

# 粒子间长程相互作用以及晶格中孤立缺陷点对两硬核玻色子在一维晶格势阱中量子行走的影响\*

李艳†

(南昌师范学院物理与电子信息学院, 南昌 330032)

(2023 年 4 月 20 日收到; 2023 年 5 月 20 日收到修改稿)

本文研究了一维晶格势阱中两个硬核玻色子在粒子间长程相互作用下的量子行走. 还通过在晶格中的某一个格点加上额外的局域势能, 模拟晶格势阱中可能存在的孤立缺陷点对两粒子量子行走的影响. 数值计算结果显示粒子间相互作用的范围(长程或短程), 相互作用的强度, 两粒子初始所处的量子态以及孤立缺陷点的存在对两粒子量子行走结果的影响巨大. 在粒子间强长程相互作用下, 初始处于非邻近格点的两粒子展现出距离固定步调一致的绑定行走, 而在只考虑处于邻近格点粒子间的短程强相互作用下只有初始处于邻近格点的两个粒子才能绑定行走. 在引入孤立缺陷点情形下, 在粒子间强相互作用下初始处于孤立缺陷点同一侧的两个粒子将保持绑定行走. 而初始分别位于孤立缺陷点两侧或者有一个粒子位于孤立缺陷点的两粒子, 将停止行走或在孤立缺陷点附近行走, 展现出局域化的量子行走行为特点. 应用简并量子系统的二阶微扰理论对数值计算结果给予了全面深入的理论分析. 研究揭示了在粒子间长程相互作用下两个硬核玻色子在一维没有缺陷点的有序晶格势阱以及具有孤立缺陷点的晶格势阱中量子行走的一些物理规律.

**关键词:** 量子行走, 长程相互作用, 空间关联函数**PACS:** 05.60.Gg, 71.23.An, 71.35.-y, 71.45.Gm**DOI:** 10.7498/aps.72.20230642

## 1 引言

离散晶格势阱中粒子的经典随机行走 (classical random walks) 被广泛应用于计算机科学的算法中<sup>[1-3]</sup>. 晶格势阱中粒子的量子动力学的演化结果则导致量子行走 (quantum walks). 量子行走是经典随机行走的量子对应物, 量子行走不仅是量子传输的基本现象, 也是开发量子算法<sup>[4,5]</sup>和实现量子计算<sup>[6,7]</sup>的实用工具. 与经典粒子的随机行走不同, 粒子量子行走的结果是不同行走路径叠加的结果. 这些不同路径之间的干涉构成了利用量子行走实现量子算法的理论基础. 从图论<sup>[8,9]</sup>的角度来

看, 图的顶点为量子系统希尔伯特空间的初始正交基状态, 连续时间量子行走是由图的邻接矩阵即量子系统的哈密顿量  $\hat{H}$  定义的酉演化  $e^{-i\hat{H}t}$  产生的. 实验方面, 到目前为止研究者在无序介质中的光子<sup>[10,11]</sup>、射频阱中的离子<sup>[12]</sup>、光学晶格中的超冷原子<sup>[13]</sup>、原子自旋杂质<sup>[14]</sup>以及核磁共振系统<sup>[15]</sup>等实验系统中实现了微观粒子的量子行走. 而其中离散晶格势阱中粒子的量子行走行为引起了人们强烈的研究兴趣. 研究表明晶格势阱中粒子的量子行走研究, 有可能揭示量子动力学的新特征<sup>[16]</sup>以及在量子计算中具有潜在的应用价值. 因而各种条件下晶格势阱中粒子的量子行走也获得了大量的研究<sup>[17,18]</sup>.

\* 湖南省自然科学基金 (批准号: 2019JJ50400)、江西省教育厅科研基金 (批准号: GJJ181086) 和南昌师范学院博士科研启动基金 (批准号: NSBSJJ2018031) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liyan\_2001@126.com

近来, 囚禁于晶格势阱中的分子以及准激发态粒子的量子行走行为也获得了很多实验和理论的关注<sup>[19–21]</sup>. 原因在于光晶格中的分子或准激发态粒子具有丰富的可调控自由度. 这对量子行走器的制备和检测可以实现前所未有的控制程度<sup>[22]</sup>. 分子以及准激发态粒子之间具有偶极-偶极长程相互作用. 因此超冷分子系统有望实现具有可调谐的各向异性长程相互作用下的量子模拟<sup>[23]</sup>、量子计算<sup>[24,25]</sup>、精确测量<sup>[26]</sup>以及量子力学机制中下的相干化学探索<sup>[27,28]</sup>等. 这一量子系统也可用于研究长程相互作用下粒子间的量子关联, 而理解量子少体和多体动力学系统中的量子关联也是当前物理学研究的中心问题之一<sup>[29,30]</sup>. 可以在晶格势阱中分子和准激发态粒子实验中探索的有趣的物理问题还包括相互作用诱导的多体局域化<sup>[31]</sup>, 以及粒子间相互作用对无序导致的局域化效应的影响<sup>[32]</sup>等.

已有的相关研究主要讨论了初始处于晶格势阱中心并位于邻近格点的两粒子, 在考虑粒子处于临近格点或同一个格点才具有相互作用的短程相互作用下在晶格势阱中的量子行走. 本文将研究一维晶格势阱中处于不同初始状态 (包括处于非邻近格点的初始状态) 的两个硬核玻色子在粒子间长程相互作用下的量子行走, 并与短程相互作用下的情形进行对比分析. 此外还研究了晶格势阱中可能存在的孤立缺陷点 (或者杂质点) 对晶格中两粒子量子行走的影响. 当晶格系统存在随机分布缺陷点 (或者杂质点) 导致的无序时, 无相互作用的多粒子体系的波函数受到晶格中随机分布的缺陷点或者杂质点的散射将阻止了量子传输, 导致粒子波函数安德森局域化<sup>[33]</sup>. 具有相互作用的粒子在具有无序的晶格势阱中量子传输\量子行走也受到广泛的研究<sup>[34,35]</sup>. 然而目前还缺乏晶格中可能存在的孤立缺陷点 (或者杂质点) 对晶格中具有相互作用的粒子的量子行走\传输机制的研究. 本文的研究结果表明粒子间相互作用的模式 (长程或短程)、相互作用的强度、两粒子初始所处的状态以及晶格势阱中孤立缺陷点的存在对两粒子量子行走的结果的影响是巨大的. 应用简并量子系统的二阶微扰理论对强相互作用下两粒子量子行走给予了全面深入的理论分析. 理论分析的结果与数值计算的结果是一致的. 本文的研究展示了粒子间长程相互作用下两个硬核玻色子在一维没有缺陷点的有序晶格势阱和有孤立缺陷点的晶格势阱中量子行走的一些独

特的行为特点, 并揭示了这些独特行为背后的一些物理规律.

