

拓扑相和拓扑相变的量子模拟*

王腾辉 吴建澜 尹艺[†] 许祝安

(浙江大学物理系 杭州 310027)

2018-03-28收到

[†] email: yiyin@zju.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20180502

Quantum simulation of topological phases and transitions

WANG Teng-Hui WU Jian-Lan Yin Yi[†] XU Zhu-An

(Physics Department, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

摘要 随着拓扑相和拓扑材料的发现, 拓扑已经从数学概念变成现代凝聚态物理学一个重要的前沿方向。尽管越来越多的拓扑材料被预言, 在人造可控量子体系中进行拓扑量子模拟仍会对材料的理解和制备起到极大的促进作用。文章简单总结了基于冷原子和超导量子比特系统开展拓扑量子模拟的进展。介绍了这两种量子系统的特点, 以及相应的拓扑量子模拟实验方法, 还分析了这两种体系在实验手段和物理原理上的联系。

关键词 量子模拟, 拓扑相, 拓扑相变, 冷原子, 超导量子比特

Abstract Since the discovery of topological phases and materials, topology, as a mathematical concept, has inspired great interest in modern condensed matter physics. Although many types of topological materials have been predicted and discovered, their simulation in controllable artificial quantum systems will greatly help our understanding and further study of such materials, and various experimental methods have already been developed. In this paper we briefly summarize the progress of quantum simulation in cold atoms and superconducting qubit systems. We describe the characteristics of different quantum systems and the corresponding experimental methods for their simulation. In addition, we also summarize the relationship between the experimental schemes and physical principles of the two systems.

Keywords quantum simulation, topological phase, topological phase transition, cold atoms, superconducting qubit

1 拓扑相和拓扑相变

自发现量子霍尔效应和拓扑绝缘体以来, 对相关材料拓朴性质的研究引起了人们的极大兴趣。拓朴作为一个数学概念, 研究的是物体的几何在连续形变下保持不变的一种性质。在凝聚态

物理中, 物质的拓朴性质使得一些相关物态在环境扰动下能稳定存在。例如区别于一般平庸的绝缘体, 拓朴绝缘体最直观的表现是具有拓朴性质导致的导电的表面态, 并在各种杂质和环境扰动下稳定存在。这种稳定的表面态在传递电子信息的过程中不会产生耗散, 被寄希望于在新一代的量子器件中发挥重要的作用。

1973年, J. Michael Kosterlitz 和 David J.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2014CB921203)资助项目

Thouless 首次在二维凝聚态体系中提出了物质的拓扑相和拓扑相变的概念^[1]。区别于普通材料的朗道相变理论, 拓扑材料的拓扑相是由体系能带特征的拓扑不变量来表征的。拓扑不变量的一个最常见的例子是陈数, 其在数学上的表达是物体几何的空间曲率沿表面积分的结果。在凝聚态物理中, 固体材料能带的布里渊区和其量子态的贝里曲率对应着经典几何中的表面和空间曲率。另一种直观的理解是贝里曲率可以被等效为布里渊区的磁感应强度, 而拓扑不变量则对应磁感应强度沿曲面积分得到的磁单极子数。需要强调的是, 拓扑不变量在相应的物理体系中并不只是一个抽象的概念, 本身也可能有其特定的物理意义, 例如整数量子霍尔效应中的整数电导。而拓扑相变的发生则表明体系的拓扑不变量在改变系统参数的过程中发生了突变。

2 拓扑量子模拟

尽管在很多材料体系中陆续预言和发现了各种拓扑材料及其拓扑相, 在一种可控的量子体系中实现对材料的拓扑性质的模拟是一种独特的研究拓扑的思路, 仍会对拓扑材料和拓扑性质的理解提供很大的帮助。自美国物理学家理查德·费曼提出量子计算的概念以来, 量子模拟一直是可控量子体系的一个重要应用。人们希望通过量子模拟, 将一些复杂问题的计算转变为人造可控体系的可控演化。对演化的结果测量直接得到问题的答案, 这是量子模拟最吸引人之处。目前, 在多种可控量子体系中都实现了对特定拓扑体系的量子模拟, 拓扑量子模拟这个方向也还在不断的发展之中, 本文主要介绍基于冷原子、超导量子比特等量子系统中的拓扑量子模拟。

