

量子多体中的呐喊与彷徨之八

我爱纠缠如秋裤

孟子杨[†]

2021-03-01 收到

[†] email: zymeng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20210309

1 引子

秋裤者，勤劳勇敢的中国人民御寒保腿温之神器也。从塞外北国到中原大地，从江南水乡及至岭南热土(没暖气)，每当神州各地秋风乍起凉意渐浓的时候，妈妈总会关切地问一句“你穿秋裤了吗？”不论在北风呼啸大雪飘飘的北方，还是在阴冷潮湿室内室外同此凉热的南方，一条秋裤不仅让温度从腿部一直蔓延到心里，更唤起了你内心中一种依恋的情节，告诉你时代再变再内卷再996，国际形势再复杂再诡谲再亡我之心不死，我们漂泊的人生中总有一些不变的东西，家一样的东西，每年按时来到，让你安心，保你平安。这就是规律性和规律性给人带来的慰藉。

虽然穿不穿秋裤的争论仍在全球化的大潮中此起彼伏，但秋裤的存在，的确揭示了我们生活中的一个普遍现象，呼唤着我们心中的一种普遍心理。这样反映普遍规律的事物，愿意思考的人都喜欢琢磨一下。虽然他们中很多人并不见得会穿秋裤，比如笔者，但喜欢是真的。

科学研究当然也是揭示规律性的活动，从事这个行业的，也颇有一些愿意思考的人。有趣的是，在笔者熟悉的量子多体系统的研究中，竟也存在一个和秋裤颇为相像的事物，揭示出量子多体系统中无处不在的量子纠缠这样深刻的道

理，让科研从业者中愿意思考的人安心，忘却身边的种种不顺遂，进入“此中有真意”的境界而更加起劲地探索其中的奥妙。他们发现通过秋裤的视角可以揭示量子多体系统从朗道—金兹堡对称性自发破缺，到量子相变，再到拓扑序长程纠缠和范畴对称性等等奇异的现象，秋裤之功善莫大焉。

这听起来好像有点离奇，待我为君细细道来。

2 量子纠缠

量子纠缠是一个深刻的概念，其全面的外延与内涵，当然不是这篇小文可以承担的。但是仅就在凝聚态物理学量子多体问题的研究中，人们逐渐认识到，量子纠缠的重要性体现在对其的测量中能够得到的关于量子多体系统的规律性——尤其是这样的规律性无法从常规测量中得到——以至于在许多新奇量子物质形态的探索中，纠缠成了一锤定音的判据。

那么纠缠作为一个概念，怎样在量子多体系统的计算中进行量化呢？这就是纠缠熵。为了计算纠缠熵，需要定义约化密度矩阵(reduced density matrix)。如图1所示的一个量子多体系统，我们将其分为A和B两个子系统(也可以计为A与其补集 \bar{A})，那么就子系统A而言的约化密度矩阵就是将系统波函数中

属于B的自由度积分掉，写成公式就是

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|,$$

然后随之而来的纠缠熵(此处主要介绍雷尼(Renyi)熵)就是

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln \text{Tr}(\rho_A^q),$$

其中 q 是一个整数。 $q \rightarrow 1$ 的极限就给出了冯·诺依曼熵，而在量子蒙特卡洛的晶格计算中，人们常常计算 $q=2$ 的Renyi熵。对于空间维度 $d=1$ 的量子多体系统，纠缠熵在量子场论的理论框架之下，以及密度矩阵重正化群(density-matrix renormalization group, DMRG)的严格数值计算之中，目前人们已经获得了十分深入近乎完美的理解。比如对于 $s=1/2$ 海森伯模型的自旋链，假设链长为 L ，而其中的子系

