

自旋相干态变换和自旋-玻色模型的基于变分法的基态解析解*

杨晓勇^{1)†} 薛海斌²⁾ 梁九卿¹⁾

1) (山西大学理论物理研究所, 太原 030006)

2) (太原理工大学物理与光电工程学院, 太原 030024)

(2012年9月24日收到; 2013年2月21日收到修改稿)

提出一种基于自旋相干态变换求解自旋-玻色模型基态的变分法, 并将其用于单原子模型, 得到旋波近似和非旋波近似情形下的解析基态能量和波函数, 特别是在光场与原子的弱、强耦合区域都与数值对角化结果符合得很好. 另外, 该方法也可以直接用于求解任意原子数的 Dicke 模型基态和相应的量子相变研究, 而通常基于 Holstein-Primakoff 变换的变分法, 原则上只适用于原子数趋于无穷的热力学极限情形.

关键词: 自旋相干态, 变分法, J-C 模型

PACS: 42.50.Lc, 03.65.Fd, 32.30.-r

DOI: 10.7498/aps.62.114205

1 引言

自旋-玻色模型因其在物理学各个领域的广泛应用, 一直是理论研究的热点问题. 例如, Jaynes-Cummings(J-C) 模型^[1] 已成为量子光学的理论基础, 并在现代光量子器件和超导量子比特中有广泛的应用. 虽然在旋波近似下描述原子与辐射场相互作用的 J-C 模型只是弱耦合条件下的理想化近似, 但因其可得到精确解析解而被广泛应用. 事实上, 仅当原子与光场之间的耦合强度 g 与光场频率 ω 相比非常小时, 旋波近似才有效^[2,3]. 但是, 随着电路量子电动力学 (Circuit QED) 的发展, 目前超导量子比特 (“人造” 二能级原子) 已应用于强相互作用情形下的振荡器或者振荡腔中^[4-11], 此时旋波近似在强耦合区域并不适用^[12], 因而必须考虑非旋波项的作用.

当单模光场和 N 个原子相互作用时, 只要把自旋为 $-1/2$ 的赝自旋算符换成量子数为 $S = N/2$ 的大自旋算符, 而相应的哈密顿算符形式不变, 此即著名的 Dicke 模型^[13]. 近年来, Dicke 模型的量

子相变已成为热点研究问题之一, 而量子相变是系统基态随耦合参数的突然改变, 因此求解基态解成为关键问题. 通常的方法是用 Holstein-Primakoff (HP) 变换^[14] 把赝自旋转化为玻色子算符, 用双模玻色场相干态作为变分的基态波函数. 此方法可以成功得到研究系统的基态, 并用于研究其量子相变^[15-18]. 但是需要指出的是, 在基于 HP 变换的变分法运算中, 算符的开根号基于 $1/N$ 展开, 因此原则上此方法只在原子数趋于无穷时才成立. 特别是此方法显然不适用于单原子的 J-C 模型. 在本文中, 提出一种新的变分法, 即通过玻色子算符取平均场近似后, 得到一等效赝自旋哈密顿算符, 并利用自旋相干态变换^[15,16] 将其对角化, 然后将求得能量泛函对其经典场变量 (复参数) 变分并取极小值, 从而给出基态能量和波函数的精确解. 此方法得到 J-C 模型的基态能量无论在弱耦合区域还是在强耦合区域都与数值对角化结果符合得非常好, 而且在共振 ($\Omega = \omega$)、蓝失谐 ($\Omega < \omega$) 和红失谐 ($\Omega > \omega$) 情况下都非常有效. 特别是, 把自旋 $-1/2$ 算符换为自旋量子数是 $N/2$ 的大自旋算符时, 则可用于求解

* 国家自然科学基金 (批准号: 11204203, 11275118) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xiaoyongyang2006@126.com

任意原子数的 Dicke 模型基态^[17].