2.1 冷原子体系中的拓扑量子模拟

在冷原子体系中, 实验上通过若干组相干的激光构造出在空间分布的周期性电场, 形成周期性的光晶格。稀疏的中性原子被注入到光晶格

中, 通过电偶极矩与电场形成可控的相互作用。与一般固体材料的周期性晶场对比, 中性原子类似于电子, 而光晶格类似于晶格, 其相互作用和晶体中电子—晶场间相互作用类似。不同于自然晶体, 这种人造光晶格的形状可精确调控, 可对其进行各种操作甚至产生周期性的振荡等。由于中性原子质量大, 体系的温度可以被冷却到 nK 量级。另外, 通过特定的技术, 如 band-mapping 和 time-of-flight 等, 实验上可以精确地测量出原子团的能量动量分布或者其时间演化反推的量子态信息。目前, 冷原子体系已经可以很好地模拟各种不同拓扑材料的晶体结构, 并在接近绝对零度的条件下, 通过测量中性原子在光晶格中的各种性质, 给出体系的拓扑性质。下面介绍近几年通过冷原子体系模拟物质拓扑性质的进展。

2013 年, Marcos Atala 等人首次在一维体系中测量了 Zak phase^[2]。Zak phase 指的是在一维体系中电子绝热地历经整个布里渊区所积累的贝里相位。在一维体系内, 贝里相位的大小与能带的拓扑不变量是直接相关的。研究者通过两束同向的激光构造了一维的光晶格, 注入中性的铷原子后, 得到一维的 Rice—Mele 模型。该模型描述了一维双原子链的哈密顿量, 双原子构成了一维体系的晶胞。晶胞内原子相互作用强度与晶胞间的相互作用强度的相对大小直接决定了体系的拓扑性质。如图 1 所示, 在研究者控制下, 不同自旋的铷原子沿着动量空间的相反方向绝热地演化。Zak phase 在不同自旋的原子间积累, 通过 Ramsey 相干的方式测量出在不同自旋原子间相对的相位。研究者通过调控 Rice—Mele 模型的参数, 改变晶胞内原子相互作用强度与晶胞间的相互作用强度的相对大小, 直接观察到了体系 Zak phase 发生突变, 这个转变表明体系发生了拓扑相变。2015 年, 该实验小组用类似的实验方法, 控制冷原子在二维的六方格子的动量空间中绝热演化^[3]。通过相干测量的方法, 研究者表征了六方格子的拓扑性质。实验发现, 冷原子在二维动量空间投影的闭合路径只有在包含狄拉克点的情况

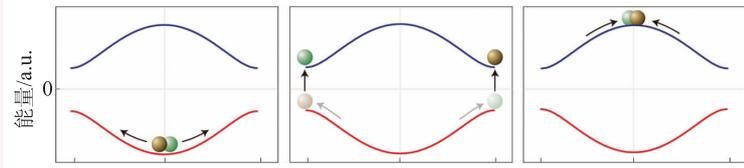


图1 自旋相反的原子在动量空间中沿着相反的方向运动，Zak phase在自旋不同的原子间积累。不同颜色的小球代表自旋方向不同的冷原子^[2]