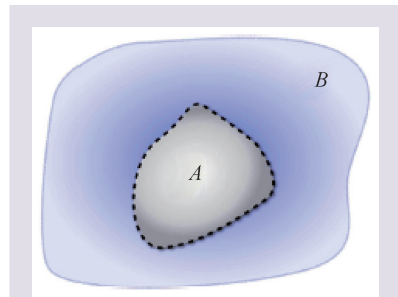


图1 空间维度为 d 的量子多体系统，可以分为A, B两个子系统，计算其纠缠熵。A和B的交界，计为 l_A ，就是下文中所说的面积律里面的面积。注意此处的面积是指A和B交界的面积，即 $d-1$ 维度面积，对于 d 维来说， l_A 是A和B交界的周长

统 A 长为 l_A ，其 $q=2$ 的 Renyi 熵就是

$$S_2(A) = \frac{c}{4} \ln \left(\frac{L}{\pi} \sin \left[\frac{\pi l_A}{L} \right] \right) + b,$$

其中的常数 c 就是系统的中心荷 (central charge)，是一个普适量 (universal constant) (对于 $s=1/2$ 海森伯自旋链 $c=1$)，而 b 是一个非普适量。这方面的文献已然汗牛充栋，比如文献[1]，笔者也不赘述了。总之纠缠熵的计算在 1 维的量子多体系统中是如此多见，以至于眼下做 DMRG 计算的人，在进行量子多体计算时，第一个要看的就是纠缠熵如何，“纠缠熵怎么样？”，“纠缠熵大不大？”，“纠缠熵和 D 怎么标定？”这样的话，在 DMRG 从业人员的日常交流中，已经平常到“你吃了么？”，“你家孩子几岁了？”，“今天天气，哈哈……”这样的见面寒暄用语的程度了。

不过在这篇文章里，出于笔者个人的行业积习，我们谈谈纠缠熵在空间维度 $d=2$ 的量子多体系统中，如何通过蒙特卡洛计算得到，以及得到的结果反映了什么普适规律。当然，最重要的是，纠缠熵与秋裤到底是什么关系。

3 秋裤的算法

其实纠缠熵之所以能够在 DMRG 这类计算中生根发芽，主要是因为这些计算可以得到量子多体系统的波函数 (起码是波函数很高程度的近似)，有了波函数，自然可以套用上面所说的公式，直接计算系统的约化密度矩阵和纠缠熵。但是对于空间维度 $d=2$ 和更加高维的晶格系统，如正方、三角、Kagome 等晶格的 Hubbard 模型和海森伯模型等等，面对系统中自由度指数增加的问题 (常常也称为“指数墙”问题)，此时还想要普遍性地写出系统的波函数，就勉为其难了。取而代之的，是通过统计物理的方法，在 $d+z$ 维度的相空间中 (d 为系统的空间维度， z 为系统的“时间”维度，其实 z 有一个学名，叫做动力学临界指数，在我们讨论的问题里，很多时候 $z=1$ ，也就是大家常常听到的那句其实是有错误的话“量子系统就是 $d+1$ 维的经典系统”的由来)，进行满足系统统计规律的蒙特卡洛抽样，才有可能以代数增长的计算复杂度，克服指数增长的物理问题自由度，获得对于量子多体系统的严格结论。

那么问题就来了，既然量子蒙特卡洛是解决 $d=2$ 的量子多体系统的不二法门，怎么用蒙特卡洛的方法计算纠缠熵呢？办法自然是有的，这就是秋裤登场的地方。不过我们还是以 $d=1, z=1$ 的量子多体系统为例 (比如上文中的 $s=1/2$ 海森伯自旋链) 来说明秋裤的算法吧，如图 2 所示 (此处当然也可以画一个空间维度 $d=2$ 的晶格，不过那样卷成的秋裤就太后现代了，还是一维比较清楚)，长度为 L ，温度为 T (“时间”长度 $\beta=1/T$) 的量子多体系统的配分函数，可以用图 2 分母中的一个长为 L 的圆筒表示，圆筒的周长就是系统的时间维度 β ，之所以卷起来是周期性边界条件的意思。如此系统的配分函数和种种物理可观测量，其蒙特卡洛计算自然是不在话下^[2]。问题是纠缠熵需要把系统两分 (bipartition，当然实际计算中可能不止两分而是多分) 为子系统 A 和其补集，就是 $L=A+\bar{A}$ 。然后刻画系统内子系统之间的纠缠。