2 自旋玻色模型

一个二能级原子与单模光场相互作用的系统哈密顿可表示为

$$H = \Omega S_Z + \omega a^\dagger a + g S_x (a^\dagger + a), \quad (1)$$

其中, 描述原子(质)自旋(-1/2)的算符 S_Z, S_+, S_- 遵从对易关系 $[S_z, S_\pm] = \pm S_\pm, [S_+, S_-] = 2S_z$ (这里取 $\hbar = 1$); Ω 和 ω 分别为原子共振频率和光场频率, 它们之间的相互作用强度用 g 表示; a^\dagger 和 a 是波色场的产生和湮没算符. 在弱相互作用情形下, 可忽略能量不守恒的作用项 $a S_-$ 和 $a^\dagger S_+$ (反旋波项), 从而得到可精确求解的 J-C 模型, 此即通常的旋波近似 (RWA). 另外, 需要说明的是本文中提出的变分法对有无旋波近似都适用. 下面, 将基于变分法分别讨论非旋波近似和旋波近似模型的基态解, 并与其严格数值对角化结果比较.

2.1 非旋波近似模型

设变分的基态波函数为玻色场的相干态 $|\alpha\rangle$, 即玻色子湮没算符的本征态 $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, 它可由真空态生成 $|\alpha\rangle = e^{\alpha(a^\dagger - a)}|0\rangle$. 在玻色场相干态表象中, 方程 (1) 对应的哈密顿算符的期待值是一个等效的质自旋哈密顿 $H_{\text{eff}}(\alpha) = \langle \alpha | H | \alpha \rangle$, 这意味着等效质自旋哈密顿也可以通过将玻色场算符取平均场近似得到, 这里经典场的变量 α (复数) 为变分参数, 因此本方法的关键是利用自旋相干态变换^[15-18] 对角化质自旋哈密顿 $H_{\text{eff}}(\alpha)$, 从而得到相应的本征值和本征态,

$$H_{\text{eff}}(\alpha)|\pm n\rangle = E_\pm(\alpha)|\pm n\rangle, \quad (2)$$

其中, 本征态 $|+n\rangle$ 和 $|-n\rangle$ 分别为自旋算符 $S \cdot n$ 在 n 方向投影的北、南极规范自旋相干态, 相应的本征值为 $+1/2$ 和 $-1/2$; $n = (\sin \xi \cos \eta, \sin \xi \sin \eta, \cos \xi)$ 是用方向角 ξ 和 η 描述的单位矢量. 自旋相干态也可通过旋转算符 $U(n) = e^{\xi/2(S_+ e^{i\eta} - S_- e^{-i\eta})}$ 由 S_z 的本征态 $|\pm\rangle$ 生成, 即 $|\pm n\rangle = U(n)|\pm\rangle$, ξ, η 是待定参数. 在自旋相干态变换下, 原来的自旋算符 S_z, S_+, S_- 分别为^[15]

$$\begin{aligned} & U^\dagger(n) S_Z U(n) \\ &= S_Z \cos \xi + \frac{1}{2} \sin \xi (S_+ e^{-i\eta} + S_- e^{i\eta}), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & U^\dagger(n) S_+ U(n) \\ &= S_+ \cos^2 \frac{\xi}{2} - S_- e^{2i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} - S_Z e^{i\eta} \sin \xi, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} & U^\dagger(n) S_- U(n) \\ &= S_- \cos^2 \frac{\xi}{2} - S_+ e^{-2i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} - S_Z e^{-i\eta} \sin \xi, \end{aligned} \quad (5)$$

然后, 将本征方程 (2) 左乘 $U^\dagger(n)$, 并考虑方程 (3), (4), (5) 可得

$$\begin{aligned} & [\omega|\alpha|^2 + A(\alpha, \xi, \eta) S_Z + B(\alpha, \xi, \eta) S_+ \\ & + C(\alpha, \xi, \eta) S_-] |\pm\rangle = E_\pm(\alpha) |\pm\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$\begin{aligned} A(\alpha, \xi, \eta) &= \Omega \cos \xi \\ &\quad - \frac{g}{2} \sin \xi (\alpha + \alpha^*) (e^{i\eta} + e^{-i\eta}), \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} B(\alpha, \xi, \eta) &= \frac{\Omega}{2} \sin \xi e^{-i\eta} + \frac{g}{2} (\alpha + \alpha^*) \\ &\quad \times \left(\cos^2 \frac{\xi}{2} - e^{-2i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} \right), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} C(\alpha, \xi, \eta) &= \frac{\Omega}{2} \sin \xi e^{i\eta} + \frac{g}{2} (\alpha + \alpha^*) \\ &\quad \times \left(\cos^2 \frac{\xi}{2} - e^{2i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

