



非平衡量子多体系统专题编者按

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 70, 230101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.230101

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.230101>

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

专题: 非平衡量子多体系统

非平衡量子多体系统专题编者按

DOI: [10.7498/aps.70.230101](https://doi.org/10.7498/aps.70.230101)

在传统固体电子材料中, 量子多体物理的研究对象多为处于热力学平衡态 (热力学性质) 或近平衡态 (输运性质) 的系统, 而对远离热力学平衡态的性质较少涉及. 近十年来, 由于量子调控技术和测量手段的飞速发展, 在凝聚态物理、超冷原子、固态量子信息等领域中涌现出大量新型的人造量子多体系统. 通过动态调控物理参数, 或者将系统耦合上非平衡的环境, 人们可以将这类量子多体系统驱动到远离平衡态的状态. 由于其独特的性质, 这类新型量子关联体系会演化出一些与传统平衡态多体系统完全不同的新现象与新物理, 很多重要的物理概念 (如拓扑序、自发对称破缺、普适类) 在非平衡物理的框架下可能被赋予新的内涵. 同时, 由于量子技术的飞速发展, 理解这类复杂系统对于以量子计算和量子调控为代表的新一代量子科学技术的发展具有重要的现实意义.

非平衡量子多体系统是一个崭新的研究领域, 其中有大量的未解之谜. 由于其具有强关联和非平衡的双重困难, 人们对这一系统的认知极其有限. 同时, 非平衡量子关联体系的研究范围不局限于某一特定的物理分支, 而是涉及凝聚态物理、原子分子物理和量子光学、量子信息与量子计算、非平衡统计物理等诸多现代物理学的前沿领域. 这些不同体系中涌现出来的非平衡量子关联现象, 既融合了各自体系的不同特征, 又展现出普适的一般规律. 我们期待未来不同学科的物理思想和研究方法在这一领域交叉融合, 碰撞出更为绚丽的火花. 本专题邀请了若干活跃在这一新兴领域的专家撰稿, 重点介绍非平衡和开放量子多体系统相关的最新研究进展. 内容涵盖了非平衡量子磁性与超导、周期驱动的量子动力学、耗散与非厄密系统、可积系统、时间晶体等方向. 我们期待专题中介绍成果能够加强国内学者在这一领域的交流, 激发读者的兴趣, 吸引更多青年学者和学生加入到这一新兴领域的研究中.

(客座编辑: 蔡子 上海交通大学)

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Preface to the special topic: Non-equilibrium quantum many-body systems

DOI: [10.7498/aps.70.230101](https://doi.org/10.7498/aps.70.230101)

In the context of traditional solid physics, the majority of studies in quantum many-body physics focus on the systems in or close to the thermodynamic equilibrium state, while the far-from-equilibrium system is less known in general. In the past decades, due to the rapid development of quantum manipulation and measurement, enormous novel synthetic quantum materials have emerged in condensed matter, ultracold atomic, and solid state quantum information systems, where the systems can be driven out of equilibrium by dynamically tuning the Hamiltonian parameters, or coupling the system to a non-equilibrium bath. Due to its unique feature, such non-equilibrium quantum many-body systems exhibit novel properties that

are completely different from the traditional equilibrium quantum many-body systems. Lots of fundamental concepts (for instance, the topological order, spontaneous symmetry breaking and universality class) have to be reexamined in the framework of non-equilibrium physics. Furthermore, understanding such complex quantum systems is also of important practical significance for the development of the new generation of quantum technologies.

As a new branch of physics, non-equilibrium quantum many-body systems are far from being understood due to the intrinsic difficulties of it strongly correlated and non-equilibrium features. At the same time, instead of focusing on a specific branch of physics, the researches in this field involve interdisciplinary theories and methods in condensed matter physics, atomic and molecular physics and quantum optics, quantum information and quantum computation, non-equilibrium statistic physics. The emergent non-equilibrium quantum many-body phenomena in above systems do not only possess the interest of its own, but also exhibit universal behavior that is independent of the details of these systems. It is expected that the interplay between the ideas and methods in various branches of modern physics can trigger exciting physics in this new field. This special topic contains several review papers written by experts working actively in this emergent field. These papers review latest progresses in several important directions in this field, including the non-equilibrium quantum magnetism and superconductivity, periodically driven quantum systems, dissipative and non-Hermitian systems, integrable systems and time crystals. We hope this special topic can inspire the interest of the readers, and attract more young scholars and students to join this exciting field.

Cai Zi

Shanghai Jiao Tong University, China



耗散响应理论及其在开放系统中的应用

陈宇

Dissipative linear response theory and its applications in open quantum systems

Chen Yu

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 70, 230306 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211687

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211687>

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

专题: 非平衡量子多体系统

耗散响应理论及其在开放系统中的应用*

陈宇†

(中国工程物理研究院研究生院, 北京 100193)

(2021 年 9 月 10 日收到; 2021 年 11 月 1 日收到修改稿)

近些年来, 随着实验技术的进步, 对量子多体系统的耗散控制能力得到了增强, 同时耗散动力学过程表征技术方面的实验也有了较大进展. 实验上的进展驱使我们理论上建立量子多体系统的耗散动力学计算体系. 最近我们发现, 通过把系统和环境之间的相互作用看成对系统的一个微扰, 可以得到一般性的耗散响应理论. 通过这一响应理论, 可以回答物理可观测量以及熵在耗散下一定时间尺度内的动力学演化的问题. 本文建立了非 Markov 环境下的一般理论, 并讨论了何时可以取到 Markov 近似, 同时综述了这种方法在计算强关联体系的耗散动力学、强相互作用开放体系的熵的动力学演化等方面的应用.

关键词: 耗散响应理论, 马尔科夫近似, 量子开放系统, 熵**PACS:** 03.65.Yz, 04.70.Dy, 05.70.Jk**DOI:** 10.7498/aps.70.20211687

1 引言

线性响应理论是物理学中各种测量的基础^[1]. 线性响应的基本精神是通过探测物理量在一个微小驱动后的含时演化来研究物理体系的性质. 在凝聚态物理的实验中, 有许多实验是以线性响应作为基础的, 如角分辨光电子谱实验 (APRES)、电导测量、中子散射等. 这些实验都采用外场来耦合系统中的某些物理量, 最终测量物理量之间的推迟关联性质.

线性响应的精神主要体现在外场为弱场时, 对复杂的非平衡动力学演化行为的研究可以被约化为对初始时刻平衡态系统性质的研究. 仔细考察线性响应理论与实验的真实设置之间的差别时可以发现, 其中一个重要的近似在于使用的外场是环境中算子的期待值, 而外场的涨落所造成的效应被完全归零了. 真实的线性响应实验总是一次环境和系统突然耦合的过程, 而在有些时候外场涨落引起的

效果是无法被忽略的. 特别是在外场的期待值为零的情况下, 体系的动力学行为是完全被外场涨落驱动的^[2].

本文将主要研究这种外场期待值为零时体系的耗散动力学行为. 第 2 节首先给出耗散响应理论的一般性理论. 这里的一般性理论主要是指一般的非 Markov 环境. 耗散响应理论包括对物理可观测量的耗散响应和熵的耗散响应两个方面. 同时, 给出 Markov 极限的条件以及在这个极限下的非厄米线性响应理论^[3]. 第 3 节介绍非厄米线性响应理论在 Bose-Hubbard 模型的耗散动力学中的应用^[2]. 第 4 节介绍如何把熵的耗散响应理论用于具有全息对偶映射的开放 Sachdev-Ye-Kitaev 模型中, 从费米子热化的角度来看引力侧黑洞蒸发问题中的 Page 曲线^[3]. 最后对耗散响应理论进行总结和展望.

2 耗散响应理论

考虑一个物理体系在某一时刻突然和环境发

* 北京市自然科学基金重点专项 (批准号: Z180013) 和国家自然科学基金重点项目 (批准号: 11734010) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yichen@gcaep.ac.cn

生耦合. 在耦合前, 系统和环境的哈密顿量可以写为

$$H_0 = H_S + H_E. \quad (1)$$

在与环境耦合以后, 其总的哈密顿量变为

$$H = H_S + H_E + V, \quad (2)$$

其中

$$V = g \sum_j \left(O_j^\dagger \xi_j + \xi_j^\dagger O_j \right), \quad (3)$$

这里 O_j 是作用在系统的 Hilbert 空间上的算子, ξ_j 是作用在环境 Hilbert 空间上的算子. j 是模式指标, 也可以看作类似空间指标的连续指标. 总系统的演化服从下面的动力学方程:

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_E \left(e^{-iHt} \rho_0^{\text{tot}} e^{iHt} \right) / \text{Tr}_E(\rho_E(t)), \quad (4)$$

$$\rho_E(t) = \text{Tr}_S \left(e^{-iHt} \rho_0^{\text{tot}} e^{iHt} \right) / \text{Tr}_S(\rho_S(t)), \quad (5)$$

其中, ρ_0^{tot} 是初始时刻的密度矩阵. 这里假设初态时刻系统和环境处于各自的热态, 因此有

$$\rho_0^{\text{tot}} = \rho_0 \otimes \rho_E, \quad (6)$$

其中 ρ_0 和 ρ_E 是系统和环境的初始密度矩阵. 由于体系的含时演化是一个么正的过程, 因此系统的密度矩阵以及环境的密度矩阵的迹都不随时间变化.

这一点是非常重要的, 一个密度矩阵的含时演化是保持迹不变的, 与么正性是互相等价的, 这是量子力学的基本要求. 然而在近来许多有关非厄米演化的研究中, 并不能保证一个密度矩阵在演化过程中保持迹不变. 因此, 这种非厄米哈密顿量的近似在量子开放系统中的有效程度和适用范围是值得进一步清晰化的. 因为迹不变, 所以可以把 $\text{Tr}_E(\rho_E(t))$ 替换为初始热态的配分函数 $Z_E = \text{Tr}_E(\rho_E)$. 为了简单起见, 后文用 Tr 取代 Tr_S 来表示对系统的 Hilbert 空间求迹.

根据 (4) 式, 得到在相互作用表象下的系统密度矩阵为

$$\begin{aligned} \rho_S^I(t) &= \text{Tr}_E \left(e^{iH_0 t} e^{-iHt} \rho_S(0) \otimes \rho_E(0) e^{iHt} e^{-iH_0 t} \right) / Z_E \\ &\equiv \text{Tr}_E \left(U(t) \rho_S(0) \otimes \rho_E(0) U^\dagger(t) \right) / Z_E, \end{aligned} \quad (7)$$

其中相互作用表象下的密度矩阵和薛定谔表象下的密度矩阵有如下关系: $\rho_S(t) = e^{-iH_S t} \rho_S^I(t) e^{iH_S t}$. 这里引入演化算子 $U(t) = T_t \exp \left[-i \int_0^t dt' V^I(t') \right]$, 其中 $V^I(t) = e^{iH_S t} V e^{-iH_S t}$ 是相互作用表象下的相互作用算子, T_t 是编时算子. 当演化算子按照相互作用强度展开到 g 的平方阶时, 其形式为

$$\begin{aligned} \rho_S^I(t) &= \text{Tr}_E \left[\left(1 - i \int_0^t V^I(t') dt' - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V^I(t_1) V^I(t_2) \right) \rho_0 \right. \\ &\quad \left. \otimes \rho_E \left(1 + i \int_0^t V^I(t') dt' - \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V^I(t_2) V^I(t_1) \right) \right] / Z_E. \end{aligned} \quad (8)$$

更加显式地:

$$\begin{aligned} \rho_S^I(t) &= \rho_0 + g^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \xi_j^I(t_1) \xi_l^{I\dagger}(t_2) \rangle_E \left(O_l^I(t_2) \rho_0 O_j^{I\dagger}(t_1) - O_j^{I\dagger}(t_1) O_l^I(t_2) \rho_0 \right) \\ &\quad + g^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \xi_j^{I\dagger}(t_1) \xi_l^I(t_2) \rangle_E \left(O_l^{I\dagger}(t_2) \rho_0 O_j^I(t_1) - O_j^I(t_1) O_l^{I\dagger}(t_2) \rho_0 \right) \\ &\quad + g^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \xi_j^I(t_2) \xi_l^{I\dagger}(t_1) \rangle_E \left(O_l^I(t_1) \rho_0 O_j^{I\dagger}(t_2) - \rho_0 O_j^{I\dagger}(t_2) O_l^I(t_1) \right) \\ &\quad + g^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \langle \xi_j^{I\dagger}(t_2) \xi_l^I(t_1) \rangle_E \left(O_l^{I\dagger}(t_1) \rho_0 O_j^I(t_2) - \rho_0 O_j^I(t_2) O_l^{I\dagger}(t_1) \right), \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\langle \cdot \rangle_E = \text{Tr}_E(\rho_E \cdot)$ 表示在环境中的系综平均. 这里外场的平均值为 0, 即 $\langle \xi_j^I(t) \rangle_E = 0$. 这里外场没有发生任何凝聚的现象, 因此所有的反常关联函数也为 0. 也就是说要求 $\langle \xi^I(t) \xi^I(t') \rangle_E = \langle \xi^{I\dagger}(t) \xi^{I\dagger}(t') \rangle_E = 0$. 其中的 I 表示相互作用表象. 在引入外场的关联函数以及类 Lindblad 算子后, (9) 式可以写为

$$\rho_S^I(t) = \rho_0 + ig^2 \iint_0^t dt_1 dt_2 \left(G_{\xi,jl}^<(t_1, t_2) L_{jl,0}^d(t_1, t_2) + G_{\xi,jl}^>(t_2, t_1) L_{jl,0}^e(t_1, t_2) \right) \rho_0, \quad (10)$$

$$\delta W^{(1)}(t) = -ig \int_0^t \langle \mathbf{V}^I(t') \mathbf{W}^I(t) - \mathbf{W}^I(t) \mathbf{V}^I(t') \rangle dt', \quad (17)$$

以及

$$\begin{aligned} \delta W^{(2)}(t) &= g^2 \int_0^t \int_0^t \theta_{12} \text{Tr}((\mathbf{V}^I(t_2) \rho_0 \otimes \rho_E \mathbf{V}^I(t_1) \\ &\quad - \rho_0 \otimes \rho_E \mathbf{V}^I(t_2) \mathbf{V}^I(t_1)) \mathbf{W}^I(t)) dt_1 dt_2 \\ &\quad + g^2 \int_0^t \int_0^t \theta_{21} \text{Tr}((\mathbf{V}^I(t_2) \rho_0 \otimes \rho_E \mathbf{V}^I(t_1) \\ &\quad - \mathbf{V}^I(t_2) \mathbf{V}^I(t_1) \rho_0 \otimes \rho_E) \mathbf{W}^I(t)) dt_1 dt_2. \end{aligned} \quad (18)$$

当外场的平均值非零, 且被测量的物理量正好是 $\mathbf{O}$ 时, 有

$$\delta O_i(t) = -ig \int_0^t \langle [\mathbf{O}_i^I(t), \mathbf{O}_j^I(t')] \rangle \xi_j(t') dt', \quad (19)$$

其中重复的 j 指标代表求和, 这正是我们所熟知的线性响应理论. 同时根据推导就不难发现, 在更高阶的贡献中, 既包括关于外场的非线性响应的部分, 也包括由于外场的涨落引起的响应部分. 接下来将证明在考虑外场均值为 0 时, 涨落引起的耗散响应在马尔可夫极限下正好是之前发现的非厄米线性响应理论.

$$\begin{aligned} \delta W^{(2)}(t) &= \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \theta_{12} G_{\xi, jl}^<(t_1, t_2) \text{Tr}(\mathbf{O}_l^{I\dagger}(t_2) \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^I(t_1) \rho_0 - \mathbf{O}_l^{I\dagger}(t_2) \mathbf{O}_j^I(t_1) \mathbf{W}^I(t) \rho_0) \\ &\quad + \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \theta_{21} G_{\xi, jl}^<(t_1, t_2) \text{Tr}(\mathbf{O}_l^{I\dagger}(t_2) \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^I(t_1) \rho_0 - \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_l^{I\dagger}(t_2) \mathbf{O}_j^I(t_1) \rho_0) \\ &\quad + \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \theta_{12} G_{\xi, jl}^>(t_1, t_2) \text{Tr}(\mathbf{O}_l^I(t_2) \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t_1) \rho_0 - \mathbf{O}_l^I(t_2) \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t_1) \mathbf{W}^I(t) \rho_0) \\ &\quad + \int_0^t \int_0^t dt_1 dt_2 \theta_{21} G_{\xi, jl}^>(t_1, t_2) \text{Tr}(\mathbf{O}_l^I(t_2) \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t_1) \rho_0 - \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_l^I(t_2) \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t_1) \rho_0). \end{aligned} \quad (20)$$

上面的解析表达式也可以用引入的图形法则来进行表示.

接下来考虑几种不同的马尔可夫极限. 第一种是低温的马尔可夫极限. 在这个极限下 $G_{\xi, jl}^<(t_1, t_2) = D\delta(t_1 - t_2)$, 同时 $G_{\xi, jl}^>(t_1, t_2) = 0$. 在这个极限下, 体系是完全没有增益的. 这里的 D 代表态密度. 引入 $2\gamma = g^2 D$, 上面的耗散响应退化为

$$\delta \mathbf{W}^{(2)}(t) = \gamma \sum_j \int_0^t dt' \left\langle \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t') \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^I(t') - \frac{1}{2} (\mathbf{O}_j^{I\dagger} \mathbf{O}_j^I(t') \mathbf{W}^I(t) + \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^{I\dagger} \mathbf{O}_j^I(t')) \right\rangle, \quad (21)$$

这正是非厄米线性响应理论中得到的表达式^[2]. 也可以注意到, (21) 式的响应理论的条件是和量子噪声为白噪声的条件一样的, 因此这一近似和 Lindblad 方程的适用条件是相同的.

第二种是经典的白噪声. 这里要求 $G_{\xi, jl}^<(t_1, t_2) = G_{\xi, jl}^>(t_1, t_2) = D\delta(t_1 - t_2)$. 对于玻色子环境, 这一条件等于要求噪声谱是欧姆谱. 这一要求和最早的理论完全一致. 在这一极限下,

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{W}^{(2)}(t) &= \gamma \int_0^t dt' \left\langle \mathbf{O}_j^I(t') \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t') - \frac{1}{2} (\mathbf{O}_j^I \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t') \mathbf{W}^I(t) + \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^I \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t')) \right\rangle \\ &\quad + \gamma \int_0^t dt' \left\langle \mathbf{O}_j^{I\dagger}(t') \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^I(t') - \frac{1}{2} (\mathbf{O}_j^{I\dagger} \mathbf{O}_j^I(t') \mathbf{W}^I(t) + \mathbf{W}^I(t) \mathbf{O}_j^{I\dagger} \mathbf{O}_j^I(t')) \right\rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

我们也发现, 一般而言, 除了在一些极限情况下, 增益都会有自己的记忆效应. 只有耗散是可以完全没有记忆效应的. 也可以注意到, 量子噪声的条件和经典噪声的条件对于环境来说差别是非常大的. 同时也看到, 在马尔可夫极限下存在增益本身已经把量子系统放在了高温环境中, 相干性消失, 可以将系统看成一个经典系统来处理. 需要注

意的是我们现在的处理方法与最早的 Feynman-Vernon 影响泛函^[4], 以及在 Caldeira-Leggett 理论中使用的 Schwinger-Keldysh 方法^[5] 略有不同, 走了不同的路线. 我们所建立的理论的优点在于比较容易计算短时间弱耗散、强相互作用的系统. 而仅仅这一优点已经可以回答大量从前在开放系统动力学中难以回答的问题.

2.2 熵的线性响应理论

下面计算系统的熵在突然与环境耦合以后发生的变化. 为了简单起见, 首先来计算第二 Renyi 熵的变化. 根据第二 Renyi 熵的定义:

$$S_{\text{RE}}^{(2)} = -\log [\text{Tr}(\rho_S^2(t))] = -\log [\text{Tr}(\rho_S^{1,2}(t))], \quad (23)$$

以及之前有关 $\rho_S^1(t)$ 的微扰展开, 可以相应地画出图 3.

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(\rho_S(t)^2) \\ &= \text{Tr}(\rho_0^2) + 2ig^2 \sum_{j,l} \iint_0^t dt_1 dt_2 \{ G_{\xi,jl}^<(t_1, t_2) \\ & \times \text{Tr}[\rho_0 (L_{jl,O}^d(t_1, t_2) \rho_0)] G_{\xi,jl}^>(t_1, t_2) \\ & \times \text{Tr}[\rho_0 (L_{jl,O}^e(t_1, t_2) \rho_0)] \}. \end{aligned} \quad (24)$$

接下来进一步利用格林函数的谱表示 (这里首先假设 ξ 和 O 是玻色场):

$$G_{\xi}^>(t_1, t_2) = -i \int d\omega' A_{\xi}(\omega', \beta_E) \frac{1}{e^{\beta_E \omega'} - 1} e^{i\omega'(t_1 - t_2)}, \quad (25)$$

$$G_{\xi}^<(t_1, t_2) = -i \int d\omega' A_{\xi}(\omega', \beta_E) \frac{e^{\beta_E \omega'}}{e^{\beta_E \omega'} - 1} e^{-i\omega'(t_1 - t_2)}, \quad (26)$$

其中 $A_{\xi}(\omega, \beta_E) = -\text{Im} G_{\xi}^R(\omega, \beta_E) / \pi$ 是 ξ 场的谱函数. $G_{\xi}^R(\omega, \beta) = \int dt e^{i\omega t} G_{\xi}^R(t, \beta)$, $G_{\xi}^R(t, \beta_E) = -i\theta(t) \times \text{Tr}_E(\rho_E[\xi(t), \xi^\dagger(0)])$ 是环境中 ξ 场的推迟格林函数. 与此同时,

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[\rho_0 (L_{jl,O}^d(t_1, t_2) \rho_0)] = \\ & \text{Tr}(\rho_0 O_j^{1,\dagger}(t_1) \rho_0 O_j^1(t_2)) - \text{Tr}(\rho_0^2 O_j^{1,\dagger}(t_1) O_j^1(t_2)), \\ & \text{Tr}(\rho_0 (L_{jl,O}^e(t_2, t_1) \rho_0)) = \\ & \text{Tr}(\rho_0 O_j^{I,\dagger}(t_1) \rho_0 O_j^I(t_2)) - \text{Tr}(\rho_0^2 O_j^I(t_2) O_j^{I,\dagger}(t_1)). \end{aligned}$$

引入一个平均的谱函数 $A_O(\omega, 2\beta)$,

$$A_O(\omega, 2\beta) = -\frac{1}{\pi N_j} \sum_j \text{Im} G_{j,O}^R(\omega, 2\beta).$$

由此, 得到格林函数的谱表示:

$$\begin{aligned} & \sum_j \text{Tr}(\rho_0 O_j^{1,\dagger}(t_1) \rho_0 O_j^1(t_2)) = \\ & N_j \text{Tr}(\rho_0^2) \int d\omega A_O(\omega, 2\beta) \frac{e^{\beta\omega}}{e^{2\beta\omega} - 1} e^{i\omega(t_1 - t_2)}, \end{aligned} \quad (27)$$

以及

$$\begin{aligned} & \sum_j \text{Tr}(\rho_0^2 O_j^{1,\dagger}(t_1) O_j^1(t_2)) = \\ & N_j \text{Tr}(\rho_0^2) \int d\omega A_O(\omega, 2\beta) \frac{1}{e^{2\beta\omega} - 1} e^{i\omega(t_1 - t_2)}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} & \sum_j \text{Tr}(\rho_0^2 O_j^1(t_2) O_j^{1,\dagger}(t_1)) = \\ & N_j \text{Tr}(\rho_0^2) \int d\omega A_O(\omega, 2\beta) \frac{e^{2\beta\omega}}{e^{2\beta\omega} - 1} e^{-i\omega(t_1 - t_2)}. \end{aligned} \quad (29)$$

把这些结果代入 Renyi 熵的表达式, 得到:

$$\begin{aligned} \delta S_{\text{RE}}^{(2)}(t) &= 4g^2 N_j \int_0^t dt_0 \int d\omega \int d\omega' \frac{\sin(\omega - \omega') t_0}{\omega - \omega'} \\ & \times W_{\beta\beta_E}^B(\omega, \omega') A_{\xi}(\omega', \beta_E) A_O(\omega, 2\beta), \end{aligned} \quad (30)$$

其中的统计核函数为

$$W_{\beta\beta_E}^B(\omega, \omega') = \frac{(e^{\beta\omega} - 1)(e^{\beta\omega} - e^{\beta_E\omega'})}{(e^{2\beta\omega} - 1)(e^{\beta_E\omega'} - 1)}. \quad (31)$$

以上是玻色子环境与玻色子耦合的情况.

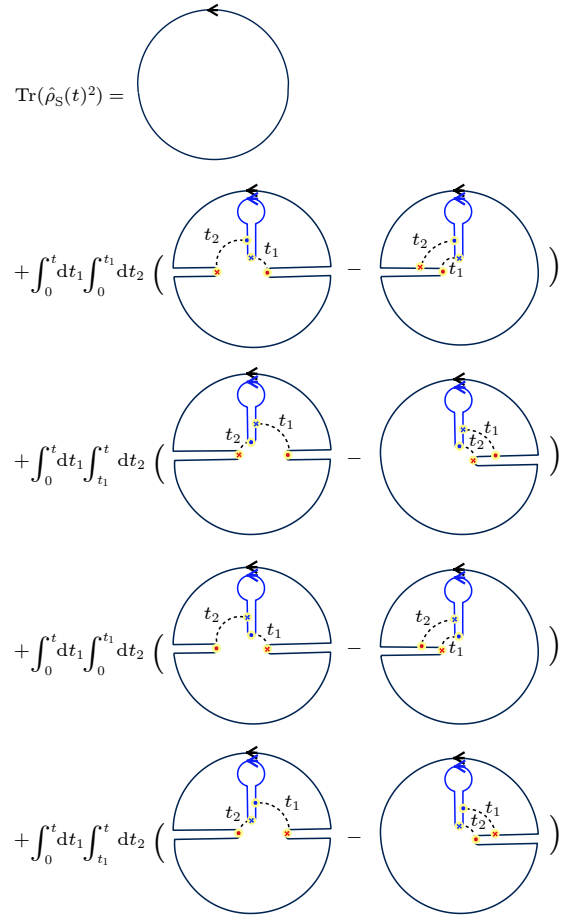


图 3 第二 Renyi 熵的指数的耗散费曼图

Fig. 3. Dissipative diagrams of the exponential of the second Renyi entropy.

如果 ξ 和 O 是费米场, 那么相应地, Renyi 熵响应公式需要修改为

$$\begin{aligned} \delta S_{\text{RE}}^{(2)}(t) &= 4g^2 N_j \int_0^t dt_0 \int d\omega \int d\omega' \frac{\sin(\omega - \omega') t_0}{\omega - \omega'} \\ &\times W_{\beta\beta_E}^{\text{F}}(\omega, \omega') A_{\xi}(\omega', \beta_E) A_O(\omega, 2\beta), \end{aligned} \quad (32)$$

其中的统计核函数为

$$W_{\beta\beta_E}^{\text{F}}(\omega, \omega') = \frac{(e^{\beta\omega} - 1)(e^{\beta\omega} - e^{\beta_E\omega'})}{(e^{2\beta\omega} + 1)(e^{\beta_E\omega'} + 1)}. \quad (33)$$

由此得到了熵响应的一般表达式. 可以发现在这个表达式中熵的变化仅仅和系统、环境的谱函数、初态温度、以及统计性质有关. (32) 式和 (33) 式也大大简化了对熵的动力学演化的计算^[3].

3 耗散 Bose-Hubbard 模型中的动力学

近些年来, 随着冷原子调控技术的突破, 陆续出现了一些有关控制冷原子体系中的耗散的实验研究^[6–12].

2019 年巴黎高等师范学院的实验工作中, 他们在二维的 Bose-Bubbard 模型中引入了耗散^[6]. 实验中他们测量了在 0 动量上的粒子占据随时间的改变, 以及动量分布的峰宽随时间的变化. 他们发现 0 动量上的粒子占据数并不是按照指数规律衰减的, 同时他们发现动量的峰宽变化比典型的扩散行为要慢一些. 过去, 在一些近似下, 有一些针对 Bose-Hubbard 模型的耗散动力学的计算^[13,14].

在此综述一下之前利用非厄米线性响应理论分析这一实验的结果. 针对实验的情形, 其研究的哈密顿量为 $H_S = t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) - \mu \sum_i n_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1)$, 这是一个二维的 Bose-Hubbard 模型. 考虑体系的耗散算子 $O_j = n_j$, 观察的物理量是 n_k (其中 k 是动量), 得到在线性响应下的动力学为

$$\begin{aligned} \delta n_k(t) &= 2\gamma \sum_j \int_0^t \langle n_j(t') n_k(t) n_j(t') \rangle \\ &- \frac{1}{2} \{ n_k(t), n_j(t') n_j(t') \} dt'. \end{aligned} \quad (34)$$

根据 Wick 定理, 同时忽略掉高阶的连通图,

$$\begin{aligned} &\langle n_j(t') a_k^\dagger(t) a_k(t) n_j(t') \rangle \\ &\approx \bar{n} (iG_{k,j}^>(t-t') iG_{k,j}^<(t-t')) \\ &+ \bar{n} (iG_{j,k}^>(t'-t) iG_{j,k}^<(t'-t)) \\ &+ \bar{n}^2 n_k + \bar{n} (iG_{j,k}^<(t'-t) iG_{k,j}^<(t-t')) \\ &+ (1 + \bar{n}) (iG_{j,k}^>(t'-t) iG_{k,j}^>(t-t')), \end{aligned} \quad (35)$$

其中 $\bar{n}$ 是平均粒子数密度, $G_{k,j}^>(t-t') = -i \langle a_k^\dagger(t) a_j(t') \rangle$, $G_{k,j}^<(t-t') = -i \langle a_j(t') a_k^\dagger(t) \rangle$. 并且,

$$\begin{aligned} &\langle n_j(t') n_j(t') a_k^\dagger(t) a_k(t) \rangle \\ &\approx (2\bar{n} + 1 + 2\bar{n}) (iG_{j,k}^>(t'-t) iG_{j,k}^<(t'-t)) + \bar{n}^2 n_k, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} &\langle a_k^\dagger(t) a_k(t) n_j(t') n_j(t') \rangle \\ &\approx (2\bar{n} + 1 + 2\bar{n}) (iG_{k,j}^>(t-t') iG_{k,j}^<(t-t')) + \bar{n}^2 n_k. \end{aligned} \quad (37)$$

把 (35) 式—(37) 式代入原始表达式 (34) 式, 得到:

$$\begin{aligned} \delta n_k(t) &\approx \gamma (2\bar{n} + 1) \int_0^t (iG_k^<(t-t') \\ &- iG_k^>(t'-t)) (iG_k^>(t-t') \\ &- iG_k^<(t'-t)) dt' \\ &+ \gamma \int_0^t [iG_k^>(t'-t) iG_k^>(t-t') \\ &- iG_k^<(t'-t) iG_k^<(t-t')] dt'. \end{aligned} \quad (38)$$

引入近似: $\int d\omega n_B(\omega) A(\omega) e^{i\omega t} \approx n_k(0) g(k, t)$, 其中 $g(k, t) = \int d\omega A_k(\omega) e^{i\omega t}$. 那么

$$\delta n_k(t) = -2\gamma (n_k(0) - \bar{n}) \int_0^t g(k, t') g(k, -t') dt'. \quad (39)$$

如果进一步引入指数化近似, 得到:

$$\frac{d\Delta n_k}{dt} = -2\gamma f(k, t) \Delta n_k(t), \quad (40)$$

其中 $\Delta n_k = n_k(t) - \bar{n}$, $f(k, t) = g(k, t) g(k, -t)$. 最终可以得到:

$$n_k(t) - n_k(0) = - \left(1 - e^{-2\gamma F(k, t)} \right) \Delta n_k(0), \quad (41)$$

其中 $F(k, t) \equiv \int_0^t f(k, t') dt'$. 这里需要注意, 一般来说 $F(k, t)$ 是动量的函数.

下面考虑两种特别的情况.

1) 系统有良好定义的准粒子:

$$A_k(\omega) = \delta(\omega - k). \quad (42)$$

容易发现, 这样的谱函数会使得 $f(k, t) = 1$, 故而 $\mathbf{F}(k, t) = t$. 由此可以发现:

$$n_k(t) - n_k(0) = -(1 - e^{-2\gamma t}) \Delta n_k(0), \quad (43)$$

也就是说粒子数的变化是指数衰减的.

2) 系统在量子临界点附近. 系统没有良好定义的准粒子^[15], 其谱函数有如下特征:

$$A_k(\omega) = \theta(\omega - k) (\omega - k)^{-\eta}. \quad (44)$$

由此可以计算得到 $f(k, t) = t^{2\eta-2}$, $\mathbf{F}(k, t) = t^{2\eta-1}$. 这里需要说明的是尽管谱函数和动量有关, 但是 $f(k, t)$ 与动量无关. 这时,

$$n_k(t) - n_k(0) = -(1 - e^{-2\gamma t^{2\eta-1}}) \Delta n_k(0). \quad (45)$$

与此同时,

$$\langle k^2 \rangle(t) - \langle k^2 \rangle(0) = \langle k^2 \rangle(t) (1 - e^{-2\gamma t^{2\eta-1}}). \quad (46)$$

注意后面动量扩散的规律和 0 动量粒子数衰变的规律完全相同. 而这一结果并不仅仅是粒子数守恒造成的, 而是严重依赖于 $f(k, t)$ 与动量无关这一事实. 因此, 这一规律如果在实验上被观测到并非是一个寻常的现象. 下面展示一下由本文给出的公式拟合实验原始数据的结果, 如图 4(a) 所示. 可以发现动量扩散的数据和粒子数衰变的数据在一定的放缩后完全重合.

4 非马尔科夫环境中的熵变与 Page 曲线

第 2 节中得到了一个系统和环境在突然耦合后熵的变化公式. 这里用这个公式以及猜测的引力全息对偶来探讨一下黑洞的信息丢失佯谬. 首先回顾黑洞信息丢失佯谬. 文献 [16–23] 中的研究发现, 黑洞的表面积和总质量、总角动量满足如下简单的关系:

$$\frac{\kappa}{8\pi G_N} d(\text{Area}) = dM - \Omega dJ, \quad (47)$$

其中 G_N 是牛顿万有引力常数, Area 是黑洞的表面积, M 是黑洞的质量, J 是黑洞的角动量, Ω 是黑洞视界的角速度, κ 是视界表面的引力. 后来有人发现这一表达式和热力学基本方程十分相似. 其中 κ 正比于温度, M 相当于内能, Area 正比于熵, J 相当于体积, Ω 相当于压强. 因此提出视界的表面积正比于黑洞的熵.

之后霍金考虑在黑洞视界的表面由于量子涨落的原因形成一对纠缠光子对, 其中一个光子在视界之内而另一个在视界的外面. 其中视界内部的光子掉落向黑洞的奇点, 而黑洞外部的光子向无穷远逃逸. 在无穷远的观测者于是看到了被辐射出的光子. 这些光子被称为霍金辐射. 霍金在计算霍金辐射的熵时发现辐射光子的熵随着时间单调上升. 但另一方面, 随着黑洞因为辐射光子而蒸发, 质量减小以后, 表面积缩小. 因此一定会出现黑洞的熵比辐射出的光子的熵更小的情况. 然而, 如果假定黑洞的所有动力学过程 (包括塌缩和蒸发) 都是一个么正过程的话, 体系的细致熵 (及部分的冯诺依曼熵) 一定满足黑洞细致熵等于霍金辐射的细致熵. 另一方面, 细致熵一定小于粗粒化的熵 (粗粒化熵

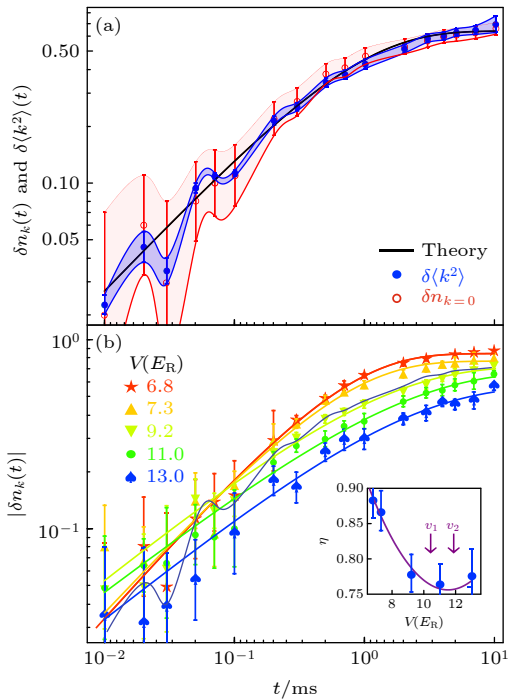


图 4 (a) 红色为 0 动量粒子数衰变的数据, 蓝色为动量空间中的粒子数宽度随时间变化的曲线; (b) 拟合的不同晶格强度下的 Bose-Hubbard 模型中的 0 动量粒子数衰变曲线中的参数 η . 这里的反常维度应该在量子临界点处最小. 图 (b) 的小图里两个箭头所在的晶格强度就是量子临界点所在的位置^[2].

Fig. 4. (a) Red curve shows the decay of zero momentum particle occupation. The blue curve shows how the width of particle momentum distribution evolves over time. The solid line is our theoretical prediction. (b) Theoretical curve with experimental data for zero momentum particle decay for different parameters. In the inset figure, we show the anomalous dimension η extracted from experimental data and we can see its minimal being around quantum critical region^[2].

是指从某些物理可观测量来看, 某些等效的分布如正则分布, 也可以得到相同的结果时, 这些等效密度矩阵的冯诺依曼熵. 一般而言在经典的热力学中, 热力学分布都取到了系统和环境最大程度退相干的混合态, 因此经典熵是粗粒化熵的代表. 自然地, 我们之前类比黑洞熵和经典热力学熵即是说黑洞的粗粒化熵. 这是因为粗粒化过程本身意味着信息的丢失, 因此人为造成熵增加. 然而根据刚才的论述可以看出, 黑洞视界面积的收缩导致的粗粒化熵减小也限制了黑洞的细致熵的大小. 而当霍金辐射的熵大于黑洞粗粒化熵时自然就无法继续满足黑洞细致熵等于霍金辐射熵这一条件. 这就导致一个问题, 黑洞蒸发的过程中是否存在信息丢失? 这就是霍金提出的黑洞蒸发的信息丢失佯谬^[24].

20 世纪 90 年代, 霍金的学生 Page^[25] 提出为了解决这一信息丢失佯谬, 霍金辐射的熵会在某个时刻开始减小. 这条非单调变化的霍金辐射熵变曲线因此得名. 在后来的研究中, 有一系列弦理论的计算中支持 Page 曲线, 暗示黑洞蒸发的过程确实是一个么正的过程^[26–30]. 1999 年 Maldacena^[30] 发现 SU(N) 的超对称 Yang-Mills 场和引力理论之间存在对偶关系. 这里所谓的对偶猜想是指在两个不同的理论下通过某种映射联系起来的场有等价关系, 表现为配分函数相同, 即所有关联函数都相同. 这种对偶映射虽然没有得到严格证明, 但在不少理论中得到了一定程度的验证. 自然地, 如果一个引力理论可以对偶为一个量子力学体系, 其动力学演化的过程一定是么正的, 故而满足最初的基本假设. 于是不少研究者试图从具有全息对偶性质的引力理论出发, 试图从引力侧和量子力学侧同时对 Page 曲线进行研究和理解. 在全息对偶理论提出以后, 很长时间内并没有一个有明确哈密顿量的体系可验证具有全息对偶性质, 直到 2015 年 Kitaev^[31,32]、Ye 和 Sachdev^[33] 提出 Sachdev-Ye-Kitaev(SYK) 模型, SYK 模型是一个具有哈密顿量的全息对偶模型^[34–36]. SYK 模型被证明和 1+1 维的 Jackiw-Teitelboim (JT) 引力^[37,38] 存在对偶关系^[39]. 由于在大 N 极限下, 类似 SYK 模型是可解的, 因此最近有不少工作对这些类 SYK 模型的熵变进行了计算^[40–48]. 在引力侧, 通过推广的 Ryu-Takanagi 公式, 最近不少研究也在 Page 曲线问题上取得了关键性的进展^[49–51].

这里我们试图在一个有全息对偶的 SYK 模型

上外加一个量子场作为环境, 来计算系统的熵的变化. 通过前面通过微扰理论给出的公式可以非常一般地计算出环境比系统温度高或者低 (环境温度低对应于黑洞蒸发的过程) 的熵变. 首先写出体系的哈密顿量:

$$H_S = \sum_{jklm} J_{jklm} \chi_j \chi_k \chi_l \chi_m, \quad (48)$$

其中 j, k, l, m 可以取从 1 到 N 的整数, 是 Majorana 费米子的模式数, χ_j 是 Majorana 费米子. J_{jklm} 满足:

$$\overline{J_{jklm}} = 0, \quad \overline{J_{jklm}^2} = \frac{3!}{N^3} J^2, \quad (49)$$

其中上横线表示无序平均, J 是一个实数参数, 表示费米子之间的耦合强度. 这里为了满足大 N 极限以及强耦合极限, 需要要求 $N \gg \beta J \gg 1$. 接下来假设环境是无序的自由费米子,

$$H_E = \sum_{\alpha=1}^M \sum_{jk=1}^N J'_{jk} \psi_{k,\alpha}^\dagger \psi_{k,\alpha}, \quad (50)$$

其中 J'_{jk} 满足

$$\overline{J'_{jk}} = 0, \quad \overline{(J'_{jk})^2} = \frac{1}{4N} (J')^2, \quad (51)$$

其中上横线表示无序平均, J' 是一个实数参数. $\psi_{k,\alpha}$ 是复费米场. 系统和环境之间的相互作用为

$$V = g \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^M (\chi_j \psi_{j,\alpha} + \psi_{j,\alpha}^\dagger \chi_j), \quad (52)$$

其中 g 是耦合常数. 在上面的假设下, 发现有关的谱函数可以给出, 为

$$A_O(\omega, \beta) = \frac{b}{\sqrt{\beta}} \text{Re} \left(d \frac{\Gamma \left[\frac{1}{4} - i\beta\omega/(2\pi) \right]}{\Gamma \left[\frac{3}{4} - i\beta\omega/(2\pi) \right]} \right), \quad (53)$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$ 是系统的初始温度倒数. $b = [1/(4\pi) J^2]^{1/4}$ 是一个常数. 环境的谱函数为

$$A_\xi(\omega, \beta_E) = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{J'^2}}. \quad (54)$$

因此, 根据之前建立的熵变的一般公式得到:

$$\begin{aligned} \delta S_{\text{RE}}^{(2)}(t) &= 4g^2 NM \int_0^t dt_0 \int_{-J'}^{J'} d\omega' \int_{-J}^J d\omega \frac{\sin(\omega - \omega') t_0}{\omega - \omega'} \\ &\quad \times W_{\beta\beta_E}^F(\omega, \omega') A_O(\omega, 2\beta) A_\xi(\omega', \beta_E), \end{aligned} \quad (55)$$

由此发现, 在短时间的极限下:

$$\delta S_{\text{RE}}^{(2)}(t) = \frac{1}{2} \kappa_{\text{F}} t^2, \quad (56)$$

其中参数 κ_{F} 定义为

$$\begin{aligned} \kappa_{\text{F}} = & 4g^2 NM \int_{-J'}^{J'} d\omega' \int_{-J}^J d\omega W_{\beta\beta_{\text{E}}}^{\text{F}}(\omega, \omega') \\ & \times A_{\text{O}}(\omega, 2\beta) A_{\xi}(\omega', \beta_{\text{E}}). \end{aligned} \quad (57)$$

在长时间极限下, 有: $\delta S_{\text{RE}}^{(2)}(t) = \lambda t$, 其中

$$\begin{aligned} \lambda = & 4\pi g^2 NM \int_{-\min(J', J)}^{\min(J', J)} d\omega W_{\beta\beta_{\text{E}}}^{\text{F}}(\omega, \omega) \\ & \times A_{\text{O}}(\omega, 2\beta) A_{\xi}(\omega, \beta_{\text{E}}). \end{aligned} \quad (58)$$

注意这个因子是可正可负的. 在较长时间里, 线性的规律比较接近热传导. 接下来展示环境温度较高

和环境温度较低时, 进入 SYK 模型非微扰区的现象.

首先在图 5 中考虑环境初始温度比较高的情况. 可以发现在初始时刻的平方增长以后变为线性增长.

接下来考虑环境温度比较低的情况, 这正好对应于类似黑洞蒸发的过程 (如图 6 所示). 从图 6 可以看出, 由于最终的 $\lambda < 0$, 而初始时刻的熵是平方增加的, 因此一定存在一个熵变反转的时刻. 由于直接计算的是 SYK 模型的细致熵, 也就是说对应于黑洞的细致熵. 其变化应和霍金辐射的熵相同, 因此我们也预期熵的变化服从 Page 曲线. 这正是我们的微扰理论给出的结果.

以下问题值得注意: 1) 首先现在的计算对于相当一大类相互作用费米子体系都是正确的, 即类

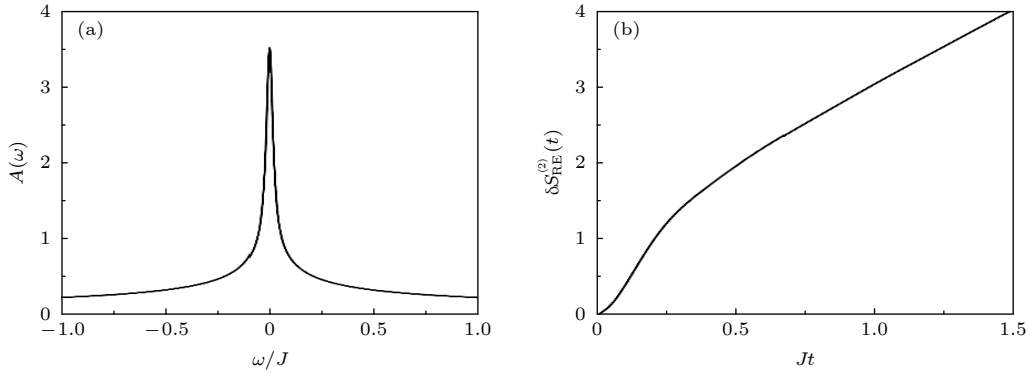


图 5 当环境比 SYK 系统温度高时系统的熵随时间的变化 (a) 环境和系统的谱函数; (b) 系统的熵随时间的演化, 可以看到经过初期的平方增长后变为线性增大. 系统的温度 $\beta = 10$, 相互作用强度 $J = 4$; 环境温度 $\beta_{\text{E}} = 2$, 相互作用强度 $J' = 8$. 该图引用自文献 [3]

Fig. 5. (a) Spectral functions of the environment and the system; (b) entropy dynamics after the quench interaction between the system and the environment. Here the temperature of the environment is higher than the system's initial temperature. The entropy dynamics shows a typical thermalization case. Cited from Ref. [3].

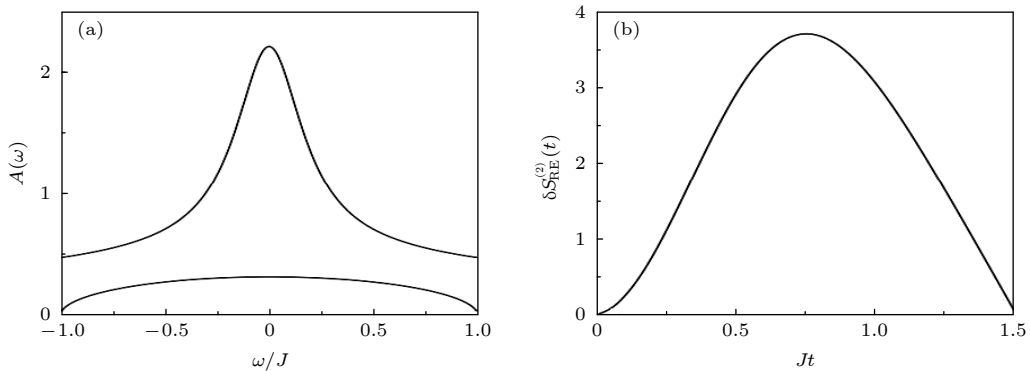


图 6 (a) 系统的谱和环境的谱; (b) “黑洞蒸发”的熵的变化图. 系统的温度 $\beta = 2$, 相互作用强度 $J = 2$; 环境的温度 $\beta_{\text{E}} = 20$, 相互作用强度 $J' = 2$. 该图引用自文献 [3]

Fig. 6. (a) Spectral functions of the environment and the system; (b) entropy dynamics after the quench interaction between the system and the environment. Here the temperature of the environment is lower than the system's initial temperature. The entropy dynamics shows a typical cooling case. Here it can be compared with “Black Hole Evaporation” and the entropy dynamics looks like a Page curve. Cited from Ref. [3].

似 Page 曲线的熵变规律并非是有引力对偶的模型的特有特征, 而很有可能是非常一般性的普适规律; 2) 初步理论测试的成功让我们可以更加细致地研究在不同时间点上量子力学侧发生的物理现象, 同时通过引力对偶的假说映射回引力体系来看在黑洞蒸发问题中的一些物理细节, 甚至包括在黑洞内部的物质状态的细节; 3) 微扰的更高阶效应所产生的物理效应也是非常值得关注的。

值得一提的是, 同时间 Dadras 和 Kitaev^[52]也创始了这种一般性的对熵的微扰线性响应方法, 并计算了一些高阶的微扰效应。后来苏凯翔等^[53]也计算了 SYK4 和 SYK2 之间的耦合造成的熵变。他们的计算利用了 SYK4 的可解性质和 replica 技术, 能给出长时间的熵变结果, 因此对于环境和系统的耦合强度没有限制。

5 总结与展望

本文综述了可以用于一般相互作用系统与一般环境在弱耦合情况下的线性响应理论, 这一理论包括了原来没有被计入的耗散造成响应动力学。文中给出了系统性的展开和用图形学方法来计算的技术。回顾了这种方法在用于非厄米线性响应动力学中与量子临界现象的研究, 以及利用线性响应的技术如何来计算熵的变化。为了展示计算效果, 在有引力对偶的模型中模拟“黑洞蒸发”的过程, 发现了类似 Page 曲线的熵变曲线。值得一提的是, 由于本文的方法可以绕过对密度矩阵在耗散动力学过程中的直接计算, 而仅仅和初态下的关联函数有关, 因此大大简化了耗散动力学的计算, 同时让我们有能力去计算一些强相互作用的开放系统的动力学。这些计算在过去都是比较困难的。同时还发现, 在本文微扰方法的高阶贡献中有超越原先主方程的贡献, 可能对于理解多体耗散动力学等有新的帮助。

参考文献

- [1] Mahan G D 1981 *Many Particle Physics* (New York and London: Plenum Press)
- [2] Pan L, Chen X, Chen Y, Zhai H 2020 *Nat. Phys.* **16** 767
- [3] Chen Y 2021 *JHEP* **04** 215
- [4] Feynman R P, Vernon Jr F L 1963 *Ann. Phys.* **24** 118
- [5] Caldeira A O, Leggett A J 1983 *Phys. A* **121** 587
- [6] Bouganne R, Aguilera M B, Ghermaoui A, Beugnon J, Gerbier F 2020 *Nat. Phys.* **16** 21
- [7] Syassen N, Bauer D M, Lettner M, Volz T, Dietze D, García-

- ripoll J J, Cirac J I, Rempe G, Dürr S 2008 *Science* **320** 1329
- [8] Barontini G, Labouvie R, Stubenrauch F, Vogler A, Guarrera V, Ott H 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 035302
- [9] Tomita T, Nakajima S, Danshita I, Takasu Y, Takahashi Y 2017 *Sci. Adv.* **99** e1701513
- [10] Sponselee K, Freystatzky L, Abeln B, Diem M, Hundt B, Kochanek A, Ponath T, Santral B, Mathey L, Sengstock K, and Becker C 2018 *Quantum Sci. Technol.* **4** 014002
- [11] Li J, Harter A K, Liu J, de Moel L, Joglekar Y N, Luo L 2019 *Nat. Commun.* **10** 855
- [12] Tomita T, Nakajima S, Takasu Y, Takahashi Y 2019 *Phys. Rev. A* **99** 031601
- [13] Cai Z, Barthel T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 150403
- [14] Poletti D, Barmettler P, Georges A, Kollath C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 195301
- [15] Sachdev S 1999 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [16] Bardeen J M, Carter B, Hawking S 1973 *Commun. Math. Phys.* **31** 161
- [17] Hawking S 1971 *Phys. Rev. Lett.* **26** 1344
- [18] Hawking S 1974 *Nature* **248** 30
- [19] Hawking S 1975 *Commun. Math. Phys.* **43** 199
- [20] Christodoulou D 1970 *Phys. Rev. Lett.* **25** 1596
- [21] Christodoulou D, Ruffini R 1971 *Phys. Rev. D* **4** 3552
- [22] Bekenstein J D 1972 *Lett. Nuovo Cimento* **4** 737
- [23] Bekenstein J D 1973 *Phys. Rev. D* **7** 2333
- [24] Hawking S 1976 *Phys. Rev. D* **14** 2460
- [25] Page D N 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 3743
- [26] Strominger A, Vafa C 1996 *Phys. Lett. B* **379** 99
- [27] Dabholkar A, Gomes J, Murthy S 2015 *JHEP* **03** 074
- [28] Gubser S S, Klebanov I R, Polyakov A M 1998 *Phys. Lett. B* **428** 105
- [29] Witten E 1998 *Adv. Theor. Math. Phys.* **2** 253
- [30] Maldacena J 1999 *Int. J. Theor. Phys.* **38** 1113
- [31] Kitaev A talk at KITP 2015 <http://online.kitp.ucsb.edu/online/entangled15/kitaev/> [2021-9-1]
- [32] Kitaev A talk at KITP 2015 <http://online.kitp.ucsb.edu/online/entangled15/kitaev2/> [2021-9-1]
- [33] Ye J, Sachdev S 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3339
- [34] Maldacena J, Stanford D 2016 *Phys. Rev. D* **94** 106002
- [35] Kitaev A, Suh S J 2018 *JHEP* **05** 183
- [36] Maldacena J, Stanford D, Yang Z 2016 *PTEP* **2016** 12C104
- [37] Jakiw R 1985 *Nucl. Phys. B* **252** 343
- [38] Teitelboim C 1983 *Phys. Lett. B* **126** 41
- [39] Gross D J, Rosenhaus V 2017 *JHEP* **05** 092
- [40] Gu Y, Lucas A, Qi X L 2017 *JHEP* **09** 120
- [41] Huang Y, Gu Y 2017 *Phys. Rev. D* **100** 041901
- [42] Liu C, Chen X, Balents L 2018 *Phys. Rev. B* **97** 245126
- [43] Zhang P 2019 *Phys. Rev. B* **100** 245104
- [44] Chen Y, Qi X L, Zhang P 2020 *JHEP* **06** 121
- [45] Zhang P, Liu C, Chen X 2020 *SciPost Phys.* **8** 094
- [46] Qi X L, Zhang P 2020 *JHEP* **05** 129
- [47] Halder A, Bera S, Banerjee S 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033505
- [48] Zhang P 2020 *JHEP* **06** 143
- [49] Penington G 2020 *JHEP* **09** 002
- [50] Almheiri A, Engelhardt N, Marolf D, Maxfield H 2019 *JHEP* **12** 063
- [51] Almheiri A, Mahajan R, Maldacena J, Zhao Y 2020 *JHEP* **03** 149
- [52] Dadras P, Kitaev A 2021 *JHEP* **03** 198
- [53] Su K, Zhang P, Zhai H 2021 *JHEP* **06** 156

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Dissipative linear response theory and its applications in open quantum systems^{*}

Chen Yu[†]

(*Graduate School, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100193, China*)

(Received 10 September 2021; revised manuscript received 1 November 2021)

Abstract

With the recent development of experimental technology, the ability to control the dissipation in quantum many-body system is greatly enhanced. Meanwhile, many new breakthroughs are achieved in detecting the quantum states and others. All these advances make it necessary to establish a new theory for calculating the dissipative dynamics in strongly correlated systems. Very recently, we found that by taking the interactions between the system and the bath as a perturbation, a systematic dissipative response theory can be established. In this new approach, the calculation of dissipative dynamics for any physical observables and the entropies can be converted into the calculation of certain correlation functions in initial states. Then we discuss how Markovian approximation at low temperature limit and at high temperature limit can be reached. Also, we review the progress of the dissipative dynamics in open Bose-Hubbard model. In the fourth section, we review recent progress of entropy dynamics of quench dynamics of an open quantum system. Finally, we draw a conclusion and discuss possible development in the future.

Keywords: dissipative linear response theory, Markovian approximation, open quantum systems, entropy

PACS: 03.65.Yz, 04.70.Dy, 05.70.Jk

DOI: 10.7498/aps.70.20211687

^{*} Project supported by the Key Program of the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. Z180013) and the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11734010).

[†] Corresponding author. E-mail: yuchen@gscaep.ac.cn



广义布里渊区与非厄米能带理论

胡渝民 宋飞 汪忠

Generalized Brillouin zone and non-Hermitian band theory

Hu Yu-Min Song Fei Wang Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230307 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211908

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211908>

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

专题: 非平衡量子多体系统

广义布里渊区与非厄米能带理论*

胡渝民 宋飞 汪忠†

(清华大学高等研究院, 北京 100084)

(2021 年 10 月 14 日收到; 2021 年 10 月 29 日收到修改稿)

能带理论是凝聚态物理的基石之一, 其应用范围已延伸至许多其他物理领域. 近年来, 众多非厄米物理问题要求将能带理论推广至非厄米体系. 人们在非厄米拓扑体系的研究中发现, 这一推广需要修改能带理论的若干基本概念. 非厄米趋肤效应 (non-Hermitian skin effect) 这一普遍的非厄米现象导致了布洛赫能带图像的失效以及常规体边对应关系的破坏. 在能谱计算与拓扑不变量定义中, 通常的布里渊区概念需要代之以广义布里渊区 (generalized Brillouin zone). 非厄米体系的一系列独特现象可以在广义布里渊区下得到精确刻画. 基于广义布里渊区的非厄米能带理论成功描述并预言了非厄米系统的大量新颖现象. 因其相对布洛赫图像的偏离, 这一理论被称为非布洛赫能带理论 (non-Bloch band theory). 本文梳理了广义布里渊区和非布洛赫能带理论的主要概念, 并简要介绍了该理论在非厄米体边对应原理、格林函数、波包动力学、手征衰减和非布洛赫宇称-时间对称性等方面的应用.

关键词: 广义布里渊区, 非厄米趋肤效应, 非布洛赫能带理论, 非厄米能带理论**PACS:** 03.65.Vf, 03.65.Yz, 05.40.Fb, 73.22.Gk**DOI:** 10.7498/aps.70.20211908

1 引言

在量子力学中, 厄米哈密顿量 ($H = H^\dagger$) 通常描述了封闭量子系统的幺正演化. 然而, 这是一种非常理想的情况. 实际上, 很多物理系统与环境之间的耦合不可忽略, 这些耦合使得物质和能量在系统与环境之间交换, 而这些交换过程无法被系统自身的厄米哈密顿量所准确描述. 为了描述系统与环境的耦合, 一种方法是将系统和环境放在一起视为一个封闭大系统, 并试图用整个封闭系统的厄米哈密顿量来刻画其演化. 这种方法实际运用起来通常十分困难. 封闭大系统的自由度时常远大于我们关心的物理系统; 与之相应, 其哈密顿量也非常复杂. 一个更为可行的做法是聚焦于所关心的物理系统自身的自由度, 将其作为一个开放体系 (open system). 相应地, 其时间演化不能由一个厄米的哈

密顿量来生成, 需要采用非厄米的哈密顿量 (或非幺正的时间演化算符). 对于经典波体系, 类似的方案也行之有效.

开放量子体系的一个简洁描述方式是 Lindblad 量子主方程^[1-3]:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i[H, \rho(t)] + \sum_{\mu} \left(2L_{\mu}\rho(t)L_{\mu}^{\dagger} - \{L_{\mu}^{\dagger}L_{\mu}, \rho(t)\} \right), \quad (1)$$

其中 ρ 代表系统的密度矩阵; H 表示系统幺正演化的哈密顿量; L_{μ} 是描述系统与环境之间耦合导致的量子跃迁 (quantum jump) 的 Lindblad 耗散算符, 其表明环境的影响将使得系统偏离自身的幺正演化. (1) 式可简记为 $\frac{d\rho(t)}{dt} = \mathcal{L}\rho(t)$, 其中 $\mathcal{L}$ 通常称为 Liouvillian 超算符.

Lindblad 量子主方程是一个描述密度矩阵 $\rho(t)$ 的演化的线性微分方程. 如果将密度矩阵

* 国家杰出青年科学基金 (批准号: 12125405) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangzhongemail@tsinghua.edu.cn

$\rho(t) = \sum_{ij} \rho(t)_{ij} |i\rangle \langle j|$ 视作一个态矢量 $|\tilde{\rho}(t)\rangle = \sum_{ij} \rho(t)_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$, 其演化由 Liouvillian 超算符 $\mathcal{L}$ 在 $\{|i\rangle \otimes |j\rangle\}$ 这组基下的矩阵形式所描述, 即 $\partial_t |\tilde{\rho}(t)\rangle = \tilde{\mathcal{L}} |\tilde{\rho}(t)\rangle$, 其中 $\tilde{\mathcal{L}}$ 为

$$\tilde{\mathcal{L}} = -iH \otimes I + iI \otimes H^T + \sum_{\mu} \left(2L_{\mu} \otimes L_{\mu}^* - L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \otimes I - I \otimes L_{\mu}^T L_{\mu}^* \right). \quad (2)$$

Liouvillian 超算符是一个非厄米算符, 可以视为对应于密度矩阵的有效非厄米哈密顿量, 它生成了密度矩阵的非么正演化.

如果定义有效哈密顿量 $H_{\text{eff}} = H - i \sum_{\mu} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}$, 方程 (1) 可表达为

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -i(H_{\text{eff}} \rho(t) - \rho(t) H_{\text{eff}}^{\dagger}) + \sum_{\mu} 2L_{\mu} \rho(t) L_{\mu}^{\dagger}, \quad (3)$$

式中的前两项代表了密度矩阵在非厄米有效哈密顿量 H_{eff} 作用下的非么正演化, 而最后一项代表了环境耦合带来的量子跃迁.

从一个初始波函数 $|\psi\rangle$ 出发, 在较短的时间内波函数将沿着非厄米有效哈密顿量 H_{eff} 进行演化: $\partial_t |\psi\rangle = -iH_{\text{eff}} |\psi\rangle$. 其有一定的概率在某一时刻 t 发生量子跃迁, 得到一个新的态: $|\psi(t)\rangle \rightarrow L_{\mu} |\psi(t)\rangle$. 随后这个态将继续在 H_{eff} 的作用下进行演化, 直到下一次量子跃迁发生. 这个过程定义了量子态 $|\psi\rangle$ 在非厄米有效哈密顿量和量子跃迁共同作用下的一条量子轨迹 (quantum trajectory)^[4]. 实验上, 可以使测量仪器对发生量子跃迁与否作出响应, 从而根据测量结果来筛选某条指定的量子轨迹, 这对应了实验测量中的后选择 (post selection). 由于密度矩阵可以视作许多纯态在经典概率下的叠加, 所以对所有可能的量子轨迹进行加权求和可得到密度矩阵在 Lindblad 量子主方程下的演化.

由此可见, 为了研究开放量子系统的性质, 需要研究非厄米算符 $\mathcal{L}$ 和 H_{eff} , H_{eff} 描述了后选择下波函数的时间演化, 而 $\mathcal{L}$ 描述了密度矩阵 (无须后选择) 的时间演化.

体系的开放性与耗散性在冷原子和量子光学等物理体系中非常普遍. 在凝聚态体系中, 由相互作用或者无序导致的有限准粒子寿命也会引入非厄米物理^[5–8]. 除此之外, 非厄米物理在光学或力学等经典波系统中也发挥着重要作用. 例如, 麦

斯韦方程可以写成和薛定谔方程类似的数学形式, 而在光子晶体系统中, 介质对光的吸收或者光向系统外界的辐射使得这一方程包含非厄米项. 适当调控光学系统的性质可使其呈现出丰富的非厄米物理现象, 如光子拓扑绝缘体中的拓扑激光^[9,10] 和光子能带中连接奇点 (exceptional point) 的体费米弧 (bulk Fermi arc)^[11].

由于非厄米物理广泛存在于各类物理系统中, 包括量子光学、冷原子、经典波、凝聚态体系等, 而且具有许多超出厄米系统范式的新颖物理性质, 所以非厄米物理近年来成为一个广受关注的方向^[12,13].

21 世纪, 凝聚态物理一个重要的研究方向是拓扑物态, 其中最简单且应用广泛的基础内容是拓扑能带理论. 在有平移对称性的厄米系统中, 布洛赫定理 (Bloch theorem) 扮演着至关重要的角色. 布洛赫波函数所蕴含的全局拓扑结构描述了能带的拓扑性质, 激发了人们对拓扑材料的研究和探索^[14–17]. 这些拓扑结构体现为拓扑不变量, 一般定义在布里渊区 (Brillouin zone, BZ) 上. 例如, 刻画量子霍尔效应的陈数 (Chern number) 定义为布洛赫波函数的 Berry 曲率在布里渊区上的积分. 拓扑能带理论基于拓扑不变量 and 对称性对不同维度的拓扑系统进行分类, 为拓扑材料的研究提供了一个理论框架^[16]. 其中, 拓扑物态的一条中心原理是“体边对应” (bulk-boundary correspondence), 该原理表明周期边界条件 (periodic boundary condition, PBC) 下的布洛赫波函数所蕴含的拓扑不变量与开放边界条件 (open boundary condition, OBC) 下受到拓扑保护的边界态数目之间有着——对应的关系. 拓扑保护的边界态具有新颖的物理性质. 与偶然出现的边界态不同, 拓扑边界态具有很强的稳定性, 不会被边界上的无序或杂质破坏. 除了科学意义本身, 拓扑态的独特物理性质也具有重要的应用前景.

拓扑能带理论的成功从实验和理论的角度激发了人们对拓扑物理的探索. 在这之后, 拓扑能带理论被广泛应用于物理学的其他领域. 例如, 光子晶体的能带结构中也蕴含着诸多拓扑性质, 这方面的研究构成了拓扑光子学方向^[18].

拓扑能带理论在过去十几年取得了巨大的成功. 然而, 这些理论仅适用于描述厄米系统. 前面提到, 非厄米物理现象在自然界普遍存在. 一个自然的问题是: 非厄米系统中的拓扑能带理论会有怎

样的形式?它是厄米拓扑能带理论的简单推广还是具有全新的特征?回答这些问题不仅是理解非厄米拓扑态的基础,也对研究其他非厄米物理现象有重要意义.

关键进展始于“非厄米趋肤效应”(non-Hermitian skin effect, NHSE)的发现^[19–25].不同于厄米系统,具有平移对称性的非厄米系统的一个重要性质是其周期边界条件和开放边界条件下的本征态可以非常不同.在厄米系统中,开放边界条件下的本征态是周期边界条件下的布洛赫波(即周期调制的平面波)的线性叠加;而在非厄米系统中,开放边界条件下的本征态通常以指数衰减的形式局域在系统的边界附近,这一现象被命名为“非厄米趋肤效应”^[19].这一效应意味着布洛赫波图像的失效,也使得非厄米系统的性质对边界条件十分敏感.

正是由于这种边界敏感性,在非厄米系统中,周期边界条件下的拓扑不变量(即定义在布里渊区上的拓扑不变量)不再能准确地描述开放边界条件下的边界态的性质.这意味着厄米系统的传统体边对应原理在非厄米系统中将会失效.为了描述非厄米系统的拓扑性质,需要发展能够容纳非厄米趋肤效应的非厄米能带理论(non-Hermitian band theory).鉴于布洛赫波图像的失效,这一能带理论一般称为“非布洛赫能带理论”(non-Bloch band theory)^[19,26].这一理论修改了传统能带理论的若干基本概念,如布里渊区被广义布里渊区(generalized Brillouin zone, GBZ)所取代.相应地,拓扑不变量的定义域也从布里渊区变为广义布里渊区.这些拓扑不变量被称为非布洛赫拓扑不变量(non-Bloch topological invariants),它们对边界态的性质给出准确的预言.非布洛赫拓扑不变量与拓扑边界态的精确对应关系被称为非布洛赫体边对应(non-Bloch bulk-boundary correspondence)^[19].

