

保真率与量子相变^{*}顾世建[†] 林海青

(香港中文大学物理系)

摘要 量子相变是量子多体理论中的一个重要概念,保真度则是量子信息学的重要概念.文章简单介绍了一个量子系统的基态对系统参量的响应,即保真率,在量子相变中的行为.作为理解量子相变的一个新的视角,保真度方法的优势在于它是一个纯粹的几何学量,所以在研究相变过程中不需要考虑任何预设的序参量.文章用通俗的语言介绍了基态保真度、保真率、量子绝热维度以及它们的物理意义.为便于理解,文章以 Lipkin-Meshkov-Glick 模型与 Kitaev 蜂巢模型为例,对保真率在这两个模型中的性质做了简单介绍.

关键词 保真率,量子相变

Fidelity susceptibility and quantum phase transitions

GU Shi-Jian[†] LIN Hai-Qing

(Department of Physics, The Chinese University of Hong Kong)

Abstract Quantum phase transition is one of the most important issues in condensed matter physics, and quantum fidelity is an important concept emerging from quantum information theory. In this paper, we describe as simply as possible the role of fidelity and its leading term, i. e. the so-called fidelity susceptibility, in quantum phase transitions. As a purely geometric quantity, the key advantage of the fidelity approach is that no a priori knowledge of the order parameter is assumed. Specifically, we discuss definitions of the fidelity, the fidelity susceptibility, and the corresponding quantum adiabatic dimension, as well as their role in quantum phase transitions. We also use the Lipkin-Meshkov-Glick model and the Kitaev honeycomb model as examples to clarify these issues.

Keywords fidelity susceptibility, quantum phase transitions

1 引言

保真度是一个信息学上的概念,它度量的是物理学信息在物理演化中对原始信息的忠诚度^[1].比如,在电子音箱系统中,音乐发烧友口中所谓的“高保真”指的就是经各种功率放大器处理后的音乐及视频信息与原始物理媒介所储存的信息的高度一致.在日常生活中遇到的信息,通常属于经典信息的范畴.近年来,由于量子信息学的发展,物理学家对量子信息的保真度表现了高度的兴趣.因为大家希望量子信息的载体,如光子,在信息的传输过程中能够与原始状态保持一致性,所以保真度这个概念被广泛应用于量子信息系统的研究中.

另一方面,在绝对零温下,量子多体系统的物理性质一般会随着系统的参量(如外场、粒子间相互作用等)的变化而发生变化.当系统的物理性质在某一临界点发生剧变的时候,我们通常说该系统发生了相变.由于系统处于绝对零温,不存在热力学涨落,相变本身是通过量子涨落来驱动的,所以这类相变被叫作量子相变^[2].在传统描述相变的理论之中,朗

^{*} 香港特别行政区研究资助局资助项目(批准号:CUHK 400807)
2009-04-07 收到

[†] 通讯联系人. Email: sjgu@phy.cuhk.edu.hk

道的对称破缺机理是一个非常成功的理论,并被广泛应用于各种相变的研究之中.近年来,由于量子信息理论的发展,人们希望从不同的角度,如信息论,对于量子相变有一种全新的理解.

2 基态保真度与保真率

顾名思义,相变意味着系统状态的突变.从信息论的角度来讲,如果我们去比较系统在同一个相中但处于参数空间不同位置的两个状态,我们会发现它们非常相似;相反,当这两个状态分别处于相变点的两边的时候,即使在参数空间它们非常接近,这两个状态仍然不同.所以,如果我们考虑一个量子多体系统,它的哈密顿量为

$$H = H_0 + \lambda H_1,$$

其中 H_1 是量子相变的驱动项, H_0 是非驱动项,对应的基态为 $|\Psi(\lambda)\rangle$;用态叠加的方式比较在参数空间两个不同点 $\lambda_1 = \lambda - \delta\lambda/2, \lambda_2 = \lambda + \delta\lambda/2$ 的两个态的距离,也就是

$$F(\lambda_1, \lambda_2) = |\langle \Psi(\lambda_1) | \Psi(\lambda_2) \rangle|,$$

我们期望这个量在量子临界点 λ_c 附近会出现极小值(见图1).在量子信息研究中,这个量定义了两个纯态之间的保真度.