显然, 方程 (6) 成立的条件是

$$\begin{cases} B(\alpha, \xi, \eta) = 0, \\ C(\alpha, \xi, \eta) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

由方程 (10) 可以求得参量 ξ 和 η 作为 α 的函数 $\xi(\alpha)$ 和 $\eta(\alpha)$, 将其代入系数 A 的表达式并考虑方程 (7) 可得其能量泛函为

$$E_\pm(\alpha) = \omega|\alpha|^2 + \frac{1}{2} A(\alpha, \xi, \eta). \quad (11)$$

然后, 将能量泛函 $E_\pm(\alpha)$ 对经典场变量 α 作变分并取极小值,

$$\frac{\partial E_+(\alpha)}{\partial \alpha} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial E_-(\alpha)}{\partial \alpha} = 0. \quad (13)$$

上面两方程中只有一个方程有物理解, 此即系统的基态能量, 相应的基态波函数为 $U(n)|+\rangle$ 或者 $U(n)|-\rangle$. 下面, 分两种情况讨论方程 (12) 和 (13) 的解.

当 $\alpha = 0$ 时, 方程 (10) 将简化为

$$\begin{aligned} & \frac{\Omega}{2} e^{-i\eta} \sin \xi = 0, \\ & \frac{\Omega}{2} e^{i\eta} \sin \xi = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

因此, 可得 $\sin \xi = 0$, 即 $\xi = k\pi$, 相应的 $A(\alpha, \xi, \eta) = \pm\Omega$. 此时系统的基态能量为

$$E_{gs} = -\frac{\Omega}{2}. \quad (15)$$

当 $\alpha \neq 0$ 时, 方程 (10) 将简化为

$$\begin{aligned} & \frac{\Omega}{2} \sin \xi + \frac{g}{2}(\alpha + \alpha^*) \left(e^{i\eta} \cos^2 \frac{\xi}{2} - e^{-i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} \right) \\ &= 0, \\ & \frac{\Omega}{2} \sin \xi + \frac{g}{2}(\alpha + \alpha^*) \left(e^{-i\eta} \cos^2 \frac{\xi}{2} - e^{i\eta} \sin^2 \frac{\xi}{2} \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (16)$$

通过求解方程 (16) 可得

$$A(\alpha, \xi, \eta) = \pm \sqrt{\Omega^2 + (2g\gamma)^2}, \quad (17)$$

其中, $\gamma^2 = \frac{g^2}{4\omega^2} - \frac{\Omega^2}{4g^2}$.

通过对能量极小条件的分析, 只有

$$E_- = \omega\gamma^2 - \frac{1}{2}\sqrt{\Omega^2 + (2g\gamma)^2}$$

是物理解, 相应的系统基态能量为

$$E_{gs} = -\frac{g^2}{4\omega} - \frac{\omega\Omega^2}{4g^2}. \quad (18)$$

因此, 在非旋波近似下, 系统的基态能量为

$$E_{gs} = \begin{cases} -\frac{\Omega}{2}, & g < \sqrt{\omega\Omega}, \\ -\frac{g^2}{4\omega} - \frac{\omega\Omega^2}{4g^2}, & g \geq \sqrt{\omega\Omega}. \end{cases} \quad (19)$$

2.2 RWA 模型

在旋波近似下, 二能级原子与单模光场相互作用的系统哈密顿可表示为

$$H = \Omega S_Z + \omega a^\dagger a + \frac{g}{2}(aS_+ + a^\dagger S_-), \quad (20)$$

基于相同的方法, 可以求得相应的基态能量为

$$E_{gs} = \begin{cases} -\frac{\Omega}{2}, & g < 2\sqrt{\omega\Omega}, \\ -\frac{g^2}{16\omega} - \frac{\omega\Omega^2}{g^2}, & g \geq 2\sqrt{\omega\Omega}. \end{cases} \quad (21)$$