## 2 理论模型

考虑处于一维晶格势阱中的两个全同硬核玻色子, 该量子体系的哈密顿量可描述为

$$\hat{H} = -J \sum_{i=1}^L \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + h.c. \right) + \sum_l V(l) \hat{n}_l + \frac{1}{2} \sum_{l,m} U_{lm} \hat{n}_l \hat{n}_m, \quad (1)$$

该量子系统总的晶格数目为  $L$ , 算符  $\hat{a}_l$  和  $\hat{a}_l^\dagger$  分别代表在格点  $l$  湮灭和产生一个玻色子. 而  $\hat{n}_l = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l$  和  $\hat{N} = \sum_{l=1}^L \hat{n}_l$  分别为格点  $l$  的粒子数算符和系统总粒子数算符. 对于硬核玻色子, 算符之间满足对易关系  $\{\hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger\} = \delta_{lk}$ ,  $[\hat{a}_l, \hat{a}_k] = [\hat{a}_l^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = [\hat{a}_l, \hat{a}_k^\dagger] = 0$  以及硬核条件  $\{\hat{a}_l, \hat{a}_l\} = 0$ . 为消除有限尺寸系统的边界效应的影响, 设定系统具有周期性边界条件, 即  $\hat{a}_{L+1} = \hat{a}_1$ . 常数  $J$  代表粒子在邻近晶格间的跳转强度. 本研究粒子在晶格间的跳转只限定在临近的格点之间, 这与实际物理系统包括固态晶格和冷原子阵列的情形是相符的. 哈密顿量的第 2 项代表格点上的局域势能, 在后面的研究中将通过在晶格中的某一个格点加上额外的局域势能的方式来模拟晶格势阱中可能存在的孤立缺陷点的影响. 哈密顿量的第 3 项表示粒子间的相互作用. 对于粒子间的相互作用, 将对研究如下两种情形:

1) 只考虑处于邻近格点粒子间的短程相互作用 (nearest-neighbor interactions)

$$U_{lm} = U \delta_{l \pm 1, m}; \quad (2)$$

2) 考虑处于不同格点  $l$  和  $m$  的两粒子间的长程相互作用

$$U_{lm} = U \left( \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi |l - m|}{L} \right)^{-\kappa}. \quad (3)$$

两式中  $U$  都表示相互作用的强度,  $U > 0$  ( $U < 0$ ) 代表粒子间具有排斥 (吸引) 相互作用. 在后面的研究中取  $\kappa = 1$ .

由于对易关系  $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$ , 系统总粒子数目是守恒量. 因此该两粒子量子系统将在粒子数算符  $\hat{N}$  的本征态所张成的希尔伯特空间中演化. 考虑粒子的统计特性及硬核条件, 两粒子演化的希尔伯特空

间表示为  $B = \{|l_1, l_2\rangle = a_{l_1}^\dagger a_{l_2}^\dagger |0\rangle, 1 \leq l_1 < l_2 \leq L\}$ . 在这个希尔伯特空间中, 可以直接得到哈密顿量 (1) 式的矩阵形式. 将矩阵对角化后可以得到系统的本征值和本征态. 考虑两粒子初始分别处于格点  $\bar{l}$  和  $\bar{m}$  即  $|\Psi\rangle_i = |\bar{l}, \bar{m}\rangle$ , 两粒子的量子态随时间  $t$  将按照如下方式演化:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) |n\rangle \langle n | \Psi\rangle_i, \quad (4)$$

其中  $|n\rangle$  为哈密顿量的本征态,  $E_n$  为其对应的本征值. 为了研究两粒子的量子行走行为, 在后面的分析中我们将利用两体空间关联函数:

$$G_{lm} = \langle a_l^\dagger a_m^\dagger a_m a_l \rangle, \quad (5)$$

随时间的变化来分析和展示两粒子在晶格势阱中的量子行走. 这一关联函数的物理意义是同时在格点  $l$  和  $m$  探测到粒子的联合概率分布 [29].

### 3 结果与分析

#### 3.1 两硬核玻色子在没有缺陷点的有序晶格势阱中的量子行走

设哈密顿 (1) 式中第 2 项的局域势能  $V(l) = 0$ , 首先研究在粒子间长程相互作用下两个硬核玻色子在没有缺陷点的有序晶格势阱中的量子行走. 图 1 和图 2 为两粒子在不同初始态以及不同的相互作用强度  $U$  下, 两粒子的空间关联图样随时间的变化. 图中的每一列代表在特定条件下两粒子的空间关联函数随时间的变化. 结果表明粒子间长程相互作用的强度以及两粒子的初始量子态对两粒子量子行走结果影响是巨大的. 图 1 中粒子的初始态均为  $|\Psi\rangle_i = |12, 17\rangle$ . 在相互作用较弱或无相互作用时, 两粒子将独立行走. 除因为硬核条件两粒子不能位于同一格点外, 两粒子将在希尔伯特空间  $B = \{|l_1, l_2\rangle, 1 \leq l_1 < l_2 \leq L\}$  中所有量子态间跳转演化. 而在强相互作用下, 两粒子将展现出绑定行走的行为特点, 即在空间关联图样中出现沿着对角线分布的两条平行线  $q = r \pm d$ . 这意味着在强相互作用下两粒子在晶格势阱中保持距离不变步调一致地行走. 两粒子的绑定行走也是两个粒子束缚态存在的一个重要标志, 参见两个磁振子 [36] 及晶格中相互作用的玻色子、费米子以及任意子 [17,18,37] 的情况. 图 1 还揭示排斥相互作用与强吸引相互作用对两粒子的量子行走的影响没有明显区别. 图 2 展

示了在强相互作用下, 处于不同初始态的两粒子的空间关联图样随时间的变化. 数值计算的结果展示出初始距离较近的两粒子将表现出强烈的绑定行走行为. 而当两粒子初始距离较远时, 两粒子的空间关联图样将出现两条较粗的平行线, 表明两粒子的距离将不再固定. 但两粒子也不能互相靠近, 将保持一定距离范围内做绑定行走. 如在同样条件下加大相互作用强度  $U$ , 随着相互作用强度的增大, 两粒子的绑定行走将得到强化, 如图 2 中最后一列所示.