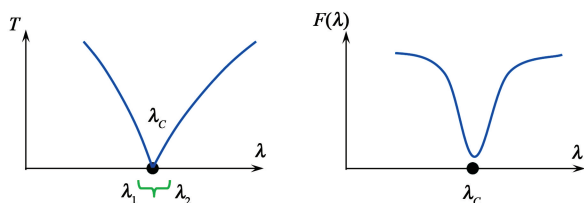


图1 左边:量子相变的一个概略图(纵轴是温度,横轴是系统参量);右边:保真度在量子相变点附近的行为(来自文献[18])

在量子力学中,系统的物理状态可以表示为希尔伯特空间的一个矢量,由于量子态通常已经归一化,两个量子态的内积恰巧定义了这两个矢量在对应的希尔伯特空间中的夹角,所以保真度同时又是一个纯粹的几何学上的概念.因此,用保真度来研究相变的一个明显的好处是不需要考虑系统的对称性与序参量,所以保真度在量子相变中的表现在近年来得到了相当广泛的关注^[3-7].

显然,保真度的大小依赖于两个态在参数空间的距离,它并不能很好地反应基态本身对于相互作用项的响应,所以我们需要对基态做微扰展开.基态波函数在一级微扰近似下,可以表述为

$$|\Psi(\lambda + \delta\lambda)\rangle =$$

$$|\Psi_0(\lambda)\rangle + \delta\lambda \sum_n \frac{\langle \Psi_0(\lambda) | H_1 | \Psi_n(\lambda) \rangle}{E_0 - E_n},$$

这样保真度可以写为

$$F(\lambda, \lambda + \delta\lambda) = 1 - \frac{(\delta\lambda)^2}{2} \chi_F,$$

其中^[5,6]

$$\chi_F = \sum_n \frac{\langle \Psi_0(\lambda) | H_1 | \Psi_n(\lambda) \rangle^2}{(E_0 - E_n)^2},$$

我们称之为保真率.经过傅里叶变换,我们可以得到保真率与关联函数有如下关系^[5]

$$\chi_F = \int \tau G(\tau) d\tau,$$

其中 τ 是虚时,

$$G(\tau) = \langle \Psi_0(\lambda) | H_1(\tau) H_1(0) | \Psi_0(\lambda) \rangle - \langle \Psi_0(\lambda) | H_1(0) | \Psi_0(\lambda) \rangle^2,$$

这个从线性响应理论得到的一般表达式对于我们理解量子相变有比较重要的意义.

众所周知,热力学相变是由于热力学涨落引起的,而量子相变是由于量子涨落引起的.前者比较容易理解,因为热力学系统对外界的响应,如热容量或磁化率,总可以归结为能量或磁矩在热统计分布下的涨落.从保真度的角度来讲,相变意味着热力学系统的状态发生了本质的变化.两个不同温度下的热力学平衡态的保真度可以定义为^[8]:

$$F(\beta, \beta') = \text{tr} \sqrt{\rho(\beta) \rho(\beta')},$$

这里 $\rho(\beta)$ 为热力学密度矩阵,

$$\rho(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n|,$$

以及 $\beta = 1/k_B T$ (k_B 是玻耳兹曼常数), $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$ 是配分函数.通过一些简单推导,我们可以得到热力学状态的保真率正比于热容量,也就是^[5,6]

$$\chi_F = \frac{C_v}{4\beta^2},$$

所以从这一层意义上讲,用自由能和保真度来描述热力学相变,在本质上都是一样的;两者最后都归于能量的涨落.这一关系式同样也表明了量子信息理论与热力学理论之间存在一种比较明确的关系.

而在量子相变中,能量的涨落是基态能量的二级微扰修正,即

$$\frac{d^2 E_0(\lambda)}{d\lambda^2} = 2 \sum_n \frac{\langle \Psi_0(\lambda) | H_1 | \Psi_n(\lambda) \rangle^2}{E_0 - E_n},$$

我们可以看到该表达式与保真率有点类似但不尽相同,不同的地方在两个表达式的分母上.当量子相变

发生时,系统能隙在多数情况下会趋向于零,这是能量的二阶导数产生奇异性的一个重要原因.显然,保真率分母上的平方项放大了这种奇异性^[9].两者也有一些共性.能量的二级修正与保真率的有限值都来自于量子涨落,即由测不准关系引起的力学量的不确定性.具体的讲,如果 H_0 与 H_1 相互对易的话,根据量子力学原理, H_0 与 H_1 会有共同本征态.如果基态是两者的共同本征态,保真率与能量的二级修正中的跃迁项就为零,所以它们自己也为零.只有当 $[H_0, H_1] \neq 0$,涨落关联函数 $G(\tau)$ 不为零,保真率与能量的二级修正才都不为零.所以说量子涨落在量子相变中起着非常重要的作用.这种作用,从保真度的角度来讲,体现了量子相变与热力学相变的不同之处.