3 讨论

在图 1 和图 2 中, 分别给出了非旋波近似和旋波近似两种情形下, 对于不同的 ω/Ω 值, 相应的基于变分法 (线 + 实心图标) 和严格数值对角化 (线 + 空心图标) 求得的基态能量随光场和原子耦合常

数 g 的变化曲线. 由图 1 可知, 在非旋波近似下, 基于变分法求得的基态能 (19) 在 ω/Ω 为 1, 0.8, 0.6, 0.4, 即共振较小的红失谐时, 与数值对角化结果完全符合; 而在大失谐 ($\omega/\Omega = 0.1, 0.2$) 的强耦合区域, 变分法求得的基态能量随着光场和原子耦合强度的增强逐渐地偏离数值结果. 这是因为变分法尝

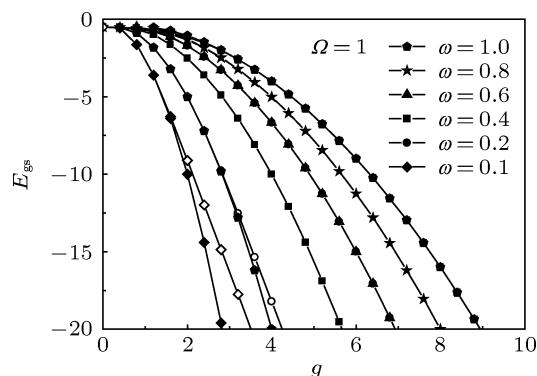


图 1 在非旋波近似下, 对于不同的光频率 ω , J-C 模型的变分法 (线 + 实心图标) 和数值对角化 (线 + 空心图标) 求得的基态能量 E_{gs} 随光场和原子耦合强度 g 的变化曲线

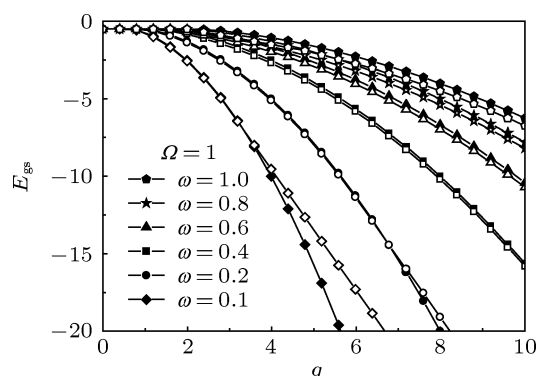


图 2 在旋波近似下, 对于不同的光频率 ω , J-C 模型的变分法 (线 + 实心图标) 和数值对角化 (线 + 空心图标) 求得的基态能量 E_{gs} 随光场和原子耦合强度 g 的变化曲线

试的波函数采用了玻色子相干态, 即平均场近似, 它在光场相对较强时才是有效的; 而大失谐的强耦合情形下, 光场的量子涨落将起重要作用, 因而平均场近似自然导致较大的偏差. 实际上, 文献中的精确解也都是在近共振条件下得到的, 但是本文的变分法基态能却可以在很宽的频率范围和耦合区域都相当精确. 对于在旋波近似情形, 见图 2, 其变分法能量和数值对角化也符合的很好, 但变分法毕竟是某种近似, 稍微的偏差可能是模型近似引起的, 而且相对偏差却非常小. 特别需要指出的是, 在非

旋波近似的模型中, 变分法能量和数值对角化的精确符合有点意外, 这说明这种方法是非常有效的, 更深层次的原因有待探讨.

本文第一次提出了求自旋-玻色模型基态解析解的普适变分法, 除了玻色子相干态作为尝试波函数外无需任何其他近似, 得到了非旋波近似和旋波近似 J-C 模型的完全解析基态能谱和波函数. 更重要的是, 这一方法可直接得到多原子 Dicke 模型的基态解.

4 结论

我们提出了用自旋相干态变换求自旋-玻色模型基态的普适变分法, 它不仅可得到相当精确度的解析基态能谱和波函数, 特别是可直接用于任意原子数的 Dicke 模型, 而先前文献中基于 HP 变换的变分法原则上仅适用于原子数趋于无穷的热力学极限情形.

