带来了解析求解的困难。量子转移矩阵方法通过对温度倒数的划分引入Trotter空间，在这个空间里具有平移不变性，采用傅立叶变换，将配分函数表达成一系列 2×2 矩阵的乘积，这样我们能够计算足够大的尺寸来研究系统的热力学行为。Hofstadter模型在朗道规范的选取下，哈密顿量脱耦成许多由对一个方向采用傅立叶变换后的特征动量 k 标示的一维哈密顿量的求和，可以通过量子转移矩阵方法求解。

Bloch电子在磁场下的行为与朗道极限出发受晶场作用的影响都可以统一到由Harper方程来描述。我们知道，自由电子在磁场下会出现典型的dHvA效应，引入晶场后，我们从磁化强度随磁场倒数的变化曲线中，看到格点的修正效应，在低温强场下，在对应dHvA效应的背景上出现了精细的振荡结构，这与Hofstadter能谱结构是一致的。晶场的扰动使得朗道能级简并解除，展宽成能带，除了大的不同朗道能级之间的能隙外，一个朗道能级内部还存在小能隙。这些能隙当温度降到特征能量 $k_B T$ 与之相当时就可以被识别，在磁化强度的振荡曲线中表现为附加在dHvA振荡背景上的细致结构。在振荡图中可以看到，除了熟知的朗道抗磁性还有顺磁行为。文章[65] 指出：晶场的引入使得系统能量出现比自由电子能量更低的极小值，这样系统中会出现顺磁响应。而分母 q 的奇偶性带来的费米面附近态密度的不同奇异性对应了磁化率的顺磁峰和抗磁谷。比热随磁场变化的曲线中也出现了振荡行为，与磁化强度振荡的根源一致：即系统的总能量随磁场的周期性变化。它们都可以作为实验观测的对象来探测Hofstadter模型的特殊能谱结构。

附录 A 第二章中定理2的证明

对于由方程 (2.4) 定义的哈密顿量，每个格点的空穴数 $1 - (S_i^z)^2$ 是一个守恒量，空穴不产生动力学效应。对于一个有 p 个空穴的系统，如果一个空穴处在格点 i ，那么哈密顿量的本征函数 $|\psi_i(p, L)\rangle$ 可以表示为一个空穴态和 $(p - 1)$ 个空穴系统的哈密顿量（不包含格点 i ）对应的本征态的乘积，即

$$|\psi_i(p, L)\rangle = |\phi_i(p - 1, L - 1)\rangle |0\rangle_i. \quad (\text{A.1})$$

从中，我们可以构建一个试探波函数，将 i 格点的空穴状态变为自旋极化状态，表达式为

$$|\psi_{trial}(p - 1, L)\rangle = |\phi_i(p - 1, L - 1)\rangle \frac{|1\rangle_i + |-1\rangle_i}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.2})$$

$|\psi_{trial}(p - 1, L)\rangle$ 有 $(p - 1)$ 空穴。容易验证这个试探波函数具有相同的能量期望值。

$$\langle \psi_{trial}(p - 1, L) | H | \psi_{trial}(p - 1, L) \rangle = \langle \psi_i(p, L) | H | \psi_i(p, L) \rangle.$$

然而， $|\psi_{trial}(p - 1, L)\rangle$ 并不是哈密顿量的本征态，除非格点 i 的两个近邻都是空穴状态。由基态波函数的变分原理可知，我们可以通过将空穴态变为自旋极化状态来降低系统的能量。因此， $(p - 1)$ 个空穴系统的基态能一定低于 p 个空穴系统的基态能。

这样，定理2得证。

附录 B M-矩阵的对角化

对于周期性的自旋链，M-矩阵的对角化已经在章节 4.1.1 中讨论过。这里我们考虑的对象是长度为 l 的开放自旋链，要对角化的是 $l \times l$ 的 M-矩阵，目的在于求解下面的本征值方程：

$$M\Phi_k = \Lambda^2(k)\Phi_k, \quad (\text{B.1})$$

其中， $\Phi_k(j)$'s 是方程 (4.41) 所定义的形式。

我们假定开链的两个边界分别位于格点 r_1 和 r_2 处。 r_1 和 r_2 可以对应奇或偶格点，因此存在四种 M-矩阵，我们将分别讨论。

B.1 $(r_1, r_2) = (\text{odd}, \text{even})$

在这种情形下，矩阵 M 定义为

$$M = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_1 & b_1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_1 & a_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

其中， $a_{1,2}$, $b_{1,2}$ 是定义在方程 (4.27) 中的参数，且有 $a_0 = D_1$ 。

能谱可由文中所给出的方法求解，结果如下：

$$\Lambda^2(k) = \frac{1}{e^{2ik} - t_e e^{-2ik}} [b_1 \tau (e^{ik} - t_o e^{-ik}) + a_2 (e^{2ik} - t_e e^{-2ik}) + b_2 \tau (e^{3ik} - t_o e^{-3ik})],$$

其中，反射参数满足

$$\frac{t_o}{t_e} = \frac{b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik}}{b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik}}. \quad (\text{B.3})$$

因此, 可以得到

$$t_o = e^{2i(l+1)k}, \quad (\text{B.4})$$

$$t_e = \frac{t_o(b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik})}{(b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik})}. \quad (\text{B.5})$$

相应的久期方程为

$$\begin{aligned} & [(a_2 - a_1) \pm W] [b_1 \sin(l+2)k + b_2 \sin lk] \\ &= \frac{2(a_0 - a_1)(b_1^2 + b_2^2 + 2b_1 b_2 \cos 2k) \sin lk}{b_2}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

这里, W 的表达已在方程 (4.30) 中给出. 同理推广到另三种情形.