3 量子绝热维度与量子相变

在普通物理中,一个粒子的状态可以由其速度与相对位置来描述.如果我们要改变其运动状态,就必须对它施加一个净的冲量.比如,对一个质量为 m 的粒子,如果我们希望把它的速度从 v_1 加速到 v_2 ,我们需要做的是给其一个冲量,即

$$f\Delta t = m(v_2 - v_1),$$

但如果我们改变一个质量更大的粒子 M ,显然我们需要更大的冲量,即

$$F\Delta t = M(v_2 - v_1).$$

上面的两个式子表明,在普通物理中,如果我们要改变一个系统的状态,所需要施加的影响,即冲量,是与系统的质量(大小)成正比的.也就是说,这种影响是广延的.这种广延性同样存在于经典热力学相变中.如果我们希望把一个热力学系统绝热的从温度 T_1 改变到温度 T_2 ,我们需要改变系统的能量.从保真度的角度来讲,系统在两个温度之间的距离其实就是自由能的差别.不管系统的演化过程是否经过了临界点,我们可以看到,这种距离与系统大小的关系是成正比的.所以在经典系统中,保真度和它的主导项保真率都是广延量.

然而,量子系统的绝热演化过程却完全不一样.在一般情况下,保真率在临界点是发散的^[10,11],正如比热会在热力学相变点发散一样.当远离相变点时,系统的比热是广延的;但对基态保真率而言,这并不是普适的行为.在一个确定的量子相之中,普适的行为是系统基态的保真率有自己独特的维度依赖.这个维度可以不同于真实系统的维度,被叫做量

子绝热维度^[12],其物理意义是一个量子系统在绝热演化过程中的尺寸标度指数.

根据这一量子系统所独有的现象,我们可以把量子相变分为两类,第一类是系统的量子绝热维度在相变过程中并没有发生变化;而第二类则是发生了变化.显然在第二类中,量子绝热维度本身就可以作为描述相变的特征.这为我们理解相变提供了一种新的途径.

现在我们以 Lipkin-Meshkov-Glick 模型^[13]为例来介绍保真率在量子相变中的行为. Lipkin-Meshkov-Glick 模型描述的是一堆在横场作用下的有两两相互作用的自旋.系统的哈密顿量为

$$H = -\frac{1}{N} \sum_{i < j} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \gamma \sigma_i^y \sigma_j^y) - h \sum_i \sigma_i^z.$$

我们可以看到哈密顿量主要包括两项,即自旋相互作用项和横场势能项.系统的基态相变正是由于这两项的相互竞争引起的.当外场 h 很小时,系统在 xy 平面内试图形成铁磁序态(见图 2 左).虽然系统哈密顿量对这两种自旋取向没有任何优先性,但真实的基态会演化到其中的一个态去,所以我们可以说系统处于一个对称破缺相.另一方面,当外场 h 很大时,所有自旋都会被外场沿 z 方向极化,因此基态处于一个极化相.量子相变就发生在哈密顿量的相互作用项与势能项可以比拟的地方: $h_c = 1.0$.

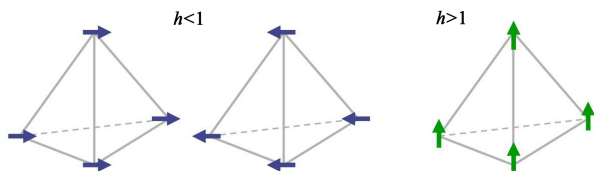


图2 Lipkin-Meshkov-Glick 模型的基态的两个相,左边两个是对称破缺相,而右边表示极化相(这里以 4 个自旋为例)

由于系统基态在相变过程中发生了很大变化,所以保真率在相变点附近会出现极大值,甚至是奇异性^[14].图 3 显示的是不同大小系统的基态保真率对于外场的依赖关系.我们可以看到在相变点附近,保真率会随着系统尺寸的增大变得越来越奇异.标度分析表明其最大值正比于 $N^{4/3}$.这里的 $4/3$ 相当于临界的量子绝热维度.进一步的研究表明,量子绝热维度在对称破缺相中为 1,而在极化相中为零.由此可见,对称破缺相的量子绝热维度本身就可以作为序参量.虽然在传统方法中,该相变也可以用朗道的对称破缺理论来描述,但保真率告诉我们,系统在极化相中的行为象一个完全局域化的单粒子,而与具体的自旋个数无关,而在对称破缺相中,系统的非局域性直接导致了保真率的广延性.