#### 3.2 两硬核玻色子在晶格势阱中量子行走的微扰理论分析

已有研究工作表明初始处于相邻格点且在只考虑处于邻近格点的粒子之间具有强短程相互作用下的两粒子将展现出绑定行走行为 [17,18,38]. 本研究展示了在强长程相互作用的影响下, 初始处于非临近格点的两个粒子也呈现出绑定行走. 这一结果可以用如下的简并量子系统的二阶微扰理论 [18,36] 进行解释. 在强相互作用情形下  $|U/J| \gg 1$ , 可以将哈密顿量的第 1 项

$$\hat{H}' = -J \sum_{i=1}^L \left( \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + h.c. \right), \quad (6)$$

作为哈密顿量的第 3 项

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \sum_{l,m} U_{lm} \hat{n}_l \hat{n}_m \quad (7)$$

的微扰项 (对于有序晶格势阱哈密顿量第 2 项为 0). 由于  $U_{lm}$  只与两个粒子之间的距离  $|l - m|$  有关, 再考虑系统周期性边界条件的限制,  $\hat{H}_0$  有  $[L/2]$  个  $L$  重简并的本征态  $B^d = \{|K_l^d\rangle = |l, m\rangle : |l - m| = d \text{ 或 } L - d, 1 \leq l < m \leq L\}$ , 对应本征值:

$$E_d = U \left( \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi d}{L} \right)^{-1}, \quad (8)$$

式中  $d = \{1, 2, \dots, [L/2]\}$ . 初始量子态  $|\Psi\rangle_i = |\bar{l}, \bar{m}\rangle$  属于简并本征态  $B^{\bar{d}}$ , 其中  $\bar{d} = \min[|\bar{l} - \bar{m}|, L - |\bar{l} - \bar{m}|]$ . 为了实现对强相互作用下的微扰分析, 先定义投影算符:

$$\hat{S} = \sum_{i,d} \frac{1}{E_{\bar{d}} - E_d} |K_i^d\rangle \langle K_i^d| \quad (9)$$

和

$$\hat{P}_0 = \sum_l |K_l^{\bar{d}}\rangle \langle K_l^{\bar{d}}|. \quad (10)$$



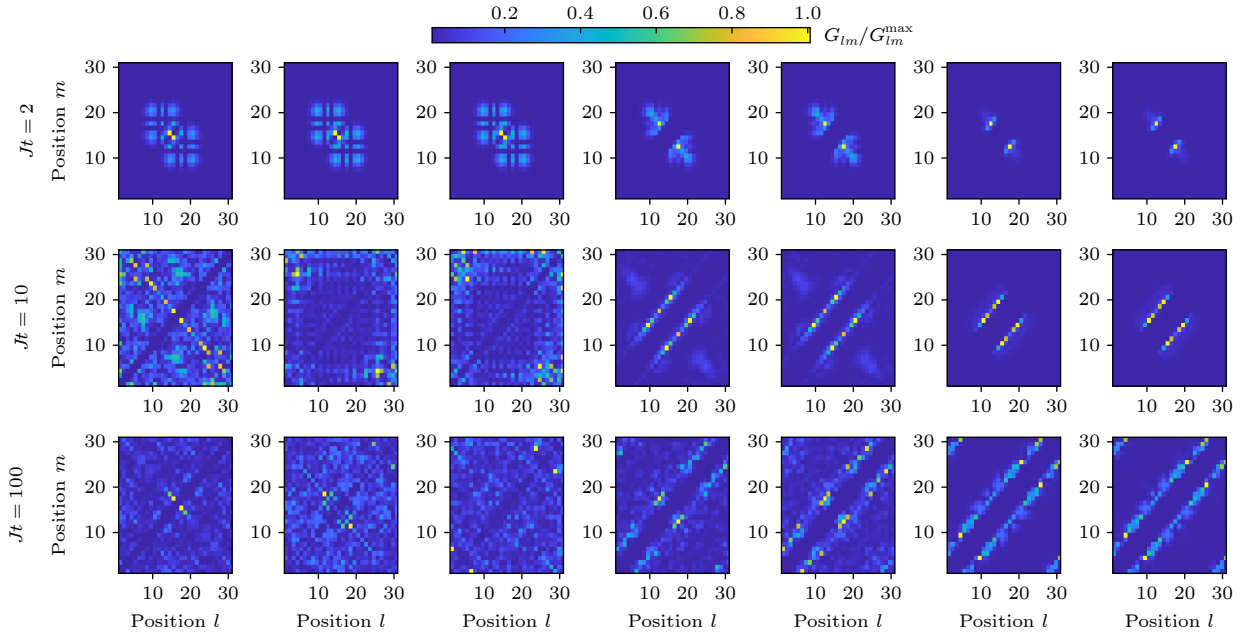


图 1 初始处于量子态  $|\Psi\rangle_i = |12, 17\rangle$  在不同强度的长程相互作用下的两个硬核玻色子的空间关联函数随时间的变化. 图中每一列均表示在特定条件下两粒子关联图样随时间的变化. 从第 1 行到第 3 行对应的演化时间  $Jt = 2, 10, 100$ . 从第 1 列到第 7 列相互作用强度  $U/J$  值分别为 0, 2, -2, 40, -40, 80, -80. 计算中晶格总的数目为  $L = 31$

Fig. 1. Spatial pair correlations of two hard-core bosons under the effects of long-range inter-particle interactions in Eq. (3) with various values of the interaction strength. The initial state for the two bosons is  $|\Psi\rangle_i = |12, 17\rangle$  for all the cases. Each column in the figure represents the change of two-particle correlation pattern with time under specific conditions. From top to bottom, the corresponding evolution times are  $Jt = 2, 10$ , and  $100$ , respectively. For each column (from left to right) the interaction strength is  $U/J = 0, 2, -2, 40, -40, 80$ , and  $-80$ , respectively. The total number of lattice sites is  $L = 31$ .

$\hat{P}_0$  和  $\hat{S}$  分别将量子态投影至绑定行走的子空间和其正交空间. 按文献 [18, 36] 的理论及计算方法可得有效哈密顿量:

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(2)} = E_{\bar{d}} \hat{P}_0 + \hat{P}_0 \hat{H}' \hat{S} \hat{H}' \hat{P}_0, \quad (11)$$

将 (9) 式和 (10) 式代入 (11) 式, 通过计算可得

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(2)} = E_{\bar{d}} \sum_l |K_l^{\bar{d}}\rangle \langle K_l^{\bar{d}}| + \sum_{l,l'} \alpha_{ll'}^{\bar{d}} |K_l^{\bar{d}}\rangle \langle K_{l'}^{\bar{d}}|, \quad (12)$$

其中

$$\alpha_{ll'}^{\bar{d}} = \sum_{i,d} \frac{1}{E_d - E_{\bar{d}}} \langle K_l^{\bar{d}} | H' | K_i^d \rangle \langle K_i^d | H' | K_{l'}^{\bar{d}} \rangle. \quad (13)$$

$\hat{H}_{\text{eff}}^{(2)}$  的计算结果表明初始处于量子态  $|\Psi\rangle_i = |\bar{l}, \bar{m}\rangle$  在强长程相互作用下的两个粒子, 将在简并量子态  $|K_l^{\bar{d}}\rangle$  之间跳转, 跳转强度为  $\alpha_{ll'}^{\bar{d}}$ . 这就导致在强相互作用情形下两粒子呈现出距离固定步调一致的绑定行走行为. 上述微扰论的分析结果说明粒子间强长程相互作用将两粒子的希尔伯特空间分成很多具有不同本征能量的简并态子空间. 当初始态对应的本征能量与其他简并态的本征能量之差满足条件  $|E_{\bar{d}} - E_d| \gg J$  时, 微扰项  $\hat{H}'$  无法提供足够的

能量, 两粒子很难在不同本征能量对应的量子态之间跳转, 只能在与初始态处于同一简并态的量子态之间演化跳转, 从而导致强相互作用下两粒子绑定行走行为. 而当条件  $|E_{\bar{d}} - E_d| \gg J$  不成立时, 上述简并态微扰论分析不再成立, 两粒子可以在能量相近的本征态之间跳转, 导致两粒子在晶格势阱中将不在呈现出粒子间距离固定的绑定行走.