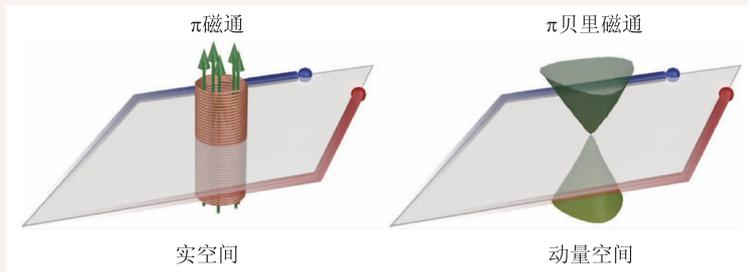


图2 实空间电子绕磁场运动的相干效应和粒子绕动量空间的狄拉克点运动形成的贝里相^[3]

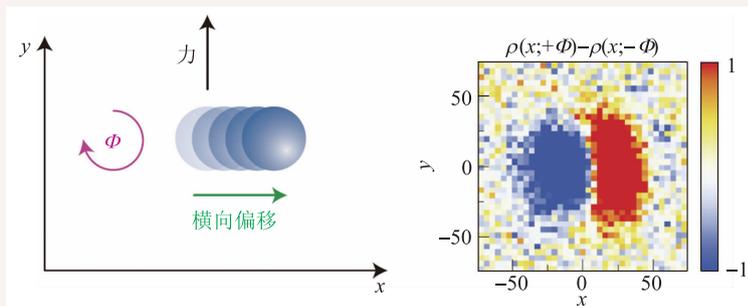


图3 在不同等效磁场 $\pm\Phi$ 的驱动下，冷原子团在空间中的分布差，证实了不同方向的磁场导致了原子团发生不同方向的偏移^[6]

下，才得到非零的贝里相位。如图2所示，假如把动量相空间类比为实空间，狄拉克点类比为实空间的磁通，可以将冷原子积累的贝里相位的过程类比为电子绕磁通产生的 Aharonov—Bohm 效应。以上的系列实验都是基于量子态沿闭合路径的绝热演化，利用演化过程中积累的贝里相位，来表征和体现体系的拓扑性质。这种测量方式虽然不直接，但是比较适合在易于测量相对相位、相干时间长的体系中实现。此种方式的不足之处在于依赖体系的长相干时间，演化过程还会引入如动力学相位等额外干扰量，需要特殊设计的实验过程对其进行消除。

与此不同的另一种方法是直接测定体系的贝

里曲率来表征体系的拓扑性质。如前文所述，贝里曲率可以类比为经典物理概念中的磁感应强度。类比经典物理中测量磁感应强度的方式，实验可以测定冷原子在贝里曲率作用下的动力学行为来反推贝里曲率的大小。2014年，M. Aidelsburger 等人^[4]通过两束方向正交的激光构造出方形的晶格，注入中性的铷原子后，得到了 Harper—Hofstadter 模型的哈密顿量。如图3所示，研究者通过激光调控冷原子朝着某个方向运动。额外的激光调控给了系统一个初始运动方向，在此条件下，冷原子会产生垂直于初始运动方向的动量分量，这个分量大小正比于冷原子所处相空间的贝里曲率。在冷原子团短时间的运动后，研究者测量出实空间中所有不同初始态的冷原子横向位移，从而计算出整个能带的各点的贝里曲率，其积分给出拓扑不变量的大小。用几乎同样的测量方法，G. Jotzu^[5]等人利用三束激光构建出六方格子的晶格，实现了 Haldane model 所需的原子次近邻相互作用，同时还引入了控制体系对称性破缺与时间反演对称性破缺的参数调控。在非自旋轨道耦合体系中，研究者在实验上对比了对称性破缺和时间反演对称性破缺对体系拓扑性质的影响，证实了时间反演对称性破缺给体系引入了非零的拓扑不变量。通过测定贝里曲率影响下的动力学响应来测定体系的拓扑性质是一种和相干测量不同的方式，该种方式不需要经历绝热演化过程，对体系相干性要求不高。但在冷原子体系中，由于贝里曲率对冷原子团引入的横向移动较小，需要较高的实验检测精度。

