

几何相位、保真率和量子相变

程加明¹ 龚明^{1,2}

(1 中国科学院量子信息重点实验室 230026;

2 中国科学技术大学量子信息与量子物理协同创新中心 230026)

1. 量子力学的相位和 Aharonov-Bohm 效应

杨振宁先生在很多场合都做过“二十世纪理论物理学的主旋律”的学术报告，相关视频目前在各大视频网站均可以找到。杨先生明确指出，二十世纪的主旋律为量子化，相位因子和几何相位。

量子相位是量子力学波函数的基本属性，如果 ψ 为 Schrödinger 方程的本征波函数，那么 $\psi e^{i\theta}$ 也是它的本征波函数，其中 θ 为任意常数。这种整体相位不会对物理量有任何影响。对于定域变换，哈密顿满足规范变换不变性要求算子满足如下规范变换关系，

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + ie\mathbf{A}_\mu, \quad (1)$$

其中相位满足 $\theta(\mathbf{r}) = \int^{\mathbf{r}} \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A}$ ， \mathbf{A} 定义为矢势。在经典力学中，矢势 \mathbf{A} 不直接出现在观测量中，所以它是不可直接观察的。但是在量子力学中，尽管整体相位不可测量，在一个闭合回路中，两条不同路径的相位差——类似于杨氏双缝干涉——是可以直接测量的。阿哈罗诺夫 (Aharonov 1932~) 和玻姆 (D. Bohm(1917~1992) 于 1959 年考虑磁场中电子在闭合回路中的运动，其中磁场仅局限在回路中心的很小区域，所以在回路上电子并不感受磁场导致的洛伦兹力，但是 $\mathbf{A} \neq 0$ (见图 1)。由于电子在两条不同的路径感受到的矢势和路径的长度等存在差别，在出口处两条不同的路径存在相位差。

$$\phi = \int_a \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} - \int_b \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A} = \oint \mathbf{dr} \cdot \mathbf{A}. \quad (2)$$

类似杨氏双缝干涉实验，在出口端观察到输出电子的强度满足如下公式，

$$I \propto 1 + \cos(\phi). \quad (3)$$

这个结果表明在量子力学中矢势 \mathbf{A} 是更加基本的物

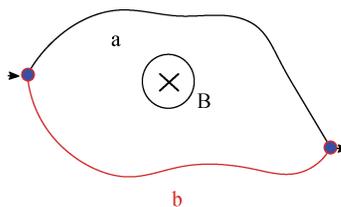


图 1 量子力学中的 Aharonov-Bohm 效应，该效应和光学中的杨氏双缝干涉非常相似

理量，它的效应可以直接实验测量。该效应目前已经得到了很多实验的验证。有趣的是，目前以阿哈罗诺夫和玻姆命名的 Aharonov-Bohm 效应，最早是埃伦伯格 (W. Ehrenberg 1901~1975) 和斯戴 (R. Siday 1912~1956) 两人于 1949 年提出来的，所以更准确的叫法应该是 Ehrenberg-Siday-Aharonov-Bohm 效应，但是没有被广泛采纳。该相位在量子力学的发展过程中发挥了非常重要的作用，并导致了很重要物理效应。在后续的研究中，也有对该效应的诸多推广，包括 1984 年针对中性粒子而提出的 Aharonov-Casher 效应，针对非绝热过程的 Aharonov-Anandan 效应，以及在规范场中的非阿贝尔 Aharonov-Bohm 效应等等。考虑到电磁场的对称性，Aharonov-Casher 效应可以认为是 Aharonov-Bohm 效应的对偶效应。

2. 绝热几何相位

对量子相位的研究的另外一个高峰出现在 20 世纪 80 年代，其中起关键作用的是贝里 (M. Berry) 提出来的绝热几何相位，也叫 Berry 相位。假设一个物理系统的哈密顿量

$$H = H(\mathbf{R}), \quad \mathbf{R} = \mathbf{R}(t), \quad (4)$$

沿着参数区间 $\mathbf{R}(t) = (R_1(t), R_2(t), \dots)$ 绝热演化。对于一个闭合回路，我们有 $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ ，以及 $H(0) = H(T)$ 。在绝热近似下系统将自始至终呆在它的瞬时本征态

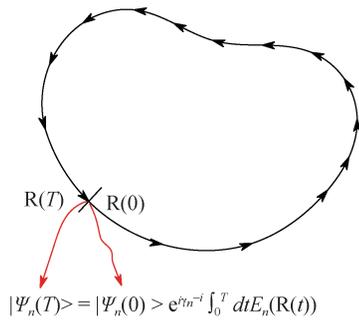


图2 绝热过程和几何相位。在绝热近似下经过一个循环，量子态将回到它初始的波函数，但是它的相位除了路径依赖的动力学相位，还有和路径无关的几何相位 γ_n 。该几何相位由波函数的几何性质决定

上，经过一个周期 T ，它将回到它的初始态 (图2)。绝热近似是一个非常古老而重要的概念，在经典力学以及热力学与统计物理中，它都起到了关键作用。在经典力学中， $I = \oint pdq$ 是绝热不变量；在热力学和统计物理中，当系统的变化非常缓慢时，系统的熵不发生改变，此时 $dS = 0$ 。甚至在旧量子理论中，通过对不变量 I 适度修改，可以用来解释氢原子光谱实验，即所谓 Bohr-Sommerfeld 量子化条件。在量子力学中，绝热过程也会导致很多有趣的现象。考虑上面的模型，Schrödinger 方程的瞬时本征态为，

$$H(\mathbf{R}(t))|n(\mathbf{R})\rangle = E_n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R})\rangle, \quad (5)$$

其中本征基矢 $\{|n(\mathbf{R})\rangle\}$ ($n=0,1,2,\dots$) 构成相应 Hilbert 空间的一组正交完备基。

假设在初始时刻， $t=0$ ，系统处在它的本征态 $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ 上，其后续演化满足绝热条件以及 Schrödinger 方程，所以它的波函数必须满足如下形式，

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t) - i \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))} |n(\mathbf{R}(t))\rangle, \quad (6)$$

其中第二个相位为动力学相位。把该波函数代入 Schrödinger 方程中，可以得到几何相位在一个回路上满足的条件，

$$\gamma_n = \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_n(\mathbf{R}), \quad (7)$$