本文的目的是简介非厄米能带理论的基本概念及其应用.第2节首先介绍非厄米趋肤效应和广义布里渊区这两个基本概念;随后讨论广义布里渊区的基本性质.第3节将讨论非厄米能带理论的若干应用,包括非厄米体边对应、非厄米格林函数、波包动力学、手征衰减(chiral damping)、非布洛赫宇称-时间对称性(non-Bloch parity-time symmetry, or non-Bloch PT symmetry)等现象.第4节是一个简短总结.随着相关研究的不断深入,非厄米能带理论可能会在越来越多的物理系统

中得到应用,其基础理论也将进一步发展完善.由于篇幅所限,本文未能覆盖本方向的所有重要进展,感兴趣的读者可进一步阅读文中列出的参考文献.

2 广义布里渊区与 Non-Bloch 能带理论

2.1 非厄米趋肤效应

为了引入非厄米能带理论,首先回顾厄米系统的布洛赫能带理论.布洛赫定理表明,具有平移对称性的厄米系统在周期边界条件下的本征态是被布洛赫波函数调制的平面波 $\langle x|n, k\rangle = u_{n,k}(x)e^{ikx}$, 其中实数 k 是位于第一布里渊区的准动量, n 表示能带指标, $u_{n,k}(x) = u_{n,k}(x+a)$ 是周期性的布洛赫波函数.在这里, a 表示晶格常数.这些本征态所对应的本征值被记为 $E_n(k)$, 它们表征了系统的能带结构.

周期边界条件和开放边界条件下的哈密顿量相差一个连接两端边界的边界项 δH . 如果以周期边界条件下的本征态 $\{|n, k\rangle\}$ 作为基矢, 该边界项将使得不同的本征态 $\{|n, k\rangle\}$ 之间存在散射, 其散射矩阵元 $\langle k, n|\delta H|k', n'\rangle \sim |\delta H|/L$, 其中 $|\delta H|$ 表示边界项的大小而 L 表示系统的长度. 因为 $|\langle x|n, k\rangle|^2 \sim 1/L$ 且 δH 只会局域地影响边界附近的波函数, 所以散射矩阵元正比于 $1/L$.

在热力学极限 $L \rightarrow \infty$ 下, 上述边界项的散射矩阵元趋于零, 其对能谱的影响可以忽略. 因此, 在开放边界条件下, 厄米系统的连续能谱仍由 $E_n(k)$ 给出. 系统的本征态是上述调制平面波的线性叠加, 其在布洛赫波基矢下的展开系数则由边界条件的细节决定.

然而, 在一般的非厄米系统中, 上述性质会发生重大变化: 周期边界条件和开放边界条件下的系统不再具有相似的能谱和波函数. 这种现象在非厄米系统中普遍存在. 为了直观地说明这种变化, 下面考虑一个简单的例子——非厄米 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型, 其布洛赫哈密顿量为^[19,27]

$$H(k) = d_x \sigma_x + \left(d_y + i\frac{\gamma}{2}\right) \sigma_y, \quad (4)$$

其中 $d_x = t_1 + t_2 \cos k$, $d_y = t_2 \sin k$. 图 1(a) 给出了它的实空间哈密顿量. t_1 和 t_2 分别表示原胞内和原胞之间的跃迁, γ 代表非厄米项. 非厄米 SSH 模型有着新奇的拓扑性质, 相关内容将在第 3.1 节

讨论. 本节主要讨论非厄米 SSH 模型在不同边界条件下能谱和波函数的行为, 以引出 non-Bloch 能带理论.

非厄米 SSH 模型的手征对称性 $\sigma_z H(k) \sigma_z = -H(k)$ 使得其能谱以 $(E, -E)$ 的形式成对出现. 在周期边界条件下, 非厄米 SSH 模型 H_{PBC} 的能谱是上述布洛赫哈密顿量的本征值 $E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{d_x^2 + (d_y + i\gamma/2)^2}$, 其在复平面上形成闭合的圈 (如图 1(c)). 当 $t_1 = t_2 \pm \gamma/2$ ($t_1 = -t_2 \pm \gamma/2$) 时, 系统的能谱在 $k = \pi$ ($k = 0$) 关闭能隙.

然而, 在开放边界条件下, 非厄米 SSH 模型 H_{OBC} 的能谱与周期边界条件的情况有着显著的区别 (图 1(c)). 为了理解这种区别, 可以利用相似变换求出其在开放边界条件下的能谱 [19]. 假设波函数 $|\psi\rangle = (\psi_{1,A}, \psi_{1,B}, \psi_{2,A}, \psi_{2,B}, \dots, \psi_{L,A}, \psi_{L,B})^T$

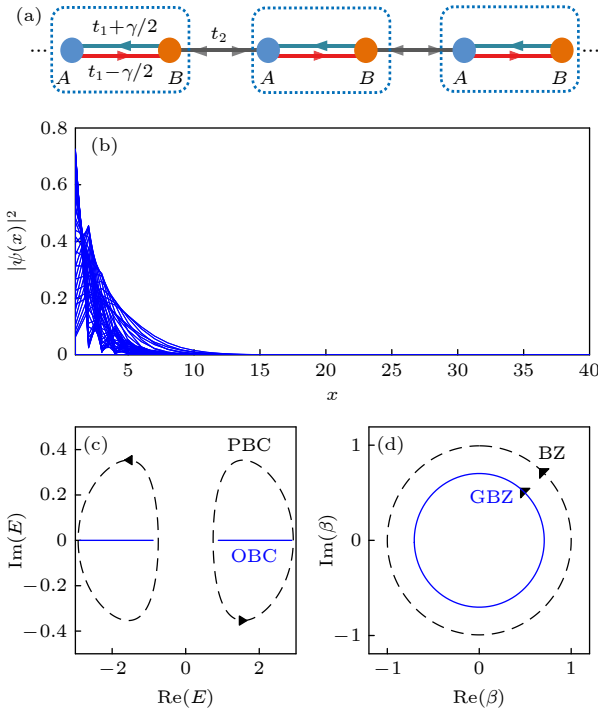


图 1 (a) 非厄米 SSH 模型示意图; (b) 开放边界条件下本征态的空间分布, 其中 $|\psi(x)|^2 = |\psi_A(x)|^2 + |\psi_B(x)|^2$, 链长 $L = 40$; (c) 非厄米 SSH 模型在周期边界条件 (黑色虚线) 和开放边界条件 (蓝色实线) 下的能谱; (d) 非厄米 SSH 模型的广义布里渊区 (蓝色实线), 虚线为布里渊区. 参数值: $t_1 = 2.5$, $t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$ [19]

Fig. 1. (a) Sketch of non-Hermitian SSH model; (b) eigenstate profiles under open boundary condition, $|\psi(x)|^2 = |\psi_A(x)|^2 + |\psi_B(x)|^2$ and $L = 40$; (c) energy spectrum under periodic boundary condition (black dashed lines) and open boundary condition (blue solid lines); (d) generalized Brillouin zone (blue solid line) and Brillouin zone (black dashed line). Parameters: $t_1 = 2.5$, $t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$ [19].

是哈密顿量的本征态, 满足定态薛定谔方程 $H_{\text{OBC}} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$. 开放边界条件下, 方程 $H_{\text{OBC}} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ 等价于 $\bar{H}_{\text{OBC}} |\bar{\psi}\rangle = E |\bar{\psi}\rangle$, 其中 $|\bar{\psi}\rangle = S^{-1} |\psi\rangle$ 且 $\bar{H}_{\text{OBC}} = S^{-1} H_{\text{OBC}} S$. 选取相似变换矩阵 S 为一个对角矩阵, 其对角元为 $\{1, r, r, r^2, r^2, \dots, r^{L-1}, r^{L-1}, r^L\}$, 其中 $r = \sqrt{[(t_1 - \gamma/2)/(t_1 + \gamma/2)]}$. 当 $|t_1| > |\gamma/2|$ 时, $\bar{H}_{\text{OBC}}$ 变成了标准的厄米 SSH 模型, 其跃迁项变为 $\bar{t}_1 = \sqrt{(t_1 - \gamma/2)(t_1 + \gamma/2)}$, $\bar{t}_2 = t_2$. 作为一个厄米的哈密顿量, 其体态能谱不再依赖于边界条件, 其 OBC 能谱可以通过 PBC 能谱给出, 而 PBC 能谱可以通过动量空间的哈密顿量得到:

$$\bar{H}(k) = (\bar{t}_1 + \bar{t}_2 \cos k) \sigma_x + \bar{t}_2 \sin k \sigma_y. \quad (5)$$

在 $|t_1| > |\gamma/2|$ 的条件下它的能谱是实数. 由于相似变换不改变能谱, $\bar{H}(k)$ 的本征值也给出了相似变换前非厄米 SSH 模型 H_{OBC} 在开放边界条件下的能谱. 此时, 能隙关闭的位置在 $\bar{t}_1 = \pm \bar{t}_2$, 即 $t_1 = \pm \sqrt{\bar{t}_2^2 + (\gamma/2)^2}$ [19]. 这与周期边界条件下非厄米 SSH 模型 H_{PBC} 能隙关闭的位置 $t_1 = \pm t_2 \pm \gamma/2$ 有着显著的区别. 第 3.1 节将要说明这种区别意味着基于布洛赫哈密顿量的传统体边对应将在非厄米系统中失效.

需要注意的是, 上述相似变换仅能将开放边界条件下的非厄米 SSH 模型 H_{OBC} 变成一个厄米模型, 这个方法并不适用于周期边界条件下的非厄米 SSH 模型 H_{PBC} . 考虑到 $H_{\text{PBC}} = H_{\text{OBC}} + \delta H$, 其中 $\delta H = t_2(|L, B\rangle \langle 1, A| + |1, A\rangle \langle L, B|)$ 表示周期边界条件下两个边界之间的跃迁, L 表示系统的长度, 上述相似变换使得 $S^{-1} H_{\text{PBC}} S = \bar{H}_{\text{OBC}} + S^{-1} \delta H S$. 此时, $S^{-1} \delta H S = t_2 r^{-L} |L, B\rangle \langle 1, A| + t_2 r^L |1, A\rangle \langle L, B|$ 是一个随着系统长度 L 增大而指数增大的修正. 周期边界条件下的非厄米 SSH 模型 H_{PBC} 在相似变换后与厄米 SSH 模型 $\bar{H}_{\text{OBC}}$ 相差一个指数大的非厄米边界项, 这与厄米系统中正比于 $1/L$ 的边界扰动有着显著区别, δH 不再能看成微扰. 这个指数大的边界项正是相似变换解法在周期边界条件下失效的原因, 也导致了 H_{PBC} 和 H_{OBC} 拥有截然不同的性质. 这表明非厄米系统对边界条件异常敏感.

这种对边界条件的敏感性体现在非厄米系统的开放边界条件下的波函数上. 开放边界条件下厄米哈密顿量 $\bar{H}_{\text{OBC}}$ 的体态波函数 $|\bar{\psi}_l\rangle$ 在空间中是延展的平面波. 因此, 非厄米 SSH 模型 H_{OBC} 的体态波函数 $|\psi_l\rangle = S |\bar{\psi}_l\rangle$ 将以指数衰减的形式局域在系

统的边界 (图 1(b)). 这意味着通常的平面波中的布洛赫相位因子 e^{ik} 变成了 $\beta \equiv re^{ik}$. 这等价于波矢 k 变为复数: $k \rightarrow k - i \ln r$. 这种体态波函数局域在系统边界的现象被称为“非厄米趋肤效应”^[19].

在传统的能带理论中, 实空间的布洛赫波图像对应的倒空间概念是布里渊区. 我们自然会问, 在非厄米趋肤效应下, 是否仍然存在倒空间 (reciprocal space) 的概念? 由此问题出发, 可以引入广义布里渊区的概念^[19]. 定义哈密顿量 $H(\beta) \equiv H(k \rightarrow -i \ln \beta)$, 或者 $H(\beta) \equiv H(k)|_{e^{ik} \rightarrow \beta}$. 通常的布里渊区就是单位圆 $|\beta| = 1$, 在单位圆上, $H(\beta)$ 给出了非厄米 SSH 模型在周期边界条件下的本征能量 (图 1(c)). 按照上面的分析, 如果将波矢 k 变为复数 $k \rightarrow k - i \ln r$, 即 $|\beta| = r$, 哈密顿量 $H(\beta)$ 将给出开放边界条件下的能谱 (图 1(c)). 实际上, $|\beta| = r$ 所确定的复平面上的圆定义了非厄米 SSH 模型的广义布里渊区 (图 1(d)), 它有别于传统的布里渊区 ($|\beta| = 1$), 在非厄米系统中扮演着厄米系统布里渊区的角色. 当 β 在广义布里渊区上移动时, $H(\beta)$ 的本征值和 $|\beta|^x$ 分别给出了实空间的能谱和具有非厄米趋肤效应的波函数^[19].

非厄米趋肤效应广泛存在于非厄米系统^[23–25,28–43]. 它体现了非厄米系统对边界条件的敏感性. 这种敏感性使得系统波函数在周期边界条件下和开放边界条件下呈现出截然不同的行为.

2.2 广义布里渊区

从非厄米 SSH 模型的例子可以看到, 非厄米系统在开放边界条件下可呈现出非厄米趋肤效应, 其能谱和波函数由广义布里渊区给出. 在非厄米系统中, 广义布里渊区扮演着厄米情况下布里渊区的角色, 它决定了非厄米系统中诸多独特的行为. 因此, 我们需要更加仔细地研究广义布里渊区的普遍定义与计算方法.

2.2.1 非厄米 SSH 模型的广义布里渊区

为了得到广义布里渊区, 需要考察边界条件的重要作用. 例如, 对于图 1(a) 所示的非厄米 SSH 模型, 可以通过边界条件解析地求出其开放边界条件下的能谱^[19]. 假设系统长度为 L , 在开放边界条件下, 这个模型的实空间薛定谔方程为

$$\begin{aligned} t_2 \psi_{x-1,B} + [t_1 + (\gamma/2)] \psi_{x,B} &= E \psi_{x,A}, \\ [t_1 - (\gamma/2)] \psi_{x,A} + t_2 \psi_{x+1,A} &= E \psi_{x,B}. \end{aligned} \quad (6)$$

假设其实空间波函数为 $|\psi\rangle = \sum_j |\phi^{(j)}\rangle$, 其中 j 为独立的波函数分量指标, $|\phi^{(j)}\rangle$ 为指数函数形式 (暂时省略 j 指标): $(\phi_{x,A}, \phi_{x,B}) = \beta^x (\phi_A, \phi_B)$, 他们满足:

$$\begin{aligned} [(t_1 + \gamma/2) + t_2 \beta^{-1}] \phi_B &= E \phi_A, \\ [(t_1 - \gamma/2) + t_2 \beta] \phi_A &= E \phi_B. \end{aligned} \quad (7)$$

由此可得非厄米 SSH 模型的特征方程:

$$E^2 = \left[\left(t_1 - \frac{\gamma}{2} \right) + t_2 \beta \right] \left[\left(t_1 + \frac{\gamma}{2} \right) + t_2 \beta^{-1} \right]. \quad (8)$$

这个方程有两个根

$$\beta_{1,2}(E) = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - 4t_2^2(t_1^2 - \gamma^2/4)}}{2t_2(t_1 + \gamma/2)},$$

其中 $B = t_1^2 + t_2^2 - \gamma^2/4 - E^2$. 这两个根满足 $\beta_1 \beta_2 = \frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2}$. 存在两个根意味着上述波函数指标 $j = 1, 2$, 其子格点上的波函数分量满足:

$$\begin{aligned} \phi_A^{(j)} &= \frac{E}{t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta_j} \phi_B^{(j)}, \\ \phi_B^{(j)} &= \frac{E}{t_1 + \gamma/2 + t_2 \beta_j^{-1}} \phi_A^{(j)}. \end{aligned} \quad (9)$$

(9) 式的两个方程在方程 (8) 的联系下是等价的. 特征方程的两个根表明系统中存在两个独立传播的指数形式波函数, 它们将以一定的形式线性叠加, 以满足相应的边界条件. 因此, 实空间波函数的一般形式可表达为

$$\begin{pmatrix} \psi_{x,A} \\ \psi_{x,B} \end{pmatrix} = \beta_1^x \begin{pmatrix} \phi_A^{(1)} \\ \phi_B^{(1)} \end{pmatrix} + \beta_2^x \begin{pmatrix} \phi_A^{(2)} \\ \phi_B^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

由于方程 (8) 和方程 (9), 上述波函数有两个独立的参量, 它们的取值将由边界条件给出. 系统的边界条件为

$$\begin{aligned} (t_1 + \frac{\gamma}{2}) \psi_{1,B} - E \psi_{1,A} &= 0, \\ (t_1 - \frac{\gamma}{2}) \psi_{L,A} - E \psi_{L,B} &= 0. \end{aligned} \quad (11)$$

代入波函数表达式以消除未知参数, 可发现系统存在非零解的条件为

$$\beta_1^{L+1}(t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta_2) = \beta_2^{L+1}(t_1 - \gamma/2 + t_2 \beta_1). \quad (12)$$

在热力学极限 ($L \rightarrow \infty$) 下, (12) 式的左右两边均指数依赖于 L . 因此 (12) 式成立的条件为 $|\beta_1| = |\beta_2|$. 如若不然, 设 $|\beta_1| > |\beta_2|$, 则当 L 很大时方程右侧的 β_2^{L+1} 项可以忽略, 方程退化为

$\beta_1^{L+1}(t_1 - \gamma/2 + t_2\beta_2) = 0$, 意味着 $t_1 - \gamma/2 + t_2\beta_2 = 0$ 或者 $\beta_1 = 0$, 无法给出数量正比于 L 的解来. 结合 $\beta_1\beta_2 = (t_1 - \gamma/2)/(t_1 + \gamma/2)$, 可以得到:

$$|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)| = r \equiv \sqrt{\left| \frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2} \right|}. \quad (13)$$

此即非厄米 SSH 模型的半径 r 的广义布里渊区 (图 1(d)), 与相似变换所得的结果一致. 满足这个方程的能量 E 将构成该模型在开放边界条件下的能谱 (图 1(c)).

上述求解广义布里渊区的方程可以通过以下图像直观理解: 由于系统存在两个独立传播的指数形式的波函数 β_1^x, β_2^x , 其线性叠加 $\psi(x) \sim C_1\beta_1^x + C_2\beta_2^x$ 需要满足系统在左右两端的边界条件. 如图 2 所示, 开放边界条件 $\psi(x < 1) = 0 = \psi(x > L)$ 要求两个指数形式的波函数在边界附近相互抵消, 形成驻波. 因此, 在 $x = 1$ 附近 $C_1\beta_1$ 和 $C_2\beta_2$ 处于同一数量级, 而在 $x = L$ 附近 $C_1\beta_1^L$ 和 $C_2\beta_2^L$ 也处于同一数量级. 由此可得, 边界条件的约束使得 $|\beta_1| = |\beta_2|$, 从而能够叠加出实空间的态波函数.

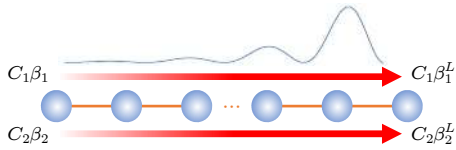


图 2 非厄米体系在开放边界条件下形成以指数衰减的方式局域在边界的“驻波”, 此驻波由 β_1 波和 β_2 波叠加而成
Fig. 2. An eigenstate wavefunction under open boundary condition, which is a superposition of the β_1 wave and β_2 wave.

然而, 目前所讨论的非厄米 SSH 模型的圆形广义布里渊区并不是普遍的情况. 一般的非厄米模型的特征方程存在不止一对 β 根, 所以此时边界条件的应用将会复杂一些. 对于这些一般情况, 是否能得到普遍的广义布里渊区方程?

例如, 图 3(a) 表示具有远程跃迁项 t_3 的非厄米 SSH 模型, 其布洛赫哈密顿量为^[19]

$$H(k) = d_x\sigma_x + \left(d_y + i\frac{\gamma}{2}\right)\sigma_y, \quad (14)$$

其中 $d_x = t_1 + (t_2 + t_3)\cos k$, $d_y = (t_2 - t_3)\sin k$. 这个模型在开放边界条件下仍具有非厄米趋肤效应 (图 3(b)), 但是该模型的特征方程有 4 个根, 此时无法判断是哪些根应该满足上述 $|\beta|$ 模相等的条件, 这个模型也无法相似变换为一个厄米模型. 而且可以发现, 其广义布里渊区不再是一个圆 (图 3(d)).

为了描述一般的非厄米系统, 需要更加普遍地定义广义布里渊区.

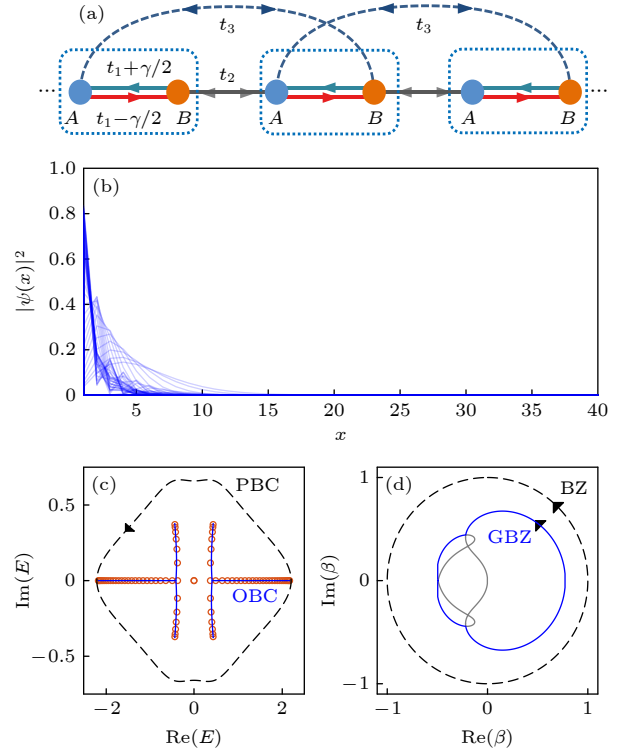


图 3 (a) 具有远程跃迁项 t_3 的非厄米 SSH 模型示意图; (b) 开放边界条件下本征态的空间分布, 其中 $|\psi(x)|^2 = |\psi_A(x)|^2 + |\psi_B(x)|^2$, $L = 40$; (c) 周期边界条件 (黑色虚线) 和开放边界条件 (蓝色实线, 通过广义布里渊区计算) 下的能谱, 橙色圆点代表直接对角化实空间哈密顿量所得的 $L = 40$ 系统在开放边界条件下的能谱; (d) 广义布里渊区 (蓝色实线) 和辅助广义布里渊区 (灰色实线), 参数取值: $t_1 = 1.1$, $t_2 = 1$, $t_3 = 0.2$, $\gamma = 4/3$ ^[19]

Fig. 3. (a) Sketch of non-Hermitian SSH model with t_3 being the third nearest neighbor hopping term; (b) eigenstate profiles under open boundary condition with $|\psi(x)|^2 = |\psi_A(x)|^2 + |\psi_B(x)|^2$ and $L = 40$; (c) energy spectrum under periodic boundary condition (black dashed lines) and open boundary condition (blue solid lines, calculated from the generalized Brillouin zone). Orange points are eigenenergies from directly diagonalizing the real-space Hamiltonian of an open chain with $L = 40$; (d) generalized Brillouin zone (blue solid line) and auxiliary generalized Brillouin zone (gray solid line). Parameters: $t_1 = 1.1$, $t_2 = 1$, $t_3 = 0.2$, $\gamma = 4/3$ ^[19].

2.2.2 一般模型的广义布里渊区

本节将讨论一般模型的广义布里渊区的定义. 为了简便, 首先讨论一维单带非厄米模型的广义布里渊区, 随后再推广到多带模型. 考虑一般的一维单带模型, 其布洛赫哈密顿量记为 $h(k) = \sum_{n=-m}^m t_n e^{ikn}$, m 表示格点模型的最大跃迁范围;

$2m+1$ 个不同格点之间的跃迁振幅 $t_{-m}, \dots, t_m$ 均在复数域上取值; 实数 $k \in [-\pi, \pi]$. 将单位圆上的相位因子 e^{ik} 替换为一般复数 β , $e^{ik} \rightarrow \beta$, 可定义一个洛朗多项式:

$$h(\beta) = \sum_{n=-m}^m t_n \beta^n. \quad (15)$$

该多项式对应的实空间哈密顿量为

$$H = \sum_x \sum_{n=-m}^m t_n \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_{x+n}, \quad (16)$$

在格点模型里, 空间坐标 x 的取值为整数, $\hat{a}_x$ 表示该处的粒子湮灭算符.

假设在远离边界的区域, 实空间波函数具有如下形式: $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle = C\beta^x$, 其中 C 是与格点坐标 x 无关的常数. 给定复数能量 E , 实空间薛定谔方程 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 将给出如下限制:

$$f(\beta, E) \equiv h(\beta) - E = 0. \quad (17)$$

(17) 式被称为系统的特征方程. 其表明对于能量为 E 的模式, 只有满足 $\psi(x) \sim \beta_n(E)^x$ 这种形式的空间波函数才能在系统中存在, 其中 $\beta_n(E)$ 是方程 (17) 的 $2m$ 个根之一. 按照根的模长可将它们排序为 $|\beta_1(E)| \leq |\beta_2(E)| \leq \dots \leq |\beta_{2m}(E)|$.

如果考虑边界条件, 系统的本征能量不仅要满足特征方程 (17), 其所对应的本征波函数还需要满足系统的边界条件. 例如, 周期边界条件要求 $\psi(x) = \psi(x+L)$, 其中 L 为周期系统的长度. 这种边界条件要求特征方程至少存在一个根 $\beta_n(E)$ 使得 $\beta_n^L = 1$. 在热力学极限下, 这个条件变为 $|\beta_n(E)| = 1$, 亦即特征方程存在一个根 $\beta_n(E) = e^{ik}$, k 为实数. 因此, 周期边界条件下的能谱为 $E(k) = h(e^{ik})$.

然而, 开放边界条件则要求 $\psi(x < 1) = 0 = \psi(x > L)$. 这种边界条件要求 $2m$ 个指数形式的波函数的线性组合 $\psi(x) = \sum_{n=1}^{2m} C_n \beta_n^x$ 需要在系统的左右两端相互抵消, 从而形成“驻波”. 类似图 2 的分析可以发现, 为了满足系统左右两端的开放边界条件, 要求对于某一个指数变化的 $C_i \beta_i^x$, 存在一个与之对应的 $C_j \beta_j^x$, 使得它们在 $x=1, L$ 附近有相同的数量级. 这个条件要求存在一对特征方程的根 $\beta_{i,j}$, 它们满足 [19]:

$$|\beta_i(E)| = |\beta_j(E)|, \quad (18)$$

即这两个根的模长必须相等. 只有满足这个方程的能量 E 才有可能在开放边界条件下形成驻波. 在这个方程中, $i, j \in \{1, 2, \dots, 2m\}$. 那么, 是不是所有满足这个方程的能量都是系统在开放边界条件下的本征值呢? 更加仔细地研究边界条件可以发现 (见第 2.3 节), 如下方程将描述开放边界条件下的能谱和波函数 [19,26]:

$$|\beta_m(E)| = |\beta_{m+1}(E)|. \quad (19)$$

方程 (19) 说明特征方程 (17) 的中间两个根所对应的波函数构成了开放边界条件下的“驻波”. 满足方程 (19) 的能量 E 定义了开放边界条件下非厄米系统的能谱 E_{OBC} . 此时, 当 $E \in \{E_{\text{OBC}}\}$ 时, 系统的波函数具有如下形式: $|\psi(x)| \sim |\beta_m(E)|^x$. 当 $|\beta_m(E)| \neq 1$ 时, 波函数以指数衰减的形式局域在边界, 呈现非厄米趋肤效应.

与此同时, 当 $E \in \{E_{\text{OBC}}\}$ 时, 它的两个根 $\beta_m(E)$, $\beta_{m+1}(E)$ 在复平面上形成一个有别于单位圆的围绕原点的圈 (图 1(d) 和图 3(d)). 这个由所有满足条件的 $\beta_m(E)$, $\beta_{m+1}(E)$ 所构成的集合被称为广义布里渊区 [19,26]. 当 β 在广义布里渊区上移动时, 由特征方程给出的 $E(\beta)$ 代表了热力学极限下开放边界条件下的连续能谱. 因此, 方程 (19) 被称为广义布里渊区方程.

基于广义布里渊区发展的非厄米能带理论被称为 non-Bloch 能带理论. 在厄米系统中, $|\beta_m(E)| = |\beta_{m+1}(E)| = 1$, 广义布里渊区始终是单位圆, 即传统的布里渊区 $\beta = e^{ik}$ (k 为实数). 此时, 非厄米能带理论回到了厄米情形时的布洛赫能带理论. 广义布里渊区之于非厄米系统, 发挥着类似于布里渊区之于厄米系统的作用. 值得补充说明的是, 广义布里渊区的应用范围并不限于最常见的开放边界条件, 对于其他类型的边界条件, 如畴壁 (domain wall) 边界条件同样适用 [44].

2.3 广义布里渊区方程的推导

本节将通过全面考察边界条件来严格推导广义布里渊区方程 (19), 并提供一种广义布里渊区的简便计算方法. 跳过本节并不影响读者理解后续物理内容.

考虑方程 (15) 所描述的一维单带非厄米模型, 在开放边界条件下, 假设能量为 E 的本征态波函数为 $\psi(x) = \sum_{n=1}^{2m} C_n \beta_n^x$, 其中 β_n 是特征方程

$h(\beta) - E = 0$ 的根而 C_n 是依赖于边界条件的 $2m$ 个待定系数. 当 $1 \ll x \ll L$ 时, 容易验证这个波函数满足薛定谔方程:

$$\sum_{l=-m}^m t_l \psi(x+l) = E\psi(x). \quad (20)$$

而在边界附近, 薛定谔方程不再是 (20) 式的形式. 系统的左右边界各包含 m 个边界方程. 这 $2m$ 个方程将被用来确定开放边界条件下本征态 $\psi(x)$ 的具体形式. 在左边界 $x=1$ 附近的 m 个方程具有如下形式:

$$\sum_{l=1-j}^m t_l \psi(j+l) = E\psi(j), \quad (21)$$

其中 $j=1, 2, \dots, m$. 这个条件等价于 $\psi(-m) = \psi(-m+1) = \dots = \psi(-1) = 0$. 同理在右边界 $x=L$ 附近的 m 个方程有如下形式:

$$\sum_{l=-m}^{m-j} t_l \psi(L-m+j+l) = E\psi(L-m+j), \quad (22)$$

其中 $j=1, 2, \dots, m$. 这个条件等价于 $\psi(L+m) = \psi(L+m-1) = \dots = \psi(L+1) = 0$. 将 $\psi(x) = \sum_{n=1}^{2m} C_n \beta_n^x$ 代入 (21) 式和 (22) 式所述的 $2m$ 个边界方程, 可以得到 $2m$ 个关于待定系数 C_n 的方程, 它们具有如下结构:

$$\sum_{l=1}^{2m} g_{j,l} C_l = 0, \quad \sum_{l=1}^{2m} g_{j+m,l} \beta_l^L C_l = 0, \quad (23)$$

其中 $j=1, 2, \dots, m$. (23) 式中 $g_{j,l}$ 和 $g_{j+m,l}$ 是 $2m \times 2m$ 个由系统参数 $t_{-m}, \dots, t_m$ 和本征能量 E 所确定的与系统长度 L 无关的系数. 这 $2m$ 个线性方程具有非零解的条件为其系数矩阵的行列式等于零, 即 [26]

$$\begin{vmatrix} g_{1,1} & g_{1,2} & \cdots & g_{1,2m} \\ g_{2,1} & g_{2,2} & \cdots & g_{2,2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{m,1} & g_{m,2} & \cdots & g_{m,2m} \\ g_{m+1,1}\beta_1^L & g_{m+1,2}\beta_2^L & \cdots & g_{m+1,2m}\beta_{2m}^L \\ g_{m+2,1}\beta_1^L & g_{m+2,2}\beta_2^L & \cdots & g_{m+2,2m}\beta_{2m}^L \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{2m,1}\beta_1^L & g_{2m,2}\beta_2^L & \cdots & g_{2m,2m}\beta_{2m}^L \end{vmatrix} = 0. \quad (24)$$

因为 $|\beta_1| \leq \dots \leq |\beta_{2m}|$, 所以在热力学极限 ($L \rightarrow \infty$) 下, (24) 式左边 (记为 LHS) 的主导项为

$$\text{LHS} = A_1 \beta_{2m}^L \beta_{2m-1}^L \cdots \beta_{m+2}^L \beta_{m+1}^L + A_2 \beta_{2m}^L \beta_{2m-1}^L \cdots \beta_{m+2}^L \beta_m^L + \cdots, \quad (25)$$

其中 A_1, A_2 是和 L 无关的常数. 在热力学极限下, $0 = \text{LHS} = \beta_{2m}^L \beta_{2m-1}^L \cdots \beta_{m+2}^L (A_1 \beta_{m+1}^L + A_2 \beta_m^L) + \cdots$, 即 $A_1 \beta_{m+1}^L + A_2 \beta_m^L = 0$. 由此可得 $(\beta_m / \beta_{m+1})^L = -A_1 / A_2$. 如果 $|\beta_m / \beta_{m+1}| \neq 1$, 这个等式左边随着 L 增长而指数增长或衰减, 而右边不依赖于 L . 因此在热力学极限下这个方程成立的条件是 $|\beta_m / \beta_{m+1}| = 1$, 即 [19,26]

$$|\beta_m(E)| = |\beta_{m+1}(E)|. \quad (26)$$

此即方程 (19) 给出的广义布里渊区方程.

上述理论可以直接推广到多带模型. 考虑到多带模型的布洛赫哈密顿量 $H(k)$ 是一个 $q \times q$ 的矩阵 (如方程 (4)), 其中 q 为能带的个数, 同样假设不同原胞之间最远的跃迁距离为 m , 此时的特征方程可定义为

$$f(\beta, E) = \det(H(\beta) - E\mathbb{I}) = 0. \quad (27)$$

式中 $H(\beta) \equiv H(k \rightarrow -i \ln \beta)$, 而 $\mathbb{I}$ 是 $q \times q$ 单位阵. 一般情况下, 上述特征方程有 $2mq$ 个根, 将其按照 $|\beta_1| \leq \dots \leq |\beta_{2mq}|$ 的顺序排列. 在多带模型中, 开放边界条件的左边界和右边界各有 mq 个边界方程. 类似的方法可以给出多带的广义布里渊区方程:

$$|\beta_{mq}(E)| = |\beta_{mq+1}(E)|. \quad (28)$$

同样地, 中间两个根的模长相等给出了广义布里渊区.

将上述非厄米能带理论用于图 1(a) 的非厄米 SSH 模型可直接计算其广义布里渊区. 延拓方程 (4) 的哈密顿量至复平面, $H(\beta) \equiv H(k \rightarrow -i \ln \beta)$, 非厄米 SSH 模型的特征方程 $\det(H(\beta) - E\mathbb{I}) = 0$ 如方程 (8) 所示. 根据韦达定理, 这个方程的两个根满足 $\beta_1 \beta_2 = \frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2}$. 于是, 根据广义布里渊区的定义可得 $|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)| = r \equiv \sqrt{\frac{t_1 - \gamma/2}{t_1 + \gamma/2}}$, 即方程 (13). 这说明非厄米 SSH 模型的广义布里渊区是复平面上半径为 r 的圆 (图 1(d)), 与相似变换的分析和解析求解的结果一致.

对于一般的非厄米模型, 广义布里渊区不再是一个圆. 例如, 考虑图 3(a) 所示具有远程跃迁项 t_3

的非厄米 SSH 模型, 将方程 (14) 的布洛赫哈密顿量 $H(k)$ 延拓为 $H(\beta) \equiv H(k \rightarrow -i \ln \beta)$, 可得其特征方程为

$$E^2 = \left[\frac{t_3}{\beta} + \left(t_1 - \frac{\gamma}{2} \right) + t_2 \beta \right] \left[t_3 \beta + \left(t_1 + \frac{\gamma}{2} \right) + \frac{t_2}{\beta} \right]. \quad (29)$$

将 (29) 式的右边记为 $g(\beta)$, 它是一个关于 β 的多项式. 特征方程 $E^2 = g(\beta)$ 有 4 个根 $|\beta_1(E)| \leq |\beta_2(E)| \leq |\beta_3(E)| \leq |\beta_4(E)|$. 考虑到方程 (19) 要求存在模相等的两个根, 假设这两个根为 β 和 $\beta e^{i\theta}$, 其中 $\theta \in [0, 2\pi]$. 这两个根对应相同的能量, 由此可得:

$$E^2 = g(\beta), \quad E^2 = g(\beta e^{i\theta}). \quad (30)$$

消除能量 E^2 可得关于 β 的多项式方程 [26]:

$$g(\beta) = g(\beta e^{i\theta}). \quad (31)$$

对于给定的 $\theta \in [0, 2\pi]$, 可以求出 $\beta(\theta)$, 然后根据方程 (30) 得出相应的 E , 考察 β 和 $\beta e^{i\theta}$ 是否为特征方程的中间两根 $\beta_2(E)$ 和 $\beta_3(E)$ (对于一般模型, 是 $\beta_m(E)$ 和 $\beta_{m+1}(E)$). 若是, 则 β 和 $\beta e^{i\theta}$ 属于广义布里渊区. 改变 θ , 这些解的集合构成了该模型的广义布里渊区 (图 3(d) 中蓝色实线). 注意到此时的广义布里渊区不再是圆. 这表明在开放边界条件下, 具有远程跃迁项的非厄米 SSH 模型无法通过相似变换变为一个厄米模型. 通过广义布里渊区可以求得系统在开放边界条件下的能谱 (图 3(c) 中蓝色实线), 其结果与在一条有限长的链上直接对角化实空间哈密顿量所得的能谱一致 (图 3(c) 中橙色圆点). 注意到系统在开放边界条件下存在零能的拓扑边界态, 其能量并非由广义布里渊区给出. 这说明广义布里渊区只提供体态的连续能谱, 与厄米系统中布里渊区的角色一致.

更一般的多带非厄米模型的特征方程 $f(\beta, E) = \det(H(\beta) - E\mathbb{I}) = 0$ 是一个关于 E 和 β 的多项式方程, 可表达为

$$f(\beta, E) = c_M \beta^{-mq} \prod_{n=1}^{2mq} (\beta - \beta_n(E)) = \prod_{i=1}^q (E_i(\beta) - E) = 0,$$

其中 q 为能带个数而 m 为原胞间最远的跃迁距离. 这个方程不一定能化简成类似于方程 (30) 那样的 $p_1(E) = p_2(\beta)$ 形式, 其中 p_1, p_2 表示任意的多项式. 因此, 无法简单地消去能量 E 得到关于 β 的方程 $p_2(\beta) = p_2(\beta e^{i\theta})$.

为了计算这类普遍模型的广义布里渊区, 可以利用结式 (resultant) 将上述方法推广为一种被

称为辅助广义布里渊区 (auxiliary generalized Brillouin zone) 的方法 [45].

广义布里渊区方程要求特征方程的某两个根的模长相等, 于是这两个根具有如下关系: $\tilde{\beta} = \beta e^{i\theta}$, 其中 $\theta \in [0, 2\pi]$. 此时 β 和 $\beta e^{i\theta}$ 均为特征方程的根:

$$f(\beta, E) = f(\beta e^{i\theta}, E) = 0. \quad (32)$$

给定一个 θ , 将有两个关于 E 和 β 的多项式方程, 利用结式的定义可以直接消除能量 E , 得到一个关于 β 和 $e^{i\theta}$ 的代数方程 $R(\beta, e^{i\theta}) = 0$ [45]. 对任意 $\theta \in [0, 2\pi]$, 这个方程给出的根同时满足 $f(\beta, E) = f(\beta e^{i\theta}, E) = 0$, 因此它们是方程 (18) 的解. 这些解所构成的 β 集合被称为辅助广义布里渊区 [45]. 从这些根中选出满足条件 $|\beta_{mq}(E)| = |\beta_{mq+1}(E)|$ 的根即可得到广义布里渊区, 进而得到开放边界条件下的能谱和波函数.

图 3(d) 中的灰色实线即为具有远程 t_3 跃迁项的非厄米 SSH 模型的辅助广义布里渊区 $|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)|$; $|\beta_3(E)| = |\beta_4(E)|$ 对应的辅助广义布里渊区则超出了本图的展示范围.

借助广义布里渊区和辅助广义布里渊区的概念, 可以理解一类被称为临界非厄米趋肤效应 (critical non-Hermitian skin effect) 的现象 [46–48]. 考虑如下双带非厄米模型:

$$H(\beta) = \begin{pmatrix} h_a(\beta) & \delta \\ \delta & h_b(\beta) \end{pmatrix}, \quad (33)$$

假设所有参数都是实数, 其中 $h_\alpha(\beta) = (t_\alpha - \gamma_\alpha)\beta^{-1} + V_\alpha + (t_\alpha + \gamma_\alpha)\beta$, 且 $\alpha = a, b$ 表示两个单带非厄米 Hatano-Nelson 模型 [49,50]. 这两个单带模型之间的耦合由参数 δ 控制.

当两个单带模型之间没有耦合 ($\delta = 0$) 时, 这个系统的特征方程 $(E - h_a(\beta))(E - h_b(\beta)) = 0$ 可分解为两个独立的方程: $E - h_a(\beta) = 0$ 和 $E - h_b(\beta) = 0$. 它们分别对应两个单带模型的特征方程, 其广义布里渊区是两个圆. 这两个圆的半径分别为 $|\beta_\alpha| = \sqrt{\left| \frac{t_\alpha - \gamma_\alpha}{t_\alpha + \gamma_\alpha} \right|}$, 其中 $\alpha = a, b$. 由此可求得其在开放边界条件下的能谱是纯实的.

然而, 当两个单带模型间存在耦合 ($\delta \neq 0$) 时, 两条链自身不同的趋肤模 (假设 $|\beta_a| \neq |\beta_b|$) 将被耦合在一起, 使得系统的广义布里渊区偏离两个独立的圆. 此时的特征方程 $(E - h_a(\beta))(E - h_b(\beta)) = \delta^2$ 不再能分解为两个独立的单带特征方程. 这个方

程有 4 个根 $|\beta_1(E)| \leq \dots \leq |\beta_4(E)|$. 考察边界条件可以发现此时的广义布里渊区方程为 $|\beta_2(E)| = |\beta_3(E)|$. 这个模型的广义布里渊区将分布在上述两个圆形广义布里渊区之间的区域^[46]. 在热力学极限下, 这个广义布里渊区给出的能谱是复数的.

值得注意的是, 两条链之间的微小耦合使得广义布里渊区方程发生了很大改变. 这意味着在热力学极限下, 即使是无穷小的耦合强度 ($\delta \rightarrow 0$) 也会使得系统的能谱与 $\delta = 0$ 的情况不再相同, 能谱从 $\delta = 0$ 变为非零时将发生不连续的突变. 这一现象被称为临界非厄米趋肤效应. 值得指出, 辅助广义布里渊区在引入微小的 δ 时相对于 $\delta = 0$ 并不发生突变, 广义布里渊区的突变来自于模长排序: 只有中间两个根入选广义布里渊区.

在有限大的开放边界条件下的系统中, 该模型的能谱将强烈依赖于系统的长度 L . 固定耦合强度 δ , 在 L 较小时, 系统的能谱是纯实的. 这意味着此时不同链的趋肤模之间的耦合较小. 当 L 超过某个临界值 L_c 时, 系统的能谱将随着 L 的增大逐渐从纯实数能谱过渡到热力学极限下广义布里渊区给出的复数能谱. 其复数能谱中拥有最大虚部的本征值对应的波函数在空间中的分布随着 L 的变化会呈现出标度不变的性质^[46,47].

2.4 环绕数和非厄米趋肤效应

图 1 和图 3 两个模型均具有非对称的跃迁项, 其原胞内向左跃迁的振幅 $t_1 + \gamma/2$ 比向右跃迁的振幅 $t_1 - \gamma/2$ 大. 直观看来, 这一非对称性导致了其在开放边界条件下的波函数呈现出局域在系统左侧边界的非厄米趋肤效应. 这是否说明具有非厄米趋肤效应的波函数在空间中局域的方向取决于非对称跃迁项中较大的那个方向呢? 事实证明, 上述粗略的图像是不准确的.

现考虑一个如图 4(a) 所示的具有非对称次近邻跃迁的一维单带非厄米模型, 其哈密顿量为^[51,52]

$$h(\beta) = (t_2 + \gamma/2)\beta^{-2} + t_1\beta^{-1} + i\kappa + t_1\beta + (t_2 - \gamma/2)\beta^2. \quad (34)$$

这个模型在周期边界条件和开放边界条件下的能谱有着显著的不同 (图 4(c)). 这意味着该模型在开放边界条件下具有非厄米趋肤效应 (图 4(b)). 这个模型的特征方程 $h(\beta) - E = 0$ 是一个关于 β 的 4 次方程. 可以仿照 2.3 节的方法求解其广义布里

渊区. 对于不同的 $\theta \in [0, 2\pi]$, 求解 $h(\beta) = h(\beta e^{i\theta})$ 可得一系列 β_θ 和 $E(\beta_\theta)$. 它们满足方程 (18): $|\beta_i(E)| = |\beta_{i+1}(E)|$, 其中 $i = 1, 2, 3$. 从中选出满足方程 (19) 的根即可得广义布里渊区. 图 4(d) 中的蓝色和红色实线分别表示位于单位圆内侧和外侧的广义布

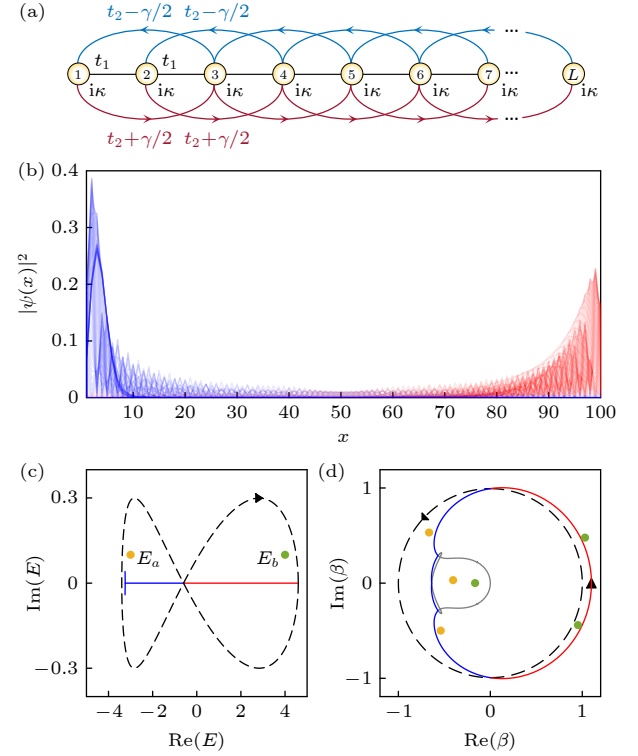


图 4 (a) 具有非对称次近邻跃迁的非厄米模型示意图; (b) 开放边界条件下系统本征态的空间分布, 其中链长 $L = 100$, 蓝色表示波函数局域在左边, 红色表示波函数局域在右边; (c) 周期边界条件 (虚线) 和开放边界条件 (实线) 下的能谱, $E_a = -3 + 0.1i$ (黄点) 和 $E_b = 4 + 0.1i$ (绿点) 为两个能量参照点; (d) 广义布里渊区 (红蓝实线), 辅助广义布里渊区 $|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)|$ (灰色实线), 和布里渊区 (黑色虚线). 辅助广义布里渊区 $|\beta_3(E)| = |\beta_4(E)|$ 对应的辅助广义布里渊区在图示区域以外, 黄点和绿点分别为 $E_a = h(\beta)$ 和 $E_b = h(\beta)$ 的前 3 个零点 $\beta_{1,2,3}$. 参数取值: $t_1 = 2$, $t_2 = 0.3$, $\gamma = 0.3$, $\kappa = 0$ ^[51,52]

Fig. 4. (a) Sketch of a single-band non-Hermitian model with asymmetric next-nearest-neighbor hoppings; (b) eigenstate profiles under open boundary condition when $L = 100$. Blue/red eigenstates are localized at the left/right side; (c) energy spectrum under periodic boundary condition (black dashed lines) and open boundary condition (red and blue solid lines), $E_a = -3 + 0.1i$ (yellow point) and $E_b = 4 + 0.1i$ (green point) are two reference points; (d) generalized Brillouin zone (red and blue solid line), auxiliary generalized Brillouin zone $|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)|$ (gray solid line), and Brillouin zone (black dashed line). Auxiliary generalized Brillouin zone $|\beta_3(E)| = |\beta_4(E)|$ is out of the plot. Yellow and green points are the zeros of $h(\beta) - E_a$ and $h(\beta) - E_b$, respectively. Parameters: $t_1 = 2$, $t_2 = 0.3$, $\gamma = 0.3$, $\kappa = 0$ ^[51,52].

里渊区 $|\beta_2(E)| = |\beta_3(E)|$, 可由其求得开放边界条件下的能谱 (图 4(c) 中的红色和蓝色实线). 图 4(d) 中的灰色实线为辅助广义布里渊区 $|\beta_1(E)| = |\beta_2(E)|$. 辅助广义布里渊区 $|\beta_3(E)| = |\beta_4(E)|$ 超出了本图的展示范围.

有趣的是, 这个模型在开放边界条件下的一部分本征态局域在系统的左侧边界, 而另一部分本征态局域在系统的右侧边界. 在这个系统中, 非厄米趋肤效应局域的方向可以和非对称跃迁项所暗示的方向相反. 这种现象被称为双极非厄米趋肤效应 (bipolar non-Hermitian skin effect)^[53], 已经在声学实验中观察到^[43]. 在一定条件下, 这类系统存在频率依赖的单向放大, 即不同频率的信号将分别向左或向右放大 (见第 3.2 节)^[51].

为了进一步理解非厄米趋肤效应发生的条件, 需要更加仔细地考察系统的性质. 可以注意到, 具有非厄米趋肤效应的系统在周期边界条件下的能谱在复平面上形成闭合的环状结构, 而其在开放边界条件下的能谱将形成未闭合的弧状结构 (图 1(c), 图 3(c), 图 4(c)). 从图 4(c) 可以看出, 开放边界条件下的能谱被周期边界条件下的能谱所环绕, 且环绕的方向和开放边界条件下能谱对应的波函数局域的方向相关. 为了刻画这种关联性, 引入能谱围绕一个参考能量 E_0 的环绕数 (winding number)^[52,54–57]:

$$w_C(E_0) \equiv \frac{1}{2\pi} \oint_C \frac{d}{d\beta} \arg[h(\beta) - E_0] d\beta, \quad (35)$$

其中 $\arg$ 表示复数的幅角且 C 为积分围道. 考虑到 $h(\beta) - E_0$ 是关于 β 的洛朗多项式, (35) 式等价于

$$w_C(E_0) = N_{\text{zeros}} - N_{\text{poles}}, \quad (36)$$

其中 $N_{\text{zeros}} (N_{\text{poles}})$ 是积分围道 C 内 $h(\beta) - E_0$ 的零点 (极点) 数.

将积分围道 C 选为传统的布里渊区, $w_{\text{BZ}}(E_0)$ 表示周期边界条件下的能谱环绕 E_0 的次数. 这个环绕数所定义了点能隙拓扑 (point-gap topology) 是非厄米系统独有的现象. 在厄米系统中, 不论何种边界条件, 系统的能谱都是实轴上的若干条线段. 此时对于任何不在能谱上的参考点 E_0 , 其能谱的环绕数均为零. 但是, 非厄米系统在周期边界条件下的能谱形成环状结构, 环内的参照点对应的环绕数 $w_{\text{BZ}}(E_0) \neq 0$.

如图 4(c) 所示, 在由方程 (34) 所描述的单带

非厄米模型中, 能量参考点 E_a 和 E_b 对应的周期边界条件下的能谱的环绕数分别为 $w_{\text{BZ}}(E_a) = +1$ 和 $w_{\text{BZ}}(E_b) = -1$. 而这个模型的特征多项式 $h(\beta) - E$ 在原点处是一个二阶极点, 即 $N_{\text{poles}} = 2$. 因此, 非零的环绕数表明参考点 E_a / E_b 在布里渊区内有 $3/1$ 个零点, 如图 4(d) 中黄点/绿点所示.

然而, 在开放边界条件下, 非厄米系统的能谱通常形成线状或弧状结构, 或者说, 其包围的“内部区域”面积为零. 因此, 如果将积分围道 C 选为广义布里渊区, 任何参考能量 $E_0 \notin \{E_{\text{OBC}}\}$ 均不被开放边界条件下的能谱所环绕^[52,54], 即

$$w_{\text{GBZ}}(E_0) = 0. \quad (37)$$

这说明在广义布里渊区内 $N_{\text{zeros}} = N_{\text{poles}}$. 这个关系可以通过一种极限情况来理解. 假设一般的洛朗多项式 $h(\beta) - E_0$ 可分解为

$$h(\beta) - E_0 = t_m \beta^{-m} \prod_{n=1}^{2m} (\beta - \beta_n(E_0)),$$

其中 $|\beta_1(E_0)| \leq \dots \leq |\beta_{2m}(E_0)|$ 为 $h(\beta) - E_0$ 的零点. 这个多项式在原点处是一个 m 阶的极点, 即 $N_{\text{poles}} = m$. 根据数学形式 $h(\beta) = \sum_{n=-m}^m t_n \beta^n$, 当 $|E_0| \rightarrow \infty$ 时, $h(\beta) - E_0 = 0$ 在 $|\beta| \rightarrow 0$ 和 $|\beta| \rightarrow \infty$ 附近各有 m 个零点. 在这种情况下, 广义布里渊区包围了在 $|\beta| \rightarrow 0$ 附近的 m 个零点 $\beta_1(E_0), \dots, \beta_m(E_0)$, 即 $N_{\text{zeros}} = N_{\text{poles}}$, 可得 $w_{\text{GBZ}}(E_0) = 0$. 将 E_0 从无穷远处连续地拉回, 只要能量 E_0 不穿过开放边界条件下的能谱, $\beta_m(E_0)$ 和 $\beta_{m+1}(E_0)$ 总不会到达广义布里渊区, 作为拓扑不变量的环绕数 $w_{\text{GBZ}}(E_0)$ 在整个过程中始终保持不变.

因为开放边界条件下的能谱通常形成没有内部区域的线状或弧状形态, 所以当 $E_0 \notin \{E_{\text{OBC}}\}$ 时, 总能找到一条连续的路径将 E_0 在不经过开放边界条件下的能谱的情况下移动到无穷远处. 因此, 广义布里渊区内总是包含着 $\beta_1(E_0), \dots, \beta_m(E_0)$ 这 m 个零点, 即 $N_{\text{zeros}} = m$. 由此可得到方程 (37).

即使某些特殊的模型在开放边界条件下的能谱表面上看似包围了非零面积, 上述定理依然严格成立. 当参考点 E_0 在从内部移动到无穷远处的过程中穿过开放边界条件下的能谱时, $\beta_m(E_0)$ 和 $\beta_{m+1}(E_0)$ 的次序将发生交换, 它们将分别移出或移入广义布里渊区. 因此, 广义布里渊区内始终包含着 $\beta_1(E_0), \dots, \beta_m(E_0)$ 这 m 个零点, 即 $w_{\text{GBZ}}(E_0) = 0$. 这一事实被表述为一个严格的定理, 其完整证

明请参阅文献 [52].

方程 (34) 所描述的模型中, 图 4(c) 中能量参考点 E_a 和 E_b 对应的开放边界条件下的能谱的环绕数均为零. 参考点 E_a/E_b 在广义布里渊区内有 2 个零点, 如图 4(d) 中黄点/绿点所示.

能谱的环绕数表明: 当参考能量 E_0 处在周期边界条件下的环状能谱内部时, $w_{\text{GBZ}}(E_0) = 0$ 但 $w_{\text{BZ}}(E_0) \neq 0$. 这说明布里渊区和广义布里渊区不再重合. 广义布里渊区上的点不再是单位模长, 其对应的开放边界条件下实空间本征态波函数将局域在系统的边界, 呈现非厄米趋肤效应. 如果选取开放边界条件下的一个本征能量作为参考点 E_0 , $w_{\text{BZ}}(E_0)$ 的正负号将决定 E_0 所对应的本征态局域在体系的左侧边界或右侧边界 (图 4). 因此, 周期边界条件下的能谱的非零环绕数符号和开放边界条件下的非厄米趋肤效应有着一一对应的关系 [52,54]. 进一步研究发现, 周期能谱非零环绕数的具体数值也对应于量子化的物理响应 [58].

这种周期边界条件下的能谱环绕数和开放边界条件下的非厄米趋肤效应的对应关系在一定程度上可以推广到高维体系. 考虑一个高维非厄米系统, 如果它在周期边界条件下的能谱在复平面上占据了一个面积非零的区域, 那么在某些边界条件下会出现非厄米趋肤效应 [59]. 需要指出的是, 高维的非厄米趋肤效应尚有许多问题有待理解.

3 非厄米能带理论的应用

广义布里渊区概念与 non-Bloch 能带理论为一大类非厄米物理问题提供了出发点, 激发了丰富的研究进展. 本节将讨论非厄米能带理论在体边对应、格林函数、波包动力学、手征衰减和非布洛赫 PT 对称性等方面的应用.

3.1 非厄米拓扑系统的体边对应

Non-Bloch 能带理论最初提出是为了回答非厄米系统的体边对应问题. 在厄米系统中, 周期边界条件下的布洛赫哈密顿量所蕴含的拓扑不变量与开放边界条件下拓扑保护的边界态之间存在着对应关系 [14–17]. 但是, 在非厄米系统中, 布洛赫哈密顿量的能谱及其所对应的调制平面波形式的波函数与开放边界条件下的能谱及波函数有着显著

的区别. 这意味着非厄米布洛赫哈密顿量的拓扑性质无法预言开放边界条件下边界态的行为. 实际上, 基于布洛赫能带理论的拓扑不变量在发生改变时, 一般并不对应开放边界条件下边界态数目的变化 [19].

因为布洛赫哈密顿量无法描述开放边界条件下的非厄米趋肤效应, 所以布洛赫拓扑不变量无法准确预测开放边界条件下非厄米系统的拓扑性质. 能够刻画非厄米趋肤效应的 non-Bloch 能带理论可以解决这个问题. 此时, 拓扑不变量不再定义在传统的布里渊区上, 而是定义在广义布里渊区上. 这种拓扑不变量刻画了广义布里渊区上的哈密顿量所蕴含的拓扑性质, 因此被称为非布洛赫拓扑不变量 (non-Bloch topological invariants). 它能够准确地预言开放边界条件下边界态的行为, 忠实地体现了非厄米系统的体边对应. 因此, 体边对应原理在非厄米体系中依然成立, 但其含义有重要变化; 非厄米体边对应关系一般称为 non-Bloch 体边对应.

为了阐述基于广义布里渊区的非布洛赫拓扑不变量, 现考虑图 1(a) 所示的非厄米 SSH 模型 (方程 (4)). 图 3(a) 所示具有远程跃迁项的非厄米 SSH 模型 (方程 (14)) 的拓扑性质拥有类似的结论. 前面已经提到, 非厄米 SSH 模型在周期边界条件和开放边界条件下的能谱有着显著的区别. 在改变系统参数时, 开放边界条件下边界态出现的位置 ($t_1 = \pm\sqrt{t_2^2 + (\gamma/2)^2}$) 并不对应周期边界条件下能隙关闭的位置 ($t_1 = \pm t_2 \pm \gamma/2$), 而是对应开放边界条件下能隙关闭的位置, 如图 5(a) 所示. 因此, 为了刻画非厄米系统的体边对应, 需要采用 non-Bloch 能带理论.

按照前面的做法, 将布洛赫哈密顿量延拓到 β 复平面上, 非厄米 SSH 模型的哈密顿量可以写作:

$$H(\beta) = \left(t_1 - \frac{\gamma}{2} + \beta t_2\right) \sigma_- + \left(t_1 + \frac{\gamma}{2} + \beta^{-1} t_2\right) \sigma_+, \quad (38)$$

其中 $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$, $\beta = re^{i\tilde{k}}$. 在这里, $r = \sqrt{|(t_1 - \gamma/2)/(t_1 + \gamma/2)|}$ 是广义布里渊区的半径而 $\tilde{k} \in [0, 2\pi]$ 是实参数. 当 β 沿着广义布里渊区变化时, 上述 $H(\beta)$ 的本征值给出了开放边界条件下非厄米系统的连续谱, 其能隙闭合的相变点对应 $t_1 = \pm\sqrt{t_2^2 + (\gamma/2)^2}$.

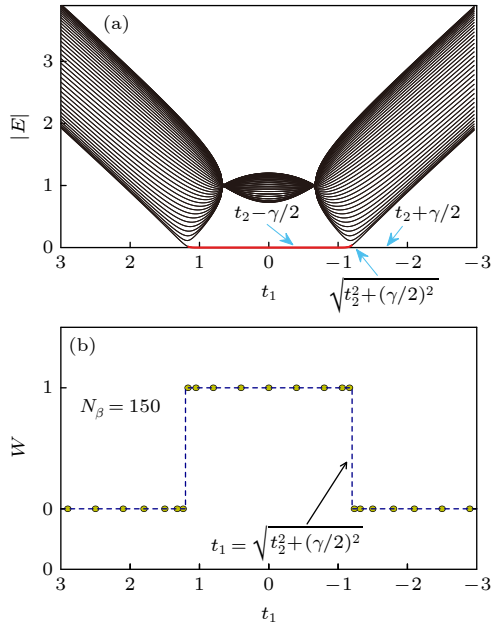


图 5 (a) 非厄米 SSH 模型在开放边界条件下的能谱模长 $|E|$ 随着参数 t_1 的变化, 红色实线表示拓扑零模边界态, 链长 $L = 40$; (b) Non-Bloch 拓扑不变量随着 t_1 的变化, 参数取值: $t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$ [19]

Fig. 5. (a) Absolute values of open-boundary eigenenergies $|E|$ for the non-Hermitian SSH model. Red solid line represents the topological edge zero modes. The chain length $L = 40$. (b) Non-Bloch topological invariant calculated from Eq.(42). Parameters: $t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$ [19].

$H(\beta)$ 的本征值和本征态如下:

$$\begin{aligned} H(\beta) |u_R\rangle &= E(\beta) |u_R\rangle, \\ H^\dagger(\beta) |u_L\rangle &= E^*(\beta) |u_L\rangle, \end{aligned} \quad (39)$$

其中 $|u_{R,L}\rangle$ 分别表示 $H(\beta)$ 的右矢和左矢. 非厄米 SSH 模型的手征对称性使得 $|\tilde{u}_{R,L}\rangle = \sigma_z |u_{R,L}\rangle$ 是能量为 $-E(\beta)$ 的右矢和左矢. 他们满足如下归一关系: $\langle u_L | u_R \rangle = \langle u_L | \tilde{u}_R \rangle = 1$, $\langle u_L | \tilde{u}_L \rangle = \langle \tilde{u}_L | u_R \rangle = 0$. 由此可以定义 Q 矩阵:

$$Q(\beta) = |\tilde{u}_R(\beta)\rangle \langle \tilde{u}_L(\beta)| - |u_R(\beta)\rangle \langle u_L(\beta)|. \quad (40)$$

手征对称性 $\sigma_z Q \sigma_z = -Q$ 使得它有如下反对角形式:

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & q \\ q^{-1} & 0 \end{pmatrix}. \quad (41)$$

此时, non-Bloch 环绕数可定义为沿着广义布里渊区的积分 [19]:

$$W = \frac{i}{2\pi} \int_{\text{GBZ}} q^{-1} dq. \quad (42)$$

如图 5(b) 所示, 这个基于广义布里渊区的 non-Bloch 拓扑不变量刻画了开放边界条件下非厄米 SSH 模型的边界零模态的数目, 准确描述了非厄米系统的

体边对应.

非厄米拓扑系统的体边对应已经在多个实验平台上实现, 其中包括量子光学系统 [24,28]、拓朴电路 [23]、光学网格系统 [25]、拓朴超材料 [29] 等. 这些实验结果清楚地观测到非厄米趋肤效应, 并显示了基于广义布里渊区的 non-Bloch 能带理论准确地描述了非厄米系统的体边对应.

Non-Bloch 体边对应关系的应用范围并不限于上述最简单的开放边界条件, 它也可以应用于其他类型的边界条件, 如非厄米畴壁系统 [44]. 非厄米趋肤效应和 non-Bloch 体边对应在高维系统中也发挥着重要作用. 在二维非厄米陈绝缘体中可以定义 non-Bloch 陈数, 它准确预言了非厄米陈绝缘体的手征边界态的数目 [20]. 值得指出, 这里的 non-Bloch 陈数是在连续极限下计算的, 二维或更高维度的 non-Bloch 拓朴不变量的高效、普适的计算方法还有待发展. 高维非厄米系统还存在着更丰富的非厄米趋肤效应, 如高阶非厄米趋肤效应, 以及其他丰富的非厄米拓朴相 [13,60–68].

3.2 非厄米格林函数

非厄米系统中另一类重要的物理量是非厄米格林函数. 格林函数在物理学的很多领域都扮演着十分重要的角色, 它描述了系统对于外界小扰动的线性响应. 因此, 研究非厄米格林函数可以帮助理解非厄米系统的响应和动力学性质.

考虑图 4(a) 所示的具有非对称次近邻跃迁的一维单带非厄米系统, 其频率空间中的格林函数定义为

$$G(\omega) = (\omega - H)^{-1}, \quad (43)$$

其中 H 为实空间哈密顿量. 数值计算表明, 开放边界条件下的格林函数 $G_{L1}(\omega)$ 和 $G_{1L}(\omega)$ 对于系统长度 L 的依赖关系呈现出如图 6 所示的指数变化的行为 [51]:

$$G_{L1}(\omega) \sim (\alpha_{\rightarrow})^L, \quad G_{1L}(\omega) \sim (\alpha_{\leftarrow})^L. \quad (44)$$

特别地, 当 $\alpha_{\rightarrow} > 1$ ($\alpha_{\leftarrow} > 1$) 时系统对边界上输入信号的响应会呈现出向右 (左) 放大的特征.

根据 non-Bloch 能带理论, 开放边界条件下实空间的非厄米格林函数可以通过广义布里渊区上的围道积分来计算 [51]:

$$G_{ij}(\omega) = \int_{\text{GBZ}} \frac{d\beta}{2\pi i} \frac{\beta^{i-j}}{\omega - h(\beta)}. \quad (45)$$

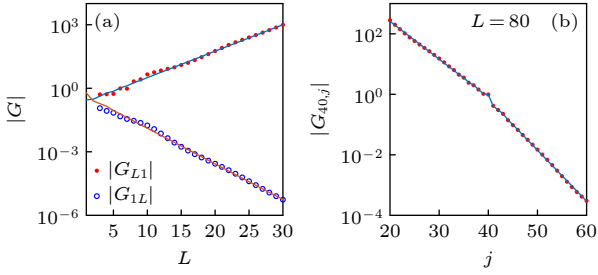


图 6 (a) 方程 (34) 所描述的非厄米模型在开放边界条件下的非厄米格林函数 $|G_{L1}|$ 和 $|G_{1L}|$, 实线是利用广义布里渊区计算的理论值; (b) $L=80$ 时的 $|G_{40,j}|$, 蓝线表示根据广义布里渊区公式计算的理论值. 参数取值: $t_1 = t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$, $\kappa = -0.8$, $\omega = -1.7$ [51]

Fig. 6. (a) Non-Hermitian Green's functions $|G_{L1}|$ and $|G_{1L}|$ for the non-Hermitian model in Eq. (34) under open boundary condition. Solid lines are calculated from the generalized Brillouin zone. (b) $|G_{40,j}|$ for $L=80$. The blue lines are the results from the generalized-Brillouin-zone-based formula. Parameters: $t_1 = t_2 = 1$, $\gamma = 4/3$, $\kappa = -0.8$, $\omega = -1.7$ [51].