B.2 $(r_1, r_2) = (odd, odd)$

此时的矩阵是

$$M = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_2 & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_2 & a_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.7})$$

因此得到反射系数 $t_{o,e}$ 为

$$t_e = e^{2i(l+1)k}, \quad (\text{B.8})$$

$$t_o = \frac{t_e(b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik})}{(b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik})}. \quad (\text{B.9})$$

相应的久期方程是

$$\begin{aligned} & 2b_2(b_1^2 + b_2^2 + 2b_1 b_2 \cos(2k)) \sin(l+1)k \\ &= (a_0 - a_1) [b_1 \sin(l-1)k + b_2 \sin(l+1)k] [(a_1 - a_2) \pm W]. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

B.3 $(r_1, r_2) = (\text{even}, \text{even})$

这种情况下的矩阵表达式如下：

$$M = \begin{pmatrix} a_3 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_2 & a_1 & b_1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_1 & a_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_1 & b_1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_1 & a_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.11})$$

这里, $a_3 = D_2$ 。

反射参数 t_e, t_o 满足

$$t_e = e^{2i(l+1)k}, \quad (\text{B.12})$$

$$t_o = \frac{t_e(b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik})}{(b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik})}. \quad (\text{B.13})$$

相应的久期方程是

$$\begin{aligned} & 2b_1[b_1^2 + b_2^2 + 2b_1b_2 \cos(2k)] \sin(l+1)k \\ & = (a_3 - a_2) [b_1 \sin(l+1)k + b_2 \sin(l-1)k] [(a_2 - a_1) \pm W]. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

B.4 $(r_1, r_2) = (\text{even}, \text{odd})$

此时的矩阵表达式为

$$M = \begin{pmatrix} a_3 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_2 & a_1 & b_1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_1 & a_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_2 & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_2 & a_1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.15})$$

反射参数 t_e, t_o 满足关系式：

$$t_o = e^{2i(l+1)k}, \quad (\text{B.16})$$

$$t_e = \frac{t_o(b_1 e^{-ik} + b_2 e^{ik})}{(b_1 e^{ik} + b_2 e^{-ik})}, \quad (\text{B.17})$$

对应的久期方程是

$$2b_1[b_1 \sin(lk) + b_2 \sin(l+2)k] = (a_3 - a_2) [(a_1 - a_2) \pm W]. \quad (\text{B.18})$$

B.5 段配分函数

在上述四种情形下, 长度为 l 的段配分函数表达式为

$$z_{(r_{1,2}, r_{1,2})}(l) = \prod_{\substack{k_1 \in (0, \pi/2), \\ k_2 \in (\pi/2, \pi)}} \cosh \left[\frac{\beta \Lambda_3(k_1)}{2} \right] \cosh \left[\frac{\beta \Lambda_4(k_2)}{2} \right], \quad (\text{B.19})$$

其中, $(r_{1,2}, r_{1,2}) = (\text{odd/even}, \text{odd/even})$, $k_{1,2}$ 分别满足相应的久期方程 (B.6) (B.10), (B.14), (B.18)。

附录 C 均匀段的格林函数

在Bogoliubov 变换里，产生湮灭算符 η_k^\dagger, η_k 通过方程 (4.9) 和 (4.10) 引入。它们可以通过式 (4.18) 用波函数 Φ_{kj} 和 Ψ_{kj} 表达为：

$$\begin{aligned}\eta_k^\dagger &= \sum_j \frac{\Phi_{kj}^* + \Psi_{kj}^*}{2} c_j^\dagger + \frac{\Phi_{kj}^* - \Psi_{kj}^*}{2} c_j, \\ \eta_k &= \sum_j \frac{\Phi_{kj} + \Psi_{kj}}{2} c_j + \frac{\Phi_{kj} - \Psi_{kj}}{2} c_j^\dagger.\end{aligned}$$

反过来，我们可以得到

$$\begin{aligned}c_j^\dagger &= \sum_k \frac{\Phi_{kj} + \Psi_{kj}}{2} \eta_k^\dagger + \frac{\Phi_{kj}^* - \Psi_{kj}^*}{2} \eta_k, \\ c_j &= \sum_k \frac{\Phi_{kj}^* + \Psi_{kj}^*}{2} \eta_k + \frac{\Phi_{kj} - \Psi_{kj}}{2} \eta_k^\dagger.\end{aligned}$$

我们定义格林函数的表达式如下：

$$G_{jq} \equiv \langle F_j^{(-)} F_q^{(+)} \rangle, \quad (\text{C.1})$$

这里， $F_j^{(\pm)} \equiv c_j^\dagger \pm c_j$ 。

对于均匀情形，波函数可取为实数，可以得到

$$\begin{aligned}F_j^{(-)} &= \sum_k \Psi_{kj} (\eta_k^\dagger - \eta_k), \\ F_j^{(+)} &= \sum_k \Phi_{kj} (\eta_k^\dagger - \eta_k).\end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

那么，有限温下的格林函数表达式为

$$G_{jq}(\beta) = - \sum_k \Psi_{kj} \Phi_{kq} \tanh[\beta \Lambda(k)/2].$$

零温下有

$$G_{jq}(\beta \rightarrow \infty) = - \sum_k \Psi_{kj} \Phi_{kq}.$$

为了区分周期性边界条件 (PBC) 和开放边界条件 (OBC), 我们把周期性边界条件下的波函数标记为 Φ^c, Ψ^c , 相应地, 开放边界条件 (自由边界) 下的表示为 Φ^f, Ψ^f 。在 PBC 情形下, M-矩阵的矩阵元是

$$M_{jq} = -D(\lambda^2 \delta_{jq} + \delta_{j+1,q} + \delta_{j-1,q}).$$

得到的波函数解为

$$\Phi_{kj}^c = \begin{cases} \sqrt{2/l} \sin jk, & k > 0 \\ \sqrt{2/l} \cos jk, & k \leq 0 \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

其中, l 是段长。按照方程 (4.16) 可以得到

$$\Psi_{kq}^c = -D\Lambda^{-1} [(1 + \lambda \cos k) \Phi_{kq}^c + \lambda \sin k \Phi_{-kq}^c]. \quad (\text{C.4})$$

那么,

$$\begin{aligned} G_{jq}^c &= -\sum_{k>0} \frac{2D}{l\Lambda(k)} [\cos(j-q)k + \lambda \cos(j-q+1)k], \\ G_r^c &= L_r + \lambda L_{r+1}, \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

其中, $r \equiv |j-q|$, 正如文献 [11, 12] 所定义,

$$L_r = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dk \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}} \cos kr.$$