为了与短程相互作用下以及无相互作用的情形对比分析, 图 3 还展示了在只考虑处于临近格点的粒子间短程相互作用 ((2) 式) 以及粒子间无相互作用情况下的两粒子的量子行走. 这两种情况下两粒子的量子行走在之前的研究中被广泛讨论过 [17, 18, 37]. 但在以往的研究中大多只考虑初始处于晶格中心邻近格点的两粒子的量子行走. 本工作考虑两粒子初始处于非邻近格点的情况. 结果显示在强短程相互作用下初始处于非临近格点的两粒子将独立行走, 没有展现出伴随行走行为, 这与长程相互作用下的初始处于非邻近格点的两粒子的绑定行走行为形成了对比. 图样中对角线上的阴影还表明强短程相互作用下的两粒子也不能互相靠近 (处于邻近格点). 而当没有粒子间相互作用时, 两粒子也表现

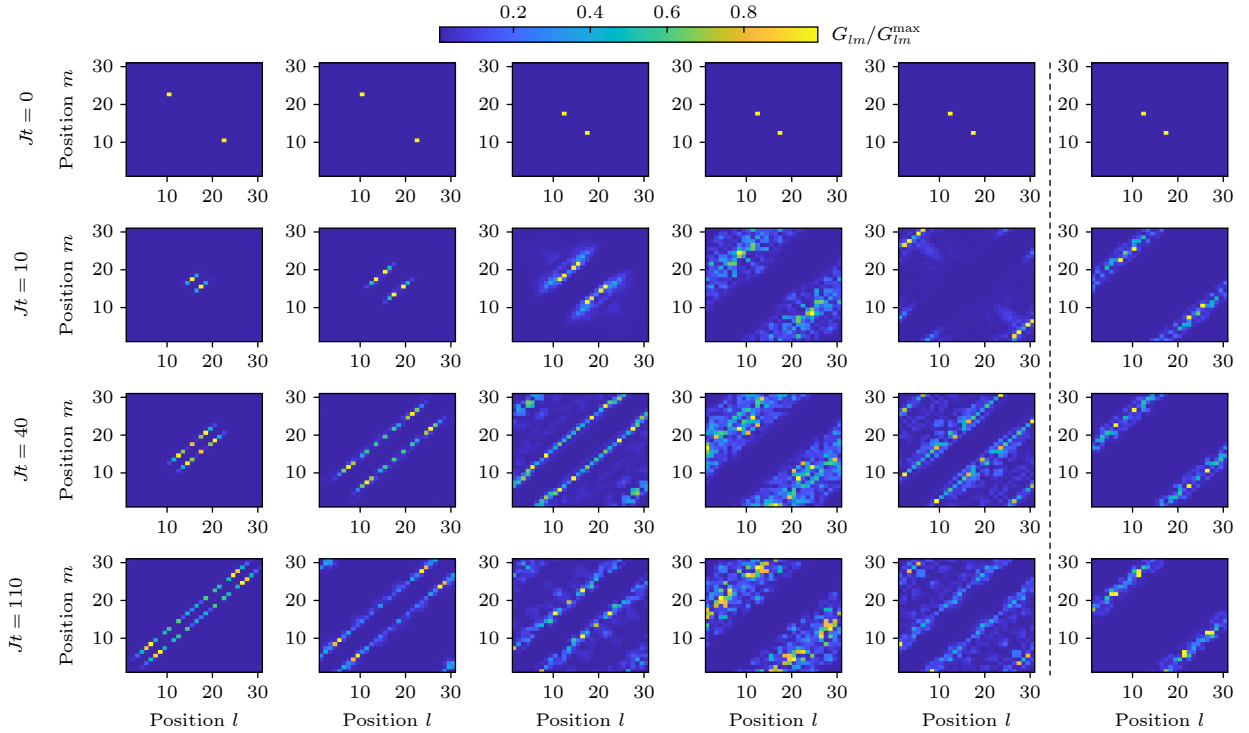


图2 初始处于不同的量子态的两个硬核玻色子在强长程相互作用下的空间关联图样随时间的变化. 图中每一列表示在特定条件下两粒子关联图样随时间的变化. 从第1行到第4行对应的演化时间分别为  $Jt = 0, 10, 40, 110$ . 从第1列到第6列(从左到右)两粒子的初始态  $|\Psi_i\rangle$  分别为  $|15, 17\rangle, |14, 18\rangle, |13, 19\rangle, |8, 24\rangle, |4, 28\rangle, |8, 24\rangle$ . 虚线左侧  $U/J = 80$ , 虚线右侧  $U/J = 1000$ . 计算中晶格格点总的数目为  $L = 31$ .

Fig. 2. Spatial pair correlations of two hard-core bosons under the effects of strong long-range inter-particle interactions for different initial states. Each column in the figure represents the change of two-particle correlation pattern with time under specific conditions. From top to bottom, the corresponding evolution times are  $Jt = 0, 10, 40$ , and  $110$ , respectively. The initial states of the two particles  $|\Psi_i\rangle$  in each column (from left to right) are  $|15, 17\rangle, |14, 18\rangle, |13, 19\rangle, |8, 24\rangle, |4, 28\rangle$ , and  $|8, 24\rangle$ , respectively. On the left and right size of the dashed line the interaction strength is  $U/J = 80$  and  $1000$ , respectively. The total number of lattice sites is  $L = 31$ .

出独立行走行为, 但两粒子演化过程中可以处于邻近格点的状态.

在上面的量子简并微扰理论框架下, 也可以解释强短程相互作用下两粒子的量子行走行为. 在强短程相互作用下, 邻近格点量子态  $\{|l, l+1\rangle : 1 \leq l \leq L\}$  处于简并态对应能量本征值  $E = U$ . 其他处于非邻近格点状态量子态  $\{|l, k\rangle : |l-k| \neq 1, 1 \leq l < k \leq L\}$  也都处于简并态对应能量本征值  $E = 0$  [17]. 按上面简并态微扰理论, 对于初始处于非邻近格点的两粒子, 随时间演化两粒子将在这些非邻近格点的简并量子态之间跳转. 于是在强短程相互作用下初始处于非邻近格点的两粒子不能处于邻近格点量子态, 也不能呈现出距离固定的绑定行走行为. 与之形成对比的是, 初始处于邻近格点的两粒子将在邻近格点量子态之间跳转, 最终将在晶格势阱中呈现出绑定行走行为, 这一绑定行走行为在以往的研究中被广泛讨论过 [17,18,38].

