



中国科学院大学  
University of Chinese Academy of Sciences

# 博士学位论文

## 路径积分方法在强关联电子系统中的应用

作者姓名: 董建军

指导教师: 杨义峰 研究员

中国科学院物理研究所

学位类别: 理学博士

学科专业: 理论物理

培养单位: 中国科学院物理研究所

2021 年 12 月



**Path integral approach in strongly correlated electronic systems**

---

A dissertation submitted to  
University of Chinese Academy of Sciences  
in partial fulfillment of the requirement  
for the degree of  
Doctor of Philosophy  
in Theoretical Physics  
By  
**Dong Jianjun**

**Supervisor: Professor Yang Yifeng**

**Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences**

**December, 2021**



## 中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：

日 期：

## 中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延期后适用本声明。

作者签名：

导师签名：

日 期：

日 期：



## 摘要

强关联电子系统中的各种新奇物理，如莫特转变、巨磁阻效应、分数量子霍尔效应、高温超导、重费米子等吸引了人们的长期关注。在这类体系中，电子之间的强烈相互作用使得基于单电子近似的传统能带理论和基于小量展开的微扰理论失效。因此发展新方法来处理强关联电子体系中的各种平衡及非平衡物理是一个重要的前沿基础课题，而这也是本文的研究目的。

本论文可以分为两部分，第一部分中我们发展新方法来研究平衡态量子相变，第二部分中我们发展新方法来研究非平衡的动力学量子相变。

重费米子系统是研究得最广泛的强关联电子系统之一。长期以来，人们对重费米子物理的理解主要来自平均场理论所提供的静态杂化图像。该图像认为局域电子在特征温度  $T_K$  之下才开始发生局域-巡游转变进而与传导电子发生杂化形成重费米子能带。虽然平均场理论的图像简单直观，但它忽略了杂化涨落和杂化关联，这导致平均场理论中的有限温局域-巡游转变是一个相变过程，与实验中观测到的渐变行为不符。针对这一问题，我们发展了静态辅助场近似方法来研究重费米子系统中的杂化涨落效应，进而结合最近提出的互信息神经网络算法来揭示杂化关联。当我们把新方法应用到两杂质近藤模型中时，我们得到了正确的渐变行为，表明新方法确实能够有效地处理杂化涨落。此外，我们发现杂化场的振幅互信息在“Varma-Jones”不动点处随温度降低对数发散，表明振幅互信息可以揭示零温的量子相变及其量子临界性质。在近藤效应占主导的区间，非零的相位互信息揭示了不同格点上杂化场的相位相干性与重费米子杂化图像之间的深刻联系。我们的方法可以推广到多杂质和晶格模型的研究中，希望能够为重费米子二流体唯象理论和实验中观测到的两阶段杂化过程提供微观理论支撑。

得益于实验技术的迅猛发展，除了调控温度、磁场、压力等参数来研究强关联电子系统的平衡态相变与临界现象以外，人们还可以调控时间来观察系统的非平衡性质。尤其是随着涨落关系、多体局域化、时间晶体、动力学量子相变等新奇现象的发现和概念的提出，非平衡物理吸引了越来越多科研工作者的关注。在这一领域中，量子功是一个非常重要的物理量，因为它既能描述平衡态相变的临界现象，又能描述非平衡的动力学量子相变和涨落关系。但在多体系统量子功

和动力学量子相变的研究中，传统的哈密顿量方法只局限于参数突变的情况，极大地限制了我们对非平衡物理的认识。为了能够高效地研究任意非平衡条件下的量子功和动力学量子相变，我们将路径积分理论推广到非平衡物理的研究中。作为发展方法的第一步，我们研究了任意双线性模型在任意非平衡条件下的功分布，得到了一般的解析解。当我们把新方法应用到横场伊辛模型中时，我们得到了与传统哈密顿量方法相同的结论，表明了新方法的正确性和有效性。当进一步应用到拓扑模型中时，由于拓扑性质的影响，我们发现不可逆功的标度中存在反常的  $1/N$  修正。此外，我们还比较了三种不同非平衡条件下的动力学量子相变，发现动力学量子相变的时间周期性仅存在于参数突变的情况下。最后，我们以伊辛-近藤模型为例阐述了如何将路径积分与蒙特卡洛方法结合并推广到强关联电子系统的非平衡物性的研究中。

**关键词：**路径积分，静态辅助场近似，互信息，量子功，动力学量子相变

## Abstract

The rich variety of novel physics in strongly correlated electron systems have attracted long-term attention of the community, that include Mott transition, colossal magnetoresistance, fractional quantum Hall effect, high-temperature superconductivity, heavy fermion, and so on. In these systems, due to the strong interaction between electrons, the traditional band theory based on single-electron approximation and the perturbation theory based on expansion over a small parameter do not work. Therefore, development of new methods to deal with various equilibrium and non-equilibrium physics in strongly correlated electron systems is an important, frontier, and fundamental subject. This is also the purpose of this thesis.

This thesis can be divided into two parts. In the first part, we develop a new method to study equilibrium quantum phase transitions. In the second part, we develop a new method to study non-equilibrium dynamical quantum phase transitions.

Heavy-fermion systems are arguably one of the most widely studied strongly correlated electron systems. Traditionally, the understanding of heavy-fermion physics is mainly based on the mean-field theory with a static and uniform hybridization approximation. In this theory, the localized electrons undergo a localized-to-itinerant transition below a characteristic temperature  $T_K$  and then hybridize with conduction electrons to form a heavy electron band. The mean-field theory is simple and intuitive, but it ignores the fluctuations and correlations of the hybridization fields, which results in a phase transition at  $T_K$  rather than a crossover observed in experiment. To address this problem, we propose a static auxiliary field approximation to study the hybridization fluctuations in heavy-fermion systems and use the mutual information to measure intersite hybridization correlations with the help of recently proposed mutual information neural network algorithm. When applied to the two-impurity Kondo model, we find that the artificial phase transition predicted in the mean-field approximation is suppressed, indicating that our new method can indeed capture the fluctuation effects. In addition, we find a logarithmically divergent amplitude mutual information with lower-

ing temperature near the so-called “Varma-Jones” fixed point, manifesting a quantum phase transition at zero temperature and its associated quantum criticality above the fixed point. In the Kondo regime, a large phase mutual information reveals the deep relationship between the intersite phase coherence of the hybridization fields and the hybridization picture in heavy-fermion systems. Our method can be easily extended to multi-impurity and lattice models, and we hope it will provide a microscopic theoretical support for the two-fluid phenomenological model of heavy electron physics and the two-stage hybridization scenario observed in experiment.

Due to the rapid development of experimental techniques, people can not only study equilibrium phase transitions and critical phenomena in strongly correlated electron systems by tuning parameters such as temperature, magnetic field and pressure, but also observe non-equilibrium properties in these systems by tuning time. Especially with the discovery of many novel phenomena such as fluctuation relations, many-body localization, time crystal, dynamical quantum phase transition, and so on, the study of non-equilibrium quantum physics is becoming one of the most active and exciting branches of modern condensed matter physics and has attracted intensive attention in recent years. Quantum work is arguably one of the most important quantities to characterize the non-equilibrium dynamics, because it can not only describe the critical phenomena of equilibrium phase transition, but also capture the non-equilibrium dynamical quantum phase transition and fluctuation relations. In the study of quantum work in many-body systems, a Hamiltonian approach has often been used by calculating explicitly time evolution of the quantum state for quench protocol. However, such calculations can be very involved which makes it hard to be extended to arbitrary time dependence and general correlated many-body systems, which greatly limits our understanding of non-equilibrium physics. To overcome this issue, we introduce the functional field integral approach to study the statistics of quantum work and the dynamical quantum phase transition under non-equilibrium conditions, and derive the general formalism for a bilinear Hamiltonian with arbitrary time dependence. When applied to the transverse field Ising model, it yields the same results as the traditional Hamiltonian method, which demonstrates the correctness and effectiveness of our new method. When fur-

ther applied to a topological model, we observe an anomalous  $1/N$  correction in the scale of irreversible work due to the topological nature of the quantum phase transition. Dynamical quantum phase transitions are observed for three different time evolution protocols but their time periodicity only appears in the double quench case. Finally, we take the Ising-Kondo model as an example to illustrate how to extend the path integral and Monte Carlo method to the study of non-equilibrium physics in strongly correlated electron systems.

**Keywords:** Path integral, Static auxiliary field approximation, Mutual information, Quantum work, Dynamical quantum phase transition



## 目 录

<b>第1章 引言</b>	1
1.1 强关联电子体系	1
1.1.1 基本概念和常用模型	1
1.1.2 近藤效应	2
1.2 重费米子物理	4
1.2.1 平均场理论	6
1.2.2 二流体理论	8
1.2.3 两阶段杂化图像	10
1.2.4 杂化涨落与杂化关联	11
1.3 相变	15
1.3.1 经典相变	15
1.3.2 量子相变	15
1.3.3 动力学量子相变	17
1.4 论文结构	18
<b>第2章 主要理论方法</b>	21
2.1 单粒子系统的路径积分理论	21
2.1.1 作用量	21
2.1.2 鞍点解	23
2.1.3 量子涨落	24
2.2 多体系统中的路径积分理论	27
2.3 蒙特卡洛方法	28
2.3.1 蒙特卡洛方法简介	28
2.3.2 Metropolis 算法	29
2.4 本章小结	30
<b>第3章 两杂质模型中的互信息与相位相干性</b>	33
3.1 研究背景	33
3.2 静态辅助场近似方法	34
3.3 互信息	38
3.3.1 互信息简介	38
3.3.2 互信息的神经网络算法	39
3.4 计算结果	41

---

3.4.1 相图 .....	41
3.4.2 杂化场的互信息 .....	44
3.4.3 杂化涨落和杂化关联对物理量的影响 .....	46
3.5 本章小结 .....	49
<b>第 4 章 量子功的泛函路径积分方法 .....</b>	<b>51</b>
4.1 研究背景 .....	51
4.2 量子功在多体物理中的应用 .....	53
4.2.1 临界指数 .....	53
4.2.2 动力学量子相变 .....	54
4.3 量子功的泛函路径积分表述 .....	55
4.3.1 任意非平衡条件下的量子功 .....	55
4.3.2 参数突变情况下的量子功 .....	58
4.4 模型与计算结果 .....	58
4.4.1 横场伊辛模型 .....	59
4.4.2 拓扑模型 .....	65
4.4.3 超导模型 .....	70
4.5 蒙特卡洛方法在量子功中的应用 .....	72
4.6 本章小结 .....	74
<b>第 5 章 总结与展望 .....</b>	<b>75</b>
5.1 总结 .....	75
5.2 展望 .....	76
<b>参考文献 .....</b>	<b>77</b>
<b>致谢 .....</b>	<b>91</b>
<b>作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果 .....</b>	<b>93</b>

## 图形列表

1.1 金在 1 K 到 5 K 范围内的电阻 [1]。 .....	3
1.2 近藤模型重整化流的示意图。图中 FM 代表铁磁近藤耦合，AFM 代表反铁磁近藤耦合，FL 代表费米液体 [2]。 .....	4
1.3 RKKY 相互作用示意图 [2]。 .....	4
1.4 近藤系统中的电阻。图中显示了当掺杂浓度 $x$ 不同时， $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ 中每摩尔 Ce 的电阻 $\rho = \rho(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6) - \rho(\text{LaCu}_6)$ 随温度的变化关系 [3, 4]。 .....	6
1.5 三角晶格中近藤-海森堡模型的平均场相图 [5]。 .....	7
1.6 左边：不同近藤晶格化合物中 $T^*$ 和 $T_K$ 的实验数据。右边：直线表明 $T^* = 0.45J_K^2\rho$ ，这意味着 $T^*$ 来自 RKKY 相互作用 [6]。 .....	8
1.7 二流体模型提出的相图。相干温度 $T^*$ 之下出现重的近藤液体 [7]。 ..	9
1.8 沿 $\Gamma$ - $M$ 方向，不同温度下 $\text{CeCoIn}_5$ 的 ARPES 数据 [8]。 .....	10
1.9 不同辐照光强下弛豫率 $\gamma$ 随温度的函数曲线。 $T^*$ 和 $T^\dagger$ 处有明显的反常，其中 $T^* < T^\dagger$ 。在 $T^*$ 之下， $\gamma$ 与辐照光强之间有很强的依赖关系。在 $T^\dagger$ 之上， $\gamma$ 几乎保持不变 [9]。 .....	11
1.10 传导电子占据数 $n$ 取不同值时，电阻随温度的变化关系 [10]。 .....	12
1.11 (a) 比较 $\text{Re } L_0(\omega)$ 的局域与非局域部分。(b) 基于 $L_0(\omega)$ 构建的相图。其中背景颜色反映了 $L_0(0)$ 处斜率 $K$ 的大小 [11]。 .....	14
1.12 量子临界点附近的相图示意图 [12]。 .....	16
1.13 CT-HYB 量子位形与经典分子气体的量子经典对应 [13]。 .....	17
1.14 动力学量子相变的示意图 [14]。 .....	18
2.1 从 $A(x_i, t_i)$ 点到 $B(x_f, t_f)$ 点的各种可能路径 [15]。 .....	22
2.2 实线为经典路径，虚线则为量子力学所允许的路径 [16]。 .....	24
2.3 对虚时间隔 $[0, \beta]$ 进行时间切片的示意图 [15]。 .....	27
3.1 计算互信息的神经网络示意图。 .....	41
3.2 (a) 平均场相图。(b) 比较 $p(V_1, V_2, \chi)$ 和 $p(V_1, V_2)$ 的峰值，以及平均场序参量 $ V_1 $ 的值随温度的变化，这里取 $J_K = 0.34$ （即 (a) 图中的虚线）。(c) 展示了当温度 $T = 0.001$ 时，复平面 $V_1 = (V_1^x, V_1^y)$ 上的边缘概率密度函数 $p(V_1)$ 随 $J_K$ 变化的演变过程，从左往右依次为磁性区、临界点以及近藤区。 .....	42