在 OBC 情形下, 波函数的解为

$$\Phi_{kj}^f = A_k \sin(j-q+1)k, \quad (\text{C.6})$$

$$\Psi_{kj}^f = A_k \delta_k \sin jk, \quad (\text{C.7})$$

其中,

$$A_k = \frac{1}{2} \left[2l + 1 - \frac{\sin(2l+1)k}{\sin k} \right]^{-1/2}, \quad (\text{C.8})$$

$\delta_k = -\text{sign}(\sin lk / \sin k)$ 这个符号因子源自方程 (4.16)。那么格林函数表达为

$$G_{jq}^f = -\sum_k A_k^2 \delta_k \sin jk \sin(j-q+1)k. \quad (\text{C.9})$$

注意, 在基态, $\beta \rightarrow \infty$, 那么 $\tanh[\beta\Lambda(k)/2] \rightarrow 1$ 有限温时可以得到

$$\begin{aligned}
 G_{jq}^c(\beta) &= - \sum_{k>0} \frac{2 \tanh[\beta\Lambda(k)/2]}{l\Lambda(k)} \\
 &\quad \times [\cos(j-q)k + \lambda \cos(j-q+1)k] , \\
 G_{jq}^f(\beta) &= - \sum_k A_k^2 \delta_k \sin jk \sin(j-q+1)k \tanh\left[\frac{\beta\Lambda(k)}{2}\right].
 \end{aligned}$$

附录 D 二聚化段的格林函数

在二聚化情形，一般而言波函数 Φ_{kj} 和 Ψ_{kj} 是复数，可以得到

$$\begin{aligned} F_j^{(-)} &= \sum_k \Psi_{kj} \eta_k^\dagger - \Psi_{kj}^* \eta_k, \\ F_j^{(+)} &= \sum_k \Phi_{kj} \eta_k^\dagger + \Phi_{kj}^* \eta_k. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

那么，格林函数表达式为

$$G_{jq} = \sum_k (\Psi_{kj} \Phi_{kq}^* + \Psi_{kj}^* \Phi_{kq}) \langle \eta_k^\dagger \eta_k \rangle - \sum_k \Psi_{kj} \Phi_{kq}^*. \quad (\text{D.2})$$

这里， $\langle \eta_k^\dagger \eta_k \rangle = [\exp(\Lambda_k/(k_B T)) + 1]^{-1}$ ，满足Fermi-Dirac 统计。零温时，格林函数（参考方程(4.78)）可写为

$$G_{jq} = D_j Y[j, q] + 2J_j Y[j + 1, q], \quad (\text{D.3})$$

其中，

$$Y[j, q] = - \sum_k \frac{e^{i(j-q)k}}{\Lambda(k)} [1 + (-1)^{j+q} \gamma^* \gamma + (-1)^j \gamma + (-1)^q \gamma^*]. \quad (\text{D.4})$$

二聚化参数 γ 定义为

$$\gamma = \frac{1 - \tau}{1 + \tau} \quad (\text{D.5})$$

其中， τ 由式 (4.29) 定义。

一般说来，对应于方程 (4.29) 中的 \pm 符号， τ 有两个解。为了数值计算格林函数，我们需要用实变量来表达 $Y[j, q]$ 函数。下面引入变量 p, q 去表达复数 γ 。

$$\gamma_1 = p_1 + iq_1, \quad \gamma_2 = p_2 + iq_2, \quad (\text{D.6})$$

$p_{1,2}$ 和 $q_{1,2}$ 分别是 $\gamma_{1,2}$ 的实部和虚部。

$$\begin{aligned} p_{1,2} &= \frac{b_1^2 + b_2^2 + 4b_1 b_2 \cos 2k - (\zeta_1 \mp \zeta_2)^2}{[(b_1 + b_2) \cos k - \zeta_1 \pm \zeta_2]^2 + (b_2 - b_1)^2 \sin^2 k}, \\ q_{1,2} &= \frac{-2(b_2 - b_1) \sin k [(b_1 + b_2) \cos k + \zeta_1 \mp \zeta_2]}{[(b_1 + b_2) \cos k - \zeta_1 \pm \zeta_2]^2 + (b_2 - b_1)^2 \sin^2 k}, \end{aligned}$$

这里, 下标1 对应于 \pm 或 \mp 上面的符号, 下标2 对应于下面的符号。 $\zeta_{1,2}$ 的表达式是

$$\begin{aligned}\zeta_1 &= (a_2 - a_1)/2, \\ \zeta_2 &= \Gamma^2 \sqrt{1 - P + Q \cos 2k}.\end{aligned}$$

现在我们可以进一步约化格林函数。为方便起见, 我们将 k 的取值区域 $[-\pi, \pi)$ 划分为两个部分, 区域(I) 对应 $[-\pi/2, \pi/2)$, 区域(II) 对应 $[-\pi, -\pi/2) \cup [\pi/2, \pi)$ 。

这样, G_{jq} 可表示为

$$G_{jq} = G_{jq}^{(I)} + G_{jq}^{(II)}. \quad (\text{D.7})$$

在区域(I) 中, 因为 $k, -k$ 取值结果相等, 可将格林函数约化在区间 $(0, \pi/2)$ 取值,

$$\begin{aligned}G_{jq}^{(I)} &= - \sum_{(0, \pi/2)} \frac{2}{\Lambda_3(k)} \{ D_j [1 + (-1)^{j+q} (p_1^2 + q_1^2) \\ &\quad + (-1)^j p_1 + (-1)^q p_1] \cos(j - q)k \\ &\quad + 2J_j [1 + (-1)^{j+q+1} (p_1^2 + q_1^2) \\ &\quad + (-1)^{j+1} p_1 + (-1)^q p_1] \cos(j - q + 1)k \}.\end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

区域(II) 中的结果与区域(I) 类似。

由方程 (D.4) 定义的函数 $Y[j, q]$ 可改写为

$$\begin{aligned}Y[j, q] &= - \sum_{(0, \pi/2)} \frac{2}{\Lambda_3(k)} [1 + (-1)^{j+q} (p_1^2 + q_1^2) \\ &\quad + (-1)^j p_1 + (-1)^q p_1] \cos(j - q)k \\ &\quad - \sum_{(\pi/2, \pi)} \frac{2}{\Lambda_4(k)} [1 + (-1)^{j+q} (p_2^2 + q_2^2) \\ &\quad + (-1)^j p_2 + (-1)^q p_2] \cos(j - q)k,\end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