其中

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle. \quad (8)$$

这里 \mathbf{A} 具有规范势中矢势的所有性质，它常被称为 Berry 联络或者 Berry 矢势。动力学相位不是绝热不变的，它和经历的路径密切相关，但是几何相位是绝热不变的。为了理解这一点，我们做如下规范变换，

$$|n(\mathbf{R})\rangle \rightarrow e^{i\zeta(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle, \quad (9)$$

其中 $\zeta(\mathbf{R})$ 为任意连续函数，则 $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ 变换为

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \zeta(\mathbf{R}). \quad (10)$$

因此，由7式可知，规范变换后，相位 $\gamma_n \rightarrow \gamma_n + \zeta(\mathbf{R}(0)) - \zeta(\mathbf{R}(T))$ 。一般来说，对于非闭合回路，该相位的贡献总可以被折合到动力学相位中，所以它不可观察。然而，贝里在1984年指出，当参数空间里的演化路径 C 为闭合回路时， $\zeta(\mathbf{R}(0)) = \zeta(\mathbf{R}(T))$ ，所以 γ_n 是绝热不变的。

由 Berry 矢势，可以定义相应的 Berry 曲率 (在电磁场中，它对应的是磁场)，

$$\begin{aligned} \Omega_{\mu\nu}^n(\mathbf{R}) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}^\mu} \mathbf{A}_\nu^n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}^\nu} \mathbf{A}_\mu^n(\mathbf{R}) \\ &= i \left[\left\langle \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}^\mu} \middle| \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}^\nu} \right\rangle - (\nu \leftrightarrow \mu) \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

根据 Stokes 定理，Berry 相位可以表示成 Berry 曲率的面积分

$$\gamma_n = \int_S dR^\mu \wedge dR^\nu \frac{1}{2} \Omega_{\mu\nu}^n(\mathbf{R}), \quad (12)$$

其中 S 为闭合路径 C 包围曲面。尽管 Berry 矢势是规范相关的，可以证明，Berry 曲率具有规范不变性，它是可以实验观察的。

该效应导致了很多重要的应用。在贝里提出几何相的概念不久，西蒙 (H. Simon) 就意识到了该相位和纤维丛的密切关系。有趣的是，西蒙的文章发表以后，贝里的文章才在 Proc. R. Soc. Lond. A 上发表 (1984)。在西蒙的文章致谢部分，西蒙提到，他们也意识到了几何相和 Thouless-Kohmoto-Nightingale-Nijs (TKNN) 数的关系。索利斯 (O. Thouless) 也因为在拓扑方面的开创性贡献而获得了2016年诺贝尔物理学奖。除此以外，阿诺瓦斯 (D. Arovas) 等人也意识到该相位在分数统计中的作用；这个几何相的想法也被推广到了非阿贝尔领域。目前这种几何相位在几何量子计算方面发挥了重要作用。

2.1 磁场中自旋 -1/2 粒子的几何相位

贝里在他的经典论文中考察了自旋 -1/2 的粒子在磁场中的几何相位以及它的物理意义。假设磁场随着时间的变换满足如下关系，

$$\mathbf{B} = B_0 \begin{pmatrix} \sin \theta \cos(\omega t) \\ \sin \theta \sin(\omega t) \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (13)$$

即磁场沿 z 方向的分量不变, 但是在 x 与 y 方向做周期性运动。粒子在磁场中运动的哈密顿量为

$$H(t) = \mu \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mu B_0 \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\omega t} \\ \sin \theta e^{i\omega t} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (14)$$

其中 $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ 为玻尔磁矩, $\boldsymbol{\sigma}$ 为泡利算子。该模型的瞬态本征波函数为,

$$|n_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\omega t} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |n_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\omega t} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

它的本征能量由磁场的大小决定, $E_{\pm} = \pm \mu B_0$ 。对于绝热过程, 系统的波函数始终处在它的瞬态本征态上。

下面令 $\phi = \omega t$ 为绝热变化参数, 那么我们有

$$\begin{aligned} \gamma_+ &= i \int_0^{2\pi} \langle n_+ | \partial_\phi | n_+ \rangle d\phi \\ &= -\sin(\theta)^2 \int_0^{2\pi} d\phi = -\pi(1 - \cos(\theta)). \end{aligned} \quad (15)$$

同样的方法可以用来计算 $|n_-\rangle$ 的几何相位, 它们可以写成如下紧凑形式,

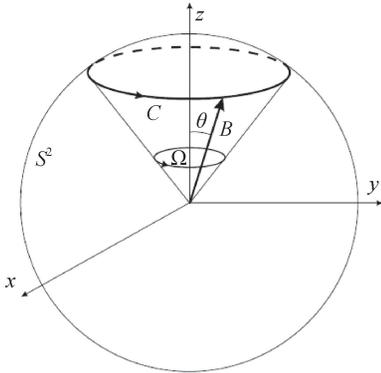


图3 自旋 1/2 粒子在磁场中的绝热运动。在运动过程中积累的几何相位等于它所对应的立体角

$$\oint_C \langle n_{\pm}(t) | \nabla | n_{\pm}(t) \rangle r \sin \theta d\phi = i\pi(1 \mp \cos \theta), \quad (17)$$

与之相应的几何相位为

$$\gamma_{\pm}(C) = -\pi(1 \mp \cos \theta) = -\frac{1}{2}\Omega_{\mp}(C), \quad (18)$$

其中 $\Omega_{\mp}(C)$ 为立体角 (图 3), 其形式为

$$\Omega_{\mp}(C) = \int_0^{2\pi} (1 \mp \cos \theta) d\phi. \quad (19)$$

所以我们可以看到, 对于自旋 1/2 的粒子, 它的几何相位有明确的物理意义。考虑到量子比特的模型和自旋 1/2 的一致性, 目前该几何相位已经得到了许多实验验证。这对理解更加复杂的物理系统的几何相位有重要的参考意义。下面我们利用几个常见的物理模型来理解这种几何

相位的基本性质以及物理意义。

2.2 相干态的几何相位

量子光学中的相干态定义为谐振子湮灭算符 a 的本征态, 即

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (20)$$

在相干态表示下, 相干态可以写成如下形式,

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} |n\rangle. \quad (21)$$

可以假设 $\alpha = \alpha_0 e^{i\theta}$, 也就是说参数 α 在复平面做圆周运动。它的几何相位为

$$\begin{aligned} \gamma &= i \int_0^{2\pi} \langle \alpha | \partial_\theta | \alpha \rangle = e^{-|\alpha_0|^2} \sum_n \frac{|\alpha_0|^{2n}}{n!} (-n) \int_0^{2\pi} d\theta \\ &= -2\pi |\alpha_0|^2. \end{aligned} \quad (22)$$

