

量子相变与几何相位*

朱诗亮†

(华南师范大学物理与电信工程学院 光子信息技术广东省高校重点实验室 广州 510631)

(美国密歇根大学物理系 光学相干及超快科学中心 理论物理中心 美国)

摘要 量子相变是凝聚态物理中的重要研究课题,而几何相位的发现是近几十年来量子力学中的重要进展,它们毫无关联地各自发展.但最近的研究表明,它们之间有密切联系:多体体系基态的几何相位在量子相变点附近具有标度性;不可收缩的几何相位可用来作为量子相变的标志等.文章将介绍最近在量子相变和几何相位的关系方面的研究进展,并用 XY 自旋链模型来详细说明.这些结果应会吸引凝聚态和几何相位领域工作的研究人员的关注和兴趣.

关键词 量子相变,几何相位,XY 自旋链

Quantum phase transitions and geometric phases

ZHU Shi-Liang†

(School of Physics and Electronic Communication Engineering, Laboratory of Photonic Information Technology, South China Normal University, Guangzhou 510631, China)

(Department of Physics, Michigan University, USA)

Abstract Quantum phase transition is one of main interests in the field of condensed matter physics. Similarly, geometric phases arrest considerable interest in the field of quantum mechanics. However, no any relevant relation was recognized before recent work. In this communication, we mainly introduce the recent results on the connections between quantum phase transitions and geometric phases: a non - contractible geometric phase is a signature of quantum phase transitions, especially all key ingredients of quantum criticality are present in geometric phases of the ground state. These results may arrest interest from both communities.

Keywords quantum phase transitions, geometric phases, XY spin chain

1 引言

量子相变是凝聚态物理中最重要的研究内容之一^[1,2].普通的热力学相变是指在有限温度下发生的由于热力学涨落而引起的系统整体性质的改变.而量子相变是发生在绝对零度并由量子涨落驱动产生的相变.在相变点附近,体系的外参数有很小的改变就能导致体系的物理性质有本质改变.近年来引起广泛研究的量子相变例子有高温超导体中因掺杂引起的相变,光子晶格中观察到的超流 - Mott 绝缘体相变,量子霍尔效应及量子磁性材料等.另一方

面,相位因子可以认为是量子力学中最重要和最本质的概念之一,是所有量子相干现象的基础.相位因子近几十年研究的重要进展之一是由 Berry 发现几何相位的经典文章^[3]引发的. Berry 发现,当体系的哈密顿量在参数空间中绝热循环演化时,除动力学相位外,波函数还会积累一几何相位. Berry 发现的绝热几何相位及其推广已被证明在包括量子计算^[4]和凝聚态物理等的物理学各个领域有重要应用^[5-7].

* 国家自然科学基金(批准号:10204008)、教育部“新世纪优秀人才支持计划”资助项目

2006-03-06 收到初稿,2006-04-21 修回

† Email: shilzhu@yahoo.com.cn

量子相变和几何相位各自都是物理学中的重要研究课题,但两者之间的密切联系只是最近才发现.2005年,剑桥大学的Carollo和Pachos指出,自旋链中的几何相位和量子相变有密切的关系^[8].特别是他们发现在XX自旋模型中,当参数空间中的回路足够小时,基态和激发态的几何相位差当且仅当在量子相变点是非平庸的.进一步,他们提出这个特性可作为判断量子相变发生的标记.这些工作作为量子相变和几何相位两个重要课题之间架起了桥梁.

我们最近发表的文章^[9]在上述工作基础上作了进一步的研究.(1)发现基态的几何相位及其微分的特性是更好的量子相变标志.指出不可收缩的基态几何相位本身也可作为量子相变点的标志;这个结果被Hamma在几乎和我们同时但独立地发现,并给出相当普遍情况时的证明^[10].(2)Carollo和Pachos的研究方法有很大局限性.以XY自旋链为例,XY模型中有两条相变线,他们的工作只能用来解释其中没那么重要的三级相变线,很难用来解释另一重要的二级相变线.(3)更有趣的结果是,我们发现基态的几何相位在相变点附近具有标度行为,并且相变的其他重要特性都存在于基态的几何相位中.(4)给出了Berry曲率和相变的关系.这个推广说明在XY模型中发现的相变和几何相位的关系并不是该系统的特性,而是多体体系的一般特征.实际上,几何相位与量子相变联系后面的物理图像是简单清晰的:量子相变点附近的物理性质随参数的微小改变而有剧烈变化,这来源于基态波函数在相变点附近的突变;任何关于体系基态波函数的解析“泛函”都可能在相变点出现奇异或标度行为.因此,这里讨论的体系基态波函数的几何相位出现上述量子相变特征是很自然的结果.但是,由于几何相位在许多物理领域中的广泛应用,单独把它从一般的体系基态波函数的解析“泛函”中挑选出来,研究它和量子相变的关系仍是有意义的课题.下面更详细介绍这些结果.