理论上，能带基态性质最直接地反应了体系的拓扑结构，可以通过能带相空间的本征态计算

里曲率来表征体系的拓扑性质。如前文所述，贝里曲率可以类比为经典物理概念中的磁感应强度。类比经典物理中测量磁感应强度的方式，实验可以测定冷原子在贝里曲率作用下的动力学行为来反推贝里曲率的大小。2014年，M. Aidelsburger 等人^[4]通过两束方向正交的激光构造出方形的晶格，注入中性的铷原子后，得到了 Harper—Hofstadter 模型的哈密顿量。如图3所示，研究者通过激光调控冷原子朝着某个方向运动。额外的激光调控给了系统一个初始运动方向，在此条件下，冷原子会产生垂直于初始运动方向的动量分量，这个分量大小正比于冷原子所处相空间的贝里曲率。在冷原子团短时间的运动后，研究者测量出实空间中所有不同初始态的冷原子横向位移，从而计算出整个能带的各点的贝里曲率，其积分给出拓扑不变量的大小。用几乎同样的测量方法，G. Jotzu^[5]等人利用三束激光构建出六方格子的晶格，实现了 Haldane model 所需的原子次近邻相互作用，同时还引入了控制体系对称性破缺与时间反演对称性破缺的参数调控。在非自旋轨道耦合体系中，研究者在实验上对比了对称性破缺和时间反演对称性破缺对体系拓扑性质的影响，证实了时间反演对称性破缺给体系引入了非零的拓扑不变量。通过测定贝里曲率影响下的动力学响应来测定体系的拓扑性质是一种和相干测量不同的方式，该种方式不需要经历绝热演化过程，对体系相干性要求不高。但在冷原子体系中，由于贝里曲率对冷原子团引入的横向移动较小，需要较高的实验检测精度。

得到相应的贝里曲率。Fläschner 等人通过对动量空间的本征态进行层析测量的方法，重构了整个能带的本征态^[7]。以两能带体系为例，在此说明能带本征态的层析测量所用到的 time-of-flight 技术。如图 4 显示的过程，在初始时刻，冷原子处于动量空间的本征态，本征态的基矢被标记为 $|\psi_A\rangle$ 和 $|\psi_B\rangle$ 。当激光引入的相互作用被突然撤去时，原本的本征态便会在两个基矢之间振荡。研究者通过测量这种随时间的振荡，可以拟合得到初始动量空间本征态的相关参数。实验上，研究者

测量出整个布里渊区的本征态，以此计算出整个布里渊区的贝里曲率。区别于前文的相干方式和动力学测量方式，这种通过测定 time-of-flight 技术测量本征态的方法避免了体系复杂的耦合给模拟过程带来的影响，精确度也比较高，但主要适用于能级数不多的相对简单的两能带体系。

冷原子体系是目前用来模拟实际凝聚态物质的比较有效的可控量子体系，它运用到激光制冷、激光调制等多种光学技术。凝聚态物理发展出的相关理论可以被直接运用到冷原子模拟体系中。

2.2 量子比特体系的拓扑量子模拟

除冷原子体系外，在量子比特体系中也实现了对某些体系拓扑性质的模拟。一般的量子比特可以由量子二能级体系来构成。这种体系的物理载体可以是光的偏振态，自然原子的两个特定能级和超导电路构造出的人造原子能级。量子比特体系所需的技术大多是较为成熟的微波、半导体等技术。比起冷原子系统，单个量子比特的可控性更强，实验的测量精度更高。特别是在超导量子比特系统中，量子比特的稳定性和可扩展性较好，有望实现大规模的集成。目前，大量耦合量子比特体系的物理载体实现难度较大，而且对其操控难度也比较大。量子比特系统还难以实现类