### 3.3 两硬核玻色子在具有孤立缺陷点的晶格势阱中的量子行走

为了模拟晶格势阱中孤立存在的缺陷或杂质造成的无序对两粒子量子行走造成的影响, 在哈密顿量 (1) 式的第2项局域势能中设置处于在总数  $L = 31$  个格点的晶格势阱中:

$$V(l) = \begin{cases} V, & l = 17, \\ 0, & l \neq 17. \end{cases} \quad (14)$$

于是格点 17 变为晶格势阱中的孤立缺陷点. 为突出孤立缺陷点的效应, 后面的研究中讨论  $|V| \gg J$  的情形. 图4中虚线左侧和右侧分别展示了初始处于不同量子态的两粒子, 在粒子间强长程和强短程相互作用下、在具有孤立缺陷点的晶格势阱中的量子行走. 结果表明孤立缺陷点的存在将导致处于不同的初始态以及不同的相互作用模式下的两粒子的量子行走行为产生强烈的变化. 在强长程相互作用

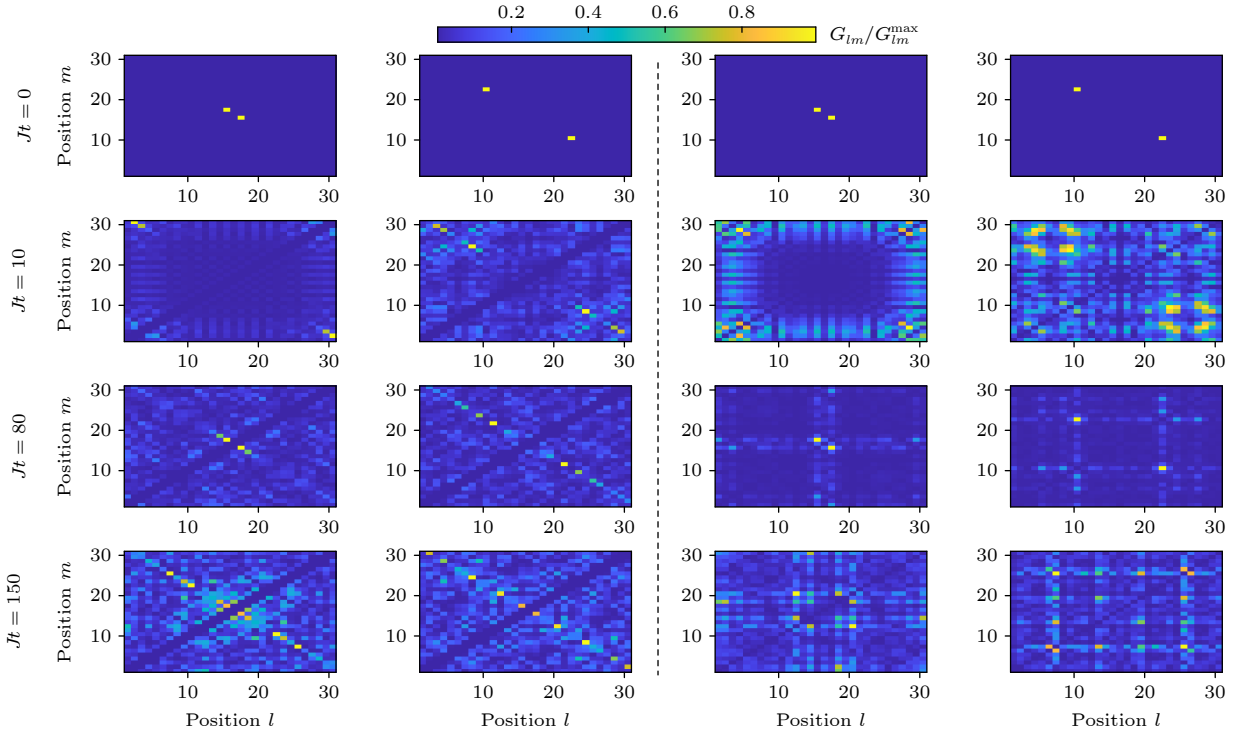


图3 初始处于不同量子态的两个硬核玻色子在强短程相互作用下(虚线左侧)和无相互作用下(虚线右侧)的空间关联函数图样随时间的变化. 对于强短程相互作用情形, 相互作用强度为  $U/J = 80$ . 从第1排到第4排对应的演化时间分别为  $Jt = 0, 10, 80, 150$ . 从第1列到第4列(从左到右)两粒子的初始态  $|\Psi\rangle_i$  为  $|15, 17\rangle, |10, 22\rangle, |15, 17\rangle, |10, 22\rangle$ . 计算中晶格格点总的数目为  $L = 31$

Fig. 3. Spatial pair correlations of two hard-core bosons under the effects of strong short-range inter-particle interactions in Eq. (2) (left side of the dotted line) and no interactions (right side of the dotted line) for different initial states. The interaction strength for the short-range inter-particle interactions is  $U/J = 80$ . From top to bottom, the corresponding evolution times are  $Jt = 0, 10, 80$ , and  $150$ , respectively. The initial state of the two particles  $|\Psi\rangle_i$  in each column (from left to right) is  $|15, 17\rangle, |10, 22\rangle, |15, 17\rangle$ , and  $|10, 22\rangle$ , respectively. The total number of lattice sites is  $L = 31$ .

用下, 初始处于孤立缺陷点同一侧的两粒子将保持绑定行走行为特点, 但不会靠近孤立缺陷点附近区域. 初始分别位于孤立缺陷点两侧或者有一个粒子位于缺陷点的两粒子将保持不动, 或在缺陷点附近行走, 表现出局域化的量子行走行为特点. 在短程强相互作用下, 图4也展示了两种典型初始态情形, 见图中虚线右侧. 第1种为初始处于非邻近格点且位于孤立缺陷点两侧量子态  $|16, 18\rangle$ , 关联图样中对角线上较低的关联函数值表明两粒子不能位于邻近格点. 而两粒子除不能靠近外将随时间独立行走并逐渐散落于整个晶格势阱中, 这与强长程相互作用下的结果形成了对比. 另外一种为初始处于邻近格点且其中一个粒子位于孤立缺陷点即初始量子态为  $|16, 17\rangle$  的情形. 在这种情况下两粒子将不会在晶格势阱中行走, 展现出局域化的量子行走行为特点, 这个结果与长程相互作用下的对应结果一致.