2 Berry 曲率和量子相变

下面考虑一个哈密顿量是 $H(\eta)$ 的量子多体体系, η 是无量纲的耦合常数.一般情况下,该体系的基态性质都是参数 η 的光滑函数.但是,可能存在某些特殊的点 η_c ,在零温时,基态的某些物理性质在 η_c 点是非解析函数. η_c 就是量子相变点.量子相

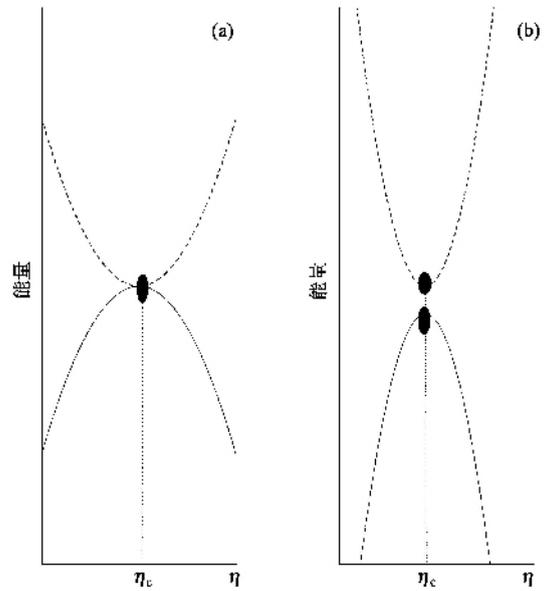


图1 多体体系的能级示意图(a)基态能级在 η_c 点和激发态能级简并(b)基态能级和激发态能级在 η_c 点避免简并.从相变角度来看 η_c 是可能的量子相变点;从几何相位的角度来看 η_c 点的Berry曲率是发散或极值点

变的重要特点是,非解析性质只发生在基态和激发态的能级简并或避免简并点(图1).同样考虑一个一般的多体量子体系的几何相位.体系的哈密顿量因参数 R 依赖于时间而随时间变化.体系的波函数随时间的演化由薛定谔方程描述.瞬时本征波函数可由方程 $H(R)|n(R)\rangle = E_n(R)|n(R)\rangle$ 决定,这里 $|n(R)\rangle$ 是哈密顿量 $H(R)$ 的本征值为 $E_n(R)$ 的本征函数. Berry在他提出几何相位的经典文献^[3]中证明,对某一本征态的波函数,如我们这里最关心的基态波函数 $|g\rangle$,当哈密顿量随参数的变化在参数空间演化一闭合回路时,基态波函数积累的几何相位可表示成参数空间中Berry曲率的面积分,其中Berry曲率 $V_g(R)$ 定义为:

$$V_g(R) = \text{Im} \sum_{n \neq g} \frac{\langle g | \nabla_R H | n \rangle \langle n | \nabla_R | g \rangle}{(E_n - E_g)^2}, \quad (1)$$

这里的分母清楚表示Berry曲率在参数空间的能级简并点一般是发散的,另外在能级避免简并点往往取极值.量子相变通常发生在基态和激发态能级的简并点或避免简并点,而这两种能级结构在Hilbert空间有特殊的几何性质,并能在对几何相位的研究中反映出来.几何相位可用Hilbert空间的Berry曲率积分来表示,因此,Berry曲率发散或极值点往往也是量子相变点.这表现了几何相位和量子相变的

密切关系. Berry 曲率本身是规范不变量,是物理可观察量,但实验上一般测量的不是 Berry 曲率,而是几何相位.因此,下面我们用一维 XY 自旋链为例来讨论量子相变和几何相位的关联. XY 模型有精确解,同时又复杂到有非常丰富的结构,是一个用来检验新物理思想的很好基准.