不失一般性, 首先考虑 $i > j$ 的情况. 因为广义布里渊区是复平面上绕原点的一个闭合回路, 所以留数定理表明 (45) 式等于广义布里渊区内所有极点的留数之和. 为了计算广义布里渊区内的留数,

需要考虑 $\omega - h(\beta) = 0$ 在广义布里渊区内的零点, 如图 7(a) 和图 7(e) 所示. 第 2.4 节证明广义布里渊区包含 m 个零点 $\beta_1(\omega), \dots, \beta_m(\omega)$. 因此, 当 $i \gg j$ 时, 上述格林函数的渐进行为如下:

$$G_{ij}(\omega) \sim \beta_m(\omega)^{i-j}, \quad i \gg j. \quad (46)$$

同理可得, 当 $i \ll j$ 时, 格林函数的渐进行为如下:

$$G_{ij}(\omega) \sim \beta_{m+1}(\omega)^{-|j-i|}, \quad i \ll j. \quad (47)$$

如图 7 所示, 数值计算所得的指数 $\alpha_{\rightarrow}, \alpha_{\leftarrow}$ 和代数方程 $\omega - h(\beta) = 0$ 的中间两个零点 $\beta_m(\omega), \beta_{m+1}(\omega)$ 符合得很好, 即

$$\alpha_{\rightarrow} = |\beta_m(\omega)|,$$

$$\alpha_{\leftarrow} = |\beta_{m+1}(\omega)|^{-1}. \quad (48)$$

当系统存在单向放大 ($\alpha_{\rightarrow} > 1$ 或 $\alpha_{\leftarrow} > 1$) 时, $\beta_m(\omega)$ 或 $\beta_{m+1}(\omega)$ 位于广义布里渊区和布里渊区之间的区域, 如图 7(a) 和图 7(e) 所示. 值得一提的是, 在目前这个模型里单向放大具有频率依赖性, 即某些频率区间系统会向右放大 (图 7(a)—图 7(d)), 而另一些频率区间里系统会向左放大 (图 7(e)—图 7(h)). 这一性质有望应用于将滤波器件与放大器件合二为一.

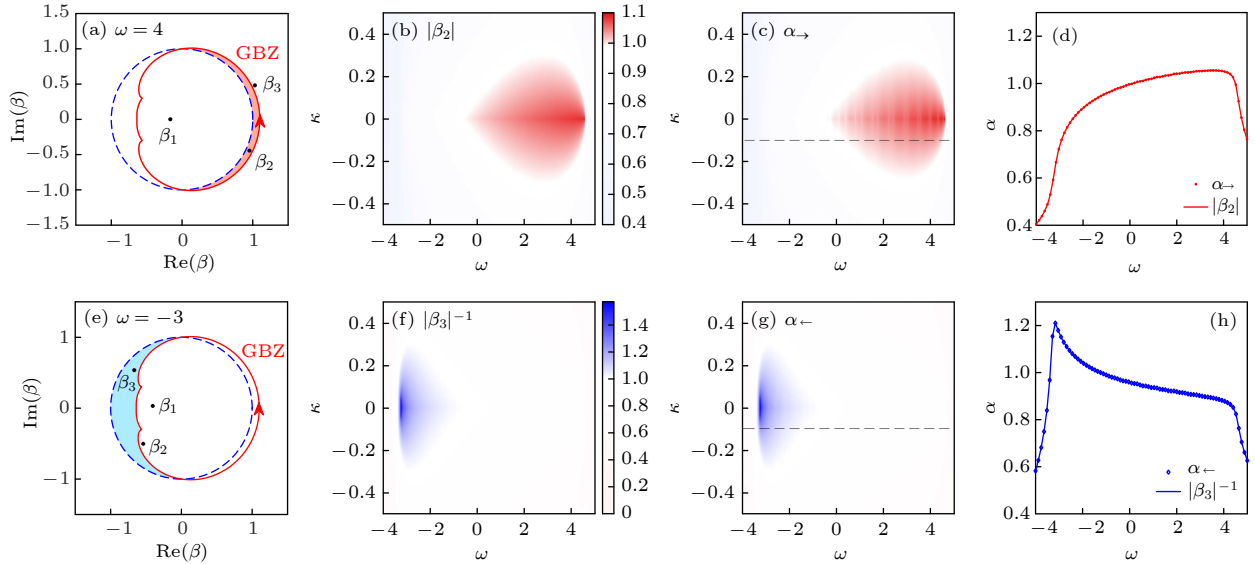


图 7 (a) 布里渊区 (蓝色虚线) 和广义布里渊区 (红色实线). $\beta_{1,2,3}$ 是方程 $h(\beta) = \omega$ 在 $\kappa = -0.1$, $\omega = 4$ 时的根 (β_4 在展示范围之外). β_2 位于广义布里渊区和布里渊区之间. (b) $|\beta_2|$ 随着 ω, κ 的变化. (c) $\alpha_{\rightarrow}$ 随着 ω, κ 的变化. (d) $|\beta_2|$ 和 $\alpha_{\rightarrow}$ 沿着图 (c) 中虚线 $\kappa = -0.1$ 的变化. (e) 和图 (a) 的区别是 $\omega = -3$, 此时 β_3 位于广义布里渊区和布里渊区之间. (f) $|\beta_3|^{-1}$. (g) $\alpha_{\leftarrow}$. (h) $|\beta_3|^{-1}$ 和 $\alpha_{\leftarrow}$ 沿着图 (g) 中虚线 $\kappa = -0.1$ 的变化. 参数取值: $t_1 = 2$, $t_2 = 0.3$, $\gamma = 0.3$ [51]

Fig. 7. (a) Brillouin zone (blue dashed line) and generalized Brillouin zone (red solid line). $\beta_{1,2,3}$ are the roots of $h(\beta) = \omega$ with $\kappa = -0.1$, $\omega = 4$ (β_4 is out of this plot). β_2 lies between the Brillouin zone and generalized Brillouin zone. (b) $|\beta_2|$ as a function of ω, κ . (c) Numerical $\alpha_{\rightarrow}$ as a function of ω, κ . (d) $|\beta_2|$ and $\alpha_{\rightarrow}$ along the dashed cut $\kappa = -0.1$ in panel (c). (e) The same as panel (a) except that $\omega = -3$. β_3 lies between the Brillouin zone and generalized Brillouin zone. (f) $|\beta_3|^{-1}$. (g) $\alpha_{\leftarrow}$. (h) $|\beta_3|^{-1}$ and $\alpha_{\leftarrow}$ along the dashed cut $\kappa = -0.1$ in panel (g). Parameters: $t_1 = 2$, $t_2 = 0.3$, $\gamma = 0.3$ [51].

上述结果对一维多带非厄米模型依然成立. 此时 $\beta_m(\omega)$ 和 $\beta_{m+1}(\omega)$ 应为代数方程 $\det(\omega\mathbb{I} - h(\beta)) = 0$ 的中间两个零点^[51].

近期, 非厄米格林函数和广义布里渊区也在其他相关问题中得到应用, 如在量子化物理响应中^[58].

3.3 非厄米波包动力学

Non-Bloch 能带理论不仅可用于计算开放边界条件下频率空间的格林函数, 还可用于研究非厄米系统在时域上的动力学性质.

考虑一个波包在一维非厄米系统的内部 (远离边界) 进行演化. Longhi^[69] 研究发现, 系统内部波包演化动力学在长时间极限下的 Lyapunov 指数能够由广义布里渊区来刻画. 有趣的是, 波包动力学所给出的 Lyapunov 指数与边界条件无关. 不论是周期边界条件还是开放边界条件, Lyapunov 指数都与广义布里渊区上的鞍点有关. 这一现象为实验探测非厄米趋肤效应提供了新的思路.

选取系统的初态为在 x_0 处的 δ 函数 $\psi(x, t=0) = \langle x|x_0 \rangle = \delta_{x,x_0}$. 这个波包将在非厄米哈密顿量 H 的作用下进行演化, t 时刻的波函数为 $\psi(x, t) = \langle x|e^{-iHt}|x_0 \rangle$. 在周期边界条件下, 该式可以用布洛赫波函数展开:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x_0)-ih(k)t} \\ &= \int_{\text{BZ}} \frac{d\beta}{2\pi i} \beta^{x-x_0} e^{-ih(\beta)t},\end{aligned}\quad (49)$$

其中 $h(k)$ 是 H 对应的布洛赫哈密顿量而 $h(\beta) \equiv h(k \rightarrow -i \ln \beta)$ 是其向 β 复平面的延拓. 通过 (49) 式可以看出, 被积函数仅在 $\beta = 0$ 处有一个本性极点. 这说明积分围道可以在不经过原点的情况下从布里渊区移动到别的围道, 如这个非厄米哈密顿量所对应的广义布里渊区. 因此, 在布里渊区或广义布里渊区上积分会给出同样的 $\psi(x, t)$, 即周期边界条件和开放边界条件下的波包动力学有着相同的行为. 这要求演化时间 t 远小于波包到达系统边界的时间, 否则波包的行为将受到边界的影响而产生差异. 可以证明, 热力学极限下的时域格林函数 $G(x, x', t) = \langle x|e^{-iHt}|x' \rangle$ 在 t 较小时与系统的边界条件无关^[70].

然而, 即使在热力学极限下波包动力学与边界条件无关, $\psi(x, t)$ 中依然蕴含着广义布里渊区的信息. 沿着漂移速度 v 所确定的坐标 $x = x_0 + vt$ 可定

义波包演化的 Lyapunov 指数

$$\lambda_v = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\ln |\psi(x_0 + vt, t)|}{t}.$$

Lyapunov 指数的极大值为周期边界条件下能谱的最大虚部: $\max(\lambda_v) = \text{Im}(E_m)$, 其中取得极大值时的漂移速度 $v_m = [dE(k)/dk]_{E_m}$. 如果系统在开放边界条件下具有非厄米趋肤效应, 可以证明 $v = 0$ 一定不是 Lyapunov 指数的极大值点, 即 $\lambda_0 < \max(\lambda_v)$ ^[69]. 这说明非厄米趋肤效应会显著影响系统内部的波包动力学.

广义布里渊区可以给出体内波函数演化的更定量的信息. 利用鞍点近似可以得到出发位置波函数 $\psi(x_0, t)$ 在长时间极限下的行为:

$$\psi(x_0, t) = \int_{\text{BZ}} \frac{d\beta}{2\pi i} \beta^{x-x_0} e^{-ih(\beta)t} \sim e^{-iE(\beta_s)t}, \quad (50)$$

其中 $E(\beta_s)$ 为某一个鞍点处的能量, 即 $\left. \frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta_s} = 0$. (50) 式表明, 在长时间极限下 $v = 0$ 的 Lyapunov 指数 $\lambda_0 = \text{Im}[E(\beta_s)]$ 是某一个鞍点能量的虚部.

可以证明, 开放边界条件下的能谱曲线的末端总是鞍点 (图 8(a)), 对应的 β_s 一定处在广义布里渊区上^[69]. 如果有多个鞍点, 虚部最大的鞍点将决定波包的长时间演化. 由此可知, 出发位置波函数振幅的长时间演化行为将由开放边界条件下能谱的末端能量的虚部决定, 因此与广义布里渊区而不是布里渊区相联系. 虽然波包演化一直处于体内 (远离边界), 这一结论仍然成立.

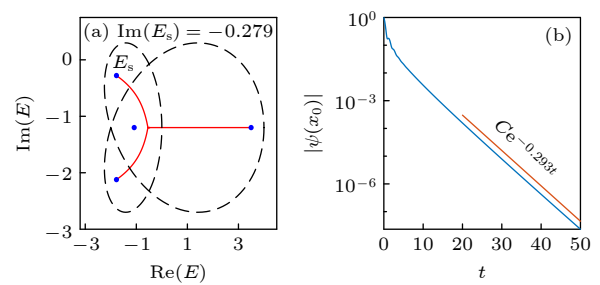


图 8 (a) 周期边界条件 (黑色虚线) 和开放边界条件 (红色实线) 下的能谱, 蓝点代表鞍点 $\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = 0$; (b) 波包初始位置波函数振幅 $|\psi(x_0, t)|$ 随时间的演化. 参数取值: $t_1 = 1$, $t_2 = 1$, $\gamma = 1.5$, $\kappa = -1.2$

Fig. 8. (a) Energy spectrums under periodic boundary condition (black dashed line) and open boundary condition (red solid line). Blue points are the saddle points satisfying $\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = 0$. (b) Time evolution of wavefunction amplitude $|\psi(x_0, t)|$ at the initial location x_0 . Parameters: $t_1 = 1$, $t_2 = 1$, $\gamma = 1.5$, $\kappa = -1.2$.

因为开放边界条件下能谱末端的鞍点位于周期边界条件下能谱的内部, 所以一定有 $\lambda_0 < \max(\lambda_v)$. 由于上述过程与边界条件无关, 因此即使在周期边界条件下, 系统仍能体现非厄米趋肤效应和广义布里渊区的性质^[69].

作为例子, 考虑图 4(a) 的一维单带模型, 在一条足够长的链 ($L = 1000$) 的中部 ($x_0 = 500$) 放入一个初态波包 $\psi(x, 0) = \delta_{x, x_0}$. 在一定的参数下, 随着波包的演化, $\psi(x_0, t)$ 会呈现出图 8(b) 所示的指数衰减的行为 $|\psi(x_0, t)| \sim e^{-0.293t}$. 这个指数非常接近开放边界条件下能谱 E_{OBC} 末端的虚部, 即鞍点 E_s 的虚部 $\text{Im}(E_s) = -0.279$ (图 8(a)), 与周期边界条件下能谱的最大虚部无关.

Non-Bloch 能带理论除了在波包动力学中展现广义布里渊区鞍点的性质, 还在其他诸多非厄米动力学过程中发挥作用^[71,72], 例如它可以给出淬火动力学中的拓扑不变量^[28,73].

3.4 开放量子体系的 Liouvillian 能隙与手征衰减

上一个例子表明, 非厄米系统的动力学性质受到 non-Bloch 能带性质的深刻影响. 在引言部分提到, 开放量子体系的 Liouvillian 超算符可以视为作用在密度矩阵上的有效非厄米哈密顿量, 决定了密度矩阵的时间演化. 一个自然的问题是, Liouvillian 作为一个非厄米算子是否可以出现非厄米趋肤效应? 其物理后果是什么? 是否可以在 non-Bloch 能带理论下描写?

下面从 Lindblad 量子主方程出发:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \sum_{\mu} (2L_{\mu}\rho L_{\mu}^{\dagger} - \{L_{\mu}^{\dagger}L_{\mu}, \rho\}) \equiv \mathcal{L}\rho, \quad (51)$$

其中 ρ 代表系统的密度矩阵, H 表示系统么正演化的哈密顿量, L_{μ} 是描述系统与环境之间的耦合导致的量子跃迁. 研究发现, Liouvillian 超算符也能展现非厄米趋肤效应, 且这种效应会显著地影响系统在长时间下的动力学行为. 在一大类开放量子系统中, 长时间极限下的量子态在周期边界条件下以代数衰减的方式趋近于稳态, 而在开放边界条件下以指数衰减的方式趋近于稳态^[74].

为具体起见, 考虑如图 9(a) 所示的开放费米子系统, 其哈密顿量 $H = \sum_{ij} h_{ij} \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j$ 选为 SSH 模

型^[27]:

$$H = \sum_x t_1 \hat{c}_{xA}^{\dagger} \hat{c}_{xB} + t_2 \hat{c}_{(x+1)A}^{\dagger} \hat{c}_{xB} + \text{h.c.}, \quad (52)$$

其中 $\hat{c}_{xA}, \hat{c}_{xB}$ 是格点上的费米子湮灭算符. 为描述体系与环境的粒子交换, 考虑两种原胞内的耗散算符 $L_{\mu}^l = \sum_i D_{\mu i}^l \hat{c}_i$ 和 $L_{\mu}^g = \sum_i D_{\mu i}^g \hat{c}_i^{\dagger}$, 其具体形式取为

$$\begin{aligned} L_x^l &= \sqrt{\gamma_l/2} (\hat{c}_{xA} - i\hat{c}_{xB}), \\ L_x^g &= \sqrt{\gamma_g/2} (\hat{c}_{xA}^{\dagger} + i\hat{c}_{xB}^{\dagger}). \end{aligned} \quad (53)$$

通过计算可以得到, 单粒子关联函数 $\Delta_{ij}(t) = \text{Tr}[\hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j \rho(t)]$ 满足如下演化方程^[74]:

$$\frac{d\Delta(t)}{dt} = X\Delta(t) + \Delta(t)X^{\dagger} + 2M_g, \quad (54)$$

式中, $X = i\hbar^T - (M_l^T + M_g)$, 且

$$(M_{\alpha})_{ij} = \sum_{\mu} (D_{\mu i}^{\alpha})^* D_{\mu j}^{\alpha},$$

其中 $\alpha = g, l$. 在长时间极限下, 上式会演化到稳态的关联函数 $\Delta_s = \lim_{t \rightarrow \infty} \Delta(t)$, 它满足 $X\Delta_s + \Delta_s X^{\dagger} + 2M_g = 0$. 现考虑系统趋向稳态的过程, 则 $\tilde{\Delta}(t) = \Delta(t) - \Delta_s$ 的演化方程为

$$\frac{d\tilde{\Delta}(t)}{dt} = X\tilde{\Delta}(t) + \tilde{\Delta}(t)X^{\dagger}. \quad (55)$$

计算得到 X 矩阵在动量空间有如下形式:

$$X(k) = i \left[(t_1 + t_2 \cos k) \sigma_x + \left(t_2 \sin k - i \frac{\gamma}{2} \right) \sigma_y \right] - \frac{\gamma}{2} \mathbb{I}, \quad (56)$$

其中 $\gamma \equiv \gamma_g + \gamma_l$. 这个矩阵等价于图 1(a) 中的非厄米 SSH 模型. 在周期边界条件下, 由 X 矩阵所确定的 Liouvillian 能隙 Λ 在 $t_1 \leq t_2$ 时等于零, 如图 9(b) 中的 A, B 所示; 而 $t_1 > t_2$ 时 $\Lambda \neq 0$, 如图 9(b) 中的 C, D 所示.

考虑全占据初态 $\prod_{x,s} \hat{c}_{x,s}^{\dagger} |0\rangle$ 的时间演化, 定义相对稳态的平均粒子数偏离

$$\tilde{n}(t) = \sqrt{\sum_x (n_x(t) - n_x(\infty))^2 / L};$$

根据定义, $n_x(t) = \Delta_{xA, xA}(t) + \Delta_{xB, xB}(t)$. 数值模拟发现, 当 $t_1 \leq t_2$ 时, $\tilde{n}(t)$ 在周期边界条件下呈代数衰减, 如图 9(c) 中的 A, B 所示.

然而, 在开放边界条件下, 非厄米矩阵 X 具有非厄米趋肤效应. 这使得它的能谱不再是周期边界条件下的能谱. 此时能谱的 Liouvillian 能隙 $\Lambda \neq 0$

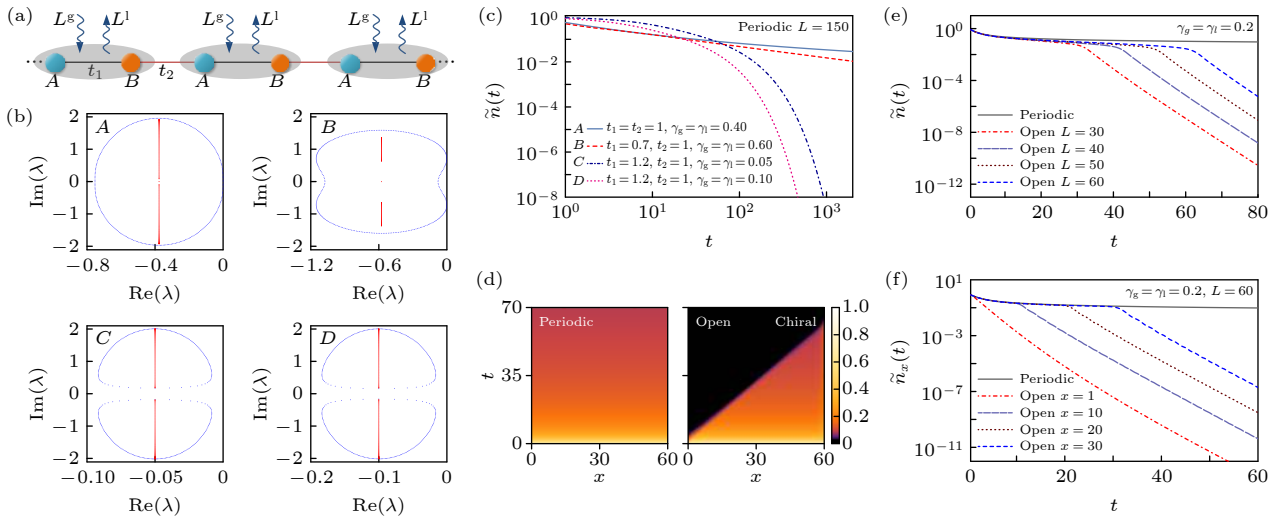


图9 开放量子系统中的 Liouvillian 能隙与手征衰减 (a) 具有耗散的开放 SSH 模型. (b) 衰减矩阵 X 的本征值. 蓝色代表周期边界条件, 红色代表开放边界条件. A 和 B ($t_1 \leq t_2$) 在周期边界条件下的 Liouvillian 能隙为零而 C 和 D ($t_1 > t_2$) 非零. A, B, C, D 4 种情况在开放边界条件下的 Liouvillian 能隙均不为零. 4 种情况的参数取值见图 (c). (c) 平均粒子数偏离值 $\bar{n}(t)$ 在周期边界条件下的演化. A 和 B 表现为缓慢的代数衰减, 而 C 和 D 为指数衰减. (d) 每个格点上的费米子数偏离 $\bar{n}_x(t)$ 在周期边界条件 (左) 和开放边界条件 (右) 下的演化. (e) 不同长度系统中平均费米子数偏离 $\bar{n}(t)$ 在周期边界条件 (实线) 和开放边界条件 (虚线) 下的演化. (f) 费米子数偏离 $\bar{n}_x(t)$ 在开放边界条件 (虚线) 下的演化. (d)–(f) 的参数为 $t_1 = t_2 = 1$, $\gamma_g = \gamma_l = 0.2$. (c)–(f) 中所有演化过程的初态均为全占据态 $\prod_{x,s} \hat{c}_{x,s}^\dagger |0\rangle$ [74]

Fig. 9. Liouvillian gap and chiral damping in an open quantum system with non-Hermitian skin effect: (a) Sketch of the SSH Hamiltonian H with additional single-particle gain and loss. (b) Eigenenergies of damping matrix X . Blue: periodic boundary condition. Red: open boundary condition. The Liouvillian gap under periodic boundary condition is zero for A and B ($t_1 \leq t_2$), while it is nonzero for C and D ($t_1 > t_2$). Parameter values are shown in panel (c). (c) Time evolution of the fermion number deviation from the steady-state value, $\bar{n}(t)$, of a periodic-boundary chain. The damping is algebraic for A, B and exponential for C, D . (d) Time evolution of site-resolved fermion number deviation from the steady-state values, $\bar{n}_x(t)$, for the periodic boundary condition (left) and open boundary condition (right). (e) Time evolution of $\bar{n}(t)$ under periodic boundary conditions (solid curve) and open boundary conditions (dashed curves) for different chain length L . (f) Time evolution of $\bar{n}_x(t)$ for an open-boundary chain at different x . Parameters in (d)–(f): $t_1 = t_2 = 1$, $\gamma_g = \gamma_l = 0.2$. The initial state in (c)–(f) is $\prod_{x,s} \hat{c}_{x,s}^\dagger |0\rangle$ [74].

(图 9(b)). 因此, $\bar{n}(t)$ 在长时间极限下会呈指数衰减. 图 9(e) 的数值模拟显示系统的平均粒子数在进入指数衰减之前, 会有一段时间呈现周期边界条件时的代数衰减的行为. 且这一行为持续的时间长度正比于体系的尺度 L .

更进一步, 如果考虑每个格点上的粒子数偏离 $\bar{n}_x(t) = n_x(t) - n_x(\infty)$ 的演化. 周期边界条件下它们都呈现出缓慢的代数衰减的行为. 然而, 在开放边界条件下, $\bar{n}_x(t)$ 先经历一段代数衰减的区域再进入指数衰减. 这个转变从系统的一侧边界 $x = 0$ 附近开始, 渐渐向系统的另一侧传播. 系统不同位置发生转变的时间正比于该处到边界的距离, 从而形成一个波前, 如图 9(f) 所示 [74]. 这种现象被称为手征衰减 (chiral damping), 如图 9(d) 所示. 它起源于 X 矩阵的非厄米趋肤效应. 如果 X 矩阵在开放边界条件下没有非厄米趋肤效应, 那么粒子数的演化在不同边界条件下有着相似的行为.

由此可见, 非厄米趋肤效应在开放量子系统中

发挥着重要作用, 它能影响开放量子系统的稳态和动力学响应等诸多性质 [75–78].

3.5 非布洛赫 PT 对称性

宇称-时间对称性 (PT 对称性) 在非厄米系统中扮演着重要的角色. 依赖于非厄米参数的取值, 一个具有 PT 对称性的系统可以拥有纯实数或者复数能谱, 二者之间的转变称为 PT 对称性破缺 [79–83]. 对于一个空间周期性体系, 如果系统没有非厄米趋肤效应, 传统的布洛赫能带理论表明 PT 对称性破缺发生于布里渊区上的奇异点.

对于具有非厄米趋肤效应的系统, 根据前面提到的定理 [52,54], 周期边界条件下的能谱环绕非零面积, 因此不可能为纯实数, 也就不会发生 PT 对称性破缺; 然而, 开放边界条件下的能谱可以是实数的. 非厄米趋肤效应使得开放边界条件下能谱为实数的现象被称为非布洛赫 PT 对称性 (non-Bloch parity-time symmetry). 值得指出的是, 开放边界

条件是物理上更自然的边界条件,也是实验中通常采用的边界条件.

3.5.1 一维量子行走系统的非布洛赫 PT 对称性

前面给出的例子里其实已经出现了非布洛赫 PT 对称性. 如, 图 1(a) 描述的非厄米 SSH 模型满足广义的 PT 对称性 $H = H^*$. 这种对称性是 PT 对称性的一般推广, 它保证了哈密顿量在一组合适的基下是一个实矩阵. 在一定的参数区间内该哈密顿量在开放边界条件下的能谱是实数 (如图 1(c)), 而在周期边界条件下它的能谱始终是复数. 图 3(a) 所示模型具有同样的对称性 $H = H^*$, 当参数取值为图 3(c) 时, 非布洛赫 PT 对称性发生了破缺, 其开放边界条件下的能谱拥有复的本征值.

利用第 3.3 节讨论过的波包动力学, 在一维单光子量子行走实验中可以观测到这种来自非厄米趋肤效应和广义布里渊区的非布洛赫 PT 对称性及其破缺 [69,84,85]

在这类体系中, 光子的演化由非幺正的离散时间演化算符刻画: $|\psi(t)\rangle = U^t |\psi(0)\rangle$, 其中 $t = 0, 1, 2, \dots$, 这可以视为初态 $|\psi(0)\rangle$ 在由 $U = e^{-iH_{\text{eff}}}$ 定义的有效哈密顿量 H_{eff} 的作用下进行演化. 具体实现方式有很多可能, 实际的量子行走实验采用了如下的非幺正算符 [85]:

$$U = R\left(\frac{\theta_1}{2}\right) S_2 R\left(\frac{\theta_2}{2}\right) M R\left(\frac{\theta_2}{2}\right) S_1 R\left(\frac{\theta_1}{2}\right), \quad (57)$$

其中单向转移算符

$$S_1 = \sum_x |x\rangle \langle x| \otimes |0\rangle \langle 0| + |x+1\rangle \langle x| \otimes |1\rangle \langle 1|,$$

$$S_2 = \sum_x |x-1\rangle \langle x| \otimes |0\rangle \langle 0| + |x\rangle \langle x| \otimes |1\rangle \langle 1|,$$

即它们使得不同偏振的光子 ($|0\rangle$ 或者 $|1\rangle$, σ_z 的两个本征态) 沿着一维晶格向不同方向转移. 在每个格点上, 还有旋转算符

$$R(\theta) = \left(\sum_x |x\rangle \langle x| \right) \otimes e^{-i\theta\sigma_y}.$$

系统的增益和损耗通过

$$M = \left(\sum_x |x\rangle \langle x| \right) \otimes e^{\gamma\sigma_z}$$

实现.

在算符 $S_{1,2}$ 和 M 的共同作用下, 演化算符 U 在实空间出现非厄米趋肤效应. 如果考虑两个一维系统首尾相连形成畴壁, 两侧的物理参数分别为 $\theta_{1,2}^R$

和 $\theta_{1,2}^L$, U 的本征态会局域在畴壁上 [44,85]. 在这个体系中可以研究非布洛赫 PT 对称性. 将演化算符 U 变换到动量空间 $U(k)$ 并定义 $U(\beta) \equiv U(k \rightarrow -i \ln \beta)$, 可以求得演化算符的广义布里渊区. 考虑 β 在广义布里渊区上取值, 计算发现, 当 $|\cos \theta_2^{R(L)}| > |\tanh \gamma|$ 时, $U(\beta)$ 有如下 η -赝幺正性 (η -pseudo-unitarity) [85]:

$$\eta U^{-1}(\beta) \eta^{-1} = U^\dagger(\beta) \Big|_{\beta \in \text{GBZ}}, \quad (58)$$

此时 $\eta = \sum_n |\xi_n\rangle \langle \xi_n|$, 其中 $|\xi_n\rangle$ 是 $U(\beta)$ 的左本征态. 这个方程等价于有效非厄米哈密顿量 H_{eff} 具有 η -赝厄米性 (η -pseudo-Hermiticity):

$$\eta H_{\text{eff}}(\beta) \eta^{-1} = H_{\text{eff}}^\dagger(\beta). \quad (59)$$

这便是单光子量子行走系统中的非布洛赫 PT 对称性, 它将保证 H_{eff} 的本征值 (U 对应的准能谱) 是纯实的或者互为复共轭. 从物理效果来看, 在 PT 对称的区域和 PT 对称破缺的区域, 初态波包具有截然不同的演化行为, 可以用第 3.3 节中非厄米波包动力学的方法来探测系统的 PT 对称性 [69,85].

如图 10 所示, 随着系统参数的改变, 周期边界条件下的能谱始终是复数的, 而开放边界条件下的能谱会经历从实数到复数的相变. 图 10 给出了非厄米系统在开放边界条件下的非布洛赫 PT 对称性及其破缺过程, 破缺点被称为非布洛赫奇异点 (non-Bloch exceptional point) [85]. 在这个具体系统中, 非布洛赫 PT 对称性发生破缺的参数条件是 $|\cos \theta_2^{R(L)}| = |\tanh \gamma|$. 这与周期边界条件下的情况有着本质区别. 在周期边界条件下, 该参数附近的能谱始终为复数, 未发生任何相变.

3.5.2 高维系统的非布洛赫 PT 对称性

最近的理论研究发现, 非布洛赫 PT 对称性对于空间维数有着出乎意料的依赖性 [86]. 分别考虑 4 个不同体系在开放边界条件下的非布洛赫 PT 对称性的相图, 他们的布洛赫哈密顿量分别如下:

图 11(a) 表示一维单带模型

$$H_{1D}(k) = (t - \gamma)e^{ik} + (t + \gamma)e^{-ik} + 2s \cos(2k);$$

图 11(b) 表示二维单带模型

$$H_{2D}^{\text{skin}}(k) = \sum_{i=x,y} [(t - \gamma)e^{ik_i} + (t + \gamma)e^{-ik_i}] + 4s \cos k_x \cos k_y;$$

图 11(c) 表示二维双带模型

$$H_{2D}^{\text{no skin}}(k) = (m + t \cos k_x + t \cos k_y) \sigma_z + \Delta \sigma_y + i\gamma \sigma_x;$$

图 11(d) 表示三维单带模型

$$H_{3D}(k) = \sum_{i=x,y,z} [(t-\gamma)e^{ik_i} + (t+\gamma)e^{-ik_i}] + 8s \cos(k_x) \cos(k_y) \cos(k_z),$$

其中, H_{1D} , H_{2D}^{skin} , H_{3D} 在开放边界条件下具有非厄米趋肤效应, 而 $H_{2D}^{\text{no skin}}$ 没有这一效应. 可以利用复数能量本征值数目 N_c 占能量本征值总数 N 的比例 $P = N_c/N$ 来刻画这些模型的 PT 对称性特征, 得到的结果如图 11(e)–图 11(h) 所示.

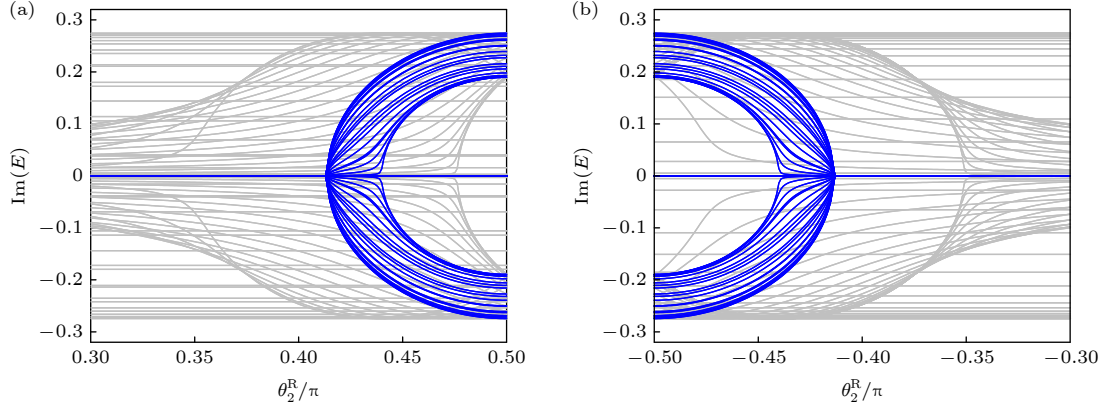


图 10 一维量子行走系统的准能谱虚部 $\text{Im}(E)$ 随着 θ_2^R 的变化. 其他参数为 $\theta_1^R = 0.5625\pi$, $\theta_1^L = -0.0625\pi$, $\gamma = 0.2746$: (a) $\theta_2^L = 0.75\pi$; (b) $\theta_2^L = -0.9735\pi$. 蓝色实线和灰色实线分别代表开放边界条件下的非布洛赫能谱和周期边界条件下的布洛赫能谱^[85]

Fig. 10. Imaginary part of quasienergies $\text{Im}(E)$ versus θ_2^R for the experimentally realized one-dimensional quantum walk. Parameter values: $\theta_1^R = 0.5625\pi$, $\theta_1^L = -0.0625\pi$, $\gamma = 0.2746$: (a) $\theta_2^L = 0.75\pi$; (b) $\theta_2^L = -0.9735\pi$. Blue and gray lines represent quasi-energies under open boundary condition and periodic boundary condition, respectively^[85].

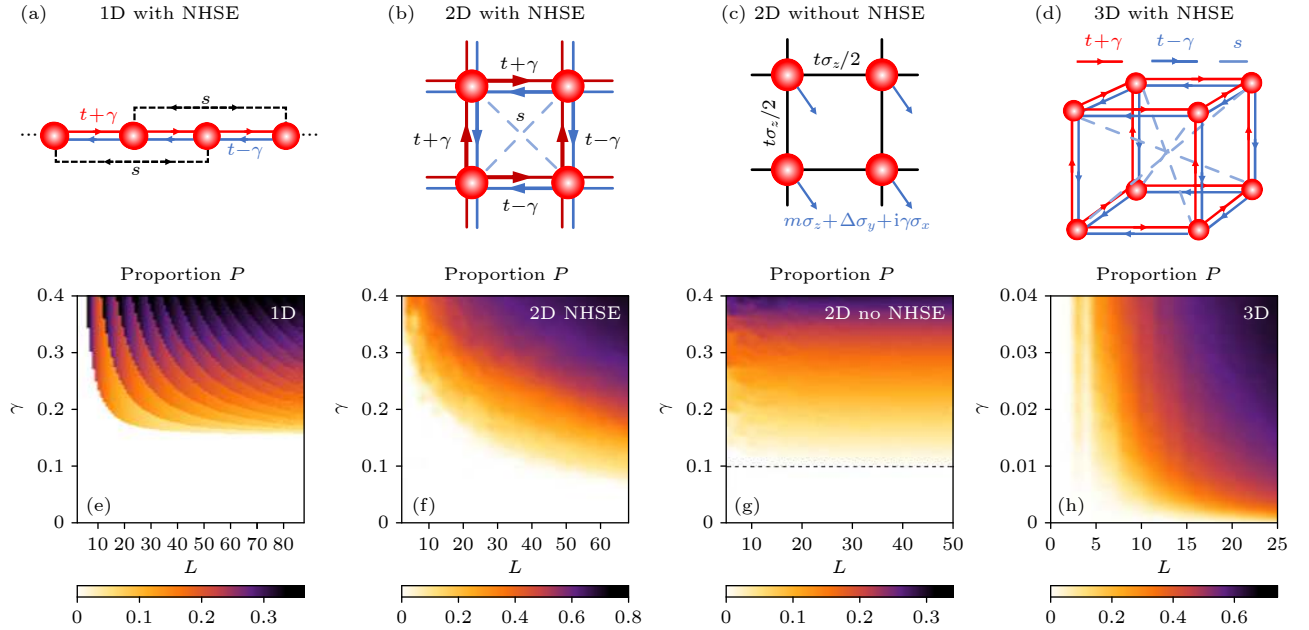


图 11 不同系统在开放边界条件下复数能量数目占比 P : (a), (e) 长度为 L 的链上的 H_{1D} , 其中 $t = 1$, $s = 0.15$; (b), (f) $L \times L$ 的正方形上的 H_{2D}^{skin} , 其中 $t = 1$, $s = 0.3$; (c), (g) $L \times L$ 的正方形上的 $H_{2D}^{\text{no skin}}$, 其中 $m = 0.5$, $t = 0.2$, $\Delta = 0$; (d), (h) $L \times L \times L$ 的正方体上的 H_{3D} , 其中 $t = 1$, $s = 0.5$. (d) 中边界格点上有随机势 $V = \sum_{\mathbf{r} \in \text{Boundary}} w(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$, 其中 $w(\mathbf{r})$ 在 $[-W/2, W/2]$ 中均匀分布且 $W = 0.7$. 能量虚部的绝对值 $|\text{Im}(E)| > 10^{-10}$ 即被视为复数能量^[86]

Fig. 11. Complex eigenenergies proportion P for four different systems under open boundary condition: (a), (e) H_{1D} on a length- L chain with $t = 1$, $s = 0.15$; (b), (f) H_{2D}^{skin} on $L \times L$ squares with $t = 1$, $s = 0.3$; (c), (g) $H_{2D}^{\text{no skin}}$ on $L \times L$ squares with $m = 0.5$, $t = 0.2$, $\Delta = 0$; (d), (h) H_{3D} on $L \times L \times L$ cubes with $t = 1$, $s = 0.5$. For (d), there is an on-site random potential $V = \sum_{\mathbf{r} \in \text{Boundary}} w(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$ on boundary sites where $w(\mathbf{r})$ is uniformly distributed in $[-W/2, W/2]$ with $W = 0.7$. Numerically, a complex energy holds a nonzero imaginary part if $|\text{Im}(E)| > 10^{-10}$ ^[86].

在一维系统中, 非布洛赫 PT 对称性的破缺一般要求非厄米项超过一个与系统长度无关的非零阈值, 如图 11(e) 所示. 但是, 在二维或更高维的系统中, 当体系的尺寸增大时, 非布洛赫 PT 对称性破缺的阈值会趋近于零, 如图 11(f) 和图 11(h) 所示. 即使是一个无穷小的非厄米项, 在体系足够大的时候也会使得系统的大部分本征能量变为复数^[86].

这一现象与布洛赫能带的 PT 对称性有着显著的区别. 对于没有非厄米趋肤效应的 PT 对称的系统, 布洛赫能带理论有效, 此时 PT 对称性破缺的阈值一般非零, 并且与系统的尺寸无关 (除了尺寸较小时出现的有限尺寸效应), 如图 11(g) 所示. 与非布洛赫 PT 对称破缺的维度依赖性不同, 布洛赫 PT 对称破缺在一维和高维一般均有非零阈值.

4 结 语

本文简要介绍了广义布里渊区的 non-Bloch 能带理论的基本概念, 并讨论了该理论在若干非厄米系统中的应用. 可以看到, 虽然最初提出广义布里渊区是为了理解非厄米拓扑态的体边对应, 但是这一概念的应用范围并不限于拓扑性质. 它可以用于研究非厄米能带结构、格林函数、动力学、PT 对称性等诸多方面的物理性质.

如果在非厄米系统中引入更丰富的对称性, 非厄米能带理论将会呈现其他新奇性质^[54,87–96]. 如, 如果系统存在互易性 $\mathcal{T}h(\beta)^T\mathcal{T}^{-1} = h(\beta^{-1})$, 其中么正算符 $\mathcal{T}$ 满足 $\mathcal{T}\mathcal{T}^* = -1$, 系统在开放边界条件下会呈现出 $\mathbb{Z}_2$ 非厄米趋肤效应 ($\mathbb{Z}_2$ non-Hermitian skin effect), 即一个本征能量对应两个分别局域在系统两侧边界的简并的本征态^[54,87,90]. 在具有 BCS 配对的玻色子系统中 (例如很多 magnon 系统中), 玻色型 Bogoliubov 准粒子的动力学由一个非厄米矩阵所控制, 因此可以用非厄米能带理论来描述^[91,92,94].

非厄米趋肤效应作为一个普遍的非厄米物理现象, 在许多无法简单定义能带结构的非厄米系统中也扮演着重要的角色, 如非厄米无序系统^[97–106]、非厄米晶体缺陷^[107–110]、非厄米相互作用系统^[111–117]及非厄米量子场论^[118,119]等.

目前, 这一研究方向仍在活跃发展之中, 限于篇幅, 众多最新进展未能在此介绍. 最后需要说明, 虽然这一方向最近几年已有不少进展, 但已被理解的部分可能只是冰山一角, 还有许多重要问题有待回答.

参考文献

- [1] Breuer H P, Petruccione F 2006 *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford: Oxford University Press)
- [2] Lindblad G 1976 *Commun. Math. Phys.* **48** 119
- [3] Gorini V, Kossakowski A, Sudarshan E C G 1976 *J. Math. Phys.* **17** 821
- [4] Daley A J 2014 *Adv. Phys.* **63** 77
- [5] Kozii V, Fu L 2017 arXiv: 1708.05841 [cond-mat]
- [6] Shen H T, Fu L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 026403
- [7] Nagai Y, Qi Y, Isobe H, Kozii V, Fu L 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 227204
- [8] Papaj M, Isobe H, Fu L 2019 *Phys. Rev. B* **99** 201107
- [9] Bandres M A, Wittek S, Harari G, et al. 2018 *Science* **359** eaar4005
- [10] Harari G, Bandres M A, Lumer Y, et al. 2018 *Science* **359** eaar4003
- [11] Zhou H Y, Peng C, Yoon Y, et al. 2018 *Science* **359** 1009
- [12] Ashida Y, Gong Z P, Ueda M 2020 *Adv. Phys.* **69** 249
- [13] Bergholtz E J, Budich J C, Kunst F K 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 015005
- [14] Hasan M Z, Kane C L 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045
- [15] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057
- [16] Chiu C K, Teo J C Y, Schnyder A P, Ryu S 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 035005
- [17] Bansil A, Lin H, Das T 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 021004
- [18] Ozawa T, Price H M, Amo A, et al. 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 015006
- [19] Yao S, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 086803
- [20] Yao S, Song F, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 136802
- [21] Kunst F K, Edvardsson E, Budich J C, Bergholtz E J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 026808
- [22] Lee C H, Thomale R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 201103
- [23] Helbig T, Hofmann T, Imhof S, et al. 2020 *Nat. Phys.* **16** 747
- [24] Xiao L, Deng T S, Wang K K, Zhu G Y, Wang Z, Yi W, Xue P 2020 *Nat. Phys.* **16** 761
- [25] Weidemann S, Kremer M, Helbig T, Hofmann T, Stegmaier A, Greiter M, Thomale R, Szameit A 2020 *Science* **368** 311
- [26] Yokomizo K, Murakami S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 066404
- [27] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1980 *Phys. Rev. B* **22** 2099
- [28] Wang K K, Li T Y, Xiao L, Han Y W, Yi W, Xue P 2021 arXiv: 2107.14741 [cond-mat]
- [29] Ghatak A, Brandenbourger M, van Wezel J, Coulais C 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **117** 29561
- [30] Gou W, Chen T, Xie D Z, Xiao T, Deng T S, Gadway B, Yi W, Yan B 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 070402
- [31] Li L H, Lee C H, Gong J B 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 250402
- [32] Yoshida T, Mizoguchi T, Hatsugai Y 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 022062
- [33] Scheibner C, Irvine W T M, Vitelli V 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 118001
- [34] Mandal S, Banerjee R, Ostrovskaya E A, Liew T C H 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 123902
- [35] Gao P L, Willatzen M, Christensen J 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 206402
- [36] Zhu X Y, Wang H Q, Gupta S K, Zhang H J, Xie B Y, Lu M H, Chen Y F 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013280
- [37] Hofmann T, Helbig T, Schindler F, S et al. 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 023265
- [38] Brandenbourger M, Locsin X, Lerner E, Coulais C 2019 *Nat. Commun.* **10** 4608

- [39] Rosa M I N, Ruzzene M 2020 *New J. Phys.* **22** 053004
- [40] Mandal S, Banerjee R, Liew T C H 2021 arXiv: 2103.05480 [cond-mat]
- [41] Zhong J, Wang K, Park Y, Asadchy V, Wojcik C C, Dutt A, Fan S H 2021 *Phys. Rev. B* **104** 125416
- [42] Chen Y Y, Li X P, Scheibner C, Vitelli V, Huang G L 2021 *Nat. Commun.* **12** 5935
- [43] Zhang L, Yang Y H, Ge Y, et al. 2021 *Nat. Commun.* **12** 6297
- [44] Deng T S, Yi W 2019 *Phys. Rev. B* **100** 035102
- [45] Yang Z S, Zhang K, Fang C, Hu J P 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 226402
- [46] Li L H, Lee C H, Mu S, Gong J B 2020 *Nat. Commun.* **11** 5491
- [47] Yokomizo K, Murakami S 2021 *Phys. Rev. B* **104** 165117
- [48] Rafi-Ul-Islam S M, Siu Z B, Sahin H, Lee C H, Jalil M B A 2021 arXiv: 2108.02457 [cond-mat]
- [49] Hatano N, Nelson D R 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 570
- [50] Hatano N, Nelson D R 1997 *Phys. Rev. B* **56** 8651
- [51] Xue W T, Li M R, Hu Y M, Wang Z 2021 *Phys. Rev. B* **103** L241408
- [52] Zhang K, Yang Z S, Fang C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 126402
- [53] Song F, Yao S, Wang Z 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 246801
- [54] Okuma N, Kawabata K, Shiozaki K, Sato M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 086801
- [55] Gong Z P, Ashida Y, Kawabata K, Takasan K, Higashikawa S, Ueda M 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031079
- [56] Shen H T, Zhen B, Fu L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 146402
- [57] Kawabata K, Shiozaki K, Ueda M, Sato M 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041015
- [58] Li L H, Mu S, Lee C H, Gong J B 2021 *Nat. Commun.* **12** 5294
- [59] Zhang K, Yang Z S, Fang C 2021 arXiv: 2102.05059 [cond-mat]
- [60] Kawabata K, Sato M, Shiozaki K 2020 *Phys. Rev. B* **102** 205118
- [61] Zhang X J, Tian Y, Jiang J H, Lu M H, Chen Y F 2021 *Nat. Commun.* **12** 5377
- [62] Fu Y X, Hu J H, Wan S L 2021 *Phys. Rev. B* **103** 045420
- [63] Edvardsson E, Kunst F K, Bergholtz E J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 081302
- [64] Wang H Q, Ruan J W, Zhang H J 2019 *Phys. Rev. B* **99** 075130
- [65] Zhang X Z, Gong J B 2020 *Phys. Rev. B* **101** 045415
- [66] Okugawa R, Takahashi R, Yokomizo K 2020 *Phys. Rev. B* **102** 241202
- [67] Lee C H, Li L H, Gong J B 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 016805
- [68] Zou D Y, Chen T, He W J, Bao J C, Lee C H, Sun H J, Zhang X D 2021 arXiv: 2104.11260 [cond-mat]
- [69] Longhi S 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 023013
- [70] Mao L, Deng T S, Zhang P F 2021 *Phys. Rev. B* **104** 125435
- [71] Longhi S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 066602
- [72] Longhi S 2020 *Phys. Rev. B* **102** 201103
- [73] Li T Y, Sun J Z, Zhang Y S, Yi W 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 023022
- [74] Song F, Yao S, Wang Z 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 170401
- [75] Haga T, Nakagawa M, Hamazaki R, Ueda M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 070402
- [76] Liu C H, Zhang K, Yang Z S, Chen S 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043167
- [77] McDonald A, Clerk A A 2020 *Nat. Commun.* **11** 5382
- [78] McDonald A, Hanai R, Clerk A A 2021 arXiv: 2103.01941 [cond-mat]
- [79] Bender C M, Boettcher S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 5243
- [80] Bender C M 2007 *Rep. Prog. Phys.* **70** 947
- [81] El-Ganainy R, Makris K G, Khajavikhan M, Musslimani Z H, Rotter S, Christodoulides D N 2018 *Nat. Phys.* **14** 11
- [82] Özdemir S K, Rotter S, Nori F, Yang L 2019 *Nat. Mater.* **18** 783
- [83] Miri M A, Alù A 2019 *Science* **363** eaar7709
- [84] Longhi S 2019 *Opt. Lett.* **44** 5804
- [85] Xiao L, Deng T S, Wang K K, Wang Z, Yi W, Xue P 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 230402
- [86] Song F, Wang H Y, Wang Z 2021 arXiv: 2102.02230 [cond-mat]
- [87] Kawabata K, Okuma N, Sato M 2020 *Phys. Rev. B* **101** 195147
- [88] Li L H, Lee C H, Gong J B 2019 *Phys. Rev. B* **100** 075403
- [89] Liu C H, Jiang H, Chen S 2019 *Phys. Rev. B* **99** 125103
- [90] Yi Y F, Yang Z S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 186802
- [91] Yang Z S 2020 arXiv: 2012.03333 [cond-mat]
- [92] Yokomizo K, Murakami S 2021 *Phys. Rev. B* **103** 165123
- [93] Jin L, Song Z 2019 *Phys. Rev. B* **99** 081103
- [94] Xu X R, Xu H W, Mandal S, Banerjee R, Ghosh S, Liew T C H 2021 *Phys. Rev. B* **103** 235306
- [95] Okugawa R, Takahashi R, Yokomizo K 2021 *Phys. Rev. B* **103** 205205
- [96] Shiozaki K, Ono S 2021 *Phys. Rev. B* **104** 035424
- [97] Jiang H, Lang L J, Yang C, Zhu S L, Chen S 2019 *Phys. Rev. B* **100** 054301
- [98] Longhi S 2019 *Phys. Rev. B* **100** 125157
- [99] Zeng Q B, Yang Y B, Xu Y 2020 *Phys. Rev. B* **101** 020201
- [100] Zeng Q B, Xu Y 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 033052
- [101] Kim K M, Park M J 2021 *Phys. Rev. B* **104** L121101
- [102] Liu Y X, Wang Y C, Liu X J, Zhou Q, Chen S 2021 *Phys. Rev. B* **103** 014203
- [103] Longhi S 2021 *Phys. Rev. B* **103** 144202
- [104] Longhi S 2021 *Phys. Rev. B* **103** 224206
- [105] Liu Q, Li T Y, Xiao L, Wang K K, Yi W, Xue P 2021 arXiv: 2108.01097 [cond-mat]
- [106] Claes J, Hughes T L 2021 *Phys. Rev. B* **103** L140201
- [107] Sun X Q, Zhu P H, Hughes T L 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 066401
- [108] Panigrahi A, Moessner R, Roy B 2021 arXiv: 2105.05244 [cond-mat]
- [109] Schindler F, Prem A 2021 *Phys. Rev. B* **104** L161106
- [110] Bhargava B A, Fulga I C, van den Brink J, Moghaddam A G 2021 arXiv: 2106.04567 [cond-mat]
- [111] Okuma N, Sato M 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 176601
- [112] Lee C H 2021 *Phys. Rev. B* **104** 195102
- [113] Zhang D W, Chen Y L, Zhang G Q, Lang L J, Li Z, Zhu S L 2020 *Phys. Rev. B* **101** 235150
- [114] Mu S, Lee C H, Li L H, Gong J B 2020 *Phys. Rev. B* **102** 081115
- [115] Yoshida T 2021 *Phys. Rev. B* **103** 125145
- [116] Shen R Z, Lee C H 2021 arXiv: 2107.03414 [cond-mat]
- [117] Guo C X, Wang X R, Wang C, Kou S P 2020 *Phys. Rev. B* **101** 144439
- [118] Kawabata K, Shiozaki K, Ryu S 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 216405
- [119] Moustaj A, Eek L, Smith C M 2021 arXiv: 2107.14271 [cond-mat]

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Generalized Brillouin zone and non-Hermitian band theory^{*}

Hu Yu-Min Song Fei Wang Zhong[†]

(*Institute for Advanced Study, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

(Received 14 October 2021; revised manuscript received 29 October 2021)

Abstract

The energy band theory is one of the cornerstones of condensed matter physics. It also has wide applications in other branches of physics. Recently, a number of questions from non-Hermitian physics call for a generalization of energy band theory to non-Hermitian systems. In the study of non-Hermitian topological states, it has been found that such a generalization necessitates redefinitions of certain fundamental concepts of band theory. In particular, the non-Hermitian skin effect (NHSE) causes the breakdown of Bloch-band picture and conventional bulk-boundary correspondence. To calculate the energy spectra and define topological invariants, the standard Brillouin zone gives way to the generalized Brillouin zone (GBZ). Many intriguing non-Hermitian phenomena, including the non-Hermitian skin effect, can be precisely characterized in terms of the generalized Brillouin zone. The non-Hermitian band theory based on the concept of generalized Brillouin zone, now generally known as the non-Bloch band theory, has successfully described and predicted a number of novel non-Hermitian phenomena. The present article provides a brief introduction to the main concepts of non-Bloch band theory, and its applications in the non-Hermitian bulk-boundary correspondence, Green's functions, wave dynamics, chiral damping, and non-Bloch parity-time symmetry.

Keywords: generalized Brillouin zone, non-Hermitian skin effect, non-Bloch band theory, non-Hermitian band theory

PACS: 03.65.Vf, 03.65.Yz, 05.40.Fb, 73.22.Gk

DOI: 10.7498/aps.70.20211908

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12125405).

[†] Corresponding author. E-mail: wangzhongemail@tsinghua.edu.cn



强关联电子体系二维相干光谱的理论研究评述

李子龙 万源

A theoretical survey of two-dimensional coherent spectroscopy in strongly-correlated electronic systems

Li Zi-Long Wan Yuan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230308 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211556

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211556>

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

专题: 非平衡量子多体系统

强关联电子体系二维相干光谱的理论研究评述*

李子龙¹⁾²⁾ 万源^{1)2)3)†}

1) (中国科学院物理研究所, 凝聚态理论与材料计算重点实验室, 北京 100190)

2) (中国科学院大学物理科学学院, 北京 100049)

3) (松山湖材料实验室, 东莞 523808)

(2021 年 8 月 23 日收到; 2021 年 9 月 30 日收到修改稿)

非线性相干光谱是一种测量材料非线性光学响应的谱学手段. 相比线性光谱, 非线性相干光谱具有多个时间变量, 能够提供材料的更多信息. 作为非线性相干光谱的代表之一, 二维相干光谱在众多领域取得了丰硕的成果. 在化学、生物学等领域, 二维相干光谱已经展现出相比线性谱学的优越性. 随着太赫兹技术的发展, 二维相干光谱在强关联体系也显现出巨大潜力, 相关的理论与实验工作正在开展. 本文简要概括了强关联体系二维相干光谱的发展现状, 介绍了二维相干光谱的基本概念与理论工具, 分析了二维相干光谱的主要特点, 并重点总结了我们研究组近几年关于强关联体系二维相干光谱的理论研究工作.

关键词: 二维相干光谱, 强关联体系**PACS:** 05.45.-a, 03.65.Yz, 03.75.Kk, 05.30.Pr**DOI:** 10.7498/aps.70.20211556

1 研究现状

凝聚态物理的进步与谱学手段的发展息息相关. 例如, 中子散射、扫描隧道光谱以及角分辨电子能谱的发展拓宽了我们对材料性质的认识. 在强关联电子学领域, 二维相干光谱作为一种新兴的谱学手段受到越来越多的重视. 二维相干光谱利用多束相干电磁波来探测材料的非线性响应, 因而在频域上产生一个二维的光谱来表征材料的非线性响应^[1,2,3].

相比传统的线性光谱, 二维相干光谱不仅能得到材料中光学激发的信息, 也能揭示激发之间的联系. 在红外以及高频波段, 二维相干光谱已经被广泛应用于化学、生物学等领域, 用来刻画化学反应以及生命活动的动力学过程^[1-4]. 太赫兹技术的发展使这一谱学手段达到了强关联电子系统的能量窗口. 太赫兹波段的频率范围为 $0.1\text{--}10 \times 10^{12}$ Hz,

对应的能量范围大致为 $1\text{ meV--}0.1\text{ eV}$. 高温超导体的赝能隙和超导转变温度对应的能量为几十个 mV ^[5], 几种量子磁性材料的磁激发对应的能量为几个 mV ^[6-8], 典型拓扑绝缘体的能隙也为几十个 mV ^[9]. 这些强关联体系的特征能量尺度在太赫兹的波段范围, 因而可以用太赫兹二维相干光谱进行研究. 目前, 这一谱学手段被应用在量子阱^[10]、反铁磁磁体^[11]、电子玻璃^[12]等强关联体系中.

与不断涌现的实验成果相比, 相关的理论仍然不成熟. 首先, 人们并不清楚强关联体系的非线性响应是否与体系的性质存在直截了当的关系; 其次, 目前大多数理论工作仍然使用能级的图像来描述非线性响应过程. 这样一套图像将非线性响应与量子系统的时间维度上的干涉现象联系起来, 为二维相干光谱提供了一个直观的物理解释. 然而, 量子多体系统具有空间上的广延性. 因此, 多体系统的非线性响应, 除了时间维度上存在干涉效应外, 还可能存在空间维度上的干涉效应. 因此, 针对强

* 国家自然科学基金 (批准号: 11974396) 和中国科学院战略性先导科技专项 (B 类)(批准号: XDB33020300) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yuan.wan@iphy.ac.cn

关联体系的非线性光谱研究需要一套新的物理图像。

理论工作者们利用数值和解析手段计算了一些重要强关联模型的非线性响应, 并通过联系非线性光谱学中已有的分析手段, 对这些模型的非线性响应光谱做出解释. 与此同时, 重整化、玻色化以及规范理论等多体物理的分析工具被引入并与原有的双边费曼图等方法结合, 从而给出强关联体系二维相干光谱更深刻的理解.

Wan 与 Armitage^[13] 从理论上研究了一种典型的强关联自旋系统——一维横场伊辛 (Ising) 模型. 自旋算符作用到基态激发两个分数激发——“自旋子”. 线性光谱是不同动量“自旋子”的连续谱, 体系的退相干时间等信息隐藏在谱内. 在不引入耗散的前提下, 退相干时间是无穷大, 因而线性谱中的展宽与耗散无关. 二维相干光谱通过光子回波将引起展宽的失相过程消除, 因而重现了“自旋子”的尖峰结构. 在引入耗散过程后, 退相干时间有限, 二维光谱的尖峰结构出现展宽. 这说明二维光谱将耗散与非耗散过程引起的展宽区分开来, 从而获得相比线性光谱关于激发更多的信息. 虽然横场伊辛模型是一维模型, 但由于分数激发是自旋液体中普遍存在的激发, 因而他们认为二维相干光谱可以用来分析更高维的、具有连续谱结构的自旋液体模型.

随后, Choi 等^[14] 进行了 Kitaev 自旋液体的二维相干光谱的理论研究. 利用 Kitaev 模型的严格可解性, 他们计算了体系的三阶非线性响应, 发现一个自旋算符可以从体系的基态中激发一个马约拉纳费米子与两个量子涡旋 (vison), 但这两种激发在二维光谱中的特征不同, 因而可以被区分出来. 其中, 二维光谱的对角线方向尖锐的峰代表了马约拉纳费米子的激发, 这对实验上认证马约拉纳费米子有指导意义.

作为工作的延续, Nandkishore 等^[15] 对具有能隙的自旋液体进行了进一步研究. 他们考虑了几种典型的有能隙的自旋液体模型, 如伊辛模型、二维 toric code 模型、Haah's code 模型以及 X-cube 模型. 对于常规自旋液体, 各类激发在线性光谱中无法表现出显著的特征. 但他们通过理论计算发现, 这些激发在二维相干光谱上都有明显特征. 对于非常规自旋液体, 第 I 类分形相 (X-cube) 的激发在线性光谱以及二维相干光谱中都表现出明显尖峰特征. 与之相比, 第 II 类分形相 (Haah's code) 需

要更高阶的非线性响应来获取体系激发的特征, 这也对实验提出了更大的挑战.

Parameswaran 和 Gopalakrishnan^[16] 从理论上研究了无序量子磁体的非线性响应. 以一维无序量子横场伊辛模型为例, 他们通过实空间重整化技术, 说明在相变点附近该模型可以用一系列孤立二能级系统描述. 紧接着, 他们人为地引入声子与体系中二能级系统的相互作用, 从而使体系的激发存在寿命. 在这种情况下, 他们考虑了对应于“泵浦-探测 (PP)”技术的非线性响应函数. 通过分析他们发现, 相比线性光谱, 二维相干光谱不仅能够将弛豫过程与退相干过程区分开, 也能够得到体系的态密度和重整化后的磁矩等物理信息.

Phuc 和 Trung^[17] 将二维相干光谱运用到一个典型的电子体系——双带哈伯德模型中. 通过模拟计算, 他们发现在没有占位能的情况下, 二维光谱的峰都分布在对角线上. 他们将这种特征归因于无相互作用的准激发. 随着占位能增加, 非对角峰开始显现, 体系中相互作用的大小正比于非对角峰的强度; 在体系进入莫特相后, 二维相干光谱表现为一个原点位置单一的峰, 这对应于基态到激发态的跃迁. 此外, 他们进一步发现, 二维相干光谱也可以用来分析强关联体系中的含时演化问题.

可以发现, 以上几个工作都局限于有能隙的体系. 这些体系在经过一定处理后, 都可以直接利用分析原子、分子体系非线性相干光谱的方法, 因而无法说明二维相干光谱在强关联体系中的新特性. 为了进一步说明二维相干光谱在强关联体系的巨大潜力, Li 等^[18] 讨论了一种典型的无能隙系统——拉廷格 (Luttinger) 液体. 他们发现拉廷格液体的二维相干光谱中仍然存在光子回波信号. 与其他光子回波产生的机理不同, 他们将这一现象归因于一种特殊的时空间干涉过程. 第 1 个自旋算符产生两个分数激发, 第 2 和第 3 个自旋算符分别改变两个分数激发的手性, 最终二者汇聚于原点并被湮灭掉. 在这个过程中, 两个分数激发的世界线犹如被一面透镜聚焦于焦点, 因而这一过程又被命名为“透镜”效应. 当体系存在色散或者耗散, 这种“透镜”效应不再完美, 因而光子回波信号随时间衰减. 这一工作将非线性光谱的时间干涉图像扩展为时空间干涉图像, 对于理解强关联体系的非线性光谱有启发性.

在接下来的部分中, 本文将介绍如下内容: 第 2 节以二能级系统为例, 简要介绍二维相干光谱的

含义与方法; 第 3 节和第 4 节以本研究组发表的两篇工作为例, 说明强关联电子体系二维相干光谱的新特点. 其中, 第 3 节主要介绍二维相干光谱在有能隙体系——横场伊辛模型的应用^[13], 第 4 节主要介绍二维相干光谱在无能隙体系——拉廷格液体的应用^[18].

2 二维相干光谱基本概念——以二能级系统为例^[1,2,12]

2.1 响应理论

考虑一个由二能级模型描述的分子体系:

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{\Delta}{2}\boldsymbol{\sigma}^z, \quad (1)$$

其中, $\boldsymbol{\sigma}^z$ 是泡利矩阵, Δ 是二能级系统的激发能. 希尔伯特空间的任何一个态都可以由 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 展开. 假设交变电场的作用是使得二能级系统跃迁, 哈密顿量可以加入一项含时相互作用:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{W}(t) = \mathbf{H}_0 - \boldsymbol{\mu}E(t), \quad (2)$$

其中, $E(t)$ 是电磁场的电场分量, $\boldsymbol{\mu}$ 对应于分子体系中的偶极子算符, $\boldsymbol{\mu} = \mu_{10}\boldsymbol{\sigma}^x$. 假设体系初始处于基态, 其含时演化的薛定谔方程为

$$i\partial_t |\phi(t)\rangle = \mathbf{H} |\phi(t)\rangle. \quad (3)$$

假设含时相互作用 $\mathbf{W}(t)$ 很弱, 电场表现为 δ 函数的形式: $E(t) = \epsilon\delta(t)$. 将 $|\phi(t) = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle$ 代入 (3) 式 $O(\epsilon)$, 得到:

$$\begin{aligned} c_0(t) &= e^{i\frac{\Delta}{2}t}, \\ c_1(t) &= ie^{i\frac{\Delta}{2}t}\epsilon\mu_{10}\Theta(t). \end{aligned} \quad (4)$$

在与电磁场相互作用后, 密度矩阵的形式为

$$\rho(0^+) = \rho^{(0)} + \rho^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + i\epsilon \begin{pmatrix} 0 & -\mu_{10} \\ \mu_{10} & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

密度矩阵此后自由演化, 也就是

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \rho^{(0)} + \rho^{(1)} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + i\epsilon \begin{pmatrix} 0 & -\mu_{10}e^{i\Delta t} \\ \mu_{10}e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6)$$

从而得到任意时刻体系中电偶极矩的值:

$$\mu(t) = \text{Tr}(\rho(t)\boldsymbol{\mu}) = 2\epsilon\mu_{10}\sin(\Delta t). \quad (7)$$

由麦克斯韦方程知, 周期运动的电偶极矩产生其运动频率的电磁场, 因而 (7) 式是一可测量. 响应的强度与电偶极子的跃迁矩阵元和电场强度的乘积

成比例, Hamm 等^[19] 仔细讨论了不同体系电偶极矩的估计方法以及线性和非线性光谱实验需要的光场强度. 以上得出了线性响应理论的主要结果, 但与此同时, 物理图像在计算中并不清晰, 因而需要使用一套更恰当的描述方法.