也就是说, 对于相干态, 它的几何相位等于它在参数空间扫描过的面积的两倍。这个图像对规则曲线是成立的, 对于非规则曲线也是如此, 所以对于任何一条闭合回路 C , 我们恒有

$$\gamma = \oint_C d\alpha \cdot \alpha = 2S, \quad (23)$$

其中 S 为曲线 C 包围的面积。对于纠缠态, 它的几何相位也可以用类似方法计算, 但是由于纠缠的存在, 最终的几何相位不仅包括每个分量在复平面扫过的面积, 也包括它们交叠部分的贡献。如果把相干态换成 Fock 态 $|n\rangle$, 也有类似结论。

2.3 石墨烯中的几何相位

前面提到, 二能级模型结构简单, 可以严格求解, 同时具有简单的物理意义。下面考察石墨烯中电子的几何问题, 其哈密顿量如下

$$H = v(k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \hbar \sigma_z = \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (24)$$

第二个公式仅仅是把 Dirac 方程写成更加紧凑的二能级形式。这个模型本质上和自旋 1/2 电子的哈密顿一样, 但是需要做替换, $B_x \rightarrow vk_x, B_y \rightarrow vk_y$ 。如果考虑一个足够大的回路, $vk/m = v\sqrt{k_x^2 + k_y^2}/m \gg 1$, 那么 $\theta \rightarrow \pi/2$, 我们得到

$$\gamma = \pm\pi. \quad (25)$$

所以对于石墨烯而言, 它的几何相为 $\pm\pi$ 。该几何相在确定石墨烯的朗道能级结构时起到了关键作用。

由于该 π 相位可以抵消 Bohr-Sommerfeld 量子化条件中的 1/2 系数, 所以最后石墨烯的朗道能级正比于 $\sqrt{|n|}$, 其中 $n \in \mathbb{Z}$; 对于 $n = 0$, 该朗道能级和磁场无

关，该性质也很快得到了实验验证。

2.4 绝热过程真的可以存在吗？

绝热过程是几何相的核心思想，那么它是否真实存在又如何实验验证？在量子力学建立之初，朗道 (L. Landau), 齐纳 (C. Zener) 等人就思考了该问题，并提出了如下严格可解模型，

$$H = vt\sigma_z + g\sigma_x. \quad (26)$$

其中假设 $v > 0, g > 0$ 。在 $t \rightarrow -\infty$ 时，系统处于它的基态， $|\psi(t = -\infty)\rangle = |\downarrow\rangle$ 。那么在 $t = +\infty$ 时，系统处在激发态的概率是多少？该模型的重要性在于，它是第一个可以严格求解的含时 Schrödinger 方程。对于任何一个时刻 t ，它的波函数都是可以严格确定的，只是表达式非常复杂。但是在 $t = +\infty$ ，系统处在激发态的几率为

$$P = \lim_{t \rightarrow +\infty} |\langle \psi(t) | \psi(t = -\infty) \rangle|^2 = e^{-\frac{\pi g^2}{v}}. \quad (27)$$

这个结果表明，如果 v 非常小，系统将一直处在瞬时基态上，即满足绝热条件。注意在 $t = 0$ 时刻，系统的能隙为 $\epsilon_g = 2|g|$ 。因此如果它的能隙为零，那么无论 v 多么小，它都不会满足绝热条件。具体的数值结果见图 4。最近 Landau-Zener 过程已经在金刚石色心，量子点以及超导比特中得到了实验验证。利用该

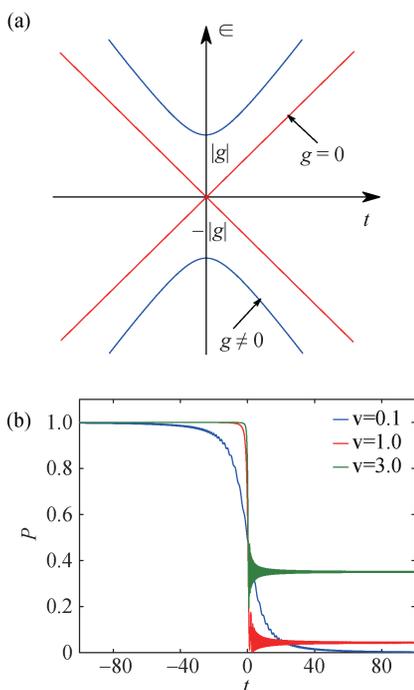


图4 Landau-Zener 过程和绝热近似。(a) 二能级 Dirac 方程的瞬态能级；(b) 在 $t = \infty$ 时系统处在激发态的几率和速度 v 的关系。参数 $g = 1.0$

过程可以实现绝热量子计算，并且已经取得了很多实验进展。目前谷歌在量子计算方面的主要研究方向，也和绝热量子计算相关。

3. 保真度和保真率

保真度是量子信息学中的一个基本概念，它被定义为两个不同波函数的内积，用以表征这两个态的相似程度。对于实际的物理系统，处于同一相的两个相邻点的基态，它们的保真度接近于单位 1；而处于相边界两边相邻点的两个基态，由于这两个态很不相同（比如序参量不同或者拓扑性质不同），它们的保真度会小于 1；而且在相空间点的距离越大，它们的内积越小。我们可以利用这个特点来定义量子相变。该方法甚至可以用来刻画拓扑量子相变，这是 Landau 相变理论所不能做到的。

假设哈密顿为 $H = H_0 + \lambda H_1$, H_0 和 H_1 不对易，其本征态为 $|\Psi_n(\lambda)\rangle$ ，相应的本征能量为 $E_n(\lambda)$ ，即

$$H|\Psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda)|\Psi_n(\lambda)\rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (28)$$

定义 $|\Psi_g(\lambda)\rangle = |\Psi_0(\lambda)\rangle$ 为基态波函数，它的保真度定义为，

$$F(\lambda, \delta) = |\langle \Psi_g(\lambda) | \Psi_g(\lambda + \delta) \rangle| \quad (29)$$

对应的保真率为

$$\Xi(\lambda) = \partial_\delta^2 F(\lambda, \delta)|_{\delta=0} = 2 \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1 - F(\lambda, \delta)}{\delta^2}. \quad (30)$$