3 XY 自旋链模型

XY 自旋链模型是在外场下由 N 个自旋 $1/2$ 粒子组成的自旋链.自旋链中最近邻的粒子之间有相互作用.系统的哈密顿量由下式表示:

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

这里 $M=(N-1)/2$, σ_j^μ ($\mu=x, y, z$) 是第 j 个自旋粒子的泡利算符,参数 λ 表示沿 z 轴方向的磁场强度, γ 代表了 x - y 平面中相互作用的各向异性. XY 模型包含了两个应用广泛的自旋模型: $\gamma=1$ 时被称为 Ising 模型; $\gamma=0$ 时被称为 XX 模型(各向同性的 XY 模型).

XY 模型中的量子相变在参数 (γ, λ) 空间中分为两个区域(1)由 $\gamma=0, \lambda \in (0, 1)$ 描述的三级相变线段(2) $\lambda_c=1$ 给出的二级相变线.对不同的各向异性参数 $\gamma, \lambda_c=1$ 描述的相变线还可分为两种不同的相变普适类.临界性质可由临界指数来刻画,其中最重要的临界指数 ν 由关联长度 ξ 在临界点附近的渐近行为来决定:即 $\xi \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu}$.当 $\gamma \neq 0$ 时, $\lambda_c=1$ 相变线属于以 $\nu=1$ 为特征的 Ising 相变普适类;当 $\gamma=0$ 时, $\lambda_c=1$ 相变点是以 $\nu=1/2$ 为特征的 XX 相变普适类.

为了方便地研究 XY 模型的几何相位,我们引入绕 z 轴旋转 ϕ 角度的新哈密顿量,即 $H_\phi = U_\phi H U_\phi^\dagger$, 这里 $U_\phi = \prod_{j=-M}^M \exp(i\phi \sigma_j^z/2)$. 因体系的能谱(见下面定义的 Λ_k, Λ_ϕ)不依赖于参数 ϕ , 故由哈密顿 H 和 H_ϕ 描述的体系的临界性质是一样的.通过 Jordan-Wigner 变换, XY 自旋链可完全等价成一维无自旋且无相互作用的费米子体系.后者的哈密顿量为 $H = \sum_k \Lambda_k (c_k^+ c_k - 1)$ 其中 c_k^+ 和 c_k 分别是费米子的产生和消灭算符, $\Lambda_k = \sqrt{[\lambda - \cos(2\pi k/N)]^2 + \lambda^2 \sin^2(2\pi k/N)}$ 是第 k 费米子的能谱, k 的取值从 $-M$ 到 M . 体系的基态 $|g\rangle$ 是费米子的真空态,由 $c_k |g\rangle = 0$ 表示.当参数从 0

到 π 变化时(注意到表示式 U_ϕ 中的 $1/2$, 实际上在参数空间中该变化已形成一闭合路径),用计算几何相位的标准方法,可算出基态波函数会积累下面的几何相位因子^[8]:

$$\beta_g = \frac{\pi}{M} \sum_{k=1}^M (1 - \cos\theta_k), \quad (3)$$

其中 $\cos\theta_k = [\cos(2k\pi/N) - \lambda]/\Lambda_k$. $\beta_g \equiv \pi(1 - \cos\theta_k)$ 可看作 k 费米子的几何相位,是演化时参数空间中的轨迹 (θ_k, ϕ) 的立体角.但要研究量子相变时,我们需要知道热力学极限时($N \rightarrow \infty$)几何相位的性质.把(3)式中的求和 $(1/M) \sum_{k=1}^M$ 换成对 $\varphi \equiv 2\pi k/N$ 的积分 $(1/\pi) \int_0^\pi d\varphi$, 可得到热力学极限时的几何相位表达式为

$$\beta_g = \int_0^\pi (1 - \frac{\cos\varphi - \lambda}{\Lambda_\varphi}) d\varphi. \quad (4)$$

4 XY 自旋链模型中的量子相变和几何相位

为了清楚地表达量子相变和几何相位的关系,我们计算了几何相位及几何相位对 λ 的微分.计算结果中有两个性质值得特别注意(1)在整个 XY 模型中,沿相变线 $\lambda_c=1$ 几何相位的微分都出现异常,表现出清楚的非解析性特性.(2)XX 模型中除文献[8]中给出的基态和激发态的不可收缩的几何相位差可作为量子相变的特征外,基态本身的几何相位也起相同作用^[9,10],这里不可收缩性是指即使在 $(\gamma \cos\phi, \gamma \sin\phi)$ 空间中, $\gamma \rightarrow 0$ 的回路几何相位也是非平庸的^[8-10].