从密度矩阵的刘维尔方程出发,

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[\mathbf{H}(t), \rho(t)]. \quad (8)$$

在相互作用绘景中, 密度矩阵表达为

$$\rho_I(t) = \mathcal{T}e^{-i\int_{t_0}^t \mathbf{W}_I(t_1)dt_1} \rho(t_0) \mathcal{T}e^{i\int_{t_0}^t \mathbf{W}_I(t_1)dt_1}, \quad (9)$$

式中下标 I 代表相互作用绘景. 将 (9) 式展开到电场的一阶, 得到:

$$\rho_I^{(1)}(t) = \int_{t_0}^t dt_1 E(t_1) [\boldsymbol{\mu}_I(t_1), \rho(t_0)]. \quad (10)$$

从而得到电偶极矩的时间演化:

$$\langle \mu(t) \rangle^{(1)} = \text{Tr}(\boldsymbol{\mu}_I(t) \rho_I^{(1)}(t)). \quad (11)$$

将电场的具体形式 $E(t) = \epsilon\delta(t)$ 代入 (11) 式再次得到 (7) 式, 这证明了两种描述方法的等价性. 更高阶的响应函数可以通过保留 (9) 式更高阶的项得到:

$$\begin{aligned} \rho_I^{(n)}(t) &= i^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n E(t_1) \cdots \\ &\quad E(t_n) [\boldsymbol{\mu}_I(t_n), [\boldsymbol{\mu}_I(t_{n-1}), [\boldsymbol{\mu}_I(t_1), \rho(t_0)]]]. \end{aligned} \quad (12)$$

因而, 电偶极矩的更高阶近似为

$$\langle \mu(t) \rangle^{(n)} = \text{Tr}(\boldsymbol{\mu}_I(t) \rho_I^{(n)}(t)). \quad (13)$$

2.2 刘维尔路径

2.1 节给出了线性和非线性响应的具体形式, 但仍然缺乏清晰的物理图像. 为此, 将 (13) 式展开并按项分析其中的物理含义. 首先, 以线性响应为例, 将 $\langle \mu(t) \rangle^{(1)}$ 分解为两项:

$$\begin{aligned} \langle \mu(t) \rangle^{(1)} &= i \int_{t_0}^t dt_1 E(t_1) \text{Tr}[\boldsymbol{\mu}_I(t) \boldsymbol{\mu}_I(t_1) \rho(t_0)] \\ &\quad - i \int_{t_0}^t dt_1 E(t_1) \text{Tr}[\rho(t_0) \boldsymbol{\mu}_I(t_1) \boldsymbol{\mu}_I(t)] \\ &= i \int_{t_0}^t dt_1 E(t_1) [R_1(t, t_1) - R_1^*(t, t_1)]. \end{aligned} \quad (14)$$

仍然假设体系初始处于基态, 即 $\rho(t_0) = |0\rangle\langle 0|$. $R_1(t, t_1)$ 代表密度矩阵的时间演化, 可以用如下刘维尔路径描述:

$$R_1(t, t_1) \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{\mu\rho} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{t-t_1} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{-i\Delta(t-t_1)} & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{\mu\rho} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle. \quad (15)$$

以上的刘维尔路径描述了这样的过程: 二能级体系在 t_1 时刻与电磁场相互作用, 密度矩阵由 $|0\rangle\langle 0|$ 激发到 $|1\rangle\langle 0|$, 而后在 H_0 下自由演化并积累相位因子, 最终测量过程使 $|1\rangle\langle 0|$ 重新回到 $|0\rangle\langle 0|$, 对该矩阵取迹即得到 $R_1(t, t_1)$ 的值. 时间上的自由演化贡献了刘维尔路径的相位, 最终的响应函数是所有刘维尔路径的求和 (图 1). Mukamel 等^[1] 将之类比为一种时间维度上的干涉行为. 这种分析方法优点在于演化过程的物理图像清晰, 可以容易地为体系添加衰减过程. 体系的衰减过程分为两种: 一种是激发态向基态自发弛豫, 其特征时间为 T_1 ; 另一种是体系的退相干过程, 其特征时间为 T_2 . 在加入这两种过程后, $R_1(t, t_1)$ 可以自然写作:

$$R_1(t, t_1) \left| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{\mu\rho} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{t-t_1} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{-i\Delta(t-t_1)-(t-t_1)/T_2} & 0 \end{pmatrix} \right\rangle \xrightarrow{\mu\rho} \left| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\rangle. \quad (16)$$

在考虑进衰减过程后, 线性响应的电偶极矩为

$$\langle \mu(t) \rangle^{(1)} = 2\epsilon\mu_{10} \sin(\Delta t) e^{-t/T_2}. \quad (17)$$

若系统是由激发能 Δ 各异的二能级体系组成的系综, 由 (17) 式知, 各二能级系统的电偶极矩正比于 $\sin(\Delta t)$, 因而大小不同、正负各异. 系综平均使电偶极矩互相抵消, 这种过程被称为“失相”. 例如, 假设 Δ 服从正态分布 $\Delta \sim (\Delta_0, \sigma^2)$, 电偶极矩在系综平均后得到:

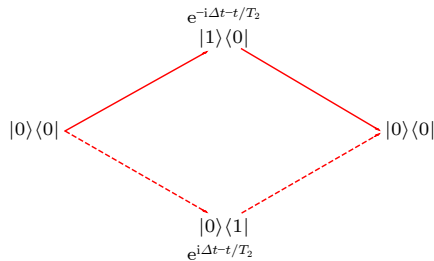


图 1 线性响应的刘维尔路径. R_1 对应的路径为图中的红色实线

Fig. 1. Liouville paths of linear response. R_1 is illustrated by the solid red line.

$$\overline{\langle \mu(t) \rangle^{(1)}}_{\Delta} \sim 2\epsilon\mu_{10} \sin(\Delta_0 t) e^{-t/T_2} e^{-\frac{\sigma^2 t^2}{2}}, \quad (18)$$

“失相”过程贡献了衰减因子 $e^{-\frac{\sigma^2 t^2}{2}}$.

以上的分析可以自然推广到非线性响应. 由于 (2) 式具有粒子空穴对称性, 因而二阶非线性响应为 0. 三阶非线性响应是领头阶的非线性响应. 由 (11) 式知, 体系的三阶非线性响应为

$$\langle \mu(t) \rangle^{(3)} = -i \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 E(t_1) E(t_2) E(t_3) \times \text{Tr}(\mu_1(t) [\mu_1(t_1), [\mu_1(t_2), [\mu_1(t_3), \rho_0]]]). \quad (19)$$

考虑图 2 所示的脉冲序列, $E(t) = \epsilon_1 \delta(t) + \epsilon_2 \delta(t - t_1) + \epsilon_3 \delta(t - t_1 - t_2)$. 扣除 (19) 式中体系仅与一个脉冲和两个脉冲相互作用的部分从而保留体系与 3 个光脉冲都相互作用的部分. 用 $\mu_{\text{NL}}^{(3)}$ 代表这部分贡献.

$$\mu_{\text{NL}}^{(3)} = i^3 \epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3 \text{Tr}(\mu_1(t_1 + t_2 + t_3) [\mu_1(t_1 + t_2), [\mu_1(t_1), [\mu_1(0), \rho_0]]]) = \epsilon_1 \epsilon_2 \epsilon_3 \chi^{(3)}(t_1, t_2, t_3), \quad (20)$$

其中

$$\chi^{(3)}(t_1, t_2, t_3) = i^3 \theta(t_3) \theta(t_2) \theta(t_1) \text{Tr}(\mu_1(t_1 + t_2 + t_3) [\mu_1(t_1 + t_2), [\mu_1(t_1), [\mu_1(0), \rho_0]]]),$$

式中取迹的部分可以展开成 8 项, 每一项分别代表一条刘维尔路径:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(\mu_3 [\mu_2, [\mu_1, [\mu_0, \rho_0]]]) = \\ & \text{Tr}(\mu_3 \mu_1 \rho_0 \mu_0 \mu_2) - \text{Tr}(\mu_2 \mu_0 \rho_0 \mu_1 \mu_3) + \rightarrow R_1 - R_1^* \\ & \text{Tr}(\mu_3 \mu_2 \rho_0 \mu_0 \mu_1) - \text{Tr}(\mu_1 \mu_0 \rho_0 \mu_2 \mu_3) + \rightarrow R_2 - R_2^* \\ & \text{Tr}(\mu_3 \mu_0 \rho_0 \mu_1 \mu_2) - \text{Tr}(\mu_2 \mu_1 \rho_0 \mu_0 \mu_3) + \rightarrow R_4 - R_4^* \\ & \text{Tr}(\mu_3 \mu_2 \mu_1 \mu_0 \rho_0) - \text{Tr}(\rho_0 \mu_0 \mu_1 \mu_2 \mu_3) \rightarrow R_5 - R_5^*, \end{aligned} \quad (21)$$

其中, $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \mu_3$ 分别是 $\mu_1(0), \mu_1(t_1), \mu_1(t_1 + t_2), \mu_1(t_1 + t_2 + t_3)$ 的简写. 不失一般性, 在这里仅给出 R_1 的分析过程:

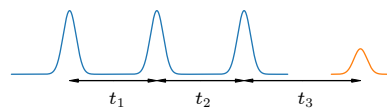


图 2 一个典型的脉冲序列

Fig. 2. A prototypical pulse sequence.

$$\begin{aligned}
 &|0\rangle\langle 0| \xrightarrow{\rho\mu_0} |0\rangle\langle 1| \xrightarrow{t_1} |0\rangle\langle 1| e^{i\Delta t_1 - t_1/T_2} \xrightarrow{\mu_1\rho} \\
 &|1\rangle\langle 1| e^{i\Delta t_1 - t_1/T_2} \xrightarrow{t_2} |1\rangle\langle 1| e^{i\Delta t_1 - t_1/T_2} e^{-t_2/T_1} \\
 &\xrightarrow{\rho\mu_2} |1\rangle\langle 0| e^{i\Delta t_1 - t_1/T_2} e^{-t_2/T_1} \xrightarrow{t_3} \\
 &|1\rangle\langle 0| e^{i\Delta(t_1-t_3) - (t_1+t_3)/T_2} e^{-t_2/T_1} \xrightarrow{\mu_3\rho} \\
 &|0\rangle\langle 0| e^{i\Delta(t_1-t_3) - (t_1+t_3)/T_2} e^{-t_2/T_1}. \quad (22)
 \end{aligned}$$

沿用线性光谱的分析方法, 以上刘维尔路径 (图 3) 可做如下解释.

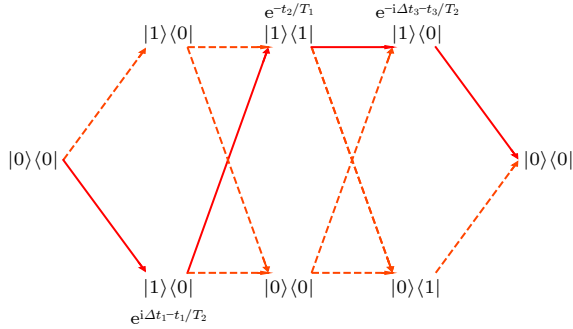


图 3 非线性响应的刘维尔路径. R_1 由图中红色实线表示
Fig. 3. Liouville paths of non-linear response. R_1 is illustrated by the solid red line.

体系在 0 时刻与电磁场相互作用, 由基态 $|0\rangle\langle 0|$ 激发到 $|0\rangle\langle 1|$, 此后在 H_0 作用下自由演化积累相位 $e^{i\Delta t_1}$ 并由此产生失相, 同时退相干过程引入一衰减因子 e^{-t_1/T_2} . 在 t_1 时刻, 体系再次与电磁场相互作用并被激发到激发态 $|1\rangle\langle 1|$. 而后在激发态下演化, 并由于体系弛豫引进一个衰减因子 e^{-t_2/T_1} . 在 $t_1 + t_2$ 时刻体系与电磁场相互作用, 密度矩阵由 $|1\rangle\langle 1|$ 转变为 $|1\rangle\langle 0|$. 之后自由演化, 积累一个与失相过程符号相反的相位 $e^{-i\Delta t_3}$, 此过程又被称为回相过程. 与此同时, 退相干过程产生另一个衰减因子 e^{-t_3/T_2} . 当 $t_1 = t_3$ 时, 失相与回相的相位完全抵消, 因而由失相引起的信号衰减现象被移除, 这个效应又被称为“光子回波”. 最终体系在 $t_1 + t_2 + t_3$ 时刻被测量, 再次回到基态. 这里的“光子回波”与 Hahn^[20] 首先提出并由 Carr 和 Purcell^[21] 改进的“自旋回波”过程类似, 由 Abella 等^[22] 首次观测到. 综合以上可得:

$$R_1 \propto \langle e^{i\Delta(t_1-t_3)} \rangle_{\Delta} e^{-(t_1+t_3)/T_2} e^{-t_2/T_1}, \quad (23)$$

其中 $\langle \cdots \rangle_{\Delta}$ 代表对整个系综做平均. 其他各项均可以通过这种方法得到:

$$\begin{aligned}
 R_2 &\propto \langle e^{i\Delta(t_1-t_3)} \rangle_{\Delta} e^{-(t_1+t_3)/T_2}, \\
 R_4 &\propto \langle e^{-i\Delta(t_1+t_3)} \rangle_{\Delta} e^{-(t_1+t_3)/T_2} e^{-t_2/T_1}, \\
 R_5 &\propto \langle e^{-i\Delta(t_1+t_3)} \rangle_{\Delta} e^{-(t_1+t_3)/T_2}. \quad (24)
 \end{aligned}$$

因为三阶非线性响应有 3 个时间指标, 可以选取任意两个进行二维相干光谱研究. 由 (23) 式和 (24) 式可知, 不同的衰减过程对应于不同的时间指标. 退相干引起的信号衰减正比于 $t_1 + t_3$, 自发弛豫带来的信号衰减正比于 t_2 , 失相带来的信号衰减正比于 $|t_1 - t_3|$. 通过选取特定的时间通道, 可以得到不同物理过程的特征时间. 与之相比, 线性光谱无法将 3 种物理过程区分开. 除此之外, 也可以采用双边费曼图的办法来分析非线性响应过程, 具体可参见文献 [1, 2].

作为回顾, 本部分主要介绍了非线性响应理论, 并通过分析刘维尔路径将响应函数中的时间变量与不同的物理过程联系起来. 下面两部分将介绍这些分析技巧在具体例子中的应用.

3 一维横场伊辛模型的二维相干光谱^[13]

Wan 等^[13] 考虑了一个典型的强关联体系——一维横场伊辛模型^[23]. 其哈密顿量为

$$H_0 = -J \left(\sum_n^{L-1} \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \eta \sigma_L^z \sigma_1^z \right) - h \sum_n \sigma_n^x, \quad (25)$$

其中, $\sigma_n^{x,y,z}$ 是泡利矩阵; $J > 0$ 是铁磁相互作用; $h > 0$ 是横场强度; L 是自旋链长度; $\eta = 1$ 代表周期边界条件, $\eta = 0$ 代表开放边界条件. 横场伊辛模型的基态有两个相, 作者考虑了铁磁相的行为. 利用约当-维格纳变换和玻戈留波夫变换等技巧, (25) 式中的哈密顿量能够用安德森准自旋^[24] 写成二能级系综的形式:

$$H_0 = \sum_{k>0} \lambda_k \tau_k^z, \quad (26)$$

式中 $\lambda_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}$, 其中

$$\epsilon_k = -2J \cos k - 2h, \quad \Delta_k = -2J \sin k.$$

为了与 (25) 式中的 σ^z 区分开, 在这里使用 τ^z 代表泡利矩阵. x 方向的总磁矩在安德森准自旋表象下表达为

$$M^x = \sum_{k>0} m_k^x = \sum_{k>0} \cos \theta_k \tau_k^z + \sin \theta_k \tau_k^y, \quad (27)$$

其中 $\sin \theta_k = \Delta_k / \lambda_k$. 若体系与 x 方向偏振的光脉

冲耦合, 那么哈密顿量写作

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0 - B(t)M^x \\ &= \sum_{k>0} \lambda_k \tau_k^z - B(t)(\cos \theta_k \tau_k^z + \sin \theta_k \tau_k^y). \end{aligned} \quad (28)$$

由于不同动量的安德森准自旋的算符之间互相对易, 因而描述不同动量的二能级体系互相独立. 该模型是二能级体系的系综, 这也正是第 2 节中考虑的情形. 但要注意, 在第 2 节中偶极子算符仅有非对角元, 与之相比, m_k^x 既有非对角元也有对角元. 但这种不同只增加了刘维尔路径的数量, 第 2 节中的分析方法仍然适用.

沿着这样的分析, 详细计算线性响应、二阶非线性响应以及三阶非线性响应等各阶响应函数. 线性响应的结果为

$$\chi_{xx}^{(1)}(t) = \frac{2\theta(t)}{L} \sum_{k>0} \sin^2 \theta_k e^{-t/T_2} \sin(2\lambda_k t), \quad (29)$$

退相干衰减与失相导致的衰减都与 t 有关, 因而无法被区分. 在频率空间, 线性谱描述了不同动量“自旋子”的连续谱, 而体系退相干时间的信息都隐藏在连续谱内 (图 4(a) 和图 4(f)).

由于 (28) 式不具有粒子-空穴对称性, 因而二阶非线性响应非零, 其具体形式为

$$\begin{aligned} \chi_{xxx}^{(2)}(t, t+\tau) &= \frac{4\theta(t)\theta(\tau)}{L} \sum_{k>0} \sin^2 \theta_k \cos \theta_k \{e^{-t/T_1} \cos(2\lambda_k \tau) \\ &\quad - e^{-(t+\tau)/T_2} \cos[2\lambda_k(\tau+t)]\}, \end{aligned} \quad (30)$$

其中右侧第一项不随 τ 演化. 在频域空间, 这对应于 $w_t = 0$ 并沿 w_τ 方向分布的条带 (图 4(b)). 条带随着 T_1 的减小而增宽, 因而可以用来表征体系的弛豫时间. 右侧第二项随着 $t+\tau$ 振荡, 这说明体系经历失相过程, 由此带来的衰减与退相干引起的衰减混合在一起无法区分, 在频域空间对应于第一象限弥散的信号 (图 4(g)).

三阶非线性响应函数荷载更多信息. 对于图 5(a) 表示的脉冲序列, 非线性响应函数表达为

$$\begin{aligned} \chi_{xxxx}^{(3)}(t_3, t_3+t_2, t_3+t_2+t_1) &= \\ &= -\frac{\theta(t_3)\theta(t_2)\theta(t_1)}{L} \sum_{k>0} A_k^{(1)} + A_k^{(2)} + A_k^{(3)} + A_k^{(4)}, \end{aligned} \quad (31)$$

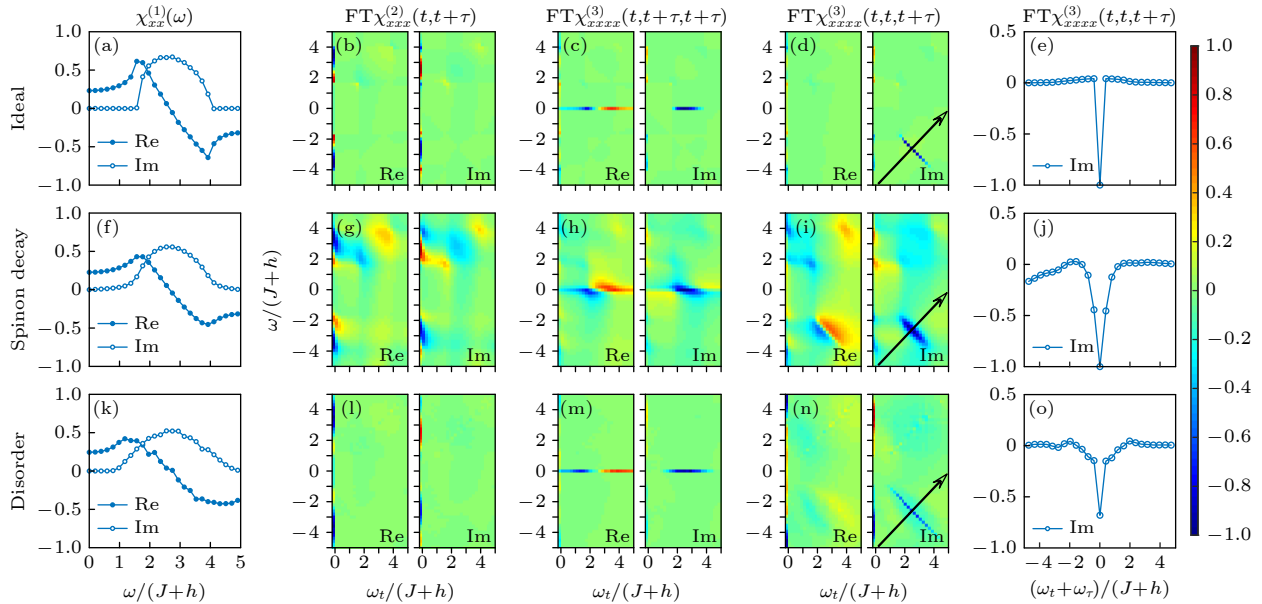


图 4 横场伊辛模型铁磁相 $[h/(h+J) = 0.3]$ 的一维和二维光谱. 从上到下, (a)–(e) 无耗散的结果 ($1/T_{1,2} = 0$); (f)–(j) 有耗散的结果 ($1/T_{1,2} = 0.2(J+h)$); (k)–(o) 添加无序后的结果. 从左到右, 每列分别是 $\chi_{xx}^{(1)}(\omega)$, 以及 $\chi_{xxx}^{(2)}(t, t+\tau)$, $\chi_{xxx}^{(3)}(t, t+\tau, t+\tau)$, $\chi_{xxxx}^{(3)}(t, t+\tau, t+\tau)$ 的傅里叶变换, 以及沿着黑色箭头方向的信号轮廓 (本图来自文献 [13])

Fig. 4. One dimensional (1D) and two dimensional (2D) spectra in the FM phase $[h/(h+J) = 0.3]$ of the TFIC. From the top to bottom, the rows show (a)–(e) the case with no dissipation ($1/T_{1,2} = 0$), (f)–(j) with dissipation ($1/T_{1,2} = 0.2(J+h)$), and (k)–(o) with quenched disorder. From the left to right, the columns show, respectively, $\chi_{xx}^{(1)}(\omega)$, and the FTs of $\chi_{xxx}^{(2)}(t, t+\tau)$, $\chi_{xxx}^{(3)}(t, t+\tau, t+\tau)$, $\chi_{xxxx}^{(3)}(t, t+\tau, t+\tau)$, and its profile along a cut indicated by the black arrow. (This figure is reprinted from ref. [13]).

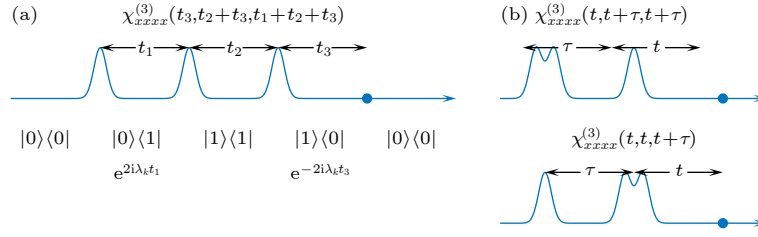


图 5 脉冲序列 (a) $\chi_{xxxx}^{(3)}(t_3, t_3 + t_2, t_3 + t_2 + t_1)$ 对应的三脉冲过程以及“自旋子”回波过程 $A_k^{(4)}$ 对应的刘维尔路径; (b) 作为三脉冲极限的两脉冲序列下的三阶响应 $\chi^{(3)}$ (本图来自文献 [13])

Fig. 5. Pulse sequences: (a) Three-pulse process associated with $\chi_{xxxx}^{(3)}(t_3, t_3 + t_2, t_3 + t_2 + t_1)$. The spinon echo process that produces the rephasing signal $A_k^{(4)}$ is also shown. (b) The $\chi^{(3)}$ terms measured in the two-pulse setup are special limits of the three-pulse process. (This figure is reprinted from ref. [13]).

其中

$$\begin{aligned} A_k^{(1)} &= 8 \sin^2 \theta_k \cos^2 \theta_k \sin[2\lambda_k(t_3 + t_2 + t_1)] \\ &\quad \times e^{-(t_3+t_2+t_1)/T_2}, \\ A_k^{(2)} &= -8 \sin^2 \theta_k \cos^2 \theta_k \sin[2\lambda_k(t_1 + t_2)] \\ &\quad \times e^{-(t_1+t_2)/T_2} e^{-t_3/T_1}, \\ A_k^{(3)} &= 4 \sin^4 \theta_k \sin[2\lambda_k(t_3 + t_1)] \\ &\quad \times e^{-(t_3+t_1)/T_2} e^{-t_2/T_1}, \\ A_k^{(4)} &= 4 \sin^4 \theta_k \sin[2\lambda_k(t_3 - t_1)] \\ &\quad \times e^{-(t_3+t_1)/T_2} e^{-t_2/T_1}. \end{aligned} \quad (32)$$

Wan 等将刘维尔路径分为 4 类, 前 3 类中相因子没有抵消, 所描述的刘维尔路径中没有回波过程. 与之相比, 第 4 类中与 t 和 τ 相关的相因子符号相反, 互相抵消, 说明相应的刘维尔路径中存在回波过程. 当 $t = \tau$ 时, 失相和回相过程产生的相位完全抵消, 这是第 2 节中提及的“光子回波”过程. 由于体系中的准激发是自旋子, 因而文献 [13] 中又称之为“自旋子”回波.

“光子回波”能够敏感地探测体系中的耗散效应. 考虑一特殊的时间通道 $\chi_{xxxx}^{(3)}(t, t, t + \tau)$, 对应于 $t_3 \rightarrow t$, $t_2 \rightarrow 0$, $t_1 \rightarrow \tau$ (图 5(b)). 在此时间通道中, 第 4 类刘维尔路径存在回波过程, 所以在频谱上位于第二、四象限, 而其他 3 类刘维尔路径均处于一、三象限或坐标轴附近. 如此一来, 二维相干光谱将“自旋子回波”同其他信号独立出来. 进一步地, 这种回波信号可以将退相干与失相引起的衰减区分开. 具体来说, 在频谱中, 尖锐的峰分布在频谱的第四象限的对角线并组成一条条带, 这是回波信号的重要特征. 在不引入退相干过程时, 这些峰沿反对角线方向的峰宽为零 (图 4(d) 和图 4(e)). 在加入退相干过程后, 反对角线的峰出现展宽

(图 4(i) 和图 4(j)), 并且展宽与退相干过程的特征时间 T_2 有关. 与之相比, 其他时间通道并不包含回波信号. 比如考虑 $\chi_{xxxx}^{(3)}(t, t + \tau, t + \tau)$ (图 5(b)), 此时第 3 类和第 4 类刘维尔路径的相因子只和 t 有关. 在二维相干光谱中, 对应的信号呈分布在 $\omega_\tau = 0$ 的一条条带. 在不引入激发态向基态弛豫过程时, 该条带沿 ω_τ 方向峰宽为 0 (图 4(c)). 在引入这样的过程后, 沿 ω_τ 方向出现展宽 (图 4(h)), 并且展宽与弛豫时间 T_1 有关. 这些结果再一次印证了 (23) 式和 (24) 式后的分析.

除此之外, Wan 等还讨论了系统无序对结果的影响, 作者将相互作用常数 J 和横场 h 设置为位置相关 J_n 和 h_n , 并假定其满足正态分布. 由于模型仍然可积, “自旋子”依然是体系的严格本征态, 因而二维相干光谱中回波信号的反对角线方向宽度为零 (图 4(m)—图 4(o)). 这说明这种无序不影响二维相干光谱的主要结构, 无法为体系引入耗散过程.

4 拉廷格液体的二维相干光谱 [18]

第 3 节讨论了一个有能隙的强关联体系, 但本质上该模型可以映射为二能级体系系综, 进而使用双边费曼图等技巧进行分析. 这样的体系在本质上并未脱离针对分子体系的非线性光谱的分析框架. 为了讨论更一般的情形, Li 等 [18] 考虑了 $S = 1/2$ 的 XXZ 模型 (图 6(a),(b)), 这一模型在某些参数空间的激发是无能隙的, 自然不能简化为二能级体系系综:

$$\begin{aligned} H &= \sum_j \frac{J_\perp}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + \text{H.c.}) \\ &\quad + J_z S_j^z S_{j+1}^z - B S_j^z, \end{aligned} \quad (33)$$

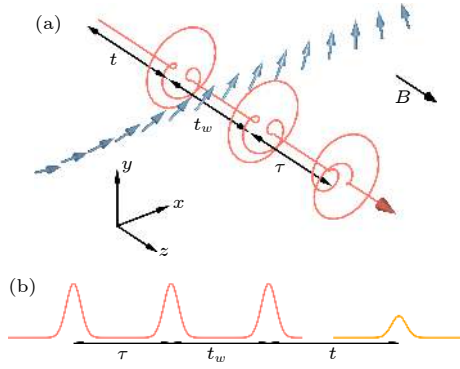


图6 (a) 法拉第构型示意图. 磁场沿 z 方向. 3 个圆偏振短光脉冲通过自旋模型, 传播方向平行于 z 方向. 第 1 个光脉冲为右旋偏振, 第 2 和第 3 个光脉冲为左旋偏振. 第 1 和第 2 个光脉冲的时间间隔为 τ , 第 2 和第 3 个光脉冲的时间间隔为 t_w , 第三个光脉冲和测量时间的间隔为 t . (b) $t \approx \tau$ 时, 光子回波信号出现 (本图来自文献 [18])

Fig. 6. (a) The Faraday configuration. A magnetic field B is applied in the z axis. Three short electromagnetic pulses with circular polarizations pass through the $S = 1/2$ spin chain. The propagation direction is parallel with the spin z axis. The first pulse is right-handed, whereas the second and the third are left-handed. The time delay between the first and the second pulse is denoted by τ , the second and the third by t_w , and the third pulse and the time of detection by t . (b) When $t \approx \tau$, photon echo appears. (This figure is reprinted from ref. [18]).

其中 $J_{\perp}$ 是自旋 xy 平面内的交换相互作用, J_z 为 z 方向的交换相互作用. 此外, 还考虑了外磁场导致的塞曼项 $-BS_j^z$. z 方向的总磁矩在海森伯表象中不随时间演化, 因而仅考虑 xy 平面内的磁学响应. 这种构型在实验上也被称为法拉第构型 [25]. 模型的 $U(1)$ 对称性决定其不存在二阶响应, 因而领头阶非线性响应为三阶非线性响应. 将参与相互作用的电磁波按照其偏振展开, 体系的对称性允许有 6 种三阶响应函数: $\chi_{+-+}^{(3)}$, $\chi_{++-}^{(3)}$, $\chi_{+--}^{(3)}$, 其中 $+$ ($-$) 代表右旋 (左旋) 圆偏振光, 以及三者的复共轭 $\chi_{-++}^{(3)}$, $\chi_{--+}^{(3)}$, $\chi_{-+-}^{(3)}$. Li 等 [18] 发现 $\chi_{+--}^{(3)}$, $\chi_{-+-}^{(3)}$ 由于存在“光子回波”而蕴含更多信息, 因而他们集中讨论 $\chi_{+--}^{(3)}$ 的相关特征. 由于电磁波波长远大于格点间距, 可以认为自旋与空间上的均匀磁场相互作用. 综合以上, $\chi_{+--}^{(3)}$ 具体表达为

$$\chi_{+--}^{(3)}(t, t_w, \tau) = \int dx_1 \int dx_2 \int dx_3 \tilde{\chi}_{+--}^{(3)}(t_1 = t, x_1; t_2 = t + t_w, x_2; t_3 = t + t_w + \tau, x_3). \quad (34)$$

$\tilde{\chi}_{+--}^{(3)}$ 是时空分辨的三阶响应函数, 其形式为

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{+--}^{(3)}(1, 2, 3) = & i^3 \Theta(t_1) \Theta(t_2 - t_1) \Theta(t_3 - t_2) \\ & \times \left\langle \left[[S^+(0), S^-(-1)], S^-(-2) \right], S^+(-3) \right\rangle, \end{aligned} \quad (35)$$

其中 $0, -1, -2, -3$ 是时空坐标 $(0, 0), (-t_1, -x_1), (-t_2, -x_2), (-t_3, -x_3)$ 的简写. 为了得到 (35) 式的表达式, 首先利用约当-维格纳变换将 XXZ 模型映射为费米子模型 [26]. 在费米子的表象下, 自旋算符 $S_j^{\pm}$ 不是局域算符, 因而 (35) 式仍难得到封闭表达式. 在自旋液体相, 进一步将费米子模型玻色化 [27–30], 忽略掉模型中重整化群意义下的无关项后, 玻色子哈密顿量由拉廷格自旋液体描述:

$$H = \frac{v}{2\pi} \int \left[\frac{1}{K} (\nabla \phi)^2 + K (\nabla \theta)^2 \right] dx, \quad (36)$$

其中的费米速度 v 和拉廷格参数 K 由模型的微观参数 $J_{\perp}, J_z$ 以及外磁场 B 共同决定. 场算符的对易关系为

$$[\phi(x), \theta(y)] = -i\pi \Theta(x - y). \quad (37)$$

哈密顿量同样可以通过手征玻色场表达:

$$H = \frac{v}{4\pi} \int dx (\nabla \phi_L)^2 + (\nabla \phi_R)^2, \quad (38)$$

其中手征玻色场定义为

$$\phi_L = \sqrt{K} \theta + \frac{1}{\sqrt{K}} \phi; \quad \phi_R = \sqrt{K} \theta - \frac{1}{\sqrt{K}} \phi. \quad (39)$$

ϕ_L 仅是 $x^+ = vt + x$ 的函数, ϕ_R 仅是 $x^- = vt - x$ 的函数.

在玻色子的表象下, 自旋算符 $S_j^{\pm}$ 由一类特殊的顶点算子表达:

$$S_j^{\pm} = \begin{cases} e^{i\theta(x)}, & J_{\perp} < 0, \\ e^{i\theta(x)} \cos(2\phi(x) - 2\pi m x), & J_{\perp} > 0, \end{cases} \quad (40)$$

其中 m 是由外磁场 B 诱导的磁密度, x 是格点 j 的空间坐标. 注意到在铁磁情形下, 自旋算符在玻色场表象中与磁化密度无关, 因而沿 z 方向的外场不改变铁磁二维相干光谱的行为. 与之相比, 反铁磁情形的自旋算符在玻色场表象下与磁化密度有关, 哈密顿量中的塞曼项会明显改变反铁磁二维相干光谱的行为.

将 (40) 式代入 (35) 式中, 利用场论的相关技巧, 得到 (35) 式的具体表达式. 将结果代入 (34) 式并作适当近似, 得到三阶响应函数 $\chi_{+--}^{(3)}(t, t_w, \tau)$ 的渐近形式. 对于铁磁情形, 他们发现 $\chi_{+--}^{(3)}(t, t_w, \tau)$ 的渐近形式为

$$\chi_{+--+}^{(3)} \sim \begin{cases} (\tau - t)e^{-\frac{\pi T(t-\tau)}{2K}}, & t \ll \tau, \\ -(t - \tau)^3 e^{-\frac{\pi T(\tau-t)}{2K}}, & t \gg \tau. \end{cases} \quad (41)$$

(41) 式说明 $\chi_{+--+}^{(3)}(t, t_w, \tau)$ 仅是 $t - \tau$ 的函数, 这是回波信号的表现. 考虑到解析结果只适用于三阶响应函数的渐近行为, Li 等同时使用数值积分求解了 (35) 式. 在固定 t_w 的前提下, 保留 t 和 τ 为时间变量, 并将结果表达为 (图 7(a)—图 7(c)) 中的二维光谱. Li 等发现铁磁的 $\chi^{(3)}$ 是实的, 并且时域和频域的结果都说明 $\chi_{+--+}^{(3)}$ 中存在回波信号. 反铁磁的渐近行为也表明反铁磁 $\chi_{+--+}^{(3)}(t, t_w, \tau)$ 中存在回波信号.

$$\chi_{+--+}^{(3)} \sim e^{-2\pi i m u(t-\tau)} \times \begin{cases} (e^{-\pi(\Delta-2)T(t-\tau)}), & t \ll \tau, \\ (t - \tau)e^{-\pi(\Delta-2)T(\tau-t)}, & t \gg \tau, \end{cases} \quad (42)$$

其中, $\Delta = 2K + 1/(2K)$. 相比铁磁情形, 反铁磁 $\chi^{(3)}$ 在时域是复的, 这是因为磁化密度影响了自旋算符在玻色场中的表达. 同样, 数值积分的结果再一次确认了回波信号的存在 (图 8(a)—图 8(d)). 与横场伊辛模型不同, XXZ 模型不能写成二能级系综的形式, 因而二维相干光谱中的回波信号需要其他解释.

按照玻色化方法, 磁化密度算符写作:

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi} \nabla \phi(x). \quad (43)$$

由基本的对易关系 (37) 式以及手征玻色场定义

可知:

$$[\rho(x), \phi_L(y)] = [\rho(x), \phi_R(y)] = i\sqrt{K}\delta(x-y). \quad (44)$$

因而 $e^{-iQ_L\phi_L(y)/\sqrt{K}}$ 在 y 处激发一磁荷为 Q_L 的左行准激发, $e^{-iQ_R\phi_R(y)/\sqrt{K}}$ 在 y 处激发一磁荷为 Q_R 的右行准激发. 在铁磁情形中, 自旋升算符用手征场表达为

$$\begin{aligned} S_j^+(t) &= e^{-i\theta(x,t)} = e^{-i\theta_L(x+vt) - i\theta_R(x-vt)} \\ &= e^{-i\frac{1}{2}\phi_L(x+vt)/\sqrt{K}} e^{-i\frac{1}{2}\phi_R(x-vt)/\sqrt{K}}, \end{aligned} \quad (45)$$

其中 θ_L 定义为 $\frac{1}{2}\phi_L/\sqrt{K}$, θ_R 定义为 $\frac{1}{2}\phi_R/\sqrt{K}$. 自旋升算符的作用是在 $x + vt$ 和 $x - vt$ 处分别激发一个携带 $1/2$ 磁荷的左行和右行准激发. 这样的准激发按照其磁荷被命名为“自旋子”. $S_j^-(t)$ 的作用与之类似, 不同在于 $S_j^-(t)$ 激发的准激发携带 $-1/2$ 的磁荷, 因而是“反自旋子”. 因为 $e^{-i\theta_{L/R}(x)} e^{i\theta_{L/R}(x)} = 1$, 所以“自旋子”和“反自旋子”路径重叠时互相抵消. 我们不妨将这样的图像首先应用于线性响应的分析. 以线性响应中一条刘维尔路径为例:

$$\begin{aligned} R &\sim \langle S^-(0) S^+(-1) \rangle \\ &= \langle e^{i\theta_L(0,0)} e^{i\theta_R(0,0)} e^{-i\theta_L(-x_1-vt_1)} e^{-i\theta_R(-x_1+vt_1)} \rangle \\ &\sim \left| \frac{\sinh(\pi T x_1^+)}{\pi T \epsilon} \right|^{-\frac{1}{4K}} \left| \frac{\sinh(\pi T x_1^-)}{\pi T \epsilon} \right|^{-\frac{1}{4K}}. \end{aligned} \quad (46)$$

该刘维尔路径用“自旋子”产生湮灭图像理解如下: 首先在 $(-x_1, -t_1)$ 由 $S^+(-1)$ 产生一对“自旋子”, 在演化时间 t 后, 这对“自旋子”在空间的位置分别为 $-x_1 - vt_1$ (左行) 以及 $-x_1 + vt_1$ (右行). 在 0 时刻,

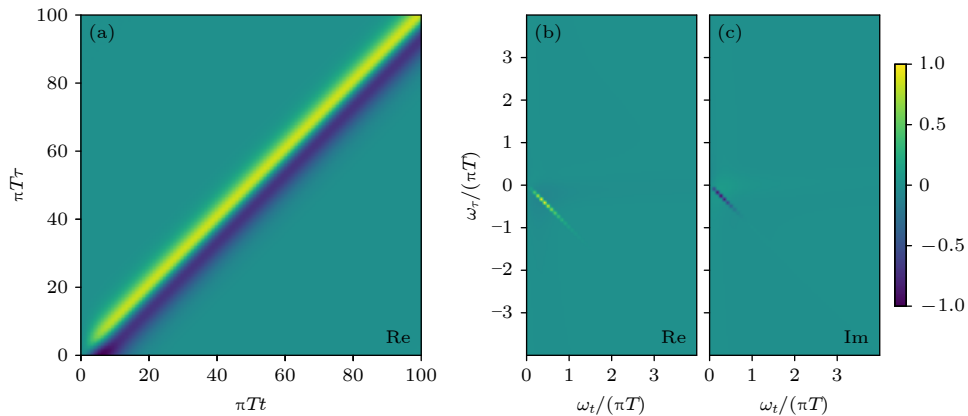


图 7 (a) 以 $\pi T t, \pi T \tau$ 为自变量, 铁磁链的三阶非线性响应 $\chi_{+--+}^{(3)}$. 固定 $\pi T t_w = 1$, 拉廷格参数 $K = 1$. (b), (c) 分别是图 (a) 中数据傅里叶变换后二维光谱的实部和虚部 (本图来自文献 [18])

Fig. 7. (a) Nonlinear magnetic susceptibility $\chi_{+--+}^{(3)}$ of a ferromagnetic chain as function of $\pi T t$ and $\pi T \tau$. The waiting time $\pi T t_w = 1$. The Luttinger parameter is $K = 1$. (b), (c) The real and imaginary parts of two dimensional spectrum, obtained by Fourier transforming the data of panel (a). (This figure is reprinted from Ref. [18]).

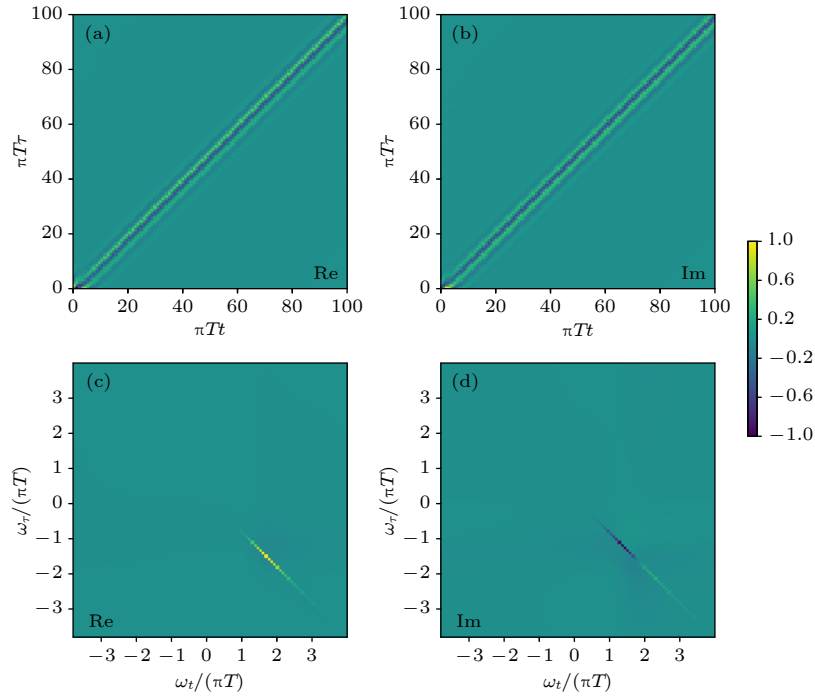


图 8 (a), (b) 以 πTt , $\pi T\tau$ 为自变量, 反铁磁链的三阶非线性响应 $\chi_{+--+}^{(3)}$ 的实部和虚部. 固定 $\pi Tt_w = 1$, 拉廷格参数 $K = 1$, 磁化密度 $2mu/T = 1.15$. (c), (d) 分别是二维相干光谱的实部和虚部 (本图来自文献 [18])

Fig. 8. (a), (b) The real and imaginary parts of Nonlinear magnetic susceptibility $\chi_{+--+}^{(3)}$ of an antiferromagnetic chain as function of πTt and $\pi T\tau$. The waiting time $\pi Tt_w = 1$. The Luttinger parameter is $K = 1$. The magnetization density $2mu/T = 1.15$. (c), (d) The real and imaginary parts of the two-dimensional spectrum. (This figure is reprinted from Ref. [18]).

在原点位置由 $S^-(0)$ 产生一对反自旋子. 如图 7(a), “自旋子”与“反自旋子”无法互相抵消, 并且“自旋子”与“反自旋子”的距离随 t_1 增加而增大, 初态演化后与末态的交叠积分减小, 因而该刘维尔路径随 t_1 衰减.

对于三阶非线性响应 $\chi_{+--+}^{(3)}$, 仍以一条刘维尔路径为例, $R_1 \sim \langle S^+(0)S^-(-1)S^-(-2)S^+(-3) \rangle$. 在 $(0, 0)$ 和 $(-x_3, -t_3)$ 处分别激发一对“自旋子”, 在 $(-x_1, -t_1)$ 和 $(-x_2, -t_2)$ 处分别激发一对“反自旋子”. 与线性响应不同, 在满足回波条件 $t = \tau$ 时, 当自旋算符的时空坐标满足:

$$x_1 = v\tau; \quad x_2 = -v(\tau + t_w); \quad x_3 = -vt_w. \quad (47)$$

刘维尔路径中产生的“自旋子”与“反自旋子”全部抵消掉 (图 9(c)), 所以这一刘维尔路径不随 t 衰减. Li 等将这一过程命名为“透镜效应”, 这一效应正是回波信号的起源. Li 等进一步检验了这一物理图像, 发现“透镜效应”对应的路径对响应函数贡献最大 (图 9(d)). 反铁磁也可做同样分析, 与铁磁不同, S_j^+ 产生一对“自旋子”和一对“劳弗林 (Laughlin) 准粒子”[31]. “透镜效应”在反铁磁情形中依然存在, 因而二维相干光谱中依然有回波信号.

当玻色场存在色散时, 空间中的“自旋子”波包

随时间扩散开. “透镜效应”说明, 波包扩散导致“光子回波”衰减. 具体来说, τ 很大时, 由 $S^+(-3)$ 产生的左行自旋子的波包在 $-t_2$ 时刻会非常平坦. 这一扩散开的波包无法与由 $S^-(-2)$ 产生的左行反自旋子互相抵消. 这使得“透镜效应”不再完美, 从而导致“光子回波”信号的衰减. 联系第 2 节的讨论, 热弛豫引起的信号衰减仅与 t_w 有关, 而色散引起的“光子回波”衰减仅与 t 和 τ 有关. 二维相干光谱将两种衰减方式区分开来.

我们已经注意到回波现象对于研究强关联电子体系的重要作用. 按照 Mukamel^[1] 的物理图像, 二维相干光谱中的回波信号来源于不同刘维尔路径的时间维的干涉作用. “透镜效应”将这一图像进一步发展. 回波现象实际上描述了准激发的波包之间的时空干涉作用. 由电磁场激发的准激发以波包的形式在空间运动, 不同波包之间互相干涉. 当满足干涉最大条件时 (准激发的波包完全重叠), 二维相干光谱对应的响应强度最大. 这一图像自然解释了 XXZ 模型中的回波现象并预言了色散对回波的影响. 这种色散导致回波衰减的效应难以被传统的分析方法如双边费曼图所描述, 因而这种新图像涵盖了更多物理内容.

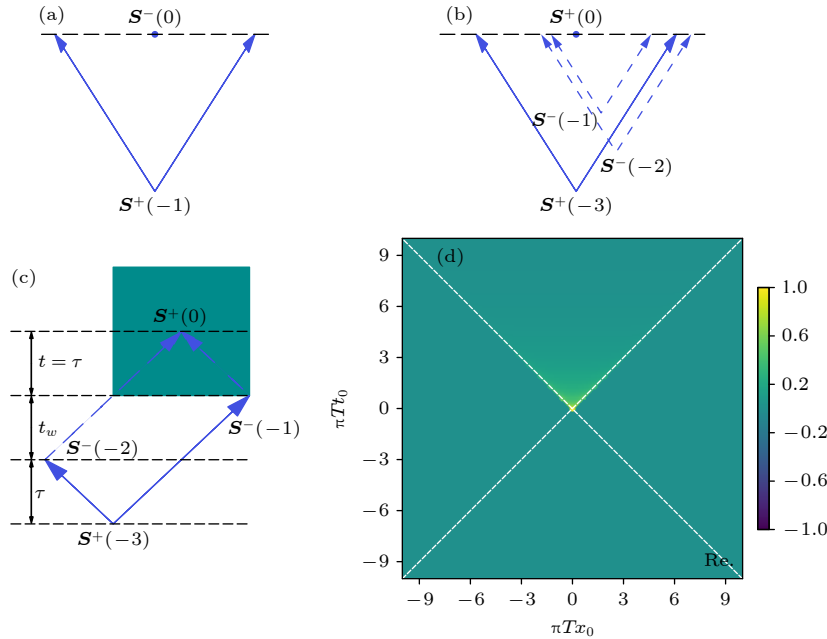


图 9 (a) 两点关联函数中的“自旋子”产生湮灭过程. 实线代表“自旋子”的动力学过程. 虚线代表“反自旋子”的动力学过程. (b) 四点关联函数中的“自旋子”产生湮灭过程. (c) 四点关联函数中的“透镜效应”构型. (d) $\hat{\chi}_{+-+}^{(3)}$ 在图 (c) 阴影部分的行为 (本图来自文献 [18])

Fig. 9. (a) The spinon creation/annihilation process in two-point correlation function. Solid and dashed lines represent dynamical processes of spinon and antispinon respectively. (b) The spinon creation/annihilation process in four-point correlation function. (c) The “Lensing” configuration in four-point correlation function. (d) The behavior of the shaded area in panel (c). (This figure is reprinted from ref. [18]).

5 总结与展望

本文通过本研究组的两个工作, 试图说明二维相干光谱在强关联电子体系的重大潜力. 这些理论工作为非线性谱学提供了新的概念与方法, 对未来的研究具有很大启发性. 与此同时, 强关联体系的二维相干光谱作为一个理论上崭新的方向, 也充满未知与挑战. 首先, 目前的理论工作局限于一些可以严格求解的解析模型, 并没有一套成熟的微扰方法对一般体系进行研究. 此外, 大部分理论工作集中于强关联系统的磁响应, 相比电响应, 磁响应实验难度更大^[19]. 最后, 仍然没有一个确定性的实验验证理论预言的结果. 未知也意味着可能性, 能否通过非平衡场论^[32] 发展出一套微扰方法? 能否将这样的方法应用到超导等体系中获得诸如库珀对的寿命等信息? 能否利用一些半经典方法^[33–35] 理解二维相干光谱? 我们相信, 未来对这些问题的研究会揭示强关联电子体系中更丰富的物理信息.

感谢与 Peter Armitage 和 Masaki Oshikawa 的有益合作.

参考文献

- [1] Mukamel S 1999 *Principle of Nonlinear Optical Spectroscopy* (Oxford: Oxford University Press) pp3–139
- [2] Hamm P, Zanni M 2011 *Concepts and Methods of 2D Infrared Spectroscopy* (Cambridge: Cambridge University Press) pp1–86
- [3] Weng Y X, Chen H L 2018 *Ultrafast Spectroscopy-Principles and Techniques* (Beijing: Chemical Industry Press) (in Chinese) [翁宇翔, 陈海龙 2018 超快激光光谱原理与技术基础 (北京: 化学工业出版社)]
- [4] Cundiff S, Mukamel S 2013 *Phys. Today* **66** 44
- [5] Hüfner S, Hossain M A, Damascelli A, Sawatzky G A 2008 *Rep. Prog. Phys.* **71** 062501
- [6] Breunig O, Garst M, Sela E, Buldmann B, Becker P, Bohaty L, Müller R, Lorenz T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 187202
- [7] Bitko D, Rosenbaum T F, Aeppli G 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 940
- [8] Coldea R, Tennant D A, Wheeler E M, Wawrzynska E, Prabhakaran D, Telling M, Habicht K, Smeibidl P, Kiefer K 2010 *Science* **327** 177
- [9] Chen Y L, Chu J H, Analytis J G, Liu Z K, Igarashi K, Kuo H H, Qi X L, Mo S K, Moore R G, Lu D H, Hashimoto M, Sasagawa T, Zhang S C, Fisher I R, Hussain Z, Shen Z X 2010 *Science* **329** 5992
- [10] Woerner M, Kuehn W, Bowlan P, Reimann K, Elsaesser T 2013 *New J. Phys.* **15** 025039
- [11] Lu J, Li X, Hwang H Y, Ofori-Okai B K, Kurihara T, Suemoto T, Nelson K A 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 207204
- [12] Mahmood F, Chaudhuri D, Gopalakrishnan S, Nandkishore

- R, Armitage N P 2021 *Nat. Phys.* **17** 627
- [13] Wan Y, Armitage N P 2018 *Phys. Rev. Lett.* **122** 257401
- [14] Choi W, Lee K H, Kim Y B 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 117205
- [15] Nandkishore R M, Choi W, Kim Y B 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013254
- [16] Parameswaran S A, Gopalakrishnan S 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 237601
- [17] Phuc N T, Trung P Q 2021 *Phys. Rev. B* **104** 115105
- [18] Li Z L, Oshikawa M, Wan Y 2021 *Phys. Rev. X* **11** 031035
- [19] Hamm P, Meuwil M, Johnson S L, Beaud P 2017 *Struc. Dyn.* **4** 061601
- [20] Hahn E L 1950 *Phys. Rev.* **80** 580
- [21] Carr H Y, Purcell E M 1954 *Phys. Rev.* **94** 630
- [22] Abella I D, Kurnit N A, Hartmann S R 1966 *Phys. Rev.* **141** 391
- [23] Pfeuty P 1970 *Ann. Phys.* **57** 79
- [24] Anderson P W 1984 *Basic Notations of Condensed Matter Physics* (Benjamin Cummings) pp92–104
- [25] Zvezdin A, Kotov V 1997 *Modern Magneto-optics and Magneto-optical Materials* (New York: Taylor & Francis)
- [26] Lieb E, Schultz T, Mattis D 1961 *Ann. Phys.* **16** 407
- [27] Affleck I 1988 *Les Houches Summer School in Theoretical Physics: Fields, Strings, Critical Phenomena* pp563–640
- [28] Giamarchi T 2003 *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford: Oxford University Press)
- [29] von Delft J, Schoeller H 1998 *Ann. Phys.* **7** 225
- [30] Shankar R 1993 *Acta Phys. Polonica B* **26** 12
- [31] Pham K V, Gabay M, Lederer P 2000 *Phys. Rev. B* **61** 16397
- [32] Kamenev A 2011 *Field Theory of Non-Equilibrium Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [33] Sachdev S, Young A P 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2220
- [34] Damle K, Sachdev S 1998 *Phys. Rev. B* **57** 8307
- [35] Damle K, Sachdev S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **95** 187201

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

A theoretical survey of two-dimensional coherent spectroscopy in strongly-correlated electronic systems*

Li Zi-Long¹⁾²⁾ Wan Yuan^{1)2)3)†}

1) (Key Laboratory of Condensed Matter Theory and Computation, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

2) (School of Physical Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

3) (Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523808, China)

(Received 23 August 2021; revised manuscript received 30 September 2021)

Abstract

Two-dimensional coherent spectroscopy (2DCS) diagnoses a material's nonlinear optical response with multiple time variables, thus offering information that is inaccessible with conventional linear optical spectroscopy. The 2DCS in the infrared, visible, and ultraviolet frequency range has yielded fruitful results in chemistry and biology. In the terahertz (THz) frequency window, 2DCS has shown its promise in the study of strongly-correlated electronic systems. As a guide to this rapidly developing field, we survey the current status of the theory of THz-2DCS in strongly-correlated electronic systems. We then introduce the basic concepts and theoretical methods of 2DCS, and analyze the main characteristics of the two-dimensional spectra. Finally, we summarize our latest theoretical research in this field.

Keywords: two-dimensional coherent spectroscopy, strongly-correlated electronic system

PACS: 05.45.-a, 03.65.Yz, 03.75.Kk, 05.30.Pr

DOI: 10.7498/aps.70.20211556

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11974396) and the Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (Grant No. XDB33020300).

† Corresponding author. E-mail: yuan.wan@iphy.ac.cn



非平衡量子物态中的对称性与时间维度效应

蔡子

Symmetries and effect of time dimension in non-equilibrium quantum matter

Cai Zi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230310 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211741

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211741>

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

专题: 非平衡量子多体系统

非平衡量子物态中的对称性与时间维度效应*

蔡子†

(上海交通大学物理与天文学学院, 上海 200240)

(2021 年 9 月 18 日收到; 2021 年 10 月 10 日收到修改稿)

非平衡量子关联体系是近年来受到广泛关注的一类新型量子系统, 其研究对象不局限于某一特定的物理分支, 而是涉及凝聚态物理、原子分子物理和量子光学、量子调控与量子计算、非平衡统计物理等诸多现代物理学的前沿领域. 这些不同体系中涌现出来的非平衡量子关联现象, 既融合了各自体系的不同特征, 又展现出普适的一般规律. 由于其新颖性和复杂性, 这类系统中存在大量未知的基本物理问题和新奇的物理现象, 是当前量子科学理论研究的难点和重点. 同时, 由于量子技术的飞速发展, 理解这类复杂系统对于以量子计算和量子调控为代表的新一代量子科学技术的发展具有重要的现实意义. 本文简要总结了近年来本课题组在非平衡量子多体物理方面的几个代表性工作, 着重讨论了与时间相关的对称性 (破缺) 导致的新的非平衡量子物态, 准粒子及其中的动力学普适行为.

关键词: 非平衡量子物态, 时间维度效应, 自发对称破缺**PACS:** 03.65.Yz, 05.40.-a, 05.70.Jk, 64.70.Tg**DOI:** 10.7498/aps.70.20211741

1 引言

物理世界是由相互作用的多粒子系统组成的. 根据构成其基本粒子的特征尺度 (如特征长度、能量等) 不同, 物理世界可以划分为一系列不同层级, 每一层级都会涌现出自己特有的物理规律和新的物理概念. 对相互作用的多粒子体系, 其复杂的集体行为往往是由简单的物理规律通过相互作用产生的结果, 因此很难根据更“基本”层级的物理规律做简单外推得以理解. 这类现象称为“演生现象”. 在凝聚态和统计物理中, 常见的演生现象包括自发对称破缺、准粒子与元激发、普适类等^[1].

量子多体物理研究关联量子体系中涌现出的大量粒子的集体行为, 在量子材料、量子计算和精密测量等前沿领域中发挥着重要的作用. 在传统的固体电子材料中, 量子多体物理的研究对象多为处

于热力学平衡态 (热力学性质) 或近平衡态 (输运性质) 的系统, 而对远离热力学平衡态的性质较少涉及. 近十年来, 由于量子调控技术和测量手段的飞速发展, 在凝聚态物理、超冷原子、固态量子信息等领域中涌现出大量新型的人造量子多体系统, 例如非平衡超导^[2]和磁性系统^[3]、周期驱动的拓扑物质^[4,5]、时间晶体^[6]等. 在这些系统中, 人们不仅可以通过量子调控手段 (如激光泵浦^[7]、超快电磁激励等) 将量子多体系统激发到远离热力学平衡态的高激发态上, 同时还可以利用最新发展的实验手段 (如时间分辨光电子谱^[8]、超快激光光谱学^[9]) 来实时观测系统的动力学演化过程. 在光晶格中的超冷原子实验系统中, 人们可以通过含时地改变光晶格的相关参数, 例如随时间突然地^[10–13]或线性地^[14], 或周期地^[15–19]改变光势阱的深度, 将这类量子多体系统驱动到远离平衡态的状态. 由于其独特的性质, 这类新型量子关联体系会演生出一些与

* 国家重点研发计划 (批准号: 2020YFA0309000)、国家自然科学基金 (批准号: 12174251) 和上海市科委重点项目 (批准号: 2019SHZDZX01) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zcai@sjtu.edu.cn

传统平衡态多体系统完全不同的新现象与新物理,产生许多亟待解决的物理问题,急需发展新的有效理论与研究方法.同时,这类问题的研究对关联电子输运、量子计算和量子调控等领域的发展有着十分重要的现实意义.

时间是物理学中的基本维度,在相对论框架下,时间维度与空间维度在数学上具有等价性.然而在传统凝聚态物理的研究中,时间维度所扮演的重要性远远不及空间维度,在多数情况下,其仅出现在对处于热力学平衡态系统动力学性质的测量中.例如,在输运实验中,通过对系统外加小的扰动(例如电场),通过测量系统对于微扰的响应,利用平衡态系统的涨落耗散定理(线性响应理论),得到系统在近平衡态下的输运性质(电导率).在这一过程中,系统的动力学行为(在微扰下的弛豫动力学),尽管在实验上具有及其重要的意义,仅仅是作为一种平衡态/近平衡态物理框架下的探测手段,其本质还是反映系统平衡态的物理性质.但是,当外界的扰动足够强以至让系统远离热力学平衡态/近平衡态时,线性响应理论中响应函数和关联函数之间的线性关系往往不再适用,同时这类远离平衡态的系统也会演生出丰富的新现象与新的物理规律.作为与平衡态物理的核心区别之一,时间维度作为刻画非平衡物态及其动力学相变的一个基本维度,在非平衡物理中扮演着至关重要的角色.

对称性自发破缺和普适类是现代物理学中的核心概念.在凝聚态物理中,人们通过空间对称群的自发破缺来刻画不同的物相,并运用普适类来对不同相之间的转变进行分类.在远离平衡的系统中,时间维度的加入为这两个基本概念赋予了新的内涵:与时间相关的对称性及其自发破缺为寻找新的(非平衡)物态提供了新的机遇与挑战.同时,将普适类的概念推广到动力学系统,即研究系统在演化的过程中展现的时间上的普适行为,不仅拓展了相变理论的研究范畴,更为非平衡物态的刻画和普适性质的研究奠定了基础.最后,由于其内禀的量子关联性,非平衡量子关联系统的复杂度远远超过经典非平衡系统,其中量子涨落与非平衡条件的交互作用可能产生出非平衡经典系统和平衡态量子系统中都不存在的新奇宏观量子现象,极大地拓展了非平衡物理与量子多体物理的研究范畴.

本综述简要总结了近年来本课题组在非平衡量子多体物理方面的几个代表性工作,着重讨论与

时间相关的对称性(破缺)导致的新的非平衡量子物态、准粒子及其中的动力学普适行为.第2节讨论由于时间平移不变性自发破缺导致的一类典型的非平衡物态:时间晶体中的瞬子激发行为^[20].另外,讨论了将这一概念推广到虚数时间,导致的一类新的物态:温度晶体^[21].第3节着重介绍时间反演不变性在宏观层面的自发破缺所导致的一个重要结果:对于一个对称保护的拓扑体系,其在微观层面上由时间反演不变性保护的拓扑边缘态耦合上环境之后,变得不再稳定^[22].第4节讨论开放量子系统中弛豫动力学中的动力学普适类,重点讨论了对称性、相互作用、无序与噪声共同作用下产生的动力学普适行为^[23].第5节讨论非平衡量子多体系统中的自发对称破缺的动力学演化框架下的新机制以及由此产生的新奇量子多体态^[24].

2 时间平移对称性的自发破缺:时间晶体态

时间晶体这一概念于2012年由诺贝尔奖得主Wilczek教授^[6]提出.在特定条件下,某些系统可能在时间上形成结构进而自发破坏时间平移不变性.类比空间上连续的平移对称性自发破缺形成晶体,这类特殊的物态被称为“时间晶体”.尽管这一新奇的物态随后被证明不可能出现在热力学平衡态的系统中^[25],人们随即将这一概念推广到非平衡态:对一个周期驱动的系统,如果其物理量的周期是驱动周期 T 的整数倍,则这类非平衡物态自发破坏了系统哈密顿量在时间轴上的分立平移对称性(在时间平移 $t \rightarrow t+T$ 变换下哈密顿量不变,而系统的状态发生变化),故而被称为分立时间晶体(或Floquet时间晶体^[26,27]).这一概念被提出后,很快为实验所证实^[28,29].时间晶体作为一类典型非平衡量子物质,受到广泛的关注.但是作为一种新的物态,其很多基本的物理性质,尤其是其针对外界扰动的响应与稳定性问题,目前并不清楚.针对这些问题,我们进行了系统的研究,取得了一系列结果,为研究这类新型非平衡量子物态的分类、稳定性及其临界行为奠定了基础.

2.1 分立时间晶体中的瞬子激发

自发对称破缺与元激发是凝聚态物理学的两个核心概念:根据各种不同的对称性及其自发破

缺, 人们可以对物质的宏观物相进行分类; 通过对系统元激发的测量, 人们可以从实验中得到物相的各种性质. 在平衡态物理中, 这两个基本概念之间具有深刻的联系: 系统基态的自发对称破缺不仅可以决定低能激发态中元激发的拓扑结构, 也可以决定其能谱及动力学性质. 例如, 在一维聚乙炔电荷密度波态中, 系统的晶格分立平移不变性自发被破缺. 这种基态的 Z_2 平移不变性的自发破缺决定了其元激发态为位于能隙中心的局域的孤子态, 这种孤子态在空间上分隔了两个简并的电荷密度波态, 并携带分数电荷^[30].

另一方面, 在非平衡物理的框架下, 自发对称破缺这一基本概念被赋予了新的内涵: 其背后的物理机制不再是能量 (自由能) 最小化, 而是不同动力学模式失稳-竞争-再平衡的结果. 与平衡态系统的一个显著不同是, 对非平衡系统, 自发对称破缺不仅可以发生在空间维度, 也可以发生在时间维度. 具有时间平移不变性的自发对称破缺的物态被称为时间晶体. 对于这类新型的非平衡物态, 一个基本的科学问题是, 其元激发是否还有良好的定义? 如果有, 如何实现并刻画这类激发? 它与系统的对称性 (破缺) 的关系如何?

针对这些问题, 我们通过类比平衡态系统中 Z_2 自发对称破缺导致的孤子激发, 提出一个严格可解的时间晶体模型^[20]:

$$\bar{H}(t) = -J \sum_i [b_i^\dagger b_{i+1} + \text{h.c.}] + \frac{V(t)}{L} \sum_{ij} (-1)^{i-j} n_i n_j, \quad (1)$$

其中, $b_i^\dagger (b_i)$ 为一维光晶格上硬核玻色子的产生 (湮灭算符), n_i 为格点 i 上的粒子密度算符, L 为系统

尺寸, $V(t)$ 为外加的含时 (周期) 驱动. 硬核玻色子之间的相互作用为一个无穷长程的相互作用, 其强度不随空间距离衰减. 由于这一无穷长程相互作用的性质, 平均场近似在热力学极限下是严格的. 我们引入电荷密度波序参量:

$$m(t) = \langle \psi(t) | \frac{1}{L} (-1)^i n_i | \psi(t) \rangle,$$

这时系统哈密顿量约化为

$$\bar{H}(t) = -J \sum_i [b_i^\dagger b_{i+1} + \text{h.c.}] + m(t) V(t) \sum_i (-1)^i n_i, \quad (2)$$

其中序参量 $m(t)$ 在时间演化的过程中自洽求得. 我们发现该模型在特定条件下, 会展现出分立时间晶体态 ($m(t)$ 的周期为 $V(t)$ 周期的 2 倍, 见图 1(a)).

为了研究其对外界 (含时) 扰动的响应 (激发), 我们在一段时间内人为破坏外界驱动的周期性 (这一扰动可以看作在一个周期内, 暂时地增加或减少驱动周期频率). 在分立的时间晶体中, 时间平移不变性的 Z_2 自发破缺导致了两个“简并”的时间晶体态, 通过对系统施加含时扰动, 我们发现时间晶体对于高频扰动几乎免疫, 但是当扰动频率低于一个临界值时, 系统在时间演化过程中可以从一个简并的时间晶体态“隧穿”到另一个时间晶体态 (见图 1(b)), 这两个宏观“简并”量子态之间的隧穿类似于量子力学中双势阱系统中的瞬子隧穿效应. 另外, 在临界频率附近, 系统的隧穿时间呈幂指数发散, 这一现象类似于动力学临界系统中的临界慢化现象. 这一研究首次揭示了时间晶体中的瞬子激发, 为研究这类新型非平衡量子物态的分类、稳定性及其临界行为奠定了基础.

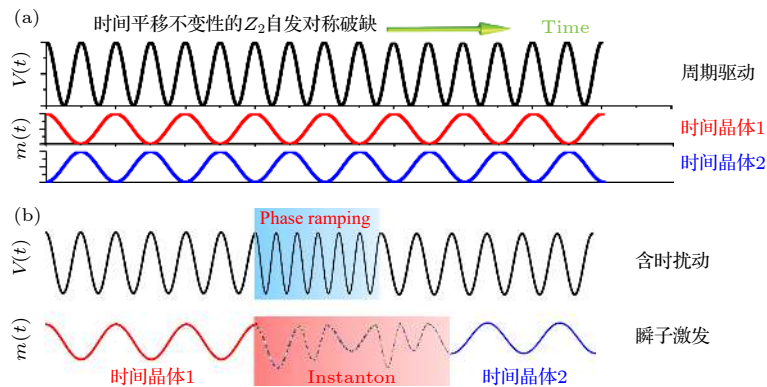


图 1 (a) 分立时间晶体态的示意图; (b) 通过含时扰动局部破坏周期驱动的周期性, 导致时间晶体瞬子激发 (不同简并时间晶体之间的隧穿)

Fig. 1. Schematic diagram of (a) a period doubling dynamics in the presence of periodical driving and two degenerate TC phases and (b) the phase ramping protocol in our model and an instanton-like excitation induced by it.

2.2 虚数时间轴上的时间平移对称性自发破缺: 温度晶体

晶体是在空间具有周期对称性的物质形态. 人类对晶体的探索可以追溯到有文字记载以前. 近代量子凝聚态物理学研究发现, 这种物态通常是在降低温度时, 从连续态 (比如流体) 通过对称性自发破缺而形成. 不同的对称破缺方式对应各种奇妙的空间群, 从而产生丰富多彩类型的晶体结构. 2012 年, Wilczek 把晶体的概念推广到了时间维度, 提出量子时间晶体.

温度是热力学中的一个基本概念. 量子力学中的路径积分方法揭示了两个重要的物理概念——温度和时间——之间的深刻联系. 一个温度为 $T = 1/\beta$ 的量子系统的配分函数在形式上等价于一个量子动力学系统在 (欧几里得空间) 虚时间 $\tau \in [0, \beta]$ 上的传播子 (见图 2(a)). 一般来说, 热力学系统的物理可观察量既可以随温度单调上升或下降, 也可能出现非单调的行为, 即物理量的温度依赖曲线出现一个或者多个峰, 这些峰的位置往往对应某些重要的物理现象 (例如反常或相变). 基于时间与温度的二象性, 一个基本的探索性问题是, 量子力学是否允许虚时间晶体的存在, 从而在宏观尺度发现“温度”晶体? 换言之, 能否找到一种物理系统, 其某些性质可以随温度的变化 (周期) 振荡?