下面从微扰角度理解保真率的性质。从波函数出发，

$$|\Psi_g(\lambda + \delta)\rangle = \frac{1}{\mathcal{C}} [|\Psi_g(\lambda)\rangle + \delta \sum_{n=1}^{N-1} \frac{H_{0n}^{(1)} |\Psi_n(\lambda)\rangle}{E_0(\lambda) - E_n(\lambda)}], \quad (31)$$

其中 $\sqrt{1 + \delta^2 \sum_{n=1}^{N-1} \frac{|H_{0n}^{(1)}|^2}{[E_0(\lambda) - E_n(\lambda)]^2}}$ 为归一化常数， $H_{0n}^{(1)} = \langle \Psi_n(\lambda) | H_1 | \Psi_g(\lambda) \rangle$ 。代入保真率的计算公式，我们立刻得到

$$\Xi(\lambda) = \sum_{n=1}^{N-1} \frac{|\langle \Psi_0(\lambda) | H_1 | \Psi_n(\lambda) \rangle|^2}{[E_0(\lambda) - E_n(\lambda)]^2}. \quad (32)$$

我们可以看到，在相变点附近，基态和第一激发态的能量会发生简并，所以保真率会发散。这个性质和几何相不同，几何相在相边界连续，但是它的一阶导数或者高阶导数不连续。

有了这些基本背景，下面我们讨论如何利用几何相以及保真率来描述相变的性质，同时讨论它们的关联。从基本定义可以看到，几何相和保真率的定义完全不同，但是它们之间有密切的关系。本文我们重点介绍这些基本概念的相关历史，并且用 XY 模型验证几何相和保真率的关系。

4. 一维 XY 模型

Berry 相位和量子相变的关系可以通过一维 XY 模型来理解。这个模型可以用 Jordan-Wigner 变换精确求解，其哈密顿量为

$$H = - \sum_{j=-M}^M \left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \lambda \sigma_j^z \right) \quad (33)$$

其中 σ_j^μ 为第 j 自旋的 Pauli 算符， γ 表示 x - y 平面自旋自旋相互作用的差异， λ 是 z 方向外磁场的强度。我们讨论周期边界条件下的情形，选取奇数个自旋 $N = 2M + 1$ 以避免处理边缘项。当 N 趋于无穷大时，奇偶差别可以忽略不计。当 $\gamma \rightarrow \pm 1$ 时，XY 模型退化为横场 Ising 模型；当 $\gamma \rightarrow \pm 0$ 时，XY 模型退化为 XX 模型。为了研究它的几何相位，我们需要构造一个回路，它可以通过如下么正变换实现

$$H_\phi = U_\phi H U_\phi^\dagger, \quad U_\phi = \prod_{j=-M}^M \exp(i\phi \sigma_j^z / 2), \quad (34)$$

旋转后的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_\phi = & - \sum_{j=-M}^M \left[\frac{1}{2} (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) \right. \\ & + \frac{\gamma}{2} \cos(2\phi) (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) \\ & \left. - \frac{\gamma}{2} \sin(2\phi) (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^y + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x) + \lambda \sigma_j^z \right] \end{aligned} \quad (35)$$

下面定义 Jordan-Wigner 变换。

$$\sigma_j^z = 1 - 2c_j^\dagger c_j, \quad \sigma_j^+ = \prod_{i<j} (1 - 2c_i^\dagger c_i) c_j, \quad (36)$$

其中 $\sigma_j^\pm = \frac{1}{2} (\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y)$ ， c_j^\dagger (c_j) 为第 j 个格点处的费米子产生（湮灭）算符，它们满足对易关系

$$\{c_i^\dagger, c_j\} = \delta_{ij}, \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \quad \{c_i, c_j\} = 0. \quad (37)$$

注意，Jordan-Wigner 变换是非局域变换，这是因为不同格点的 Pauli 算子是对易的，但是不同格点的费米子是不对易的，所以为了让 Pauli 算符满足对易关系，必须定义一个非局域的算子。在这个新的费米子表象

下，费米子单粒子哈密顿量有如下形式，

$$\begin{aligned} H_\phi = & - \sum_{j=-M}^M [(c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + \gamma \exp(-i2\phi) c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + h.c. \\ & - 2\lambda c_j^\dagger c_j] - \lambda N, \end{aligned} \quad (38)$$

这是一个二次型单粒子模型，能够被精确对角化。我们看到，对 H 的旋转等价于在配对序参量中引入一个相位；可见， ϕ 的周期为 π ，所以我们取 $\phi \in [0, \pi]$ 。它的实空间到动量空间的傅里叶变换，

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \exp(ikj) c_k, \quad (39)$$

其中 $k = \frac{2\pi}{N} (-M, -M+1, \dots, M-1, M)$ 。为方便起见，我们设定晶格常数为单位 1。将 (39) 式代入到 (38) 式得到动量空间的哈密顿量

$$H_\phi = \sum_k \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \mathcal{H}_\phi(k) \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} + \text{常数}, \quad (40)$$

其中

$$\mathcal{H}_\phi(k) = \begin{pmatrix} \epsilon_k & -i\gamma e^{-i2\phi} \sin(k) \\ i\gamma e^{i2\phi} \sin(k) & -\epsilon_k \end{pmatrix}, \quad (41)$$

以及 $\epsilon_k = \lambda - \cos(k)$ 。最后可以用 Bogoliubov 变换方法对角化上面的哈密顿量，

$$\mathcal{B}_\phi = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\phi_k}{2}) & -ie^{-i2\phi} \sin(\frac{\phi_k}{2}) \\ -ie^{i2\phi} \sin(\frac{\phi_k}{2}) & \cos(\frac{\phi_k}{2}) \end{pmatrix}, \quad (42)$$

在这里我们有如下关系

$$\cos(\frac{\phi_k}{2}) = \frac{\gamma \sin(k)}{\sqrt{2\xi_k(\xi_k - \epsilon_k)}}, \quad (43)$$

$$\sin(\frac{\phi_k}{2}) = \frac{\xi_k - \epsilon_k}{\sqrt{2\xi_k(\xi_k - \epsilon_k)}}, \quad (44)$$

$$\xi_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \gamma^2 \sin^2(k)}. \quad (45)$$