因为用 $Y[j, q]$ 可以方便地写出方程 (D.3) 定义的总格林函数。对于二聚化情形, 基于段两端空穴所处格点的奇偶性, 格林函数有四种表达形式。

附录 E 有限温下段的自旋-自旋关联函数

段关联函数定义式为

$$\rho_{mn}^a(\beta) \equiv 4 \langle s_m^a s_n^a \rangle_\beta \quad (\text{E.1})$$

其中, $a = x, y, z$, $s = 1/2$ 。

当 $m = n$ 时, 关联函数 $\rho_{mn}^a = 1$ 。当 $m < n$, x -方向的关联函数表达式为

$$\rho_{mn}^x(\beta) = \langle F_m^{(-)} F_m^{(+)} F_n^{(-)} F_n^{(+)} \rangle_\beta,$$

考虑所有可能的收缩, 可以得到

$$\begin{aligned} \rho_{mn}^x(\beta) &= \sum_{k, k'} (\psi_{km} \phi_{km} \psi_{k'n} \phi_{k'n} - \psi_{kn} \phi_{km} \psi_{k'm} \phi_{k'n}) \\ &\quad \times \tanh[\beta\Lambda(k)/2] \tanh[\beta\Lambda(k')/2]. \end{aligned}$$

z -方向的自旋-自旋关联函数 $\rho_{mn}^z(\beta)$ 形式与方程 (4.76), 只需要用 $G_{jq}(\beta)$ 替换 G_{jq} 。

附录 F 指数算符的矩阵元

我们已知在总粒子数为1的子空间 $\{|0, 1\rangle, |1, 0\rangle\}$ 中, $h(i, i+1)$ 的矩阵形式为

$$h_{i,i+1} = m_i \cdot \mathbf{1} - m_i \cdot \sigma_z - t_i \cdot \sigma_x. \quad (\text{F.1})$$

因此, $\exp[-\epsilon h(i, i+1)]$ 在这个子空间的矩阵元即为

$$e^{-\epsilon h_{i,i+1}} = e^{-\epsilon m_i} e^{\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x}. \quad (\text{F.2})$$

那么

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\epsilon h_{i,i+1}}}{e^{-\epsilon m_i}} &= e^{\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x} \\ &= 1 + \epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x + \frac{1}{2}(\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x)^2 \\ &\quad + \frac{1}{3!}(\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x)^3 + \frac{1}{4!}(\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x)^4 + \dots \\ &= 1 + \epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x + \frac{1}{2}\epsilon^2(m_i^2 + t_i^2) \\ &\quad + \frac{1}{3!}\epsilon^2(m_i^2 + t_i^2)(\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x) + \frac{1}{4!}\epsilon^4(m_i^2 + t_i^2)^2 + \dots \\ &= 1 + \frac{1}{2}\epsilon^2(m_i^2 + t_i^2) + \frac{1}{4!}\epsilon^4(m_i^2 + t_i^2)^2 \dots \\ &\quad + \frac{1}{\epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2}} \left[\epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2} + \frac{1}{3!} \left(\epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2} \right)^3 + \dots \right] (\epsilon m_i \sigma_z + \epsilon t_i \sigma_x) \\ &= \cosh \epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2} + \frac{m_i \sinh \epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2}}{\sqrt{m_i^2 + t_i^2}} \sigma_z + \frac{t_i \sinh \epsilon \sqrt{m_i^2 + t_i^2}}{\sqrt{m_i^2 + t_i^2}} \sigma_x. \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

这样, 在定义了简化符号后, 就得到了式(5.15)中相应的矩阵元。

参考文献

- [1] P. W. Anderson. More Is Different, *Science*. **177**, 393(1972).
- [2] 于渌, “演生现象—对建构论的挑战”, 中科院研究生院科学与人文论坛, 2008 .
- [3] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik. *Bosonization and Strongly Correlated Systems*, Cambridge University Press, New York, 1998.
- [4] R. B. Laughlin, and D. Pines. The Theory of Everything, *PNAS*. **97** : 28-31, 2000.
- [5] J. Horgan. *The End of Science: Facing the limits of Knowledge in the Twilight of the Scientific Age*, Addison-Wesley, Reading, MA. 1997.
- [6] Frank A. Butler and E. Brown. Model calculations of magnetic band structure. *Phys. Rev.*, 166(3):630–636, Feb 1968.
- [7] 于渌, 郝柏林, 陈晓松, *边缘奇迹: 相变和临界现象*, 科学出版社, 2005.
- [8] H. A. Kramers and G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i. *Phys. Rev.*, 60(3):252–262, Aug 1941.
- [9] M. Suzuki. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional ising systems. *Prog. Theor. Phys.*, 56:1454, 1976.
- [10] M. A. Continentino, *Phys. Rep.* **239** 181 (1994).
- [11] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys.(N.Y.)* **16**, 407(1961).
- [12] P. Pfeuty. The one-dimensional Ising model with a transverse field. *Ann. Phys.(N.Y.)* **57**, 79(1970).

- [13] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shahar. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 69(1):315–333, Jan 1997.
- [14] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, New York, 1999.
- [15] A. Kopp and S. Chakravarty. Criticality in correlated quantum matter. *Nature Phys.*, 1:53–56(2005).
- [16] John B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, 51(4):659–713, Oct 1979.
- [17] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli. Quantum critical behavior for a model magnet. *Phys. Rev. Lett.*, 77(5):940–943, Jul 1996.
- [18] B. K. Chakrabarti, A. Dutta, and P. Sen, *Quantum Ising Phase and Transitions in Transverse Ising Models*, Springer, Berlin, 1996.
- [19] J. Richter, S. E. Kruger, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop, in *Series on Advances in Quantum Many-Body Theory*, World Scientific, Singapore, 2001, Vol.5, p.239.
- [20] L.-M. Duan, E. Demler, and M. D. Lukin. Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 91(9):090402, Aug 2003; D. Porras and J. I. Cirac. Effective quantum spin systems with trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 92(20):207901, May 2004.
- [21] A. Micheli, G. K. Brennen, and P. Zoller. A toolbox for lattice-spin models with polar molecules. *Nature Phys.*, **2**, 341(2006).
- [22] A. Abragam and B. Bleaney, *Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions*, Oxford University, Oxford, 1970.
- [23] 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(15):1153–1156, Apr 1983.