- [1] Jaynes E T, Cummings F W 1963 *Proceedings of IEEE* **51** 89
- [2] Raimond J M, Brune M, Haroche S 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 565
- [3] Hood C J, Lynn T W, Doherty A C, Parkins A S, Kimble H J 2000 *Science* **287** 1447
- [4] Wallraff A, Schuster D I, Blais A, Frunzio L, Huang R S, Majer J, Kuma S, Girvin S M, Schoelkopf R J 2004 *Nature* **431** 162
- [5] Forn-Diaz P, Lisenfeld J, Marcos D, Garc'ia-Ripoll J J, Solano E, Harmans C J P M, Mooij J E 2010 *arXiv*1005.1559
- [6] Schuster D I, Houck A A, Schreier J A, Wallraff A, Gambetta M, Blais A, Frunzio L, Majer J, Johnson B, Devoret M H, Girvin S M, Schoelkopf R J 2007 *Nature* **445** 515
- [7] Yu Y, Han S, Chu X, Wang Z 2002 *Science* **296** 889
- [8] Chiorescu I, Bertet P, Semba K, Nakamura Y, Harmans C J P M, Mooij J E 2004 *Nature* **431** 159
- [9] Deppe Frank, Mariantoni Matteo, Menzel E P, Marx A, Saito S, Kakuyanag K, Tanaka H, Meno T, Semba K, Takayanagi H, Solano E, Gross R 2008 *Nature Physics* **4** 686
- [10] Fink J M, Göppl M, Baur M, Bianchetti R, Leek P J, Blais A, Wallraff A 2008 *Nature* **454** 546
- [11] Hofheinz Max, Wang H, Ansmann M, Bialczak Radoslaw C, Lucero Erik, Neeley M, O'Connell A D, Sank D, Wenner J, Martinis John M, Cleland A N 2009 *Nature* **459** 546
- [12] Liu T, Wang K L, Feng M 2009 *Europhys. Lett.* **86** 54003
- [13] Dicke R H 1954 *Phys. Rev.* **93** 99
- [14] Holstein T, Primakoff H 1940 *Phys. Rev.* **58** 1098
- [15] Lai Y Z, Liang J Q, H J Wüller-Kirsten, Zhou J G 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3691; 1996 *J. Phys. A: Math Gen.* **29** 1773
- [16] Chen Z D, Liang J Q, Shen S Q, Xie W F 2004 *Phys. Rev. A* **69** 023611
- [17] Lian J L, Zhang Y W, Liang J Q 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 060302
- [18] Liang J Q, Wei L F 2011 *Advances In Quantum Physics* (Beijing: Science Press) p76 (in Chinese) [梁九卿, 韦联福 2011 量子物理新进展 (北京: 科学出版社) 第 76 页]
- [19] Chen Q H, Liu T, Zhang Y Y, Wang K L 2011 *Europhys. Lett.* **96** 14003
- [20] Li X H, Wang K L, Liu T 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 044212

Spin coherent-state transformation and analytical solutions of ground-state based on variational-method for spin-Bose models*

Yang Xiao-Yong^{1)†} Xue Hai-Bin²⁾ Liang Jiu-Qing¹⁾

1) (*Institute of Theoretical Physics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China*)

2) (*College of Physics and Optoelectronics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China*)

(Received 24 September 2012; revised manuscript received 21 February 2013)

Abstract

We present a variational method for the ground-state solutions of the spin-Bose models by means of the spin coherent-state transformation. For the Jaynes-Cummings (J-C) models with and without the rotating-wave approximation, the ground-state energies obtained by this method are in perfect agreement with the results from numerical diagonalization in the whole region of the coupling between a light field and an atom. The present variational-method can be directly used to solve the ground-state energies of the Dicke models with arbitrary atom-numbers and further study the quantum phase transition; while the variational-method based on the Holstein-Primakoff transformation is only valid in principle for the thermodynamic limit with the atom-number tending to infinity.

Keywords: spin coherent-states, variational method, Jaynes-Cummings model

PACS: 42.50.Lc, 03.65.Fd, 32.30.-r

DOI: 10.7498/aps.62.114205

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11204203, 11275118).

† Corresponding author. E-mail: xiaoyongyang2006@126.com