结合 (43) 式和 (44) 式可以得到

$$\cos \phi_k = \frac{\epsilon_k}{\xi_k}, \quad \sin \phi_k = \frac{\gamma \sin(k)}{\xi_k}. \quad (46)$$

经过以上三步，我们能够得到对角化的哈密顿量

$$H_{\text{diag}} = \mathcal{B}_\phi H_\phi \mathcal{B}_\phi^\dagger = \sum_k 2\xi_k f_k^\dagger f_k + \text{常数}, \quad (47)$$

其中

$$\begin{pmatrix} f_k \\ f_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = \mathcal{B}_\phi \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (48)$$

所以体系的基态 $|g\rangle$ 满足条件： $f_k |g\rangle = 0$ ，其具体形式为我们常见的超导基态波函数，

$$|g\rangle = \prod_{k>0} (\cos(\frac{\phi_k}{2}) |0\rangle_k |0\rangle_{-k} + ie^{-i2\phi} \sin(\frac{\phi_k}{2}) |1\rangle_k |1\rangle_{-k}), \quad (49)$$

这里的 $|0\rangle_k$ 和 $|1\rangle_k$ 分别为 c_k 的真空态和单占据态。基态 $|g\rangle$ 在旋转角度从 0 变到 π 的过程中积累的几何相位为

$$\Psi_g = -\frac{i}{M} \int_0^\pi d\phi \langle g | \partial_\phi | g \rangle = -\sum_{k>0} \frac{\pi}{M} (1 - \cos \phi_k) \quad (50)$$

注意, $\pi(1 - \cos(\phi_k))$ 其实就是动量为 k 的量子态所对应的立体角 (图 3)。在热力学极限下, 上式动量求和可以换成积分, 所以几何相位可以写成,

$$\Psi_g = \int_0^\pi (1 - \cos \phi_k) dk = \int_0^\pi (1 - \frac{\epsilon_k}{\xi_k}) dk \quad (51)$$

利用能隙的关闭和打开, $\xi_k = 0$, 可以确定它的相图 (图 5)。它对 λ 的一阶导数为

$$\frac{d\Psi_g}{d\lambda} = \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \frac{d \cos \phi_k}{d\lambda} = \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \frac{1}{\xi_k} (1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}) \quad (52)$$

这些结果表明, 几何相本身是处处连续的, 但是它的导数可能不连续, 这是因为在相变点附近, 这个求和或者积分函数的分母出现奇点。这种发散行为会

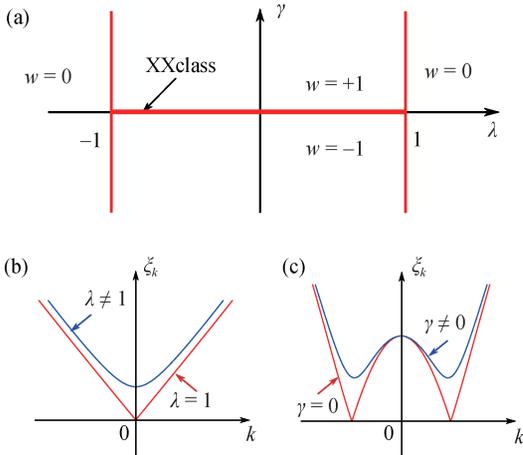


图 5 XY 模型的相图以及相变点附近的色散关系。(a)XY 模型的相图, 其中相边界为 $\lambda = \pm 1$, 以及 $\gamma = 0, |\lambda| < 1$ 。(b)为在 $\lambda = 1$ 附近的色散关系;(c)为 $\gamma = 0$ 附近的色散关系

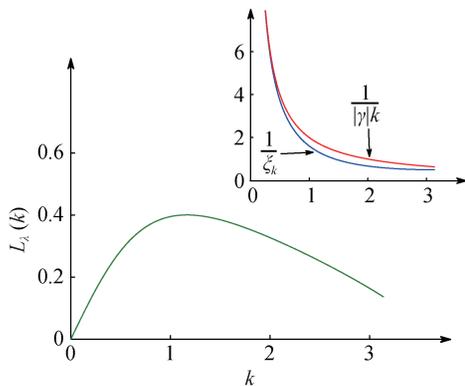


图 6 奇异函数分解法。对于任意一个求和函数, 比如 $1/\xi_k$, 可以在奇点附近找它另外一个相对简单的发散的奇异函数抵消它的发散, 剩下的部分将在整个区间是有限和连续的

给出一些标度关系。根据这些奇点可以确定这个模型的相图 (图 5)。

一般来说在奇点附近, 积分函数发散而且无法简单计算, 所以通常面对该问题都是直接采用数值计算和数值拟和方法。我们采取奇异函数分解法来确定它的严格发散关系, 并且确定它们的相关系数。首先我们确定求和函数或者被积函数在相变点附近的发散行为, 比如对 (52) 式, 我们发现对 $\lambda_c = 1$,

$$\lim_{k \rightarrow 0} (1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}) = 1, \quad \lim_{k \rightarrow 0} \xi_k = |\gamma|k + \mathcal{O}(k)^3 \quad (53)$$

所以在相变点附近, (52) 式将以 $1/|\gamma|k$ 的方式发散。如果在被积函数中首先扣除这个发散, 那么剩余的部分将在任何 k 点有限而且连续 (图 6)。基于这样的想法, 我们有如下奇异函数分解,

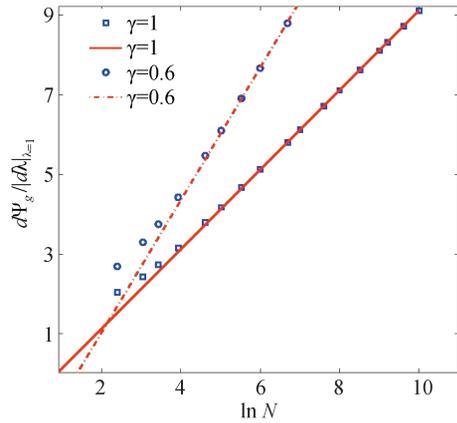


图 7 在临界点 $\lambda = 1$ 处, 几何相位的一阶导数和晶格长度 N 的关系。蓝色的点是数值结果, 红色的实线为解析结果

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_g}{d\lambda} |_{\lambda=1} = & \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\xi_k} (1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}) - \frac{1}{|\gamma|k} \right] \\ & + \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \frac{1}{|\gamma|k} \end{aligned} \quad (54)$$