在具有孤立缺陷点的晶格势阱中, 当粒子间具

有强长程或短程相互作用的情形下, 上面的简并微扰论仍然适用. 首先讨论长程相互作用下的情形. 由于格点17具有附加局域势能, 系统本征态的简并状态将发生改变: 与孤立缺陷点相关的量子态  $\{|l, 17\rangle, |17, k\rangle : 1 \leq l < 17, 17 < k \leq L\}$  成为新的简并态对应本征能量  $E_d + V$ . 而除去与孤立缺陷点有关的剩余量子态  $\{|K_l^d\rangle = |l, m\rangle : 1 \leq l < m \leq L, l \neq 17, m \neq 17\}$  仍处于简并态对应本征能量  $E_d$ . (11)–(13) 式的分析仍然成立. 于是初始处于量子态  $|10, 12\rangle$  的两粒子将在新的简并态  $\{|K_l^2\rangle = |l, m\rangle : 1 \leq l < m \leq L, l \neq 17, m \neq 17\}$  之间跳转演化形成图中的绑定行走的图样分布. 但是由于与孤立缺陷点相关的两个量子态  $\{|15, 17\rangle, |17, 19\rangle\}$  已不再处于同一简并状态, 两粒子将无法跳转到这些量子态. 导致两粒子不能行走至孤立缺陷点附近的区域. 对于初始处于孤立缺陷点两侧的两粒子量子态  $|16, 18\rangle$ , 附近的量子态  $|15, 17\rangle$  与  $|17, 19\rangle$  不再属于同一简并态. 而由于哈密顿第一项的跳转限制两粒子也无法

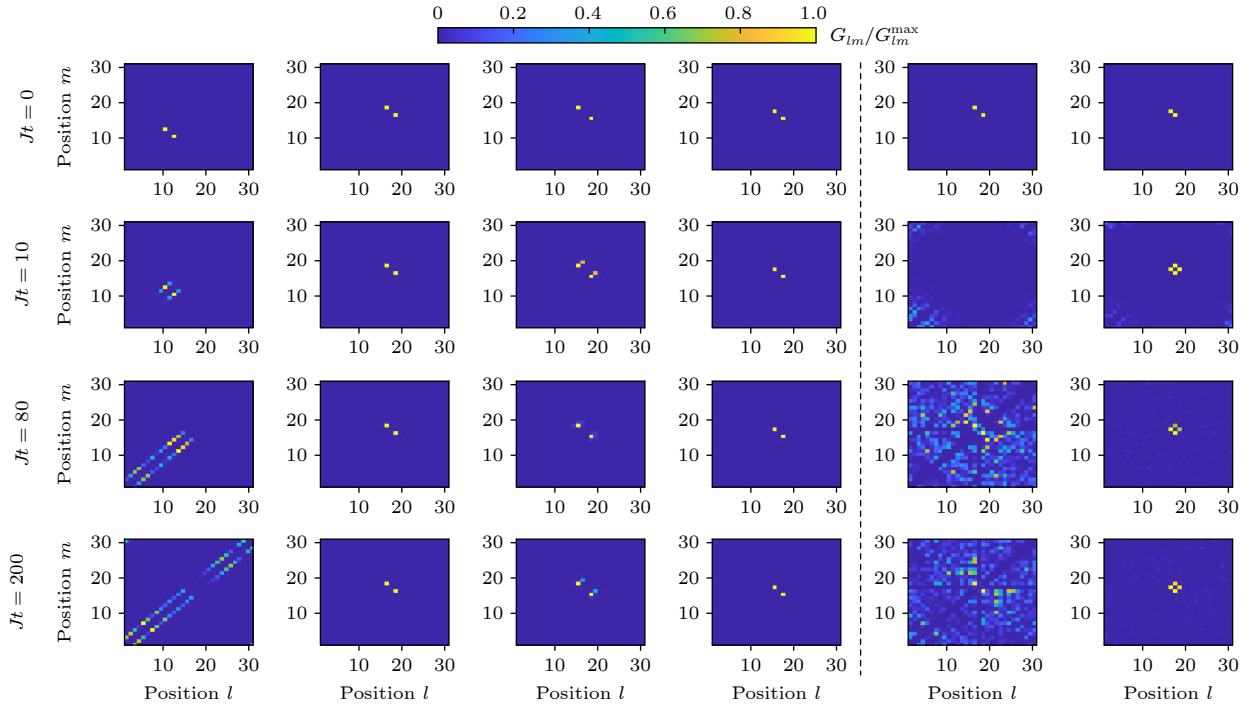


图 4 在具有孤立缺陷点的晶格势阱中, 处于不同初始态的两个硬核玻色子在强长程 (虚线左侧) 和短程相互作用 (虚线右侧) 下空间关联函数随时间的变化. 晶格中孤立缺陷点按如下方式引入: 处于在总数为  $L = 31$  个格点的晶格中设定处于格点 17 的粒子具有额外的势能, 设哈密顿量 (1) 式中  $V(17)/J = -80$ , 而其他格点的局域势能仍为 0. 长程相互作用与短程相互作用的作用强度都为  $U/J = 80$ . 第 1 行到第 4 行 (从上到下) 对应的演化时间分别为  $Jt = 0, 10, 80, 200$ . 从第 1 列到第 6 列对应的初始量子态  $|\Psi\rangle_i$  为  $|10, 12\rangle, |16, 18\rangle, |15, 18\rangle, |15, 17\rangle, |16, 18\rangle, |16, 17\rangle$

Fig. 4. Spatial pair correlations of two hard-core bosons under the effects of an isolated defect point in the lattice and strong inter-particle interactions for different initial states. The left and right side of the dashed line are under the effects of strong long-range and short-range inter-particle interactions, respectively. The isolated defect point is introduced as follows: in the lattice with  $L = 31$  lattice sites in total, lattice site 17 is set to have additional potential energy with strength  $V(17)/J = -80$  in the Hamiltonian (1), while the local potential energy of the other lattice sites is still 0. The interaction strength is  $U/J = 80$  for all cases. From top to bottom, the corresponding evolution times are  $Jt = 0, 10, 80$  and  $200$ , respectively. The initial state of two particles  $|\Psi\rangle_i$  in each column (from left to right) is  $|10, 12\rangle, |16, 18\rangle, |15, 18\rangle, |15, 17\rangle, |16, 18\rangle$ , and  $|16, 17\rangle$ , respectively.

跨越格点直接跳转到其他简并量子态. 因此两粒子只能保持不动, 展现出局域化的量子行走行为特点. 而对于初始处于量子态  $|15, 18\rangle$  的两粒子也只能在  $|15, 18\rangle$  和  $|16, 19\rangle$  这两个简并态之间跳转, 无法行走到其他格点. 因此两粒子只能在无序格点附近行走, 也展现出局域化的量子行走行为特点. 对于其中一个粒子位于孤立缺陷点的情况下即初始处于量子态  $|15, 17\rangle$  的情形, 这时虽然  $\{|15, 17\rangle, |17, 19\rangle\}$  这两个量子态处于简并状态, 但由于哈密顿第 1 项的跳转限制这两粒子不能在这两个量子态之间跳转. 于是两粒子将一直处于  $|15, 17\rangle$  这个量子态, 无法行走到其他格点, 也表现出局域化的量子行走行为特点.