3.3 (a) 振幅互信息 $I( V_1 ;  V_2 )$ 随温度与近藤耦合强度的变化。右图中的插图展示了互信息最大值随温度降低而对数发散的关系，其中黑色实线是为了方便视觉查看。(b) 当温度 $T = 0.001$ 时，分布 $p( V_1 ,  V_2 )$ 在不同 $J_K$ 处的比较。 .....	43
3.4 (a) 相位互信息 $I(\theta_1; \theta_2)$ 随温度与近藤耦合强度的变化。(b) 当温度 $T = 0.001$ 时，分布 $p(\theta_1, \theta_2)$ 在不同 $J_K$ 处的比较。 .....	45
3.5 (a) 低温 $T = 0.001$ 下我们的方法 (SAF) 和平均场方法 (MF) 的电子谱函数在杂质处 ( $i = 1$ ) 和远离杂质处 ( $i = 3$ ) 的对比，费米面处的谱函数被抑制（赝能隙）表明即使在磁性区间也存在杂化涨落。(b) 三组不同 $J_K$ 处的电阻 $\rho$ 随温度的变化关系，插图展示了与平均场结果的对比。(c) 低温 $T = 0.001$ 下不同杂质间距，即 $ \mathbf{R}  = 1$ 和 8 时的相位互信息的对比。插图为平均场序参量 $\chi$ 随 $J_K$ 的变化。(d) $J_K = 0.4$ 时电阻随温度的变化，表明从单杂质极限 $ \mathbf{R}  = 8$ 到 $ \mathbf{R}  = 1$ 时，格点间相位相干性的增加会使电阻急剧下降。插图再现了 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ 在不同 $x$ 时的实验电阻率 [3]。 .....	47
4.1 两次投影测量中的量子功示意图。在初始时刻进行第一次测量，体系处于能量为 $E_n^i$ 的本征态 $ n^i\rangle$ ，经过一段时间的演化后，进行第二次测量，体系位于能量为 $E_m^f$ 的本征态 $ m^f\rangle$ ，这个过程中系统做的功为 $W = E_m^f - E_n^i$ 。 .....	52
4.2 泛函路径积分的时间围道 $C$ 。蓝色圆圈代表离散的时间点，其中 $\Delta t = T_0/M$ 。 $t = 0$ 和 $T_0$ 处的红色圆点和线表示在这些地方需要额外计算的算符。 .....	56
4.3 一维周期性边界条件的反铁磁横场伊辛模型的能级图。(a) 偶数格点 $N = 50$ ，(b) 奇数格点 $N = 51$ 。图中 $E_0$ 为基态能。 .....	59
4.4 不同逆温度 $\beta$ 下，横场伊辛模型中的参数从 $h_0 = 0.5$ 突变到 $h_1 = 2.0$ 这一单次 quench 过程中的比率函数 $r(w)$ 。(b) 为相应的功分布函数 $p(w) \sim e^{-Nr(w)}$ 。(c) 和 (d) 分别为特征函数 $G(u)$ 的实部和虚部。图中格点大小取为 $N = 20$ 。 .....	62
4.5 (a) 当格点数 $N$ 不同时，平均不可逆功密度 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随参数 $h_0$ 的变化曲线。插图为平均功密度 $\langle w \rangle / \delta$ 随 $h_0$ 的变化曲线。(b) 和 (c) 展示了在热敏感极限 ( $\delta = 0.001$ ) 下 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $N$ 和 $\lambda$ 的对数依赖关系，(b) 中 $\lambda = 0.005$ ，(c) 中 $N = 100$ 。(d) 和 (e) 展示了热力学极限 ( $N = 1000$ ) 下 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $\delta$ 和 $\lambda$ 的对数依赖关系，(d) 中 $\lambda = 0.01$ ，(e) 中 $\delta = 0.01$ 。(f) 和 (g) 展示了 $\lambda = 0.0005$ 时 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $N$ 和 $\delta$ 的对数标度律，此时 $\lambda^{-\nu}$ 是最大的特征长度，即初始系统非常靠近相变点，(f) 中 $\delta = 0.001$ ，(g) 中 $N = 1000$ 。 .....	64

---

4.6 两次 quench 过程——即从 $h_0 = 0.5$ 突变到 $h_1 = 2.0$ , 然后经过一段时间 $T_0$ 后再突变回 $h_0$ 这一过程中横场伊辛模型在零温时的比率函数 $r(w, T_0)$ 。图中格点数为 $N = 100$ 。由于 $w = 0$ 的比率函数对应 Loschmidt 回波, 其在 $T_0 = (n + 1/2)T^*$ 处的非解析性代表动力学量子相变。插图展示了平均功密度 $\langle w \rangle$ 随时间 $T_0$ 的连续变化, 没有体现出任何奇异性。 .....	65
4.7 (a) 当格点数 $N$ 不同时, 平均不可逆功密度 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随参数 $v_0$ 的变化曲线。插图为平均功密度 $\langle w \rangle / \delta$ 随 $v_0$ 的变化曲线, 当 $N$ 较小时, 曲线在 $v_0 = 1$ 处出现跃变。(b) 和 (c) 展示了在热敏感极限 ( $\delta = 0.001$ ) 下 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $N$ 和 $\lambda$ 的对数依赖关系, (b) 中 $\lambda = 0.005$ , (c) 中 $N = 100$ 。(d) 和 (e) 展示了在热力学极限 ( $N = 1000$ ) 下 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $\delta$ 和 $\lambda$ 的对数依赖关系, (d) 中 $\lambda = 0.01$ , (e) 中 $\delta = 0.01$ 。 .....	67
4.8 (a) 和 (b) 展示了当 SSH 模型靠近相变点时平均不可逆功密度 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随 $N$ 和 $\delta$ 的标度关系。其中 $\lambda = 0.0005$ , 表示 $\lambda^{-\nu}$ 是系统的最大特征长度。其他参数为: (a) 中 $\delta = 0.001$ , (b) 中 $N = 1000$ 。(a) 中的 $1/N$ 标度行为可以分解为 (c) 和 (d) 两部分, 其中 (c) 中较小的 $\ln N$ 行为来自量子临界的贡献, 而 (d) 中较大的非普适的 $1/N$ 行为则与 SSH 模型相变的拓扑性质有关。 .....	68
4.9 零温下, SSH 模型在三种不同的时间演化方案下的比率函数 $r(w, T_0)$ , 其中 $w = 0$ 。插图为当 $T_0 = 2.0$ 时 $v(t)$ 的不同演化方案。图中格点数取为 $N = 1000$ 。三种情况下的比率函数都出现了尖峰, 代表着在这些时刻发生了动力学量子相变。 .....	69
4.10 (a) 当格点数 $N$ 不同时, BCS 模型在单次 quench 过程中平均不可逆功密度 $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ 随初始序参量 $\Delta_0$ 的变化曲线。(b) 和 (c) 展示了在热力学极限下, 即 $N = 1000$ 时, 平均不可逆功密度随 $\delta$ 和 $\lambda$ 的对数依赖关系。其他参数为: (b) 中 $\delta = 0.01$ , (c) 中 $\lambda = 0.01$ 。 .....	71
4.11 两次 quench 过程——即从 $\Delta_0 = 0.0$ 突变到 $\Delta_1 = 2.0$ , 然后经过一段时间 $T_0$ 的演化后再突变回 $\Delta_0$ 这一过程中 BCS 模型在零温时的比率函数 $r(w, T_0)$ 。图中格点数取为 $N = 50$ 。与比率函数在 $T_0 = (n + 1/2)T^*$ 处出现奇异行为不同的是, 平均功密度 $\langle w \rangle$ 在动力学量子相变点处没有出现任何奇异性, 如插图所示。 .....	72



## 表格列表

2.1 Metropolis 算法: 其中第三行和第五行相等, 证明该算法满足细致平衡 条件。 .....	29
3.1 不同方法的比较。 .....	37
3.2 随机变量 $X$ 和 $Y$ 的联合概率分布 $p(x, y)$ 。 .....	39



## 符号列表

### 字符

<b>Symbol</b>	<b>Description</b>	<b>Unit</b>
$k_B$	Boltzmann constant	J/K
$\hbar$	Plank constant	J · s
$I$	Identity matrix	1
$\delta_{ij}$	Kronecker tensor	1

### 算子

<b>Symbol</b>	<b>Description</b>
$\mathcal{T}$	Time-ordering operator
$\det$	Determinant
$\text{Tr}$	Trace
$\text{Re}$	Real part

### 缩写

SAF	Static Auxiliary Field
MF	Mean Field
NRG	Numerical Renormalization Group
RKKY	Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida
FM	Ferromagnet
AFM	Antiferromagnet
FL	Fermi Liquid
MC	Monte Carlo
CT-HYB	Continuous Time Quantum Monte Carlo Method with Hybridization Expansion

DQMC	Determinant Quantum Monte Carlo
RPA	Random Phase Approximation
SSH	Su-Schrieffer-Heeger
BCS	Bardeen-Cooper-Schrieffer
QPT	Quantum Phase Transition
DQPT	Dynamical Quantum Phase Transition
QCP	Quantum Critical Point
DOS	Density of States
ARPES	Angle-resolved Photoemission Spectroscopy
TCA	Traveling Cluster Approximation

# 第1章 引言

在本章中，我们首先介绍强关联电子系统的基本概念和常用模型，然后着重介绍本论文所关心的近藤体系，并详细阐述近藤效应和近藤问题的概念。虽然人们在上世纪七十年代就已经研究清楚了单杂质近藤模型的各种物性，但当杂质浓度增加变为近藤晶格模型时，则会涌现出许多单杂质系统中没有的新奇物理，如重费米子、非常规超导、近藤绝缘体、量子相变 (QPT) 等。我们将在本章详细介绍近藤晶格模型中的杂化物理和相变的概念，包括经典相变、量子相变以及动力学量子相变 (DQPT)。在下一章，我们将介绍研究强关联电子系统中这些新奇物理的常用理论和方法。

## 1.1 强关联电子体系

### 1.1.1 基本概念和常用模型

虽然随着固体理论和实验技术的飞速发展，人们已经研究清楚了许多材料的物性，但是仍然存在许多悬而未决的问题，比如铜氧化物中的高温超导，过渡金属氧化物中的莫特 (Mott) 金属绝缘转变，重费米子化合物中的量子相变与非费米液体行为、二维电子气体中的分数量子霍尔效应、锰氧化物中的巨磁阻效应等 [2]。这类材料的共同特征是电子间的库仑相互作用很强，甚至强到可以与电子的动能相比拟的程度，因此这类体系被统称为强关联电子系统。

在理论上，研究强关联电子系统的基本模型是 Hubbard 模型

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_l n_{l\uparrow} n_{l\downarrow}, \quad \dots (1.1)$$

其中  $t_{ij}$  为导带电子间的跃迁强度， $\mu$  为化学势， $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  为粒子数算符， $U$  为库仑相互作用。当库仑相互作用很强时，微扰论和基于单电子近似的能带理论失效。在半满  $\mu = 0$  和大  $U$  极限下，基态中每个格点上平均占据一个粒子，因此没有空占据态和双占据态，低能有效模型为反铁磁海森堡模型

$$H_{\text{eff}} = \sum_{ij} J_{ij} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right), \quad \dots (1.2)$$

其中  $J_{ij} = \frac{2}{U} |t_{ij}|^2$ 。偏离半满时，其低能有效模型为 t-J 模型

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} P_G c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} P_G, \quad \dots (1.3)$$

其中  $P_G$  为投影掉双占据态的 Gutzwiller 算符。t-J 模型是研究铜氧化物高温超导的基本模型。

以上是最简单的单带模型，在稀土化合物中同时存在着相互作用比较弱的巡游电子  $c$  和相互作用比较强的局域电子  $f$ ，此时我们需要用两带模型来描述，即周期性安德森模型

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + E_0 \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f, \quad \dots (1.4)$$

其中第一项为巡游电子的动能项， $E_0$  为局域电子的在位能，第三项则代表两种电子之间的杂化，第四项表示库仑排斥相互作用只存于局域  $f$  电子之间。

在稀磁合金中局域电子数很少，特别是在只有一个杂质的极限情况下，体系应由单杂质安德森模型描述

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + E_0 \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + V \sum_{i\sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger f_{\sigma} + f_{\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U n_{\uparrow}^f n_{\downarrow}^f. \quad \dots (1.5)$$

与周期性安德森模型 (1.4) 的区别是，此时体系中只有一个杂质原子，因此无需对局域的  $f$  电子求和。在大  $U$  极限下，利用 Schrieffer-Wolff 变换将高能自由度积分掉后 [17]，可以得到其低能有效模型，即单杂质近藤模型

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_{\mathbf{K}} \mathbf{s} \cdot \mathbf{S}, \quad \dots (1.6)$$

其中  $\mathbf{S}$  为局域电子自旋， $\mathbf{s}$  为巡游电子在杂质处的自旋

$$\mathbf{s} = \frac{1}{N_0} \sum_{\mathbf{k}\alpha, \mathbf{k}'\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{\alpha\beta}}{2} c_{\mathbf{k}'\beta}. \quad \dots (1.7)$$

### 1.1.2 近藤效应

1934 年，W. J. de Haas 等人发现金和铜中的电阻存在着极小值 [1]，即随温度降低电阻先减少后增加，如图 1.1 所示。这无法通过晶格缺陷，电声耦合或电子与电子散射的机制来解释。于是这个“电阻极小”的问题一直困扰着物理学家。直到随着晶体生长技术的提高，人们得以控制晶体中的杂质浓度时才把电阻

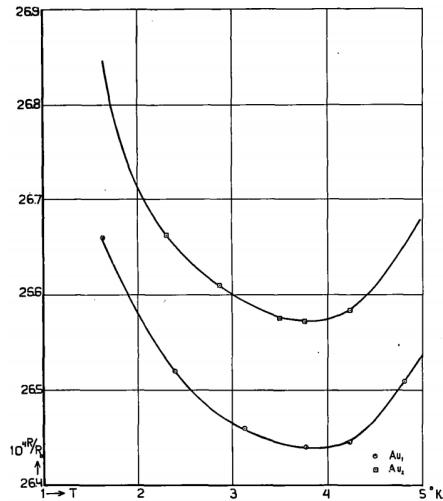


图 1.1 金在 1 K 到 5 K 范围内的电阻 [1]。

Figure 1.1 Resistance of Au between 1 K and 5 K [1].