其实通过简单的推导 (比如在文献[1]中)，如是的以约化密度矩阵写出的纠缠熵：

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln \text{Tr}(\rho_A^q),$$

可以转化为用配分函数写成

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln \left(Z_A^{(q)} / Z_{\emptyset}^{(q)} \right),$$

其中 $q=2$ 就是图 2 所示的，我们关心的 2 阶 Renyi 纠缠熵， $S_2(A) = -\ln(Z_A^{(2)} / Z_{\emptyset}^{(2)})$ ，而 \ln 里面分子上的 $Z_{\emptyset}^{(2)} = Z^2$ ，就是系统不两分时配分函数的平方 (此时子系统 A 为空集 \emptyset)。 \ln 里面分子上的 $Z_A^{(2)}$ ，就是我们喜欢的秋裤构型的配分函数。其中裤裆部分的空间维度就是子系统 A ，其时间上的周期为 2β ；裤腿部分的 A 的补集，其时间周期为 β 。

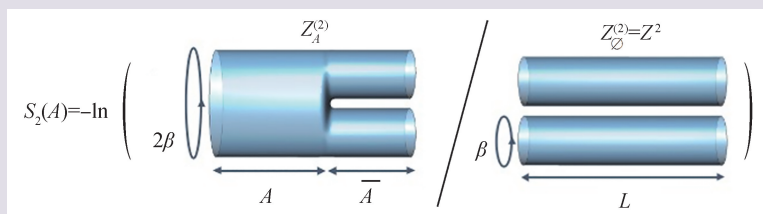


图 2 $d=1, z=1$ 的量子多体系统，2 阶 Renyi 纠缠熵 $S_2(A)$ 的秋裤表示。系统本身的配分函数 Z 就是一个长为 L 的圆筒，筒的周长是 β 。现在为了计算纠缠熵，需要把 Z 平方一下，就是 \ln 里面分母中的 $Z_{\emptyset}^{(2)} = Z^2$ ，其中的 \emptyset 是空集的意思，就是系统不两分，子系统 A 为空集。而 \ln 里面分子上的 $Z_A^{(2)}$ ，就是我们所说的秋裤构型或者秋裤配分函数。这个配分函数的裤裆就是子系统 A ，具有时间周期 2β ；裤腿就是 A 的补集 \bar{A} ， $L=A+\bar{A}$ ，时间周期为 β 。2 阶 Renyi 纠缠熵 $S_2(A) = -\ln(Z_A^{(2)} / Z_{\emptyset}^{(2)})$

因为我们此处讨论的是2阶 Renyi 纠缠熵，所以秋裤有两条腿。如果是3阶、4阶的话，那就会有3条、4条腿甚至更加复杂联通的秋裤了，是给外星生物穿的了。

图2中描述的，就是这样的一个2阶 Renyi 纠缠熵的秋裤表示。一旦可以写出配分函数，不管其形状多么奇怪，后面的蒙特卡洛抽样等等就有章可循了。重要的是有秋裤这样一个清晰的意象。当然算法的发展，也经历了颇为曲折的过程，而且还在不断优化之中，从最早的、略显尴尬的在蒙特卡洛中硬要 DMRG 上身的 Swap 算符^[3]，到后来的运用非平衡抽样的手段，优化配分函数比例的统计质量^[4]等等，更加简便和鲁棒的计算窍门，正在不断向前推进。但是正是拜秋裤的意象所赐，蒙特卡洛从业人员可以从配分函数入手计算纠缠熵(其实也不止纠缠熵了，而是以其为代表的广泛的非局域测量方法，如威尔逊环(Wilson loop)，无序算符(disorder operator)等等，后文会有提及)，这样的视角在技术上对蒙特卡洛从业人员来说，比纠结于波函数的方法更加可亲，也更容易在不同的模型中程序实现。可以想见在不久的将来，随着计算方法的普及，量子蒙特卡洛的从业人员讨论起纠缠熵的时候，也可以像我们的 DMRG 同行那样稀松平常，“今天天气，哈哈哈……”了。