再讨论具有孤立缺陷点的晶格中的两粒子在强短程相互作用下的情形. 孤立缺陷点的存在也将导致该种情况下量子系统的本征态的简并状态发

生改变. 系统的本征态将分为如下 4 个处于简并状态的子空间: 处于非邻近格点的两粒子简并态  $\{|l, k\rangle : |l - k| \neq 1, 1 \leq l < m \leq L, l \neq 17, k \neq 17\}$  对应本征能量  $E = 0$ , 邻近格点状态简并态  $\{|l, l+1\rangle : 1 \leq l \leq L, l \neq 16, l \neq 17\}$  对应本征能量  $E = U$ , 与孤立缺陷点有关的量子态  $\{|l, m\rangle : 1 \leq l < m \leq L, l = 17 \text{ or } m = 17\}$  对应本征能量  $E = V$ , 而邻近且与孤立缺陷点相关的两个量子态  $\{|16, 17\rangle, |17, 18\rangle\}$  也处于简并状态对应本征能量  $E = U + V$ . 对于初始处于非邻近格点状态  $|16, 18\rangle$  两粒子将在非邻近格点的两粒子态将在上面的第一个简并量子态之间跳转, 形成图 4 中第 5 列中的关联图样. 而对于初始处于邻近格点且与孤立缺陷点有关的量子态  $|16, 17\rangle$  的两粒子只能在  $\{|16, 17\rangle, |17, 18\rangle\}$  这两个简并量子态之间跳转, 导致两粒子展现出局域化的量子行走行为特点.



结果表明强相互作用下晶格中孤立存在的缺陷点的存在改变了两粒子量子态的简并状态. 当量子系统的条件符合上面简并量子系统的二阶微扰理论的要求时, 两粒子只能在初始状态所处的简并态之间跳转. 于是孤立缺陷点存在导致两粒子在晶格中量子行走行为产生强烈的变化. 特别是当初始状态与邻近的量子态不再属于同一简并态时, 两粒子将不能在晶格间行走或只在孤立缺陷点附近行走, 展示出局域化的量子行走行为特点.

对于无相互作用或弱相互作用的具有无序的量子系统 Anderson 局域化效应, 系统波函数需要经过多个随机分布的缺陷点或杂质点导致的无序的散射才能让粒子停止量子传输, 导致量子体系波函数的局域化. 由 Anderson 局域化的研究引发, 量子系统局域化效应引起了极大兴趣, 并逐渐推广到量子多体系统的局域化<sup>[34,35,39]</sup>. 量子多体系统波函数的局域化打破了系统各态历经性, 使得量子系统初始状态保持不变, 阻止系统的热化<sup>[40]</sup>. 除了无序会引起量子系统波函数局域化以外, 导致量子系统波函数局域化的方案还包括通过应用倾斜场<sup>[41]</sup>, 设计弯曲带<sup>[42]</sup>来降低隧道效应以及控制粒子间相互作用<sup>[43]</sup>. 本文研究结果表明在两粒子间具有强相互作用这一强关联区域下晶格中的一个孤立缺陷点也可以让初始处于特定量子态的两粒子停止在晶格中行走\传输, 产生局域化效应. 本文研究结果也为量子多体系统的局域化方案提供了一些有益的补充.

## 4 结 论

本文研究了在粒子间长程相互作用下, 处于不同初始状态的两个硬核玻色子在一维有序和具有孤立缺陷点的晶格势阱中的量子行走. 这里晶格中的孤立缺陷点是通过在晶格势阱中的某一个格点加上额外的局域势能方式实现, 目的是为了模拟晶格中孤立存在的杂质或者缺陷对晶格中两粒子的量子行走的影响. 直接数值计算结果表明粒子间相互作用的模式(长程或短程), 两粒子初始所处的状态以及孤立缺陷点的存在对两粒子量子行走的结果的影响是巨大的. 利用简并量子系统的二阶微扰理论对强相互作用下的量子行走行为进行了全面的理论分析. 理论分析结果说明粒子间强相互作用的存在, 将两粒子的希尔伯特空间分成多个具有不同

本征能量的简并态子空间. 而当系统哈密顿量的跳转项无法提供足够的能量让两粒子在不同本征能量对应的量子态之间跳转时, 两粒子只能在同一简并态之间演化跳转, 导致了强相互作用下的两粒子的绑定行走. 晶格中孤立缺陷点的存在改变了强相互作用下两粒子量子态的简并状态, 导致强相互作用下两粒子在晶格中量子行走行为产生强烈的变化. 特别是当初始状态与邻近的量子态不再属于同一简并态时, 两粒子将不能在晶格间行走或在孤立缺陷点附近行走, 展示出局域化的量子行走行为特点. 本研究展示了在粒子间长程相互作用以及晶格中孤立缺陷点的存在下两个硬核玻色子在一维晶格势阱中量子行走的一些独特的行为特点, 也揭示了这些独特量子行走行为背后的一些物理规律. 此外晶格中的孤立缺陷点存在, 导致处于特定条件下的两粒子间停止在晶格中行走, 该结果也为量子多体系统的局域化方案提供了一些有益的补充.

## 参考文献

- [1] Lovasz L 1989 *Bol. Soc. Bras. Mat.* **20** 87
- [2] Adamic L A, Lukose R M, Puniyani A R, Huberman B A 2001 *Phys. Rev. E* **64** 046135
- [3] Noh J D, Rieger H 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 118701
- [4] Yin R, Barkai E 2023 *Phys. Rev. Lett.* **130** 050802
- [5] Lewis D, Benhemou A, Feinstein N, Banchi L, Bose S 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 240502
- [6] Lovett N B, Cooper S, Everitt M, Trevers M, Kendon V 2010 *Phys. Rev. A* **81** 042330
- [7] Childs A M, Gosset D, Webb Z 2013 *Science* **339** 791
- [8] Farhi E, Gutmann S 1998 *Phys. Rev. A* **58** 915
- [9] Childs A M, Cleve R, Deotto E, Farhi E, Gutmann S, Spielman D A 2003 *Proceedings of the thirty-fifth ACM Symposium on Theory of Computing* San Diego, CA, USA, June 9–11, 2003 (New York: ACM Press)
- [10] Crespi A, Osellame R, Ramponi R, Giovannetti V, Fazio R, Sansoni L, Nicola F De, Sciarro F, Mataloni P 2013 *Nat. Photonics* **7** 322
- [11] Gilead Y, Verbin M, Silberberg Y 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 133602
- [12] Feldker T, Bachor P, Stappel M, Kolbe D, Gerritsma R, Walz J, Schmidt-Kaler F 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 173001
- [13] Preiss P M, Ma R, Tai M E, Lukin A, Rispoli M, Zupancic P, Lahini Y, Islam R, Greiner M 2015 *Science* **347** 1229
- [14] Fukuhara T, Kantian A, Endres M, Cheneau M, Schauß P, Hild S, D. Bellem, Schollwöck U, Giamarchi T, Gross C, Bloch I, Kuhr S 2013 *Nat. Phys.* **9** 235
- [15] Du J, Li H, Xu X, Shi M, Wu J, Zhou X, Han R 2003 *Phys. Rev. A* **67** 042316
- [16] Kempe J 2003 *Contemp. Phys.* **44** 307
- [17] Qin X Z, Ke Y G, Guan X W, Li Z B, Andrei N, Lee C H 2014 *Phys. Rev. A* **90** 062301
- [18] Wang L M, Wang L, Zhang Y B 2014 *Phys. Rev. A* **90** 063618