-
- [24] N. C. Eddeqaqi, M. Saber, A. El-Atri, and M. Kerouad. Phase diagram of spin-1 Ising model in transverse crystal field. *Physica A* **272**, 144 (1999).
- [25] Xue-Fan Jiang, Jia-Liang Li, Jia-lin Zhong, and Chuan-Zhang Yang. Effect of a crystal field on phase transitions in a spin-1 transverse ising model. *Phys. Rev. B*, 47(2):827–830, Jan 1993.
- [26] W. Jiang, G. Z. Wei, A. Du, L. Q. Guo. Phase diagrams and tricritical behavior in a spin- Ising model with transverse crystal field. *Physica A* **313**, 503 (2002).
- [27] Q. Zhang, G. Z. Wei, Y. Q. Liang. Phase diagrams and tricritical behavior in spin-1 Ising Model with biaxial crystal-field on honeycomb lattice. *J. Magn. Magn. Matter* **253**, 45 (2002).
- [28] W. Jiang, G. Z. Wei and Q. Zhang. Effects of biaxial crystal-field on spin1.4 honeycomb lattice. *Physica A* **329**, 161 (2003).
- [29] Yasusada Yamada, Norikazu Todoroki, and Seiji Miyashita. Theory of ferroelectric phase transition in *srtio3* induced by isotope replacement. *Phys. Rev. B*, 69(2):024103, Jan 2004.
- [30] L. Xu, S. L. Yan. Critical properties of the biaxial Ising model with both the longitudinal crystal field and the transverse dilution crystal field. *Solid State Commun.* **142**, 159 (2007).
- [31] J. Ricardo de Sousa and N. S. Branco. Variational-method study of the spin-1 ising model with biaxial crystal-field anisotropy. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 77(1):012104, 2008.
- [32] J. Oitmaa and A. M. A. von Brasch. Spin-1 ising model in a transverse crystal field. *Phys. Rev. B*, 67(17):172402, May 2003.
- [33] Y. Fukumoto and A. Oguchi. Thermodynamic Properties of the Transverse-Crystal-Field Ising Model on a Δ Chain *Prog. Theor. Phys.* **115**, 847 (2006);

- Y. Fukumoto and A. Oguchi. Ground State and Thermodynamic Properties of the Spin-1 Antiferromagnetic Ising Model on a Chain in Transverse Crystal Fields. *AIP Conf. Proc.* **850**, 1081 (2006).
- [34] O. Derzhko. Quantum phase transitions in alternating transverse Ising chains. *cond-mat/0412682* (2004).
- [35] Oleg Derzhko, Taras Krokhmal'skii, Joachim Stolze, and Gerhard Muller. Dimer and trimer fluctuations in the $s = (1/2)$ transverse xx chain. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 71(10):104432, 2005.
- [36] Oleg Derzhko, Johannes Richter, Taras Krokhmal'skii, and Oles' Zaburannyi. Regularly alternating spin-1/2 anisotropic xy chains: The ground-state and thermodynamic properties. *Phys. Rev. E*, 69(6):066112, Jun 2004.
- [37] K. Okamoto. Longitudinal Spin Correlation in Spin-0.5 Dimerized XY Chain. *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 2947 (1988); Longitudinal Spin Correlation in Spin-0.5 Dimerized XY Chain. II. Finite Temperature. *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 2004 (1989).
- [38] G. Spronken, B. Fourcade, and Y. Lépine. Finite-size study of the one-dimensional spin-(1/2) dimerized heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 33(3):1886–1903, Feb 1986.
- [39] Rajiv R. P. Singh, Zheng Weihong, C. J. Hamer, and J. Oitmaa. Dimer order with striped correlations in the $j_1 - j_2$ heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 60(10):7278–7283, Sep 1999.
- [40] Oleg A. Starykh and Leon Balents. Dimerized phase and transitions in a spatially anisotropic square lattice antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 93(12):127202, Sep 2004.
- [41] T. Nakano and H. Fukuyama. Dimerization and Solitons in One-Dimensional XY-Z Antiferromagnets. *J. Phys. Soc. Jpn.* **50**, 2489 (1981).

-
- [42] H. N. Wu, Z. H. Yang, J. H. Dai, H. P. Ying. Rigorous results for the quantum phase transitions in a dimerized $S=1$ Ising lattice *Mod. Phys. Lett. A* **22**, 727 (2007).
- [43] F. Bloch, *Z. Phys.* **52**, 555(1928).
- [44] L. Landau, *Z. Phys.* **64**, 629(1930).
- [45] Ulrich Rössler, Michael Suhrke, *Bloch electrons in a magnetic field: Hofstadter's butterfly*, Springer Berlin, Heidelberg, 2000.
- [46] M. Ya. Azbel, *Zh. Eksp. Toer. Fiz* **46**, 730 (1964) [*Sov. Phys. JETP* **19**, 634 (1964)].
- [47] Dieter Langbein. The tight-binding and the nearly-free-electron approach to lattice electrons in external magnetic fields. *Phys. Rev.*, 180(3):633–648, Apr 1969.
- [48] D. Springsguth, R. Ketzmerick, and T. Geisel. Hall conductance of bloch electrons in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 56(4):2036–2043, Jul 1997.
- [49] P. G. Harper. Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field. *Proc. Phys. Soc. Lond. A*, 68:874–878, 1955.
- [50] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49(6):405–408, Aug 1982.
- [51] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer. Evidence of hofstadter's fractal energy spectrum in the quantized hall conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 86(1):147–150, Jan 2001.
- [52] Douglas R. Hofstadter. Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 14(6):2239–2249, Sep 1976.
- [53] J. C. Slater. Electrons in perturbed periodic lattices. *Phys. Rev.*, 76(11):1592–1601, Dec 1949.