第二部分实际上为调和级数, 当尺寸足够大时, 它的发散和系统尺寸的关系满足,

$$\frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \frac{1}{|\gamma|k} = \frac{1}{|\gamma|} (\ln N + \Gamma - \ln 2) + \frac{1}{N} \frac{1}{|\gamma|} \ln N \quad (55)$$

对于第一部分, 由于求和函数在整个动量空间处处有限, 而且在动量空间缓慢变化 (见图 6), 可以把求和变成积分,

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\xi_k} (1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}) - \frac{1}{|\gamma|k} \right] &= \int_0^\pi dk \left[\frac{1}{\xi_k} (1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}) - \frac{1}{|\gamma|k} \right] \\ &= \frac{\ln(4|\gamma|)}{|\gamma|} - \frac{1 + \ln \pi}{|\gamma|} \end{aligned} \quad (56)$$

结合前面两个结果, 我们发现,

$$\frac{d\Psi_g}{d\lambda}|_{\lambda=1} = \alpha_1 \ln N + \beta_1 + \dots, \quad (57)$$

其中 $\alpha_1 = \frac{1}{|\gamma|}$, $\beta_1 = \frac{1}{|\gamma|}(\Gamma - \ln 2) + \frac{\ln(4|\gamma|)}{|\gamma|} - \frac{1+\ln\pi}{|\gamma|}$ 。这个解析结果的数值验证见图 7。从式 (53), 我们看到 γ 在这里决定了在相变点附近能带线性关闭和打开的斜率; 这个斜率决定了几何相位在相变点附近的发散系数, 这是它的物理意义。其他的物理量也有类似关系。

在热力学极限下, $N \rightarrow \infty$, 式 (52) 的求和可以换成积分, 则

$$\frac{d\Psi_g}{d\lambda}|_{N \rightarrow \infty} = \int_0^\pi \frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^{3/2}} dk. \quad (58)$$

在临界点附近, $\lambda \sim 1$, 做奇异函数分解

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_g}{d\lambda}|_{N \rightarrow \infty} = & \int_0^\pi \left[\frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^{3/2}} - \chi_k \right] dk \\ & + \int_0^\pi \chi_k dk, \end{aligned} \quad (59)$$

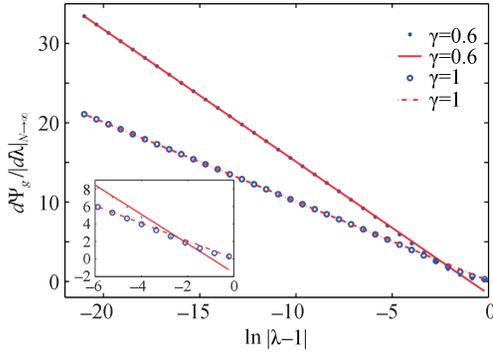


图 8 在临界点 $\lambda = 1$ 附近, 几何相位的一阶导数和 $\ln|\lambda - 1|$ 的关系。蓝色的点是数值结果, 红色的实线为解析结果

其中 $\chi_k = \frac{1}{\sqrt{(\lambda-1)^2 + (\lambda-1+\gamma^2)k^2}}$ 。在临界点附近, $\lambda - 1$ 是一个小量, 可以认为 $\lambda - 1 + \gamma^2 > 0$, 故由上式第二个积分可得

$$\int_0^\pi \chi_k dk = -\frac{1}{|\gamma|} \ln|\lambda - 1| + \frac{1}{|\gamma|} \ln(2\pi|\gamma|) + \dots \quad (60)$$

第一部分在 $\lambda - 1$ 零阶近似下,

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \left[\frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^{3/2}} - \chi_k \right] dk \\ = \frac{1}{|\gamma|} \ln\left(\frac{4}{\pi}|\gamma|\right) - \frac{1}{|\gamma|} + \dots, \end{aligned} \quad (61)$$

结合公式 (60) 与 (61), 我们得到如下标度行为,

$$\frac{d\Psi_g}{d\lambda}|_{N \rightarrow \infty} = -\frac{\ln|\lambda - 1|}{|\gamma|} + \frac{\ln(8\gamma^2) - 1}{|\gamma|} + \dots, \quad (62)$$

所以 $\alpha'_1 = -\frac{1}{|\gamma|}$, $\beta'_1 = \frac{1}{|\gamma|} \ln(8\gamma^2) - \frac{1}{|\gamma|}$ 。这些解析结果的数值验证见图 8。所以我们可以看到, $\alpha_1 = -\alpha'_1$, 而且常数 β 和 β' 是斜率的唯一函数。对于任意复杂的物理系统, 原则上这些系数都可以精确确定, 只是对于一些复杂的函数, 我们需要数值计算它们的值。但是它比纯粹的数值拟合已经有了很大的提升。该方法具有某些普适性, 可以处理更加广泛的物理系统。

在前面的讨论中, 我们假设 N 或者参数 λ 是不变的, 所以只有一个变量。如果两个参数同时变化, 那么在临界点附近可以定义如下标度函数,

$$F_1 = \frac{d\Psi_g}{d\lambda} - \frac{d\Psi_g}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_c} \quad (63)$$

它是 $N^m(\lambda - \lambda_c)$ 的函数, 其具体形式为

$$F_1 = \frac{\pi}{M} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\xi_k} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}\right) - \frac{1}{\xi_k} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}\right) \right]. \quad (64)$$

由于常数部分和 N 无关, 该函数最终只由发散部分决定, 因此我们有

$$F_1 \approx 2\pi \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\sqrt{N^2(\lambda - 1)^2 + N^2\gamma^2 k^2}} - \frac{1}{N|\gamma|k} \right]. \quad (65)$$

假设 $N(\lambda - 1)$ 是小量, 并对该部分做泰勒展开, 我们得到,

$$F_1 \approx \sum_{n=1}^{\infty} \frac{-N^2(\lambda - 1)^2}{8\pi^2|\gamma|^3 n^3} = -\frac{\zeta(3)|N(\lambda - 1)|^2}{8\pi^2|\gamma|^3}. \quad (66)$$

其中在对 n 求和时, 考虑到级数是快速收敛的, 我们把求和上限延展到了无穷大。通过这个结果我们看到, $\eta = 1$ 该结论在以前的文献中一般是通过数值方法确定, 现在利用我们的方法可以给出解析结果。

