

ユニタリ変換としての Jordan-Wigner 変換

下村顕士

2023 年 5 月 12 日

X を有限集合とする. X 上のフェルミオン系の状態空間を,

$$\mathcal{H}_F^X := \text{span}_{\mathbb{C}} \{ |\mathbf{n}\rangle_F \mid \mathbf{n}: X \rightarrow \{0, 1\} \}, \quad \langle \mathbf{n} | \mathbf{n}' \rangle_F := \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{n} = \mathbf{n}' \\ 0 & \text{if } \mathbf{n} \neq \mathbf{n}' \end{cases} \quad (1)$$

なる複素内積空間として定義する^{*1}. また, 単一のスピン $\frac{1}{2}$ 系の状態空間を

$$\mathcal{H}_S := \text{span}_{\mathbb{C}} \{ |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \}, \quad \langle \uparrow | \uparrow \rangle := \langle \downarrow | \downarrow \rangle := 1, \quad \langle \uparrow | \downarrow \rangle := \langle \downarrow | \uparrow \rangle := 0 \quad (2)$$

なる複素内積空間とし^{*2}, X 上のスピン系の Fock 空間を

$$\mathcal{H}_S^X := \bigotimes_{x \in X} \mathcal{H}_S \quad (3)$$

と定める. 定義より

$$\dim \mathcal{H}_F^X = 2^{|X|} = \dim \mathcal{H}_S^X, \quad (4)$$

したがって, \mathcal{H}_F^X と \mathcal{H}_S^X は $(\mathbb{C}^2)^{|X|} \simeq \mathbb{C}^{2^{|X|}}$ を通じて等長同型.

\mathcal{H}_S 上の線型演算子 $\hat{\sigma}^Z, \hat{\sigma}^+, \hat{\sigma}^- \in \text{End}(\mathcal{H}_S)$ を

$$\hat{\sigma}^Z |\uparrow\rangle := |\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^Z |\downarrow\rangle := -|\downarrow\rangle, \quad (5)$$

$$\hat{\sigma}^+ |\downarrow\rangle := |\uparrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^+ |\uparrow\rangle := 0, \quad (6)$$

$$\hat{\sigma}^- |\uparrow\rangle := |\downarrow\rangle, \quad \hat{\sigma}^- |\downarrow\rangle := 0 \quad (7)$$

で定義する. 各 $x \in X$ に対し, $\hat{\sigma}_x^Z, \hat{\sigma}_x^+, \hat{\sigma}_x^- \in \text{End}(\mathcal{H}_S^X)$ を

$$\hat{\sigma}_x^d := \bigotimes_{y \in X} (\text{if } y = x \text{ then } \hat{\sigma}^d \text{ else } \hat{1}_{\mathcal{H}_S}) \quad (d = Z, +, -) \quad (8)$$

により定める. $|\downarrow\rangle$ と $|\uparrow\rangle = \hat{\sigma}^+ |\downarrow\rangle$ は \mathcal{H}_S を張るから, $|\downarrow\rangle^{\otimes X} := \bigotimes_{x \in X} |\downarrow\rangle \in \mathcal{H}_S^X$ と置くと

$$\left\{ \left(\prod_{x \in X} (\hat{\sigma}_x^+)^{\mathbf{n}(x)} \right) |\downarrow\rangle^{\otimes X} \in \mathcal{H}_S^X \mid \mathbf{n}: X \rightarrow \{0, 1\} \right\} \quad (9)$$

は \mathcal{H}_S^X の正規直交基底を張る.

^{*1} $|\mathbf{n}\rangle_F$ はあくまでもシンボルであり, 異なる \mathbf{n} に対して $|\mathbf{n}\rangle_F$ は互いに区別する. 式 (1) では, シンボル $|\mathbf{n}\rangle_F$ を正規直交基底を持つような内積空間として \mathcal{H}_F^X を定義している.

^{*2} $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ はあくまでもシンボルであり, これらを正規直交基底を持つような内積空間として \mathcal{H}_S を導入している.

\mathcal{H}_F^X から \mathcal{H}_S^X への線形写像 \hat{U}_{JW} を

$$\hat{U}_{JW} |\mathbf{n}\rangle_F := \left(\prod_{x \in X} (\hat{\sigma}_x^+)^{n(x)} \right) |\downarrow\rangle^{\otimes X} \quad (10)$$

で定義する. \hat{U}_{JW} は \mathcal{H}_F^X の正規直交基底を \mathcal{H}_S^X の正規直交基底に写すからユニタリ演算子である*3.