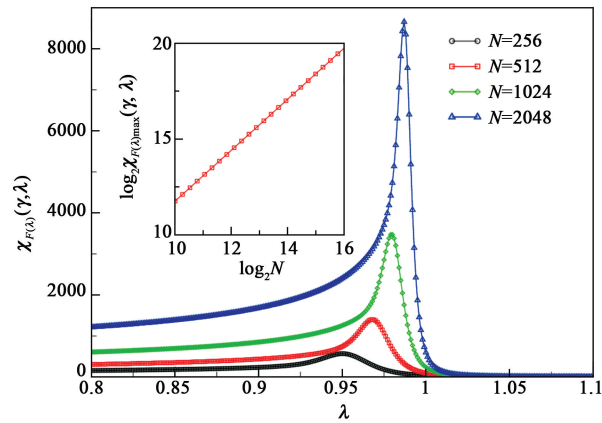


图3 Lipkin-Meshkov-Glick 模型在不同系统尺寸下的保真率。可以看到,保真率在对称破缺相中基本上正比于系统尺寸,而在极化相中与系统尺寸无关(来自文献[14])

4 保真率与拓扑量子相变

如前所述,用保真率研究量子相变的一个特点是它抛弃了序参量的概念,对一些朗道相变理论不能研究的相变,比如拓扑量子相变,保真度方法也能够适用并得到比较好的结果。

这里我们以 Kitaev 蜂巢模型^[15]为例,简单讨论保真率在量子拓扑相变中的行为。Kitaev 蜂巢模型定义在一个蜂巢状格点上(见图 4),每个格点上都有一个局域的 1/2 自旋。两个近邻的自旋具有相互作用,但相互作用的方式依赖于连接这两个自旋的连接方向(见图 4)。模型的哈密顿量为

$$H = -J_x \sum_{i,j \in x \text{ bond}} \sigma_i^x \sigma_j^x - J_y \sum_{i,j \in y \text{ bond}} \sigma_i^y \sigma_j^y - J_z \sum_{i,j \in z \text{ bond}} \sigma_i^z \sigma_j^z.$$

Kitaev 蜂巢模型的基态包括两个相。如果我们在参数空间固定 $J_x + J_y + J_z = 1$,就定义了一个平面。在这个平面上,基态相图可由图 5 来说明。在相图中,周围的 3 个三角形区域代表有能隙相。在这些相中,除了系统的元激发具有能隙外,另一个重要的特性是该元激发是一种阿贝耳任意子¹⁾。相反,相图中间的三角形区域是无能隙相,其元激发是非阿贝耳的任意子。量子相变就发生在这两种区域相交的边界上。

Kitaev 蜂巢模型在无磁通的子空间是可以严格求解的,这里我们并不打算介绍如何求解,而只讨论基态保真率在对应的拓扑相变中的性质^[17]。图 6(b)显示的是保真率在相变点附近的奇异行为,这种现象在保真率与量子相变的研究中非常普遍。它描述了系统基态在相变点附近的巨大变化。研究

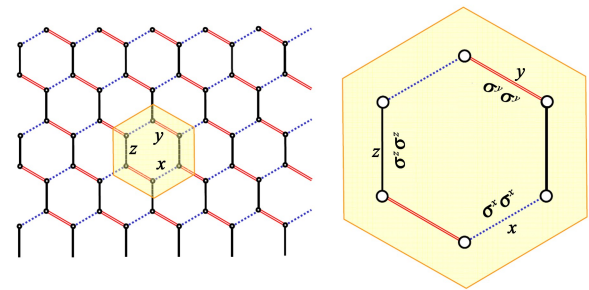


图4 Kitaev 蜂巢模型的示意图。左边:模型结构,每个格点上都有一个 1/2 的自旋;右边:相邻自旋间的相互作用方式依赖与自旋连接的方向(来自文献[16])