- [19] Jurcevic P, Lanyon B P, Hauke P, Hempel C, Zoller P, Blatt R, Roos C F 2014 *Nature* **511** 202
- [20] Sowinski T, Dutta O, Hauke P, Tagliacozzo L, Lewenstein M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 115301
- [21] Yan B, Moses S A, Gadway B, Covey J P, Hazzard K R A, Rey A M, Jin D S, Ye J 2013 *Nature* **501** 521
- [22] Lang F, Winkler K, Strauss C, Grimm R, Hecker Denschlag J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 133005
- [23] Carr L D, DeMille D, KREMS R V, Ye J 2009 *New J. Phys.* **11** 055049
- [24] Ni K K, Rosenband T, Grimes D D 2018 *Chem. Sci.* **9** 6830
- [25] Kaufman A M, Ni K K 2021 *Nat. Phys.* **17** 1324
- [26] Ho C, Devlin J, Rabey I, Yzombard P, Lim J, Wright S, Fitch N, Hinds E, Tarbutt M, Sauer B 2020 *New J. Phys.* **22** 053031
- [27] Liu Y, Hu M G, Nichols M A, Yang D, Xie D, Guo H, Ni K K 2021 *Nature* **593** 379
- [28] Liu Y and Ni K K 2022 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **73** 73
- [29] S. Fölling, Gerbier F, Widera A, Mandel O, Gericke T, Bloch I 2005 *Nature* **434** 481
- [30] Greiner M, Regal C A, Stewart J T, Jin D S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 110401
- [31] Schiulaz M, Silva A, Müller M 2015 *Phys. Rev. B* **91** 184202
- [32] Michal V P, Altshuler B L, Shlyapnikov G V 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 045304
- [33] Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- [34] Vu D D, Huang K, Li X, Das Sarma S 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 146601
- [35] Xue P, Zhang R, Bian Z H, Zhan X, Qin H, Sanders B C 2015 *Phys. Rev. A* **92** 042316
- [36] Takahashi M 1977 *J. Phys. C Solid State Phys.* **10** 1289
- [37] Liu W, Andrei N 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 257204
- [38] Chattaraj T, KREMS R V 2016 *Phys. Rev. A* **94** 023601
- [39] Nandkishore R, Huse D A 2015 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6** 15
- [40] Abanin D A, Altman E, Bloch I, Serbyn M 2019 *Rev. Modern Phys.* **91** 021001
- [41] Schulz M, Hooley C A, Moessner R, Pollmann F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **122**, 040606
- [42] Kuno Y, Orito T, Ichinose I 2020 *New J. Phys.* **22** 013032
- [43] Zhang N, Ke Y, Lin Ling, Zhang L, Lee C H 2023 *New J. Phys.* **25** 043021

# Effects of long-range inter-particle interactions and isolated defect on quantum walks of two hard-core bosons in one-dimensional lattices<sup>\*</sup>

Li Yan<sup>†</sup>

(College of Physics and Telecommunication, Nanchang Normal University, Nanchang 330032, China)

( Received 20 April 2023; revised manuscript received 20 May 2023 )

## Abstract

The quantum walk of two hard-core bosons in one-dimensional lattice under the effect of long-range inter-particle interaction is studied in detail. We also simulate the influence of an isolated defect that may exist in the lattice on the quantum walk of two particles by adding an additional potential energy to a certain lattice site. Using exact diagonalization method, the continuous-time quantum walk is directly simulated. The numerical simulations show that the range of interaction (long-range or short-range), the strength of the inter-particle interaction, the initial state of the two particles and the presence of the isolated defect have great influences on the quantum walk. Under the effect of strong long-range interaction, the particles initially located on the non-adjacent lattice sites have a co-walking behavior, while under the short-range interactions (nearest-neighbor interactions) only two particles initially located on the neighboring lattice sites can exhibit co-walking. After introducing the isolated defect into the system with strong interaction, two particles residing on the same side of the isolated defect keep co-walking, while two particles located on either sides of the isolated defect or one particle located on the isolated defect and the other particle staying on the side of the isolated defect, the two particles keep stationary or co-walking near the defect, displaying the characteristics of localization. By using the second-order perturbation theory of degenerate quantum system, a comprehensive theoretical analysis of the above numerical results is given. The theoretical analysis reveals the underlying physical law of quantum walks of two particles in one-dimensional lattice under the effects of strong long-range interaction and isolated defect in the lattice.

**Keywords:** quantum walk, long-range interactions, spatial correlation function

**PACS:** 05.60.Gg, 71.23.An, 71.35.-y, 71.45.Gm

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230642](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230642)

<sup>\*</sup> Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2019JJ50400), the Scientific Research Foundation of the Education Department of Jiangxi Province, China (Grant No. GJJ181086), and the Doctoral Research Launch Fund of Nanchang Normal University, China (Grant No. NSBSJJ2018031).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [liyan\\_2001@126.com](mailto:liyan_2001@126.com)



粒子间长程相互作用以及晶格中孤立缺陷点对两硬核玻色子在一维晶格势阱中量子行走的影响

李艳

**Effects of long-range inter-particle interactions and isolated defect on quantum walks of two hard-core bosons in one-dimensional lattices**

Li Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 170501 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230642

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230642>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于置换群的多粒子环上量子行走的反馈搜索算法

Feedback search algorithm for multi-particle quantum walks over a ring based on permutation groups

物理学报. 2022, 71(3): 030201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211000>

里德堡原子多体相互作用的研究进展

Research progress of Rydberg many-body interaction

物理学报. 2020, 69(18): 180301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200649>

基于量子随机行走和多维混沌的三维图像加密算法

Three dimensional image encryption algorithm based on quantum random walk and multidimensional chaos

物理学报. 2022, 71(17): 170303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220466>

基于Cayley图上量子漫步的匿名通信方案

Anonymous communication scheme based on quantum walk on Cayley graph

物理学报. 2020, 69(16): 160301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200333>

集成光量子计算的研究进展

Research progress of integrated optical quantum computing

物理学报. 2022, 71(24): 240302 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221782>

一维晶格中全同任意子的量子动力学与关联

Quantum dynamics and correlations of indistinguishable anyons in one-dimensional lattices

物理学报. 2022, 71(13): 130501 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20220188>