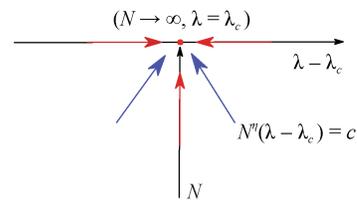


图 9 在相变点附近, 沿着不同方向趋近临界点都可能会表现出标度行为

下面我们讨论保真率的性质以及它在相变点附近的发散行为, 并和几何相的结果做比较。它的基本定义见公式 (30)。对于我们考虑的 XY 模型, 我们有

$$\Xi_F = \frac{1}{4N} \sum_{k>0} \left(\frac{d\phi_k}{d\lambda} \right)^2 = \frac{1}{4N} \sum_{k>0} \frac{1}{\xi_k^2} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2}\right). \quad (67)$$

和 (52) 式相比可知, 保真率的求和项在 $\lambda = 1, k = 0$ 时按照 $\frac{1}{\gamma^2 k^2}$ 方式发散, 因此我们必须用如下奇异函数分解,

$$\Xi_F = \frac{1}{4N} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\xi_k^2} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2} \right) - \frac{1}{\gamma^2 k^2} \right] + \frac{1}{4N} \sum_{k>0} \frac{1}{\gamma^2 k^2}. \quad (68)$$

在上面的方程中, 第二部分求和给出,

$$\frac{1}{4N} \sum_{k>0} \frac{1}{\gamma^2 k^2} = \frac{N}{16\pi^2 \gamma^2} \sum_{n=1}^M \frac{1}{n^2} = \frac{N}{96\gamma^2} - \frac{1}{8\pi^2 \gamma^2} + \dots. \quad (69)$$

第一部分是收敛的, 它的求和函数是有限而且光滑的, 所以利用求和化积方法,

$$\frac{1}{8\pi} \int_0^\pi \left[\frac{1}{\xi_k^2} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2} \right) - \frac{1}{\gamma^2 k^2} \right] dk = \frac{1}{8\pi^2 \gamma^2} + \frac{\gamma^2 - 3}{64\gamma^3}. \quad (70)$$

结合上面的结果, 我们得到,

$$\Xi_F = \alpha_2 N + \beta_2, \quad (71)$$

其中 $\alpha_2 = \frac{1}{96\gamma^2}$, $\beta_2 = \frac{\gamma^2 - 3}{64\gamma^3}$ 。我们的数值验证结果在图 10 中。

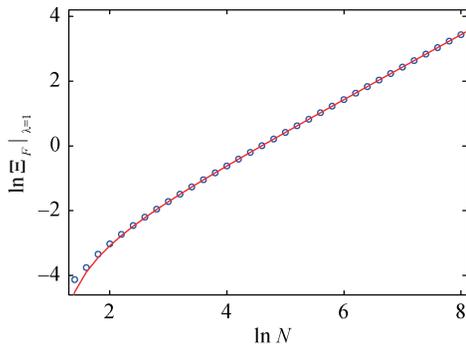


图 10 在临界点 $\lambda = 1$ 处, 保真率 Ξ_F 和 N 的关系, 其中 $\gamma = 1$ 。蓝色的点是数值结果, 红色的实线为解析结果

在热力学极限下, $N \rightarrow \infty$, 保真率可以求和换积分,

$$\Xi_F|_{N \rightarrow \infty} = \frac{1}{8\pi} \int_0^\pi \frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^2} dk, \quad (72)$$

在临界点附近, $\lambda \sim 1$, 我们做如下奇异函数分解,

$$\Xi_F|_{N \rightarrow \infty} = \frac{1}{8\pi} \left(\int_0^\pi \frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^2} - \chi_k \right) dk + \int_0^\pi \chi_k dk, \quad (73)$$

其中 $\chi_k = \frac{1}{(\lambda - 1)^2 + (\lambda - 1 + \gamma^2)k^2}$ 。同前面的讨论一样, 近似到 $\lambda - 1$ 的零阶, 我们有

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi} \int_0^\pi \chi_k dk &= \int_0^\pi \frac{1}{8\pi} \frac{dk}{(\lambda - 1)^2 + \zeta k^2} \\ &= \frac{1}{16|\gamma|} \frac{1}{|\lambda - 1|} - \frac{1}{8\pi^2 \gamma^2} - \frac{1}{32|\gamma|^3} \text{sgn}(\lambda - 1) + \dots \end{aligned} \quad (74)$$

其中 $\text{sgn}(x)$ 为 x 的符号函数。对于第一部分我们有,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{8\pi} \int_0^\pi \frac{\gamma^2 \sin^2(k)}{[(\lambda - \cos(k))^2 + \gamma^2 \sin^2(k)]^2} - \chi_k dk \\ &= \frac{1}{8\pi^2 \gamma^2} + \frac{\gamma^2 - 3}{64\gamma^3}. \end{aligned} \quad (75)$$

结合 (74) 式和 (75) 式可以得到

$$\Xi_F|_{N \rightarrow \infty} = \frac{1}{16|\gamma|} \frac{1}{|\lambda - 1|} + \frac{\gamma^2 - 3}{64\gamma^3} - \frac{\text{sgn}(\lambda - 1)}{32|\gamma|^3}. \quad (76)$$

则 $\alpha'_2 = \frac{1}{16|\gamma|}$, $\beta'_2 = \frac{\gamma^2 - 3}{64\gamma^3} - \frac{1}{32|\gamma|^3} \text{sgn}(\lambda - 1)$ 。有趣的是, 我们看到 β 常数在相边界两边可能有不同的值, 所以它存在一个阶跃。在一般情况下, 我们可以把这个跳跃收缩到 α'_2 中, 此时它不再是常数, 而是和 λ 相关的线性函数。所以我们看到保真率在相边界附近没有普适的临界行为。我们的数值结果见图 11。

保真率在临界点附近的差会表现出很好的标度行为。为此, 定义

$$F_2 = \Xi_F - \Xi_F|_{\lambda=\lambda_c}, \quad (77)$$

同样地, 它是 $N^\eta(\lambda - \lambda_c)$ 的函数, 其具体形式为

$$F_2 = \frac{1}{4N} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{\xi_k^2} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2} \right) - \frac{1}{\xi_k^2} \left(1 - \frac{\epsilon_k^2}{\xi_k^2} \right) \right], \quad (78)$$