针对以上两个问题, 我们运用量子蒙特卡罗方法, 在一类开放系统中找到了这样一类新型的量子物态 [21]. 考虑一个一维硬核玻色子模型:

$$H_S = -J \sum_i [b_i^\dagger b_{i+1} + \text{h.c.}] \quad (3)$$

假设该模型每个点上耦合一个量子环境. 当量子系统中的粒子与环境耦合时, 环境会诱导出粒子之间的有效相互作用. 一般来说, 这类相互作用具有“延迟性”: 某一时刻的粒子会与之后另一时刻的粒子发生作用, 这一虚时间上的延迟相互作用可以用如下有效 (将环境自由度积掉) 作用量描述:

$$S_R = - \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' n_i(\tau) D(\tau - \tau') n_i(\tau'), \quad (4)$$

其中 $D(\tau - \tau')$ 代表延迟相互作用随时间间隔的函数. 对某些特定的量子环境, 其诱导出的延迟相互作用随着“延迟时间”具有非单调行为 (在某些时间范围内为吸引相互作用, 另一些范围为排斥). 例如, 考虑如下延迟相互作用:

$$D(\tau - \tau') = \alpha e^{-\omega_d |\tau - \tau'|} \cos[2\pi \omega_c (\tau - \tau')], \quad (5)$$

这一相互作用可以通过积掉一个 (有效的) 非厄密的量子环境得到 [31].

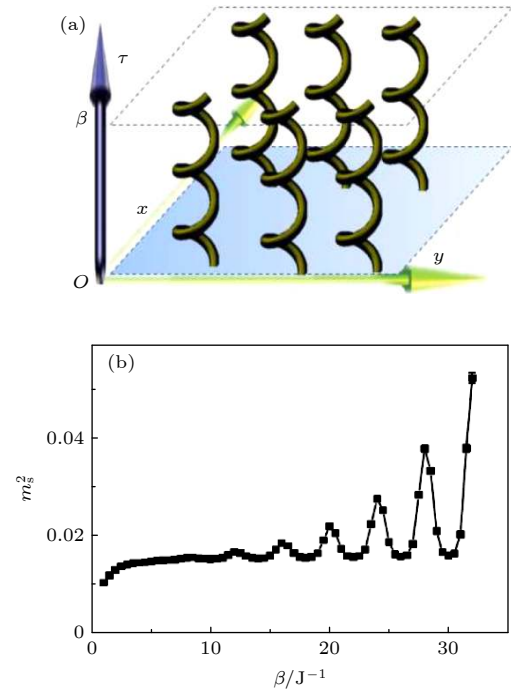


图 2 (a) 虚时间晶体在 2+1 维欧几里得时空中一种典型的时空构型的示意图; (b) 其物理性质随温度振荡

Fig. 2. (a) A typical world-line configurations of iTC in a (2+1)D Euclidean space; (b) the (inverse) temperature dependence of the CDW order parameter in the iTC phase.

通过与传统晶体中的相互作用做类比, 我们发现这类环境诱导的延迟相互作用会导致 (虚) 时间方向上的结晶行为. 由于虚时间和温度的对应关系, 这类虚时间晶体的物理性质在一定范围内会随温度 (周期) 振荡 (见图 2(b)). 另一方面, 当温度降到零温时, 系统的基态会展现出奇异的物理性质, 即一个不可压缩的超流体. 这一零温态不同于目前已知的所有玻色子系统基态, 它源自环境诱导的延迟相互作用和多体系统内部的量子涨落之间的竞争, 反映了开放量子系统中不同于传统封闭量子多体系统的奇异特性.

3 时间反演对称性的自发破缺: 开放量子系统中的对称性保护的拓扑边缘态

如何在对多个量子比特进行相干操作的同时, 降低环境对于量子系统的影响一直是量子计算领

域的一个核心挑战. 拓扑量子计算因其能极大地容忍局域微扰造成的错误, 成为实现这一目标的一种可能的方案. 作为拓扑量子计算的物理基础, 拓扑量子物态因其潜在的应用价值, 一直是凝聚态物理研究的前沿课题^[32]. 近年来, 以拓扑绝缘体为代表的一类新型拓扑态受到广泛的关注. 不同于传统的拓扑物态 (例如量子霍尔效应), 这类物质的拓扑性质只对满足特定对称性的微扰保持稳定, 因此被称为“对称保护的拓扑态 (SPT)”^[33]. 例如, 在拓扑绝缘体中^[34], 其边缘上的量子化自旋流被时间反演对称性所保护, 而对于破坏时间反演的微扰 (例如外磁场) 并不稳定. 一般认为, 环境对量子系统的影响可以看成某种局域的微扰, 如果环境本身以及系统和环境的耦合均不破坏相应的对称性, 则系统的拓扑性质不会受到环境的干扰, 这也是当前拓扑量子计算的理论基础.

然而, 相比于自然界中的其他对称性, 时间反演这一对称性的特殊性在于, 其不仅可以被显式地破坏 (例如外加磁场), 也会在宏观层面上自发破缺: 即宏观世界的时间的不可逆性 (热力学第二定律). 因此, 研究时间反演在宏观层面的自发破缺对拓扑物态, 尤其是环境对于受到时间反演对称性保护的拓扑物态的影响, 不仅拓展人们对于拓扑物态理解, 同时对于拓扑量子计算领域具有重要的现实意义^[35].

针对这一问题, 我们利用密度矩阵重整化群方法系统地研究了环境对对称性保护的拓扑系统的影响. 考虑一个开放系统, 其总 (系统+环境) 的哈密顿量为:

$$H_{\text{tot}} = H_s + H_b + H_{\text{sb}}, \quad (6)$$

其中 H_s 为系统哈密顿量, H_b 为环境哈密顿量, H_{sb} 为系统环境耦合哈密顿量. 为了研究方便, 我们考虑系统为一个对称保护的拓扑自旋链, 环境也为一条量子自旋链, 系统和环境在两条链的端点相连 (见图 4).

取 H_s 为一个自旋为 1 的量子自旋链 (Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) 模型^[36]:

$$H_s = \sum_i \left[S_i \cdot S_{i+1} + \frac{1}{3} (S_i \cdot S_{i+1})^2 \right], \quad (7)$$

该模型的基态是一个典型的对称保护拓扑态, 即在开边界条件下, 这一自旋为 1 的自旋链两端会有两个自由的自旋为 1/2 的边缘态, 这些边缘态受到时间反演、空间反演、 $Z_2^* Z$ 等对称性的保护^[37], 即只要外加微扰不破坏所有这些对称性, 边缘态就不被破坏, 由边缘态决定的基态简并度也会被保护. 下面我们要考虑当系统和环境耦合后, 环境对于对称保护的边缘态的影响, 及其与对称性的关系.

为了考虑环境对于这类对称保护的边缘态的影响, 我们考虑了不同系统环境, 以及系统-环境耦合形式 (见图 3). 系统-环境耦合的一般形式可以写为:

$$H_{\text{sb}} = \sum_{\alpha} A^{\alpha} \otimes B^{\alpha}, \quad (8)$$

其中 A^{α} 为系统算符, B^{α} 为环境算符. 我们着重关注时间反演对称性, 即考虑系统和环境哈密顿量都具有时间反演不变性, 同时系统和环境耦合也保持时间反演. 不仅如此, 系统-环境耦合中系统算符 A^{α} 和环境算符 B^{α} 各自都保持时间反演不变, 即对这个复合系统来说, 时间反演对称性在所有的微观层次都不被破坏.

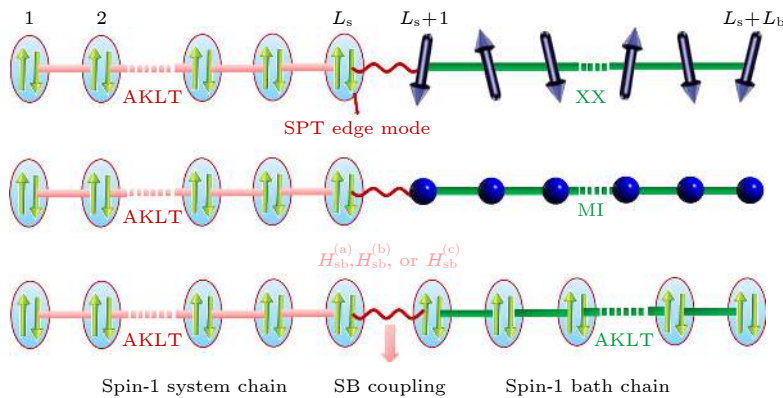


图 3 一条对称保护的拓扑量子态 (AKLT 态) 通过不同的方式, 耦合上不同量子环境的示意图

Fig. 3. Schematic of the symmetry-protected topological systems (AKLT state) coupled to different quantum baths via various SB couplings.

我们的研究结果显示, 时间反演这一对称性在拓朴性质保护上具有脆弱性, 即使在上述情况下 (时间反演对称性在所有微观层面都被保持), 拓朴系统中由时间反演对称性保护的拓朴边缘态也会被破坏. 其本质原因是因为时间反演对称的特殊性: 在开放系统中, 当我们将环境自由度积掉, 得到只含系统自由度的有效运动方程时, 时间反演对称性可以自发破坏, 从而不再能保护相应的拓朴边缘态. 与之相对应的, 如果边缘态有其他 (么正) 对称性保护 (例如 $Z_2^* Z_2$ 对称性), 在开放系统中, 边缘态仍然被保护. 这一发现将目前对于对称性保护的拓朴态的研究推广到开放系统, 并对当前基于时间反演对称保护的拓朴物态 (例如拓朴绝缘体) 的潜在应用提出了挑战 [38].

4 开放量子多体系统中的动力学普适类

普适类是现代物理学的一个基本概念. 人们发现不同的临界系统可能展现出某些普适的性质, 这些性质往往与系统的大部分细节无关, 而仅仅被少数关键因素, 如系统的维数、对称性等所决定. 通过对这些普适性质的刻画 (临界指数), 人们可以将自然界的连续相变分成有若干普适类. 21 世纪 70 年代, Hohenberg 和 Halperin 等 [39] 将这一概念推广到动力学系统, 提出了动力学普适类的概念: 对于临界系统, 其动力学性质 (如弛豫时间等) 也可以表现出普适行为, 这些行为往往比静态物理量 (如关联函数) 的普适类更加复杂. 同时, 这类普适动力现象甚至不局限于近平衡系统的相变点附近, 在远离平衡的系统中也能被观察到 (如 Kardar-

Papisi-Zhang 普适类 [40]), 目前已经成为非平衡统计物理研究的重要方向.

相比于经典非平衡系统, 量子多体系统中的动力学行为往往更为复杂, 也更加有趣. 由于量子关联系统内在的复杂性, 目前没有一般性的方法来研究这类系统的动力学性质. 因此, 远离平衡态的量子多体系统中是否存在普适的动力学行为一直是该领域的一个基本问题. 我们运用密度矩阵重整化群方法, 研究了一类具有噪声的一维量子多体系统中的弛豫动力学问题 [23]. 考虑一个无序的各项异性的量子自旋链:

$$H_s = \sum_i [(J + \delta) S_i^x S_{i+1}^x + (J - \delta) S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z + h_i^z S_i^z], \quad (9)$$

其中 $h_i^z \in [-\Delta, \Delta]$ 之间均匀分布的随机数, 代表无序外场; δ 为各项异性参量, 当 $\delta = 0$ 时, 系统具有 $U(1)$ 对称性. 另外我们在每个自旋上耦合一个 z 方向的白噪声磁场, 见图 4.

可以发现, 尽管噪声会最终将这一多体系统驱动到温度无穷高的稳态, 但是在这一平庸状态附近的弛豫动力学可能展现出非平庸的普适性质. 在这类开放的量子多体系统中, 无序、量子涨落、对称性以及噪声等因素的交互作用会导致丰富的弛豫动力学行为: 在系统具有连续的 $U(1)$ 对称性时 ($\delta = 0$), 随着无序强度的增加, 系统会经历一个从普适的代数弛豫到压缩指数弛豫 (stretched exponential) 的动力学相变. 当 $U(1)$ 对称性被破坏后, 系统马上会恢复常规的指数弛豫行为. 一个关键的发现是, 在这一过程中, 这一动力学系统的对称性对于决定系统的长时间的弛豫行为起到了决定性作用.

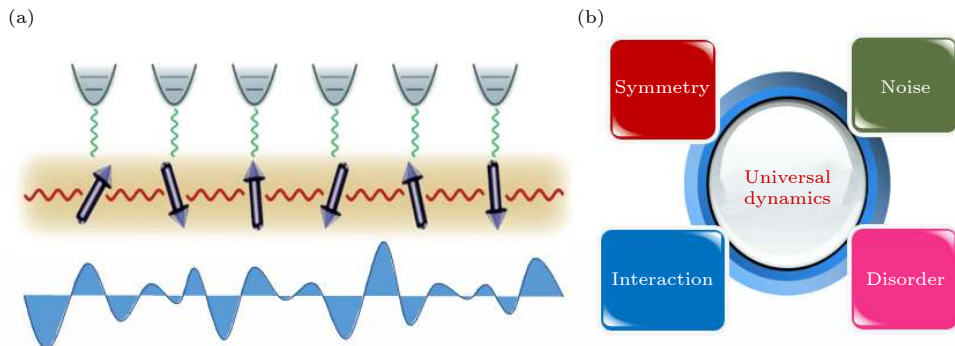


图 4 量子多体系统在不序、噪声、相互作用、对称性等因素共同作用下产生普适的弛豫动力学行为

Fig. 4. Schematic of a open quantum many-body system and its universal dynamics induced by the interplay between disorder, noise, interaction and symmetry.

通过 hydrogen dynamics 和有效场论的分析, 我们为这一数值发现提供了理论解释. 同时, 这一理论结果与当前超冷原子领域中多体局域化与开放量子系统的实验密切相关^[41,42].

5 驱动-耗散量子多体系统中的模式形成和奇异量子态

自发对称破缺是现代物理学的一个基本概念. 在平衡态物理中, 在低温下系统通过自发破缺哈密顿量的对称性, 达到能量 (自由能) 更低且更稳定的有序态. 在非平衡系统中, 外界的能量输入和耗散会驱使系统远离热力学平衡态, 在这一过程中具有不同对称性的非平衡模式往往会自发涌现. 在非平衡物理的框架下, 自发对称破缺这一基本概念被赋予了新的内涵: 其背后的物理机制不再是能量 (自由能) 最小化, 而是在外界非平衡条件的驱动下, 初始的均匀模式失稳, 不均匀的涨落模式被放大, 同时不同时空模式之间通过竞争与相互作用达到再平衡, 最终赢得竞争的模式决定系统稳态的对称性^[43]. 非平衡稳态中的模式形成与自发对称破缺已经成为经典非平衡统计物理研究的重要前沿课题.

相比于经典非平衡系统, 由于量子关联系统内在的复杂性, 量子多体系统中的动力学行为往往更为复杂, 也更加有趣. 除了常规的模式形成和对称破缺态 (例如条纹相), 量子涨落可能恢复被破缺的对称性, 产生出奇量子多体态, 这类非平衡量子物态既不同于经典非平衡系统中的模式形成, 也和常规量子多体态 (如自旋液体) 有本质区别. 探索远离平衡的量子多体系统中的自发对称破缺与奇异量子多体态的形成机制对人们理解这类新型量子物质具有重要意义.

我们研究了一类具有驱动-耗散相互作用的玻

色系统中的非平衡稳态^[24]. 这一系统的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} [b_i^\dagger b_j + \text{h.c.}] + \sum_i \left[-v n_i + \frac{U}{2} n_i (n_i + 1) \right] + \sum_i \Delta (b_i^{\dagger 2} + b_i^2). \quad (10)$$

与传统 Bose-Hubb 模型不同, 这一模型中我们引入了玻色子的对产生和对湮灭项, 在特定条件下, 这些项会导致玻色系统失稳, 从而外界驱动将这一系统驱动到远离平衡态.

可以发现, 在非平衡稳态中这一玻色系统会展现出某些类似费米子系统的性质: “费米面”在这一过程中扮演了重要的角色. 最终在“费米面”附近的动量模式赢得竞争, 导致玻色子倾向于凝聚在“费米面”附近的动量上. 在一般情况下, 费米面附近的动量模式之间相互散射, 最终一对具有相反动量的动量模式赢得竞争. 玻色子凝聚在这一对动量上, 在实空间出现具有条纹相的不均匀稳态结构 (见图 5(a), 图 5(b)). 但是在一种特殊情况下, 费米面特殊的“嵌套”结构使得动量模式间可能的散射通道数目极大增加, 这种情况下所有“费米面”上的动量模式都被玻色子占据, 在实空间形成一种密度均匀分布的稳态. 这类凝聚在“封闭线”上而不是“分立点”上的玻色-爱因斯坦凝聚体是一种奇异的量子多体态 (见图 5(c), 图 5(d)), 可能帮助人们理解阻挫量子磁性、高温超导系统等强关联系统中涌现的奇异量子物态. 此外, 这一驱动-耗散玻色子模型与当前基于超导比特的量子计算实验平台具有密切联系, 这一工作揭示了这一平台不仅在量子计算方面具有重要的实际价值, 其本身作为一种新型的人造量子系统, 也可以被用于探索非平衡量子关联系统中的基本物理规律.

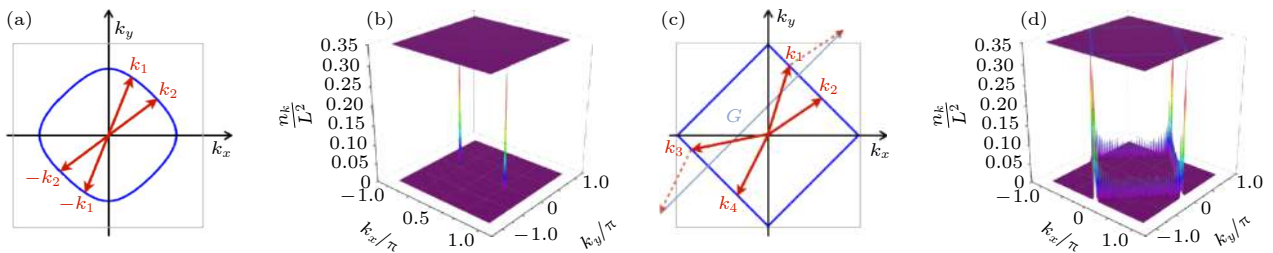


图 5 耗散-驱动玻色-赫伯特模型的非平衡稳态中涌现的条纹相 (a), (b) 和奇异玻色液体态 (c), (d)

Fig. 5. The stripe phase (a), (b) and the exotic Bose liquid (c), (d) emerging from the steady state of a dissipative-driven Bose Hubbard model.

6 非平衡量子关联体系的研究方法

由于非平衡和量子关联带来的双重复杂性,这类非平衡量子关联系统目前没有成熟和普适的处理方法,往往是多种方法综合运用(见图6).在很多情况下,可以从平均场近似出发,抓出非平衡系统中对称破缺态的基本物理,同时对于某些特定系统(例如 BEC 系统),可以采取准经典近似,将其运动方程约化为经典非线性方程进行处理^[44].为了超越平均场并探讨量子涨落扮演的关键作用,对于一维系统,通过对现有数值(例如密度矩阵重整化群^[45])和解析(例如玻色化^[46])方法的推广来研究具体模型,同时结合某些严格可解模型进行结果比对.对高维系统,目前没有适用的数值方法.如何将现有量子多体方法推广来处理高维非平衡问题将是当前这一领域数值计算中的关键难点.从解析的角度,利用 Schwinger-Keldysh 路径积分技术发展有效场论^[47],并通过微扰展开逐级考虑量子修正.通过这一系列数值和解析方法相结合,可能建立适用于非平衡量子关联系统的数值方法和理论框架.

研究方法中的难点和关键技术是发展适用于高维非平衡量子关联系统的数值方法.对量子蒙特卡罗方法,一般认为其只适用于处理热力学平衡态的系统.在之前的工作中,我们注意到蒙特卡罗方法的本质是根据特定分布函数进行重要性抽样.对于热力学平衡态系统,这一分布函数为玻尔兹曼函数,而对于非平衡系统,一般没有普适的分布函数,

需要针对具体问题具体分析.对于某些特殊的非平衡量子多体系统,可以找到其非平衡稳态满足的分布函数,然后根据这一分布函数利用蒙特卡罗方法进行重要性抽样,同时还要保证抽样过程中不出现严重的“负符号”问题.这样的特例十分罕见但的确存在^[48],这些特殊模型对于人们理解非平衡量子关联系统的许多一般性质十分重要.另一方面,利用密度矩阵或张量网络重整化群等方法处理非平衡问题面临的重要挑战之一是,大部分量子系统的纠缠度会随时间迅速增长,使得这类方法只适用于研究短时间内的动力学行为.这一困难对于具有短程纠缠的非平衡系统(例如多体局域化系统,强耗散量子多体系统等)并不十分严重,这使得我们有可能将这类方法推广到二维系统.最近动力学平均场方面的研究取得进展,非平衡动力学平均场方法可能被用来研究更高维相互作用费米子系统的时间演化问题^[49].

7 结 论

非平衡量子关联系统是一个崭新的研究领域,其中有大量的未解之谜.由于其具有强关联和非平衡的双重困难,人们对这一系统的认知极其有限.在这类系统中,以往很多基于平衡态热力学的基本物理量(如温度、自由能等)往往不再有良好的定义.另外,很多重要的物理概念(如拓扑序、自发对称破缺、普适类)在非平衡物理的框架下可能被赋予新的内涵.更为重要的是,这类系统中时间维度的引入以及与其密切相关的对称性和对称性破缺

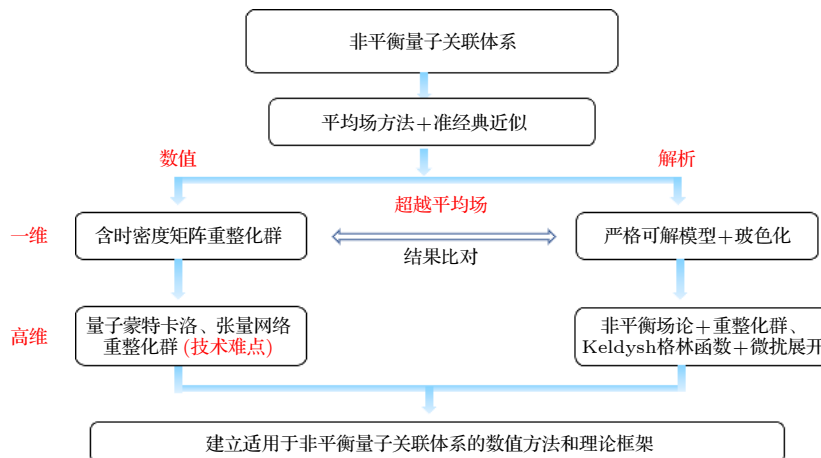


图6 当前处理非平衡量子关联系统的部分解析与数值方法

Fig. 6. A review of current analytical and numerical methods to deal with non-equilibrium quantum many-body systems.

可能演生出传统平衡态量子多体系统中不存在的新的物理概念和物理规律. 同时, 非平衡量子关联体系的研究范围不局限于某一特定的物理分支, 而是涉及凝聚态物理、原子分子物理和量子光学、量子信息与量子计算、非平衡统计物理等诸多现代物理学的前沿领域. 这些不同体系中涌现出来的非平衡量子关联现象, 既融合了各自体系的不同特征, 又展现出普适的一般规律. 我们期待未来不同学科的物理思想和研究方法在这一领域交叉融合, 碰撞出更为绚丽的火花.

感谢王孝群老师、刘文胜老师卓有成效的合作和一直以来的帮助. 感谢李伟、万源、王磊、陈宇、任杰、Navarrete-Benlloch、王子健、岳明锡、杨晓琴、李乔伊、黄易珍等老师和同学在上述工作中的合作和有益的讨论.

参考文献

- [1] Zhang G M, Yu L 2010 *Physics* **39** 543 (in Chinese) [张广铭, 于禄 2010 *物理* **39** 543]
- [2] Fausti D, Tobey R I, Dean N, Kasier S, Dienst A, Hoffmann M C, Pyon S, Takayama T, Takagi H, Cavalleri A 2011 *Science* **331** 189
- [3] Wan Y, Moessner R 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 167203
- [4] Lindner N H, Refael G, Galitski V 2011 *Nat. Phys.* **7** 490
- [5] Wang Y H, Steinberg H, Jarillo-Herrero P, Gedik N 2013 *Science* **342** 453
- [6] Wilczek F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 160401
- [7] Mankowsky R, Subedi A, Forst M, Mariager S O, Chollet M, Lemke H T, Robinson J S, Glowia J M, Minitti M P, Frano A, Fechner M, Spaldin N A, Loew T, Keimer B, Georges A, Cavalleri A 2014 *Nature* **516** 71
- [8] Kuehn W, Reimann K, Woerner M, Elsaesser T, Hey R 2011 *J. Phys. Chem. B* **115** 5448
- [9] Yang Y, Tang T, Duan S, Zhou C, Hao D, Zhang W 2019 *Rev. Sci. Instrum.* **90** 063905
- [10] Rigol M, Dunjko V, Olshanii M 2008 *Nature* (London) **452** 854
- [11] Polkovnikov A, Sengupta K, Silva A, Vengalattore M 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 863
- [12] Gring M, Kuhnert M, Langen T, Kitagawa T, Rauer B, Schreitl M, Mazets I, Smith D A, Demler E, Schmiedmayer J 2012 *Science* **337** 1318
- [13] Trotzky S, Chen Y A, Flesch A, McCulloch I P, Schollwöck U, Eisert J, Bloch I 2012 *Nat. Phys.* **8** 325
- [14] Braun S, Friesdorf M, Hodgman S S, Schreiber M, Ronzheimer J P, Riera A, del Rey M, Bloch I, Eisert J, Schneider U 2015 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112** 3641
- [15] Clark L W, Feng L, Chin C 2016 *Science* **354** 606
- [16] Struck J, Ölschläger C, Le Targat R, Soltan-Panahi P, Eckardt A, Lewenstein M, Windpassinger P, Sengstock K 2011 *Science* **333** 996
- [17] Struck J, Ölschläger C, Weinberg M, Hauke P, Simonet J, Eckardt A, Lewenstein M, Sengstock K, Windpassinger P 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 225304
- [18] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R, Lebrat M, Uehlinger T, Greif D, Esslinger T 2014 *Nature* **515** 237
- [19] Clark L W, Anderson B M, Feng L, Gaj A, Levin K, Chin C, 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 030402
- [20] Yang X, Cai Z 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 020602
- [21] Cai Z, Huang Y, Liu W V 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 050503
- [22] Wang Z J, Li Q Y, Li W, Cai Z 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 237201
- [23] Ren J, Li Q Y, Li W, Cai Z, Wang X Q 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 130602
- [24] Wang Z J, Navarrete-Benlloch C, Cai Z 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 115301
- [25] Watanabe H, Oshikawa M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 251603
- [26] Else D V, Bauer B, Nayak C 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 090402
- [27] Khemani V, Lazarides A, Moessner R, Sondhi S 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 250401
- [28] Choi S, Choi J, Landig R, Kucsko G, Zhou H Y, Isoya J C, Jelezko F, Onoda S, Sumiya H, Khemani V, von Keyserlingk C, Yao N Y, Demler E, Lukin M D 2017 *Nature* **543** 221
- [29] Zhang J, Hess P W, Kyprianidis A, Becker P, Lee A, Smith J, Pagano G, Potirniche I Q, Potter A C, Vishwanath A, Yao N Y, Monroe C 2017 *Nature* **543** 217
- [30] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698
- [31] Kozii V, Fu L 2017 arXiv: 1708.05841
- [32] Nayak C, Simon S H, Stern A, Freedman M, Das Sarma S 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 1083
- [33] Chen X, Gu Z C, Liu Z X, Wen X G 2012 *Science* **338** 1604
- [34] Kane C L, Mele E J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 146802
- [35] McGinley M, Cooper N R 2020 *Nat. Phys.* **16** 1181
- [36] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H, Tasaki H 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 799
- [37] Berg E, Torre E G D, Giamarchi T, Altman E 2009 *Phys. Rev. B* **77** 245119
- [38] Deng T S, Pan L, Chen Y, Zhai H 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 086801
- [39] Hohenberg P C, Halperin B I 1977 *Rev. Mod. Phys.* **49** 435
- [40] Kardar M, Parisi G, Zhang Y C 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 889
- [41] Lüschen H P, Bordia P, Hodgman S S, Schreiber M, Sarkar S, Daley A J, Fischer M H, Altman E, Bloch I, Schneider U 2017 *Phys. Rev. X* **7** 011034
- [42] Bouganne R, Aguilera M B, Ghermaoui A, Beugnon J, Gerbier F 2020 *Nat. Phys.* **16** 21
- [43] Cross M, Greenside H 2009 *Pattern Formation and Dynamics in Nonequilibrium Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [44] Pethick C J, Smith H 2002 *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [45] Daley A J, Kollath C, Schollwöck U, Vidal G 2005 *J. Stat. Mech.* P04005
- [46] Mitra A, Giamarchi T 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075117
- [47] Kamenev A 2011 *Field Theory of Non-equilibrium Systems* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [48] Cai Z, Schollwöck U, Pollet L 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 260403
- [49] Aoki H, Tsuji N, Eckstein M, Kollar M, Oka T, Werner P 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 779

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Symmetries and effect of time dimension in non-equilibrium quantum matter^{*}

Cai Zi[†]

(School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

(Received 18 September 2021; revised manuscript received 10 October 2021)

Abstract

Non-equilibrium quantum many-body systems have attracted considerable attention in the past decades. The scope of the research of this kind of novel system involves interdisciplinary research of condensed matter, atomic and molecular physics, quantum optics, quantum information and quantum computation, as well as the non-equilibrium statistical physics. The non-equilibrium phenomena emerging from the aforementioned quantum systems can exhibit rich and universal behaviors, which have far from being well understood due to the novelties and complexities of these systems, and hence the quantum many-body physics becomes the research highlight. At the same time, with the rapid development of quantum techniques, the understanding of these complex systems is of important practical significance due to their potential applications in quantum computation and quantum manipulation. In this paper, we show our recent progress of non-equilibrium quantum many-body systems. We focus on the novel phenomena closely related to the temporary symmetry breaking, including the exotic quantum matter, quasi-particles as well as the dynamical universality classes in non-equilibrium quantum many-body systems.

Keywords: non-equilibrium quantum matter, effect of time dimension, spontaneous symmetry breakings

PACS: 03.65.Yz, 05.40.-a, 05.70.Jk, 64.70.Tg

DOI: 10.7498/aps.70.20211741

^{*} Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2020YFA0309000), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12174251), and the Shanghai Municipal Science and Technology Major Project, China (Grant No. 2019SHZDZX01).

[†] Corresponding author. E-mail: zcaiz@sjtu.edu.cn



周期驱动系统的非平衡热输运与热力学几何

王子 任捷

Nonequilibrium thermal transport and thermodynamic geometry in periodically driven systems

Wang Zi Ren Jie

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 230503 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211723

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211723>

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

专题: 非平衡量子多体系统

周期驱动系统的非平衡热输运与热力学几何^{*}王子 任捷[†]

(同济大学物理科学与工程学院, 声子学与热能科学中心, 上海市特殊人工微结构材料与技术重点实验室, 上海 200092)

(2021 年 9 月 15 日收到; 2021 年 10 月 25 日收到修改稿)

随着对微纳尺度系统的深入理解和实验技术的进步, 发生在这些小系统中的热输运和能量转换近期吸引了大量研究. 不同于依赖静态热力学力(如温差、电势差等)的非平衡稳态调控手段, 受时间驱动的非平衡非稳态小系统具有特有的高可调性和普遍性, 其研究同时具有基础价值和应用潜力. 本文从几何这一基本概念出发, 分析了热力学几何相(曲率)和热力学距离这两个关键物理量, 以几何的视角展现和分析近期关于受驱动非平衡量子系统中输运调控和能量转换途径的热力学研究. 热力学几何不仅可以看作是这一大类系统中非平凡输运和耗散的本质起源, 也同样给我们提供了一种理论框架, 给出对于系统输运和能量转换的限制, 同时也可以给出慢驱动条件下量子热机性能的通用优化方式. 这将在未来帮助理解非平衡量子多体系统所发挥的能量输运/转换功能, 也会为发现高性能(高效率、高功率、高可靠性)量子热机提供新的设计思路.

关键词: 非平衡量子系统, 几何相, 热力学距离, 热泵浦, 量子热机**PACS:** 05.70.Ln, 03.65.Vf, 07.20.Pe**DOI:** 10.7498/aps.70.20211723

1 引言

在现实生活中, 宏观的热力学系统, 如热机、制冷机、热泵等发挥着重要作用, 它们可以将一部分输入的能量转换为人们所需要的输出能量. 在此过程中, 能量的转换方向、转换效率是衡量这些热力学过程的重要参数. 而近些年来, 人们对于热力学系统的研究集中到了非平衡的小系统, 通过纳米制造和精确控制的实验手段, 可以制备出承担着各种热力学任务的微纳系统. 单布朗粒子热机便是这方面的一个重要例子^[1]. 在这样的系统中, 工作介质往往具有较少的自由度和较小的空间尺度, 它与热库进行的能量交换过程充满了大幅的涨落. 如何利用随机热力学^[2]的工具, 来刻画这些涨落过程中能流大小和能量转换效率等物理量就成了一个重要问题. 另外, 量子效应也是研究低温条件下随机能量转换过程所必须考虑的因素. 一方面, 量子热

机是构造功能性量子器件的一个关键目标; 另一方面, 量子制冷机可以被用来在较冷的环境下进一步对所研究的系统进行冷却, 从而凸显其量子效应, 使其可以承担量子信息处理等任务. 研究表明, 量子相干性^[3]和压缩态^[4]可以被当作一种资源, 借以实现超出卡诺效率的热机. 另外, 在量子热机中, 热流的涨落^[5]和最优相干性的寻找^[6]也推动了人们对量子热机的理解.

时间驱动, 正是小系统热力学过程的一个重要调控手段, 例如可以通过时间驱动调控声子系统中的拓扑与非互易性^[7]. 如不依靠时间驱动, 经典的准静态过程虽然一般可以保证能量转换效率最高, 但它的长时间功率却趋向无穷小, 因而很难被实际利用. 静态条件下工作的稳态不可逆热机虽然可以具有可以调节的功率和效率, 但两者间往往存在权衡关系和限制. 因此最大功率下的效率极限^[8–11]受到大量研究. 与这些静态框架相比, 受到时间驱动的小热力学系统具有更大的可调空间, 它们所发

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 11935010, 11775159)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: xonics@tongji.edu.cn

挥的功能和品质参数可以通过设计特有的驱动方案得到便捷的调节 [12,13].

然而, 相比稳态系统, 时间驱动的研究难度更大, 一般性结论更少. 特别地, 在试图直接对系统品质参数进行优化时, 往往需要较大的计算量. 尤其是在对多个品质参数进行多目标优化时, 最优驱动方案在不同优化条件间还会出现相变等复杂现象 [14]. 因而关于受驱动小系统的普遍性概念和理论框架就显得十分重要. 几何是物理系统的一种重要内禀性质. 它在小系统热力学性质的研究中也发挥着不可替代的作用. 它可以描述非平凡几何相(曲率)带来的热泵浦现象 [15–18], 也可以描述驱动带来的热-功转换过程 [19,20] 和驱动带来的额外熵的产生 [21,22]. 另外, 借助热力学几何的概念, 人们可以利用热力学度规 [23,24], 对能量转换中的功率、效率和稳定性等品质参数进行优化 [25,26].

本文关注于受周期性驱动的小量子系统中, 时间驱动对于热输运和热-功转换的调节作用. 本文将介绍受驱动热力学系统中, 几何相(曲率)和热力学距离的概念, 它们分别代表了驱动的可逆部分和不可逆部分. 在此框架基础上, 本文分别介绍几何相热泵浦效应, 以及热力学几何在描述热机工作过程的作用. 最后, 本文介绍基于几何方法提出的优化方法和权衡关系. 值得注意的是, 由于各方面的限制, 本文所介绍分析的内容不具备绝对的完整性, 而仅以近期的一些代表性研究工作为例向读者展现这一新颖的研究方向.

2 周期性驱动量子输运中的几何相与距离

在周期驱动热力学系统中, 几何相和热力学距离作为两个重要概念, 为我们提供了一种统一描述经典/量子系统的理论框架. 在几何上, 在一个可以定义任意两点距离的空间中, 可以使用 Riemann 空间中的度规来描述相近两点间的距离. 此无穷小距离沿着曲线的积分就是此路径首尾两点间的距离. 在一个非平坦的空间中, 一个矢量途经一条闭合路径进行平行移动, 其末了矢量与初始矢量间的夹角被称为和乐(holonomy)角, 它即是几何相的数学含义. 一个光滑空间中, 此和乐角可以通过路径上几何联络的线积分得到. 从另一个角度, 联络本身定义了曲面上向量平行移动的方式, 它使我们z可以把不同位置处切空间内的向量进行比较.

在物理上, 这些数学概念也有对应的意义. 开

放系统内热泵浦、功转换等过程中, 几何相描述了经由一个绝热驱动, 系统分布在回到其初始状态时, 额外累积定向转移热量/功的多少 [15]. 它可以由参数空间内局域的几何联络的积分得到. 描述能量流(功/热)的几何联络可以类比孤立量子系统中的 Berry 联络, 它在驱动路径上的投影给出了在此参数点进行一个微小绝热驱动所引起的额外热流泵浦/功输出. 另外, 若驱动速度较小, 但并非完全绝热, 则热力学距离则描述了驱动过程中引起的耗散大小 [23]. 相近参数点间的热力学距离可以定义出一个参数空间中的度规. 这样的物理图像如图 1 所示. 接下来, 我们给出具体的分析和推导.

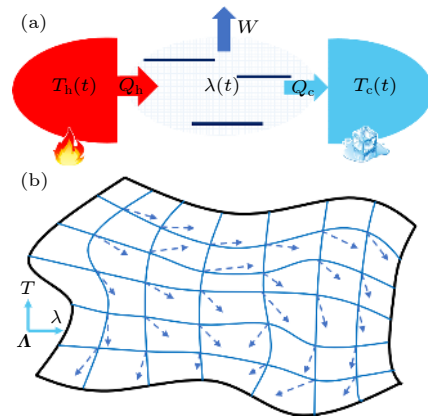


图 1 周期性驱动非平衡量子输运和其中几何性质的示意图 (a) 非平衡量子系统示意图. 量子系统由一个包含多个能级的系统来表示, 它可以与多个热库相连. 热库温度 (T_h 和 T_c) 和系统参数 (λ) 都被含时地驱动. 由此, 可以产生系统与热库间的热量交换 (Q_h 和 Q_c) 以及系统的功输出 (W). (b) 此非平衡量子系统在参数空间 ($\mathbf{A} \equiv (T, \lambda)$) 中的几何性质. 曲线坐标系表现出非均匀的热力学距离, 而各点的箭头表示几何联络. 几何联络在几何上对应平行移动一个微小参数时带来的和乐(holonomy)角. 热力学距离定义了一个具有度规的黎曼曲面

Fig. 1. A scheme of periodically driven nonequilibrium quantum transport and its geometry. (a) A diagrammatic nonequilibrium quantum system. The middle quantum system is illustrated by a multi-level system, which is coupled with several thermal reservoirs. The temperature of reservoirs (T_h and T_c) and the mechanical parameter of the system (λ) are simultaneously and periodically modulated. The heat exchange (Q_h and Q_c) and work output (W) are thus generated. (b) The geometry of this nonequilibrium quantum system in the space of parameters ($\mathbf{A} \equiv (T, \lambda)$). The curvilinear coordinate is adopted to show the inhomogeneous thermodynamic distance and the local vectors are for the geometric connection, as derived in the main text. Geometrically, the geometric connection is the holonomy angle during an infinitesimal parallel transport and the thermodynamic distance between neighboring points defines a Riemannian space with endowed metric.

假设作为工作媒质的系统与周边热库之间的耦合较弱, 则根据开放量子系统的理论, 可以在波恩-马尔可夫近似下, 等效地使用量子主方程来描述粗粒化后系统的演化. 若再进一步假设旋转波近似, 则可以将此量子主方程简化为具有全正定且保密度矩阵迹 (completely positive trace preserving, CPTP) 的 Lindblad 形式 [27]:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \mathcal{L}\hat{\rho}(t) \equiv -i [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)] + \mathcal{D}\hat{\rho}(t), \quad (1)$$

其中 $\hat{\rho}(t)$ 是系统的约化密度矩阵; $\hat{H}(t)$ 是它本身瞬时的哈密顿量 (其中包含了热库-系统相互作用带来的能级修正); 耗散子 $\mathcal{D}$ 描述了热库带来的耗散和去相干等效效应: $\mathcal{D}\hat{\rho} \equiv \sum_i \gamma_i \left(\hat{A}_i \hat{\rho} \hat{A}_i^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i, \hat{\rho} \} \right)$. γ_i 描述热库-系统耦合强度, 反对易子 $\{\hat{a}, \hat{b}\} \equiv \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$. 本节仅介绍基本概念, 这里的描述只涉及 (但不局限于) 系统与单个热库接触的情形. 多个热库的更一般情况在后文中将有所涉及. 在刘维尔空间, 可以把主方程写成:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}(t) |\rho(t)\rangle, \quad (2)$$

其中, 矩阵 $\check{\mathbf{L}}(t)$ 为超算符 $\mathcal{L}$ 在刘维尔空间下的表示. 由于系统仅与单个热库接触, 假设若不进行驱动, 经过足够长时间后, 系统弛豫到唯一的平衡稳态上. 将稳态的左右矢分别记作 $\langle l_0|$ 和 $|r_0\rangle$, 它们将满足本征方程:

$$\check{\mathbf{L}}(t) |r_0(t)\rangle = \langle l_0| \check{\mathbf{L}}(t) = 0. \quad (3)$$

在我们关心的参数范围内, 开放系统一般不处在奇异点 (exceptional point) 处, 此时, 系统的左/右本征态可以选择为一组双正交的基矢, 即: $\langle l_m|r_n\rangle = \delta_{m,n}$. 这里, Kronecker delta 函数在 $m=n$ 时为 1, 否则为 0. 通常, $\langle l_0|$ 不依赖于 $\check{\mathbf{L}}(t)$ 所取的参数, 它仅仅为一个常矢量. 在慢驱动条件下, $|\rho(t)\rangle$ 可以写成瞬时稳态和一个小的修正的叠加:

$$|\rho(t)\rangle = |r_0(t)\rangle + |\delta(t)\rangle. \quad (4)$$

根据绝热响应理论 [28,29], 可以得到一阶修正项 $|\delta(t)\rangle$ 的具体形式为

$$|\delta(t)\rangle = \check{\mathbf{L}}^+(t) \frac{\partial}{\partial t} |r_0(t)\rangle, \quad (5)$$

其中算符 $\check{\mathbf{L}}^+$ 为 $\check{\mathbf{L}}$ 的伪逆. 它的定义式为:

$$\check{\mathbf{L}}^+(t) = \int_0^{+\infty} ds e^{s\check{\mathbf{L}}(t)} (|r_0(t)\rangle \langle l_0| - \mathbf{I}). \quad (6)$$

这里, 矩阵 $\mathbf{I}$ 表示单位矩阵.

假设在驱动过程中, 热库的温度 T 和系统的参数 λ 被驱动, 它们的驱动形式为: $\mathbf{A}(t) = (T(t), \lambda(t))^T$. 这里, 上标 T 表示转置操作. 根据随机热力学 [30], 我们可以给出瞬时系综平均功率 $P(t)$ 和平均热流 $J(t)$ 的定义 (正方向都规定为流入系统的方向):

$$P(t) \equiv \langle l_0| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} |\rho(t)\rangle \dot{\lambda}, \quad (7)$$

$$J(t) \equiv \langle l_0| \hat{H} \left| \frac{\partial \rho(t)}{\partial \mathbf{A}^\mu} \right\rangle \dot{\mathbf{A}}^\mu. \quad (8)$$

这里, 我们使用了爱因斯坦求和约定. 很容易看到, 它们满足热力学第一定律: $\frac{d}{dt} \langle \hat{H}(t) \rangle = P(t) + J(t)$, 即系统的系综平均能量的瞬时变化等于流入它的功率和热流之和. 若驱动为周期性的, 则系统的演化在经历多个驱动周期后, 也将进入周期性的演化. 此时, 一个周期累积的热 $Q = \int_0^{\tau_p} dt J(t)$ 和功 $W = \int_0^{\tau_p} dt P(t)$ 满足 $Q + W = \int_0^{\tau_p} dt \frac{d}{dt} \langle \hat{H}(t) \rangle = 0$, 这里 τ_p 为驱动周期. 在慢驱动的条件下, $\dot{\lambda}$ 和 $\dot{\mathbf{A}}^\mu$ 都可被视为一阶小量.

在此系统中, 我们关心经历一个周期后的 W . 在慢驱动时, 可以保留功的最低阶贡献为

$$W_{\text{geo}} = \int_0^{\tau_p} dt \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| r_0(t) \right\rangle \dot{\lambda} \equiv \oint_{\partial\Omega} A_\mu d\mathbf{A}^\mu, \quad (9)$$

其中推导可以得出功的几何联络的形式为 $\mathbf{A} = (0, \langle l_0| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} |r_0(\mathbf{A}) \rangle)^T$, 回路积分沿着参数空间中的整个驱动路径 $\partial\Omega$. 图 1(b) 用局域的箭头示意了这里推导的几何联络, 它沿着一个回路的积分给出几何相贡献 W_{geo} . 可以看到, 此时的功 W_{geo} 为一个纯几何量, 它不依赖于驱动的速率, 仅仅与驱动在参数空间里驱动路径 $\partial\Omega$ 有关. 值得注意的是, 这里给出的几何联络的形式与文献 [25] 中的形式不同, 仅仅源于选择了不同的规范, 它们给出的 W_{geo} 是完全相同的. 根据斯托克斯定理, 可以把 W_{geo} 的表达式写成一个不依赖于所选规范的形式:

$$W_{\text{geo}} = \int_{\Omega} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{F}, \quad (10)$$

其中 $\mathbf{F} \equiv \nabla \times \mathbf{A}$ 为参数空间的几何曲率, 积分的范围为驱动路径所围绕的参数范围 Ω , $d\mathbf{S}$ 为面元向量. 可以看出, W_{geo} 的形式与孤立量子系统中的 Berry 相位的形式 [31,32] 具有很强的类比性, 因此被称为几何相 (曲率) 贡献的非平衡功. 几何相 (曲率)

贡献的热也同理可得, 并满足 $Q_{\text{geo}} = -W_{\text{geo}}$. 这里作为示例, 仅推导了平均意义下功的形式, 任意非平衡涨落流的几何相描述和它与 Berry 相位进一步的类比将在下一节中以生成函数的形式给出.

上面所推导的结果为慢驱动下的热-功转换. 若将驱动方向反向, 则这部分的贡献也会反向, 因此它代表了可逆的部分. 若要研究热-功转换中的不可逆性、耗散以及效率, 则需要引入量子随机熵^[29,33]和热力学距离^[23,24]的概念. 下面仍将在此示例系统中进行推导. 在双参数驱动下,

$$|\delta(t)\rangle = \check{L}^+(t) \frac{\partial}{\partial t} |r_0(t)\rangle = \check{L}^+(t) \frac{\partial}{\partial \Lambda^\mu} |r_0(t)\rangle \dot{\Lambda}^\mu. \quad (11)$$

研究工作^[33]已经将经典系统中随机熵的定义^[34]推广到了受驱动量子系统中. 受驱动的过程中, 整体的熵增可以拆分为系统和热库的熵增两部分. 此时, 平均熵产生速率可以写成^[33]:

$$\sigma(t) = -\text{tr} \left\{ \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \ln \left(\frac{\hat{\rho}(t)}{\hat{\rho}^s(t)} \right) \right\}, \quad (12)$$

其中 tr 表示求迹; $\hat{\rho}^s(t)$ 为瞬时的稳态密度矩阵. 将上面的表达式展开到驱动频率的最低阶, 可以得到:

$$\sigma(t) = \text{tr} \left\{ \dot{\hat{\rho}}^s \ln \left(1 + \frac{\delta \hat{\rho}}{\hat{\rho}^s} \right) \right\} \approx \text{tr} \left\{ \frac{d}{dt} [\ln(\hat{\rho}^s)] \delta \hat{\rho} \right\}, \quad (13)$$

其中 $\delta \hat{\rho}$ 为驱动带来的密度矩阵修正项, 它在刘维尔表象下即为 $|\delta(t)\rangle$.

在刘维尔表象下, 上面熵增速率可以写作:

$$\sigma(t) = \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \check{E}}{\partial \Lambda^\mu} \check{L}^+ \right| \frac{\partial r_0}{\partial \Lambda^\nu} \right\rangle \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu \equiv R_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu. \quad (14)$$

这里, $\check{E}$ 为 $\ln(\hat{\rho}^s)$ (稳态随机熵) 在刘维尔表象下向量组成的对角矩阵. $R_{\mu\nu} = \left\langle l_0 \left| \frac{\partial \check{E}}{\partial \Lambda^\mu} \check{L}^+ \right| \frac{\partial r_0}{\partial \Lambda^\nu} \right\rangle$ 为热力学几何张量. 可以看到, 不同于与 $\dot{\Lambda}^\mu$ 成正比的平均功率和平均热流, 熵产生速率是与 $\dot{\Lambda}^\mu$ 的平方项成正比的. 因此, 一个驱动周期内累积的平均熵产生量是与驱动速度成正比的, 它可以表示为

$$\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt \sigma(t) = \oint_{\partial\Omega} dt g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu. \quad (15)$$

由此定义的度规 $g_{\mu\nu} \equiv (R_{\mu\nu} + R_{\nu\mu})/2$ 是 $R_{\mu\nu}$ 的对称部分, 刻画了慢驱动过程中的瞬时平均熵增速率. 从这里容易看出, $R_{\mu\nu}$ 的反对称部分对于熵的产生没有贡献. 图 1(b) 中, 用曲线坐标系定性地表现了 $g_{\mu\nu}$ 描述的参数点间的局域热力学距离. 可以

看到, 若将参数驱动的方向反向, 几何相 (曲率) 的贡献也会反向, 但热力学距离以及熵产生的符号不会改变. 因此, 热力学距离在物理上描述了驱动带来的不可逆性, 而几何相 (曲率) 贡献则代表了可逆的能量转换.

根据 Cauchy-Schwarz 不等式, 可以一般性地给出对于熵产生的限制, 此极限由热力学给出:

$$\Sigma \geq L^2 / \tau_p, \quad (16)$$

这里 $L \equiv \oint_{\partial\Omega} dt \sqrt{g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu}$ 为热力学长度, 它与驱动速率无关, 仅与参数经过的路径有关. 这里得出的结果与经典情况下的结果有直接对应^[23,24]. 在驱动周期 τ_p 固定的情况下, L 限制了系统在驱动过程中所产生的熵增 Σ . 若要使熵增达到其下限 (即不等式的右边), 则需要优化驱动方式, 使其路径的参数化不再由时间 t , 而是由热力学距离给出^[25], 后文会做详细讨论.

与几何相 (曲率) 贡献的平均流类似, 热力学几何也是一个普遍框架. 这里仅举例说明它在最简单系统中的应用. 若采取不同的定义, 可以研究驱动系统中功率-效率的权衡关系^[25], 多个热库的系统中的权衡关系^[20], 以及受驱动量子热机的多目标优化^[26] 等等. 但这些都具有相类似的理解方式. 这正说明了几何方法在受驱动量子系统中, 研究能量转换时所发挥的普适框架性作用. 后文将进一步介绍.

3 几何相: 可逆热泵浦和慢驱动热机

类似于第 2 节的分析, 在慢驱动情况, 时间驱动带来的累积热流和功可以写成一个不依赖驱动频率的几何性表达式. 但是上面的分析没有考虑多个热库的情况, 也没有包含累积流的涨落的性质. 本节将在生成函数的框架下对这两个问题进行讨论.

非热力学的几何泵浦的研究可以追溯到 Thouless^[32] 关于零温孤立且受周期性参数驱动的电子系统的研究, 他发现一个周期内泵浦的电荷量是量子化的, 且它受到拓扑保护, 具有很强的鲁棒性. 此时, 量子化的泵浦量可以写成 Berry 曲率^[31] 在驱动参数和一维布里渊区所组成的二维面上的积分. 这项开创性工作开启了周期性驱动系统中输运性质的研究. 后续, 人们发现, 在开放量子系统中也可以实现类似的现象. 特别地, 即便不存在静态偏压, 也可以周期性驱动产生定向电流. 此电流可

以用散射矩阵表达出来^[35]. 此外, 相互作用量子点系统具有在实验中展现出此类现象的潜力^[36]. 后续 Sinitsyn 和 Nemenman^[37] 的研究说明, 几何泵浦的现象不局限于电子系统, 而具有广泛的应用. 他们使用生成函数的方法, 给出了随机泵浦系统中, 包含泵浦流各阶涨落信息的几何相贡献.

然而, 上面的研究只探讨了粒子流的定向输运, 而没有研究周期驱动过程中热流等能流的输运情况. 基于随机热力学研究方法^[38], Ren 等^[15] 提出了量子分子结的声子热输运中, 驱动热库温度等参数产生几何相热流的热泵. 随后, 几何相热流也在经典布朗系统^[17], 自旋-玻色系统^[18,39], 量子光力系统^[16] 等大量系统中得到了广泛研究. 特别地, 在自旋-玻色系统中, 研究人员发展运用了极化子变换的方法^[40], 系统性探讨了系统-热库耦合从弱到强的变化对于几何相热流的影响^[18,41].

为了帮助对于这一大类工作的理解, 下面大致梳理了几何相热泵^[42] 的基本思想和理论框架.

根据两点测量的方法可以定义从热库流入系统的累积随机热流. 若在时刻 0 和 t 分别测出热库的能量为 m_0 和 m_t , 则流入系统的热流为 $Q = m_0 - m_t$. 将此事件的联合概率密度记作 $P(m_t, t; m_0, 0)$, 它表示热库在 0 时刻总能量为 m_0 , 且在经过酉演化后第二次测量时热库具有总能量 m_t 的联合概率. 在这个过程中流入系统的热流的生成函数为^[2,38]

$$Z(\chi) \equiv \sum P(m_t, t; m_0, 0) e^{\chi(m_0 - m_t)}. \quad (17)$$

χ 是计数参数. 对应地, 热流的累积量 (cumulant) 生成函数为

$$G(\chi) \equiv \ln[Z(\chi)]. \quad (18)$$

通过对它求导, 可以给出热流各阶累积量:

$$\langle Q^n \rangle_c = \left. \frac{\partial^n}{\partial \chi^n} G(\chi) \right|_{\chi \rightarrow 0}, \quad (19)$$

其中前两阶的累积量分别对应平均热和它的涨落: $\langle Q \rangle_c = \langle Q \rangle$, $\langle Q^2 \rangle_c = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2$. $\langle Q^n \rangle$ 是随机量 Q^n 的系综平均.

若假设系统-热库的耦合相对于系统和热库各自的能量来说为弱耦合, 则可以用一个带有计数参数 χ 的量子主方程来同时描述系统密度矩阵和流的生成函数的演化^[15,39]:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\rho(\chi, t)\rangle = \check{L}_\chi |\rho(\chi, t)\rangle, \quad (20)$$

其中下标表示对于计数参数 χ 的依赖. 若计数参数 $\chi = 0$, 则此方程对应的是只描述系统密度矩阵演化的主方程. 可以根据 $\check{L}_\chi$ 得到其稳态下的左右本征矢:

$$\begin{aligned} \check{L}_\chi |r_0(\chi)\rangle &= E_0(\chi) |r_0(\chi)\rangle, \langle l_0(\chi) | \check{L}_\chi \\ &= E_0(\chi) \langle l_0(\chi) |, \end{aligned} \quad (21)$$

这里, $E_0(\chi)|_{\chi \rightarrow 0} = 0$. 当系统到达稳态且经历一个完整周期 τ_p 后, $G(\chi)$ 包含动力学相 $G_{\text{dyn}}(\chi)$ 和几何相 $G_{\text{geo}}(\chi)$ 两部分贡献. 它们来自于瞬时的平均效果和来参数空间本身的几何性质:

$$G_{\text{dyn}} = \int_0^{\tau_p} dt E_0(\chi, t), \quad G_{\text{geo}} = \oint_{\partial\Omega} dA \cdot A. \quad (22)$$

A 为驱动的多个参数, $A_\mu = -\left\langle l_0(\chi) \left| \frac{\partial}{\partial A^\mu} r_0(\chi) \right\rangle \right\rangle$ 为几何联络. 可以看到, 动力学贡献 G_{dyn} 与驱动周期成正比, 而几何贡献 G_{geo} 与驱动周期长度无关. 因此, 若保持在慢驱动范围内, 增加驱动频率 (减小驱动周期) 可以增加 G_{geo} 在总热流生成函数 $G(\chi) \equiv G_{\text{geo}}(\chi) + G_{\text{dyn}}(\chi)$ 中所占的比重. 根据计算出的累积量产生函数 $G_{\text{geo}}(\chi)$, 即可计算出几何相部分带来的热流和它任意阶的涨落性质. 同样根据斯托克斯定理, 可以把几何相的贡献写成:

$$G_{\text{geo}} = \int_{\Omega} dS^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (23)$$

其中 $dS^{\mu\nu}$ 为特定方向的面元, 反对称的几何曲率 $F_{\mu\nu} \equiv \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ 为参数空间的内禀量, 不依赖于规范的选取. 如果把驱动路径反向, 热的几何相效应也反向. 因此, 在只有纯的几何相效应 (动力学相效应为零) 的情况下, 系统为可逆热泵和热机.

近年来, 大量关于受驱动非平衡量子系统中热流泵浦的研究基本都基于以上描述的理论框架. 如图 2(a) 所示, 最初关于几何热泵的研究是关于一个量子分子结的声子热泵^[15]. 通过动态驱动分子结两端热库的温度, 可以产生一个累积的定向热流. 这个热流的一部分累积量生成函数可以和 Berry 相位进行对应, 由一个纯几何量给出, 即几何曲率 (如图 2(b)) 在驱动包裹的参数空间区域内的积分. 几何相热流的存在, 使得静态条件下普适成立的涨落定理被打破. 后续关于此情况下新的形式的涨落定理被推导得出, 此特殊的涨落定理需要考虑几何相热流的贡献^[43].

随后, 除了经典布朗系统中的几何热泵现象外^[17], 更多量子系统中的几何相热泵也得到了大量关注. 在自旋-玻色系统中, 系统-热库耦合强

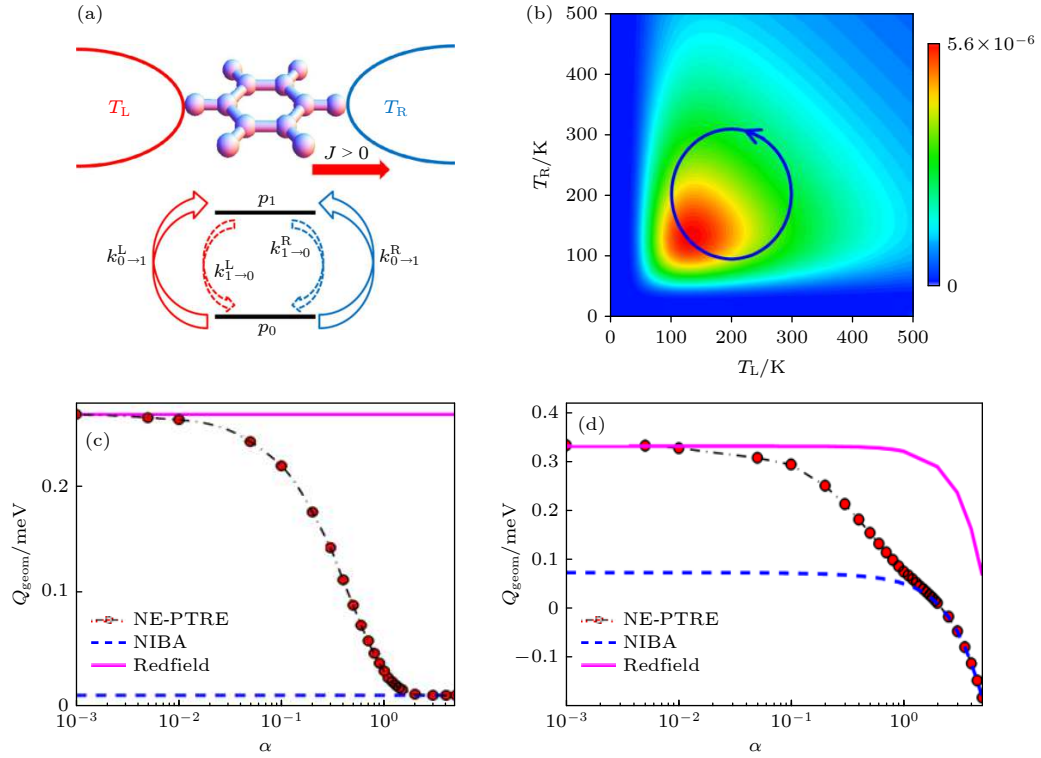


图 2 几何相热泵 (a) 最初研究的量子分子结系统, 工作介质由一个两能级系统描述, p 和 k 分别为各个占据数和跃迁速率^[15]; (b) 驱动两端温度产生的热泵现象, 图中用颜色表示了几何曲率的大小. 几何泵浦的热量驱动回路包裹的范围内的几何曲率积分^[15]. (c), (d) 自旋-玻色系统中几何相热流与系统-热库耦合强度 α 的关系^[18]. (c) 为无 Zeeman 劈裂能的情形; (d) 为有 Zeeman 劈裂能的情形^[18]. (a), (b) 改编自文献^[15]; (c), (d) 改编自文献^[18]

Fig. 2. The geometric heat pump effect. (a) The originally studied quantum molecular junction system. The working medium is described by a quantum two-level system, with p and k denoting different populations and transition rates^[15]. (b) The geometric curvature in the two-temperature parameter space. The color denotes the magnitude of the geometric curvature. The pumped heat is the integral of geometric curvature over the encircled area^[15]. (c), (d) The geometrically pumped heat versus the coupling strength between the middle system and reservoirs in a quantum spin-boson system^[18]. (c) is for the setup with no Zeeman splitting while the splitting is present in (d)^[18]. (a), (b) are adapted from^[15], while (c), (d) are adapted from^[18].

度对于几何相热流的调控得到了研究^[18]. 如图 2(c) 和图 2(d) 所示, 在没有 Zeeman 劈裂能时, 几何相热流随着耦合强度的增加而单调衰减; 而当有 Zeeman 劈裂时, 几何相热流先随耦合强度的增加而减小, 后经过反向后, 绝对值又继续增大. 这说明几何相热流可以方便地在量子系统中被控制. 另外, 在量子光力系统中, 可以调控的参数更多, 例如失谐, 光驱动的压缩性质等等, 由此在光力系统中引入周期驱动, 也可以实现热流的几何泵浦和非互易传输^[16].

为了使几何相泵浦不再局限于慢驱动附近, 研究人员借鉴了量子控制和非绝热控制^[44]的概念, 在设计驱动方案时, 研究了对几何相泵浦的非绝热控制^[45,46]. 通过引入一个附加的驱动项, 可以把几何相的描述方法拓宽到相对高频的参数条件, 从而极大地增大了几何泵浦的功率, 在单位时间内可以

将更多热量/粒子泵浦到特定热库中去.

除了实现定向泵浦, 几何相的概念也可以被应用在研究慢驱动下热机工作分析. Giri 和 Goswami^[19] 分析了三端口热机中几何相的贡献, 通过驱动高温和低温端热库的温度, 可以向光学腔内单一模式中泵浦光子. 特别地, 他们通过引入两个接近简并的能级, 探究了量子相干性对于泵浦的影响, 相对于动力学相对应的功的行为, 两个近简并能级间的相位差可以更明显地调制几何相部分的功. 几何相的存在, 使得稳态热机在取得最大功率时效率的普适极限被打破.

在上面这些面向实际应用的研究外, 生成函数的几何相也在关于非平衡统计物理的基础理论中发挥了作用. 早期关于稳态统计物理的研究希望能找到一个类似于平衡态 Clausius 不等式的关系, 由此可以给出系统在不同稳态间切换时所要满足

的限制. Hatano 和 Sasa^[47] 指出, 可以将熵产生拆分为瞬时稳态熵 (housekeeping entropy) 和额外熵 (excess entropy), 且根据额外熵满足的涨落定理 (Hatano-Sasa 等式) 可以限制不同稳态间切换的过程. 近期, Sagawa 等^[22] 的工作表明, 几何相正好对应了额外熵的累积量生成函数, 而同时动力学相则对应了瞬时稳态熵的统计性质. 这样的工作说明, 几何相对应热力学过程不仅具有实际应用的价值, 也对基本非平衡理论的研究具有指导作用.

4 热力学距离: 热机中的不可逆性

第 3 节中描述的几何相贡献没有分析驱动过程中带来的不可逆性和由此带来的热力学效率的减小. 本节将运用热力学距离的概念对此进行讨论. 热力学距离最初源于宏观平衡热力学的研究, 它基于热力学势函数 (内能, 熵等) 在参数空间中的二阶导数, 且其发散性代表了相变的发生^[48,49]. 近年来, 此概念被用来描述单一热库接触的微纳系统的热力学和统计物理性质, 与前面宏观系统的情况不同, 此时的热力学距离基于随机的香农熵 ($S = -\ln p$) 来定义^[23]. 此时的热力学度规与信息几何中的 Fisher 信息矩阵直接相关, 即: 当把 Fisher 信息定义中的概率分布选取为 Gibbs 分布, 则可以得到对应的热力学度规. 根据此度规计算的两点间的热力学距离确定了这两点间态转换的最小耗散, 这与信息几何中 Cramer-Rao 界限具有很强的类比性. 此时的热力学距离是一个实验可直接测量的量^[50], 它可以帮助人们设计进行微纳系统态转换时最优 (耗散最小) 的路径方案, 此方案对应着参数空间中由热力学度规确定的测地线^[24,51].

上面一系列重要的研究仅仅关注了受驱动系统的耗散性质, 而没有研究受到周期驱动的微纳系统中涉及的热机功能以及其能量转换效率. 近期, Brandner 和 Saito^[25] 的研究工作讨论了这个问题. 类似于本文第 2 节中的讨论, 他们用几何联络来描述慢驱动产生的功输出, 用热力学度规来描述驱动带来的耗散. 如图 3(a) 中给出的, 热力学几何限定了有限时间热机工作时的效率-功率权衡关系. 图中的灰色区域为热力学几何给出的不等式所禁止的, 即在一定范围内若要获得更大的效率就要牺牲一部分功率. 而图 3(a) 中黑线为以匀速驱动的结果, 而橙线则代表了经过优化的热机表现, 具体的优化方式将在下一节中进行描述. 另一方面, 与先

前的结果^[6] 不同, 在此研究的具体模型中, 无论驱动的幅度如何, 量子相干性 (由驱动引起) 都只会损害热机的工作性能.

尽管上面的理论适用于大量受到慢驱动的经典/量子系统, 但却要求系统仅与一个热库相连. 随后, Hino 和 Hayakawa^[20] 将此框架推广到了同时与多个热库相接的系统中去, 并以此分析了非平衡自旋-玻色模型中的效率和功率. 此时, 热力学距离的定义不再像单一热库时那样依据 Gibbs 分布, 而是运用了 Hatano-Sasa 等式中的额外熵. 此理论可以用在无驱动时处于稳态的热机中, 但由于稳态分布在较复杂系统时难以直接得到, 因此, 提出另外的计算热力学距离的方法显得尤为重要.

在线性响应区域, 可以把驱动和静态偏置同等地当作一个平衡态附近的微小扰动来处理. 此时, 热力学距离可以直接表示为一个平衡态的关联函数, 但此方法仅局限于驱动幅度和偏置幅度都较小的线性响应区域^[52,53]. 根据平衡态关联函数可计算出热力学张量, 它的对称部分为热力学度规, 反对称部分为几何曲率, 这就把本文第 2 节中介绍的看似分离的两部分内容联系了起来^[54]. 特别地, 基于线性响应计算热力学距离的方法可以处理受驱动导体中的相干输运, 给出对于输运系数的热力学限制^[55]. 这将有助于进一步考察更复杂量子系统中的输运现象.