极小现象与磁性杂质的存在联系在一起。这一发现为解决电阻极小问题铺平了道路。在 1964 年，日本物理学家 J. Kondo 利用多体理论对 s-d 交换模型 (1.6) 的杂质散射问题做了微扰计算 [18]。J. Kondo 发现当交换作用  $J_K$  为反铁磁时，自旋翻转会对电阻产生  $-c \log T$  的贡献，系数  $c$  与杂质浓度有关。于是总电阻可以表示为

$$\rho = aT^5 + c\rho_0 - c\rho_1 \log T, \quad \dots (1.8)$$

其中第一项来自声子的贡献，其随温度增加而增加，第二项则来自非磁杂质或晶格缺陷的贡献，与温度无关。从上式可知，正是声子和自旋翻转两者的贡献使得电阻出现极小值。J. Kondo 的工作解决了困扰人们三十年的疑惑，于是这种由传导电子自旋与杂质自旋的翻转散射引起的电阻随温度降低而对数增加的机制被称为近藤效应。

虽然 J. Kondo 的工作解释了电阻极小现象，但式 (1.8) 在零温下会发散，这一发散问题又被称为近藤问题。在二十世纪七十年代随着重整化群思想的发展电阻零温发散的问题得到了完美解决 [19, 20]。如图 1.2 所示，单杂质近藤系统中存在一个特征能标（被称为近藤温度） $T_K$ ，

$$T_K = D \exp\left(-\frac{1}{J_K N(\epsilon_F)}\right), \quad \dots (1.9)$$

其中  $D$  为导带电子带宽， $N(\epsilon_F)$  为费米能级处的态密度。在这个温度之上，系统处于弱耦合区间，J. Kondo 的微扰计算是适用的，自旋翻转散射使电阻随温度

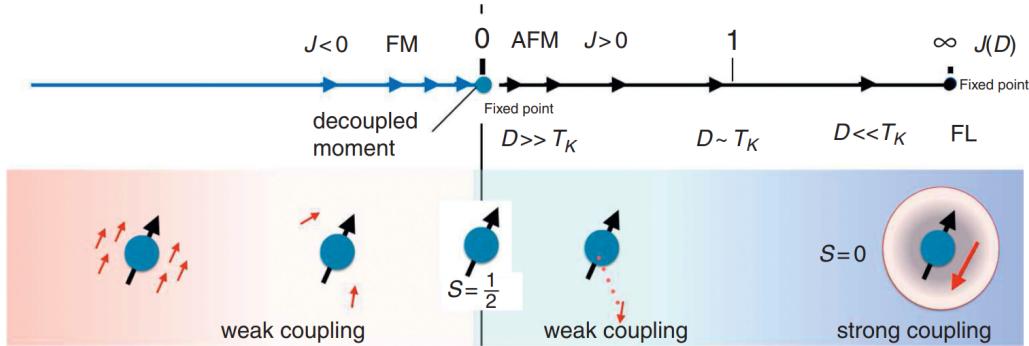


图 1.2 近藤模型重整化流的示意图。图中 FM 代表铁磁近藤耦合，AFM 代表反铁磁近藤耦合，FL 代表费米液体 [2]。

Figure 1.2 Schematic illustration of renormalization group flow in the Kondo model. In the diagram, FM = ferromagnet, AFM = antiferromagnet, and FL = Fermi liquid [2].

降低而对数增加。在  $T_K$  以下，系统进入强耦合区间，微扰理论失效。此时局域自旋会被传导电子屏蔽形成新的复合准粒子，新的准粒子与传导电子发生杂化，在费米面处形成“近藤共振”。同时体系表现出局域费米液体的行为，电阻不再发散而是随温度降低达到饱和。

## 1.2 重费米子物理

单杂质近藤模型的近藤问题得到了完美解决，但是当杂质排列成晶格时，则会涌现出许多新的物理。理论上将单杂质近藤模型做简单推广便可以得到近藤晶格模型

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + J_K \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i. \quad \dots (1.10)$$

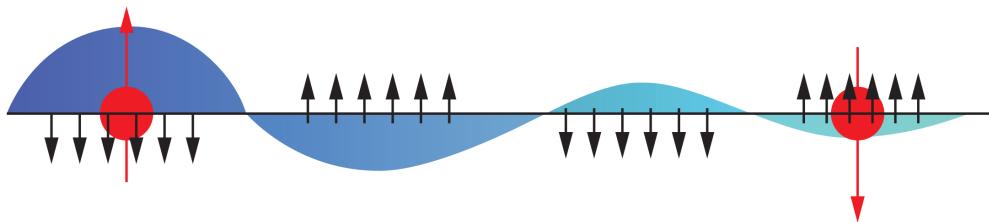


图 1.3 RKKY 相互作用示意图 [2]。

Figure 1.3 Schematic illustration of the RKKY interaction [2].

在晶格模型中，低温下每个格点上的局域自旋都会与导带电子发生杂化形成复合准粒子。不同格点间的准粒子由于晶格效应联系在一起，形成杂化能带和杂化能隙。当化学势在杂化能隙中时基态为近藤绝缘体，当化学势穿过杂化能带时，基态为金属，表现出费米液体的特征。通常情况下，杂化能带所对应的准粒子的有效质量非常大，因此也被称为重费米子。

如前所述，低温下的近藤相互作用倾向于使局域自旋发生屏蔽，从而导致系统处于非磁性的基态。但局域自除了与导带电子发生直接的近藤耦合外，不同格点间的局域自旋还存在由导带电子传递的间接相互作用，RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) 相互作用 [21]

$$H_{\text{RKKY}} = \sum_{ij} J(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad \dots (1.11)$$

其中

$$J(R) = \frac{9\pi}{2} \left( \frac{J_K}{E_F} \right) \left[ \frac{\cos 2k_F R}{(2k_F R)^3} - \frac{\sin 2k_F R}{(2k_F R)^4} \right], \quad \dots (1.12)$$

$R = |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$  为局域自旋之间的距离， $k_F$  为费米波矢。如图 1.3 所示，随距离不同，RKKY 相互作用可以为铁磁型或反铁磁型。

1977 年，S. Doniach 指出 [22]，在近藤晶格模型中，体系中存在两个能标：近藤能标  $T_K$  和 RKKY 能标  $T_{\text{RKKY}}$

$$T_K = D \exp \left( -\frac{1}{J_K N(\epsilon_F)} \right), \quad T_{\text{RKKY}} = J_K^2 N(\epsilon_F). \quad \dots (1.13)$$

需要强调的是， $T_K$  与近藤耦合系数  $J_K$  之间是指数依赖关系，而  $T_{\text{RKKY}}$  则是  $J_K$  的幂函数，两种能标呈现出迥然不同的特征。正是近藤效应与 RKKY 相互作用之间的竞争使得晶格模型表现出完全不同于单杂质近藤模型的性质并展现出丰富的相图。这一点可以通过对非磁金属进行掺杂来体现。图 1.4 展示了  $\text{Ce}_x \text{La}_{1-x} \text{Cu}_6$  在不同掺杂浓度  $x$  时，其电阻随温度的变化关系 [3]。当  $x$  比较小时，体系中的杂质较小，可以近似为单杂质近藤模型，因此电阻随温度降低对数增加，在 1 K 以下达到饱和。不断增加杂质浓度  $x$ ，低温下的电阻会随  $x$  增加而降低。当  $x = 1$  时，体系变为近藤晶格模型，此时电阻在 30 ~ 40 K 处出现极大值，该温度也被称为相干温度  $T^*$ 。关于相干温度背后的微观机制则一直存在争议。如传统的平均场 (MF) 理论认为晶格模型中的  $T^*$  来自近藤效应  $T^* \sim T_K$  [2]，而二流体理论

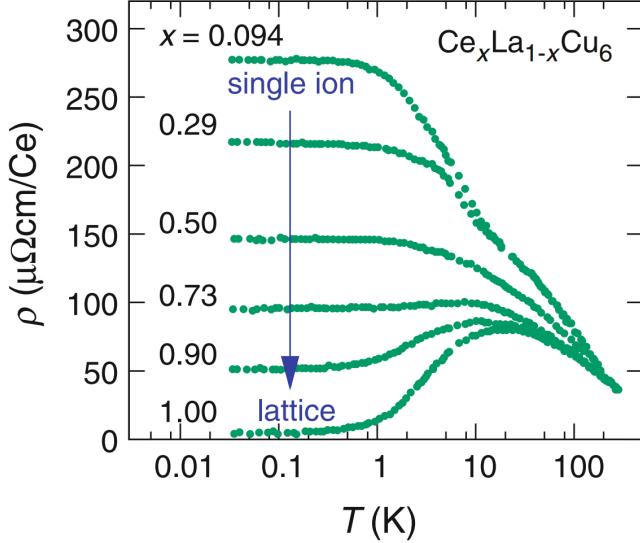


图 1.4 近藤系统中的电阻。图中显示了当掺杂浓度  $x$  不同时,  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$  中每摩尔 Ce 的电阻  $\rho = \rho(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6) - \rho(\text{LaCu}_6)$  随温度的变化关系 [3, 4]。

**Figure 1.4 Resistivity of a Kondo system.** The temperature dependence of the magnetic resistivity of  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ , calculated as  $\rho = \rho(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6) - \rho(\text{LaCu}_6)$  per mole Cerium, is shown for different concentrations  $x$  [3, 4].

则发现  $T^*$  正比于  $J_K^2 N(\epsilon_F)$ , 因此  $T^*$  应该对应  $T_{\text{RKKY}}$  能标 [6]。下面分别介绍两种观点。

### 1.2.1 平均场理论

为了模拟 RKKY 相互作用, 人们通常研究近藤-海森堡晶格模型

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i + J_H \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad \dots (1.14)$$

在赝费米子表示下, 上式可以表示为

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{c\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{J_K}{2} \sum_{i\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} f_{i\beta}^\dagger c_{i\beta} - \frac{J_H}{2} \sum_{ij\alpha\beta} f_{i\alpha}^\dagger f_{j\alpha} f_{j\beta}^\dagger f_{i\beta} + \sum_i \lambda_i (n_{f_i} - 1), \quad \dots (1.15)$$

其中拉格朗日乘子  $\lambda_i$  保证赝费米子占据数  $n_{f_i} = \sum_\alpha f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha}$  等于 1。引入如下序参量可以把近藤相互作用和海森堡相互作用解耦

$$V = \sum_\sigma \langle c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \rangle, \quad \chi = \sum_\sigma \langle f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} \rangle, \quad \dots (1.16)$$

其中  $V$  代表杂化效应, 而  $\chi$  则代表反铁磁相互作用。最后求解自治方程便可以得到体系的相图。

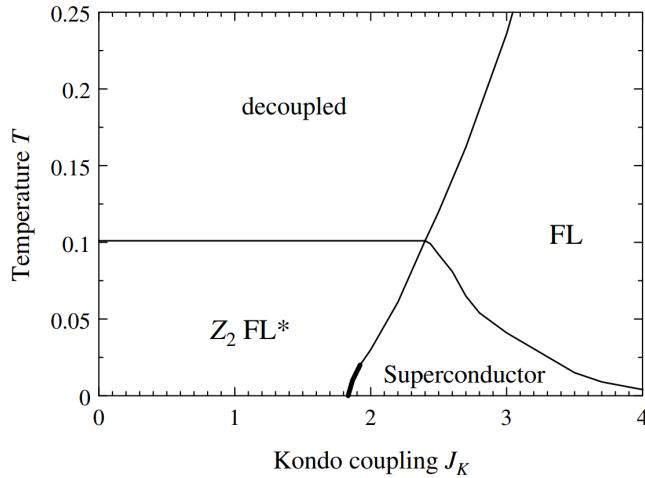


图 1.5 三角晶格中近藤-海森堡模型的平均场相图 [5]。

**Figure 1.5 Mean-field phase diagram of Kondo-Heisenberg model on the triangular lattice [5].**

2003 年, T. Senthil 等人仔细分析了三角晶格中近藤-海森堡模型的平均场相图 [5, 23], 如图 1.5 所示。高温区间  $V$  和  $\chi$  都等于零, 表明导带电子和局域自旋在高温时退耦合 (decoupled)。当  $J_K$  较小时, 低温下局域自旋形成自旋液体  $\chi \neq 0$ , 但自旋液体与导带电子之间依然不存在耦合效应  $V = 0$ , 因此只有传导电子参与费米面的形成。由于自旋液体中存在分数化的自旋子 (spinon) 激发, 于是 T. Senthil 等人将小  $J_K$  时的低温相取名为  $\text{FL}^*$  (Fractionalized Fermi Liquid) 相。当  $J_K$  较大时, 近藤效应占主导, 低温下自旋液体与传导电子发生杂化, 此区间中  $V$  和  $\chi$  都不等于零。自旋子的相位与传导电子的相位锁定在一起变为带电粒子参与费米面的形成, 因此该区间为  $\text{FL}$  (Fermi Liquid) 相。在费米液体相中, 准粒子在更低温度下会发生配对进入超导相。2007 年, I. Paul 等人则进一步分析了低温下发生杂化的转变温度 [24, 25], 他们发现从  $\text{FL}^*$  相到  $\text{FL}$  相的转变温度正比于单杂质近藤温度  $T_K$ 。

此外, 在平均场理论中, 由于人为地引入了表征杂化的序参量  $V$ , 因此有限温度下平均场会给出相变的结论。但在实验中, 电阻连续变化, 如图 1.4 所示, 因此近藤效应实际上是一个渐变 (crossover) 行为。由于平均场近似忽略了涨落效应, 于是 T. Senthil 等人认为只有考虑涨落效应之后才能得到正确的渐变行为, 但他们缺乏实际的计算支持这一观点。

Compound	$T^*$ (K)	$T_K$ (K)
CeRhIn <sub>5</sub>	20 ± 5	0.15
CeCu <sub>6</sub>	35 ± 5	3.5
CeCu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	75 ± 20	10
CePb <sub>3</sub>	20 ± 5	3
CeCoIn <sub>5</sub>	50 ± 10	6.6
CePd <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	40 ± 10	9
CePd <sub>2</sub> Al <sub>3</sub>	35 ± 10	10
CeRu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	60 ± 10	20
U <sub>2</sub> Zn <sub>17</sub>	20 ± 5	2.7
URu <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	55 ± 5	12
UBe <sub>13</sub>	55 ± 5	20
UPd <sub>2</sub> Al <sub>3</sub>	60 ± 10	25
YbRh <sub>2</sub> Si <sub>2</sub>	70 ± 20	20
YbNi <sub>2</sub> B <sub>2</sub> C	50 ± 5	20

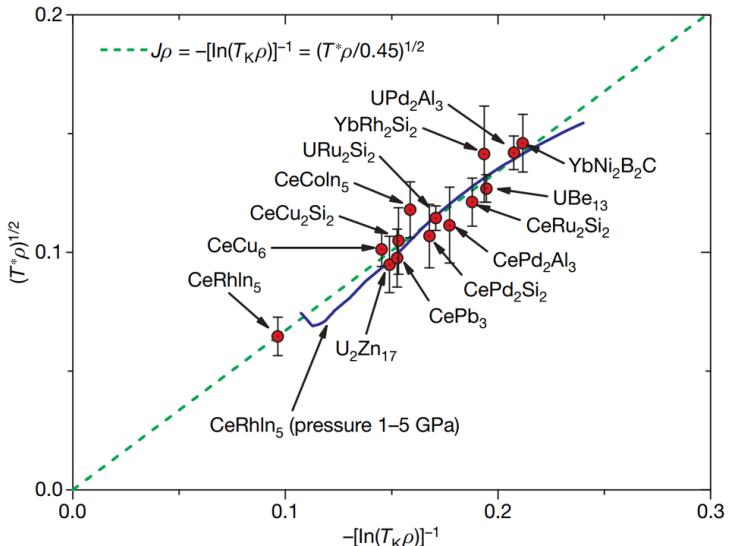


图 1.6 左边: 不同近藤晶格化合物中  $T^*$  和  $T_K$  的实验数据。右边: 直线表明  $T^* = 0.45J_K^2\rho$ , 这意味着  $T^*$  来自 RKKY 相互作用 [6]。

**Figure 1.6 Left:** experimental  $T^*$  and  $T_K$  values for a variety of Kondo lattice compounds.  
**Right:** the linear relation indicates  $T^* = 0.45J_K^2\rho$ , which demonstrates that  $T^*$  is given by the intersite RKKY interaction [6].