以下では $X = [1, L] \cap \mathbb{Z} = \{1, 2, \dots, L\}$ ($L \in \mathbb{Z}_{>0}$) とする. このとき, $\mathbf{n}: X \rightarrow \{0, 1\}$ は数列と見なせるので $n_x := \mathbf{n}(x)$ と書くことにする. これに伴って $|\mathbf{n}\rangle_F$ を $|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$ と記すことにする. また, テンソル積 $\otimes_{x \in X}$ は x の昇順に左から右に並べて書くことにする: 例えば

$$|\downarrow\rangle^{\otimes X} = |\downarrow\rangle \otimes \dots \otimes |\downarrow\rangle, \quad \hat{\sigma}_x^d = \underbrace{\hat{1}_{\mathcal{H}_S}}_1 \otimes \dots \otimes \underbrace{\hat{\sigma}_x^d}_x \otimes \dots \otimes \underbrace{\hat{1}_{\mathcal{H}_S}}_L \quad (d = Z, +, -). \quad (11)$$

各 $x \in X$ に対し, フェルミオンの消滅演算子 $\hat{c}_x \in \text{End}(\mathcal{H}_F^X)$ を

$$\hat{c}_x |\mathbf{n}\rangle_F := \begin{cases} -\exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1, \dots, n_L\rangle_F & \text{if } n_x = 1 \\ 0 & \text{if } n_x = 0 \end{cases} \quad (12)$$

により定義する*4. 定義より $(\hat{c}_x)^2 = 0$ であり, また, $x < x'$ のとき

$$\begin{aligned} & \hat{c}_x \hat{c}_{x'} |\mathbf{n}\rangle_F \\ &= \begin{cases} \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^{x'} n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1, \dots, x_{x'} - 1, \dots, n_L\rangle_F & \text{if } n_x = n_{x'} = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & \hat{c}_{x'} \hat{c}_x |\mathbf{n}\rangle_F \\ &= \begin{cases} \exp\left(i\pi \left(\sum_{y=1}^{x'} n_y - 1\right)\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1, \dots, x_{x'} - 1, \dots, n_L\rangle_F & \text{if } n_x = n_{x'} = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \end{aligned} \quad (14)$$

より

$$\hat{c}_{x'} \hat{c}_x = e^{-i\pi} \hat{c}_x \hat{c}_{x'} = -\hat{c}_x \hat{c}_{x'} \quad (15)$$

である. これらの結果より, 一般の $x, x' \in X$ に対して反交換関係

$$\{\hat{c}_x, \hat{c}_{x'}\} = 0 \quad (16)$$

が成り立つ.

\hat{c}_x の共役演算子 \hat{c}_x^\dagger の表示を与える:

$${}_F \langle \mathbf{n}' | \hat{c}_x^\dagger | \mathbf{n} \rangle_F = ({}_F \langle \mathbf{n} | \hat{c}_x | \mathbf{n}' \rangle_F)^* = \begin{cases} -\exp\left(-i\pi \sum_{y=1}^x n'_y\right) & \text{if } n'_x = 1 \ \& \ n_{x'} = n'_{x'} - \delta_{x,x'} \text{ for } x' \in X \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (17)$$

$$= \begin{cases} \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) & \text{if } n_x = 0 \ \& \ n'_{x'} = n_{x'} + \delta_{x,x'} \text{ for } x' \in X \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18)$$

*3 後で見ると, \hat{U}_{JW} はフェルミオン系とスピン系の Jordan-Wigner 変換を与える. 式 (33), (34) を参照せよ.

*4 符号 $-\exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) = -(-1)^{\sum_{y=1}^x n_y}$ は, \hat{c}_x の反交換関係から逆算して導入している.

より,

$$\hat{c}_x^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} = \begin{cases} \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x + 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 0 \\ 0 & \text{if } n_x = 1 \end{cases}. \quad (19)$$

\hat{c}_x^\dagger たちをフェルミオンの生成演算子と呼ぶことにする. 生成演算子同士の交換関係は,

$${}_{\text{F}}\langle \mathbf{n}' | \{\hat{c}_x^\dagger, \hat{c}_{x'}^\dagger\} |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} = ({}_{\text{F}}\langle \mathbf{n} | \{\hat{c}_x, \hat{c}_{x'}\} |\mathbf{n}'\rangle_{\text{F}})^* = 0 \quad (20)$$

より

$$\{\hat{c}_x^\dagger, \hat{c}_{x'}^\dagger\} = 0 \quad (x, x' \in X) \quad (21)$$

である.