5 基于几何方法的能量转换优化与权衡关系

根据前面的讨论, 热力学耗散和热力学距离之间存在的一般不等式为: $\Sigma \geq L^2/\tau_p$. 其中, Σ 为总耗散, L 为热力学距离, τ_p 为驱动周期. 根据定义, $\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu$, 且 $L \equiv \int_0^{\tau_p} dt \sqrt{g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu}$. 此不等式是可饱和的, 它的等号在特定条件下可以取得. 此条件就给出了最优驱动所要满足的关系. 对于同样的参数位置 $\Lambda(t)$, 假设需要用 $\Lambda(\phi(t))$ 来表示, ϕ 为把路径参数化的另一个变量, 它可以被选在 $[0, 1]$ 的范围内. $\dot{\phi}(t)$ 表示了驱动的速度. 根据 $\Sigma \equiv \int_0^{\tau_p} dt g_{\mu\nu} \dot{\Lambda}^\mu \dot{\Lambda}^\nu$, 改变驱动路径的参数化后, 它变成了 $\int_{\phi(0)}^{\phi(\tau_p)} d\phi g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)$. 为了取得不等式中的等号, 需要将此表达式变为不依赖参数选取的形式, 即使得热力学耗散不再依赖于 $\phi(t)$.

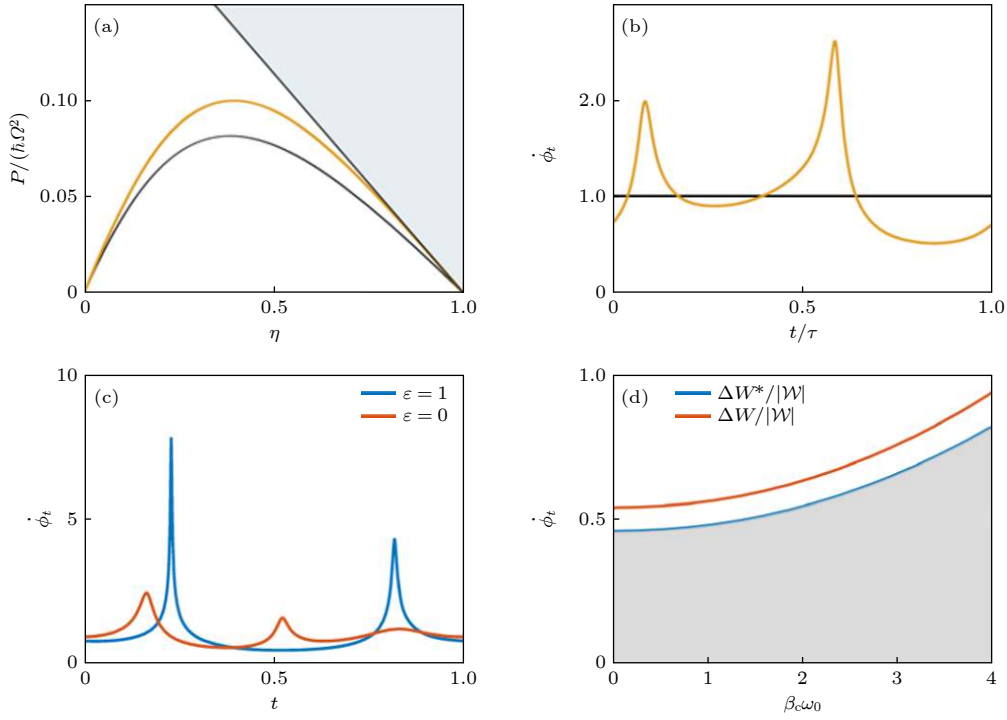


图 3 通过热力学距离对慢驱动热机的限制和优化 (a) 周期驱动量子热机中的功率与效率权衡. 灰色区域是根据热力学几何得出的不可能区域, 黑色线对应等速率驱动方式, 而橙色线对应经过优化的驱动方式 (驱动速度随时间变化), 这两种驱动方式中驱动速度的具体形式由图 (b) 给出 [25]. (c), (d) 对于驱动量子热机 (一个谐振子) 的多目标优化 [26] (c) 不同的优化后的驱动速度; (d) 功的相对涨落与谐振子频率的关系, 此时为效率-功涨落的多目标优化. 红线为匀速率的驱动, 而蓝线对应优化后的驱动, 灰色区域为由热力学几何给出的不可能区域 [26]. (a), (b) 改编自文献 [25]; (c), (d) 改编自文献 [26]

Fig. 3. The constraint on and optimization of slowly driven quantum heat engine using the thermodynamics distance method: (a) The efficiency-power tradeoff in driven quantum heat engine. The gray area is ruled out by the thermodynamic geometry, with the black and orange line corresponding to the constant-speed driving and optimized driving protocols (driving speed is time dependent) respectively. The driving speed in these two protocols is illustrated in Figure (b) [25]. (c), (d) A multiple target optimization of a driven heat engine composed of a harmonic oscillator: (c) the driving speed of the optimization result with different targets [26]; (d) the relative work fluctuation versus the oscillator's frequency (system's parameter) with a multiple target optimization. The red line is for the constant speed driving while the blue one is for the optimized protocol. The gray area is prohibited by the thermodynamic geometry [26]. (a), (b) are adapted from Ref. [25], while (c), (d) are adapted from Ref. [26].

因此, $\phi(t)$ 需要满足的方程为

$$\frac{dt}{d\phi} = C \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi}} = C \frac{ds}{d\phi}, \quad (24)$$

C 为一个待定的常数, s 为沿驱动路径累积的热力学距离. 这时在一个参数点附近停留的时间正比于此处驱动路径的局域热力学距离. 从而求出最优的驱动函数应当为

$$t = C \int_{\phi(0)}^{\phi(t)} d\phi \sqrt{g_{\mu\nu} \frac{d\Lambda^\mu}{d\phi} \frac{d\Lambda^\nu}{d\phi}}, \quad (25)$$

其中给定驱动路径后, $\phi(t)$ 确定了参数空间中的具体位置, 而 t 就表示从初始位置驱动到此处所要花费的时间. 按此方式选择的驱动, 可以使得热力学系统的整体耗散最小. 由于经历完整周期的驱动后, (25) 式变为 $\tau_p = CL$. 因此常数 $C = \tau_p/L$. 可以

看出, 当驱动最优时, 驱动路径 $\Lambda(t)$ 以热力学距离为参数. 此时, 经过相同长度的时间, 参数空间内应走过热力学度规给出的相同的距离.

在对于单一目标 (如效率) 进行优化时, 可以通过计算参数空间中热力学度规, 然后确定出最优的驱动方式 [25]. 不同于一般性的直接优化方式 [14], 此优化过程是不需要大量数值性优化过程的. 另外, 如图 3(c) 和图 3(d) 中的例子, 若优化的目标为多目标优化, 则可以根据 ϵ 这样的参数, 调节优化时的权重, 决定一定程度上牺牲哪一个目标来换取另一个目标的优化. 根据不同 ϵ 计算出的热机表现, 就确定了它在多个衡量标准时的 Pareto 前沿 [26].

6 总结

在近些年的研究中, 来源于几何的概念——几

何相和热力学距离——给受驱动微纳量子系统中热泵浦和热-功转换现象的研究提供了一种普适的方法和理解的角度。一般地,一个随机流的累积量产生函数中包含了驱动带来的几何相贡献。这部分贡献是可逆的,平均流的方向会因为驱动方向的转变而翻转。它可以用一个反对称的张量(几何曲率)来描述。在慢驱动极限下,驱动产生的定向热流、功提取、中间系统的额外熵等物理量都可以用一个类似于 Berry 相位(曲率)的几何相(曲率)来表示。在此范围内,几何相热流是一个重要的可测量物理量,它可以帮助人们实现在无静态偏置时的便捷的热流调控。一系列理论研究已经涵盖了量子分子结、自旋-玻色模型和量子光力系统等实际系统中各系统参数对于几何相热流的调控作用。

另一方面,源于热力学距离的几何度规则是一个对称张量,它不会随着驱动反向而反向。在具体的应用中,它可以被用来研究周期驱动量子热机中对于功率、效率、涨落的热力学限制,也可以在慢驱动条件下直接给出最优的驱动方式。

上面这两者,是非平衡量子系统的参数空间里内禀几何性质的不同体现。它可以帮助人们用统一的方式去研究大多数受驱动量子系统中的能流和能量转换过程。未来,它将指导人们设计出更具实用价值的量子热机^[56,57],量子热泵和量子制冷机等功能性量子热器件。本文的讨论局限在弱耦合系统,若未来能正确考虑系统-热库间一般耦合带来的非马尔可夫效应,则可以拓宽非平衡系统中几何性质研究的应用场景。

参考文献

- [1] Martínez I A, Roldán É, Dinis L, Petrov D, Parrondo J M, Rica R A 2016 *Nat. Phys.* **12** 67
- [2] Seifert U 2008 *Eur. Phys. J. B* **64** 423
- [3] Scully M O, Zubairy M S, Agarwal G S, Walther H 2003 *Science* **299** 862
- [4] Roßnagel J, Abah O, Schmidt-Kaler F, Singer K, Lutz E 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 30602
- [5] Rahav S, Harbola U, Mukamel S 2012 *Phys. Rev. A* **86** 43843
- [6] Goswami H P, Harbola U 2013 *Phys. Rev. A* **88** 13842
- [7] Wang Z, Zhang DM, Ren J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 220302 (in Chinese) [王子, 张丹妹, 任捷 2019 物理学报 **68** 220302]
- [8] Esposito M, Lindenberg K, Van den Broeck C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 130602
- [9] Nakpathomkun N, Xu H Q, Linke H 2010 *Phys. Rev. B* **82** 235428
- [10] Tu Z C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 020513
- [11] Van den Broeck C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 190602
- [12] Abiuso P, Perarnau-Llobet M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 110606
- [13] Miller H J, Mohammady M H, Perarnau-Llobet M, Guarnieri G 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 210603
- [14] Solon A P, Horowitz J M 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 180605
- [15] Ren J, Hänggi P, Li B 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 170601
- [16] Nie W, Li G, Li X, Chen A, Lan Y, Zhu S 2020 *Phys. Rev. A* **102** 43512
- [17] Ren J, Liu S, Li B 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 210603
- [18] Wang C, Ren J, Cao J 2017 *Phys. Rev. A* **95** 23610
- [19] Giri S K, Goswami H P 2017 *Phys. Rev. E* **96** 052129
- [20] Hino Y, Hayakawa H 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 13187
- [21] Yuge T, Sagawa T, Sugita A, Hayakawa H 2013 *J. Stat. Phys.* **153** 412
- [22] Sagawa T, Hayakawa H 2011 *Phys. Rev. E* **84** 51110
- [23] Crooks G E 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 100602
- [24] Sivak D A, Crooks G E 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 190602
- [25] Brandner K, Saito K 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 40602
- [26] Miller H J, Mehboudi M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 260602
- [27] Breuer H, Petruccione F 2002 *The Theory of Open Quantum Systems* (New York: Oxford University Press)
- [28] Kolodrubetz M, Sels D, Mehta P, Polkovnikov A 2017 *Phys. Rep.* **697** 1
- [29] Cavina V, Mari A, Giovannetti V 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 50601
- [30] Sekimoto K 1997 *J. Phys. Soc. Jpn.* **66** 1234
- [31] Berry M V 1984 *Proc. R. Soc. A* **392** 45
- [32] Thouless D J 1983 *Phys. Rev. B* **27** 6083
- [33] Deffner S, Lutz E 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 140404
- [34] Seifert U 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 40602
- [35] Brouwer P W 1998 *Phys. Rev. B* **58** R10135
- [36] Splettstoesser J, Governale M, König J, Fazio R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 246803
- [37] Sinitsyn N A, Nemenman I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 220408
- [38] Esposito M, Harbola U, Mukamel S 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1665
- [39] Chen T, Wang X, Ren J 2013 *Phys. Rev. B* **87** 144303
- [40] Xu D, Cao J 2016 *Front. Phys.* **11** 110308
- [41] Wang C, Ren J, Cao J 2015 *Sci. Rep.* **5** 11787
- [42] Wang Z, Wang L, Chen J, Wang C, Ren J 2022 *Front. Phys.* **17** 13201
- [43] Hino Y, Hayakawa H 2020 *Phys. Rev. E* **102** 012115
- [44] Guéry-Odelin D, Ruschhaupt A, Kiely A, Torrontegui E, Martínez-Garaot S, Muga J G 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 45001
- [45] Takahashi K, Fujii K, Hino Y, Hayakawa H 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 150602
- [46] Funo K, Lambert N, Nori F, Flindt C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 150603
- [47] Hatano T, Sasa S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3463
- [48] Weinhold F 1975 *J. Chem. Phys.* **63** 2479
- [49] Ruppeiner G 1995 *Rev. Mod. Phys.* **67** 605
- [50] Feng E H, Crooks G E 2009 *Phys. Rev. E* **79** 012104
- [51] Sivak D A, Crooks G E 2016 *Phys. Rev. E* **94** 052106
- [52] Brandner K, Saito K, Seifert U 2015 *Phys. Rev. X* **5** 031019
- [53] Brandner K, Seifert U 2016 *Phys. Rev. E* **93** 62134
- [54] Bhandari B, Alonso P T, Taddei F, von Oppen F, Fazio R, Arrachea L 2020 *Phys. Rev. B* **102** 155407
- [55] Potanina E, Flindt C, Moskalets M, Brandner K 2021 *Phys. Rev. X* **11** 021013
- [56] Tu Z 2021 *Front. Phys.* **16** 33202
- [57] Quan H, Liu Y, Sun C, Nori F 2007 *Phys. Rev. E* **76** 031105

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Nonequilibrium thermal transport and thermodynamic geometry in periodically driven systems^{*}

Wang Zi Ren Jie[†]

(*Shanghai Key Laboratory of Special Artificial Microstructure Materials and Technology, Center for Phononics and Thermal Energy Science, China-EU Joint Lab on Nanophononics, School of Physics Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China*)

(Received 15 September 2021; revised manuscript received 25 October 2021)

Abstract

With the in-depth understanding of nano-/micro-scaled systems and the developing of the corresponding experimental techniques, the heat transport and energy conversion processes in these small systems have attracted much interest recently. In contrast to the static manipulation methods, which hinge on the steady nonequilibrium sources such as temperature bias, chemical potential difference, etc., the temporal driving methods can control small systems in nonequilibrium non-steady states with much more versatility and universality. The research on periodically driven small systems holds both fundamental and pragmatic promises. This review is based on the fundamental concept of geometry. By analyzing the geometric phase and thermodynamic length in the transport process and the energy conversion process, we provide a unified perspective for the recent researches on the thermodynamic properties of driven nonequilibrium quantum systems. Thermodynamic geometry not only is the intrinsic origin of the nontrivial transport and dissipation, but also provides us with an all-applicable theoretical framework. The discussion over the geometry would yield multiple thermodynamic constraints on the transport and energy conversion, and can naturally construct a general optimization method as well. This will conduce to a better understanding of functionality for nonequilibrium quantum many-body systems acting as thermal machines. Also, this will inspire people to design quantum thermal machines with simultaneously more ideal performance, i.e. higher efficiency, higher power and higher constancy.

Keywords: nonequilibrium quantum system, geometric phase, thermodynamic distance, heat pump, quantum heat engine

PACS: 05.70.Ln, 03.65.Vf, 07.20.Pe

DOI: [10.7498/aps.70.20211723](https://doi.org/10.7498/aps.70.20211723)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11935010, 11775159).

[†] Corresponding author. E-mail: xonics@tongji.edu.cn



从横场伊辛链到量子 E_8 可积模型

王骁 杨家豪 吴建达

From the transverse field Ising chain to the quantum E_8 integrable model

Wang Xiao Yang Jia-Hao Wu Jian-Da

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 70, 230504 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211836

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211836>

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

专题: 非平衡量子多体系统

从横场伊辛链到量子 E_8 可积模型*王骁¹⁾ 杨家豪¹⁾ 吴建达^{1)2)†}¹⁾ (上海交通大学李政道研究所, 上海 201210)²⁾ (上海交通大学物理与天文学院, 上海 200240)

(2021 年 10 月 3 日收到; 2021 年 11 月 23 日收到修改稿)

本文综述了近年来关于横场伊辛链模型及量子 E_8 可积模型研究工作的一系列理论及实验进展. 在针对横场伊辛链的研究工作中, 理论上发现格林艾森比率 (热或磁胀系数与比热之比) 在此模型中独特的奇异量子临界行为, 并实质性地扩展了能涌现横场伊辛链普适类的微观模型. 这些理论进展成功地推进了一系列合作实验在准一维反铁磁材料 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ 及 $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ 中首次实现横场伊辛链普适类. 在针对量子 E_8 可积模型的研究工作中, 理论上严格计算了该系统的低温局域动力学行为及在零转动量之时的动力学结构因子, 并在动力学结构因子的连续谱区域得到了级联幂次发散的奇性谱边激发. 这些理论进展在结合详细的量子临界标度行为分析及大规模 iTEBD 数值计算之后, 成功促成了包括太赫兹谱学测量、非弹性中子散射、核磁共振等系列实验, 在 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ 中首次实现量子 E_8 可积模型. 量子 E_8 可积模型的物理实现为在真实材料中研究量子可积系统的物理开拓了新的边界. 这一系列关于横场伊辛链及量子 E_8 可积模型的研究进展为量子不可积系统的研究带来了新的契机, 并将启发凝聚态系统、冷原子系统、统计场论和共形场论等相关方向的研究.

关键词: 可积系统, 量子磁性, 普适类, 自旋动力学**PACS:** 05.30.Rt, 31.15.aq, 67.30.hj, 74.40.Kb**DOI:** 10.7498/aps.70.20211836

1 引言

量子相变指在零温下通过调节参数, 强关联多体系统发生的相变行为^[1]. 在量子临界点 (quantum critical point, QCP) 附近, 强烈的量子涨落往往会涌现出奇异的量子临界行为^[2–7]. 对这些量子临界行为的深入理解将有助于解答长期悬而未决的物理问题^[8–16], 包括非常规高温超导体、非费米液体等^[17–19], 并有助于在材料中实现量子自旋液体^[20,21], 因此吸引着理论和实验的持续研究. 量子临界行为能被临界指数所刻画, 每一组量子临界指数对应于一种普适类, 并往往伴随相应的低能有效量子场论^[1]. 即使微观起源不同, 属于同

一普适类的模型在 QCP 附近也会展示出非常一致的物理, 如标度规律、关联行为及动力学激发等^[1]. 因此, 对普适类的深入研究可以使人们同时理解 QCP 附近大量具有该普适类的微观模型, 而这意味着将实际系统调节向 QCP 附近是实现并研究普适类之必要. 然而, 由于真实材料内在的复杂性, 只有极少数的 QCP 可以被实验实现, 即使一些形式上并不复杂的微观模型, 如横场伊辛链模型^[22] (transverse field Ising chain model, TFIC 模型, 见方程 (1)), 实验上也一直难以找到候选材料实现并研究其对应的普适类.

在 QCP 处对体系的微扰可能会进一步涌现出丰富的物理, 如涌现对称性和涌现可积性 (涌现对称性指量子系统在低能物理中的对称性大

* 上海自然科学基金 (批准号: 20ZR1428400)、上海浦江人才计划 (批准号: 20PJ1408100) 和上海人才计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wujd@sjtu.edu.cn

于完整的哈密顿量的对称性. 涌现可积性指不可积系统在某些特定的参数区间成为可积系统, 产生了可积性; 或可积系统在恰当扰动下又呈现出新的可积性^[3–6,23–26]. 自 1989 年起 Zamolodchikov 等^[23,24,27–29] 发展了微扰共形场论 (perturbed conformal field theory, pCFT). 他们通过在不同普适类的临界点处施加微扰, 发现了一系列能够由例外李代数 (exceptional Lie algebra) 描述的可积模型^[24]. 比如, QCP 处的 TFIC 模型在纵向磁场的微扰下会涌现出量子 E_8 可积模型^[23,24,27–31]. 这类涌现现象同样具有普适性, 一方面不依赖于微观模型的具体细节, 另一方面拓展了量子可积模型范围, 有利于推动实验在实际材料中对可积模型进行研究.

近年来, 吴建达及其合作者在理论和实验的共同努力下, 在强关联材料 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ (BCVO) 和 $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ (SCVO) 中首次成功实现 TFIC 模型的普适类^[22,32–35], 并在 BCVO 材料中首次实现量子 E_8 可积模型^[30,36,37]. 这一系列进展不仅是量子可积磁性理论和实验上的突破^[2], 也展示了对量子临界行为、普适类、涌现对称性和涌现可积性研究的重要意义, 更开拓了于真实材料中实现并研究量子可积模型的重要方向. 本文按照历史的脉络, 从理论和实验两个方面综述了这一系列的进展. 全文组织如下: 第 2 节分别回顾 TFIC 模型和横场海森伯-伊辛链的量子临界行为及其普适类; 第 3 节介绍证实 BCVO 材料和 SCVO 材料中 TFIC 模型普适类的实验进展; 第 4 节概括量子 E_8 模型的理论背景和进展; 第 5 节叙述量子 E_8 模型在材料中的实验实现; 第 6 节为总结与展望.

2 伊辛普适类

2.1 横场伊辛链

TFIC 模型的哈密顿量为^[1,22]

$$H_1 = -J \sum_i (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + g \sigma_i^x), \quad (1)$$

其中 J 及 gJ 分别为铁磁及横场与自旋间的相互作用强度. $S_i^\alpha = \sigma_i^\alpha/2$, $\alpha = x, y, z$ 表示在格点 i 处的自旋 $1/2$ 算符, σ_i^α 是泡利矩阵. 该模型是一精确可解模型, 利用约当-魏格纳变换 (Jordan-Wigner transformation) 和波格留波夫 (Bogoliubov) 变换可以对角化该哈密顿量并求解出其激发谱^[1,22,32]:

$$H_1 = \sum_k \varepsilon_k \left(\gamma_k^\dagger \gamma_k - \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

其中 $\varepsilon_k = 2J\sqrt{1+g^2-2g\cos(ka)}$ 为单粒子激发谱, a 为晶格常数, $\gamma_k^\dagger$ 和 γ_k 分别为波格留波夫变换后的费米子产生湮灭算符. 显然, 当 $g \neq 1$ 时, 系统存在能隙, 该能隙在 $g = g_c = 1$ 时消失. 零温时, 该模型存在一个横场驱动的铁磁相和顺磁相之间的量子相变 (图 1)^[1,22], 对应的 QCP 位于 g_c .

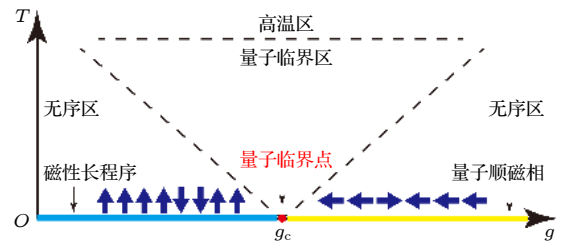


图 1 TFIC 模型相图. g 为横场参数, $g_c = 1$ 为 QCP. 在相变点左侧, 青蓝色实线代表零温下的铁磁相; 在相变点右侧, 黄色实线代表零温下的顺磁相. 相图中的两斜虚线为低温下各个不同无序区域的过渡边界, 而上方虚线则是量子临界区域到经典区域的过渡边界

Fig. 1. A phase diagram of TFIC, where g labels transverse field, and $g_c = 1$ is the QCP. The cyan solid line represents for ferromagnetic phase at zero temperature on the left of the critical point, while on the right the yellow solid line stands for a paramagnetic phase at zero temperature. The two tilted dotted lines illustrate the crossovers of different disorder phases in low temperature region, while the dotted line above shows a crossover from quantum critical region to classical region.

1970 年, Pfeuty^[22] 首次研究了 TFIC 模型的量子相变. 1984 年, Zamolodchikov 等^[3,30,38] 证明了当 $g = g_c$ 时 TFIC 模型的低能物理可以被中心荷 $1/2$ 的共形场论 (central charge $1/2$ conformal field theory, $\text{CFT}_{c=1/2}$) 所描述. 在标度极限下^[30], TFIC 模型中的自旋算符 σ_i^z 及 σ_i^x 分别对应于 $\text{CFT}_{c=1/2}$ 中自旋密度算符 $\sigma(x)$ 及能量密度算符 $\varepsilon(x)$. 当 $|x| \rightarrow 0$ 时, 其两点关联函数具有标度行为^[31,38]

$$\langle \sigma(x) \sigma(0) \rangle \sim 1/|x|^{1/4}, \quad \langle \varepsilon(x) \varepsilon(0) \rangle \sim 1/|x|^2, \quad (3)$$

$\sigma(x)$ 和 $\varepsilon(x)$ 对应的标度维度分别是 $2\Delta_\sigma = 1/8$ 和 $2\Delta_\varepsilon = 1$ ^[30,31,38], 它们刻画了 TFIC 模型的普适类, 同时也刻画了二维经典伊辛模型的普适类^[39] (以下简称该普适类为伊辛普适类). 然而, 自 TFIC 模型提出后的近半个世纪里, 具有伊辛普适类的强关联材料却一直没有被确认存在, 这是因为一方面实验上受限于实验精度, 另一方面缺乏有效的理论

指导去分辨并证实观测到的量子临界行为是否属于伊辛普适类. 比如, 方程 (3) 所提及的标度行为是等时短程关联, 实验上不具有可操作性, 无法进行测量. 2018 年, 吴建达与合作者^[32]关于伊辛普适类格林艾森比率 (Grüneisen ratio) 量子临界标度行为的理论突破为实验提供了一个可靠的判定标准. 这里先简要归纳伊辛普适类在 QCP 附近的标度规律, 这些标度规律皆可作为判断伊辛普适类的依据^[1,22,32]. 首先, QCP 附近系统的磁化 M_z 满足 $M_z \approx |g - g_c|^\delta$, 其中 $\delta = 1/8$. 其次, 在 QCP 附近考虑自旋关联函数

$$C_{ij} = \langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle - \langle \sigma_i^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle, \quad (4)$$

该关联随格点间距呈指数衰减, 即 $C_{ij} \approx e^{-|i-j|/\xi}$, 其中 ξ 被称为关联长度, 满足标度律 $1/\xi \approx |g_c - g|^\nu$, $\nu = 1$. 此时系统激发的能隙满足标度律 $\Delta \approx |g_c - g|^{z\nu}$, $z = 1$ 被称为动力学临界指数^[1,32,35].

由于临界指数也可以直接用于分析热力学量临界行为, 因此在实验方面, 可以通过测量相应热力学量的量子临界行为考察相关材料的普适类性质. 比如考虑和磁热效应相关的热力学量格林艾森比率:

$$\begin{aligned} \Gamma_H &= \frac{\alpha_H}{c_H} = -\frac{1}{T} \frac{(\partial M / \partial T)_H}{(\partial S / \partial T)_H} \\ &= -\frac{1}{T} \frac{(\partial S / \partial H)_T}{(\partial S / \partial T)_H}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 H 是可控外场; c_H , α_H , M 和 S 分别为摩尔比热、磁膨胀系数、每摩尔磁化强度和熵. 在 TFIC 模型中, 相关物理量均可被解析地求解出来^[32]. 零温极限下, 格林艾森比率在横场趋于 TFIC 模型的 QCP 时趋于发散 $\Gamma_{cr}(t \rightarrow 0, g) \approx \frac{\alpha}{c_v} \text{sgn} \frac{g - g_c}{|g - g_c|}$, 而在量子临界区内, 趋于 QCP 时, 格林艾森比率则趋于常数^[32]. 此奇异的量子临界行为一方面表明了 TFIC 模型的 QCP 是本性奇点, 另一方面则可作为 TFIC 模型中伊辛普适类的独特特征, 为实验探测伊辛普适类提供有效的理论指导. 值得一提的是, 格林艾森比率的发散行为意味着熵极大值会出现在 QCP 附近^[40], 这在相关材料的量子临界测量中得到确认, 如 $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ 和 $\text{CeCu}_{6-x}\text{Au}_x$ 等^[41,42]. 于是, 基于上述理论, 在实验中可以通过测量相关材料格林艾森比率的量子临界行为, 判断该材料的普适类是否是伊辛普适类.

2.2 横场海森伯-伊辛链

接下来总结横场海森伯-伊辛链在外加横场之下的可能量子相变及其普适类特征, 首先考察外加均匀横场之下的海森伯-伊辛链:

$$H = \sum_i J[\varepsilon(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] + H_x \sum_i S_i^x, \quad (6)$$

这里 H_x 是自旋和横场的耦合系数. ε 通常取 0—1 之间, 当 $\varepsilon = 0, 1$ 时该模型分别对应 TFIC 和横场海森伯链, 于是称该模型为横场海森伯-伊辛链^[43,44]. 此前已经证明了该模型在加横场后会存在伊辛普适类^[44]. 2019 年, 吴建达及合作者^[35]利用大规模 infinite time-evolving block decimation (iTEBD) 数值计算证明了引入垂直于所加均匀横场的交错横场后, 该模型在量子相变点处依旧展示了伊辛普适类. 考虑一般的带有交错横场的海森伯-伊辛链哈密顿量

$$\begin{aligned} H &= \sum_i J[\varepsilon(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] \\ &\quad - \sum_i [g_x S_i^x + (-1)^i g_y S_i^y]. \end{aligned} \quad (7)$$

利用 iTEBD 数值方法, 在 g_x - g_y - ε 三维参数空间内可以精确计算该有效模型中展现伊辛普适类物理的 QCPs, 所有的 QCPs 组成了 g_x - g_y - ε 参数空间内一量子临界曲面, 如图 2^[35] 所示.

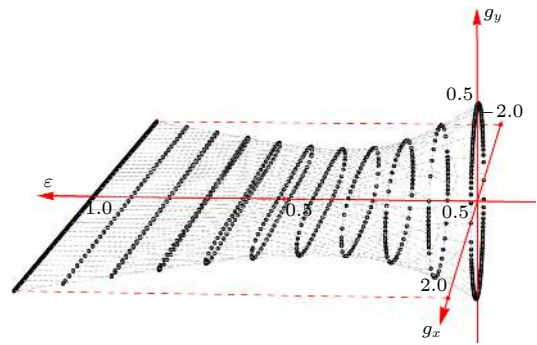


图 2 由 iTEBD 计算得出的针对模型方程 (7) 的量子临界曲面 (图片经文献^[35] 允许转载, 版权归 2019 IOP Publishing Ltd 所有)

Fig. 2. Quantum critical surface calculated by iTEBD algorithm for Eq. (7). (Reprinted with permission from Ref. [35]. Copyright 2019 IOP Publishing Ltd.).

该理论工作进一步考察了带有交错横场的海森伯-伊辛链存在沿 z 方向的 4 周期磁场微扰项的情形, 发现这一微扰项仅轻微移动 QCP 的位置而不改变相应的伊辛普适类. 计算结果见图 3^[35].

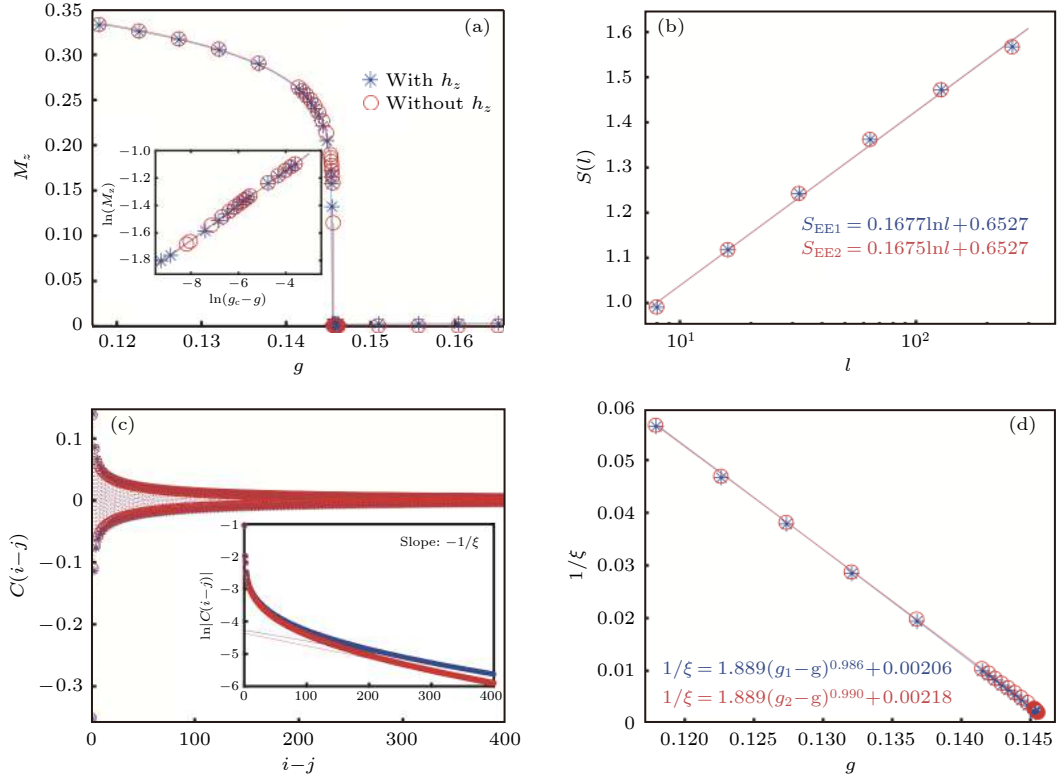


图 3 (a) 交错磁化 $M_z(g)$ 的计算结果. 蓝线和红线分别代表了带有和不带有 4 周期项的数据. 这两条曲线可以分别用 $M_z = 0.524(g_{c1} - g)^{0.126}$ 和 $M_z = 0.530(g_{c2} - g)^{0.128}$ 来拟合, 其中 $g_{c1} = 0.1454$, $g_{c2} = 0.1456$, 在误差精度范围内均可得到临界指数为 $1/8$ 的结论. 内嵌图是利用对数坐标轴画出的 M_z 的标度行为. (b) 半对数坐标轴下纠缠熵 $S_{EE}(l)$ 和链长 l 的关系, 两种情况都符合伊辛普适类的 $1/2$ 中心荷. (c) 当 $g = 0.1448$ 时, 自旋两点关联函数和距离 $i - j$ 间的函数关系. 内嵌图展示了 $\ln C(i - j)$ 在长程时与 $i - j$ 成正比. (d) 关联长度的倒数和 g 的函数关系, 两种情况都符合伊辛普适类中关联长度指数 $\nu = 1$ 的结论 (图片经文献 [35] 允许转载, 版权归 2019 IOP Publishing Ltd 所有)

Fig. 3. (a) iTEBD results for staggered magnetization $M_z(g)$. The blue line and red line represent iTEBD data with and without the four periodic term, respectively. The two curves can be fitted with $M_z = 0.524(g_{c1} - g)^{0.126}$ and $M_z = 0.530(g_{c2} - g)^{0.128}$, where $g_{c1} = 0.1454$, $g_{c2} = 0.1456$, and critical exponent $\delta = 1/8$ is obtained within error bar for both cases. Inset shows scaling behavior of M_z in log-log plot. (b) Entanglement entropy $S_{EE}(l)$ versus length l in a semi-log plot, both fall into central charge $c = 1/2$ of TFIC universality. (c) Spin-spin correlation function versus distance $i - j$ at $g = 0.1448$. Inset shows $\ln C(i - j)$ being proportional to $i - j$ in long range region. (d) The inverse of correlation length in terms of g , both agree with correlation length exponent $\nu = 1$. (Reprinted with permission from Ref. [35]. Copyright 2019 IOP Publishing Ltd.).

综上所述, 该工作利用 iTEBD 数值算法证明了在带有交错横场的海森伯-伊辛链中通过合理调整所加磁场, 可以到达伊辛普适类的量子临界区, 从而实现伊辛普适类的物理. 而由于 BCVO 和 SCVO 材料均可被海森伯-伊辛链所描述 [33–37], 理论上预期这两种材料在横场调节之下可以实现伊辛普适类. 第 3 节中将叙述在 BCVO 和 SCVO 材料中实验实现伊辛普适类的一系列工作. 实验测量所得到的 BCVO 材料中格林艾森比率的量子临界行为完美符合了伊辛普适类中该物理量量子临界行为的理论结果, 从而为 BCVO 在外加强横场之下涌现伊辛普适类提供了坚实的判定依据 [33]. 而利用核磁共振 (NMR) 实验辅以数值算法, 通过对 SCVO 材料及其有效模型进行研究, 我们证实

了 SCVO 材料在弱横场下展现了伊辛普适类 [34].

3 BCVO 和 SCVO 材料中的伊辛普适类

利用上述伊辛普适类的相关理论, 吴建达及合作者 [32–37] 对 BCVO 和 SCVO 材料展开测量并证实了这两类准一维材料在外加横场之下能够实现伊辛普适类. BCVO 和 SCVO 是能被海森伯-伊辛链有效描述的准一维反铁磁材料, 在外加磁场下一般性的有效哈密顿量为 [43]

$$\begin{aligned} H = J \sum_i [\varepsilon (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] \\ - \mu_B \sum_i S_i^z \tilde{g} H_0, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 μ_B 是玻尔磁子, $\mathbf{H}_0$ 为外加磁场, $\tilde{g}$ 代表 g 张量: 其中

$$\tilde{g} = \begin{pmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{yx} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{zx} & g_{zy} & g_{zz} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

考虑加横向磁场 $\mathbf{H}_0 = H_0 \mathbf{e}_x$, 由于 g 张量的非对角元, 此时在 Y 轴和 Z 轴会诱导出垂直于该磁场的有效磁场, 因此有^[45]

$$\begin{aligned} & \mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \tilde{g} \mathbf{H}_0 \\ &= \mu_B \sum_i [S_i^x g_{xx} + S_i^y g_{xy} + S_i^z g_{xz}] \mathbf{H}_0, \end{aligned} \quad (10)$$

$$g_{xx} = (g_\xi \cos^2 \theta + g_\zeta \sin^2 \theta) \cos^2 \phi + g_\psi \sin^2 \phi, \quad (11)$$

$$g_{xy} = \frac{1}{2}(g_\xi \cos^2 \theta - g_\psi + g_\zeta \sin^2 \theta) \sin(2\phi), \quad (12)$$

$$g_{xz} = (g_\zeta - g_\xi) \sin \theta \cos \theta \cos \phi,$$

$$\phi = \phi_1 + \frac{\pi}{2}(i-1). \quad (13)$$

而 ξ 轴、 ψ 轴和 ζ 轴代表将实验室的 XYZ 坐标轴绕 Y 轴转 θ 角, 绕 Z 轴转 ϕ 角后得到的材料中的局域坐标轴. CoO_6 的晶格结构、螺旋链结构及坐标轴间的关系如图 4 所示.

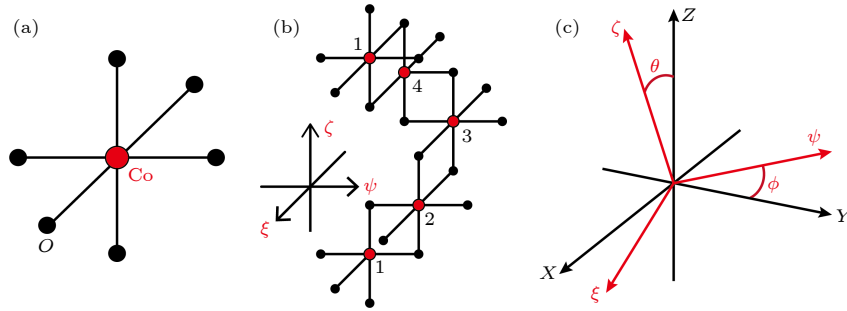


图 4 (a) CoO_6 八面体的结构; (b) CoO_6 四周期螺旋链的单元结构及局域坐标系 $\xi\psi\zeta$; (c) 局域坐标系 $\xi\psi\zeta$ 与实验室坐标系 XYZ 的关系

Fig. 4. (a) Structure of CoO_6 octahedron; (b) a unit structure of CoO_6 four-period screw chain and the local coordinate $\xi\psi\zeta$; (c) relation between the local coordinate $\xi\psi\zeta$ and the lab coordinate XYZ .

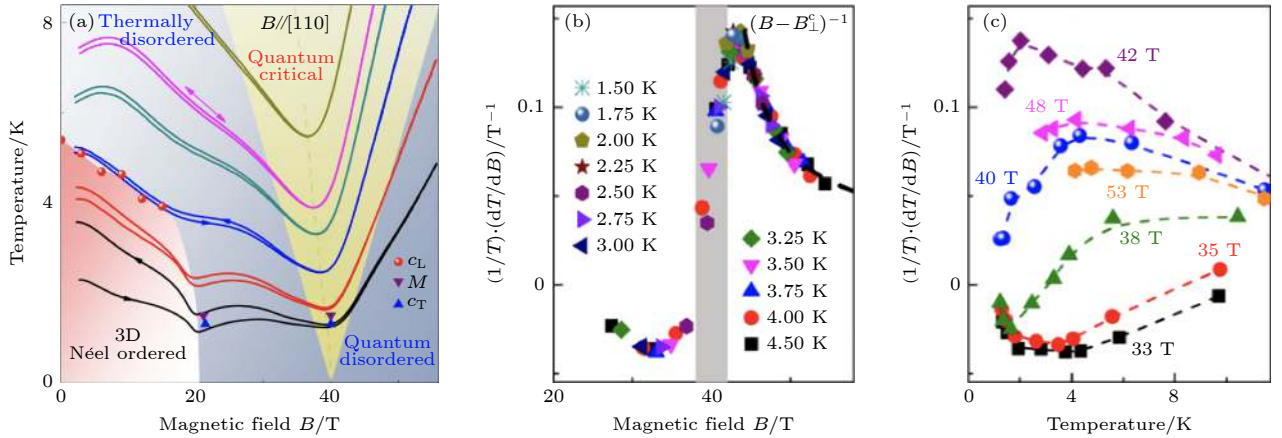


图 5 (a) BCVO 材料在加 $[110]$ 方向磁场后的相图, 利用从不同起始温度出发的绝热磁热测量得出. 红色区域内直到 20 T 处标记了一有限温的三维序. 一维 QCP 出现在 $B_\perp^c = 40$ T 附近, 上方黄色区域为量子临界区. (b), (c) 以磁场和温度作为自变量的格林艾森比率实验数据. 在图 (b) 中, 大于 QCP 时不同温度的数据展现了 $\Gamma_B \approx (B - B_\perp^c)^{-1}$ 的发散行为. 相对应地, 当场强在临界场强附近时, 低温下格林艾森比率 $\Gamma_B(T)$ 趋于收敛 (图片经文献^[33]允许转载, 版权归 2018 American Physical Society 所有)

Fig. 5. (a) Phase diagram of BCVO material with a transverse field along $[110]$, obtained from adiabatic magnetocaloric-effect measurements starting from different temperatures. Red area labels a finite-temperature three dimensional (3D) order until 20 T. The one dimensional (1D) QCP appears around $B_\perp^c = 40$ T, while the yellow area above labels quantum critical region. (b), (c) Experimental data of Grüneisen ratio in terms of magnetic field and temperature. In panel (b) data of different temperature above the QCP shows divergent behavior of $\Gamma_B \approx (B - B_\perp^c)^{-1}$. Correspondingly, with the field being around the critical field, Grüneisen ratio converges in low temperature. (Reprinted with permission from Ref. ^[33]. Copyright 2018 American Physical Society).

对于外加磁场沿 [110] 和 [100] 两种情况, ϕ_1 分别取 0° 和 45° . 以 BCVO 为例, 若对该材料施加沿 [110] 的磁场, 则 $g_{xy} = g_{xz} = 0$, 可以避免诱导出有效交错横场. 在低温下对该材料进行磁热效应测量, 可以得到随温度和横场变化的格林艾森比率数据. 对该数据的标度行为分析完全符合理论上对 TFIC 模型格林艾森比率量子临界行为的预期, 从而确认该材料 QCP 在 $B_{\perp}^c = 40$ T 附近, 并在该点附近涌现出伊辛普适类 [图 5][33].

然而, 40 T 左右的量子临界磁场过于昂贵, 难以从此出发继续深入研究与伊辛普适类相关的物理. 此后不久, 吴建达及合作者 [34–37] 在对 SCVO 和 BCVO 的进一步研究中发现, 沿 [100] (或 [010]) 方向施加一横向磁场所诱导出的沿 [010] (或 [100]) 的有效交错横场能极大降低达到 QCP 所需要的磁场强度, 相关的数值分析已在 2.2 节中提及 [图 2][35]. 这里介绍吴建达及合作者对施加沿 [100] 方向磁场的 SCVO 材料的伊辛普适类 QCP 的实验进展. 此时, 该材料的有效哈密顿量为 [34]

$$\begin{aligned} H = J \sum_i [\varepsilon (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] \\ - \mu_B g_x \sum_i \{ H S_i^x + H_y (-1)^i S_i^y \\ + H_z S_i^z \cos[\pi(2i-1)/4] \}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中 $J \approx 7.5$ meV, 各向异性因子 $\varepsilon = 0.47$. $g_x \approx 2.79$ 为旋磁比率, 诱导出的有效交错横场 $H_y \approx 0.4H$, 四周期场 $H_z \approx 0.14H$. 利用 NMR 实验可以测量此时的 QCP 及其普适类, 测量结果见图 6[34]. 在 SCVO 中, 沿 [100] 方向调节磁场会涌现出两个 QCPs, 记为 H_{c1} 和 H_{c2} . 其中, $H_{c1} \approx 7.03$ T 代表三维序的终点, 而 $H_{c2} \approx 7.7$ T 对应伊辛普适类的量子临界点 [34].

这篇工作表明, 对于能被海森伯-伊辛链有效描述的磁性材料而言, 若外加横向磁场时能诱导出新的平面内交错磁场, 这些诱导场能够有效压制达到临界磁场所需要的场强大小, 从而在一个较小的磁场环境下实现伊辛普适类.

本节总结了在 BCVO 和 SCVO 中实现伊辛普适类的实验工作 [33,34]. 在实现伊辛普适类之后, 笔者及合作者结合理论工作进展 [30,46], 推动了量子 E_8 可积模型 (以下简称 E_8 模型) 的物理实现. 下文将首先介绍与该模型相关的理论背景及研究进

展 [30,46–50], 再详细描述理论及实验共同合作促成的该奇异模型在 BCVO 材料中的实现.

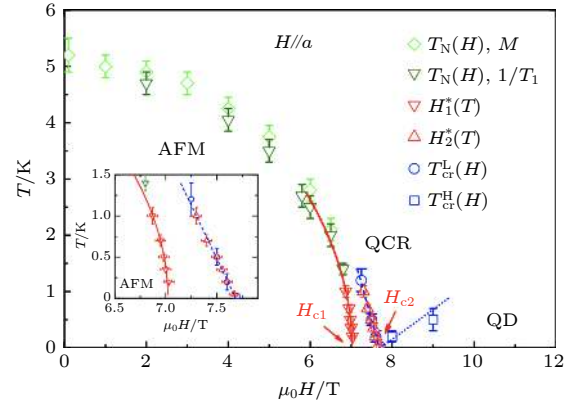


图 6 外加 [100] 方向磁场的 SCVO 材料相图. 图中 AFM, QCR 和 QD 分别代表反铁磁相、量子临界区和量子无序区. 两个 QCPs 分别为 $H_{c1} \approx 7.03$ T 和 $H_{c2} \approx 7.7$ T. 蓝色线可以被曲线 $T_{cr}^{L,H} \sim |H_{c2} - H|$ 所拟合, 揭示了该 QCP 对应伊辛普适类. 内嵌图是两 QCPs 附近拟合曲线的放大 (图片经文献 [34] 允许转载, 版权归 2019 American Physical Society 所有)

Fig. 6. Phase diagram of SCVO with transverse field along [100]. The AFM, QCR and QD in the figure corresponds to anti-ferromagnetic phase, quantum critical region and quantum disordered region, respectively. The two QCPs are $H_{c1} \approx 7.03$ T and $H_{c2} \approx 7.7$ T. The blue line can be fitted with $T_{cr}^{L,H} \sim |H_{c2} - H|$, implying the Ising universality of the 1D QCP. Inset is an enlarged figure of the fitting curves near two QCPs. (Reprinted with permission from Ref. [34]. Copyright 2019 American Physical Society).

4 量子 E_8 可积模型

1990 年前后, Zamolodchikov [23] 和 Fateev 等 [24] 证明了对应于某一特定中心荷的 CFT, 若它被一相关元场所微扰, 该 CFT 对应的哈密顿量会成为能够被例外李代数所描述的可积模型 [16,27–31]. 特别地, 对于中心荷 $c = 1 - 6/[p(p+1)]$ 的 CFT 哈密顿量 H_p , 其被相关元场 Φ_p 微扰的哈密顿量为

$$\hat{H}_p = H_p + \lambda \int \Phi_p(x) dx. \quad (15)$$

当 $p = 6, 4, 3$ 时, 该微扰哈密顿量可以分别被 E_6, E_7, E_8 例外李代数所描述, 对应的系统分别包含有 6, 7, 8 种准粒子激发 [24,51–57]. 在 QCP 处, TFIC 模型是中心荷 $c = 1/2$ 的 CFT [3], 在标度极限下, 自旋密度算符为相关元场 [30,31], 在其微扰下的哈密顿量

$$H = H_{c=1/2} + h \int \sigma(x) dx \quad (16)$$

成为一个激发谱能够被 E_8 例外李代数所描述量子可积模型 [16,27–38], 其对应的格点模型为被一纵向磁场所微扰的 QCP 处 ($g = g_c = 1$) 的 TFIC 模型 [30,36,37]:

$$H = -J \sum_i (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \sigma_i^x + h_z \sigma_i^z), \quad (17)$$

其中处在 QCP 处的 TFIC 哈密顿量 $-J \sum_i (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \sigma_i^x)$ 对应中心荷 $c = 1/2$ 的哈密顿量 $H_{c=1/2}$, 纵向场微扰 $-J \sum_i h_z \sigma_i^z$ 对应元场微扰 $h \int \sigma(x) dx$, 而 $h_z J$ 是纵向磁场与自旋间的耦合强度, 对应于标度极限下方程 (16) 中的 h . 对 TFIC 模型而言, 标度极限由如下转换方式给出 [30]:

$$a \rightarrow 0, J \rightarrow \infty, h_z \rightarrow 0, aJ \rightarrow \text{finite value}. \quad (18)$$

即在标度极限下, 晶格常数 a 与纵场 h_z 趋于 0, 同时保持能隙 $\Delta \approx Jh_z^{8/15}$ 和 $2Ja$ 为有限值. 由此, 在标度极限下

$$h \approx J^{15/8} h_z, \sigma(x) \approx J^{1/8} \sigma_j^z, \varepsilon(x) \approx J \sigma_j^x. \quad (19)$$

E_8 模型包含有 8 种不同的准粒子激发. 其中最轻的准粒子质量 $m_1 = Ch^{8/15}$, $C = 4.4049 \dots$ [58]. 而次轻准粒子质量 m_2 与 m_1 满足黄金分割, 即 $m_2 = 2 \cos(\pi/5) m_1 \approx 1.618 m_1$. 其他准粒子的质量都可以通过 m_1 及 m_2 精确地得到. E_8 模型相图如图 7 所示. 该相图给出了 E_8 准粒子激发与伊辛普适类的联系: 在 TFIC 模型的伊辛普适类处, QCP 附近的物理可以用中心荷 1/2 的共形场论描述. 此时纵向磁场的微扰提供了一个微弱的禁闭效应, 引起一系列完美共振的介子态, 从而产生 8 种 E_8 模型的准粒子激发 [59,60]. 因此纵向磁场较小的区间正是可以涌现出量子 E_8 模型的区间, 如图 7 中蓝色区域所示. 而这些准粒子间的精确质量关系亦见于图 7.

E_8 模型哈密顿量的本征态可以表达为一列 E_8 准粒子的直积态 $|A(\theta_1) \cdots A(\theta_n)\rangle_{a_1, \dots, a_n}$. 其中 $|A(\theta_i)\rangle_{a_i}$ 为单粒子态, 满足正交归一化关系 $a_i \langle A(\theta_i) | A(\theta_j) \rangle_{a_j} = 2\pi \delta_{a_i a_j} \delta(\theta_i - \theta_j)$. θ_i 和 a_i ($i = 1, \dots, 8$) 分别代表该粒子的快度和 8 个 E_8 粒子之一, 其能量及动量满足 $E_i = m_i \cos \theta_i$, $P_i = m_i \sin \theta_i$, 这里设定系统的特征速度 $c = 1$ 及普朗克常量 $\hbar = 1$. E_8 模型的基态是不包含任何准粒子激发的真空态, 记为 $|0\rangle$. 对时空关联函数作傅里叶变换后有动力学结构因子 (dynamical structure factor, DSF) $D^{\Phi\Phi}(\omega, q) = \int dx dt e^{i(\omega t - qx)} \langle \Phi(x, t) \Phi(0, 0) \rangle$,

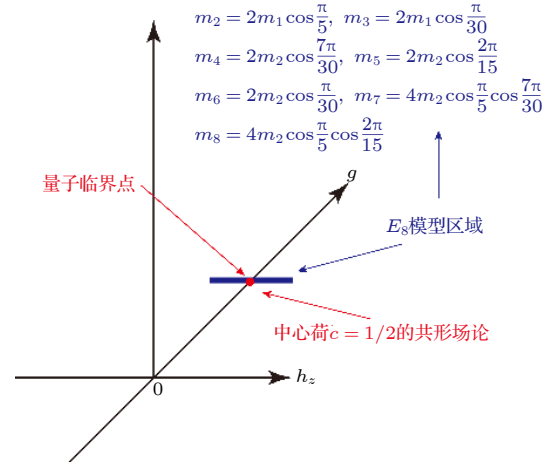


图 7 E_8 模型相图. 图中蓝色实线代表了 E_8 模型涌现的区域, 其中 g 和 h_z 分别对应于横场参数 g 和方程 (17) 中的 h_z . 其余 E_8 准粒子的质量和 m_1 和 m_2 的关系列于右上, 其中 m_1 为最轻准粒子的质量

Fig. 7. A phase diagram of E_8 model. The blue solid line in the figure implies region of E_8 model emerging, where g and h_z correspond to transverse parameter g and h_z in Eq. (17) respectively. Relations of other E_8 particles' masses to m_1 and m_2 are listed in the top right-hand corner, where m_1 is mass of the lightest particle.

其中 Φ 可以取自自旋密度算符或能量密度算符, 分别对应于格点模型中的 σ^z 和 σ^x . E_8 模型中 σ^y 不存在对应的 CFT 元场, 因此无法直接计算 σ^y 的 DSF, 但可以证明 σ^y 的 DSF $D^{yy}(\omega, q)$ 与 $D^{zz}(\omega, q)$ 间满足严格关系 $D^{yy}(\omega, q) = \omega^2 D^{zz}(\omega, q) / (4J^2)$ [46]. 于是, 考虑零动量的情形, 通过引入不同数目 E_8 粒子完备基, DSF 的莱曼表示 (Lehmann representation) 为 [30,36,37]:

$$D^{ii}(\omega, q = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{a_i\}} \left(\prod_{a_i} \frac{1}{N_{a_i}!} \right) \frac{1}{(2\pi)^{n-2}} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta_1 \cdots d\theta_n |F_n^{\sigma^i}(\theta_1, \dots, \theta_n)|^2 \delta\left(\omega - \sum_{i=1}^n E_i\right) \delta\left(\sum_{i=1}^n P_i\right), \quad (20)$$

其中 $i = x, z$, 而 $D^{yy}(\omega, q = 0)$ 由前述关系给出. $F_n^{\sigma^i}(\theta_1, \dots, \theta_n)$ 为对应于 σ^i 算符的包含 n 粒子的形式因子 (Form Factor, FF) [28],

$$F_n^{\sigma^i}(\theta_1, \dots, \theta_n) = \langle 0 | \sigma^i | A(\theta_1), \dots, A(\theta_n) \rangle_{a_1, \dots, a_n}. \quad (21)$$

关于 FF 的一般性讨论可参考文献 [30, 31, 61–64]. 而对于 E_8 模型 FF 的求解则可见于文献 [30, 47], 这里不再赘述.

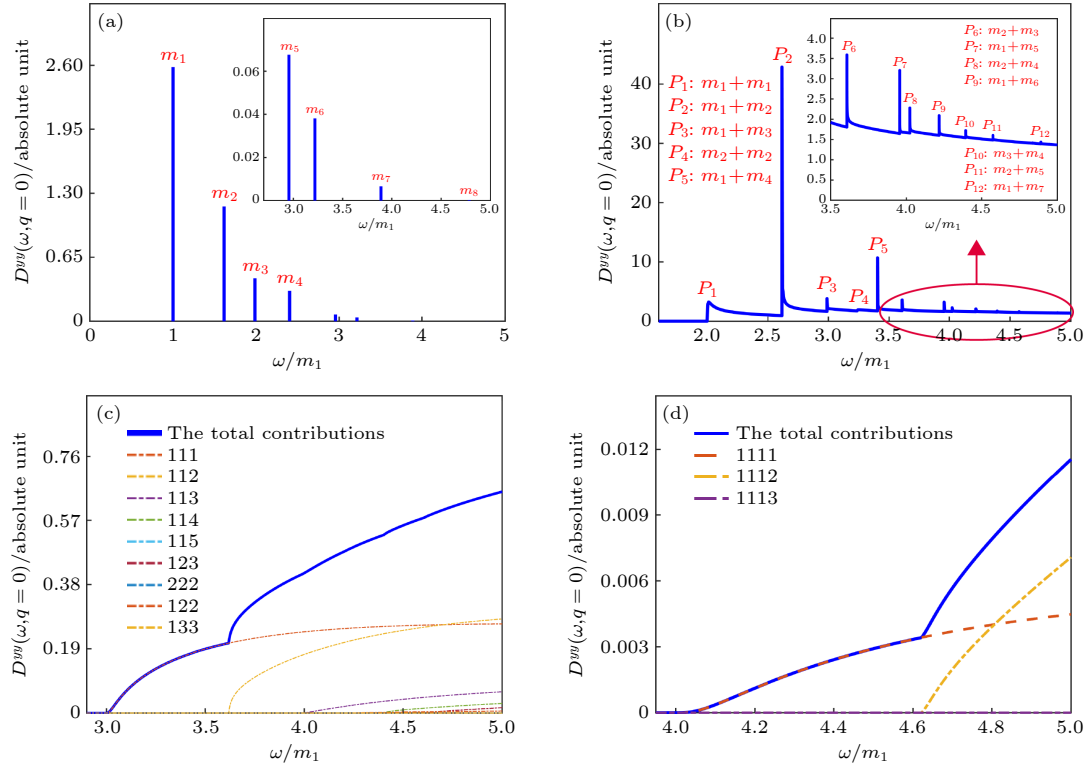


图 8 $D^{yy}(\omega)$ 的解析计算结果 (a) 单粒子通道的谱权重贡献, 8 个峰的位置依次对应 E_8 模型 8 种粒子的质量, 其中 $m_1 = 1$; (b)–(d) 二粒子、三粒子和四粒子通道的谱权重贡献, 图中分别标出了谱线和峰的具体贡献来源 (图片经文献 [30] 允许转载, 版权归 2021 American Physical Society 所有)

Fig. 8. (a) Spectrum contribution from single particle channel, the eight delta peaks one-by-one correspond to the masses of the eight particles in the quantum E_8 model with $m_1 = 1$; (b)–(d) contributions from two, three and four particle channels. The detailed contributions of different peaks and curves are highlighted in the sub-figures. (Reprinted with permission from Ref. [30]. Copyright 2021 American Physical Society).

在方程 (20) 中, 通过引入不同粒子数态, 依粒子数的不同, 总体的贡献可分解为不同的通道, 即单粒子通道、两粒子通道、三粒子通道和四粒子通道 [30]. 由于质量最大的 E_8 粒子的质量约在 $4.8m_1$ 左右, 而计算表明随着能量增加谱权重急剧衰减, 因此选取 DSF 直至 $\omega = 5m_1$. 以 $D^{yy}(\omega)$ 为例, 其 DSF 谱如图 8 所示. 这一解析计算的结果展示了丰富的物理: 首先, 对于单粒子通道, 所有的谱均为共振峰, 位置分别对应了 E_8 模型中 8 种准粒子的质量. 随着能量的增大共振峰的强度不断衰减. 这是由于在粒子质量增大的同时, 单粒子形式因子的绝对数值也在不断减小, 而单粒子通道的谱权重的峰值正比于 $|F|^2/m$, 因此质量越大的单粒子对应的峰值越小. 其次, 对于两粒子通道, 含不同类型粒子 a 和 b 的通道谱存在谱边发散行为 $1/\sqrt{\omega - \omega_0}$, 位于这两粒子的质量之和边界 $\omega_0 = m_a + m_b$ 处. 这是由两粒子态密度的发散行为所导致的, 即范·霍夫奇性 (Van Hove's singularity) [30]. 两相同类型的粒子组合却不存在这种发散行为, 这

是由于它们的 FF 特殊结构恰好能够消除由态密度导致的发散. 最后, 三粒子和四粒子通道的谱贡献不存在上述的发散行为, 且二者行为相似, 贡献都比较小. 这是由于随着引入粒子数的增多, FF 的绝对大小在不断衰减, 同时由于相空间的增大, 奇性行为被消除. 从图 8 的解析数据可以预期, 随着能量的不断升高, 高能区的 DSF 谱会不断衰减, 其行为相对来说较为平凡. 将解析计算得出的 DSF 谱线以实验测量的能量分辨率作展宽后 [30], 便可以与实验进行对比以验证具体材料中是否实现 E_8 模型.

5 BCVO 材料中的 E_8 激发

2010 年, 牛津大学的 Coldea 实验组 [65] 利用非弹性中子散射技术 (inelastic neutron scattering, INS) 对准一维磁性材料 CoNb_2O_6 展开了自旋动力学谱的测量. 其测量结果提供了量子 E_8 模型可在材料中实现的初步实验证据, 这体现在质量最轻

的两个粒子质量比满足黄金分割. 然而, 受限于实验分辨率, 其测量结果未能得到较为精确的连续谱, 无法就连续谱区域的相关的 E_8 物理做出有效的比对, 从而未能就该材料是否能完整实现量子 E_8 模型给出确定性的回答. 之后, 2020 年对该材料的太赫兹 (THz) 谱测量^[66] 得到了详细且精确的连续谱, 实验所展示的连续谱区域特征和解析上得到的 E_8 谱存有明显的偏差, 因此该材料是否能实

现量子 E_8 模型有待进一步深入仔细的研究^[67,68]. 接下来聚焦于 BCVO 材料中实现量子 E_8 模型的工作.

前文所述的 E_8 模型对应的格点模型为铁磁相互作用, 而若想在反铁磁相互作用下实现 E_8 模型, 需要将方程 (17) 中的纵场转为交错纵场, 这在凝聚态系统实验中几乎不可能通过外加手段实现, 因此只能另辟蹊径. 考虑沿 [010] 方向的外加磁场, 材料的有效哈密顿量为^[34–37]

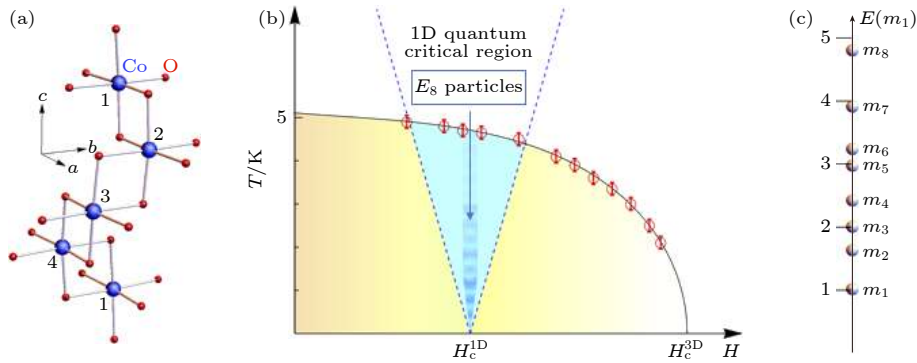


图 9 (a) BCVO 的晶格结构. (b) 加沿 [010] 方向磁场后 BCVO 的相图, QCP 为 H_c^{1D} , 隐藏在三维序中, 其一维量子临界行为可在三维序外测得. 棕色圆圈代表由 NMR 实验测出的尼尔 (Néel) 温度 T_N . $H_c^{3D} = (10.4 \pm 0.1)$ T, $H_c^{1D} = (4.7 \pm 0.3)$ T. E_8 模型在蓝色缎带区涌现. (c) 8 种 E_8 粒子的质量以 m_1 为单位沿能量轴分布 (图片经文献^[37] 允许转载, 版权归 2021 American Physical Society 所有)

Fig. 9. (a) Crystal structure of BCVO. (b) Phase diagram of BCVO with a transverse field along [010] direction. QCP is at H_c^{1D} , hidden in the 3D order. Its quantum criticality can be measured outside the 3D ordering phase. Brown circles represent for Néel temperature T_N measured by NMR experiments. $H_c^{3D} = (10.4 \pm 0.1)$ T, $H_c^{1D} = (4.7 \pm 0.3)$ T. E_8 model emerges in the blue ribbon area. (c) Masses of eight E_8 particles along energy axis in unit of m_1 . (Reprinted with permission from Ref. ^[37]. Copyright 2021 American Physical Society).

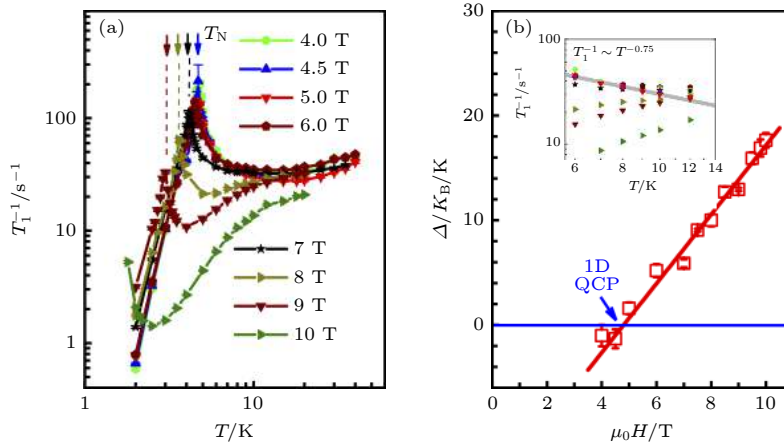


图 10 三维反铁磁序外 NMR 实验测量结果 (a) 在不同横场下测得自旋-晶格弛豫率 $1/T_1$ 关于温度的函数. 下箭头标记出决定 T_N 的 $1/T_1$ 的峰. (b) 拟合 $1/T_1$ 得到能隙, 温度区间为 6—12 K. 具体细节见文献^[37]. QCP 位于 (4.7 ± 0.3) T. 内嵌图是对数坐标下放大的低温区数据. 灰色直线区域内的量子临界行为可以拟合为 $1/T_1 \sim T^{-0.75}$ (图片经文献^[37] 允许转载, 版权归 2021 American Physical Society 所有)

Fig. 10. NMR experiment result outside the 3D anti-ferromagnetic ordering phase. (a) Spin-lattice relaxation rate $1/T_1$ with different transverse fields as a function of temperature. The down arrows label $1/T_1$ peaks that determining T_N . (b) Energy gap by fitting $1/T_1$, with temperature being from 6 K to 12 K. The details can be found in Ref. ^[37]. QCP is at (4.7 ± 0.3) T. Inset: a log-log plot of enlarged data in low-temperature region. The quantum critical behavior around the gray line area can be fitted by $1/T_1 \sim T^{-0.75}$. (Reprinted with permission from Ref. ^[37]. Copyright 2021 American Physical Society).