- [54] J. M. Luttinger. The effect of a magnetic field on electrons in a periodic potential. *Phys. Rev.*, 84(4):814–817, Nov 1951.
- [55] Walter Kohn. Theory of bloch electrons in a magnetic field: The effective hamiltonian. *Phys. Rev.*, 115(6):1460–1478, Sep 1959.
- [56] Gregory H. Wannier. Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields. *Rev. Mod. Phys.*, 34(4):645–655, Oct 1962.
- [57] P. Streda. Theory of quantized hall conductivity in two dimensions. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 15:L717–L721, Aug 1982.
- [58] D. Weiss, K. V. Klitzing, K. Ploog, G. Weimann. Magnetoresistance oscillations in a two-dimensional electron gas induced by a submicrometer periodic potential. *Europhys. Lett.* **8**, 179 (1989).
- [59] R. R. Gerhardts, D. Weiss, and K. v. Klitzing. Novel magnetoresistance oscillations in a periodically modulated two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 62(10):1173–1176, Mar 1989.
- [60] Rolf R. Gerhardts, Dieter Weiss, and Ulrich Wulf. Magnetoresistance oscillations in a grid potential: Indication of a hofstadter-type energy spectrum. *Phys. Rev. B*, 43(6):5192–5195, Feb 1991.
- [61] U. Kuhl and H.-J. Stöckmann. Microwave realization of the hofstadter butterfly. *Phys. Rev. Lett.*, 80(15):3232–3235, Apr 1998.
- [62] O. Gat and J. E. Avron. Semiclassical analysis and the magnetization of the hofstadter model. *Phys. Rev. Lett.*, 91(18):186801, Oct 2003.
- [63] P. B. Wiegmann and A. V. Zabrodin. Bethe-ansatz for the bloch electron in magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 72(12):1890–1893, Mar 1994.
- [64] Yasuhiro Hatsugai, Mahito Kohmoto, and Yong-Shi Wu. Explicit solutions of the bethe ansatz equations for bloch electrons in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 73(8):1134–1137, Aug 1994.

-
- [65] Y. Hasegawa, P. Lederer, T. M. Rice, and P. B. Wiegmann. Theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 63(8):907–910, Aug 1989.
- [66] T. Schlösser, K. Ensslin, J. F. Kotthaus, M. Holland. Internal structure of a Landau band induced by a lateral superlattice: a glimpse of Hofstadter’s butterfly. *Europhys. Lett.* **33**, 683(1996).
- [67] P. W. Anderson, B. S. Shastry, and D. Hristopulos. Class of variational singlet wave functions for the hubbard model away from half filling. *Phys. Rev. B*, 40(13):8939–8944, Nov 1989.
- [68] P. Lederer, D. Poilblanc, and T. M. Rice. Superconductivity from commensurate flux phases. *Phys. Rev. Lett.*, 63(14):1519–1522, Oct 1989.
- [69] D. Poilblanc, Y. Hasegawa, and T. M. Rice. Numerical study of flux phases in the t-j model. *Phys. Rev. B*, 41(4):1949–1957, Feb 1990.
- [70] Didier Poilblanc and Yasumasa Hasegawa. Staggered flux phases in the t-j model. *Phys. Rev. B*, 41(10):6989–6993, Apr 1990.
- [71] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mottier insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* **415**, 39 (2002).
- [72] M. Uhlarz, C. Pfleiderer, and S. M. Hayden. Quantum phase transitions in the itinerant ferromagnet ZrZn_2 . *Phys. Rev. Lett.*, 93(25):256404, Dec 2004.
- [73] Y. J. Uemura, T. Goko, I. M. Gat-Malureanu, J. P. Carlo, P. L. Russo, *et. al.*, Phase separation and suppression of critical dynamics at quantum phase transitions of MnSi and $(\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x)\text{RuO}_3$. *Nature. Phys.* **3**, 29 (2007).
- [74] P. Gegenwart, Q. M. Si, F. Steglich. Quantum criticality in heavy-fermion metals. *Nature. Phys.* **4**, 186 (2008).
- [75] M. Blume. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, 141(2):517–524, Jan 1966.

- [76] H. W. Capel. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica* **32**, 966 (1966).
- [77] Elliott Lieb and Daniel Mattis. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels. *Phys. Rev.*, 125(1):164–172, Jan 1962.
- [78] A. Esucet, R. Viente, X. Solans and M. Font-Baidía. Crystal Structure and Magnetic Properties of $[\text{Ni}_2(\text{dpt})_2(\mu\text{-ox})(\mu\text{-N}_3)_n](\text{PF}_6)_n$ - A New Strategy To Obtain $S = 1$ Alternating Chains. *Inorg. chem.* **33**, 6007 (1993).
- [79] J. J. Borrás-Almenar, E. Coronado, J. Curely and R. Georges. Exchange Alternation and Single-ion Anisotropy in The Antiferromagnetic Heisenberg Chain $S = 1$. Magnetic and Thermal Properties of the Compound $\text{Ni}_2(\text{EDTA}) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. *Inorg. chem.* **34**, 2699 (1995).
- [80] S. Kimura, S. Hiraia, Y. Narumib, K. Kindoa, and M. Hagiwarac. High-field ESR measurements of an $S=1$ antiferromagnetic dimer compound. *Physica B* **294**, 47 (2001).
- [81] Y. Narumi, M. Hagiwara, R. Sato, K. Kindo, H. Nakano and M. Takahashi. High field magnetization in an $S=1$ antiferromagnetic chain with bond alternation. *Physica B* **246**, 509 (1998).
- [82] W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura and T. Goto. Magnetization Plateaus in NH_4CuCl_3 . *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1548 (1998).
- [83] H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N. V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C. P. Slichter, T. Goto, and Y. Ueda. Exact dimer ground state and quantized magnetization plateaus in the two-dimensional spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 82(15):3168–3171, Apr 1999.
- [84] H. Tsujii, B. Andraka, M. Uchida, H. Tanaka, and Y. Takano. Specific heat of the $s = 1$ spin-dimer antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{Mn}_2\text{O}_8$ in high magnetic fields. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 72(21):214434, 2005.