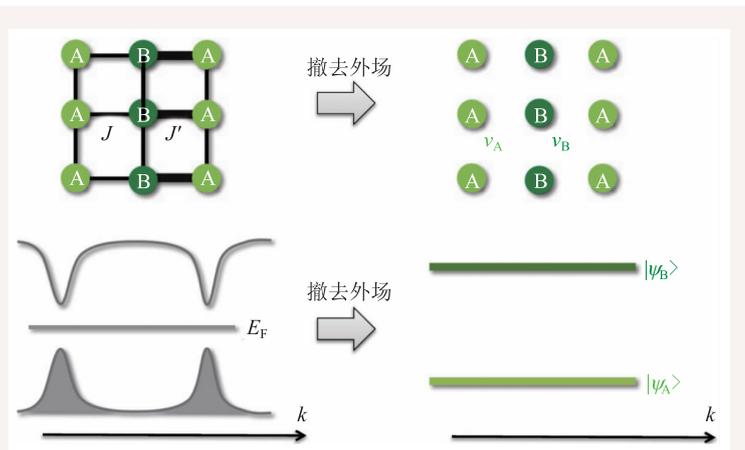


图 4 A-B 两种原子构成的方晶格在撤去外场后，形成了无相互作用的原子点阵。相应地，方晶格的两能带退化为一平坦的能级^[8]

似晶体中的周期性的相互作用体系。因此，大多数的拓扑量子模拟是基于将拓扑材料动量空间的哈密顿量映射到少数的量子比特体系进行的。与冷原子体系相同，在量子比特体系中也发展出了相应的测量体系拓扑性质的方法。

2014 年，P. Roushan 等人首次在超导量子比特中成功模拟了石墨烯体系中的拓扑相变过程^[9]。研究者将 Haldane model 的本征态一一映射到单个超导量子比特的两能级体系中。实验上，通过采用外部微波场调控产生可变的动量空间的哈密顿量。研究者通过连续改变外部微波场，等效地实现量子态在相空间的移动。采用类似于冷原子体系中动力学测量的方法，量子态在起始点被赋予沿着能带基态演化的初始速度，由于体系贝里曲率的影响，横向的加速导致量子态偏离了预定轨迹。这样的偏移量正比于量子态所处位置的贝里曲率。通过测定所有位置的贝里曲率，体系的拓扑不变量可以通过积分计算出来。如图 5 所示，(a)图表示施加的微波调控等效地实现了整个布里渊区的哈密顿量，(b)图则显示了基态在哈密顿量的驱动下偏离绝热演化路径的轨迹。在此基础上，研究者还将研究对象推广到耦合的两比特体系中，并成功观测到体系的拓扑相变。研究结果表明，除了简单的两能带体系，多个耦合的超导量子比特可以在更复杂体系的拓扑模拟上发挥重要的作用。除了动力学测量的方法，在量子比特

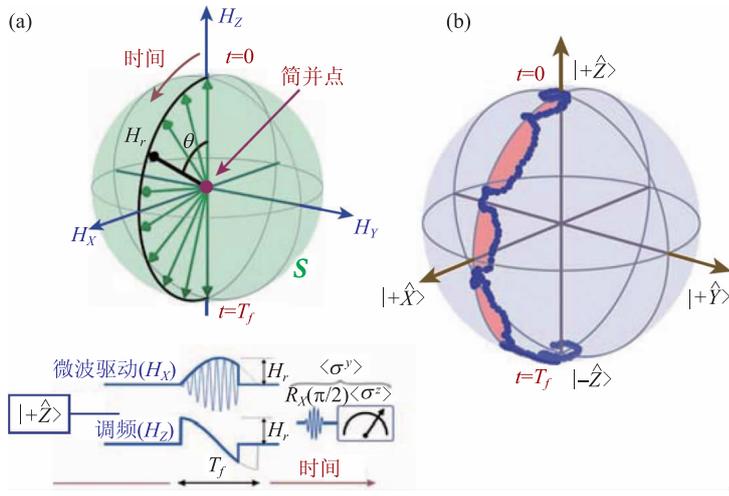


图5 (a)描述超导量子比特体系中通过微波产生的从布洛赫球的北极到南极的哈密顿量；(b)描述在该哈密顿量的驱动下，由于存在贝里曲率，量子态产生了远离大圆轨迹的偏离^[9]