4 秋裤的应用

有了通过秋裤配分函数计算 Renyi 纠缠熵的方法，我们就可以谈谈纠缠熵作为物理可观测量，在量子多体问题中揭示了什么普遍性的规律。其实很多读者都听说过纠缠熵要满足面积律(area law)，就

是说

$$S(A) = al_A + \dots,$$

其中 l_A 就是上文提到的子系统的边界，也就是 $d-1$ 维度的面积。可见纠缠熵和被分开的子系统之间交界的面积成正比，这是对于纠缠熵的 leading 贡献，是十分自然的结果。但是其实人们真正关心的，是上面公式中的省略号，也就是纠缠熵中 sub-leading 的贡献，正是这里深藏着量子多体系统中的种种奥秘。

当然这方面的讨论也非常多，比如可以参见综述文献[5]，笔者在此仍是从个人的行业积习出发，略论纠缠熵在 $d=2$ 的量子多体系统中如下几个方面的应用。

4.1 对称性破缺系统中的应用

众所周知，作为量子多体理论的核心支柱之一，朗道—金兹堡—威尔逊理论框架，通过对系统序参量的对称性和对称性自发破缺过程的刻画，成功地描述了大量凝聚态物理学中的物质的相与相变。比如超导体、超流体、量子磁体等等。在对称性，尤其是连续对称性发生自发破缺之后，系统除了进入如是的超导、超流、反铁磁相之外，还有伴随着序参量出现的无能隙的激发模式，所谓戈德斯通模(Goldstone mode)，这些模式告诉人们在连续对称性自发破缺的系统中，应该有的低能准粒子谱。这样的谱，

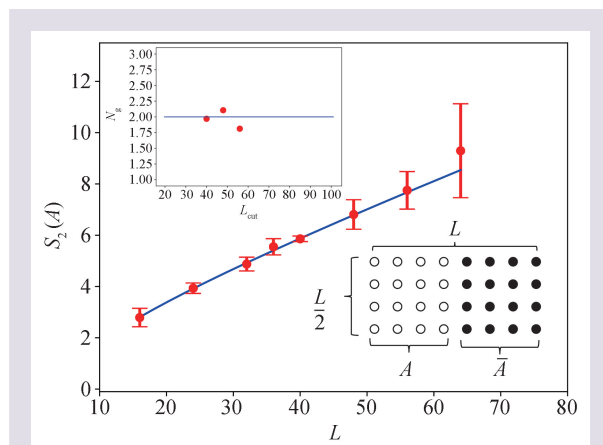


图3 $d=2$ 维正方晶格反铁磁海森伯模型2阶 Renyi 纠缠熵的量子蒙特卡洛计算结果。系统的几何结构如右下插图所示，子系统 A 与其补集 \bar{A} 之间的边界长度就是 $l_A=L$ 。拟合计算所得的结果，得到纠缠熵中 \ln 修正项的系数收敛到 $N_g=2$ 的平台，这正是反铁磁的 Néel 态中应该具有的 Goldstone mode 数目

就是如中子散射、核磁共振等现代谱学手段研究量子磁性、常规和非常规超导体等等系统的理论依据^[2]。

那么纠缠熵在这样的系统中，如何应用呢？秘密还是藏在那个省略号之中。原来对于连续对称性自发破缺的系统，其纠缠熵满足这样一个形式：

$$S(A) = al_A + \frac{N_g}{2} \ln(l_A) + b,$$

此处的省略号…化身成为一个 \ln 修正项与一个常数，而 \ln 修正项前面的系数 N_g ，不是别人，正是 Goldstone 模式的数目^[6]。这是一个很有意思的结果，它告诉人们当对称性发生自发破缺之后，系统内部的量子纠缠其实是与系统中存在的激发模式的数目有关系。