### 1.2.2 二流体理论

2002 年, S. Nakatsuji 等人发现  $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{CoIn}_5$  中的  $T^*$  可能来自格点间的反铁磁相互作用 [26]。在 2004 年初, 他们进一步发现  $\text{Ce}_{1-x}\text{La}_x\text{CoIn}_5$  这一材料中由  $f$  电子贡献的比热和磁化率能够被一种两流体模型描述 [27]。随后, N. Curro 等人于 2004 年底发现可以用这一两流体模型解释奈特位移反常等实验现象 [28]。在 2008 年, Y.-F. Yang 等人仔细分析了十多种近藤晶格模型中  $T^*$  和  $T_K$  的关系, 证实  $T^*$  来自 RKKY 相互作用 [6]。

如图 1.6 所示, Y.-F. Yang 等人注意到不同材料中的  $T^*$  和  $T_K$  满足下面的关系 [6]

$$J_K \rho = -1/\ln(\rho T_K) = \sqrt{c^{-1} T^* \rho}, \quad \dots (1.17)$$

其中  $\rho$  为态密度,  $c$  为拟合常数,  $T_K$  为单杂质近藤温度

$$T_K \sim \rho^{-1} e^{-1/(J_K \rho)}. \quad \dots (1.18)$$

式 (1.17) 表明

$$T^* = c J_K^2 \rho. \quad \dots (1.19)$$

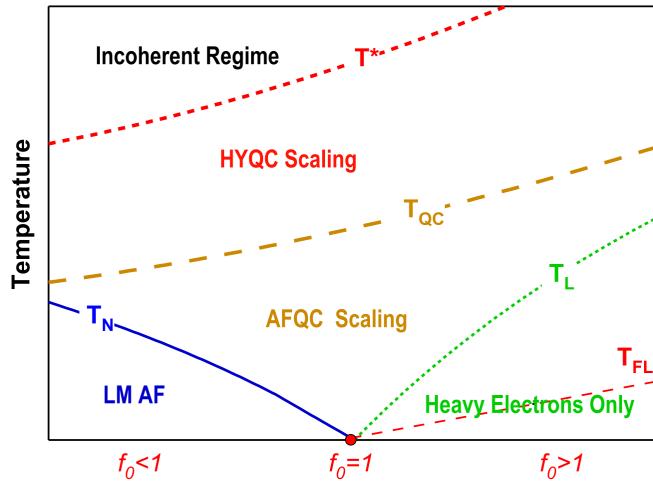


图 1.7 二流体模型提出的相图。相干温度  $T^*$  之下出现重的近藤液体 [7]。

Figure 1.7 A suggested phase diagram in two fluid model.  $T^*$  is the coherence temperature that marks the emergence of the heavy Kondo liquid [7].

而  $T_{\text{RKKY}}$  同样正比于  $J_K^2 \rho$ , 这意味着  $T^*$  确实来自格点间的 RKKY 相互作用, 而非平均场理论中认为的  $T^*$  由  $T_K$  决定。

从 2008 年至今, Y.-F. Yang 与 D. Pines 基于  $T^*$  来自 RKKY 相互作用这一观点, 发展了一套可以解释重费米子体系中众多反常实验现象的唯象理论, 即重费米子二流体理论 [7, 29]。如图 1.7 所示, 在二流体理论中  $T^*$  具有非常重要的地位, 在  $T^*$  之上为非相干区间, 即局域电子与导带电子退耦合。在  $T^*$  之下, 一部分  $f$  电子开始由局域状态转变为巡游状态, 并逐渐与导带电子发生杂化。众多材料的实验数据表明  $f$  电子巡游部分的相对权重为

$$f(T) = f_0 (1 - T/T^*)^{3/2}, \quad \dots (1.20)$$

其中参数  $f_0$  反映杂化的效率, 可由外磁场、压强等参数调控。转变为巡游状态的这部分  $f$  电子形成的流体被称为近藤液体, 仍旧保持局域的  $f$  电子形成的流体则称为局域自旋液体, 其权重为  $1 - f(T)$ 。值得注意的是, 近藤液体的权重  $f(T)$  在不同的材料中都具有相同的形式, 表明  $f$  电子的局域-巡游转变背后有某种普适规律。但不幸的是, 目前还没有微观理论来支持二流体理论中观察到的各种普适规律。

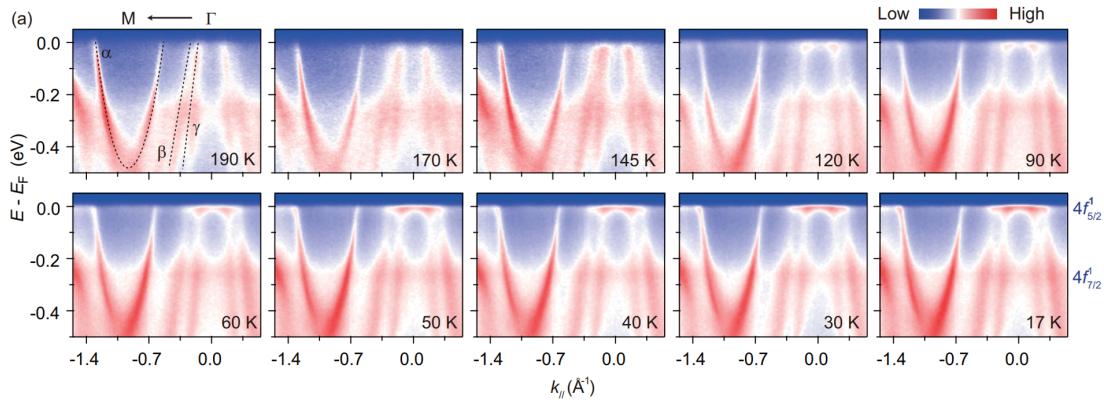


图 1.8 沿  $\Gamma$ - $M$  方向，不同温度下  $\text{CeCoIn}_5$  的 ARPES 数据 [8]。

Figure 1.8 ARPES data of  $\text{CeCoIn}_5$  along  $\Gamma$ - $M$  at the different temperatures [8].

### 1.2.3 两阶段杂化图像

虽然  $T^*$  的微观机制还存在着争议，但平均场理论和二流体理论都认为在  $T^*$  之下  $f$  电子才开始与导带电子发生杂化并形成重费米子能带。然而越来越多的实验结果表明，发生杂化效应的温度远远高于相干温度  $T^*$ 。比如在 2017 年，Q. Y. Chen 等人对  $\text{CeCoIn}_5$  这一典型的重费米子材料做了 ARPES (Angle-resolved Photoemission Spectroscopy) 实验 [8]。如图 1.8 所示，她们发现在 120 K 处就能观察到清晰的能带弯曲现象，远大于  $\text{CeCoIn}_5$  的相干温度  $T^* \approx 55$  K (见图 1.6 左边的表格)。

在 2020 年，Y. P. Liu 等人利用超快光谱对  $\text{CeCoIn}_5$  进行了系统研究 [9]。如图 1.9 所示，弛豫率  $\gamma$  随温度降低呈现出两类不同的特征。在  $T^\dagger = 120$  K 之上，超快实验探测到的高能准粒子弛豫率近似不变，这一能标与 ARPES 测量中能带弯折开始出现的特征温度相对应。在  $T^\dagger$  之下，弛豫率随温度降低快速下降，但不随辐照光强的改变而改变。直到温度降低到  $T^* = 55$  K 之下，弛豫率的大小开始依赖于辐照光强。

针对以上实验结果，我们提出了两阶段杂化图像 [9]。其中高温能标  $T^\dagger$  对应杂化涨落开始起明显效应的能标。在  $T^\dagger$  之上，仅传导电子参与费米面的形成，局域自旋与传导电子发生非相干散射，对费米面和其他物理量的影响较小。在  $T^\dagger$  之下，由于杂化涨落效应，每个格点上的局域自旋会与传导电子发生杂化形成复合准粒子，从而改变费米面附近的电子结构，对应实验中看到的能带弯曲现象。但此时格点间的杂化关联还很弱，不足以形成重费米子能带，因此仅打开直

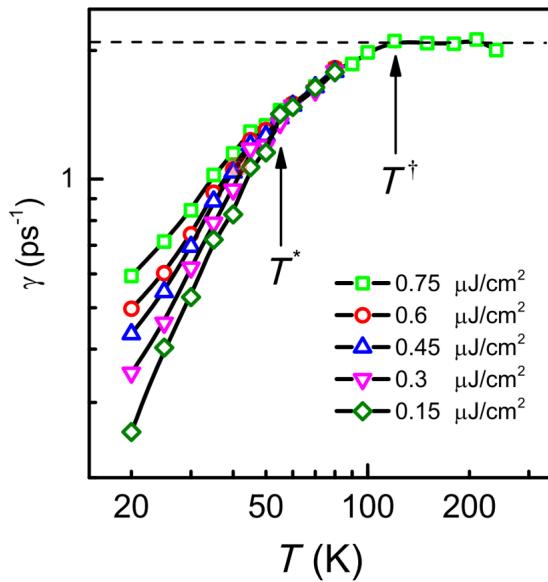


图 1.9 不同辐照光强下弛豫率  $\gamma$  随温度的函数曲线。 $T^*$  和  $T^\dagger$  处有明显的反常，其中  $T^* < T^\dagger$ 。

在  $T^*$  之下， $\gamma$  与辐照光强之间有很强的依赖关系。在  $T^\dagger$  之上， $\gamma$  几乎保持不变 [9]。

**Figure 1.9 The decay rate  $\gamma$  as a function of temperature measured at different fluences. Two clear anomalies at  $T^*$  and  $T^\dagger$  are found ( $T^* < T^\dagger$ ). Below  $T^*$ ,  $\gamma$  shows strong fluence-dependent. Above  $T^\dagger$ ,  $\gamma$  almost keeps constant. [9]**

接带隙从而抑制高能准粒子的弛豫率。随温度进一步降低到相干温度  $T^*$  之下，由于格点间的 RKKY 相互作用，不同格点间的杂化准粒子开始发生关联，导致重费米子能带的形成和间接能隙的打开。而间接带隙的打开会使电阻等物理量发生明显变化。

我们可以把两阶段杂化图像简单总结为： $T^\dagger$  对应杂化涨落开始影响可观测量的能标， $T^*$  则对应格点间的磁关联和杂化关联开始占主导地位的能标。

#### 1.2.4 杂化涨落与杂化关联

除了上述实验证据外，理论研究也揭示了杂化涨落和杂化关联的重要性。在这一小节中，我们将介绍理论研究的历史和现状。

对杂化涨落的理论研究可以追溯到 1982 年，M. Lavagna 等人认为杂化的空间涨落会引起电子间的散射，于是系统地研究了近藤晶格模型中电阻随温度的变化规律 [10]。如图 1.10 所示，他们的研究表明当传导电子数  $n < 1$  时，体系为金属态，低温下电阻随温度增加而线性增加，高温下电阻随温度升高对数下降，电阻最大值的特征温度为  $T_1 \sim (1 - n)^{\frac{1}{3}} T_K$ 。当  $n = 1$  时，体系的电阻表现为半导

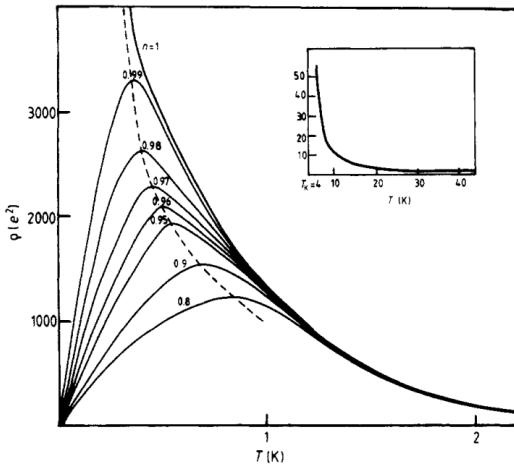


图 1.10 传导电子占据数  $n$  取不同值时，电阻随温度的变化关系 [10]。

**Figure 1.10 Temperature dependence of resistivity for various values of the conduction electron number  $n$  [10].**

体行为，即随温度增加指数下降  $\rho \sim \exp(T_K/T)$ 。这篇文章的作者研究的是近藤晶格模型，虽然考虑杂化的空间涨落后得到了电阻变化的渐变行为而不是平均场理论中的跃变，但由于忽略了局域自旋间的 RKKY 交换关联效应，他们发现电阻最大值的特征温度不是相干温度  $T^*$  而是正比于单杂质近藤温度  $T_K$ 。

K. Ohara 等人则在 2007 年到 2014 年间利用推广的金兹堡—朗道理论系统研究了 Coqblin-Schrieffer 晶格模型中杂化涨落对物理量的影响 [30–32]。他们引入了辅助玻色场  $\varphi_i$  将近藤相互作用解耦  $\varphi_i \rightarrow \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ 。忽略辅助场的虚时依赖而仅考虑静态杂化时，他们写出了关于  $\varphi_i$  的四阶自由能并将  $\varphi_i^4$  项作解耦近似后研究了体系序参量、比热和磁矩随温度的变化规律。他们发现比热在  $T_K$  处不再有发散行为，表明当考虑杂化涨落后，平均场下的二阶相变变为了与真实物理更接近的渐变行为，但随之带来的问题则是体系在  $T_K/3$  以下出现了非物理的行为。作者认为这一温度下出现非物理行为的原因是忽略了更高阶的相互作用。在 2013 年，作者进一步考虑了玻色场  $\varphi_i$  的频率依赖 [31]，得到了四阶的金兹堡—朗道—威尔逊作用量。相比之前的研究，考虑辅助场的动力学涨落后能在高温时得到  $S \rightarrow N k_B \ln 2$  的正确结果。在 2014 年，作者研究了零温时由杂化场的相位涨落和振幅涨落引起的 Nambu—Goldstone 模和 Higgs 模的色散 [32]。与超导不同的是，杂化场可以看作是  $c$  和  $f$  电子组成的粒子和空穴对，是电中性的，不会与电磁场耦合，因此不存在 Anderson—Higgs 效应。也就是说 Nambu—Goldstone