次に, 生成演算子と消滅演算子の交換関係を計算する. $x, x' \in X$ について, $x < x'$ のとき

$$\begin{aligned} & \hat{c}_x \hat{c}_{x'}^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^{x'} n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1, \dots, n_{x'} + 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 1 \text{ \& } n_{x'} = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} & \hat{c}_{x'}^\dagger \hat{c}_x |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \left(\sum_{y=1}^{x'} n_y - 1\right)\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1, \dots, n_{x'} + 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 1 \text{ \& } n_{x'} = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \end{aligned} \quad (23)$$

$x > x'$ のとき

$$\begin{aligned} & \hat{c}_x \hat{c}_{x'}^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \left(\sum_{y=1}^x n_y + 1\right)\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^{x'} n_y\right) |n_1, \dots, n_{x'} + 1, \dots, n_x - 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 1 \text{ \& } n_{x'} = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} & \hat{c}_{x'}^\dagger \hat{c}_x |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \sum_{y=1}^{x'} n_y\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_{x'} + 1, \dots, n_x - 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 1 \text{ \& } n_{x'} = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \end{aligned} \quad (25)$$

$x = x'$ のとき

$$\begin{aligned} & \hat{c}_x \hat{c}_x^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \left(\sum_{y=1}^x n_y + 1\right)\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x + 1 - 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} = |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ &= (1 - n_x) |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & \hat{c}_x^\dagger \hat{c}_x |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} \\ &= \begin{cases} -\exp\left(i\pi \left(\sum_{y=1}^x n_y - 1\right)\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^x n_y\right) |n_1, \dots, n_x - 1 + 1, \dots, n_L\rangle_{\text{F}} = |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}} & \text{if } n_x = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ &= n_x |\mathbf{n}\rangle_{\text{F}}. \end{aligned} \quad (27)$$

よって、任意の $x, x' \in X$ に対して

$$\{\hat{c}_x, \hat{c}_{x'}^\dagger\} = \delta_{x, x'} \quad (28)$$

が成り立つ。

なお、 $\mathbf{0}: X \rightarrow \{0, 1\}$ を 0 への恒等写像とすると、

$$\begin{aligned} \left(\prod_{x \in X} (\hat{c}_x^\dagger)^{n_x} \right) |\mathbf{0}\rangle_{\mathbb{F}} &:= (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{c}_{L-1}^\dagger)^{n_{L-1}} (\hat{c}_L^\dagger)^{n_L} |0, \dots, 0, 0\rangle_{\mathbb{F}} = (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{c}_{L-1}^\dagger)^{n_{L-1}} |0, \dots, 0, n_L\rangle_{\mathbb{F}} \\ &= \cdots = |n_1, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle_{\mathbb{F}} = |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} \end{aligned} \quad (29)$$

が従う。これにより、生成演算子 \hat{c}_x^\dagger は実際に $\mathcal{H}_{\mathbb{F}}^X$ を生成していることが分かる。

$\hat{\sigma}_x^d$ ($d = Z, +, -$) をユニタリ演算子 \hat{U}_{JW} で変換しよう:

$$\hat{\sigma}_x^d \in \text{End}(\mathcal{H}_{\mathbb{S}}^X) \mapsto \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^d \hat{U}_{\text{JW}} \in \text{End} \mathcal{H}_{\mathbb{F}}^X. \quad (30)$$

式 (5), (6), (10), (19), (27) を用いると、

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^Z \hat{U}_{\text{JW}} |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} &= \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^Z \left(\prod_{y \in X} (\hat{\sigma}_y^+)^{n_y} \right) |\downarrow\rangle^{\otimes X} \\ &= \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \left((\hat{\sigma}_x^+)^{n_1} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes \hat{\sigma}_x^Z (\hat{\sigma}_x^+)^{n_x} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (\hat{\sigma}_L^+)^{n_L} |\downarrow\rangle \right) \\ &= \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \left((\hat{\sigma}_x^+)^{n_1} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (2n_x - 1) (\hat{\sigma}_x^+)^{n_x} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (\hat{\sigma}_L^+)^{n_L} |\downarrow\rangle \right) \\ &= (2n_x - 1) \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \left(\prod_{y \in X} (\hat{\sigma}_y^+)^{n_y} \right) |\downarrow\rangle^{\otimes X} = (2n_x - 1) \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{U}_{\text{JW}} |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} \\ &= (2n_x - 1) |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} = (2\hat{c}_x^\dagger \hat{c}_x - 1) |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}}, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^+ \hat{U}_{\text{JW}} |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} &= \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \left((\hat{\sigma}_x^+)^{n_1} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes \hat{\sigma}_x^+ (\hat{\sigma}_x^+)^{n_x} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (\hat{\sigma}_L^+)^{n_L} |\downarrow\rangle \right) \\ &= \begin{cases} \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \left((\hat{\sigma}_x^+)^{n_1} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (\hat{\sigma}_x^+)^{n_x+1} |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes (\hat{\sigma}_L^+)^{n_L} |\downarrow\rangle \right) & \text{if } n_x = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ &= \begin{cases} \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} |n_1, \dots, n_x + 1, \dots, n_L\rangle & \text{if } n_x = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \\ &= \exp \left(-i\pi \sum_{y=1}^x n_y \right) \hat{c}_x^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}} = -\exp \left(-i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y \right) \hat{c}_x^\dagger |\mathbf{n}\rangle_{\mathbb{F}}. \end{aligned} \quad (32)$$