它的值依旧由发散项决定, 因此我们有

$$\begin{aligned} F_2 &\approx \frac{N}{4} \sum_{k>0} \left[\frac{1}{N^2(\lambda - 1)^2 + N^2\gamma^2 k^2} - \frac{1}{N^2\gamma^2 k^2} \right] \\ &\approx \sum_{n=1}^\infty \frac{-N^3(\lambda - 1)^2}{64\pi^4 \gamma^4 n^4} = -\frac{\zeta(4)|N^{3/2}(\lambda - 1)|^2}{60|\gamma|^4}. \end{aligned} \quad (79)$$

所以我们看到, $\eta = 3/2$ 。通过这个方法, 我们可以精确地确定它们的值。同时我们可以看到这两个函数可以写成 $N^\eta(\lambda - \lambda_c)/\gamma^{\eta'}$ 的函数, 其中对 F_1 , $\eta' = 3/2$, 但是对 F_2 , $\eta' = 1$ 。

通过精确求解基态几何相位和保真率的临界行为, 我们可以看到, 临界项的系数仅由能隙的闭合方式决定, 所以这些系数并不包含基态波函数的拓扑信息, 当能隙以其他方式闭合和打开时, 它们会表现出其它的标度行为。对于 XY 模型, 我们发现保真率和几何相位有密切的关系, 它们的发散系数满足如下关系,

$$\alpha_1 = -\alpha'_1, \alpha_2 = \frac{1}{96}\alpha_1^2, \alpha'_2 = \frac{1}{16}|\alpha_1|, \alpha_2 = \frac{8}{3}\alpha_2'^2. \quad (80)$$

这里的几个关系只对能隙以线性方式在 $k_0 = 0, \pi$ 点闭合和打开的模型才成立。如果在其他位置或者

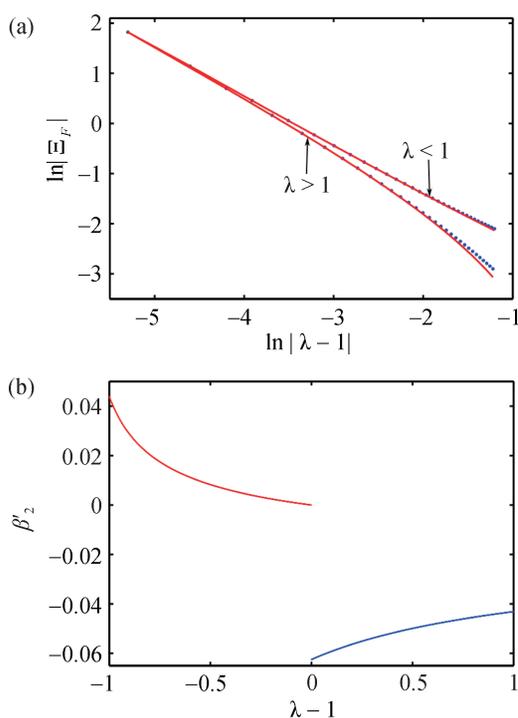


图 11 热力学极限下保真率的发散行为。(a) 在临界点 $\lambda=1$ 附近, 保真率 Ξ_F 和 $|\lambda-1|$ 的关系, 蓝色的点是数值结果, 红色的实线为解析结果; (b) 常数 β'_2 和 $\lambda-1$ 的关系。在图 (a) 和 (b) 中, $\gamma=1$

以其他方式发生相变, 这些关系就不再成立。但是利用我们的奇异函数分解法, 我们还是可以找到这两个物理量的关系。这些结果证明, 尽管保真率和几何相的定义完全不同, 它们在本质上是密切相关的, 所以它们的系数也有简单的关系。另外, 由标度律假设

$$\Xi_F|_{\lambda=\lambda_c} \sim N^{2/\nu-D}, \quad \Xi_F|_{N \rightarrow \infty} \sim |\lambda - \lambda_c|^{D\nu-2}. \quad (81)$$

科苑快讯

科学家首次合成三角形分子

当原子聚合成一个分子时, 不同原子中的电子会配对成化学键, 固定住这个分子。称为自由基的分子则有一个剩余的未配对电子, 这种排列方式使其具有高活性, 剩余电子非常容易与其他电子配对。但是在罕见情况下, 拥有偶数个电子的分子也能表现出自由基那样的活性, 因为他们的原子排列方式阻止所有电子相互配对。

20 世纪 50 年代, 捷克化学家克拉尔 (E. Clar) 预言, 由 6 个苯分子合成的三角形碳氢化合物将有偶数个原子和电子, 但是因为该分子的几何形状, 其中的两个

对于一维 XY 模型来说, $D=1$, 我们的理论结果表明 $\nu=1$; 通过对基态几何相位临界行为的分析, 也可以得到相同的结论, $\nu = |\frac{\alpha_1}{\alpha_1}| = 1$ 。

5. 总结

本文主要介绍几何相, 保真率和量子相变的关系。首先我们总结了几何相和保真率的相关背景以及发展历史, 在最后一小节我们介绍了它们在 XY 模型中的应用。我们证明, 尽管几何相和保真率的定义完全不同, 但是在描述量子相变的过程中, 它们的发散系数有密切关系。我们发展了一套基于奇异函数分解的数学方法, 可以精确确定这些系数, 并且确定保真率和几何相的关系。对于 XY 模型, 我们推导了很多严格的解析结果。该方法具有很好的扩展性, 可以用于处理其他的物理模型, 比如扩展的 Ising 模型。但是对于不同的相变类型, 这些严格关系可能需要做适当调整。我们期望该方法可以加深学生对量子相变的认识, 有兴趣的学生可以参考文献^①, 并可以利用该方法自行找到更多严格关系。

致谢

作者感谢青千项目 (No. KJ2030000001) 以及中国科大经费支持 (No. KY2030000053)。

^① J. -M. cheng, M. Gong, G-C. Guo, (2006) and Z. -W.Zhou, arXiv: 1611.07664

电子会无法配对。克拉尔也曾尝试在溶液中合成这个称为三角烯 (triangulene) 的分子, 却以失败告终, 因为其活性太高, 甫一出现就与其他三角烯片段结合了。

现在, 研究者首先合成一个较大的前体分子, 该分子是一个有几个额外氢原子的稳定分子。他们随后用电子束冲击分子去除多余的氢原子, 剩余部分就成了三角烯。三角烯独特的电子排列使其具有磁性, 对量子计算将很有价值。

(高凌云编译自 2017 年 2 月 13 日 www.sciencemag.org)