模不会消失，其谱函数不会打开能隙。他们的研究表明 Nambu-Goldstone 模的色散关系正比于动量的平方。

上述研究都忽略了局域自旋间的 RKKY 交换关联效应，因此所得结果都不能反映真实的重费米子物理。理论上通常在模型中添加海森堡项来模拟这一效应。2004 年 T. Senthil 等人研究了近藤-海森堡模型中  $\chi$  场（式(1.16)）的规范涨落 [23]。他们发现规范涨落会对比热产生  $T \ln(1/T)$  的贡献。P. Coleman 等人则进一步研究了规范涨落对输运性质的影响 [33]，在没有杂化的自旋液体区间， $\chi$  的规范场  $\theta$  与电磁场退耦合，因此自旋子不带电，此时对电导的贡献仅来自传导电子。而在有杂化的重费米液体相， $\theta$  与电磁场相耦合，自旋子将带电变为电子从而与传导电子发生杂化，此时对电导的贡献则来自  $c$  和  $f$  电子两部分，因此电导将在相变点发生跃变。另一方面，由于热导率不与规范场耦合，因此热导率在相变点不会发生跃变，这会导致 Wiedemann-Franz 比率也会在相变点发生跃变。除了  $\chi$  场的规范涨落外，体系还存在杂化场  $V_i \rightarrow \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  的涨落。I. Paul 等人在 2007 年利用自旋的费米子表示研究了大  $N$  极限下近藤-海森堡模型中杂化场的临界涨落 [24, 25]。平均场框架下，体系中存在从杂化为零的自旋液体相到杂化不为零的近藤屏蔽相转变的量子临界点。他们发现在一个很小的温度之上（大约为 1 mK），单杂质近藤温度之下，杂化涨落的临界指数为  $z = 3$ ，体系的电阻表现出  $T \log T$  的边缘费米液体行为。

上述工作都是基于在平均场附近做微扰展开的方法。这类方法不能很好地处理高阶涨落效应。针对这一问题，我们利用行列式蒙特卡洛 (DQMC) 方法系统地研究了周期性安德森模型中的杂化涨落和杂化关联 [11]

$$L_{ij}(\tau) = -\langle \mathcal{T}_{\tau} [O_i(\tau) - \langle O_i \rangle] [O_j(0) - \langle O_j \rangle] \rangle, \quad \dots (1.21)$$

其中  $O_i = \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$  为杂化算符。我们研究了杂化关联的谱函数

$$L_{\mathbf{q}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} L_{ij}(\omega), \quad \dots (1.22)$$

并基于  $L_{\mathbf{q}=0}(\omega) = N^{-1} \sum_{ij} L_{ij}(\omega)$  构建了相图。如图 1.11 所示，其中 I 和 II 区间中的传导电子和局域电子退耦合；在 II 区间中， $f$  电子在低温下会打开莫特能隙。III 区间中杂化涨落开始起作用，同时非局域关联  $N^{-1} \sum_{i \neq j} L_{ij}(\omega)$  开始出现，但非局域的关联比较弱。我们还发现这个区间中能带会发生轻微的弯曲，因此

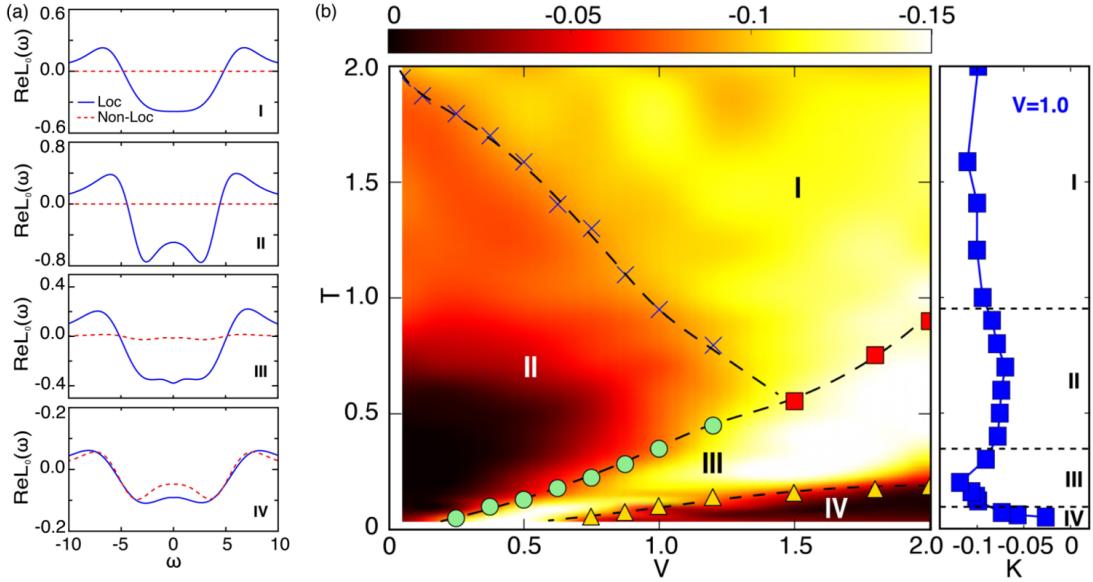


图 1.11 (a) 比较  $\text{Re } L_0(\omega)$  的局域与非局域部分。(b) 基于  $L_0(\omega)$  构建的相图。其中背景颜色反映了  $L_0(0)$  处斜率  $K$  的大小 [11]。

**Figure 1.11 (a) Comparison of the local and nonlocal contributions to  $\text{Re } L_0(\omega)$ . (b) Tentative phase diagram constructed based solely on  $L_0(\omega)$ . The background colors reflect the low-energy slope  $K$  of its imaginary part [11].**

III 区间对应着两阶段杂化图像中  $T^* < T < T^\dagger$  的温度区间。在 IV 区间，格点间的非局域关联显著增加，甚至达到了局域关联  $N^{-1} \sum_i L_{ii}(\omega)$  的量级，此时格点间的强关联导致重费米子杂化能带的形成，体系处于近藤绝缘态。IV 区间对应两阶段杂化图像  $T^*$  之下的温度区间。由此可以看出，我们的工作证实了前面提出的两阶段杂化图像。

至此，我们已经从实验和理论的角度分别阐述了研究杂化涨落和杂化关联的重要性。虽然我们已经利用 DQMC 方法研究了周期性安德森模型中的杂化涨落和杂化关联并取得了重要进展 [11]，但该模型不显含重费米子物理中最重要的近藤和 RKKY 相互作用。为了更清楚地体现近藤效应和 RKKY 相互作用的竞争并揭示 RKKY 相互作用在杂化物理中扮演的角色，我们需要进一步研究近藤-海森堡模型中的杂化涨落和杂化关联。然而该模型的传统研究方法如平均场、有效场理论和动力学平均场等都不能很好地处理杂化场的涨落和空间关联效应，因此我们需要发展新方法来研究近藤-海森堡模型中的杂化涨落和杂化关联，以帮助我们进一步理解重费米子体系中的各种复杂现象。而这也是第三章中相关工

作的研究动机。

### 1.3 相变

除了有限温下的杂化物理以外，重费米子体系在零温下的量子相变和低温下的量子临界现象也吸引了科研工作者的关注。在这一小节中我们将简单介绍相变的概念。

#### 1.3.1 经典相变

由热涨落驱动的相变被称为经典相变。如二维正方格子上的经典伊辛模型

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z, \quad \dots (1.23)$$

其中  $S_i^z = \{-1, +1\}$  为经典自旋。在高温时，很强的热运动导致自旋呈无序分布。随温度降低，在临界温度  $T_c$  之下，系统发生相变进入铁磁相，自旋全部向上或向下。当自由能随温度的一阶导数不连续时称为一级相变，当一阶导数连续而二阶导数不连续时则称为二级相变，又称为连续相变。对于连续相变，当温度接近  $T_c$  时，关联长度将发散

$$\xi \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad \dots (1.24)$$

其中  $\nu$  是关联长度的临界指数。如经典伊辛模型的临界指数为  $\nu = 1$ 。不同的临界指数对应不同的普适类。

#### 1.3.2 量子相变

除热力学涨落外，量子体系中还存在量子涨落。特别地，在零温时，热涨落消失，我们把仅由量子涨落驱动的相变称为量子相变，把相变点称为量子临界点 (QCP)。比如我们把经典伊辛模型中的经典变量  $S_i^z = \{-1, +1\}$  改为泡利矩阵，然后加入外场中就得到了横场伊辛模型

$$H = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - h \sum_{j=1}^N \sigma_j^z, \quad \dots (1.25)$$

其中  $J > 0$  为铁磁相互作用， $h$  为外场。在零温下，泡利矩阵的不对易性将引起很强的量子涨落。当  $J \gg h$  时，自旋全部向左或向右，体系发生自发对称破缺进入铁磁态；反之当  $J \ll h$  时，横场引起的量子涨落将使系统处于无序的顺磁

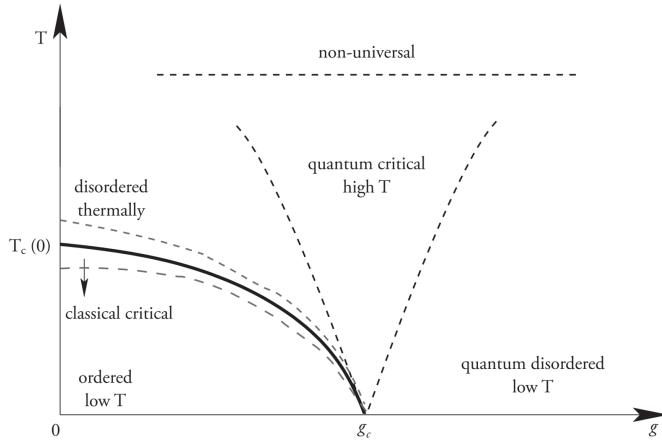


图 1.12 量子临界点附近的相图示意图 [12]。

**Figure 1.12 Schematic phase diagram in the vicinity of a quantum critical point [12].**

态。增加磁场  $h$  时, 体系存在从铁磁态到顺磁态的相变, 相变点发生在  $J = h$  处 [12]。

注意到自由能为  $F = U - TS$ , 因此零温下自由能等于基态能。类似经典相变的分类, 我们可以根据基态能对调控参数 (如外磁场  $h$ ) 的导数的连续性对量子相变进行分类。当基态能对非热参数的一阶导数不连续时称为一级量子相变; 当基态能对非热参数的一阶导数连续而二阶导数不连续时称为二级量子相变或连续量子相变。同理, 我们也可以引入临界指数研究量子相变的普适类。

在量子相变点之上常常存在一个量子临界区, 如图 1.12 所示。由于根据热力学第三定律, 我们不可能在实验中达到绝对的零温, 因此我们更关心低温下量子临界区中的物理, 如重费米子系统量子临界区中的非费米液体和非常规超导等。

此外, 我们可以利用路径积分理论把一个  $d$  维的量子系统映射为  $d + 1$  维的经典系统。这种映射有时能帮助我们简化问题, 加深我们对复杂量子问题的理解。比如一维量子横场伊辛模型和二维经典伊辛模型都有严格解, 可以证明一维横场伊辛模型量子相变的临界指数与二维经典伊辛模型热力学相变的临界指数是一致的, 表明两个相变属于统一普适类且这种量子经典映射是有效的 [12]。对于强关联电子体系, 建立解析的映射往往是不可能的, 但我们还可以在数值上建立起这种对应关系。在 2020 年, 我们基于杂化展开的连续时间量子蒙特卡洛 (CT-HYB) 方法, 结合机器学习将量子杂质模型的有效作用量映射到一个经典的

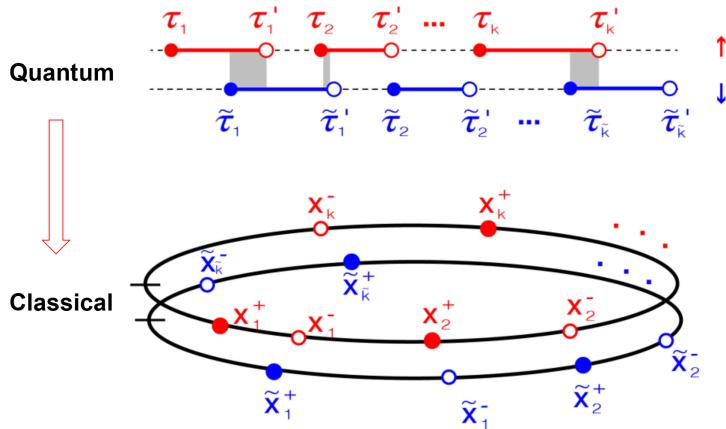


图 1.13 CT-HYB 量子位形与经典分子气体的量子经典对应 [13]。

**Figure 1.13 The quantum-to-classical mapping between CT-HYB configuration and classical molecular gas [13].**

双原子分子系统，如图 1.13 所示。我们把量子模型的莫特相变转化为经典分子气体的气液相变进行研究，为理解莫特转变提供了新的视角 [13]。

### 1.3.3 动力学量子相变

调控温度可以观察到经典相变，零温下调控非热参数可以观察到量子相变。我们还有时间自由度可以调控，因此一个自然的问题是我们能否观察到调控时间引起的相变？M. Heyl 等人在 2013 年针对这一问题提出了动力学量子相变的概念 [34]。他们的主要研究对象是 Loschmidt 回波

$$\mathcal{L}(t) = |\langle \psi_0 | e^{-iHt} | \psi_0 \rangle|^2. \quad \dots (1.26)$$

M. Heyl 等人认为 Loschmidt 回波可以视为边界配分函数 (boundary partition function)  $Z_B = \langle \psi_0 | e^{-RH} | \psi_0 \rangle$  在时间方向上的推广  $R = it$ ，因此可以看作动力学配分函数，其比率函数

$$\lambda(t) = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \ln \mathcal{L}(t), \quad \dots (1.27)$$

则对应动力学自由能。如图 1.14 所示， $\lambda(t)$  在时间方向上的奇异性被命名为动力学量子相变。

动力学量子相变的概念一经提出，便受到了众多科研工作者的关注。经过多年的发展，虽然人们在越来越多的体系中观察到了动力学量子相变，但我们对动力学量子相变的认识深度还远远不够。原因之一是传统的哈密顿量本征值方法