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = & J \sum_n [\mathbf{S}_n^z \mathbf{S}_{n+1}^z + \varepsilon (\mathbf{S}_n^x \mathbf{S}_{n+1}^x + \mathbf{S}_n^y \mathbf{S}_{n+1}^y)] \\
 & - \mu_B g_{yy} H \sum_n \left[\mathbf{S}_n^y + h_x (-1)^n \mathbf{S}_n^x \right. \\
 & \left. + h_z \cos \left(\pi \frac{2n-1}{4} \right) \mathbf{S}_n^z \right] \\
 & - \mu_B H' \sum_n (-1)^n \mathbf{S}_n^z,
 \end{aligned} \quad (22)$$

其中交错纵场 $\mu_B H' \sum_n (-1)^n \mathbf{S}_n^z$ 仅在材料处于三

维反铁磁序内 (其三维量子相变点在 10 T 左右 (图 9)), 利用链平均场描述链间相互作用时才会出现. 根据上文提及的 SCVO 材料的相关参数, 其对应于伊辛普适类的最低临界磁场值为 7.7 T 位于三维量子相变点 7.0 T 以外, 所以此材料缺乏能产生交错纵场的机制或手段 [34–37], 难以实现 E_8 模型. 而对 BCVO 材料来说, 相互作用 $J = 5.8 \text{ meV}$, 利用 iTEBD 数值计算及 NMR 实验, 可以确定其伊辛普适类的临界磁场位于 $\mu_0 H = 4.7 \text{ T}$ 处 (图 10),

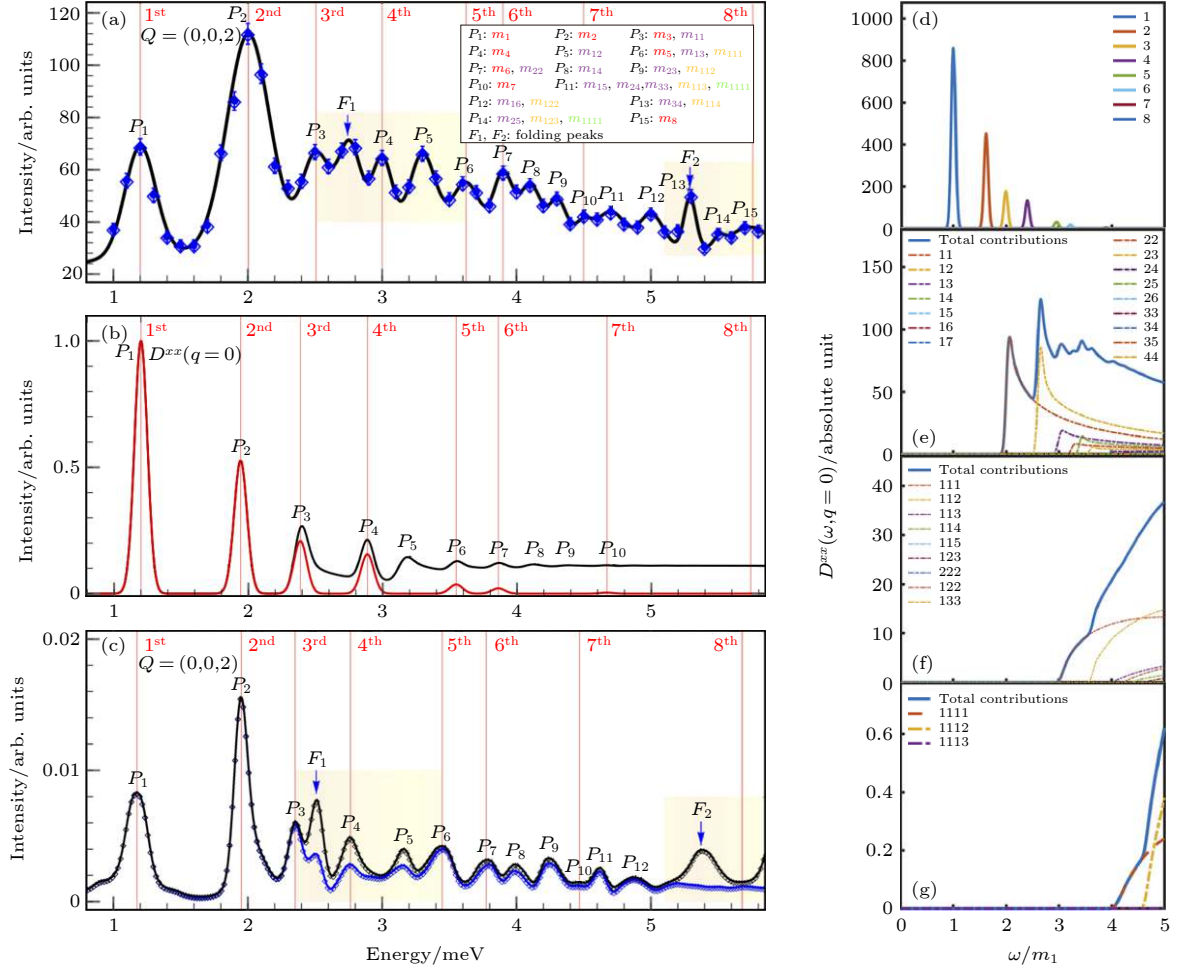


图 11 (a) $Q = (002)$ QCP 处 INS 测量数据, 场强 $H = 4.7 \text{ T}$, 温度 0.4 K . 蓝色方块及误差棒为实验测量数据, 黑线是高斯函数的拟合. 红色竖线对应于 8 种 E_8 模型的粒子. 其他的峰来自于多粒子通道的连续谱贡献以及布里渊区折叠效应 (标记于 F_1 和 F_2 处). (b) 解析计算的 $D^{xx}(\omega)$, 数据经过 $0.08m_1$ 洛伦兹展宽. $m_1 = 1.2 \text{ meV}$. 红色线和黑色线分别代表单粒子激发贡献及引入多粒子激发贡献的总和. (c) iTEBD 数值计算有效模型在转移动量 $q = 0$ 处的激发谱, 其中蓝线和黑线代表不包含及包含折叠效应的数据. (d)–(g) 单粒子到四粒子激发通道的贡献, $ijkl$ 代表激发来自于 $m_i m_j m_k m_l$ 通道 (图片经文献 [37] 允许转载, 版权归 2021 American Physical Society 所有)

Fig. 11. (a) INS data obtained from $Q = (002)$ at QCP with $H = 4.7 \text{ T}$, temperature 0.4 K . The blue diamonds with error bars are experimental data, the black curve is fitted with Gaussian functions. The red vertical lines correspond to eight particles of E_8 model. Other peaks are contributed from multi-particle channels and zone-folding effect (labelled at F_1 and F_2). (b) Analytical result of $D^{xx}(\omega)$ with a $0.08m_1$ Lorentzian broadening. $m_1 = 1.2 \text{ meV}$. Red curve and black curve are single particle spectrum and total spectrum including multi-particle excitations respectively. (c) Effective model spectrum of iTEBD calculation at $q = 0$, where blue curve and black curve are results of without and with zone-folding effect. (d)–(g) single particle-four particle excited channels' contributions, where $ijkl$ represents for $m_i m_j m_k m_l$ channel. (Reprinted with permission from Ref. [37]. Copyright 2021 American Physical Society).

处在三维序内且远离三维量子相变点, 因此存在由链间相互作用平均后大小为 $\mu_B H' = 0.018J$ 的有效弱交错纵向磁场, 为实现 E_8 模型提供了可能. 确实, 在该材料三维序内, 进一步的非弹性中子实验将沿 [010] 方向所加横场调到 4.7 T 时得到的自旋动力学关联谱与解析计算得出的 E_8 模型单粒子及多粒子激发谱及从 (22) 式出发的 iTEBD 数值计算结果高度符合, 如图 11 所示. 这是人们首次在真实材料中实现 E_8 模型, 不仅明确测量到了单 E_8 粒子激发, 同时确认了多 E_8 粒子激发, 是强关联磁性系统研究的一次重大进展.

6 结 论

本文综述了在 BCVO 和 SCVO 材料中首次发现伊辛普适类并在 BCVO 材料中首次实现 E_8 模型激发的研究进展. 叙述了便于判断伊辛普适类的格林艾森比率的奇异量子临界行为. 随后介绍了横场海森伯-伊辛链并叙述了数值验证其具有伊辛普适类的理论进展. 通过将数值方法和实验相结合, 确认了 BCVO 和 SCVO 材料在外加横场之下会涌现出伊辛普适类. 在此基础上, 介绍了 E_8 模型主要的理论进展及在理论与实验的共同推动下于 BCVO 材料中实现 E_8 模型的一系列工作.

这些研究进展充分展示了普适类的强大力量, 其所蕴含的迷人的物理现象持续吸引着人们对量子临界物理及相关普适类物理的进一步的探索^[2]. 我们期待未来通过更多的凝聚态理论和实验物理学家的合作, 能在实际材料中实现更多非平凡的普适类, 并能通过深入研究这些奇异系统中的非平凡物理激发, 最终实现物理操纵这些奇异的激发并期望能够服务于新颖量子器件的设计与开发.

参考文献

- [1] Sachdev S 2011 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge: Cambridge University Press) pp96–115
- [2] Oshikawa M 2020 *Journal Club for Condensed Matter Physics*
- [3] Belavin A, Polyakov A, Zamolodchikov A 1984 *Nucl. Phys. B* **241** 333
- [4] Zamolodchikov A B, Zamolodchikov A B 1979 *Ann. Phys.* **120** 253
- [5] Belavin A A, Belavin V A, Litvinov A V, Pugai Y P, Zamolodchikov A B 2004 *Nucl. Phys. B* **676** 587
- [6] Delfino G, Mussardo G 1994 *Phys. Lett. B* **324** 40
- [7] Berg B, Karowski M, Weisz P 1979 *Phys. Rev. D* **19** 2477
- [8] Löhneysen V H 2010 *J. Low Temp. Phys.* **161** 1

- [9] Si Q M, Rabello S, Ingersent K, Smith J L 2001 *Nature* **413** 804
- [10] Schuberth E, Tippmann M, Steinke L, Lausberg S, Steppke A, Brando M, Krellner C, Geibel C, Yu R, Si Q M, Steglich F 2016 *Science* **351** 485
- [11] Wang Z, Wu J D, Yang W, Bera A K, Kamenskyi D, Islam A T M N, Xu S L, Law J M, Lake B, Wu C J, Loidl A 2018 *Nature* **554** 219
- [12] Fan Y C, Yang J H, Yu W Q, Wu J D, Yu R 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 013345
- [13] Isakov S V, Moessner R 2003 *Phys. Rev. B* **68** 104409
- [14] Essler F H L, Konik R M 2005 in *From Fields to Strings: Circumnavigating Theoretical Physics* (Vol. 1) (Singapore: World Scientific) pp684–830
- [15] Amico L, Fazio R, Osterloh A, Vedral V 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- [16] Mussardo G 2010 *Statistical Field Theory* (New York: Oxford University Press) pp744–785
- [17] Ku W, Yildirim Y 2015 *Phys. Rev. B* **92** 180501(R)
- [18] Ku W, Yildirim Y 2011 *Phys. Rev. X* **1** 011011
- [19] Kitaev A 2006 *Ann. Phys.* **321** 2
- [20] Banerjee A, Yan J Q, Knolle J, Bridges C, Stone M, Lumsden M, Mandrus D, Tennant D, Moessner R, Nagler S 2017 *Science* **356** 1055
- [21] Balents L 2010 *Nature* **464** 199
- [22] Pfeuty P 1970 *Ann. Phys.* **57** 79
- [23] Zamolodchikov A B 1989 *Int. J. Mod. Phys. A* **04** 4235
- [24] Fateev V A, Zamolodchikov A B 1990 *Int. J. Mod. Phys. A* **05** 06
- [25] Yang W L, Yang Z Y, Yang T, et al. 2019 *Integrable Model Method and Its Applications* (Beijing: Science Press) pp137–180 (in Chinese) [杨文力, 杨战营, 杨涛等 2019 可积模型方法及其应用 (北京: 科学出版社) 第137—180页]
- [26] Wu T T, McCoy B M, Tracy C A, Barouch E 1976 *Phys. Rev. B* **13** 316
- [27] Zamolodchikov A B 1989 *Adv. Stud. Pure Math.* **19** 641
- [28] Zamolodchikov A B 1991 *Nucl. Phys. B* **348** 619
- [29] Braden H W, Corrigan E, Dorey P E, Sasaki R 1990 *Nucl. Phys. B* **338** 3
- [30] Wang X, Zou H Y, Hódsági K, Kormos M, Takács G, Wu J D 2021 *Phys. Rev. B* **103** 235117
- [31] Delfino G, Mussardo G 1995 *Nucl. Phys. B* **455** 724
- [32] Wu J D, Zhu L J, Si Q M 2018 *Phys. Rev. B* **97** 245127
- [33] Wang Z, Lorenz T, Gorbunov D I, Cong P T, Kohama Y, Niesen S, Breunig O, Engelmayer J, Herman A, Wu J D, Kindo K, Wosnitza J, Zherlitsyn S, Loidl A 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 207205
- [34] Cui Y, Zou H, Xi N, He Z Z, Yang Y X, Shu L, Zhang G H, Hu Z, Chen T, Yu R, Wu J D, Yu W Q 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 067203
- [35] Zou H Y, Yu R, Wu J D 2020 *J. Phys.: Condens. Matter.* **32** 045602
- [36] Zhang Z, Amelin K, Wang X, Zou H Y, Yang J H, Nagel U, Rößm T, Dey T, Nugroho A A, Lorenz T, Wu J D, Wang Z 2020 *Phys. Rev. B* **101** 220411(R)
- [37] Zou H Y, Cui Y, Wang X, Zhang Z, Yang J H, Xu G, Okutani A, Hagiwara M, Matsuda M, Wang G, Mussardo G, Hódsági K, Kormos M, He Z Z, Kimura S, Yu R, Yu W Q, Ma J, Wu J D 2021 *Phys. Rev. Lett.* **127** 077201
- [38] Francesco P D, Mathieu P, Sénéchal D 1997 *Conformal Field Theory* (New York: Springer) pp200–235
- [39] Wu T T, McCoy B 2013 *The Two-Dimensional Ising Model* (Cambridge: Harvard University Press) pp213–238

- [40] Wu J D, Zhu L J, Si Q M 2011 *J. Phys. Conf. Ser.* **273** 012019
- [41] Rost A, Perry R, Mercure J F, Mackenzie A, Grigera S 2009 *Science* **325** 1360
- [42] Grube K, Zaun S, Stockert O, Si Q M, Löhneysen H V 2017 *Nat. Phys.* **13** 742
- [43] Shiba H, Ueda Y, Okunishi K, Kimura S, Kindo K 2003 *J. Phys. Soc. Jpn.* **72** 2326
- [44] Dmitriev V D, Krivnov Y V, Ovchinnikov A A, Langari A 2002 *J. Exp. Theor. Phys.* **95** 538
- [45] Kimura S, Okunishi K, Hagiwara M, Kindo K, He Z Z, Taniyama T, Itoh M, Koyama K, and Watanabe K 2013 *J. Phys. Soc. Jpn. Lett.* **82** 033706
- [46] Wu J D, Kormos M, Si Q M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 247201
- [47] Hódsági K, Kormos M, Takács G 2019 *J. High Energy Phys.* **08** 047
- [48] Delfino G, Simonetti P, Cardy J 1996 *Phys. Lett. B* **387** 327
- [49] Delfino G, Simonetti P 1996 *Phys. Lett. B* **383** 450
- [50] Delfino G, Mussardo G, Simonetti P 1996 *Phys. Lett. B* **473** 469
- [51] O'Brien E, Fendley P 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 206403
- [52] O'Brien E, Fendley P 2020 *SciPost Phys.* **9** 88
- [53] Zou Y J, Vidal G 2020 *Phys. Rev. B* **101** 045132
- [54] Gehlen G 1990 *Nucl. Phys. B* **330** 741
- [55] Deserno M 1997 *Phys. Rev. E* **56** 5204
- [56] Xiang C H, Chen A M, Su H Y, Wang H L 2020 *Physica A* **553** 124274
- [57] Balbao D B, Felicio J R D D 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** L207
- [58] Fateev V 1994 *Phys. Lett. B* **324** 45
- [59] Fonseca P, Zamolodchikov A 2006 arxiv: hep-th/0612304
- [60] McCoy B M, Wu T T 1978 *Phys. Rev. D* **18** 1259
- [61] Pozsgay B, Takács G 2008 *Nucl. Phys. B* **788** 167
- [62] Pozsgay B, Takács G 2008 *Nucl. Phys. B* **788** 209
- [63] Kormos M, Takács G 2010 *J. High Energy Phys.* **2010** 112
- [64] Kormos M, Takács G 2008 *Nucl. Phys. B* **803** 277
- [65] Coldea R, Tennant D A, Wheeler E M, Wawrzynska E, Prabhakaran D, Telling M, Habicht K, Smeibidl P, Kiefer K 2010 *Science* **327** 177
- [66] Amelin K, Engelmayr J, Viirok J, Nagel U, Rööm T, Lorenz T, Wang Z 2020 *Phys. Rev. B* **102** 104431
- [67] Morris M C, Desai N, Viirok J, Hävonen D, Nagel U, Rööm T, Krizan W J, Cava J R, McQueen T M, Koohpayeh S M, Kaul K R, Armitage N P 2020 *Nat. Phys.* **17** 832
- [68] Favara M, Coldea R, Parameswaran S 2020 *PNAS* **117** 41

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

From the transverse field Ising chain to the quantum E_8 integrable model*

Wang Xiao¹⁾ Yang Jia-Hao¹⁾ Wu Jian-Da^{1)2)†}

1) (*Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 201210, China*)

2) (*School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China*)

(Received 3 October 2021; revised manuscript received 23 November 2021)

Abstract

This review reports a series of theoretical and experimental progress on researches of the transverse field Ising chain (TFIC) and the quantum E_8 integrable model. For the TFIC, on one hand, a unique exotic quantum critical behavior of Grüneisen ratio (a ratio from magnetic or thermal expansion coefficient to specific heat) is theoretically established; on the other hand microscopic models can accommodate the TFIC universality class are substantially expanded. These progresses successfully promote a series of experiments collaborations to first-time realize the TFIC universality class in quasi one-dimensional anti-ferromagnetic material $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ and $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$. For the quantum E_8 integrable model, the low temperature local dynamics and the dynamical structure factor with zero transfer momentum of this system are analytically determined, where a cascade of edge singularities with power-law divergences are obtained in the continuum region of the dynamical structure factor. After combining with detailed quantum critical scaling behaviors analysis and large scale iTEBD calculation, it successfully facilitates a series of experiments, including THz spectrum measurements, inelastic neutron scattering and NMR experiments, to realize the quantum E_8 integrable model in $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ for the first time. The experimental realization of the quantum E_8 integrable model substantially extends the frontiers of studying quantum integrable models in real materials. The series of progress and developments on the TFIC and the quantum E_8 integrable model lay down a concrete ground to go beyond quantum integrability, and can inspire studies in condensed matter systems, cold atom systems, statistical field theory and conformal field theory.

Keywords: integrable systems, quantum magnetism, universality class, spin dynamics

PACS: 05.30.Rt, 31.15.aq, 67.30.hj, 74.40.Kb

DOI: 10.7498/aps.70.20211836

* Project supported by the Natural Science Foundation of Shanghai, China (Grant No. 20ZR1428400), the Pujiang Program of Shanghai, China (Grant No. 20PJ1408100), and the Shanghai Talent Program, China.

† Corresponding author. E-mail: wujd@sjtu.edu.cn



非厄米局域拓扑指标的动力学特性

孙孔浩 易为

Dynamics of non-Hermitian local topological marker

Sun Kong-Hao Yi Wei

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 70, 230309 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211576

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211576>

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

专题: 非平衡量子多体系统

非厄米局域拓扑指标的动力学特性*

孙孔浩 易为†

(中国科学技术大学, 中国科学院量子信息重点实验室, 合肥 230026)

(2021 年 8 月 26 日收到; 2021 年 9 月 15 日收到修改稿)

非厄米拓扑系统的拓扑不变量可以由定义在双正交基下的局域拓扑指标刻画. 不同于厄米体系, 非厄米局域拓扑指标在动力学过程中的传播和演化目前还未见文献讨论. 本文研究非厄米拓扑体系局域拓扑指标的动力学特性, 重点关注淬火过程中, 局域拓扑指标由边界向体内的传播. 结果表明, 当淬火前后的体系拓扑性质不同时, 系统中存在局域拓扑指标的流动, 其流速与体系群速度相关, 但具体形式与相应厄米体系不同. 以 3 个具体模型为例, 通过数值计算说明了这一结论. 其中, 对于特定具有非厄米趋肤效应的模型, 可以发现局域拓扑指标的流速上限与广义布里渊区中的群速度直接相关. 但这一关系在其他非厄米模型中则需要修正, 其更普适的形式有待进一步研究. 本文的结果揭示了非厄米体系中局域拓扑指标传播的复杂性, 是进一步理解非厄米局域拓扑指标动力学行为的基础.

关键词: 非厄米拓扑, 淬火动力学, 开放体系**PACS:** 03.75.Kk, 03.65.Vf**DOI:** 10.7498/aps.70.20211576

1 引言

非厄米拓扑体系是近年来凝聚态及量子模拟领域的研究热点之一^[1–6]. 非厄米拓扑模型脱胎于开放系统^[7,8], 其性质与封闭系统厄米模型多有不同. 其中尤为典型的例子是具有非厄米趋肤效应的拓扑模型^[9–21]. 在开边界条件下, 该类体系的本征态波函数局域在边界上, 并在实空间呈能态依赖的指数分布; 同时体系本征能谱在复平面上的分布受边界条件影响. 与此对应, 在具有非厄米趋肤效应的拓扑体系中, 传统的体边对应关系失效——定义于周期边界布里渊区上的拓扑不变量不再能准确预测开边界下的拓扑边缘态. 为解释这一现象, 非布洛赫能带论应运而生^[9,10,14]. 根据该理论, 非厄米拓扑系统在开边界条件下的性质应由计入了非厄米趋肤效应的广义布里渊区决定, 而在广义布里渊区上定义的非布洛赫拓扑不变量则保证了体边对应关系在非厄米系统中仍然成立. 目前, 非厄米趋

肤效应及非厄米能带论在一系列经典或量子的人工拓扑体系中被相继观测证实^[22–25]. 同时, 研究者发现, 非布洛赫能带论及广义布里渊区也在非布洛赫宇称-时间对称性及非布洛赫淬火动力学等方面有重要应用^[26–30].

另一方面, 人们发现不论非厄米体系是否具有趋肤效应, 其拓扑不变量均可通过定义在双正交基下的局域拓扑指标刻画^[31,32], 而后者可以通过动力学过程中的可观测量在实验上进行观测^[30]. 对局域拓扑指标的研究起源于厄米拓扑体系^[33–36]. 在这些模型中, 虽然体系具有能带拓扑及拓扑保护的边缘态等全局特性, 定义在体态上的局域拓扑指标却是量子化的, 能反映体系的全局拓扑特性, 并在拓扑相变附近呈现特定的标度行为. 更进一步, 文献^[34]通过对厄米体系淬火动力学的研究, 发现了动力学过程中局域拓扑指标在体系内部的传播规律. 例如, 当体系从拓扑平庸的初态出发, 由拓扑平庸的哈密顿量驱动进行时间演化时, 初始体系内部量子化的局域拓扑指标在一定时间后会受到

* 国家自然科学基金 (批准号: 11974331) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wyz@ustc.edu.cn

始于边界的局域拓扑指标流影响,在某弛豫时间 t^* 后明显偏离量子化取值. 通过对该弛豫时间 t^* 进行分析,研究者发现局域拓扑指标在淬火过程中的传播速度与体系群速度相关. 这揭示了局域拓扑指标在厄米拓扑体系非平衡动力学过程中的普适行为,具有重要意义. 与此对应,非厄密拓扑体系的局域拓扑指标是否具有类似的行为,还未见研究报道.

在这一背景下,本文研究非厄米拓扑模型的局域拓扑指标在淬火过程中的动力学行为. 首先验证说明了定义在双正交基下的局域拓扑指标可以有效刻画对应非厄米体系的全局拓扑性质,并在拓扑相边界附近呈现普适的临界行为. 对于淬火动力学,考虑初态为某初始哈密顿量 H^i 的本征态,在末态哈密顿量 H^f 的驱动下做时间演化. 一般而言, H^i 和 H^f 参数不同,且处于不同拓扑相区. 以几个具体的非厄米拓扑模型为例,计算了淬火动力学演化过程中,非厄米局域拓扑指标的演化,并通过拟合确定了局域拓扑指标从边界向体系内部传播的速度. 对于本文考察的具有非厄米趋肤效应的模型,可以发现该传播速度与定义在广义布里渊区中的群速度相关,而与定义于一般布里渊区的群速度无关. 然而,对于一般性的非厄米模型,该结论并不普遍成立. 一般说来,在非厄米体系中局域拓扑指标的传播速度与群速度相关,但二者之间的关系是否普适则需要进一步研究.

下面首先以一解析可解的非厄米拓扑模型为例,说明非厄米局域拓扑指标对非厄米拓扑模型的适用性及其临界行为. 然后讨论该模型的淬火动力学过程中,局域拓扑指标的演化及传播速度. 最后,通过对其他具体非厄米拓扑模型淬火动力学的计算,对局域拓扑指标传播速度的一般性规律进行讨论.

2 非厄米局域拓扑指标

为说明非厄米局域拓扑指标的特性,考虑二维正方晶格上的非厄米哈密顿量

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\mathbf{R}} \bar{c}_{\mathbf{R}}^\dagger (m\sigma_z) \bar{c}_{\mathbf{R}} \\
 & + \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=x,y} \bar{c}_{\mathbf{R}}^\dagger \frac{\exp(-\gamma_j)}{2} (-i\sigma_j - t_1\sigma_z) \bar{c}_{\mathbf{R}+\mathbf{e}_j} \\
 & + \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=x,y} \bar{c}_{\mathbf{R}}^\dagger \frac{\exp(\gamma_j)}{2} (i\sigma_j - t_1\sigma_z) \bar{c}_{\mathbf{R}-\mathbf{e}_j}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中 $\bar{c}_{\mathbf{R}} = (c_{\mathbf{R},\uparrow}, c_{\mathbf{R},\downarrow})^T$, $c_{\mathbf{R},\sigma}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) 为格点

$\mathbf{R} = xe_x + ye_y$ 上具有相应自旋的费米子湮灭算符, σ_j ($j = x, y, z$) 为泡利矩阵, t_1 为近邻跃迁率, m 为格点上的塞曼场, γ_x 及 γ_y 为非厄米系数, e_x 和 e_y 为对应方向的单位格点矢量.

在非厄米系数 $\gamma_{x,y} \neq 0$ 时,上述模型具有非厄米趋肤效应——开边界条件下,系统所有体态均指数局域在边界附近. 非厄米趋肤效应的直接后果是,体系在开边界下的拓朴性质,尤其是与边缘态相关的拓朴性质,须通过非布洛赫能带论在广义布里渊区上计算. 对于(1)式的模型,该计算可以进一步简化,因其在开边界下,可以通过相似变换得到厄米的 Qi-Wu-Zhang 模型^[37,38]. 具体而言,该相似变换在实空间写作 $S(x, y) = \exp(\gamma_x x + \gamma_y y)$,而在准动量空间该变换等价于 $\mathbf{k} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + i\tilde{\mathbf{k}}'$, $\tilde{\mathbf{k}}' = (-\gamma_x, -\gamma_y)$ ^[10]. 可以认为这一变换形式上是用广义布里渊区中的准动量 $\tilde{\mathbf{k}} + i\tilde{\mathbf{k}}'$ 取代周期边界下布里渊区中的准动量 $\mathbf{k}$. 相应的非布洛赫哈密顿量写作

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}(\tilde{\mathbf{k}}) &= H(\mathbf{k} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + i\tilde{\mathbf{k}}') \\
 &= \sin(\tilde{k}_x)\sigma_x + \sin(\tilde{k}_y)\sigma_y \\
 &\quad + [m - t_1 \cos(\tilde{k}_x) - t_1 \cos(\tilde{k}_y)], \quad (2)
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{k}) &= \sin(k_x + i\gamma_x)\sigma_x + \sin(k_y + i\gamma_y)\sigma_y \\
 &\quad + [m - t_1 \cos(k_x + i\gamma_x) - t_1 \cos(k_y + i\gamma_y)]\sigma_z
 \end{aligned}$$

为周期边界下的布洛赫哈密顿量. 非布洛赫哈密顿量 $\tilde{H}(\tilde{\mathbf{k}})$ 的本征谱即为开边界下体系的能谱. 在此基础上,体系的非布洛赫拓扑数可以由非布洛赫哈密顿量的左右本征矢得到:

$$C_{(\alpha)} = \frac{i}{2\pi} \int_{\tilde{T}^2} d^2\tilde{\mathbf{k}} \varepsilon^{ij} \left\langle \partial_i u_{L\alpha}(\tilde{\mathbf{k}}) | \partial_j u_{R\alpha}(\tilde{\mathbf{k}}) \right\rangle, \quad (3)$$

其中体系的本征右(左)矢定义为

$$\tilde{H} |u_{R\alpha}\rangle = \tilde{E}_\alpha |u_{R\alpha}\rangle \quad (\langle u_{L\alpha} | \tilde{H} = \langle u_{L\alpha} | \tilde{E}_\alpha),$$

其中 α 为能带指标. 对于 $\text{Re}(\tilde{E}_\alpha) < 0$ 的能带,计算可得在 $m > 2t_1$ 时非布洛赫陈数 $C = 0$, $m < 2t_1$ 时 $C = -1$.

非厄米体系的非布洛赫拓扑数,同样可以由非厄米局域拓扑指标给出. 对于本文的二维体系,对应的非厄米局域拓扑指标定义为

$$c(\mathbf{R}) = -\frac{4\pi}{A_c} \text{Im} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \langle \mathbf{R}, \sigma | \hat{P} \hat{x} \hat{Q} \hat{y} \hat{P} | \mathbf{R}, \sigma \rangle, \quad (4)$$

其中 A_c 是实空间中单位晶胞的面积, $\hat{P}$ 是下能带的投影算符, $\hat{Q} = \hat{1} - \hat{P}$. 此处,设非厄米体系的下能

带为 $\text{Re}(E_\alpha) < 0$ 的部分, 则 $\hat{P} = \sum_{\text{Re}(E_\alpha) < 0} |\psi_\alpha^R\rangle \langle \psi_\alpha^L|$,

其中 $|\psi_\alpha^{L,R}\rangle$ 为开边界下 H 的左右本征矢, 即 $H|\psi_\alpha^R\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha^R\rangle$, $\langle \psi_\alpha^L|H = \langle \psi_\alpha^L|E_\alpha$. 利用局域拓扑指标可以从实空间出发研究体系的拓扑性质, 尤其是那些不具有平移对称性的系统. 而在非厄米系统中, 定义在双正交基下的局域拓扑指标可以准确反映体系的非厄米拓扑性质, 不论体系是否具有非厄米趋肤效应. 这是因为投影算符 $\hat{P}$ 和 $\hat{Q}$ 中的本征左矢与右矢, 已经包含了体态的拓扑及趋肤信息. 与厄米拓扑系统的局域拓扑指标类似, 非厄米局域拓扑指标可以表征系统在拓扑相变点附近的临界行为. 如图 1 所示, 对于尺寸为 $L \times L$ 的体系 (其中 L 为 x 或者 y 方向的格点数), 其中格点处的非厄米局域拓扑指标在拓扑相变附近, 满足 $(m - m_c)L^{\frac{1}{\nu}}$ 的普适标度律, 其中 $m_c = 2t_1$ 为相变点, $\nu = 1.12(6) \approx 1$. 这样的普适临界行为与相关厄米拓扑体系的相变临界行为一致 [34], 是讨论非厄米局域拓扑指标动力学行为的基础.

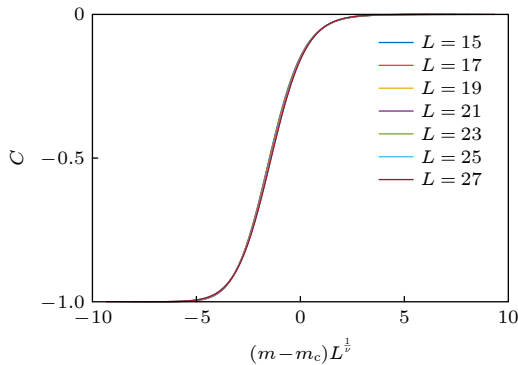


图 1 非厄米局域拓扑指标的标度行为. 系统中心的非厄米局域拓扑指标随着 m 的变化遵循 $(m - m_c)L^{\frac{1}{\nu}}$ 的标度行为. 在 L 分别取 15, 17, 19, 21, 23, 25, 27 等值时 (对应于图中不同颜色的曲线), 所有曲线经变换后遵循同一函数形式, 经拟合得到 $\nu \approx 1.1259$. 在本文的数值计算中, 取 $t_1 = 1$, $\gamma_x = \gamma_y = 0.3$

Fig. 1. Scaling behavior of the non-Hermitian local topological marker near the topological phase transition. The numerically calculated local topological markers for different system sizes ($L = 15, 17, 19, 21, 23, 25, 27$) collapse to the same curve, with the functional form $(m - m_c)L^{\frac{1}{\nu}}$ and $\nu \approx 1.12(6)$. For all calculations, we take $t_1 = 1$, $\gamma_x = \gamma_y = 0.3$.

3 非厄米局域拓扑指标的动力学行为

考虑 (1) 式哈密顿量的淬火过程中, 非厄米局域拓扑指标的动力学行为. 设初始时刻体系由哈密

顿量 $H_i(t_1, m)$ 描述, 且其下能带被完全占据. 在此后的时间演化中, 哈密顿量变为 $H_f(t'_1, m')$, 则相应投影算符 $\hat{P}$ 和 $\hat{Q}$ 均随时演化, 从而导致非厄米局域拓扑指标的演化. 对于厄米拓扑体系, 研究者发现, 当初末哈密顿量拓扑性质不同时, 具有开放边界的体系在淬火过程中会出现局域拓扑指标的流动, 其流速与群速度相关 [34]. 这里我们关心的第一个问题是, 在具有非厄米趋肤效应的非厄米拓扑体系中, 是否有类似的结论.

如图 2 所示, 数值计算了 $L = 23$ 的开边界二维晶格体系中, 各格点的非厄米局域拓扑指标在不同时刻的行为. 选择的初始哈密顿量处于拓扑非平庸区间 ($C = -1$), 末态哈密顿量处于拓扑平庸区间 ($C = 0$). 在 $t = 0$ 时刻, 局域拓扑指标 C 在体系中心取 -1 , 而在边界上取正值, 这是因为局域拓扑指标对格点求和应该始终得 0. 而在 $t > 0$ 时刻, 局域拓扑指标开始从边界向体内流动 (见图 2(a)), 系统中心处的局域拓扑指标会在某个特征时间 t^* 后明显偏离其量子化取值. 由 t^* 与系统尺寸的线性关系, 可以定义并计算局域拓扑指标的传播速度. 在具体数值计算中, 取时间演化的步长为 0.02 (这里时间单位为 $1/t_1$), 定义 t^* 为体系中心处局域拓扑指标对时间的差分首次超过阈值的时间. 数值上, 取阈值为 10^{-3} . 在得到不同系统尺寸下的 t^* 后, 通过线性拟合, 得到局域拓扑指标的传播速度 v_{lc} . 由图 2(b) 可以看出, 在该模型下, 非厄米局域拓扑指标的传播速度与广义布里渊区下得到的 $|\tilde{v}_{1x}(\tilde{\mathbf{k}}) - \tilde{v}_{2x}(\tilde{\mathbf{k}})|$ 最大值相符 (黄线), 而与周期边界下布里渊区里计算的群速度 (红星) 不同. 这里广义布里渊区上的群速度 $\tilde{v}_{ix} (i = 1, 2)$ 定义为 $\tilde{v}_{ix} = \text{Re}(\partial \tilde{E}_i(\tilde{\mathbf{k}}) / \partial \tilde{k}_x)$. 相应地, 一般布里渊区上的群速度定义为 $v_{ix} = \text{Re}(\partial E_i(\mathbf{k}) / \partial k_x)$. 这似乎意味着只需要利用非布洛赫能带论便可解释及预言非厄米拓扑体系淬火过程中局域拓扑指标流的动力学演化.

4 其他非厄米拓扑系统的局域拓扑指标流

为验证上述结论的普适性, 本节考察其他非厄米拓扑模型的淬火过程. 首先考虑如下具有非厄米趋肤效应的非厄米 Qi-Wu-Zhang 模型:

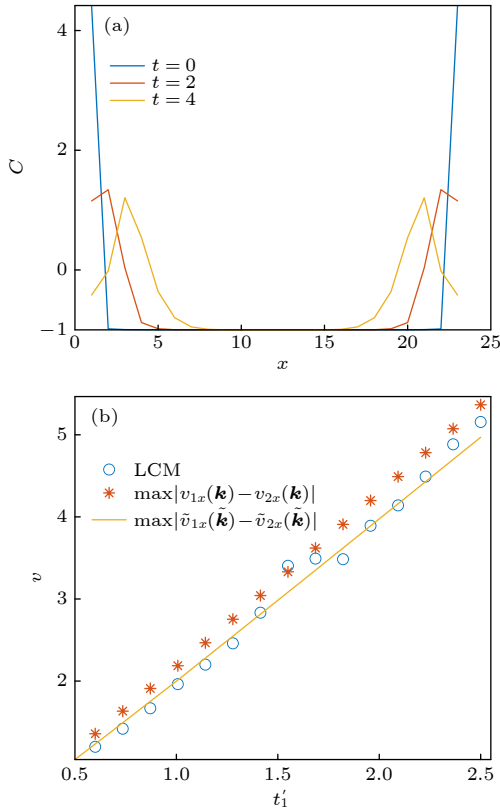


图 2 非厄米局域拓扑指标的传播速度 (a) 淬火过程中系统中心格点处的非厄米局域拓扑指标的时间演化. 系统尺寸为 $L = 23$, 取开边界. 初始时 $\mathbf{H}(t_1 = 1, m = 1)$ 处于拓扑非平庸相, 淬火后 $\mathbf{H}(t'_1 = 1, m' = 6)$ 处于拓扑平庸相, 淬火前后 $\gamma_x = \gamma_y = 0.3$. 这里只考虑 x 方向的动力学演化, y 方向的演化有类似性质. (b) 非厄米局域拓扑指标的传播速度随末态哈密顿量参数 t'_1 的变化. 淬火参数与图 (a) 相同. 分别数值模拟了体系大小为 $L = 11, 15, 19, 23, 27$ 时的淬火过程, 并通过线性拟合 t^* 与 L 的关系, 数值得到了局域拓扑指标的传播速度

Fig. 2. Dynamics of the non-Hermitian local topological marker. (a) Spatial distribution (along the x -direction) of the non-Hermitian local topological marker at different times of the quench dynamics. The parameters are: $L = 23$, $\mathbf{H}_i(t_1 = 1, m = 1)$, $\mathbf{H}_f(t'_1 = 1, m' = 6)$, $\gamma_x = \gamma_y = 0.3$. (b) Propagation speed of the local topological marker as a function of t'_1 . Other parameters are the same as those in panel (a).

$$\mathbf{H} = \left[\sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=x,y} \bar{\mathbf{c}}_{\mathbf{R}}^\dagger \left(-\frac{i}{2} \sigma_j - \frac{1}{2} t_j \sigma_z \right) \bar{\mathbf{c}}_{\mathbf{R}} + \mathbf{e}_j + \text{H.c.} \right] + \sum_{\mathbf{R}} \bar{\mathbf{c}}_{\mathbf{R}}^\dagger \left(m \sigma_z + i \sum_{j=x,y} \gamma_j \sigma_j \right) \bar{\mathbf{c}}_{\mathbf{R}}, \quad (5)$$

其中 t_j 为体系参数. 如前所述, 在开边界下, 该体系的所有本征态会指数局域在边界附近, 体系在开边界下的拓扑效应因此需要在广义布里渊区上计算. 为此, 本文先通过体系本征方程和边界条件确定

广义布里渊区. 参照文献 [10, 14], 定义 $\beta_j = e^{i\tilde{k}_j - \tilde{k}'_j}$ ($j = x, y$), 并在本征方程 $\det[\mathbf{H}(\mathbf{k}) - E] = 0$ 中做代换 $e^{i\mathbf{k}_j} \rightarrow \beta_j$, 得到关于 β_j 的方程:

$$E^2 = \left[\frac{t_x}{2} (\beta_x^{-1} + \beta_x) + \frac{t_y}{2} (\beta_y^{-1} + \beta_y) - m \right]^2 + \left[\frac{iv_x}{2} (\beta_x^{-1} - \beta_x) + \frac{v_y}{2} (\beta_y^{-1} - \beta_y) + (i\gamma_x + \gamma_y) \right] \times \left[\frac{iv_x}{2} (\beta_x^{-1} - \beta_x) + \frac{v_y}{2} (\beta_y - \beta_y^{-1}) + (i\gamma_x - \gamma_y) \right]. \quad (6)$$

一般来说, (6) 式关于 β_x 和 β_y 均有 4 个解, 按绝对值大小排序, 记为 $|\beta_x^{(1)}| \leq |\beta_x^{(2)}| \leq |\beta_x^{(3)}| \leq |\beta_x^{(4)}|$ 及 $|\beta_y^{(1)}| \leq |\beta_y^{(2)}| \leq |\beta_y^{(3)}| \leq |\beta_y^{(4)}|$. 广义布里渊区对应于满足条件 $|\beta_x^{(2)}| = |\beta_x^{(3)}|$ 和 $|\beta_y^{(2)}| = |\beta_y^{(3)}|$ 的解.

仿照之前的处理, 体系对应的布洛赫哈密顿量为

$$\mathbf{H}(\mathbf{k}) = [\sin(k_x) + i\gamma_x] \sigma_x + [\sin(k_y) + i\gamma_y] \sigma_y + [m - t_x \cos(k_x) - t_y \cos(k_y)] \sigma_z. \quad (7)$$

非布洛赫哈密顿量可以通过替换 $\mathbf{k} \rightarrow \tilde{\mathbf{k}} + i\tilde{\mathbf{k}}'$ 得到.

考虑初始为拓扑非平庸的体系, 在拓扑平庸的哈密顿量下进行时间演化. 淬火后非厄米局域拓扑指标的传播速度如图 3 所示. 有趣的是, 在此系统中, 定义在广义布里渊区上的 $\max |\tilde{v}_{1x}(\tilde{\mathbf{k}}) - \tilde{v}_{2x}(\tilde{\mathbf{k}})|$ 与定义在一般布里渊区的 $\max |v_{1x}(\mathbf{k}) - v_{2x}(\mathbf{k})|$ 几乎相同. 但局域拓扑指标的传播速度要明显大于这两个速度, 且在取 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma$ 时, 数值上近似于 $e^\gamma \max |v_{1x}(\mathbf{k}) - v_{2x}(\mathbf{k})|$.

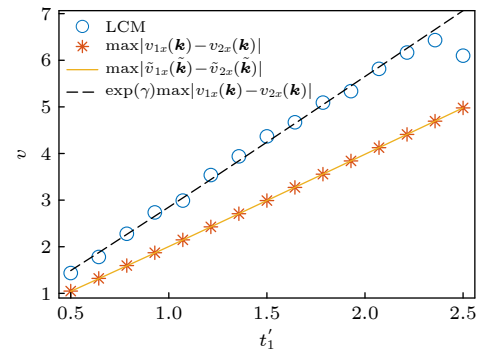


图 3 模型 (5) 的非厄米局域拓扑指标的传播速度随 t'_1 的变化. 初始时, $t_x = t_y = 1, m = 1$; 淬火后, $t'_x = t'_y = t'_1, m' = 6$. 淬火前后 $\gamma_x = \gamma_y = \gamma = 0.35$

Fig. 3. Propagation speed of the non-Hermitian local topological marker for Hamiltonian (5). We fix $\gamma_x = \gamma_y = \gamma = 0.35$, and the pre- and post-quench parameters are $t_x = t_y = 1, m = 1$ and $t'_x = t'_y = t'_1, m' = 6$, respectively.

最后考虑如下非厄米模型:

$$H = \left[\sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=x,y} \bar{c}_{\mathbf{R}}^{\dagger} \left(-\frac{i}{2} \sigma_j - \frac{1}{2} t_j \sigma_z \right) \bar{c}_{\mathbf{R}+e_j} + \text{H.c} \right] + \sum_{\mathbf{R}} \bar{c}_{\mathbf{R}}^{\dagger} \left[m \sigma_z + \frac{i\gamma}{2} (\sigma_z + 1) \right] \bar{c}_{\mathbf{R}}. \quad (8)$$

与前面讨论的两个模型不同, 哈密顿量 (8) 不具有非厄米趋肤效应. 如图 4 所示, 在该模型淬火过程中, 局域拓扑指标的传播速度要大于定义在一般布里渊区的群速度. 但不同于模型 (5) 的指数加速, 数值上看, 局域拓扑指标传播速度与 $\max |v_{1x}(\mathbf{k}) - v_{2x}(\mathbf{k})|$ 相比, 相差一个常数.

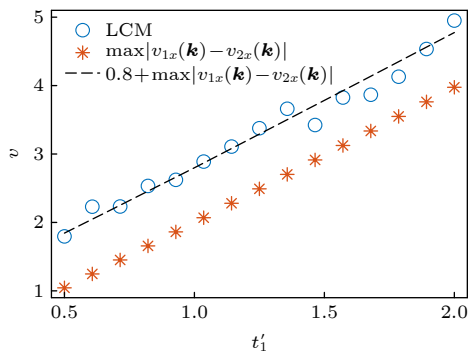


图 4 模型 (8) 的非厄米局域拓扑指标的传播速度随 t'_1 的变化. 初始时, $t_x = t_y = 1, m = 1$; 淬火后, $t'_x = t'_y = t'_1, m' = 6$. 淬火前后 $\gamma = 0.3$

Fig. 4. Propagation speed of the non-Hermitian local topological marker for Hamiltonian (8). We fix $\gamma = 0.3$, and the pre- and post-quench parameters are $t_x = t_y = 1, m = 1$ and $t'_x = t'_y = t'_1, m' = 6$, respectively.

5 总结与展望

本文研究了非厄米拓扑模型中非厄米局域拓扑指标的性质. 首先刻画了非厄米局域拓扑指标在非厄米拓扑相变附近的临界行为, 数值确定了其临界系数. 然后考察了 3 个不同非厄米拓扑模型的动力学淬火过程, 计算了非厄米局域拓扑指标的传播速度. 与厄米拓扑体系类似, 当淬火前后的体系拓扑性质不同时, 系统的淬火过程中存在局域拓扑指标的流动. 发现局域拓扑指标的传播速度与体系群速度相关, 但其关系并不普适. 具体而言, 对于本文考察的 3 个模型, 局域拓扑指标的传播速度或与定义于广义布里渊区上的群速度直接相关, 或与群速度差一个指数因子, 或差一常数. 本文的结果揭

示了非厄米体系中局域拓扑指标传播的复杂性, 为进一步理解非厄米局域拓扑指标的动力学行为打下了基础.

局域拓扑指标传播速度的非普适行为或与不同模型中非厄米性出现的不同形式有关. 具体而言, 在本文的 3 个非厄米模型中, 唯有第一个模型在开边界时具有纯实数本征能谱. 因此, 一个合理的猜想是, 局域拓扑指标的传播速度能否由广义布里渊区上的群速度刻画, 与体系在开边界下本征能谱的虚实有关. 在今后的研究中, 我们将进一步考察这一猜想的正确性. 同时, 为进一步理解非厄米局域拓扑指标的传播, 可以研究由主方程描述的开放体系动力学过程中局域拓扑指标的演化. 基于非厄米模型与开放体系的密切关系, 期望通过这一角度, 更彻底地理解非厄米局域拓扑指标的非普适传播行为.

参考文献

- [1] Ashida Y, Gong Z, Ueda M 2020 *Adv. Phys.* **69** 249
- [2] Kawabata K, Shiozaki k, Ueda M, Sato M 2019 *Phys. Rev. X* **9** 041015
- [3] Zhou H, Lee J Y 2019 *Phys. Rev. B* **99** 235112
- [4] Bender C M 2007 *Rep. Prog. Phys.* **70** 947
- [5] Konotop V V, Yang J, Zezyulin D A 2016 *Rev. Mod. Phys.* **88** 035002
- [6] El-Ganainy R, Makris K G, Khajavikhan M, Musslimani Z H, Rotter S, Christodoulides D N 2017 *Nat. Phys.* **14** 11
- [7] Dalibard J, Castin Y, Mølmer K 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 580
- [8] Carmichael H J 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2273
- [9] Yao S Y, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 086803
- [10] Yao S Y, Song F, Wang Z 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 136802
- [11] Lee C H, Thomale R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 201103
- [12] McDonald A, Pereg-Barnea T, Clerk A A, 2018 *Phys. Rev. X* **8** 041031
- [13] Kunst F K, Edvardsson E, Budich J C, Bergholtz E J 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 026808
- [14] Yokomizo K, Murakami S 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 066404
- [15] Zhang K, Yang Z, Fang C 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 126402
- [16] Okuma N, Kawabata K, Shiozaki K, Sato M 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 086801
- [17] Lee T E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 133903
- [18] Zhang X Z, Gong J B, 2020 *Phys. Rev. B* **101** 045415
- [19] Zeng Q B, Yang Y B, Xu Y 2020 *Phys. Rev. B* **101** 020201
- [20] Wang X R, Guo C X, Kou S P 2020 *Phys. Rev. B* **101** 121116
- [21] Li T Y, Zhang Y S, Yi W 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 030301
- [22] Helbig T, Hofmann T, Imhof S, Abdelghany M, Kiessling T, Moltenkamp L W, Lee C H, Szameit A, Greiter M, Thomale R 2020 *Nat. Phys.* **16** 747
- [23] Xiao L, Deng T S, Wang K K, Zhu G, Wang Z, Yi W, Xue P 2020 *Nat. Phys.* **16** 761
- [24] Ghatak A, Brandenbourger M, van Wezel J, Coullais C 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **117** 29561
- [25] Weidemann S, Kremer M, Helbig T, Hofmann T, Stegmaier A, Greiter M, Thomale R, Szameit A 2020 *Science* **368** 311

- [26] Longhi S 2019 *Phys. Rev. Res.* **1** 023013
- [27] Longhi S 2019 *Opt. Lett.* **44** 5804
- [28] Xiao L, Deng T S, Wang K K, Wang Z, Yi W, Xue P 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 230402
- [29] Li T Y, Sun J Z, Zhang Y S, Yi W 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 023022
- [30] Wang K, Li T, Xiao L, Han Y, Yi W, Xue P 2021 arXiv: 2107.14741
- [31] Luo X W, Zhang C W 2019 arXiv: 1912.10652
- [32] Song F, Yao S, Wang Z 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 246801
- [33] Bianco R, Resta R 2011 *Phys. Rev. B* **84** 241106
- [34] Cao M D, Miller G, Cooper N R, Bhaseen M J 2019 *Nat. Phys.* **15** 257
- [35] Privitera L and Santoro G E 2016 *Phys. Rev. B* **93** 241406
- [36] Pozo O, Repellin C, Grushin A G 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 247401
- [37] Qi X L, Wu Y S, Zhang S C 2006 *Phys. Rev. B* **74** 085308
- [38] Qi X L, Zhang S C 2011 *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Dynamics of non-Hermitian local topological marker^{*}

Sun Kong-Hao Yi Wei[†]

(CAS Key Laboratory of Quantum Information, University of Science and Technology of China,
Hefei 230026, China)

(Received 26 August 2021; revised manuscript received 15 September 2021)

Abstract

Topological invariants of non-Hermitian topological systems can be captured by local topological markers defined on the biorthogonal basis. However, unlike the scenario of Hermitian systems, the dynamics of non-Hermitian local topological marker has not yet received much attention so far.

Here in this work, we study the dynamic features of local topological markers in non-Hermitian topological systems. In particular, we focus on the propagation of non-Hermitian topological markers in quench dynamics. We find that for the dynamics with topologically distinct pre- and post-quench Hamiltonians, a flow of local topological markers emerges in the bulk, with its propagation speed related to the maximum group velocity. Taking three different non-Hermitian topological models for example, we numerically calculate the propagation speed, and demonstrate that a simple universal relation between the propagation speed and group velocity does not exist, which is unlike the scenarios in previously studied Hermitian systems. Our results reveal the complexity of the local-topological-marker dynamics in non-Hermitian settings, and would stimulate further study on the matter.

Keywords: non-Hermitian topology, quench dynamics, open systems

PACS: 03.75.Kk, 03.65.Vf

DOI: 10.7498/aps.70.20211576

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11974331).

[†] Corresponding author. E-mail: wyz@ustc.edu.cn

离子阱中以声子为媒介的多体量子纠缠与逻辑门

刘腾 陆鹏飞 胡碧莹 吴昊 劳祺峰 边纪 刘泱 朱峰 罗乐

Phonon-mediated many-body quantum entanglement and logic gates in ion traps

Liu Teng Lu Peng-Fei Hu Bi-Ying Wu Hao Lao Qi-Feng Bian Ji Liu Yang Zhu Feng Luo Le

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 080301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220360

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220360>

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

基于金刚石氮-空位色心自旋系综与超导量子电路混合系统的量子节点纠缠

Entanglement of quantum node based on hybrid system of diamond nitrogen-vacancy center spin ensembles and superconducting quantum circuits

物理学报. 2018, 67(7): 070302 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172634>

飞秒激光直写光量子逻辑门

Femtosecond laser direct writing of optical quantum logic gates

物理学报. 2019, 68(10): 104205 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190024>

基于共振里德伯偶极-偶极相互作用的双反阻塞机制及量子逻辑门的实现

Implementation of the Rydberg double anti-blockade regime and the quantum logic gate based on resonant dipole-dipole interactions

物理学报. 2021, 70(13): 134202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210059>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

量子纠缠与宇宙学弗里德曼方程

Quantum entanglement and cosmological Friedmann equations

物理学报. 2018, 67(17): 179501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180813>

中性原子量子计算研究进展

Experimental progress of quantum computation based on trapped single neutral atoms

物理学报. 2019, 68(3): 030305 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182133>

专题: 非平衡量子多体系统

离子阱中以声子为媒介的多体量子纠缠与逻辑门*

刘腾^{1)†} 陆鹏飞¹⁾ 胡碧莹¹⁾ 吴昊¹⁾ 劳祺峰¹⁾边纪¹⁾²⁾ 刘浹¹⁾²⁾ 朱峰¹⁾²⁾³⁾ 罗乐^{1)2)3)‡}

1) (中山大学物理与天文学院, 珠海 519082)

2) (中山大学深圳研究院, 量子信息技术中心, 深圳 518087)

3) (中山大学, 光电材料与技术国家重点实验室, 广州 510275)

(2022 年 3 月 1 日收到; 2022 年 3 月 29 日收到修改稿)

高保真度的多离子纠缠和量子逻辑门是离子阱量子计算的基础. 在现有的方案中, Mølmer-Sørensen 门是比较成熟的实现多离子纠缠和量子逻辑门的实验方案. 近年来, 还出现了通过设计超快激光脉冲序列, 在 Lamb-Dicke 区域以外实现超快量子纠缠和量子逻辑门的方案. 这些方案均借助离子链这一多体量子系统的声子能级来耦合离子之间的自旋状态, 并且均通过调制激光脉冲或设计合适的脉冲序列解耦多运动模式, 来提高纠缠门的保真度. 本文从理论和实验层面分析了这些多体量子纠缠和量子逻辑门操作的关键技术, 揭示了离子阱中利用激光场驱动离子链运动态, 通过非平衡过程中的非线性相互作用, 来实现量子逻辑门的基本物理过程.

关键词: 离子阱量子计算, 量子逻辑门, 量子纠缠, 自旋依赖相互作用**PACS:** 03.67.Bg, 42.50.Dv, 03.67.Ac, 03.65.Vf**DOI:** 10.7498/aps.71.20220360

1 引言

自 20 世纪 80 年代 Paul Benioff 提出量子图灵机概念之后, 多体系统中的量子纠缠与量子逻辑门得到快速发展. 多量子比特的纠缠特性可以实现量子计算功能, 在解决复杂数学问题时, 不仅能够有效节省计算时间, 而且可以节省大量算力资源. 目前量子计算的独特优势已经在分子模拟、化学化工和机器学习等领域有初步展现. 基于量子多体系统的量子模拟与量子计算正在展现其在科学探索上的巨大潜在价值.

量子计算的硬件实现体系有很多, 例如半导

体、冷原子光晶格、超导约瑟夫森结体系等. 离子阱体系也是其中之一, 例如 Paul 阱和 Penning 阱. Paul 阱的发明归功于沃尔夫冈·保罗 (Wolfgang Paul), 他也因这项工作获得了 1989 年的诺贝尔物理学奖. Paul 阱通过直流和射频电极在特定区域产生电磁场, 以此俘获并囚禁离子. 囚禁离子本身处于高真空状态, 稳定性非常好, 处于纠缠态的离子可以保持相当长的相干时间. 量子计算的核心是在多体系统上构建量子逻辑门, 并以此实现量子算法, 因此, 能否实现高保真度的纠缠态对于量子计算而言非常重要. 在囚禁离子系统中实现高保真度的量子纠缠态, 其中应用比较广泛的有 Cirac-Zoller controlled-NOT 门和 Mølmer-Sørensen 门, 两者都

* 国家自然科学基金 (批准号: 11774436, 11974434, 12074439)、广东省自然科学基金 (批准号: 2020A1515011159)、广东省重点领域研发计划项目 (批准号: 2019B030330001)、广州市科技计划项目 (批准号: 202102080380)、中山大学中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: 2021qntd28)、中国博士后科学基金 (批准号: 2021M703768)、广东省珠江人才计划项目 (批准号: 2017GC010656) 和中央引导地方科技发展资金 (批准号: 2021Szvup172) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liut87@mail2.sysu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: luole5@mail.sysu.edu.cn

已被实验验证^[1,2]. 本文主要讨论 Mølmer-Sørensen 门, 它利用囚禁离子的运动模式和自旋 (外态和内态) 的耦合和解耦, 以声子为媒介实现囚禁离子自旋的纠缠. 其最大的特点就是利用激光与声子的相互作用, 将一维离子链构成的量子多体系统驱动到远离平衡态的状态, 通过非线性过程实现纠缠.

本文将详细地讨论 Mølmer-Sørensen 门中蕴含的非平衡和非线性物理过程, 同时阐述多声子模式的耦合问题, 特别是多声子模式中拉比频率 Ω 的数值分布. 此外, 传统的 Mølmer-Sørensen 门采用的是连续激光, 每种激光频率只能和一种离子运动模式耦合, 这大大降低了门的运行速度, 且速度只会随着囚禁的离子数增加而指数下降. 我们将在本文中讨论近年来高功率脉冲激光的运用, 以及在 Lamb-Dicke 区域外实现两离子超快纠缠门的可行性.

本文的结构如下: 第 2 节首先简单介绍离子阱系统的基本结构、离子在阱中的振动模式以及量子的声子能级, 以此为基础探讨了激光驱动离子内态与外态耦合的物理过程和相关应用; 第 3 节和第 4 节主要总结讨论单声子模式下 Mølmer-Sørensen 门和超快门中离子链这一量子多体系统在激光驱动下内、外态耦合演化的非平衡过程, 从自旋相关的相位积累角度分析了这一过程产生的非线性效应并探讨了其产生纠缠的原因; 最后总结分析了在囚禁离子系统上实现量子逻辑门这一研究热点中解决多声子模式问题的常用方法.

2 离子阱中的声子与激光相互作用

2.1 离子链振动与声子模式

当离子因受到直流 (DC) 和射频 (RF) 电极的电场作用而被囚禁在阱中时, 离子会近似以简谐运动的形式在阱中振荡. 在囚禁多个离子时, 可以通过设置合适的电极参数使阱中的离子在外加电场和离子间库仑斥力的共同作用下, 形成一维线性的链状结构. 由于存在比较强的库仑相互作用, 链上离子之间的运动状态相互耦合影响, 单个离子微小的动力学改变会在库仑力作用下迅速引起整个离子链的运动形式发生变化. 如果把离子链整体的运动也看作谐振子, 整个离子链会在 x, y, z 三个正交方向上存在本征运动模式和相应的本征频率. 其中, 定义一维离子链延伸方向 (z 轴方向) 的运动模式为轴向模, 与之正交的 x 轴和 y 轴方向的运动模

式为径向模. 由于阱的电极参数结构, 轴向上本征模的振动频率 ω_z 远远小于径向上的振动频率 ω_x 和 ω_y . 本征运动模式的量子化能量可以用一种准粒子——声子来描述^[3].

2.1.1 空间位置

为研究离子链在囚禁区域的振荡特征, 首先需要了解每个离子在囚禁区域的受力情况和位置分布. 当只考虑纯二次势的作用时, 一维链状的库仑晶体系统的总能量为^[3]

$$V = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 + \sum_{i,j=1, i \neq j}^N \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_i - x_j|}, \quad (1)$$

其中第一项为离子振动的动能, 第二项为离子间的势能, m 为离子的质量, i, j 为离子的序数指标. 这是经典的能量表达式书写方式, 但是实际计算时颇为复杂. 使用约束条件 $\frac{\partial V}{\partial x_i} = 0$ 则 (1) 式可以化为

$$x_j + \sum_{i=1}^{j-1} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m \omega^2} \frac{1}{(x_i - x_j)^2} - \sum_{i=j+1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m \omega^2} \frac{1}{(x_i - x_j)^2} = 0, \quad (2)$$

其中 ω 取轴向方向的质心模频率 ω_z , e 为单位电荷量. 为了化简该式, 引入两个新量^[4] $u_i = x_i/l$, $l^3 = e^2/(4\pi\epsilon_0 m \omega^2)$. 最终可以得到关于离子位置的约束方程:

$$u_j + \sum_{i=1}^{j-1} \frac{1}{(u_i - u_j)^2} - \sum_{i=j+1}^N \frac{1}{(u_i - u_j)^2} = 0. \quad (3)$$

解决多个离子的问题时, 使用 (3) 式可以得到离子位置的数值解. 表 1 为 $\omega_z = 0.3058$ MHz 时 5 个 $^{171}\text{Yb}^+$ 的离子链中离子位置的计算结果. 值得注意的是常数 l 在实验中非常重要, 其一定程度上表征了一个离子阱中的囚禁区域的线度^[4], 对于 $^{171}\text{Yb}^+$ 而言, 以上轴向频率下 $l \approx 6.038 \mu\text{m}$.

表 1 离子链上的离子位置
Table 1. Ion position on the ion chain.

离子序数	1	2	3	4	5
位置/ μm	-10.52	-4.96	0	4.96	10.52

2.1.2 振动模式与声子

离子链在时变的外部电场作用下存在一定程度的振动. 如果从量子力学观点去看, 势阱中谐振子的能量不连续, 而是表现出一定的能级特性. 阱

中离子链更像一种库仑晶体, 存在其特定的声子能级. 如果囚禁区域只有两个离子, 囚禁势是一个二次势. 根据牛顿第二定律研究离子在 z 轴 (轴向) 方向的受力情况, 可以得到如下微分方程组:

$$m \frac{d^2(z_1 + z_2)}{dt^2} = -ke(z_1 + z_2), \quad (4)$$

$$m \frac{d^2(z_1 - z_2)}{dt^2} = -\frac{2k_0e^2}{(z_1 - z_2)^2} - ke(z_1 - z_2), \quad (5)$$

其中 z_1, z_2 分别为两个离子的位置坐标. k_0 为静电力常量, k 为常数, e 为单位电荷, m 为 $^{171}\text{Yb}^+$ 的质量. $z_1 + z_2$ 实际上表征两个离子质心的位置坐标, 而 $z_1 - z_2$ 表征离子间距. 如果将式中 $z_1 + z_2$ 和 $z_1 - z_2$ 看作两个新的变量, 那么以上微分方程关于这两个新变量的解具有周期性振荡的形式. 这使得离子运动表现为两种模式: 一种为质心模, 即质心随离子振动而振动; 另一种为呼吸模, 即离子以质心为中心而做类似呼吸的运动, 如图 1 所示.

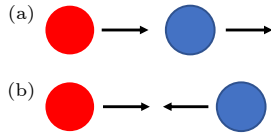


图 1 两离子在阱中的振动模式 (a) 质心模; (b) 呼吸模
Fig. 1. Vibration modes of two ions in trap: (a) Center of mass mode; (b) relative motion mode.

质心模的频率较小, 为 $\sqrt{ke/m}$; 呼吸模频率较大. 当阱中离子链上的离子总数超过两个时, 此时需要从系统的拉格朗日量开始考虑, 将运动的模式转化为本征值和本征向量问题. 本征模式的本征向量可以通过对矩阵 $\mathbf{A}$ 进行对角化得到. 系统的拉格朗日量为^[4]

$$L = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \dot{q}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N q_i q_j \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right). \quad (6)$$

将总能量表达式 (1) 式代入 (6) 式可得:

$$L = \frac{m}{2} \left(\sum_{i=1}^N \dot{q}_i^2 - \nu^2 \sum_{i,j=1}^N \mathbf{A}_{ij} q_i q_j \right), \quad (7)$$

其中矩阵 $\mathbf{A}_{ij}$ 可以解析地推出如下形式^[3]:

$$\mathbf{A}_{ij} = \begin{cases} \frac{\omega_D}{\omega_z} + \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq i}}^N \frac{a}{|u_i - u_n|^3}, & (i=j, D=x, y, z), \\ -\frac{a}{|u_i - u_j|^3}, & (i \neq j), \end{cases} \quad (8)$$

根据阱的对称结构和势场分布可知 $\omega_x \sim \omega_y \gg \omega_z$, 因此这里模拟计算轴向运动模式频率时可取参数 $a=2$, $\omega_D/\omega_z=1$ (D 取 z); 在计算径向运动模式频率时取 $a=-1$, $\omega_D/\omega_z=10$ (D 取 x 或 y)^[3-5]. 计算矩阵 $\mathbf{A}$ 的本征值和本征态为 $\mathbf{A}\xi_k = \lambda_k \xi_k$, ξ_k 表示第 k 个本征模, λ_k 表示第 k 个本征模对应的本征值. 在各个方向上的本征模频率可以表示为 $\omega_{D,k} = \sqrt{\lambda_k} \omega_z$. 由以上计算过程不难看出, 当离子链上有 m 个离子时就会有 m 个本征运动模式和本征频率与之对应, 可以模拟计算 5 个离子的轴向和径向两个方向的本征频率图谱, 如图 2 所示. 径向模式的本征频率在线性离子链系统中比轴向更高, 且本征频谱间隔更近.

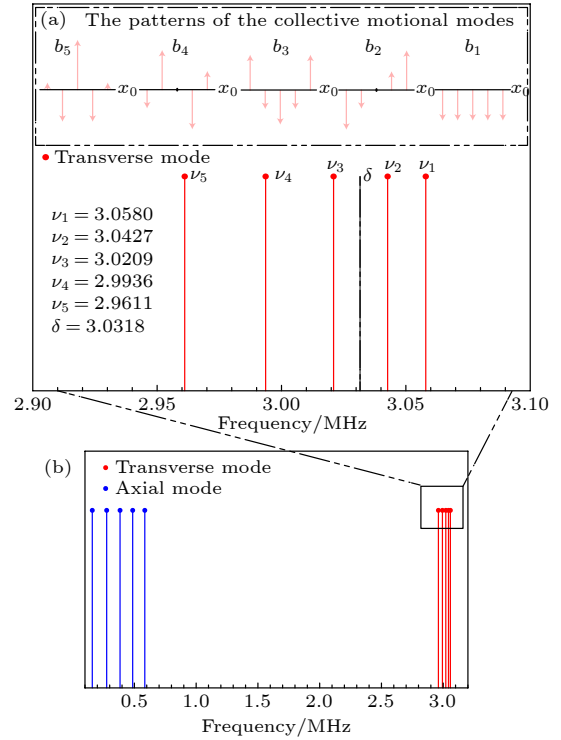


图 2 5 个离子径向模式和轴向模式的本征频率 (a) 径向模式的本征频率以及本征模向量, $b_m (m=1-5)$ 表示了 5 个离子远离平衡位置 x_0 的大小, δ 是执行受激拉曼跃迁过程中设置的失谐; (b) 模拟计算的径向模式和轴向模式的本征频率谱

Fig. 2. Eigenfrequencies of the transverse and axial modes of the 5 ions in trap: (a) Eigenfrequencies of transverse modes and eigenmode vectors, $b_m (m=1-5)$ represents the size of the 5 ions away from the equilibrium position x_0 , δ is the detuning in stimulated Raman transition; (b) simulated eigenfrequency spectra of transverse and axial modes.