よって、

$$\hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^Z \hat{U}_{\text{JW}} = 2\hat{c}_x^\dagger \hat{c}_x - \hat{1}_{\mathcal{H}_{\mathbb{F}}^X}, \quad \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^+ \hat{U}_{\text{JW}} = -\exp \left(-i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y \right) \hat{c}_x^\dagger = \hat{c}_x^\dagger \exp \left(-i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y \right). \quad (33)$$

が従う。 $\hat{\sigma}^- = (\hat{\sigma}^+)^\dagger$, したがって $\hat{\sigma}_x^- = (\hat{\sigma}_x^+)^\dagger$ が成り立つことに注意すると、

$$\hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^- \hat{U}_{\text{JW}} = (\hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \hat{\sigma}_x^+ \hat{U}_{\text{JW}})^\dagger = -\hat{c}_x \exp \left(i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y \right) = \exp \left(i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y \right) \hat{c}_x \quad (34)$$

も従う.

\hat{U}_{JW} はユニタリなので, $\hat{H}_S \in \text{End}(\mathcal{H}_S^X)$ のスペクトルと $\hat{H}_F := \hat{U}_{\text{JW}} \hat{H}_S \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \in \text{End}(\mathcal{H}_F^X)$ のスペクトルは一致する. 例えば \hat{H}_S を横磁場 Ising モデルのハミルトニアンとしよう. すなわち,

$$\hat{\sigma}_x^X := \hat{\sigma}_x^+ + \hat{\sigma}_x^- \in \text{End}(\mathcal{H}_S^X) \quad (35)$$

を導入して

$$\hat{H}_S = J \sum_{x=1}^{L-1} \sigma_x^X \sigma_{x+1}^X + \sum_{x=1}^L \sigma_x^Z \quad (J \in \mathbb{R}) \quad (36)$$

とする.

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{JW}} \hat{\sigma}_x^+ \hat{\sigma}_{x+1}^+ \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} &= -\hat{c}_x^\dagger \exp\left(-i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y\right) \exp\left(-i\pi \sum_{y=1}^{x+1} \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y\right) \hat{c}_{x+1}^\dagger \\ &= -\hat{c}_x^\dagger e^{-i\pi \hat{c}_{x+1}^\dagger \hat{c}_{x+1}} \hat{c}_{x+1}^\dagger = \hat{c}_x^\dagger \hat{c}_{x+1}^\dagger, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\text{JW}} \hat{\sigma}_x^+ \hat{\sigma}_{x+1}^- \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} &= \hat{c}_x^\dagger \exp\left(-i\pi \sum_{y=1}^x \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y\right) \exp\left(i\pi \sum_{y=1}^{x+1} \hat{c}_y^\dagger \hat{c}_y\right) \hat{c}_{x+1} \\ &= \hat{c}_x^\dagger e^{i\pi \hat{c}_{x+1}^\dagger \hat{c}_{x+1}} \hat{c}_{x+1} = \hat{c}_x^\dagger \hat{c}_{x+1} \end{aligned} \quad (38)$$

に注意すると,

$$\begin{aligned} \hat{H}_F &= J \sum_{x=1}^{L-1} \hat{U}_{\text{JW}} (\hat{\sigma}_x^+ \hat{\sigma}_{x+1}^+ + \hat{\sigma}_x^+ \hat{\sigma}_{x+1}^- + \text{h.c.}) \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} + \sum_{x=1}^L \hat{U}_{\text{JW}} \hat{\sigma}_x^Z \hat{U}_{\text{JW}}^{-1} \\ &= J \sum_{x=1}^{L-1} (\hat{c}_x^\dagger \hat{c}_{x+1}^\dagger + \hat{c}_{x+1}^\dagger \hat{c}_x + \hat{c}_x^\dagger \hat{c}_{x+1} + \hat{c}_{x+1} \hat{c}_x) + \sum_{x=1}^L (2\hat{c}_x^\dagger \hat{c}_x - \hat{1}_{\mathcal{H}_F^X}) \end{aligned} \quad (39)$$

が得られる. これは Kitaev 鎖モデルのハミルトニアンに他ならない. 当然, \hat{H}_S と \hat{H}_F は同じスペクトルを与える.