我们进一步用有限标度理论^[11]来研究几何相位在相变点的临界性质.有限标度理论是一种可以用有限尺寸体系的数据来计算热力学极限时的临界指数的方法.我们先用它来计算 Ising 模型的临界指数.不同自旋粒子数且 $\gamma=1$ 时的微分 $d\beta_g/d\lambda$ 如图 2 所示.在自旋粒子数 N 有限时,微分 $d\beta_g/d\lambda$ 并没有真正的发散,但在 $\lambda_c=1$ 附近的异常(尖峰)很明显,并且异常的高度随粒子数的增加而增加的趋势在图 2 中也很清楚.尖峰的位置 λ_m 可被称为赝临界点^[11],它按 $N^{-1.803}$ 的趋势趋近临界点,在 $N \rightarrow \infty$ 时的极限是 λ_c .图 3(b)是微分 $d\beta_g/d\lambda$ 在 λ_m 点的值随粒子数的对数 $\ln(N)$ 的变化图,图中的数据点都分布在一條直线上,这表明该微分的值随粒子数的增加而呈对数发散,并且可表示成为:

$$\frac{d\beta_g}{d\lambda} \Big|_{\lambda_m} \approx \kappa_1 \ln N + \text{const.} \quad (5)$$

其中 $\kappa_1 = 0.3121$. 另外, Ising 模型的微分 $d\beta_g/d\lambda$ 在粒子数无穷大时的值可解析得到, 在相变临界点附近的渐近形式可由下式表示:

$$\frac{d\beta_g}{d\lambda} \approx \kappa_2 \ln |\lambda - \lambda_c| + \text{const.} \quad (6)$$

其中 $\kappa_2 = -0.3123$. 根据对数发散时的标度假设, 比值 κ_2/κ_1 即是临界指数 $\nu^{[11]}$. 因此, 图3的数值计算结果表明, 由 Ising 模型的微分 $d\beta_g/d\lambda$ 给出的临界指数 $\nu \sim 1$ 和众所周知的结果一致. 另外, 根据标度理论, 通过适当变换后, 不同的粒子数 N 的数据会重合成同一条曲线. 我们的计算证实了这点.

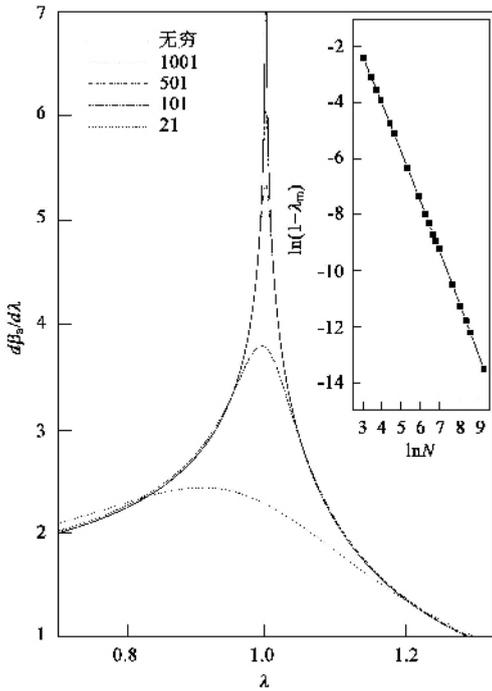


图2 Ising 模型中的微分 $d\beta_g/d\lambda$. 曲线对应于不同的自旋粒子数 $N=21, 101, 501, 1001, \infty$. 随着粒子数的增加, 最大值变得越来越尖锐. 插图显示临界点(微分 $d\beta_g/d\lambda$ 最大值)的位置 λ_m 随 $N^{-1.803}$ 的形式趋向临界值 $\lambda_c = 1$

量子相变理论的基石之一是普适性原理, 该原理是指临界行为仅由体系的维度和序参量的对称性决定. XY 模型中在参数 $\gamma \in (0, 1]$ 时是属于由临界指数 $\nu = 1$ 为特征的同普适类. 为验证普适性原理在这个模型中仍适用, 我们计算了不同参数 γ 时的标度性质, 发现渐近行为仍可由(5)(6)式表示. 这里仅举 $\gamma = 0.6$ 时的结果为例证. 在 $\gamma = 0.6$ 时的计算结果如图3所示, 其中 $\kappa_1 \sim 0.5234, \kappa_2 \sim$