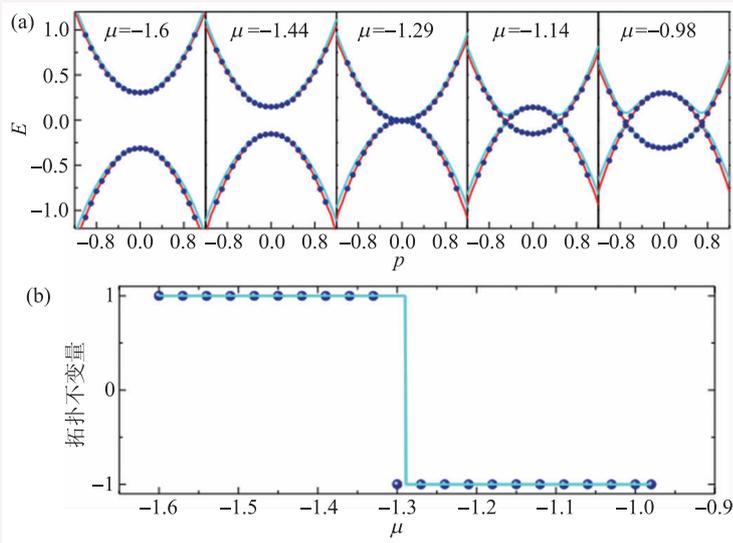


图6 (a)实验上在不同化学势 μ 下测量到的能带色散关系；(b)分析得到的拓扑不变量随化学势 μ 的变化，在 $\mu = -1.3$ 附近，体系发生了拓扑相变^[10]

系统中也实现了测量本征态和相干测量等相应的模拟方法。杜江峰院士团队于2016年成功地在金刚石色心构造的量子比特系统中，实现了对半导体量子线体系的模拟^[10]。研究利用了金刚石色心的多个额外能级，控制量子态在多能级间进行拉比振荡，然后用傅里叶分析的方法，提取出模拟的体系能带相对于参考能级的能量差。以此为基础，研究者测定出模拟体系的能量动量色散关

系。从体系的能带色散关系出发，研究者分析了模拟的半导体量子线体系的拓扑相变发生的过程(图6)。该方法虽然有别于测定能带的量子本征态，但仍然属于对体系能带的一种非动力学响应的测量手段。

此外，南京大学于扬教授团队于2017年在基于3D谐振腔的超导量子比特体系中模拟了立方格子中的Hopf-link结构^[11]。他们控制量子态沿着相空间的不同路径积累贝里相位，这与冷原子体系中的相干测量的方法是类似的。他们从贝里相位的突变证实了模拟体系的拓扑相变。

2018年，浙江大学尹艺教授的团队在超导相位量子比特中模拟了Su—Schrieffer—Heeger (SSH)模型的相变过程^[12]。该研究采用绝热捷径的方法，通过辅助的逆绝热驱动场来加速绝热演化。研究者考虑了在超导相位量子比特中，存在的三能级体系对模拟SSH模型的影响，采用Derivative removal by adiabatic gates (DRAG)的方法，在特定表象下屏蔽了体系的额外能级。利用绝热捷径技术，他们减少了非绝热过程引入的误差和对实验系统以及实验参数的局限性。研究不仅能够模拟一维SSH模型，同时也能直观地推广到对更高维度的拓扑结构的相变模拟。