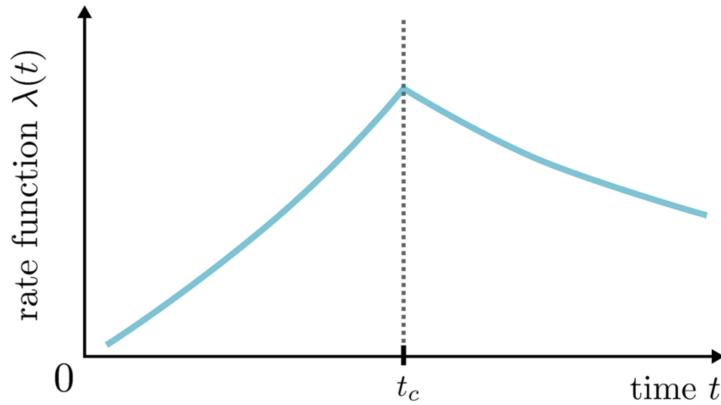


图 1.14 动力学量子相变的示意图 [14]。

**Figure 1.14** A schematic illustration of a dynamical quantum phase transition [14].

只局限于参数突变的情况，极大地限制了我们对非平衡物理的认识。针对这一情况，我们在第四章中把路径积分理论推广到非平衡物理的研究中。我们发展了计算多体系统量子功的泛函路径积分方法，并利用这一方法研究了任意非平衡条件下的动力学量子相变。此外，在未来的研究中，我们还可以借鉴量子经典对应的思想，建立某种时间——空间对偶来研究动力学量子相变，以揭示动力学量子相变发生的真正条件。

#### 1.4 论文结构

在第一章中我们着重介绍了近藤效应、近藤问题和重费米子物理，并通过二流体理论和两阶段杂化图像强调了重费米子体系中杂化涨落和杂化关联的重要性。随后我们还介绍了杂化涨落和杂化关联的理论研究历史和现状。最后，我们讲解了经典相变、量子相变以及最近受到广泛关注的动力学量子相变的基本概念和思想。

在第二章中，我们将详细介绍本论文所使用的研究方法，即路径积分理论和蒙特卡洛 (MC) 方法，并讲解如何将两者有机地结合在一起。

在第三章中，针对传统重费米子方法不能很好处理杂化涨落和空间关联的问题，我们发展了静态辅助场 (SAF) 近似方法来处理重费米子体系中的杂化涨落和杂化关联。结合机器学习，我们研究了两杂质近藤-海森堡模型中的互信息，发现杂化场的振幅互信息可以揭示量子相变而相位互信息则揭示了相位相干性与重费米子杂化图像之间的深刻联系。

在多体系统量子功和动力学量子相变的研究中，针对传统哈密顿量方法局限于参数突变情况的问题，我们在第四章中将路径积分理论推广到非平衡量子热力学的研究中。我们发展了计算多体系统量子功的路径积分方法，解决了旧方法不易推广到任意非平衡过程的缺点。通过计算横场伊辛模型，拓扑模型以及超导模型中的功分布和动力学量子相变，我们展示了新方法的正确性以及优越性。

最后，第五章是总结和展望。



## 第2章 主要理论方法

这一章主要介绍研究强关联电子系统的常用理论和数值方法：路径积分理论与蒙特卡洛方法。我们将通过简单的例子来阐明路径积分与蒙特卡洛方法背后的思想。因为“万变不离其宗”，只有当我们掌握不同方法背后的基本思想后才能灵活地运用该方法并应用到不同的场景中，如将两种方法结合、推广到非平衡和非厄米系统、以及与机器学习结合等。

### 2.1 单粒子系统的路径积分理论

在平衡态物理中，配分函数  $Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}]$  占据着举足轻重的地位。因为一旦求出配分函数，系统的自由能、比热等热力学量也可以随之得到。我们将以简谐振子为例展示如何利用路径积分方法求解配分函数，并说明鞍点解和量子涨落等常用概念的含义。

#### 2.1.1 作用量

简谐振子的哈密顿量为

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2. \quad \dots (2.1)$$

我们希望计算它的配分函数

$$Z = \text{Tr} [e^{-\beta H}] = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle. \quad \dots (2.2)$$

为此，我们先定义传播子

$$G \equiv \langle x_f | e^{-i(t_f - t_i)H/\hbar} | x_i \rangle, \quad \dots (2.3)$$

它代表从  $A(x_i, t_i)$  点到  $B(x_f, t_f)$  点的跃迁概率。一旦求出  $G$  后，我们可以形式上令  $x_f = x_i = x$  以及  $t_f - t_i = -i\beta\hbar$ ，然后再对  $x$  积分便可求得配分函数  $Z = \int dx G$ 。

首先，我们对指数上的时间进行切片，即把时间间隔  $t_f - t_i$  分为  $M$  份，

$$G = \langle x_f | e^{-i\Delta t H/\hbar} e^{-i\Delta t H/\hbar} \dots e^{-i\Delta t H/\hbar} | x_i \rangle, \quad \dots (2.4)$$

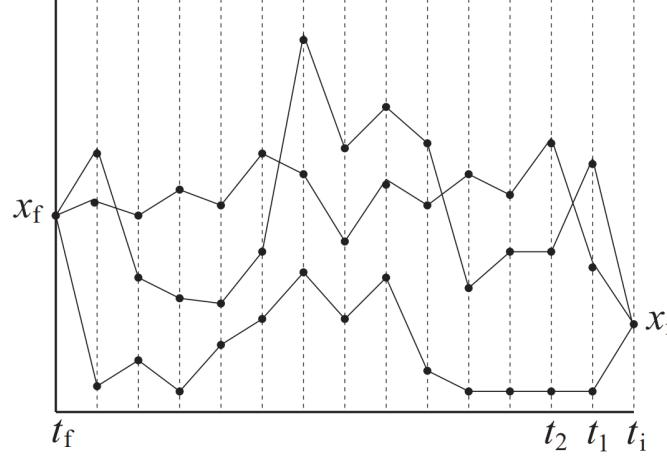


图 2.1 从  $A(x_i, t_i)$  点到  $B(x_f, t_f)$  点的各种可能路径 [15]。

Figure 2.1 Various possible paths from  $A(x_i, t_i)$  to  $B(x_f, t_f)$  [15].

其中  $\Delta t = \frac{t_f - t_i}{M}$ 。然后我们在每一个切片处插入单位一： $\int dx |x\rangle\langle x| = 1$ ，此时传播子可以写为

$$G = \int \left( \prod_{n=1}^{M-1} dx_n \right) \left[ \prod_{n=1}^M \langle x_n | e^{-i \Delta t H / \hbar} | x_{n-1} \rangle \right]. \quad \dots (2.5)$$

为了书写方便，我们在上式中改变了记号  $x_i \equiv x_0$ ,  $x_f \equiv x_M$ 。如图 2.1 所示，上式表明在量子力学中，从  $A$  点到  $B$  点的各种可能路径都是允许的。为了计算从  $A$  点到  $B$  的传播概率，我们需要对各种可能的路径进行求和，因此路径积分也被叫做“历史求和”(sum over histories)。

下面考虑无穷小时间间隔的传播子

$$G_n = \langle x_n | e^{-i \Delta t H / \hbar} | x_{n-1} \rangle. \quad \dots (2.6)$$

进一步插入动量表象的单位一： $\int dp_n |p_n\rangle\langle p_n| = 1$ ，得

$$G_n = \int dp_n \langle x_n | p_n \rangle \langle p_n | e^{-i \Delta t H / \hbar} | x_{n-1} \rangle. \quad \dots (2.7)$$

再利用表象变换的关系  $\langle x | p \rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ ，我们可以消除掉  $G_n$  中的态矢

$$\begin{aligned} G_n &= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{m}{2} \omega^2 x_{n-1}^2} \int dp_n e^{-i \frac{\Delta t}{2m\hbar} p_n^2} e^{i p_n (x_n - x_{n-1}) / \hbar} \\ &= \sqrt{\frac{-i m}{2\pi\hbar\Delta t}} e^{\frac{i m (x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t\hbar} - i \frac{\Delta t}{\hbar} \frac{m}{2} \omega^2 x_{n-1}^2}. \end{aligned} \quad \dots (2.8)$$

在第二个等式中，为了积分掉动量  $p_n$ ，我们利用了如下的高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2+bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}}. \quad \dots (2.9)$$

最后，把  $G_n$  带入式 (2.5) 后整理可得

$$\begin{aligned} G &= \left( \frac{-im}{2\pi\hbar\Delta t} \right)^{M/2} \int \left( \prod_{n=1}^{M-1} dx_n \right) \exp \left[ \frac{i\Delta t}{\hbar} \sum_{n=1}^M \frac{m(x_n - x_{n-1})^2}{2\Delta t^2} - \frac{m\omega^2}{2} x_{n-1}^2 \right] \\ &= \int D[x(t)] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \right) \right] \\ &= \int D[x(t)] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\}, \end{aligned} \quad \dots (2.10)$$

其中  $D[x(t)]$  为积分测度，指数中的函数被称为作用量

$$S[x(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{m\dot{x}^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right). \quad \dots (2.11)$$

上式中的被积函数又被称为拉氏量。

这一小节最重要的思想是：我们可以对指数上的时间段进行切片然后插入单位一，最后进行连续化便可以求出系统的作用量。

### 2.1.2 鞍点解

虽然各种可能的路径都是允许的，但只有鞍点解的路径对传播幅的贡献最大。这可以表述为最小作用原理。

**最小作用原理：**经典力学方程对应作用量的极值解（图 2.2 中实线所示），即粒子从  $A(x_i, t_i)$  点到  $B(x_f, t_f)$  点的经典路径  $x_c(t)$  满足 Euler-Lagrange 方程

$$\delta S = 0 \implies \ddot{x}_c + \omega^2 x_c = 0. \quad \dots (2.12)$$

上式也被称为最小作用原理。最小作用原理的应用非常广泛。比如在相对论中，作用量  $S = \int \sqrt{-g} d^n x R$  的鞍点对应爱因斯坦场方程。在多体物理中，我们常常把  $\delta S = 0$  的解称为鞍点解。可以证明在近藤模型或者近藤海森堡模型中，鞍点解也对应平均场解。

Euler-Lagrange 方程 (2.12) 的解为

$$x_c = \frac{x_f \sin [\omega(t - t_i)] - x_i \sin [\omega(t - t_f)]}{\sin [\omega(t_f - t_i)]}. \quad \dots (2.13)$$

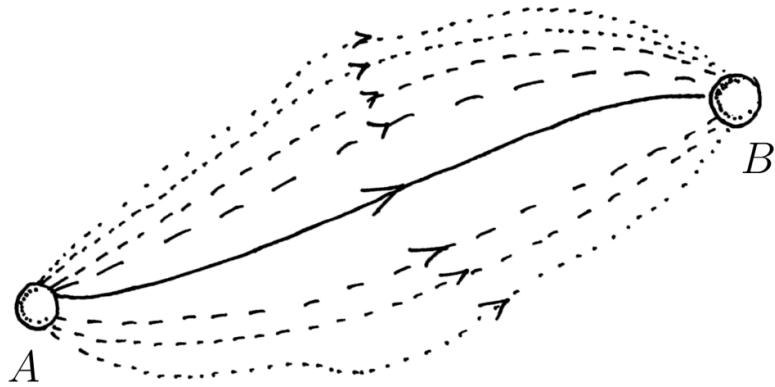


图 2.2 实线为经典路径，虚线则为量子力学所允许的路径 [16]。

**Figure 2.2 The classical path is shown as a solid line, alternative paths allowed by quantum mechanics are shown as dashed lines [16].**

于是经典路径的作用量为

$$\begin{aligned} S[x_c] &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left[ \frac{m\dot{x}_c^2}{2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x_c^2 \right] \\ &= \frac{m\omega}{2 \sin [\omega(t_f - t_i)]} \left\{ \left( x_f^2 + x_i^2 \right) \cos [\omega(t_f - t_i)] - 2x_i x_f \right\}. \end{aligned} \quad \dots (2.14)$$

这一节的核心思想是：我们通过对作用量变分的方法求出体系的鞍点解。在强关联电子体系中，鞍点解往往能给出一个直观的物理图像。

### 2.1.3 量子涨落

在经典力学中，粒子只能沿经典路径运动。但在量子力学中，由于量子效应，偏离经典路径的运动轨迹也是有一定几率出现的，如图 2.2 中虚线所示。为了考虑量子涨落效应，我们把作用量在鞍点解附近做微扰展开

$$S[x_c + y] = S[x_c] + \frac{1}{2!} \int dt_1 dt_2 y(t_1) y(t_2) \frac{\delta^2 S[x]}{\delta x(t_1) \delta x(t_2)}|_{x=x_c}. \quad \dots (2.15)$$

注意到对于简谐振子，上式是严格的，其原因是势能中只有二次项，所以这里没有高阶展开项，由于鞍点满足  $\delta S = 0$ ，所以也没有一阶展开项。

利用作用量的展开表达式，我们可以把传播子写为

$$\begin{aligned} G &= \int D[x(t)] \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]\right\} \\ &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[x_c]\right\} \int D[y(t)] \exp\left\{\frac{im}{2\hbar} \int dt (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)\right\}. \end{aligned} \quad \dots (2.16)$$

在上一节中我们已经计算了  $S[x_e]$ , 为了严格求解传播子  $G$ , 我们还需要求出涨落的贡献  $I_f$

$$I_f \equiv \int \mathcal{D}[y(t)] \exp\left\{\frac{i m}{2\hbar} \int dt (\dot{y}^2 - \omega^2 y^2)\right\}, \quad \dots (2.17)$$

其中由于边界  $A$  和  $B$  是确定的, 所以有  $y(t_i) = 0$ ,  $y(t_f) = 0$ 。将积分改写为求和, 我们发现涨落效应  $I_f$  可以写为如下的简洁形式

$$I_f = \left(\frac{-im}{2\pi\hbar\Delta t}\right)^{M/2} \int \left( \prod_{n=1}^{M-1} dy_n \right) \exp\left[\frac{im}{2\hbar\Delta t} \sum_{i,j=1}^{M-1} y_i (A_{M-1})_{ij} y_j\right], \quad \dots (2.18)$$

其中  $(M-1) \times (M-1)$  维的正方矩阵  $A_{M-1}$  为

$$A_{M-1} = \begin{bmatrix} 2 - \Delta t^2 \omega^2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 - \Delta t^2 \omega^2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \Delta t^2 \omega^2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & \ddots \end{bmatrix}. \quad \dots (2.19)$$