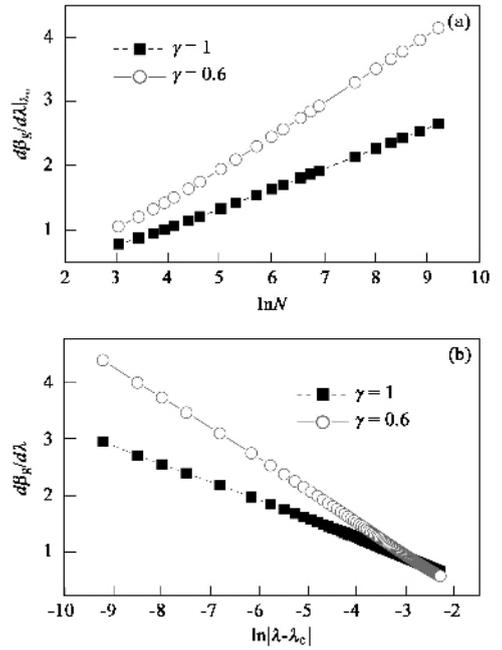


图3 (a) 在临界点 λ_m 的微分 $d\beta_g/d\lambda$ 值随粒子数的变化图. $\gamma = 1$ 和 $\gamma = 0.6$ 时的斜率分别是 0.3121 和 0.5234 (b) 热力学极限时微分 $d\beta_g/d\lambda$ 以对数发散形式趋近临界值. $\gamma = 1$ 和 $\gamma = 0.6$ 时的斜率分别是 -0.3123 和 -0.5238 . 图(a)和(b)中相同参数 γ 的斜率比值的绝对值给出了临界指数 $\nu \sim 1$. 不同参数 $\gamma (\neq 0)$ 的临界指数相同是临界现象的普适性在 XY 模型中的体现

-0.5238 . 进一步, 在适当的标度下, $\gamma = 0.6$ 时不同粒子数的数据也会重合成同一条曲线.

和 $\gamma \neq 0$ 时情况不一样, XX 模型中的微分 $d\beta_g/d\lambda$ 发散性质属于不同的临界普适类型. 几何相位的标度行为可以直接从热力学极限时的几何相位的解析表达式 $\beta_g = 2\pi - 2\arccos(\lambda)$ 得到. 直接微分该式得到 $d\beta_g/d\lambda = -\sqrt{2}(1-\lambda)^{-1/2}(\lambda \rightarrow 1^-)$. 从这里可直接得到 XX 模型中的临界指数 $\nu = 1/2$. 总之, 上述结果表明, XY 模型中基态的几何相位具有临界现象的所有主要元素.

5 未来研究方向的展望

(1) 上面阐述了 Berry 曲率和量子相变的关系, 在 XY 模型中, 发现几何相位在量子相变的临界点附近具有标度行为. 后者有理由在一般多体体系中普遍成立, 但没有证明. 如能更严格地证明几何相位的微分在一般量子相变体系中成立, 那么, 这将是这方向有意义的进展. (2) 研究量子相变的其他几

何结构. 本文的结果表明,量子相变点在 Hilbert 空间中的 Berry 曲率有特别性质. 是否 Hilbert 空间中其他的几何量也能反映量子相变的特性呢? 这方向在最近有一研究结果. 意大利的 Zanardi 和 Paunkovic 发现^[12],不同参数的基态波函数的重叠度可以用作量子相变的指标:该重叠度在量子相变点会显著减小,并且在相变点会是正交的. 他们发现基态波函数的重叠度在量子相变点附近也具有标度行为,并也可以算出类似本文讨论的相变临界指数. 这里的物理图象和几何相位与量子相变的关系类似:量子相变点附近的物理性质随参数的微小改变而有剧烈变化,此变化来源于基态波函数在相变点附近的突变,因此,在相变点附近,即使是相隔微小的两组参数的基态波函数也会正交(或趋于正交). (3) 现在的研究还主要局限在 XY 模型(主要是因为该模型有精确解,便于研究),研究其他统计模型中量子相变和几何相位的关系或讨论可行的实验方案去验证这些关系也是很有意义的方向. 最近就有人讨论了 Dicke 模型中的相关问题^[13]. 不过,在讨论一般体系时会遇到一个困难:计算体系基态波函数的几何相位的普通方法中要先知道基态波函数,而这本身是研究多体体系中最困难的问题. 在自旋波动力学研究中,不必写出体系的基态波函数,就可以直接计算出 Berry 曲率^[14]. 能否在一般体系中发展出一套类似不必调用基态波函数就能计算出几何相位的系统方法可能是相关问题的解决关键. 目前,我们正在从

事这些研究.