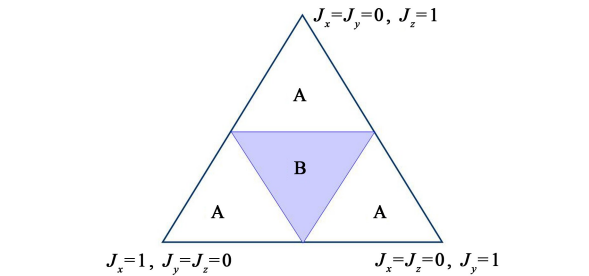


图5 Kitaev 蜂巢模型的基态相图,其中 A 为有能隙相,B 为无能隙相

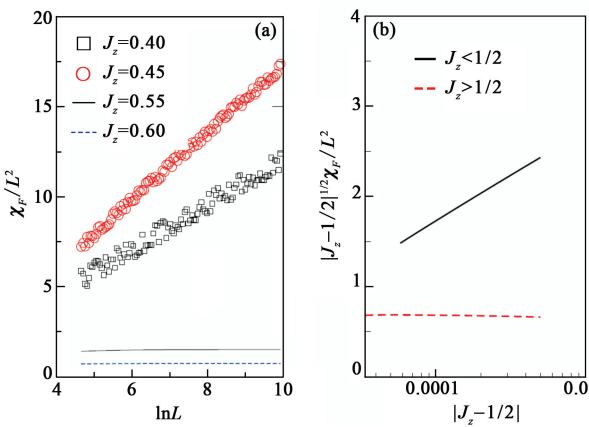


图6 (a) Kitaev 蜂巢模型中的保真率与系统尺寸的关系,在有能隙相中,保真率正比于 L^2 ,而在无能隙相中,其正比于 $L^2 \ln L$; (b) 保真率在临界点两边具有不同的临界行为(来自文献[12])

表明,保真率在量子相变点附近同样具有奇异性与很好的标度率。因此,保真度方法对拓扑相变也是适用的。

另一方面,从图 6(a)我们看到,在有能隙相中,保真率正比于系统的尺寸。但奇怪的是,在无能隙相中,保真率正比于 $L^2 \ln L$ 。后者有点难以理解。因为这一维度高于系统的实际维度,从另一个角度来讲,两个无能隙相中的量子态之间的距离是超广延的。

1) 任意子是对玻色子和费米子的一种推广。我们知道,对两全同玻色子 $\Psi(x_1, x_2) = \Psi(x_2, x_1)$, 费米子 $\Psi(x_1, x_2) = -\Psi(x_2, x_1)$; 而对于任意子,则是 $\Psi(x_1, x_2) = e^{i\theta} \Psi(x_2, x_1)$, 这里的 θ 是一任意有理数相角。

这一点是经典相变中所没有的. 我们对于此行为的解释是系统在整个无能隙区都是临界的. 但无能隙其实只是一个必要条件, 因为同样存在无能隙的临界相, 如 XXZ 模型中的 XY 区域, 相应的保真率仍然是广延的. 同时, 这种超广延性表明, 系统在这个区域要进行绝热演化会非常困难, 所以绝热定理有可能在这个相中是失效的.

5 总结

在本文中, 我们概括地介绍了保真度方法, 尤其是保真率在量子相变中的应用. 我们通过一般性分析, 并配以具体模型来说明保真度方法是非常实用, 并颇具特色的方法: 首先保真度是从态演化的角度, 而不是从热力学函数出发, 这是从信息论来理解相变的一种新的视角; 其次, 在保真度方法中, 没有假定任何序参量, 所以它在一些不能用序参量描述的相变中也显示出强大的功能.

由于该领域还在不断发展之中, 尤其是随着保真度方法在实验上的实现^[18], 这一领域将会展示出更多的活力. 我们希望本文能够起到抛砖引玉的作用, 为大家, 特别是学生去理解这一方法做些铺垫. 有兴趣的读者可以进一步参考本文其中一位作者对

该领域的综合评述性文章^[16].

参考文献

- [1] Nilesen M A, Chuang I L. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000
- [2] Sachdev S. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000
- [3] Quan H T, Song Z, Liu X F *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 140604
- [4] Zanardi P, Paunkovic N. *Phys. Rev. E*, 2006, 74: 031123
- [5] You W L, Li Y W, Gu S J. *Phys. Rev. E*, 2007, 76: 022101
- [6] Zanardi P, Giorda P, Cozzini M. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99: 100603
- [7] Zhou H Q, Barjaktarevic J P. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2008, 41: 412001
- [8] Zanardi P, Quan H T, Wang X *et al.* *Phys. Rev. A*, 2007, 75: 032109
- [9] Chen S, Wang L, Hao Y *et al.* *Phys. Rev. A*, 2008, 77: 032111
- [10] Venuti L C, Zanardi P. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 99: 095701
- [11] Gu S J, Kwok H M, Ning W Q *et al.* *Phys. Rev. B*, 2008, 77: 245109
- [12] Gu S J, Lin H Q. *Europhys. Lett.*, 2009, 87: 10003
- [13] Lipkin H J, Meshkov N, Glick A J. *Nucl. Phys.*, 1965, 62: 188
- [14] Kwok H M, Ning W Q, Gu S J *et al.* *Phys. Rev. E*, 2008, 78: 032103
- [15] Kitaev A. *Ann. Phys.*, 2006, 321: 2
- [16] Gu S J. *arXiv*, 2008, 0811: 3127
- [17] Yang S, Gu S J, Sun C P *et al.* *Phys. Rev. A*, 2008, 78: 012304
- [18] Zhang J, Peng X, Rajendran N *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2008, 100: 100501