- [85] E. C. Samulon, Y.-J. Jo, P. Sengupta, C. D. Batista, M. Jaime, L. Balicas, I. R. Fisher. Ordered magnetic phases of the frustrated spin-dimer compound $\text{Ba}_3\text{Mn}_2\text{O}_8$. *cond-mat/* **0803.3830** (2008).
- [86] Michael H. Whitmore, Horacio R. Verdún, and David J. Singel. Electron-paramagnetic-resonance spectroscopy of manganese-doped $\text{Ba}_3(\text{VO}_4)_2$: Identification of tetrahedral Mn^{5+} and Mn^{4+} centers. *Phys. Rev. B*, 47(17):11479–11482, May 1993.
- [87] G. V. Brennen, A. Micheli, and P. Zoller. Designing spin-1 lattice models using polar molecules. *New J. Phy.* **9**, 138 (2007).
- [88] Zhihua Yang, Liping Yang, Jianhui Dai, and Tao Xiang. Rigorous solution of the spin-1 quantum ising model with single-ion anisotropy. *Physical Review Letters*, 100(6):067203, 2008.
- [89] Zhihua Yang, Liping Yang, Haina Wu, Jianhui Dai, and Tao Xiang, *arXiv*: 0811.2275v1 [cond-mat.str-el] (2008).
- [90] T. D. SCHULTZ, D. C. MATTIS, and E. H. LIEB. Two-dimensional ising model as a soluble problem of many fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 36(3):856–871, Jul 1964.
- [91] R. J. Elliott, P. Pfeuty, and C. Wood. Ising model with a transverse field. *Phys. Rev. Lett.*, 25(7):443–446, Aug 1970.
- [92] A. A. Ovchinnikov, D. V. Dmitriev, and V. Ya. Krivnov. The antiferromagnetic Ising chain in a mixed transverse and longitudinal magnetic field. *cond-mat/***0306468** (2003).
- [93] H. C. Fogedby. The Ising chain in a skew magnetic field. *J. Phys. C*. **11**, 2801 (1978).
- [94] J. Sirker, N. Laflorencie, S. Fujimoto, S. Eggert, and I. Affleck. Chain breaks and the susceptibility of $\text{Sr}_{2-x}\text{Cu}_{1-x}\text{Pd}_x\text{O}_{3+\delta}$ and other doped quasi-one-dimensional antiferromagnets. *Physical Review Letters*, 98(13):137205, 2007.

- [95] M. Hase, I. Terasaki, Y. Sasago, K. Uchinokura, and H. Obara. Effects of substitution of zn for cu in the spin-peierls cuprate, *cugeo3*: The suppression of the spin-peierls transition and the occurrence of a new spin-glass state. *Phys. Rev. Lett.*, 71(24):4059–4062, Dec 1993.
- [96] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Elsevier(Singapore) Pte Ltd., 2001.
- [97] T. Brandes and S. Kettmann. *Anderson Localization and Its Ramifications*. Springer, Berlin, 2003.
- [98] Liping Yang, Yongjun Wang, Wenhui Xu, Mingpu Qin, and Tao Xiang. Quantum transfer matrix method for one-dimensional disordered electronic systems. *arXiv*: 0812.0128v1 [cond-mat.str-el] (2008).
- [99] H. F. Trotter. On the product of semi-groups of operators. *Proc. Am. Math. Soc.*, 10:545–551, 1959.
- [100] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109(5):1492–1505, Mar 1958.
- [101] T. Xiang R. F. Bursill and G. A. Gehring. The density matrix renormalization group for a quantum spin chain at non-zero temperature. *J. Phys. : Condens. Matter*, 8:L583, 1996.
- [102] Xiaoqun Wang and Tao Xiang. Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. B*, 56(9):5061–5064, Sep 1997.
- [103] T. Xiang and X. Wang. *Density-Matrix Renormalization: A New Numerical Method in Physics*, pp. 149-172. edited by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg, Springer, New York, 1999.
- [104] H. Betsuyaku. Study of One-Dimensional Quantum Spin Systems by the Transfer-Matrix Method. *Prog. Theor. Phys.* **73**, 320 (1985).

-
- [105] R. Shankar and Ganpathy Murthy. Nearest-neighbor frustrated random-bond model in $d=2$: Some exact results. *Phys. Rev. B*, 36(1):536–545, Jul 1987.
- [106] R. Peierls, *Z. Phys.* **80**, 763(1933).
- [107] R. B. Laughlin. Quantized hall conductivity in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 23(10):5632–5633, May 1981.
- [108] M. Taut, H. Eschrig, and Manuel Richter. Effective hamiltonian approach for magnetic band structure and additional oscillations in the magnetization originating from the fermi surface at finite magnetic fields. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 72(16):165304, 2005.
- [109] V. M. Gvozdkov and M. Taut. Magnetic quantum oscillations of electrons on a two-dimensional lattice: Numerical simulations and the magnetic breakdown approach. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 75(15):155436, 2007.
- [110] Ashcroft, Neil W. and Mermin, N. David. *Solid State Physics*. Thomson Learning, Inc., 1976.
- [111] G. H. Wannier, *Phys. Stat. Sol. (b)* **88**, 757 (1978) ; G. H. Wannier, G. M. Obermair, R. Ray, *Phys. Stat. Sol. (b)* **93**, 337 (1979).
- [112] G. Montambaux. Comment on “theory of electronic diamagnetism in two-dimensional lattices”. *Phys. Rev. Lett.*, 63(15):1657, Oct 1989.
- [113] Y. Hasegawa, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, and G. Montambaux. Stabilization of flux states on two-dimensional lattices. *Phys. Rev. B*, 41(13):9174–9182, May 1990.
- [114] Wenhui Xu, Liping Yang, Mingpu Qin, and Tao Xiang. Probing the Hofstadter butterfly with the quantum oscillation of magnetization. *arXiv: 0808.0099v2 [cond-mat.str-el]* (2008).

-
- [115] Liping Yang, and Tao Xiang. Specific heat oscillation from Hofstadter's fractal energy spectrum (In preparation).
- [116] R. O. Umucalilar, Hui Zhai, and M. Ö. Oktel. Trapped fermi gases in rotating optical lattices: Realization and detection of the topological hofstadter insulator. *Physical Review Letters*, 100(7):070402, 2008.