参 考 文 献

- [1] Wen X G. Quantum Field Theory of Many-body Systems. Oxford Oxford University Press, 2004
- [2] Sachdev S. Quantum Phase Transitions. Cambridge(U K): Cambridge University Press, 1999
- [3] Berry M V. Proc. R. Soc. London A, 1984, 392 :45.
- [4] 朱诗亮,汪子丹. 物理, 2004, 33 :242 ;2005, 34 :706. [Zhu S L, Wang Z D, Wuli(Physics), 2004, 33 :242 ;2005, 34 :706 (in Chinese)]
- [5] Shapere A, Wilczek F. (Ed.) Geometric Phases in Physics. Singapore : World Scientific, 1989
- [6] 李华钟. 简单物理系统中的整体性. 上海 :上海科学技术出版社, 1998[Li H Z. Global properties in the simple physical systems. Shanghai : Shanghai scientific & Technical Publishers, 1998(in Chinese)]
- [7] Bohm A, Mostafazadeh A, Koizumi H *et al.* The Geometric Phase in Quantum Systems. New York : Springer, 2003
- [8] Carollo A C M, Pachos J K. Phys. Rev. Lett., 2005, 95 : 157203
- [9] Zhu S L. Phys. Rev. Lett., 2006, 96 :077206
- [10] Hamma A. quant-ph/0602091
- [11] Barber M N. In Phase Transition and Critical Phenomena. Ed Domb C, Lebowitz J L. London : Academic Press, 1983. 8 : 145
- [12] Zanardi P, Paunkovic N. quant-ph/0512249
- [13] Plastina F, Liberti G, Carollo A. quant-ph/0604011
- [14] Niu Q *et al.* Phys. Rev. Lett., 1999, 83 :207

· 物理新闻和动态 ·

失重条件下的气泡坍塌

最近位于瑞士洛桑的 EPFL 实验室的 P. Kobel 博士和他的同事们对单个气泡的行为开展了一系列的工作,特别是研究气泡在平坦或弯曲表面下的坍塌. 他们希望能观察到球形水滴内气泡是如何与球表面发生作用的,但非常遗憾,在实验室条件下无法做到,由于水滴的大小是厘米量级,所以在重力的影响下,液气的界面成为一个平坦的表面. 为此他们将实验安置到欧洲空间通讯飞船(European Space Agency aircraft)的舱内,因为飞船在上升与下降的飞行过程中有将近 20 s 的失重时间. 可以利用这段时间进行失重条件下的气泡坍塌实验.

实验的具体步骤如下:先通过一个特殊的管子缓慢地排出水滴,再利用安放在水滴内的二个薄电极产生火花放电,让水滴内生成气泡. 在微重力的条件下,他们得到了厘米量级的球形水滴,并用高速 CCD 摄像机将过程记录下来. 通过这项实验,研究组获得了几个意想不到的结果,他们发现气泡并不是在水滴的中央生成,而是在一侧,其次发现气泡的坍塌具有螺旋对称性,最后还看到当气泡从水滴中逃逸时会形成两注方向相反的射流. 这是科学家们第一次能看到由气泡所引起的射流是如何从稳定的流体中喷射出来的. 除此以外,研究组还注意到有亚毫米大小的微小“喷雾”存在,这种喷雾常出现在空穴化现象中. Kobel 等科学家们认为,由于溶解在液体的空气以及微量的杂质中,在火花放电和激波的作用下才形成了亚毫米气泡,这些亚毫米气泡正是空穴化的本身. 所以研究组进一步从理论上测算激波的能量和气泡在小体积内可存在的寿命等问题.

这组新的实验和计算结果与工业系统有很大的关系,同时也会对超新星的球形坍塌与激波在流体球内传播状态间的关联给出新的启示.

(云中客 摘自 Physical Review Letters, 1 Sept. 2006)