利用积分公式

$$\int dx_1 \cdots dx_n \exp\left(-\sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j\right) = \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{\det A}}, \quad \dots (2.20)$$

将  $y_n$  积分掉后,  $I_f$  可以化简为

$$I_f = \lim_{M \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t \det A_{M-1}} \right)^{1/2}. \quad \dots (2.21)$$

于是我们还需要计算行列式 (2.19) 的值。注意到将  $A_N$  按第一列展开后可得如下的递推关系

$$\det[A_N(\omega)] = (2 - \Delta t^2 \omega^2) \det[A_{N-1}(\omega)] - \det[A_{N-2}(\omega)], \quad \dots (2.22)$$

其中初始两个行列式的值为

$$\begin{aligned} \det[A_1] &= 2 - \Delta t^2 \omega^2, \\ \det[A_2] &= (2 - \Delta t^2 \omega^2)^2 - 1. \end{aligned} \quad \dots (2.23)$$

引入新的定义  $\Psi_N \equiv \Delta t \det[A_N(\omega)]$ , 然后利用上面的递推公式可得

$$\frac{\Psi_N - 2\Psi_{N-1} + \Psi_{N-2}}{\Delta t^2} = -\omega^2 \Psi_{N-1}, \quad \dots (2.24)$$

其中  $N > 2$ , 初值  $\Psi_1$  和  $\Psi_2$  为

$$\Psi_1 = 2\Delta t - \Delta t^3 \omega^2, \quad \frac{\Psi_2 - \Psi_1}{\Delta t} = 1 - 4\Delta t^2 \omega^2 + \Delta t^4 \omega^4, \quad \dots (2.25)$$

在连续极限下  $N \rightarrow \infty$ ,  $\Delta t \rightarrow 0$ , 式 (2.24) 可写为二阶微分方程

$$\frac{d^2\Psi(t)}{dt^2} = -\omega^2\Psi(t), \quad \dots (2.26)$$

其中初值 (2.25) 变为

$$\Psi(t_i) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \Psi_1 = 0, \quad \frac{d\Psi(t)}{dt}|_{t=t_i} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Psi_2 - \Psi_1}{\Delta t} = 1. \quad \dots (2.27)$$

此二阶微分方程的解为

$$\Psi(t) = \frac{\sin [\omega(t - t_i)]}{\omega}, \quad \dots (2.28)$$

带入式 (2.21) 即可求出量子涨落对传播子的贡献

$$I_f = \lim_{M \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t \det A_{M-1}} \right)^{1/2} = \left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin [\omega(t_f - t_i)]} \right)^{1/2}. \quad \dots (2.29)$$

最后, 结合上节中所得的鞍点解  $S[x_c]$ , 便可以求出传播子  $G$  的最终表达式

$$G = \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2\hbar \sin [\omega(t_f - t_i)]} \left\{ (x_f^2 + x_i^2) \cos [\omega(t_f - t_i)] - 2x_i x_f \right\} \right\} \\ \times \left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin [\omega(t_f - t_i)]} \right)^{1/2}. \quad \dots (2.30)$$

做变量替换  $x_f \rightarrow x$ ,  $x_i \rightarrow x$  以及  $t_f - t_i \rightarrow -i\beta\hbar$  后再对  $x$  积分便可求得配分函数

$$Z = \int dx \exp \left\{ \frac{i m \omega \{ 2x^2 \cos [-i\beta\hbar\omega] - 2x^2 \}}{2\hbar \sin [-i\beta\hbar\omega]} \right\} \left( \frac{m\omega}{2\pi\hbar i \sin [-i\beta\hbar\omega]} \right)^{1/2} \\ = \frac{1}{2 \sinh [\beta\hbar\omega/2]}. \quad \dots (2.31)$$

这一节的核心思想是: 在量子体系中存在着量子涨落, 我们可以在鞍点附近做展开把量子涨落效应考虑在内, 从而得到正确的配分函数。



图 2.3 对虚时间隔  $[0, \beta]$  进行时间切片的示意图 [15]。

Figure 2.3 Illustration of the slicing of the imaginary time interval  $[0, \beta]$  [15].

## 2.2 多体系统中的路径积分理论

上一小节中我们以简谐振子为例介绍了单粒子系统中的作用量、鞍点近似以及量子涨落的概念。这一节我们把相关概念推广到多体系统中。

在多体系统中，我们需要处理如下类型的哈密顿量

$$H = \sum_{ij,\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H_{\text{int}}, \quad \dots (2.32)$$

其中  $c_i$  可以为费米子或玻色子算符， $H_{\text{int}}$  代表粒子间的相互作用项。其配分函数可以表示为

$$Z = \int \mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) \exp \left( - \sum_i \bar{\psi}_i \psi_i \right) \langle \zeta \psi | \exp(-\beta H) | \psi \rangle, \quad \dots (2.33)$$

其中边界条件为

$$\bar{\psi}(0) = \zeta \bar{\psi}(\beta), \psi(0) = \zeta \psi(\beta), \quad \dots (2.34)$$

对于玻色子  $\zeta = 1$ ，对于费米子  $\zeta = -1$ 。如图 2.3 所示，采用同样的时间切片办法，我们把虚时  $\beta$  分为  $M$  份，然后在每一个小间隔处插入单位一，最后取连续极限  $M \rightarrow \infty$ ，便可以求出系统的配分函数

$$Z = \int \mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) e^{-S[\bar{\psi}, \psi]}, \quad \dots (2.35)$$

与作用量

$$S [\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \left[ \sum_{ij,\sigma} \bar{\psi}_{i\sigma} (\partial_\tau + t_{ij}) \psi_{j\sigma} + H_{\text{int}}(\bar{\psi}, \psi) \right]. \quad \dots (2.36)$$

在玻色子系统中， $\psi$  为复变量，在费米子系统中  $\psi$  为 Grassmann 变量。

对于本文所涉及的费米子系统，我们不能对 Grassmann 变量直接做鞍点近似。常用的处理办法是通过 Hubbard-Stratonovich 变换引入玻色型的辅助场  $\phi$  将  $H_{\text{int}}$  解耦，然后积分掉费米子得到仅与复变量有关的有效作用量  $S_{\text{eff}}[\phi]$ 。

$$\begin{aligned} Z &= \int D\phi D\Psi \exp \left\{ -\Psi^\dagger M[\phi] \Psi - S_0[\phi] \right\} \\ &= \int D\phi \exp \left\{ -S_0[\phi] \right\} \det M[\phi]. \end{aligned} \quad \dots (2.37)$$

于是有效作用量为

$$S_{\text{eff}}[\phi] = -\ln \det M[\phi] + S_0[\phi], \quad Z = \int D\phi \exp \left\{ -S_{\text{eff}}[\phi] \right\}. \quad \dots (2.38)$$

最后我们基于有效作用量分析所关心的物理量。

## 2.3 蒙特卡洛方法

### 2.3.1 蒙特卡洛方法简介

在前面两节中，我们利用路径积分理论把系统的配分函数写为如下形式

$$Z = \int D\phi e^{-S_{\text{eff}}[\phi]}, \quad \dots (2.39)$$

$\phi$  代表某种辅助场的构型。依赖于模型的不同， $S_{\text{eff}}[\phi]$  可能具有非常复杂的形式，因此很难精确地计算相关的物理量。除了上述的鞍点近似和微扰展开等解析方法，我们还可以利用蒙特卡洛来数值求解。

比如对于物理量  $Q[\phi]$ ，其系综平均可以表示为

$$\langle Q[\phi] \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi Q[\phi] e^{-S_{\text{eff}}[\phi]}. \quad \dots (2.40)$$

当作用量  $S_{\text{eff}}[\phi]$  是实数时，我们可以定义概率密度函数

$$p[\phi] \equiv \frac{e^{-S_{\text{eff}}[\phi]}}{Z}, \quad \dots (2.41)$$

其满足归一化条件

$$\int D\phi p[\phi] = 1. \quad \dots (2.42)$$

于是式 (2.40) 可以改写为

$$\langle Q[\phi] \rangle = \int D\phi Q[\phi] p[\phi]. \quad \dots (2.43)$$

由于  $\phi$  与格点数和时间切片的数目有关，其维数很大，因此我们很难用简单的数值积分方法来计算式(2.40)或(2.43)。但是注意到在通常情况下，鞍点  $\partial_\phi S_{\text{eff}}[\phi] = 0$  处的构型对配分函数的贡献最大，其他构型对配分函数的贡献则指数衰减，表明鞍点及鞍点附近的构型出现的概率也是最大的。于是我们可以利用蒙特卡洛来把这些出现概率较大的构型筛选出来，即重要性抽样。下面介绍重要性抽样方法的思想。

我们希望抽取的样本满足分布(2.41)，这可以通过构造如下 Markov 链实现，即给定一个初始位形  $\{\phi^0\}$ ，其概率密度记为  $p[\phi^0] \equiv p[\{\phi^0\}]$ ，我们按照跃迁概率  $W_{01}$  更新到新位形  $\{\phi^1\}$ ，然后按照跃迁概率  $W_{12}$  更新到新位形  $\{\phi^2\}$ ，如此重复这个过程

$$\{\phi^0\} \xrightarrow{W_{01}} \{\phi^1\} \xrightarrow{W_{12}} \{\phi^2\} \xrightarrow{W_{23}} \{\phi^3\} \longrightarrow \dots \quad (2.44)$$

便得到了一个 Markov 链。此时我们需要选取恰当的跃迁概率  $W$  使得当更新次数足够多时，样本满足分布(2.41)，即

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p[\phi^n] = \frac{e^{-S_{\text{eff}}[\phi]}}{Z}. \quad (2.45)$$

要保证这一点，需要满足下面两个条件：

**各态历经：**任意两组位形能通过有限次 Markov 过程相联。

**细致平衡条件：**

$$p[\phi^x] W_{xy} = p[\phi^y] W_{yx}. \quad (2.46)$$

### 2.3.2 Metropolis 算法

**表 2.1 Metropolis 算法：**其中第三行和第五行相等，证明该算法满足细致平衡条件。

**Table 2.1 Metropolis algorithm: detailed balance holds because the third and fifth rows of this table are equal.**

Case	$S_{\text{eff}}[\phi'] > S_{\text{eff}}[\phi]$	$S_{\text{eff}}[\phi'] < S_{\text{eff}}[\phi]$
$P_A[\phi \rightarrow \phi']$	$\exp[-(S_{\text{eff}}[\phi'] - S_{\text{eff}}[\phi])]$	1
$p[\phi] P_A[\phi \rightarrow \phi']$	$\exp(-S_{\text{eff}}[\phi'])/Z$	$\exp(-S_{\text{eff}}[\phi])/Z$
$P_A[\phi' \rightarrow \phi]$	1	$\exp[-(S_{\text{eff}}[\phi] - S_{\text{eff}}[\phi'])]$
$p[\phi'] P_A[\phi' \rightarrow \phi]$	$\exp(-S_{\text{eff}}[\phi'])/Z$	$\exp(-S_{\text{eff}}[\phi])/Z$

为了生成满足分布(2.41)的样本，我们采用最著名的 Metropolis 算法。先任意生成一组初始位形  $\{\phi\}$ ，其中变量  $\phi$  的个数为  $N$ ，即  $\phi \equiv (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N)$ 。从

$N$  个变量中任意选取一个  $\phi_i$  进行更新

$$\phi'_i = \phi_i + \Delta \cdot x, \quad \dots (2.47)$$

其中  $x$  是  $[-1, 1]$  之间的随机数,  $\Delta$  为更新步长, 可以用于调节接收概率。新构型的组态记为  $\{\phi'\}$ , 然后比较更新前后有效作用量的变化

$$\Delta S = S_{\text{eff}} [\phi'] - S_{\text{eff}} [\phi]. \quad \dots (2.48)$$

最后, 我们以  $P_A [\phi \rightarrow \phi']$  的概率接收新位形

$$P_A [\phi \rightarrow \phi'] = \min [1, e^{-\Delta S}]. \quad \dots (2.49)$$

一般情况下使接收概率  $P_A [\phi \rightarrow \phi']$  在 0.5 附近。表 2.1 中第三行和第五行相等, 证明了 Metropolis 算法满足细致平衡条件 [35]

$$p [\phi] P_A [\phi \rightarrow \phi'] = p [\phi'] P_A [\phi' \rightarrow \phi]. \quad \dots (2.50)$$

我们把  $N$  次这样的更新记为一次扫描。由于存在自关联时间, 我们需要间隔一定的扫描次数存储位形, 最后对样本平均便可求得物理量的期望值

$$\langle Q [\phi] \rangle \approx \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} Q [\{\phi^i\}], \quad \dots (2.51)$$

其中  $N_s$  为总的样本个数。

除上述单个位形的更新方法外, 还有集团更新的算法。对于本文第三章中所关注的两杂质近藤-海森堡模型, 由于辅助场的变量不多, 单个位形更新的方法已经足够有效。但是对于近藤-海森堡晶格模型, 则需要采用集团更新的方法以避免临界减慢 (critical slowing down) 现象。

## 2.4 本章小结

本章以简谐振子为例将路径积分理论的基本思想阐述完毕。总结如下:

第一步先对指数上的因子进行时间切片

$$e^{-i t H / \hbar} = (e^{-i \Delta t H / \hbar})^M, \quad \Delta t = \frac{t}{M}. \quad \dots (2.52)$$

第二步则是对无穷小的时间间隔  $\Delta t$  做展开

$$e^{-i \Delta t H / \hbar} = 1 - i \frac{\Delta t}{\hbar} H (\hat{A}, \hat{B}) + O (\Delta t^2), \quad \dots (2.53)$$

其中哈密顿量是算符  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  的函数, 其本征态分别为  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$  (在简谐振子中,  $\hat{A} = \hat{x}$ ,  $\hat{B} = \hat{p}$ )。

第三步则是插入单位一,

$$\begin{aligned} e^{-i\Delta t H/\hbar} &= \sum_{a,b} |a\rangle\langle b| \left[ 1 - i \frac{\Delta t}{\hbar} H(\hat{A}, \hat{B}) + O(\Delta t^2) \right] |b\rangle\langle b| \\ &= \sum_{a,b} |a\rangle\langle b| e^{-i\Delta t H(a,b)/\hbar} |b\rangle\langle b| + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad \dots (2.54)$$

其中  $H(a, b)$  是哈密顿量  $H(\hat{A}, \hat{B})$  在本征态  $|a\rangle$ ,  $|b\rangle$  下的值。