博士期间的工作

- [1] Zhi-Hua Yang, Li-Ping Yang, Jian-Hui Dai, Tao Xiang. *Rigorous solution of spin-1 quantum Ising model with single-ion anisotropy*, Phys. Rev. Lett. **100**, 067203 (2008).
- [2] Wen-Hu Xu, Li-Ping Yang, Ming-Pu Qin, Tao Xiang. *Probing the Hofstadter butterfly with the quantum oscillation of magnetization*, Phys. Rev. B **78** 241102(R) (2008).
- [3] Zhi-Hua Yang, Li-Ping Yang, Hai-Na Wu, Jian-Hui Dai, Tao Xiang. *Exact solutions of a class of $S = 1$ quantum Ising spin model*, arXiv: 0811.2275v1 [cond-mat.str-el], submitted to Phys. Rev. B.
- [4] Li-Ping Yang, Yong-Jun Wang, Wen-Hu Xu, Ming-Pu Qin, Tao Xiang. *Quantum transfer matrix method for one-dimensional disordered electronic systems*, arXiv: 0812.0128v1 [cond-mat.str-el], submitted to J. Phys: Condens. Matter.
- [5] Li-Ping Yang, Tao Xiang. *Specific heat oscillation from Hofstadter's fractal energy spectrum*, In preparation.

致 谢

写下致谢一词，心中不禁感慨万千。理论所三年多的学习和生活带给我长足的进步，要感谢的人实在太多。我的博士生活已走向尾声，这段青春岁月存放了许多感动，无数次盼望冲出的读博围城，此刻却让我恋恋不舍。就让那些美丽的过往，美好的人和事珍藏在记忆的相册，去丰富生命的历程吧。

感谢我的导师向涛研究员，向导儒雅俊朗，风度翩翩，智慧与外表相得益彰。感谢他一念之差收了我为弟子，让我在过去的三年多里有机会接触这么多优秀的老师和同学。记得初次见向导，我对凝聚态理论一无所知，他问我为什么要选择这个方向，还历数这个方向的种种艰辛，我当时的回答是我觉得自己可以学。这个无知而张狂的回答让我在之后的日子每每想到就汗颜不已，难怪有“无知者无畏”一说。但或许我也要感谢自己这种无知的勇敢，可能正因为如此，向导才接受了我这么个毫无基础的学生。时至今日，但愿他没有将其视为一个错误决定。向导目光犀利，思维活跃，物理直觉极强，讨论时往往一语中的，这一风格使得我对物理问题的理解有了很大的提高，同时也推动了我积极思考以理解那些高度凝炼的语言。在向导严谨的治学态度里，同时可以呼吸到许多自由和平等的气息，学生想法得到尊重，学习习惯自由。组会讨论时向导的总结陈词清晰明了，物理图像明确，与会后聚餐腐败一道成为学生们的最大期待与享受。记得博后申请时有个老师直言我文章太少，向导知晓后笑言责任在他学生文章都少，写到这里，内心突然有一种温暖和坚定，在这三年多的科研练兵里，所有的努力都是朝着解决问题的方向的，而这实在是很值得的选择和定位。在文章反反复复修改的过程中，也有很多的牢骚和抱怨，而到某天突然觉察的进步让我彻悟这种锻炼的必要。

感谢和我合作过的北师大老师王甬军，浙大老师戴建辉及其学生杨志华，我在和他们的讨论里受益良多，逐步成长。从问题的雏形到最终的定稿，我们一起经历困惑和明朗。感谢戴老师在开会期间的热情引荐。

感谢所处的凝聚态小组，基本上任何问题都能找到人讨论。感谢那些被我问问题的初级和坚持折腾得几乎抓狂的人们：晓勇、司铁岩、胡时杰、小胖虎、石弢、覃绍京老师。晓勇面目全非的歌曲演绎，小司特立独行的思维方式，帅胡在电视剧滚动播放窗口下的编程操练，小胖饭桌上眉飞色舞的花边八卦，石弢

津津乐道的物理之我见都是会让嘴角上扬的画面。特别感谢覃老师，这些年来作为我幼稚提问的求助首选受害不轻，向导拒绝讨论的问题我都会拿来迫害他，在这里我要隆重表达歉意和谢意。还要感谢他在我读博的最后岁月与我的乒乓球清晨对练，早起为我的博士论文准备赢得了更多的时间，也使得我原本不俗的球技更上层楼，反手拉球颇有王皓风范（唉，又开始吹了...）。感谢罗洪刚老师、郭成和陈巧妮先后组织的小组讨论，感谢打扰罗老师所接收到的耐心与热忱。临近离去越发感觉“眼前但见少年多”，意气风发的师弟们：秦明普、魏忠超、谢志远、赵汇海等又投奔至向导麾下。感谢组内蔓延的聪明和努力对我学习的鞭策和推动，这的确是一个充满希望的团队，祝福他们都有美好的未来。

感谢于绿老师的和善和鼓励，感谢每每解疑答惑时亲切笑容所带来的无限温暖。感谢他与郝柏林先生执笔的《相变和临界现象》这一科普册子，此书对我影响深远，开启了兴趣之门。感谢林秀豪老师对我的肯定和祝福，他亦师亦友，机智善言。感谢几位优秀的北大教师：韩汝珊、田光善、郭卫、刘川，在我常常蹭听的物理课程里，他们的精彩讲解极大地提升了我对凝聚态方向的了解和热情。感谢虞跃老师为我写推荐信。

感谢先后成为我室友和邻居的几个可爱女生：贺小涛，庄辞，苏方，甘景玉，吴素芝，李淑明。我们聊天逛街评超女快男，在这个略显沉闷的集体里，她们带给我很多的欢乐和色彩。

感谢在美丽燕园结识的人生伴侣朱同学，感谢他质朴的聪明带给我的诸多分享。感谢他在我得意自恋时给我泼冷水及不遗余力的贬损打击，在我失意自怜时发扬的热情的人道主义精神，让我时刻保持头脑冷静给自己正确定位。感谢哥嫂对我的照顾和疼爱，感谢超级无敌可爱小侄女元曦宝贝带给全家人的欢乐和笑声。感谢父母这么多年来为我的全力付出，他们可敬可爱。家人是我的最大精神支柱和动力源泉，借此地此文来表达我对他们最深的谢和最真的爱。

一直很喜欢歌曲《海阔天空》里的一段唱词，我把它作为致谢的结束语来勉励自己从容地面对将来和心存感恩：

冷漠的人，谢谢你们曾经看轻我，让我不低头，更精彩地活；

最懂我的人，谢谢一路默默的陪我，让我拥有好故事可以说。

—— 戊子年冬于科苑