离子链是一个比较典型的多体量子系统, 其中简谐振子能量形式在量子力学里可以以量化的

形式表示, 对应于特定的声子能级. 每一个方向上每一个本征模都可以提供其声子能级, 第 m 个本征模提供的声子频率为 ν_m , 对应的声子能级间隔为

$$\Delta E = \hbar \nu_m. \quad (9)$$

2.2 激光场与声子模式的相互作用

以 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子为例, $^{171}\text{Yb}^+$ 离子的两个超精细能级对磁场的变化不敏感, 因此将其编码为量子比特具有更好的稳定性. 如图 3 分别定义 $F=0$, $m_F=0$ 能级和 $F=1$, $m_F=0$ 能级为 $|\downarrow\rangle$ 态 ($|0\rangle$) 和 $|\uparrow\rangle$ 态 ($|1\rangle$). 在这个两能级系统中, 两能级的哈密顿量可以写成 $H_0 = \frac{\hbar\omega_{\text{hf}}}{2}\sigma_z$, 其中 ω_{hf} 代表自旋能级 $|\downarrow\rangle$ 态和 $|\uparrow\rangle$ 态的能级差, σ_z 是泡利 z 算符. 在离子阱中的离子可以被看作一个简谐振子, 所以离子运动态的哈密顿量可以写成 $H_m = (a^\dagger a + 1/2)\hbar\nu$, 其中 $a^\dagger$ 和 a 是产生和湮灭算符, ν 是某个运动模式的本征频率 (也就是声子的频率).

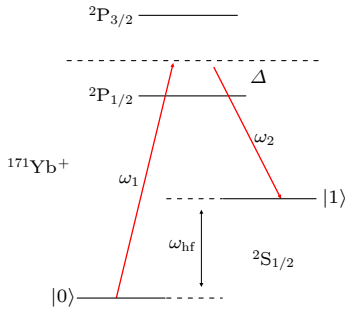


图 3 $^{171}\text{Yb}^+$ 中受激拉曼跃迁示意图 (ω_1 、 ω_2 分别为两束激光的频率; Δ 为两束激光在 $2\text{P}_{1/2}$ 能级处的失谐)

Fig. 3. The stimulated Raman transition of $^{171}\text{Yb}^+$ (ω_1 and ω_2 are the frequencies of the two laser beams; Δ is the detuning of the two laser beams at the $2\text{P}_{1/2}$ energy level).

原则上离子在三个正交方向上只用耦合其中一个方向的运动模式即可. 通过构建一组受激拉曼跃迁, 离子的运动外态和自旋内态就可以被耦合起来. 三能级构型的 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子和激光相互作用的受激拉曼跃迁如图 3 所示, 忽略交流斯塔克效应后, 离子和激光相互作用的哈密顿量可以写成 [6]:

$$H_1 = \frac{\hbar\Omega}{2}(\sigma_+ + \sigma_-)[e^{i(k\hat{x} - \omega t - \phi)} + e^{-i(k\hat{x} - \omega t - \phi)}], \quad (10)$$

其中 $\omega = \omega_2 - \omega_1$ 是两束激光的频率差, $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ 是两束激光的波矢差, $\phi = \phi_2 - \phi_1$ 是两束激光的

相位差, $\sigma_+ = |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$ 是自旋的升算符, $\sigma_- = |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$ 是自旋的降算符, Ω 是拉比频率. 当两束激光的波矢差 $\mathbf{k}$ 为 0 时, (10) 式相互作用哈密顿量中的 $k\hat{x}$ 项可以忽略. 此时这个受激拉曼跃迁过程只表现为两能级的简单耦合, 量子态在两能级间翻转, 此时旋转波近似后相互作用绘景下系统哈密顿量为 $H_1 = \frac{\hbar\Omega}{2}\sigma_+ + \frac{\hbar\Omega}{2}\sigma_-$. 如果受激拉曼跃迁用到的两束激光垂直于离子链且相对照射到离子上时, (10) 式中 $k\hat{x}$ 无法忽略. 此时波矢差 $\mathbf{k}$ 的方向为垂直于离子链方向, 这表征激光的部分动量会转移到离子上并且对离子在垂直于离子链方向上的运动模式产生影响. 旋转波近似后相互作用绘景下哈密顿量为

$$H_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2}e^{i(\omega - \omega_{\text{hf}})t}e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \phi)} \\ \frac{\Omega}{2}e^{-i(\omega - \omega_{\text{hf}})t}e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \phi)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

考虑离子运动时, 我们将 $|\downarrow\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle$ 构成的希尔伯特空间扩展为离子内态 ($|\downarrow\rangle$ 、 $|\uparrow\rangle$) 和离子外态 (声子能级 $|n\rangle$) 的直积空间, 则 (11) 式哈密顿量表示 $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle \otimes |n'\rangle$ 之间的耦合. 如果将 (11) 式代入薛定谔方程, 可以解出 $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle \otimes |n'\rangle$ 之间耦合的等效拉比频率 $\Omega_{n,n'}$ 为

$$\Omega_{n,n'} = \langle n' | e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} | n \rangle \Omega = \langle n' | e^{i\eta(a + a^\dagger)} | n \rangle \Omega. \quad (12)$$

在 (12) 式中的可以看到, 表征激光与离子动量交换的 $k\hat{x}$ 可以被 Lamb-Dicke 因子 $\eta = kx_0$ 和声子的产生湮灭算符 $a^\dagger$, a 所替代, 这里 $x_0 = \sqrt{\hbar/(2m\nu)}$ 是基态谐振子波包大小. 这一过程表示激光转移给离子的动量引起了离子的运动外态 (声子态) 的转移. 在考虑声子态跃迁的情况下, $|\downarrow\rangle \otimes |n\rangle$ 态和 $|\uparrow\rangle \otimes |n'\rangle$ 态耦合的等效拉比频率由 $D_{n,n'} = \langle n' | e^{i\eta(a + a^\dagger)} | n \rangle$ 系数所调制, 这一系数又被称为 Debye-Waller 因子 [7,8], 其表征考虑声子跃迁情况下的自旋之间的耦合强度. 当 Lamb-Dicke 极限条件 $\eta^2(2n+1) \ll 1$ 满足时, 对 $e^{i\eta(a + a^\dagger)}$ 进行泰勒展开:

$$e^{i\eta(a + a^\dagger)} = 1 + i\eta(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) + O(\eta^2). \quad (13)$$

由 (13) 式和 (12) 式可知, 在 Lamb-Dicke 极限条件下, 大于一个声子能级的跃迁将被抑制而只可能存在不改变声子能级的载波跃迁和改变一个声子能级的红边带或蓝边带跃迁. 当 (11) 式哈密顿量

中 $\omega - \omega_{\text{hf}} = 0$ 时激发强烈的载波共振跃迁, 此时自旋翻转的同时声子能级不发生改变, 对应的拉比频率为 $\Omega_{n,n} = \Omega$; 当 $\omega - \omega_{\text{hf}} = \nu$ 时 (ν 为声子的能级间隔) 激发蓝边带跃迁, 此时自旋由下翻上的同时声子能级增一, 即由 $|n\rangle$ 跃迁到 $|n+1\rangle$, 自旋由上翻下的同时声子能级减一, 即由 $|n\rangle$ 跃迁到 $|n-1\rangle$; 当 $\omega - \omega_{\text{hf}} = -\nu$ 时激发红边带跃迁, 此时自旋由下翻上时声子能级减一, 由上翻下时声子能级增一, 如图 4(a). 此外, 由 (13) 式和 (12) 式可求得声子能级增一或减一时自旋耦合的拉比频率分别为 $\Omega_{n,n+1} = \sqrt{n+1}\eta\Omega$ 和 $\Omega_{n,n-1} = \sqrt{n}\eta\Omega$.

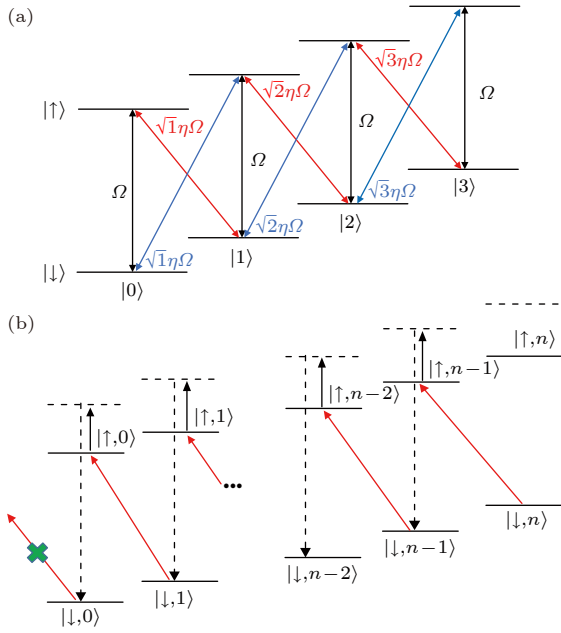


图 4 边带跃迁和边带冷却示意图 (a) 载波 (黑)、红边带 (红) 和蓝边带 (蓝) 跃迁; (b) $^{171}\text{Yb}^+$ 红边带冷却示意图
Fig. 4. Schematic diagram of sideband transition and sideband cooling: (a) Carrier (black arrow), red sideband (red arrow) and blue sideband (blue arrow) transitions; (b) red sideband cooling of $^{171}\text{Yb}^+$.

利用以上耦合单个声子能级的自旋跃迁原理可以构建基于边带的离子冷却过程 [9–11], 图 4(b) 就是基于红边带构建边带冷却的示意图. 从高声子能级的自旋下态出发, 红边带将自旋翻转为上态并使得声子能级降低一级. 为了能够使得红边带持续作用而降低声子能级, 每次翻转后需要将处于自旋上态的离子重新泵浦回自旋下态, 这一过程不改变声子能级. 实验中设置合适的红边带与泵浦序列, 离子所处的声子能级将会逐级降低. 当离子的声子能级被冷却到声子基态时, 红边带将无法再产生作用.

3 单声子模式下的纠缠和逻辑门

3.1 Mølmer-Sørensen 门

Mølmer-Sørensen 门 [12,13] 通过同时运用 2.2 节提到的非共振的红、蓝边带来耦合两个离子的自旋. 在囚禁 $^{171}\text{Yb}^+$ 系统中 [14–16], 可以通过给受激拉曼跃迁过程设置合适的失谐来产生红、蓝边带. 为了防止同种边带的连续跃迁, 需要在原来红、蓝边带的频率基础上额外增加一个小失谐 δ [2], 如图 5 所示. 由于其每种边带一次最多只跃迁一个声子能级, 因此这是一种在 Lamb-Dicke 极限以内的逻辑门实现方式.

由于声子的玻色子特性, 离子链上不同离子可同时处于相同的声子能级上. 假设离子链上两个离子被初始化为 $|\downarrow\downarrow, n\rangle$ 态, 此时, 如果其中一个离子沿着图 5 中路径 1 受红边带光子激发跃迁到 $|\uparrow\downarrow, n-1\rangle$ 态. 由于失谐 δ 的设置, 红边带的连续作用将被抑制, 此时另外一个离子将受蓝边带光子激发跃迁到 $|\uparrow\uparrow, n\rangle$ 态. 如果 Mølmer-Sørensen 门中失谐的设置远大于两自旋翻转的拉比频率, 中间单自旋翻转的态就可视为几乎没有布居 [17,18]. 根据 (12) 式和 (13) 式, 两自旋翻转的跃迁的强度可以表示为 $\Omega_{|\downarrow\downarrow, n\rangle \rightarrow |\uparrow\uparrow, n\rangle} = \frac{n(\eta\Omega)^2}{2\delta}$. 另外沿着路径 2, $|\downarrow\downarrow, n\rangle$ 态先受蓝边带光子激发跃迁到 $|\downarrow\uparrow, n+1\rangle$ 态,

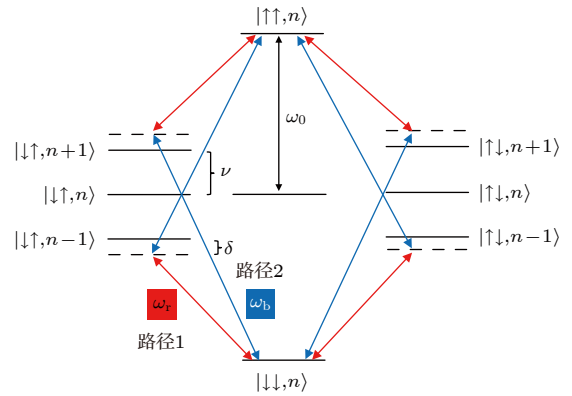


图 5 Mølmer-Sørensen 门能级跃迁示意图, 其中 ω_b , ω_r 分别为蓝边带和红边带的频率, 红色箭头和蓝色箭头分别为红边带跃迁和蓝边带跃迁. ν 为声子频率, δ 为红、蓝边带处的小失谐
Fig. 5. The energy level transition in Mølmer-Sørensen gate. ω_b and ω_r are frequencies of blue sideband and red sideband respectively, and blue arrow and red arrow are blue sideband transition and red sideband transition respectively; ν is the phonon frequency, and δ is the small detuning of each sideband.

然后受红边带光子激发跃迁 $|\uparrow\uparrow, n\rangle$ 态. 跃迁的强度可以表示为 $\Omega_{|\downarrow\downarrow, n\rangle \rightarrow |\uparrow\uparrow, n\rangle} = \frac{(n+1)(\eta\Omega)^2}{-2\delta}$. 图 5 中右侧还有两条相同的针对不同离子的路径, 实际过程可视为这些路径同时都有可能存在.

从以上分析过程可以看出 $|\downarrow\downarrow, n\rangle \Rightarrow |\uparrow\uparrow, n\rangle$ 跃迁的强度可以和运动态 $|n\rangle$ 无关, 只要 $n-1$ 和 $n+1$ 声子的中间态没有布居, 则可视为整个过程与运动态解耦, 最终的哈密顿量具有纯自旋耦合的形式^[18]:

$$H_I = \Omega_{\text{total}} \sigma_{\phi_i} \sigma_{\phi_j}, \quad (14)$$

其中 $\Omega_{\text{total}} = (\eta\Omega)^2/\delta$ 是所有路径作用下两离子自旋翻转的总强度, 这里 $\sigma_{\phi} = \cos \phi \sigma_x + \sin \phi \sigma_y$. 在讨论 Mølmer-Sørensen 相互作用时, 可以从激光场与两能级离子在简谐势阱中相互作用的哈密顿量开始考虑. 离子在阱中的自由哈密顿量为 $H_0 = \hbar\nu a^\dagger a + \frac{\hbar\omega_0}{2} \sigma_z$, 其中 $\omega_0 = \omega_{\text{hf}}$. 相互作用哈密顿量为 (10) 式. 旋波近似后相互作用绘景下系统的哈密顿量为

$$H_I = \frac{\hbar\Omega}{2} \left(\sigma_+ e^{i\eta(ae^{-i\nu t} + a^\dagger e^{i\nu t})} e^{i[(\omega_0 - \omega)t - \phi]} + \sigma_- e^{-i\eta(ae^{-i\nu t} + a^\dagger e^{i\nu t})} e^{-i[(\omega_0 - \omega)t - \phi]} \right), \quad (15)$$

其中 $\eta = kx_0$ 是 Lamb-Dicke 系数. 在 (15) 式中, 取 $\delta = \delta_r$, $\phi = \phi_r$ 可以得到红边带的哈密顿量, 取 $\delta = \delta_b$, $\phi = \phi_b$ 可以得到蓝边带的哈密顿量. Mølmer-Sørensen 门中红、蓝边带同时作用, 如图 5. 此时相互作用哈密顿量可以写成红、蓝边带哈密顿量的和^[12,13],

$$\begin{aligned} H_{\text{M-S}} &= H_R + H_B \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^N [\hbar\Omega_i \sigma_+ \cos(\delta_m t - \phi_m) \\ &\quad - \hbar\Omega_i \sigma_- \cos(\delta_m t - \phi_m)] \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^N \hbar\eta_{i,m} \Omega_i \sigma_{\phi_s}^i \cos(\delta_m t + \phi_m) \\ &\quad \times (a_m^\dagger e^{i\nu_m t} + a_m e^{-i\nu_m t}). \end{aligned} \quad (16)$$

定义 Mølmer-Sørensen 门中设置的红、蓝失谐为 $\delta_b = -\delta_r = \delta_m \equiv \nu + \delta$, 运动态相位为 $\phi_m = (\phi_b - \phi_r)/2$, 自旋相位为 $\phi_s = -\pi/2 - (\phi_b + \phi_r)/2$, 自旋算符为 $\sigma_{\phi} = (\sigma_+ e^{-i\phi} + \sigma_- e^{i\phi})$. 指标 i 为离子的序

数, 指标 m 为多运动模式的模式序数. 忽略非共振的载波项后, 设置 $\phi_r = 0$, $\phi_b = \pi$ 得到相互作用哈密顿量为

$$H_{\text{M-S}} = - \sum_i^N \sum_m^N \hbar\eta_m^i \Omega_i \sin(\delta_m t) \begin{pmatrix} a_m^\dagger e^{i\nu_m t} \\ + a_m e^{-i\nu_m t} \end{pmatrix} \sigma_{x_i}. \quad (17)$$

这个哈密顿量的时间演化算符可以用二阶 Magnus 公式展开^[19],

$$U(t) = \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt_1 H_{\text{M-S}}(t_1) - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 [H_{\text{M-S}}(t_1), H_{\text{M-S}}(t_2)] \right]. \quad (18)$$

忽略多声子模式的情况, 考虑两离子共享运动态, 则可得两离子自旋耦合运动态的演化算符,

$$U(t, 0) = \exp \left[(\alpha(t)a^\dagger - \alpha(t)^*a) \sigma_{x_1} \otimes I + (\alpha(t)a^\dagger - \alpha(t)^*a) I \otimes \sigma_{x_2} - i\chi(t) \sigma_{x_1} \otimes \sigma_{x_2} \right], \quad (19)$$

其中 $\alpha(t) \approx \frac{\eta_m^i \Omega_i}{2} \frac{e^{-i\delta T} - 1}{i\delta}$. 当门时间 $T = 2n\pi/\delta$ (n 为整数) 时 $\alpha(T) = 0$, (19) 式中前两项表征的自旋与声子解耦, 此时就只剩下表征自旋与自旋净耦合的最后一项. $\alpha(t)$ 值表征离子运动在相空间中的轨迹, 那么门操作结束时 $\alpha(T) = 0$, 又可以理解为离子在门操作结束时, 其在相空间中的位置与 $t = 0$ 时刻重合, 即离子在相空间的轨迹恰好闭合. 在声子能级上额外的小失谐 δ 是非常有必要的, 从能级跃迁角度上看可以防止同一种边带的连续作用, 从相空间的轨迹闭合角度来看, 当 $\delta = 0$ 时, 门时间 $T = 2n\pi/\delta$ 趋于无穷大, 即运动态永远无法与自旋解耦.

Mølmer-Sørensen 门的中心思想是使用声子作为媒介来实现离子自旋的纠缠. 离子在阱中存在相互独立的自旋态 (内态) 和共同分享的声子态 (外态). 通过运动态相互耦合的离子为实现纠缠提供了很大的方便. 改变其中一个离子的声子模式, 这种改变会通过离子间库仑相互作用迅速地传递到整个链条, 链上的所有离子共享一个声子模式. 如果此时离子的自旋与这个共享的声子模式相互耦合, 则以声子为媒介将两个离子的自旋纠缠在一起将成为可能. Mølmer-Sørensen 门使用红、蓝边带两组受激拉曼跃迁实现这种离子自旋与声子的耦合, 最后 $T = 2n\pi/\delta$ 时两个离子的自旋纠缠起来, 同时自旋与声子解耦, 实现了两个离子自旋的净纠缠.

3.2 超快激光作用下的逻辑门

超快脉冲锁模激光器在物理学研究的各个领域得到广泛的应用. 有着一定重复频率的超快激光脉冲序列在频域上有着独特的梳齿结构, 即所谓的光学频率梳^[20–22]. 其不仅在光谱学领域的发展上有着重要推动作用, 也在囚禁离子系统上制备离子自旋的纠缠态和实现量子逻辑门^[23], 实现两离子自旋超快纠缠^[24]方面有着出色的应用. 同连续激光一样, 超快脉冲激光也是通过构造自旋依赖的动量转移来实现离子内态(自旋)的纠缠. 时域上, 两束脉冲序列在垂直于离子链的方向上相向入射, 由同时到达的多对脉冲驱动离子自旋翻转的同时耦合声子能级, 实现最大的动量转移. 这一过程可以视为由脉冲激光序列驱动受激拉曼跃迁过程. 当脉冲序列很长, 脉冲序列上单个脉冲强度较弱时, 频域上每根梳齿的带宽很窄, 在声光调制器的调制下很容易构造出第2节所描述的产生红、蓝边带的受激拉曼跃迁, 进而实现超快脉冲激光作用下的两比特纠缠. 在频域上这一过程可视为离子感受到来自两束激光脉冲序列所构成的光频梳的梳齿频率差恰好满足驱动离子红、蓝边带跃迁的共振要求. 这种用弱脉冲、长脉冲序列来构造红、蓝边带的方案受 Lamb-Dicke 区域的限制, 即高于一个声子能级的跃迁会被强烈地抑制, 因而门时间相对较长, 约为百微秒量级^[16]. 此外还可以利用强脉冲、短脉冲序列实现 Lamb-Dicke 区域以外的超快纠缠门, 门时间大约为几微秒量级^[24]. Lamb-Dicke 区域以内激发红、蓝边带的理论原理在第2节已讨论, 本节主要讨论超快脉冲激光作用下的超快纠缠.

3.2.1 超快激光脉冲耦合声子

以 $^{171}\text{Yb}^+$ 离子为例, 与3.1节 Mølmer-Sørensen 门相似, $^{171}\text{Yb}^+$ 离子在基态 $|\downarrow\rangle = |0\rangle = |^2\text{S}_{1/2} : F=0, m_F=0\rangle$ 受到 355 nm 激光的激发, 吸收光子跃迁至一虚能级, 此处的失谐量 Δ 约为 33 THz. 另一束 355 nm 的激光照射离子, 使其释放光子落回至激发态 $|\uparrow\rangle = |1\rangle = |^2\text{S}_{1/2} : F=1, m_F=0\rangle$. 这一整个受激跃迁过程将离子内态的两个能级耦合起来, 布居数在两个能级间以拉比振荡的形式转移, 拉比频率为 Ω , 暂时不考虑离子运动效应的情况下, 激光的电场效应可以写为 $\mathbf{E} = \text{Re} [\hat{\epsilon} f(t) e^{-i(\omega t + \phi)}]$. $\hat{\epsilon}$ 是脉冲激光的极化矢量, $f(t)$ 是脉冲激光的电场包络函数, ω 是脉冲激光的频率, ϕ 是脉冲激光的

相位. 根据受激拉曼跃迁的基本理论, 在旋转坐标系下相互作用哈密顿量可以写为

$$H_e = \begin{pmatrix} \frac{\omega_{\text{hf}}}{2} + \Delta_1 & \frac{\Omega}{2} \\ \frac{\Omega^*}{2} & -\frac{\omega_{\text{hf}}}{2} + \Delta_2 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

其中拉比频率 $\Omega = \frac{g_{02}^* g_{12}}{2\Delta}$, g_{02} , g_{12} 为偶极跃迁因子. Δ_1 和 Δ_2 分别为两束激光引起的斯塔克效应项, 因为激光在P能级处有着巨大的失谐, 如图3所示, 这两项引起的能级间距频移项 $|\Delta_1 - \Delta_2|$ 远小于拉比频率 Ω , 其引起的绕 z 轴的转动效应很小, 因此可以忽略不计^[25]. 哈密顿量的最终形式为 $H_e = \frac{1}{2} (\Omega \sigma_x + \omega_{\text{hf}} \sigma_z)$.

与 Mølmer-Sørensen 门相似, 激光操纵离子内态(自旋)和运动态的核心是两束波矢相向或者有着相向的分量的激光在构成以上受激拉曼跃迁的同时还对离子有一定的扰动力. 在 Mølmer-Sørensen 门中, 其表现为直接激发声子的跃迁, 这里这种扰动表现为离子内态在进行拉曼跃迁时, 吸收和放出光子会对自身的动量产生一定的改变. 当两束激光的波矢相向且垂直与离子链时, 这种动量改变最大为 $\hbar \Delta \mathbf{k}$ ^[25], $\Delta \mathbf{k}$ 为两束光的波矢差. 考虑离子在阱中的简谐振动, 激光电场效应中的相位 $\phi = \mathbf{k}\mathbf{x} + \phi_0$, $\mathbf{k}$ 为电场波矢, $\mathbf{x}$ 为位置算符. 拉比频率中的偶极跃迁因子具有如下形式:

$$\begin{aligned} g_{ij} &= -f(t) e^{-i(kx + \phi_0)} \langle i | \mu \cdot \hat{\epsilon} | j \rangle \\ &= C_{\text{CG}} e^{-i(kx + \phi_0)} \Gamma \sqrt{\frac{I(t)}{2I_{\text{sat}}}}, \end{aligned} \quad (21)$$

式中 I_{sat} 为饱和光强, C_{CG} 为 Clebsch-Gordan 系数, Γ 为上能级的自发辐射率. 拉比频率的大小反映了两个能级的耦合强度, 其正比于光强. 以两束光相向传播为例, 考虑到受激拉曼跃迁中两束光具有方向相反的波矢 $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, 和不同的相位 ϕ_1 , ϕ_2 . 定义 $\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$, $\Delta \phi = \phi_2 - \phi_1$. 则拉比频率 $\Omega = \frac{g_{02}^* g_{12}}{2\Delta}$ 可以通过(21)式计算得

$$\Omega = 2\sqrt{\Omega_1(t)\Omega_2(t)} [\cos(\Delta kx + \Delta \phi)], \quad (22)$$

Ω_1 , Ω_2 分别正比于两束光的光强. 最终的有效哈密顿量为

$$H_e = \sqrt{\Omega_1(t)\Omega_2(t)} \cos(\Delta kx + \Delta \phi) \sigma_x + \frac{\omega_{\text{hf}}}{2} \sigma_z. \quad (23)$$

与红、蓝边带的作用相似, Δkx 的引入在(23)式哈密顿量的时间演化算符内表现为离子在

运动态上的位移算符, 即激光将对离子的运动态产生影响. 用离子运动态的基态波包 x_0 定义 Lamb-Dicke 参数 $\eta = \Delta k x_0$, 谐振子的位置算符 x 写作 $x_0(a + a^\dagger)$. 使用超快激光脉冲序列激发自旋翻转时, 单个脉冲的脉宽很短且远小于离子的运动周期, 数学上可以近似为一个 δ 函数^[25]. 因此如果一个脉冲在 t_0 时刻到达离子, 则有近似关系 $\Omega_{1,2}(t) \approx \Theta\delta(t - t_0)$. 因此一对脉冲同时照射到离子的总的演化算符为^[25,26]

$$U(\tau) = \exp\left(-i \int_0^\tau H_c(t) dt\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(\Theta) e^{in\Delta\phi(\tau)} D(in\eta) \hat{\sigma}_x^n. \quad (24)$$

可以看到一对脉冲光子照射到离子时不仅引起了离子自旋的翻转, 也对其运动外态以位移算符 $D(in\eta)$ 的形式产生影响. 但是如果仅靠单独一对脉冲光子实现一次完整的受激拉曼跃迁, 脉冲面积 Θ 取 π 时, (24) 式中贝塞尔函数 $J_n(\Theta)$ 的 n 阶效应无法忽略, 即相当于在脉冲对驱动的受激拉曼跃迁过程中, 自旋翻转和动量改变会以一定的概率发生 n 次, 这个概率幅由前面的贝塞尔函数的大小决定. 由此可见, 一对强脉冲的作用最终让一个初态在声子基态或者一个相干态的离子成为不同动量大小踢的叠加态, 类似于 Kapitza-Dirac 衍射效应^[25,26].

3.2.2 自旋依赖的动量转移

(24) 式中虽然同时体现了自旋的翻转和离子运动态的转移, 但这并不能称得上是 Spin-dependent Kick (SDK)^[25], 只可称得上是 Spin-coupled Kick. 因为 (24) 式中可以发现这种动量改变并不依赖于自旋的状态, 只是在耦合运动态的同时自旋做一个简单的翻转. 换言之, 处在不同自旋状态的离子在经过一对脉冲的作用后完全有可能仍然处在一个相同的运动态上. 实验中可以通过每对光脉冲之间有特定时间间隔的光脉冲序列来实现 SDK, 假设脉冲和脉冲之间的时间间隔为 t_0 , 则这对脉冲光子序列的总演化算符为^[26]

$$U = U_n \dots U_f U_2 U_f U_1, \quad (25)$$

其中 $U_f = e^{-i(\omega_{\text{trap}} a^\dagger a + \omega_{\text{hf}} \hat{\sigma}_z/2)t_0}$ 是每对脉冲之间自由演化算符.

在这多个脉冲的作用下, 每个脉冲的脉冲面积设为一个小量 $\delta\theta$. 当 $\delta\theta$ 足够小时, 每个脉冲造成的高阶动量转移效应就被很好地抑制, 此时 (24) 式

中贝塞尔函数只取到一阶. 第 t_n 时刻到达的强脉冲对的作用可认为是瞬时的, 相互作用绘景下每对脉冲的演化算符 U'_n 近似写为^[26]

$$U'_n = 1 + i \frac{\delta\theta}{2} (e^{i\phi} D(in\eta) \hat{\sigma}_+ + e^{-i\phi} D(-in\eta) \hat{\sigma}_-). \quad (26)$$

虽然上面的演化算符不含 t_k , 但是这样的化简是基于脉冲之间的时间间隔限制条件 $t_0 = t_{n+1} - t_n = \frac{2\pi n}{\omega_{\text{hf}} + \omega_A}$, 其中 ω_A 为是施加给其中一束激光的频移, 满足 $\omega_{\text{hf}} = n\omega_{\text{rep}} \pm \omega_A$, $n \in \mathbb{Z}$ 的共振条件^[25,26].

在取总脉冲面积 $\int_0^t \delta\theta = \pi$ 的情况下, 整个脉冲序列在相互作用绘景中的演化算符为 $U_K = (U'_n)^n$, 在脉冲序列上脉冲数目比较多时, 其可很好地近似为^[24] $U_K = e^{i(\phi_0 + \pi/2)} D(in\eta) \hat{\sigma}_+ + e^{-i(\phi_0 - \pi/2)} D(-in\eta) \hat{\sigma}_-$, 这就是一个单离子的 “Spin-dependent Kick”. SDK 演化算符中, 对不同自旋的离子而言它在相空间中被踢的方向不一样. 这样的 SDK 算符在实验上是由一串脉冲序列组成, 实现一次受激拉曼跃迁的自旋的翻转, 并依据自旋的状态在相空间内完成自旋依赖的动量转移. 如离子自旋为 $|\downarrow\rangle$, 则其在 SDK 算符作用下自旋翻为 $|\uparrow\rangle$ 并获得 $+\eta$ 的动量转移. 如离子自旋为 $|\uparrow\rangle$, 则其自旋翻为 $|\downarrow\rangle$ 并获得 $-\eta$ 的动量转移如图 6(a). 两离子的 SDK 算符为^[24]

$$U_{K-2} = e^{2i\phi} \hat{\sigma}_{+1} \hat{\sigma}_{+2} D(in\eta_C) + \hat{\sigma}_{+1} \hat{\sigma}_{-2} D(in\eta_R) + e^{-2i\phi} \hat{\sigma}_{-1} \hat{\sigma}_{-2} D(-in\eta_C) + \hat{\sigma}_{-1} \hat{\sigma}_{+2} D(-in\eta_R), \quad (27)$$

其中 η_C 和 η_R 分别代表质心模和呼吸模的 Lamb-Dicke 参数. 可以看到两比特的 SDK 算符每项有选择地耦合了不同运动模式. 第一项和第三项对处

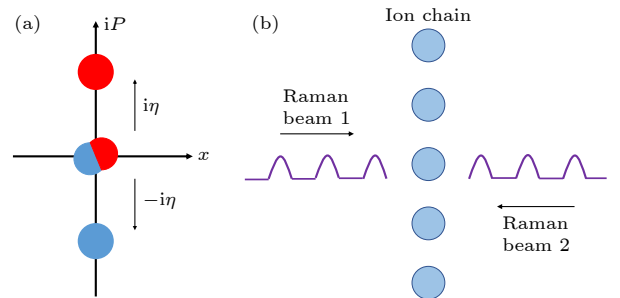


图 6 自旋依赖的动量转移 (a) 不同自旋状态在相空间被转移的方向不同, 红色圆代表 $|\uparrow\rangle$ 态, 蓝色圆代表 $|\downarrow\rangle$ 态; (b) 超快脉冲序列照射离子产生自旋依赖的动量转移

Fig. 6. Spin-dependent momentum transfer: (a) Different spin states are transferred in different directions in phase space, red circle represents $|\uparrow\rangle$ state and blue circle represents $|\downarrow\rangle$ state; (b) ultrafast pulse trains irradiate ions and produce spin-dependent momentum transfer.

于 $|11\rangle$, $|00\rangle$ 的系统耦合质心模. 第二项和第四项对处于 $|01\rangle$, $|10\rangle$ 的系统耦合呼吸模. 那么在演化时, 不同自旋组合在不同的运动模式下将在相空间内累积不同的相位, 这种自旋依赖的相位积累构建出了这个多体量子系统非平衡的相位积累过程, 为产生纠缠提供了条件.

3.3 非线性作用与纠缠制备

在量子计算中, 任意一个么正演化算符都可以通过一些基本的单比特门和两比特 CNOT 门构建而成^[27]. 但实现两比特或多比特纠缠的演化算符必然不可被几个单比特门直积分解, 因为纠缠包含了比特之间的相互作用, 这一特性源于产生纠缠的物理过程有一定的非线性的相互作用. 假设初态为 $|\phi_i\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$, $|\phi_i\rangle$ 包含了两个量子比特所展开的希尔伯特空间的所有相互正交的基 ($|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$). 一个物理过程对应的演化算符 U 作用在这样的初态上, 其作用效果可以在末态中以真值表的形式被完全展示出来. 即如果

$$|\phi_f\rangle = U|\phi_i\rangle = \frac{1}{2}(A|00\rangle + B|01\rangle + C|10\rangle + D|11\rangle), \quad (28)$$

则 A, B, C, D 即为 U 分别作用在四个基上的真值, A, B, C, D 均为复数. 当这些值在某些配比情况下使得 $|\phi_f\rangle$ 不可被直积分解, 比如 $B = C = 0$, 则 $|\phi_f\rangle$ 为纠缠态. A, B, C, D 的配比与 U 直接相关, 当这个 U 不能被看作是两个态无相互作用的单独演化时, 其在数学上即表示为不能被直积分解. 得到的态也必然包含了相互作用的信息, 即得到了纠缠态. 这种相互作用可以总结为一种“非线性过程”, 即不同的基在演化结束时有不同的演化结果, 以满足特定的真值表.

3.1 节和 3.2 节提到的利用红、蓝边带跃迁耦合声子的 Mølmer-Sørensen 门和利用强超快脉冲序列耦合离子运动态的方案都借助离子的外态即运动态来构建“线性的过程”, 因为离子的运动在离子链上可以通过库仑相互作用互相影响, 其核心是给离子施加所谓的“自旋相关力 (spin-dependent force)”^[13,28]. 其构建“非线性过程”的基本逻辑可以总结为: 首先用拉曼过程将运动态和自旋态耦合起来, 然后利用自旋依赖过程给不同基积累不同运动态相位, 最后将运动态和自旋解耦, 运动态积累的相位表现在自旋态上.

在强超快脉冲序列的方案中, 根据位移算符的

运算规则 $D(\beta)|\alpha\rangle = e^{\frac{\beta\alpha^* - \beta^*\alpha}{2}}|\alpha + \beta\rangle$, 每对脉冲光子都会使离子的运动态在相空间发生位移. 设离子的运动初态为相干态 $|\alpha_0\rangle$, t_1 时刻一对脉冲光子照射到离子并引起 SDK, 则 (27) 式中的位移算符的作用下得到新的运动态 $|\alpha_{t_1}\rangle$ 为

$$\begin{aligned} |\alpha_{t_1}\rangle &= D(i\eta_1)|\alpha_0\rangle = e^{\frac{i\eta_1\alpha_0^* + i\eta_1\alpha_0}{2}}|\alpha_0 + i\eta_1\rangle \\ &= e^{i\phi_1}|\alpha_1\rangle, \end{aligned} \quad (29)$$

经过 $t_2 - t_1$ 的自由时间演化后, t_2 时刻第二对超快脉冲照射到离子, 此时经过自由演化后的运动态再次受到 SDK,

$$|\alpha_{t_2}\rangle = D(i\eta_2)|\alpha_1 e^{-i\omega(t_2 - t_1)}\rangle = e^{i\phi_2}|\alpha_2\rangle. \quad (30)$$

以此类推, 在第 n 个脉冲到达之后, 第 m 个运动模式的运动态演化为 $|\alpha_{t_n}\rangle = e^{i\phi_n^m}|\alpha_n\rangle$, 其中^[24]

$$\alpha_n = e^{-i\omega t_n} \left(\alpha_0 + i \sum_{n=1}^N \eta_n e^{i\omega t_n} \right), \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \phi_n^m &= \text{Re} \left[\alpha_0 \sum_{n=1}^N \eta_n e^{-i\omega t_n} \right] \\ &\quad - \sum_{n=2}^N \sum_{i=1}^{N-1} \eta_n \eta_i \sin[\omega(t_i - t_n)]. \end{aligned} \quad (32)$$

当 $|\alpha_n\rangle = |\alpha_0\rangle$ 满足时运动态的末态回复到初态位置, 此时运动态可以视为和自旋解耦, 由运动态在相空间转移而产生的相位表现在对应自旋基矢上. 如果初态为 $|\psi_i\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle|\alpha_0\rangle + |01\rangle|\alpha_0\rangle + |10\rangle|\alpha_0\rangle + |11\rangle|\alpha_0\rangle)$, 提取公共相位后的末态为

$$|\psi_f\rangle = \frac{1}{2}(e^{i\Phi}|00\rangle|\alpha_0\rangle + |01\rangle|\alpha_0\rangle + |10\rangle|\alpha_0\rangle + e^{i\Phi}|11\rangle|\alpha_0\rangle), \quad (33)$$

其中 $\Phi = \phi_{Cn} - \phi_{Rn}$, 为质心模和呼吸模各自积累的相位之差. 在驱动边带耦合声子的 Mølmer-Sørensen 门中, 这种直观的自旋相关的运动态转移也存在. 当运动态与自旋解耦时, 则 (19) 式的演化算符写为

$$U(t, 0) = \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\sigma_{x_1} \otimes \sigma_{x_2}\right). \quad (34)$$

如果选择 $|0_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|1_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ 作为新的基矢, 则 (34) 式中的矩阵可以被对角化而可以重新展开为

$$\begin{aligned}
U = & D(\alpha(t))e^{-i\chi(t)}|0_x 0_x\rangle\langle 0_x 0_x| + e^{i\chi(t)}|0_x 1_x\rangle \\
& \times \langle 0_x 1_x| + e^{i\chi(t)}|1_x 0_x\rangle\langle 1_x 0_x| \\
& + D(-\alpha(t))e^{-i\chi(t)}|1_x 1_x\rangle\langle 1_x 1_x|. \quad (35)
\end{aligned}$$

(35) 式与 (27) 式形式相近, 在两比特自旋基矢上具有明确的自旋依赖的动量转移形式, 只不过 Mølmer-Sørensen 门中需要定义新的基矢.

4 多声子模式下的纠缠和逻辑门

利用库仑相互作用不仅可以单独实现两离子自旋纠缠, 也可以实现多对离子自旋的平行纠缠^[29]及整个离子链的全局纠缠^[30]. 利用自旋相关力和离子间的库仑相互作用, 离子的运动态可以作为产生离子间自旋内态纠缠的中介. 但是所有产生纠缠的最关键一步就是在操作结束后需要满足自旋态和运动态的解耦, 实现离子自旋内态的净纠缠. 3.3 节讲到的自旋相关力在驱动离子自旋演化的同时也驱动着离子的运动态在相空间演化, 当运动态在相空间演化的轨迹恰好闭合, 即离子运动态的演化回复到初态时可以视为和自旋解耦. 但是链上有 m 个离子时, 每个方向上都有 m 个本征运动模式. 无论是用边带驱动声子的 Mølmer-Sørensen 门还是强超快脉冲序列, 都需要解决多运动模式对离子自旋纠缠的保真度带来的影响. 常见的解决方法为对入射激光或脉冲进行频率调制、相位调制和幅度调制^[16, 31], 即所谓的“脉冲整形”.

4.1 Lamb-Dicke 区域以内解耦多声子模式

由于实际在执行 Mølmer-Sørensen 门操作的时候, 激光的线宽往往不能忽略. 理论上, 激光的线宽只要不覆盖到其他本征模式提供的声子能级上, 那么激光就不与这些能级耦合. 实际实验中由于离子的径向模式的几个本征模式频率非常接近, 激光的线宽会基本覆盖到离子这个方向上所有本征模式的声子能级上, 如图 7 所示.

如果采用单模的处理方法, 就会因其他模式无法解耦而降低门操作的保真度, 所以在进行离子链上的两离子纠缠时考虑多模问题不可避免. Mølmer-Sørensen 门在多声子模式下演化算符为

$$U(t) = \exp \left(\sum_i \sum_m \phi_{i,m}(t) \sigma_{x_i} - i \sum_i \sum_j \chi_{ij}(t) \sigma_{x_i} \sigma_{x_j} \right), \quad (36)$$

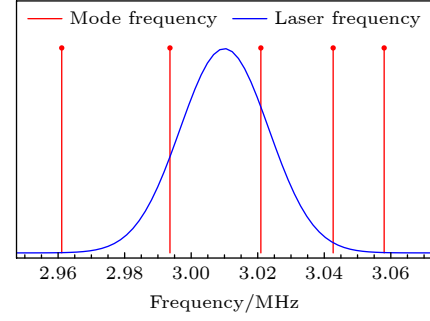


图 7 脉冲激光线宽覆盖若干个本征频率的示意图

Fig. 7. Schematic of laser linewidth covering several eigen-frequencies.

式中第一项表征为自旋-运动的相互作用项, $\phi_{i,m}(t) = \alpha_{i,m}(t) a_m^\dagger - \alpha_{i,m}^*(t) a_m$ 表征离子运动态的在相空间的转移. 若在 T 时刻门结束时使得自旋内态与运动态完全解耦, 仅保留离子间自旋内态的净耦合, 则意味着 (36) 式中 $\alpha_{i,m}(T)$ 对所有运动模式 m 而言均为 0. 此外, 如果在门操作结束后还要满足离子间自旋内态的最大纠缠, 则 (36) 式中第二项还需同时满足 $\chi_{i,j}(T) = \pm\pi/4$. 实验中通常采用基于脉冲整形的脉冲调制技术来处理此多模问题, 比较常见的是对激光的幅度进行离散的分段调制^[29,31]. 在一个幅度分段调制激光作用下, 离子的不同运动态在相空间内的轨迹都可以恰好在门操作结束时闭合, 实现与自旋内态的解耦. 此时拉比频率用一个分段函数表示:

$$\Omega(t) = \begin{cases} \Omega_1, & 0 < t \leq T/N, \\ \Omega_2, & T/N < t \leq 2T/N, \\ \dots, & \\ \Omega_n, & (N-1)T/N < t \leq T. \end{cases} \quad (37)$$

将激光幅度在时域上分为 N 段, 每种运动模式都同时受此幅度分段调制的激光驱动. 当 $\delta_m - \nu_m \ll \delta_m + \nu_m$ 时, 表征离子在相空间位置的 $\alpha_{i,m}(t)$ 在旋波近似后化为

$$\begin{aligned}
\alpha_{i,m}(t) = & \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \eta_{i,m} \Omega_{i,n} \\
& \times \int_{(n-1)T/N}^{nT/N} [-\exp(-i(\delta_m - \nu_m)t)] dt. \quad (38)
\end{aligned}$$

两量子比特的自旋-自旋相互作用项系数为

$$\chi_{i,j}(t) = \vec{\Omega}^T D_{n,n}^{i,j} \vec{\Omega}. \quad (39)$$

其中

$$D_{n,n'}^{i,j} = \begin{cases} \sum_{n=1}^N \sum_{n'=1}^N \int_{(n-1)t/N}^{nt/N} dt_2 \int_{(n'-1)t/N}^{n't/N} dt_1 \sum_m \eta_{i,m} \eta_{j,m} \sin(\delta t_1) \sin(\delta t_2) \sin(\nu_m(t_2 - t_1)), & n' < n, \\ \sum_{n=1}^N \sum_{n'=1}^N \int_{(n-1)t/N}^{nt/N} dt_2 \int_{(n'-1)t/N}^{t_2} dt_1 \sum_m \eta_{i,m} \eta_{j,m} \sin(\delta t_1) \sin(\delta t_2) \sin(\nu_m(t_2 - t_1)), & n' = n, \\ 0, & n' > n. \end{cases} \quad (40)$$

通过对 (36) 式的分析可知, 为了实现离子链上离子对 i, j 自旋净最大纠缠, 须同时满足下面两个限制条件:

1) 所有运动模式在门结束的时候都和自旋解耦, 即 $\alpha_{i,m}(t)$ 对所有模式 m 都为 0;

2) 两量子比特的自旋相互作用项系数 $\chi_{i,j}(T) = \Omega^T D_{n,n'}^{i,j} \Omega = \pm\pi/4$.

文献 [32] 中定义了纠缠门的保真度为

$$F = \frac{1}{8} [2 + 2(\Gamma_i + \Gamma_j) + \Gamma_+ + \Gamma_-] \\ \approx 1 - \frac{1}{4} \sum_{m=1}^M (\alpha_{m,i}^* \alpha_{m,i} + \alpha_{m,j}^* \alpha_{m,j}). \quad (41)$$

通过求解以上两条约束条件及 (41) 式中最大保真度下分段的 $\Omega(t)$ 的解, 可得 5 个离子的离子链上 2 个离子纠缠的幅度调制的脉冲整形结果. 如果对脉冲幅度的调制总共分 9 段, 设置门时间为 200 μs , 设置失谐 δ 为 3.0318 MHz, 则其中一个 $\Omega(t)$ 的解如图 8 所示.

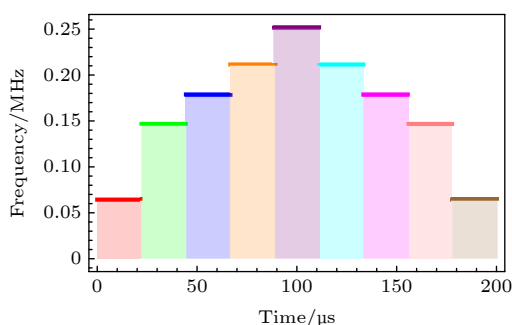


图 8 门时间为 200 μs , 失谐 δ 为 3.0318 MHz 时脉冲幅度调制模拟结果

Fig. 8. Simulation result of laser amplitude modulation when gate time is 200 μs and detuning δ is 3.0318 MHz.

5 个运动模式在相空间中运动的轨迹如图 9 所示. 可以发现 5 个模式在门操作结束的时候, 在幅度调制后的脉冲作用下, 所有模式的运动态在相空间中的轨迹都恰好闭合, 即所有模式的自旋态都和运动态完全解耦, 这可以大大提升纠缠门的保真度.

实现多运动模式解耦的脉冲整形方法除了以上详细讨论的幅度调制 (AM) 外, 还有相位调制 (PM) 和频率调制 (FM). 这些调制方案都可以在合适的参数调制设计下解耦多声子模式、提高纠缠门的保真度. 不同调制方案可以同时运用且被调制的参数也可以采用非离散的形式. 文献 [33] 通过使用单独离散的相位调制方法实现了解耦多运动模式并抑制驱动离子的光场波动误差. 此外, 也有研究组研究了使用连续函数形式的频率调制方案来解耦多运动模式, 构建具有鲁棒性的两比特门 [15]. 随着离子链上离子数的增加, 离子链径向模式的模式频率数更多且间隔更窄, 已有研究组通过同时运用非离散的幅度调制和频率调制解耦多运动模式, 实现了长离子链上的局部两比特纠缠 [16]. 另外, 参数的连续调制和分段离散调制也可以同时运用, 文献 [30] 就同时使用离散的相位调制和连续的幅度调制解决了 4 量子比特的全局纠缠过程中的多运动模式解耦问题.

随着离子数的增多, 设计合适的参数调制方案也会变得更复杂 [33], 此时可以辅之一些阱的对称条件来简化上文提到的寻找满足非线性限制条件解的过程 [30]. 此外, 实际实验过程中所用的仪器对幅度、频率和相位的控制精度往往也影响着 AM, FM 和 PM 等调制方案的选择.

4.2 Lamb-Dicke 区域以外解耦多运动模式

Lamb-Dicke 区域以外解耦多运动模式并实现超快门的方案有很多, 包括使用光强更高的连续 (CW) 激光和相应的幅度调制来实现快速纠缠和多运动模式解耦 [34], 该方案在囚禁 $^{43}\text{Ca}^+$ 系统中实现了 99.8% 保真度的纠缠门且门时间只有 1.6 μs . 此外还有上文提到的使用强超快激光脉冲序列的方案实现超快纠缠并解耦多运动模式. 其中, 使用强超快脉冲序列的方案最具代表性. 目前相关的工作包括自旋-运动态纠缠的实现 [25]、两离子自旋-自

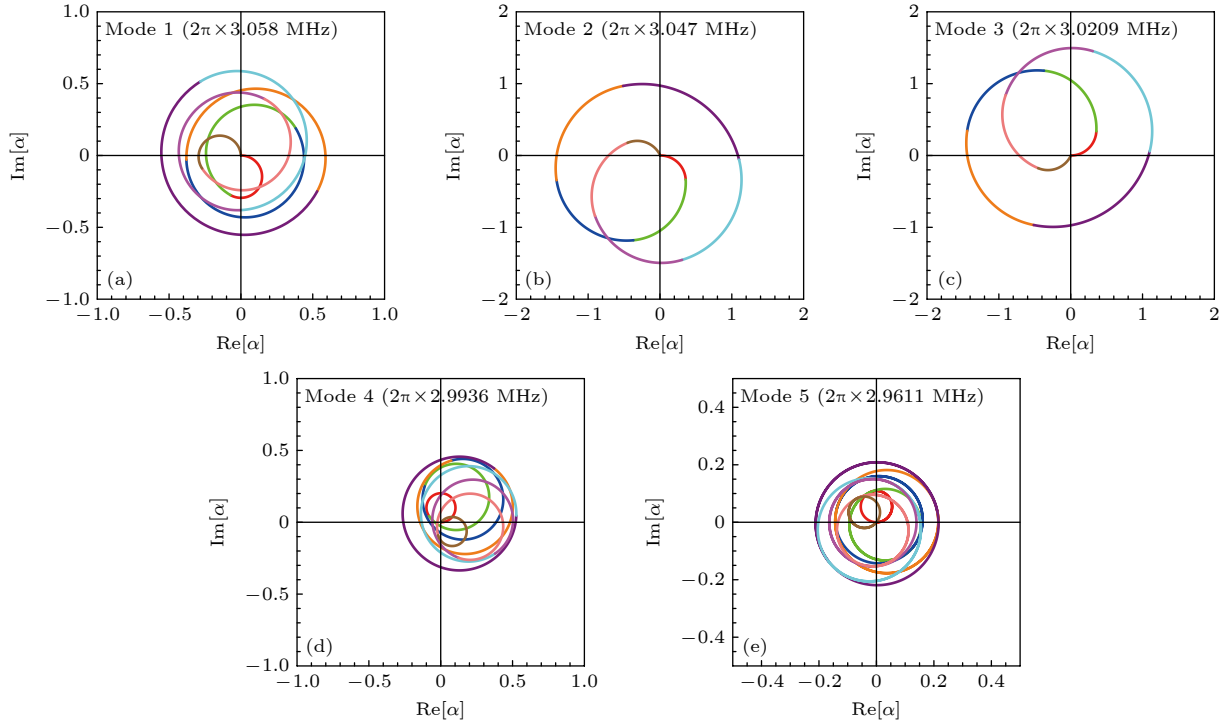


图 9 5 个振动模式的运动态在相空间内的运动轨迹 (a) 线频率为 3.058 MHz 的模式 1; (b) 线频率为 3.047 MHz 的模式 2; (c) 线频率为 3.0209 MHz 的模式 3; (d) 线频率为 2.9936 MHz 的模式 4; (e) 线频率为 2.9611 MHz 的模式 5

Fig. 9. The motional state trajectories of the five vibration modes in phase space: (a) Mode 1, line frequency is 3.058 MHz; (b) Mode 2, line frequency is 3.047 MHz; (c) Mode 3, line frequency is 3.0209 MHz; (d) Mode 4, line frequency is 2.9936 MHz; (e) Mode 5, line frequency is 2.9611 MHz.

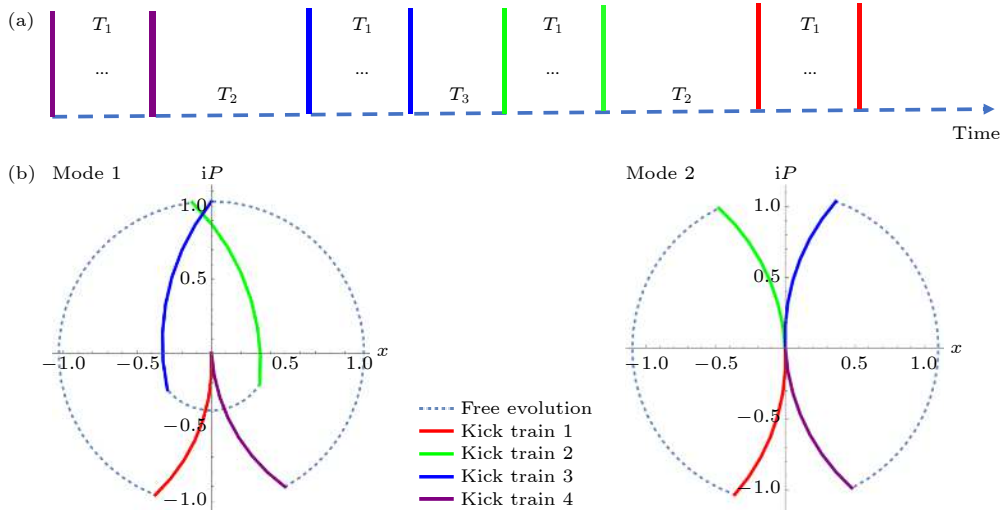


图 10 两个运动模式在脉冲序列的作用下与自旋解耦 (a) 超快脉冲序列; (b) 两个运动模式在相空间的运动轨迹

Fig. 10. Two motional modes are decoupled from spin: (a) Ultrafast pulse train; (b) trajectories of two motion modes in phase space.

旋纠缠的理论^[26]和实验^[24]等. 在囚禁 $^{171}\text{Yb}^+$ 系统上, 该方案已经实现了 $18.5\ \mu\text{s}$ 的门时间、76% Bell 态制备保真度的纠缠门^[24]. 此外, 最近有研究小组提出了使用高重复频率、高功率皮秒光梳的初步理论方案^[35], 很有希望在实际实验平台上实现.

使用强超快脉冲序列的方案需要设置合适的

SDK 序列来解耦多运动模式, 包括设置一定次数 SDK 和穿插在其之间的自由演化时间. 能够实现运动态解耦的序列设置方案有很丰富的可能性, 保真度最优和资源最少的序列尚无定论, 寻找更好的强超快脉冲下的 SDK 序列还是一个亟待探索的领域, 比如最近就有研究组提出考虑微运动的序列设

计方案不仅能够提高门的保真度,而且可以使其具备对实验误差的鲁棒性^[36].此外,还有研究组提出了使用更少的超快脉冲个数得到更高保真度的序列方案,并发现此方案可以扩展到任意长离子链上^[37].我们在图10中模拟了文献[26]的方案作为示例,演示了合适的 SDK 序列解耦多运动模式的过程,模拟中的部分参数也来源于该文献.图中 T_1 , T_2 , T_3 分别为 74.88, 249.6, 174.72 ns, 时长为 T_1 的红、绿、蓝、紫线条区域代表脉冲序列,分别包含了 7 次自旋依赖的动量转移 (SDK) 操作.相邻两次之间的时间间隔为 12.48 ns,期间离子只进行自由演化. T_2 , T_3 所对应的时间范围内由于没有脉冲序列作用,离子同样只进行自由演化.在作用这样的 SDK 序列后,离子的质心模和呼吸模的运动态都在相空间内闭合,如图10(b). Mode 1 代表质心模, Mode 2 代表呼吸模.

5 结论和展望

本文回顾了近年来以声子为媒介的多个囚禁离子纠缠与逻辑门的相关研究工作.首先介绍了离子阱中以声子为媒介的物理原理,包括离子链运动模式与声子的概念,以及激光与声子模的相互作用.重点介绍了 Mølmer-Sørensen 门的原理,并分析了其不足之处.接着介绍了如何利用超快激光通过拉曼跃迁实现单离子操控^[23,26],以及如何将离子内态与声子态耦合^[25],实现自旋依赖的动量转移^[24,25].最后给出了如何利用超快激光通过激发单模或多模声子模式实现两比特超快纠缠逻辑门^[24].

二十多年前提出的 Cirac-Zoller 门、Mølmer-Sørensen 门开启了离子阱量子计算研究的热潮,取得了丰硕的成果,但在扩展到大规模量子计算的过程中也遇到了瓶颈.为了获得高保真度仍需处于 Lamb-Dicke 区域;门的速度受限于阱频率;由于随着离子数增加本征模谱越发复杂,难以扩展到大规模比特数.基于超快激光的超快逻辑门有望解决这些困难,通过锁模激光器产生的超短光脉冲耦合离子内态与声子模,实现超越 Lamb-Dicke 区域、速度不受限于阱频率的超快单比特门及两比特纠缠门^[24].由于不需要分辨各个运动模式,本文介绍的超快门和 Cirac-Zoller 门、Mølmer-Sørensen 门有本质区别,也因此获得了上述优越性^[24].超快门

实际上将实现大规模量子计算的复杂度从离子方面转移到了激光方面,可以不必再过度追求离子量子比特相干时间的提升,而是转而追求更好地控制激光系统.由于目前已对如何稳定激光系统、进行激光脉冲整形等有了足够好的掌握,基于超快激光-原子相互作用的量子门有较为光明的前景^[26].囚禁离子实验中已经实现了时间在 50 ps 量级的超快单比特门,保真度达到 0.99^[38],也已实现了时间在 2—20 μ s 的两比特纠缠门,保真度达到 0.76^[24].基于连续激光形状脉冲的超快门更是达到了 1 μ s 量级、保真度超过 0.99 的水平^[34].随着囚禁离子量子计算^[39]与量子模拟^[40]规模的进一步扩大,超快门可被拿来替换掉其中耗时过长的操作,更好地完成大规模量子信息处理任务.

本文介绍的超快激光-库仑晶体的相互作用,其应用范围不止局限于量子计算中的超快逻辑门,而是能在更广阔的研究领域如原子物理^[41,42]、量子模拟^[40]、量子网络^[43]、量子物理基础^[44]等方面发挥作用.具体来讲,在原子物理方面,可利用超快激光精密测量离子能级寿命^[41],也可实现快速亚多普勒冷却^[42].在量子模拟方面,超快门有望使得大规模、多比特量子模拟成为可能^[40].在量子网络方面,超快激发离子结合自发辐射可制备单光子-离子纠缠态,从而为基于双光子干涉的远距离离子-离子纠缠建立基础^[43].在量子物理基础方面,超快激光可被用来实现 δ -驱动的谐振子以研究量子混沌^[45];也可被用来制备离子阱中相空间分离创纪录的薛定谔猫态,从而推进对于宏观量子效应、退相干等问题的研究^[44];结合高分辨成像技术,还有望加深对于量子测量、“海森伯显微镜”等量子力学基本问题的理解^[44].

目前基于超快激光的超快两比特纠缠门保真度约为 0.76^[24],这对于更复杂的量子信息处理任务显然是不够的.超快纠缠门的表现主要受限于构成它的一系列自旋依赖动量转移的保真度.目前高保真度的自旋依赖动量转移仍面临挑战,主要限制包括光束指向的不稳定、使用紫外脉冲采集器导致的偏振不完美、目标声子模和沿其余阱轴方向的声子模间的串扰等^[44].一个可能的提升保真度的方案是采用红外超快激光脉冲,这样就能规避使用紫外光时的一系列困难,例如脉冲采集器带来的偏振不完美.另外,目前实现超快纠缠门的脉冲序列仍不是最优的,例如可通过切换两束激光的波矢差实现

速度更快的操控. 未来还可通过更先进的数值优化方法确定一组最优的脉冲序列参数, 从而在多量子比特系统中实现速度更快, 保真度更高的超快逻辑门^[44].

参考文献

- [1] Schmidt-Kaler F, Häffner H, Riebe M, Gulde S, Lancaster G P T, Deuschle T, Becher C, Roos C F, Eschner J, Blatt R 2003 *Nature* **422** 408
- [2] Sackett C A, Kielpinski D, King B E, Langer C, Meyer V, Myatt C J, Rowe M, Turchette Q A, Itano W M, Wineland D J, Monroe C 2000 *Nature* **404** 256
- [3] Marquet C, Schmidt-Kaler F, James D F V 2003 *Appl. Phys. B* **76** 199
- [4] James D F V 1998 *Appl. Phys. B: Lasers Opt.* **66** 181
- [5] Zhu S L, Monroe C, Duan L M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 050505
- [6] Leibfried D, Blatt R, Monroe C, Wineland D 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 281
- [7] Wineland D J, Monroe C, Itano W M, Leibfried D, King B E, Meekhof D M 1998 *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.* **103** 259
- [8] Meekhof D M, Leibfried D, Monroe C, King B E, Itano W M, Wineland D J 1997 *Brazilian J. Phys.* **27** 15
- [9] Diedrich F, Bergquist J C, Itano W M, Wineland D J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 403
- [10] Monroe C, Meekhof D M, King B E, Jefferts S R, Itano W M, Wineland D J, Gould P 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 4011
- [11] King B E, Wood C S, Myatt C J, Turchette Q A, Leibfried D, Itano W M, Monroe C, Wineland D J 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 1525
- [12] Mølmer K, Sørensen A 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1835
- [13] Sørensen A, Mølmer K 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 1971
- [14] Kim K, Chang M S, Islam R, Korenblit S, Duan L M, Monroe C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 120502
- [15] Leung P H, Landsman K A, Figgatt C, Linke N M, Monroe C, Brown K R 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 020501
- [16] Landsman K A, Wu Y K, Leung P H, Zhu D W, Linke N M, Brown K R, Duan L M, Monroe C 2019 *Phys. Rev. A* **100** 022332
- [17] Benhelm J, Kirchmair G, Roos C F, Blatt R 2008 *Nat. Phys.* **4** 463
- [18] Roos C F 2008 *New J. Phys.* **10** 013002
- [19] Klarsfeld S, Oteo J A 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3270
- [20] Cundiff S T, Ye J 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 325
- [21] Udem T, Holzwarth R, Hänsch T W 2002 *Nature* **416** 233
- [22] Pe'er A, Shapiro E A, Stowe M C, Shapiro M, Ye J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 113004
- [23] Hayes D, Matsukevich D N, Maunz P, Hucul D, Quraishi Q, Olmschenk S, Campbell W, Mizrahi J, Senko C, Monroe C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 140501
- [24] Wong-Campos J D, Moses S A, Johnson K G, Monroe C 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 230501
- [25] Mizrahi J, Senko C, Neyenhuis B, Johnson K G, Campbell W C, Conover C W S, Monroe C 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 203001
- [26] Mizrahi J, Neyenhuis B, Johnson K G, Campbell W C, Senko C, Hayes D, Monroe C 2014 *Appl. Phys. B* **114** 45
- [27] Nielsen M A, Chuang I L 2010 *Quantum Computation and Quantum Information, 10th Anniversary Edition* (New York: Cambridge University Press) pp189–193
- [28] Soderberg K A B and Monroe C 2010 *Rep. Prog. Phys.* **73** 036401
- [29] Figgatt C, Ostrander A, Linke N M, Landsman K A, Zhu D W, Maslov D, Monroe C 2019 *Nature* **572** 368
- [30] Lu Y, Zhang S N, Zhang K, Chen W T, Shen Y C, Zhang J L, Zhang J N, Kim K 2019 *Nature* **572** 363
- [31] Choi T, Debnath S, Manning T A, Figgatt C, Gong Z X, Duan L M, Monroe C 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 190502
- [32] Zhu S L, Monroe C, Duan L M 2006 *Europhys. Lett.* **73** 485
- [33] Green T J, Biercuk M J 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 120502
- [34] Schäfer V M, Ballance C J, Thirumalai K, Stephenson L J, Ballance T G, Steane A M, Lucas D M 2018 *Nature* **555** 75
- [35] Hussain M I, Heinrich D, Guevara-Bertsch M, Torrontegui E, García-Ripoll J J, Roos C F, Blatt R 2021 *Phys. Rev. Appl.* **15** 024054
- [36] Ratcliffe A K, Oberg L M, Hope J J 2020 *Phys. Rev. A* **101** 052332
- [37] Mehdi Z, Ratcliffe A K, Hope J J 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013026
- [38] Campbell W C, Mizrahi J, Quraishi Q, Senko C, Hayes D, Hucul D, Matsukevich D N, Maunz P, Monroe C 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 090502
- [39] Debnath S, Linke N M, Figgatt C, Landsman K A, Wright K, Monroe C 2016 *Nature* **536** 63
- [40] Monroe C, Campbell W C, Duan L M, Gong Z X, Gorshkov A V, Hess P W, Islam R, Kim K, Linke N M, Pagano G, Richerme P, Senko C, Yao N Y 2021 *Rev. Mod. Phys.* **93** 025001
- [41] Moehring D L, Blinov B B, Gidley D W, Kohn R N, J r., Madsen M J, Sanderson T D, Vallery R S, Monroe C 2006 *Phys. Rev. A* **73** 023413
- [42] Blinov B B, Kohn R N, J r., Madsen M J, Maunz P, Moehring D L, Monroe C 2006 *J. Opt. Soc. Am. B* **23** 1170
- [43] Madsen M J, Moehring D L, Maunz P, Kohn R N, Jr., Duan L M, Monroe C 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 040505
- [44] Johnson K G, Wong-Campos J D, Neyenhuis B, Mizrahi J, Monroe C 2017 *Nat. Commun.* **8** 1
- [45] Gardiner S A, Cirac J I, Zoller P 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 4790

SPECIAL TOPIC—Non-equilibrium quantum many-body systems

Phonon-mediated many-body quantum entanglement and logic gates in ion traps^{*}Liu Teng^{1)†} Lu Peng-Fei¹⁾ Hu Bi-Ying¹⁾ Wu Hao¹⁾ Lao Qi-Feng¹⁾Bian Ji¹⁾²⁾ Liu Yang¹⁾²⁾ Zhu Feng¹⁾²⁾³⁾ Luo Le^{1)2)3)‡}¹⁾ (*School of Physics and Astronomy, Sun Yat-Sen University, Zhuhai 519082, China*)²⁾ (*Center of Quantum Information Technology, Shenzhen Research Institute, Sun Yat-Sen University, Shenzhen 518087, China*)³⁾ (*State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, Sun Yat-Sen University, Guangzhou 510275, China*)

(Received 1 March 2022; revised manuscript received 29 March 2022)

Abstract

The high-fidelity multi-ion entangled states and quantum gates are the basis for trapped-ion quantum computing. Among the developed quantum gate schemes, Mølmer-Sørensen gate is a relatively mature experimental technique to realize multi-ion entanglement and quantum logic gates. In recent years, there have also been schemes to realize ultrafast quantum entanglement and quantum logic gates that operate outside the Lamb-Dicke regime by designing ultrafast laser pulse sequences. In such a many-body quantum system, these entanglement gates couple the spin states between ions by driving either the phonon energy level or the motional state of the ion chain. To improve the fidelity of quantum gates, the modulated laser pulses or the appropriately designed pulse sequences are applied to decouple the multi-mode motional states. In this review, we summarize and analyze the essential aspects of realizing these entanglement gates from both theoretical and experimental points of view. We also reveal that the basic physical process of realizing quantum gates is to utilize nonlinear interactions in non-equilibrium processes through driving the motional states of an ion chain with laser fields.

Keywords: trapped-ion quantum computing, quantum gate, quantum entanglement, spin-dependent interaction**PACS:** 03.67.Bg, 42.50.Dv, 03.67.Ac, 03.65.Vf**DOI:** 10.7498/aps.71.20220360

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11774436, 11974434, 12074439), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 2020A1515011159), the Key-Area Research and Development Program of Guangdong Province, China (Grant No. 2019B030330001), the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 202102080380), the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China, Sun Yat-sen University (Grant No. 2021qntd28), the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2021M703768), the Guangdong Province Pearl River Youth Talents Program, China (Grant No. 2017GC010656), and the Central-Leading-Local Scientific and Technological Development Foundation, China (Grant No. 2021Szvup172).

[†] Corresponding author. E-mail: liut87@mail2.sysu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: luole5@mail.sysu.edu.cn