图3所示的就是2维正方晶格反铁磁海森伯模型中2阶 Renyi 熵的量子蒙特卡洛计算结果。此处为了不引入子系统角落(corner)的贡献，我们将几何结构为 $L \times L/2$ 的系统在面包圈上分为两节，如图3中的右下插图所示， A 与其补集 \bar{A} 之间的边界 $l_A=L$ ，然后用秋裤的算法，计

算了不同长度 $L = 16, 32, 48, 64 \dots$ 之下的系统的纠缠熵。再对得到的数据进行按照上面公式的拟合, 可以看到, 当 L 大于 16 之后, 数据已经可以很好地用如上公式拟合了, 并且得到了 \ln 修正前面的系数, 稳步地收敛到 $N_g = 2$ 的平台, 而对于具有 $SU(2)$ 自旋旋转对称性的反铁磁海森伯模型, 其奈尔(Néel)态中的自旋波(Goldstone mode)的数目, 就

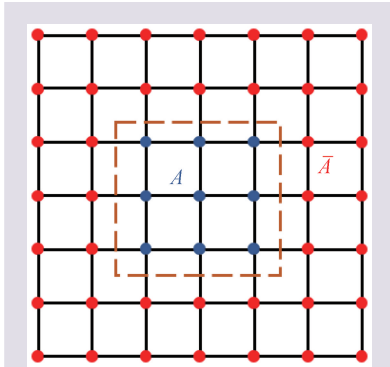


图4 此处子系统 A 为正方晶格中的一个蓝色方块, 这样 A 与其补集之间就具有了四个呈直角的角落。当如此的正方晶格的横场 Ising 模型发生量子相变时, 纠缠熵中面积律 leading 项的系数具有普适的形式, 体现了量子相变的关联长度指数。sub-leading 项的贡献也具有普适的 \ln 形式, \ln 前面的系数可以通过解析与数值配合计算得到, 见文献[7]

是 2。秋裤纠缠, 诚不我欺也!

4.2 量子临界现象中的应用

下面再说说秋裤在空间维度 $d=2$ 的量子临界现象研究中的应用。我们讨论 $d=2$, 动力学临界指数 $z=1$ 的量子临界点。比如上文所说的反铁磁 Néel 态到顺磁态的相变(对于 2 维正方晶格, 这样的相变应该发生在零温), 比如 2 维横场伊辛(Ising)模型在零温时从 Ising 态到被横场极化态的相变等等。

在这些量子相变点上, 如果子系统 A 与其补集的交界具有如图 4 所示的 4 个 90° 的棱角, 那么此时的纠缠熵满足如下公式:

$$S(A) = a_1 l_A + s \ln(l_A) + a_0,$$

也是面积律 leading 项, \ln 修正项再加一个常数。此处有趣的是, 面积律的系数 a_1 , 当横场 h 向相变点 h_c 调节时, 满足 $(a_1(h) - a_1(h_c)) \sim (h - h_c)^\nu$ 的幂指数行为, 而此处的 ν 就是量子相变的关联长度指数(比如 $d=2, z=1$ 的横场 Ising 模型, $\nu=0.63$)。而在相变点上得到的 \ln 修正的系数 $s = 4s_{\text{corner}}$, 就是 4 倍的角落贡献。每个角落的贡献, 又可以从系统对应的高斯不动点上做严

格的解析计算, 计算所得的每个角落的贡献是 $s_{\text{corner}} \approx 0.06$, 所以此式中的 $s = 4s_{\text{corner}} \approx 0.24$ 。

这样的结果都被量子蒙特卡罗模拟所证实。在文献[7]中, 我们计算了如是的横场 Ising 的无序算符 X_A 。此处请允许笔者简介何谓无序算符, 以及这个算符和纠缠熵的关系。