随着多量子比特系统的发展，基于量子比特的量子模拟在不远的将来会有更大的发挥空间。

3 总结

量子模拟在对材料拓朴性质的研究领域已经取得了相当大的进展，加深了人们对拓扑相变的理解。随着技术的不断发展和新的研究手段被陆

续研发出来，量子模拟可望在未来指导人们寻找新的拓扑材料，帮助研发出新型无损的电子芯片和器件。通过这些新型器件，拓扑材料又会反向作用于量子计算，推动拓扑容错量子计算的发展。

参考文献

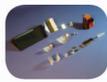
- [1] Kosterlitz J M, Thouless D J. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1973, 6(7):1181
- [2] Atala M, Aidelsburger M, Barreiro J T *et al.* *Nature Physics*, 2013, 9(12):795
- [3] Duca L, Li T, Reitter M *et al.* *Science*, 2015, 347:288
- [4] Aidelsburger M, Lohse M, Schweizer C *et al.* *Nature Physics*, 2015, 11(2):162
- [5] Jotzu G, Messer M, Desbuquois R *et al.* *Nature*, 2014, 515 (7526):237
- [6] Goldman N, Budich J C, Zoller P. *Nature Physics*, 2016, 12 (7):639
- [7] Fläschner N, Rem B S, Tarnowski M *et al.* *Science*, 2016, 352 (6289):1091
- [8] Hauke P, Lewenstein M, Eckardt A. *Physical Review Letters*, 2014, 113(4):045303
- [9] Roushan P, Neill C, Chen Y *et al.* *Nature*, 2014, 515(7526):241
- [10] Kong F, Ju C, Liu Y *et al.* *Physical Review Letters*, 2016, 117 (6):060503
- [11] Tan X, Li M, Li D *et al.* *arXiv*: 1712.07981, 2017
- [12] Wang T H, Zhang Z X, Xiang L *et al.* *Science China Physics Mechanics & Astronomy*, 2018, 61(4):047411

标准光学元件库存---供您随时运用

总量多达10万片，
超过700个品种规格的透镜，
棱镜，反射镜，窗口，
滤光片等常用光学器件；
涵盖紫外，可见，
近红外，
红外等光学应用领域。



光学透镜



光学棱镜



可见光学元件



红外元件



颜色滤光片



窄带干涉滤光片



北京歌普特科技有限公司
Beijing Golden Way Scientific Co.,Ltd

地址：北京市朝阳区酒仙桥东路1号M7栋5层东段
电话：010-88096218/88096099 传真：010-88096216
邮箱：optics@goldway.com.cn

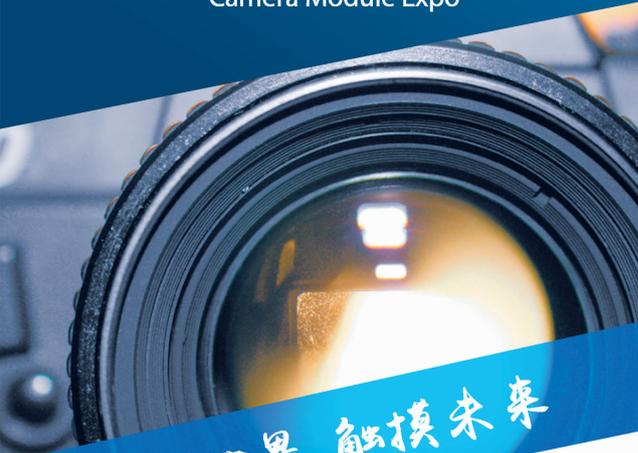




CHINA INTERNATIONAL OPTOELECTRONIC EXPO
中国国际光电博览会



精密光学展
镜头及摄像模组展
Precision Optics, Lens Expo & Camera Module Expo



光连世界 触摸未来

2018.9.5-8 深圳会展中心



CIOE官方微信

同期展会：



光通信展
Optical Communications Expo



红外技术及应用展
Infrared Application Expo



激光技术及
智能制造展
Lasers Technology & Intelligent Manufacturing Expo



光电创新及
军民融合馆
Photonics Innovation Pavilion

WWW.CIOE.CN