无序算符是一种新的非局域关联函数, 它是设计来探测一种更加广义的对称性——高型对称(higher-form symmetry)或者范畴对称性(categorical symmetry)——及其破缺和临界点上的标度行为的。而高型对称或者范畴对称性之所以被提出, 背后的动机是想在一个统一的框架之下, 把满足朗道—金兹堡框架的物质形态和满足长程量子纠缠的拓扑序物质形态完整地描述^[8-11], 尝试建立起一个新的理论体系。这方面的研究刚刚开始, 所牵涉的知识也远远地超出了本文的范围。但是可以讲的是无序算符探测的就是 1-form symmetry 及其破缺, 而传统的朗道—金兹堡框架下的序参量探测的就是 0-form symmetry 及其破缺。通过对无序算符进行量子蒙特卡罗计算和量子场论的解析分析, 已经在 $d=2, z=1$ 的 Ising 量子临界点^[7, 12], XY 量子临界点^[13, 14]上取得确定性的结果。

无序算符其实与纠缠熵都是非局域的关联函数, 在此处讨论的 2+1 Ising 量子临界点上, 它其实就是图 4 中的子系统 A 所有的自旋算符 s^x 的连乘(模型中的 Ising 相互作用项是 $s^z s^z$), 即 $X_A = \prod_{i \in A} s_i^x$, 更有意思的是, 可以证明在如是相变的高斯不动点上, 2 阶 Renyi 纠缠熵就是 $S_2(A) = -\ln(X_A)$, 所以通过

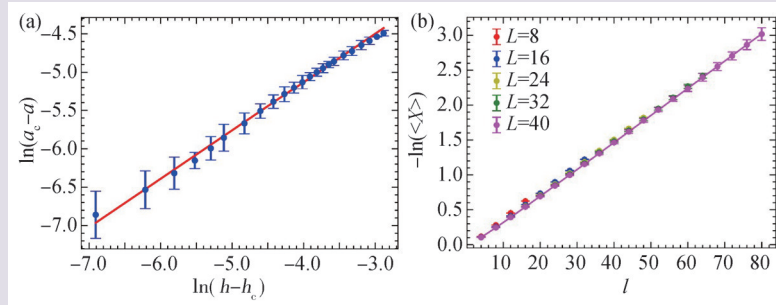


图5 (a) 2 阶 Renyi 纠缠熵(其实是无序算符)面积律系数随着 h 向相变点 h_c 靠近, 呈现幂指数的行为, 在双对数坐标下为直线, 其斜率即为幂律, 图中红线为用 2+1 Ising 相变关联长度指数 $\nu=0.63$ 所画的示意线, 与数据高度吻合; (b) 2 阶 Renyi 纠缠熵(其实是无序算符)在量子相变点上的数据拟合, 按照文中的公式, 可以得到 \ln 修正项前面的系数, 与高斯不动点解析计算预期吻合^[7]

无序算符的蒙特卡洛测量(此处为等时测量,比纠缠熵的秋裤配分函数更加容易计算)就可以直接得到2阶Renyi纠缠熵。

图5是通过无序算符计算得到的纠缠熵结果。其中图5(a)是面积律系数 $(a_1(h) - a_1(h_c)) \sim (h - h_c)^\nu$ 的行为,可以看到在双对数坐标下,当横场逐渐靠近 $h_c = 3.044$ 时, $a_1(h) - a_1(h_c)$ 确实满足幂指数函数形式,而且其幂次就是图中的红线 $\nu = 0.63$ 。图5(b)是在相变点 $h_c = 3.044$ 上拟合无序算符的面积律+ln+常数的函数形式,通过拟合不同的系统尺寸,我们得到了如下结果:

$$S_2(A) = -\ln(X_A) = 0.0394(4)l_A - 0.026(5)\ln(l_A) - 0.0158(8),$$

其中的ln修正前面的系数,在误差之内0.026(5)与高斯不动点上的计算 $s = 4s_{corner} \approx 0.24$ 在误差范围内吻

合。这些在 $d = 2, z = 1$ 的Ising量子相变点上的结果,又是一个秋裤纠缠熵于微末处揭示量子相变本质内容的成功案例。

5 且待秋裤的来日

行文至此,我们讨论了纠缠熵面积律的物理意义,讨论了纠缠熵ln修正项所包含的物理意义,其实纠缠熵最后那个常数包含的也许是更加深刻的物理意义,尤其在传统的量子多体局域测量无能为力的地方。比如在超越朗道一金兹堡一威尔逊框架的,具有真正长程量子纠缠的拓扑序系统中,纠缠熵中最后的常数,其实告诉人们如是拓扑序的任意子统计的具体性质,这方面的量子蒙特卡洛计算与其他多体计算,比如对于晶格模型量子自旋液体种类的判断,正是领域发展的前

沿。可见一条秋裤,寄托了人们多少深刻的情愫啊。这方面的内容,篇幅所限,我们且待来日吧。

要之,量子多体的潮流,浩浩荡荡。秋裤的计算初看并不起眼,但是却能够从微末中发掘出量子多体系统独有的纠缠特性,从对称性破缺到量子相变再到拓扑序等等,超越了长期以来人们所习以为常的测量方式,打开了许多新的方向:如其在拓扑序系统中的应用,还有与无序算符这样尝试统一朗道一金兹堡和拓扑序的范畴对称性非局域测量方法的互动等等。这些规律性的内容都值得愿意思考的人们反复琢磨、体会和发掘,全身心地投身于其中,新的发现是可以预期的。最后开个玩笑,套一句一百年前的宣传语收束此篇,那就是我们有理由相信:“试看将来的量子多体纠缠,必是秋裤的世界。”

参考文献

- [1] Calabrese P, Cardy J. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2004, 2004: P06002
- [2] 孟子杨. 海森伯模型的谱,到底有多靠谱? *物理*, 2018, 47(9): 595
- [3] Hastings M B, González I, Kallin A B *et al.* Measuring Renyi entanglement entropy in quantum Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, 104: 157201
- [4] D'Emidio J. Entanglement entropy from nonequilibrium work. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, 124: 110602
- [5] Laflorencie N. Quantum entanglement in condensed matter systems. *Physics Reports*, 2016, 646: 1
- [6] Metlitski M A, Grover T. Entanglement entropy of systems with spontaneously broken continuous symmetry. 2011, arXiv: 1112.5166
- [7] Zhao J R, Yan Z, Cheng M *et al.* Higher-form symmetry breaking at Ising transitions. 2020, arXiv: 2011.12543
- [8] Nussinov Z, Ortiz G. Sufficient symmetry conditions for topological quantum order. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 2009, 106: 16944
- [9] Gaiotto D, Kapustin A, Seiberg N *et al.* Generalized global symmetries. *J. High Energ. Phys.*, 2015, (2): 172
- [10] Ji W T, Wen X G. Categorical symmetry and noninvertible anomaly in symmetry-breaking and topological phase transitions. *Phys. Rev. Research*, 2020, 2: 033417
- [11] Kong L, Lan T, Wen X G *et al.* Algebraic higher symmetry and categorical symmetry: A holographic and entanglement view of symmetry. *Phys. Rev. Research*, 2020, 2: 043086
- [12] Wu X C, Ji W J, Xu C K. Categorical symmetries at criticality. 2020, arXiv: 2012.03976
- [13] Wang Y C, Cheng M, Meng Z Y. Scaling of disorder operator at (2+1)d U(1) quantum criticality. 2021, arXiv: 2101.10358
- [14] Wu X C, Jian C M, Xu C K. Universal features of higher-form symmetries at phase transitions. 2021, arXiv: 2101.10342