第四步则是取连续极限, 求出作用量。注意在上一步中我们已经把算符变成了数, 因此不再需要考虑算符的对易关系, 这也是路径积分方法的优点之一。

最后则是根据作用量计算相关的物理量。比如通过鞍点近似求出体系的平均场解。平均场解通常比较简单, 这有助于我们初步了解体系的物理图像。如果想考虑涨落效应, 则需要在鞍点解附近做微扰展开, 比如随机相近似 (RPA) 方法、Ginzburg-Landau-Wilson 理论、引力波等。当系统中没有小量进行微扰展开时, 则可以利用蒙特卡洛方法来处理涨落效应。

值得注意的是, 以上方法不仅对平衡态配分函数  $Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}]$  成立, 在非平衡物理的研究中, 我们也可以利用类似的步骤计算量子功的特征函数

$$G(u) = Z_0^{-1} \text{Tr} \left[ U^\dagger(T_0, 0) e^{iuH(T_0)} U(T_0, 0) e^{-(iu+\beta)H(0)} \right], \quad \dots (2.55)$$

其中  $Z_0$  为初始时刻配分函数,  $U(T_0, 0) = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_0^{T_0} dt H(t) \right]$  为时间演化算符,  $\mathcal{T}$  为时序算符 (time-ordering operator)。我们将在第四章详细说明  $G(u)$  的具体含义, 这里仅从数学计算的角度来看待  $G(u)$ 。平衡态配分函数中只有一个指数因子, 而量子功的特征函数中包含四个指数因子, 因此利用路径积分方法计算  $G(u)$  的基本思想不变, 只是计算复杂度有所增加。



## 第3章 两杂质模型中的互信息与相位相干性

在第一章中我们强调了杂化涨落和杂化关联的重要性，但传统的研究方法不能很好地处理这些效应。在这一章中，我们将利用静态辅助场 (SAF) 近似方法来研究两杂质近藤-海森堡模型中的杂化涨落，并利用互信息来揭示量子相变和杂化场的相位关联，为将来研究近藤晶格模型中的杂化涨落和杂化关联打下基础。

### 3.1 研究背景

P. W. Anderson 早在 1972 年就指出：“多者异也” (More is different) [36]，多体系统中涌现出的集体现象不能视为子系统微观特性的简单相加，表明不同子系统之间的关联性将在多体系统中扮演至关重要的角色。互信息则能很好地刻画子系统之间的关联性质，它是信息论中最核心的概念之一，能够度量两个随机变量之间的统计依赖性 [37–39]。近年来，互信息的概念被广泛应用到凝聚态物理的研究中，比如在不明确系统的序参量和对称性破缺的情况下，可以利用互信息来研究相变 [40–49]。但另一方面，强关联电子系统中互信息的研究则比较少，还处于萌芽阶段 [50–53]。

近藤系统是研究得最广泛的强关联电子系统之一 [54]。在理论上，人们常常利用赝费米子表示来处理局域自旋。因为这个表示能清晰地揭示赝费米子与导带电子之间的杂化物理 [2]。传统上，大部分的研究均基于平均场近似 [55–63]。平均场近似的图像虽然简单清晰，但它忽略了杂化涨落。而杂化场的涨落可能会引起新的物理，比如最近在超快泵浦光探测实验中观察到的两阶段杂化图像以及 ARPES 实验中观察到的高温能带弯曲现象等 [8, 9]。此外，在有限温度下，近藤效应是一个渐变行为，由于忽略了涨落效应，平均场理论会给出与实验不相符的一级相变（两杂质模型）或二级相变（晶格模型）的结论 [5, 23, 64, 65]。鉴于杂化涨落的重要性，人们越来越重视杂化涨落的研究并且有了一定的进展。但是由于解析研究的困难性，人们的手段常常局限于杂化场的低能有效理论的微扰展开 [24, 25, 30–33, 66]。在数值上，严格对角化、行列式蒙特卡洛和动力学平均场等方法则不能直接地处理杂化场 [11, 67–78]。因此迄今为止，我们还不能

很好地研究杂化涨落效应，这极大地限制了我们对丰富杂化物理的探索 [7]。

在这一章节中，我们采用静态辅助场近似方法来直接模拟杂化场的概率分布。这一方法能非常好地处理杂化场的空间涨落和空间关联，因此它超越了传统的平均场理论。由于没有符号问题，我们可以使用标准的蒙特卡洛抽样来研究杂化分布。基于杂化分布，我们还可以利用杂化互信息来揭示杂化场的空间关联以及量子相变等物理。值得注意的是，该方法不仅可以用于研究单杂质问题，还可以研究多杂质模型以及晶格模型。但为了使论文内容更清晰和紧凑，在这一章中，我们主要以两杂质近藤-海森堡模型为例来展示该方法。

把这一方法应用到两杂质模型时，我们发现考虑杂化涨落之后，平均场理论的一级相变会被抑制而变为渐变行为，与数值重整化群 (NRG) 方法的结论和实验结果一致 [79–82]。我们还利用最近提出的互信息神经网络估计器计算了杂化场的互信息 [83]，发现振幅互信息在所谓的“Varma-Jones”不动点 [79] 上随温度降低而对数发散。在近藤作用占主导的区间，当两个杂质的距离较近时相位互信息不为零，当杂质距离较远时相位互信息变为零，表明杂化场的相位相干性随距离增加而消失。此外，我们还通过计算局域态密度和电阻等物理量并将其与实验结果比较，进一步揭示格点间相位相干性的重要性。

### 3.2 静态辅助场近似方法

两杂质近藤-海森堡模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_K \sum_{i=1}^2 \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i + J_H \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2, \quad \dots (3.1)$$

其中  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  为导带电子的色散关系， $J_K$  和  $J_H$  分别为近藤和海森堡相互作用的强度， $\mathbf{S}_i$  是定义在格点  $\mathbf{R}_i$  上的局域自旋， $\mathbf{s}_i = \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{\alpha\beta}}{2} c_{i\beta}$  则为相应格点上的导带电子自旋。在这个模型中，我们以海森堡相互作用来模拟实际体系中的 RKKY 相互作用。两杂质近藤-海森堡模型虽然简单，但它包含了近藤效应和 RKKY 相互作用的竞争。正是这两种效应的竞争使得重费米子体系拥有各种奇异物态，如非常规超导、非费米液体、反常奈特位移等 [29]。因此研究两杂质模型是研究重费米子晶格模型的第一步。在反铁磁极限下， $J_H \gg J_K$ ，两个局域自旋在零温时将形成反铁磁单态；而在近藤极限下， $J_K \gg J_H$ ，局域自旋会被导带电子屏蔽并形成近藤单态。在有粒子空穴对称时，尽管系统没有发生自发对称破缺，但依然存

在从反铁磁单态到近藤单态的量子相变，相变点也被称为“Varma-Jones”不动点。当粒子空穴对称性消失时，量子相变点消失 [84, 85]。

为了揭示杂化物理，我们采用 Abrikosov 费米子表示  $\mathbf{S}_i = \sum_{\eta\gamma} f_{i\eta}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{\eta\gamma}}{2} f_{i\gamma}$  来描述局域自旋，这里  $i = 1, 2$ 。利用恒等式

$$\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\eta\gamma} = 2\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\eta\beta} - \delta_{\eta\gamma}\delta_{\alpha\beta}, \quad \dots (3.2)$$

我们可以把哈密顿量 (3.1) 写为

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{J_K}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} f_{i\beta}^\dagger c_{i\beta} - \frac{J_H}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{2\alpha} f_{2\beta}^\dagger f_{1\beta}. \quad \dots (3.3)$$

为了处理上式中的近藤和海森堡相互作用，我们需要引入如下两组 Hubbard-Stratonovich 变换

$$\frac{J_K}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} f_{i\beta}^\dagger c_{i\beta} \rightarrow -\frac{J_K |V_i|^2}{2} - \frac{J_K}{2} \left( \bar{V}_i \sum_{\beta} f_{i\beta}^\dagger c_{i\beta} + \text{H.c.} \right), \quad \dots (3.4)$$

以及

$$\frac{J_H}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{2\alpha} f_{2\beta}^\dagger f_{1\beta} \rightarrow -\frac{J_H |\chi|^2}{2} - \frac{J_H}{2} \left( \bar{\chi} \sum_{\alpha} f_{2\alpha}^\dagger f_{1\alpha} + \text{H.c.} \right), \quad \dots (3.5)$$

其中  $V_i(\tau)$  是格点  $i$  上传导电子与局域自旋之间的杂化场，而  $\chi(\tau)$  场则描述了局域自旋之间的磁关联性质。经过变换后，系统的配分函数可以表示为

$$Z = \int \mathcal{D} [c^\dagger, c, f^\dagger, f, \bar{V}_i, V_i, \bar{\chi}, \chi, \lambda_i] \exp \left( - \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(\tau) \right), \quad \dots (3.6)$$

其中拉氏量为

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (\partial_\tau + \epsilon_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i,\alpha} f_{i\alpha}^\dagger (\partial_\tau + \lambda_i) f_{i\alpha} - \sum_{i=1}^2 \lambda_i \\ & + \frac{J_K}{2} \sum_{i=1}^2 \left( \bar{V}_i V_i + \bar{V}_i \sum_{\alpha} f_{i\alpha}^\dagger c_{i\alpha} + V_i \sum_{\alpha} c_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} \right) \\ & + \frac{J_H}{2} \left( \bar{\chi} \chi + \bar{\chi} \sum_{\alpha} f_{2\alpha}^\dagger f_{1\alpha} + \chi \sum_{\alpha} f_{1\alpha}^\dagger f_{2\alpha} \right). \end{aligned} \quad \dots (3.7)$$

这里我们引入了拉格朗日乘子  $\lambda_i$  以使费米子满足约束条件  $n_f^i = 1$ 。利用 Wick 旋转后， $\lambda_i$  可以取为实数 [86]。

式(3.7)描述的是传导电子  $c$  和赝费米子  $f$  在不断涨落的两种背景场  $V_i(\tau)$  和  $\chi(\tau)$  下的运动。在动量和松原频率的空间中，我们可以引入如下的矢量

$$\Psi_{n\sigma} = [c_{\mathbf{k}_1\sigma n}, \dots, c_{\mathbf{k}_{N_0}\sigma n}, f_{1\sigma n}, f_{2\sigma n}]^T, \quad \dots (3.8)$$

从而将作用量  $S = \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(\tau)$  简写成

$$S = \sum_{i,n} \frac{\beta J_K |V_{i,n}|^2}{2} + \sum_n \frac{\beta J_H |\chi_n|^2}{2} - \beta \sum_{i=1}^2 \lambda_i + \sum_{nm\sigma} \Psi_{n\sigma}^\dagger (O_{nm} - i\omega_n \delta_{nm}) \Psi_{m\sigma}, \quad \dots (3.9)$$

其中  $V_{i,n}$  和  $\chi_n$  分别为辅助场  $V_i(\tau)$  和  $\chi(\tau)$  在松原频率  $i\omega_n$  空间中的第  $n$  个分量，而费米子矩阵  $O_{nm}$  则为

$$O_{nm} = \begin{bmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}_1} & \cdots & 0 & V_{1,n-m}^1 & V_{2,n-m}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \epsilon_{\mathbf{k}_{N_0}} & V_{1,n-m}^{N_0} & V_{2,n-m}^{N_0} \\ \overline{V}_{1,m-n}^1 & \cdots & \overline{V}_{1,m-n}^{N_0} & \lambda_1 & \frac{J_H \chi_{n-m}}{2} \\ \overline{V}_{2,m-n}^1 & \cdots & \overline{V}_{2,m-n}^{N_0} & \frac{J_H \overline{\chi}_{m-n}}{2} & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad \dots (3.10)$$

式中  $V_{i,n-m}^j = \frac{J_K e^{i\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{k}_j} V_{i,n-m}}{2\sqrt{N_0}}$ ，其中  $N_0$  表示的是传导电子在第一布里渊区中的动量个数。注意到费米子矩阵  $O_{nm}$  的维度是无穷大，因此我们很难严格求解作用量(3.9)。在本文中，我们对辅助场做如下近似

$$V_{i,n-m} = V_i \delta_{nm}, \quad \chi_{n-m} = \chi \delta_{nm}, \quad \dots (3.11)$$

此时有  $O_{nm} = O \delta_{nm}$ 。在虚时表示下有  $V_i(\tau) = V_i$  和  $\chi(\tau) = \chi$ ，由此可见，这个近似方案的缺点是忽略了辅助场的虚时涨落，优点则是完全保留了辅助场的空间涨落和空间关联效应[87–92]。表3.1比较了几种常见的处理重费米子系统的方法的优缺点。由于在重费米子体系中，杂化场的涨落和关联效应是非常重要的，因此本文采用静态辅助场近似是合理的。

利用积分公式

$$\int D[\Psi^\dagger, \Psi] \exp[-\Psi^\dagger M \Psi] = \det M \quad \dots (3.12)$$

将费米子自由度积分掉后，我们可以得到关于辅助场的有效作用量

$$S_{\text{eff}} = \beta \sum_{i=1}^2 \left( \frac{J_K |V_i|^2}{2} - \lambda_i \right) + \frac{\beta J_H |\chi|^2}{2} - 2 \sum_n \ln \det(O - i\omega_n), \quad \dots (3.13)$$

表3.1 不同方法的比较。

Table 3.1 Comparison of different methods.

方法	优点	缺点
平均场理论	图像简单清晰	忽略了涨落效应
微扰展开	考虑了部分涨落效应	局限于大 $N$ 展开
动力学平均场理论	考虑了动力学涨落	忽略了空间涨落和关联
静态辅助场近似	包含空间涨落和关联	忽略了辅助场的动力学涨落
行列式蒙特卡洛	完全包含涨落	非半满时有符号问题

式中

$$O = \begin{bmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}_1} & \cdots & 0 & V_1^1 & V_2^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \epsilon_{\mathbf{k}_{N_0}} & V_1^{N_0} & V_2^{N_0} \\ \overline{V}_1^1 & \cdots & \overline{V}_1^{N_0} & \lambda_1 & \frac{J_H \chi}{2} \\ \overline{V}_2^1 & \cdots & \overline{V}_2^{N_0} & \frac{J_H \chi}{2} & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad V_i^j = \frac{J_K e^{i \mathbf{R}_i \cdot \mathbf{k}_j} V_i}{2\sqrt{N_0}}. \quad \dots (3.14)$$

进一步利用松原频率求和公式  $\sum_n \ln(x - i\omega_n) = \ln(1 + e^{-\beta x})$ , 我们可以把有效作用量写为

$$S_{\text{eff}} = \beta \sum_{i=1}^2 \left( \frac{J_K |V_i|^2}{2} - \lambda_i \right) + \frac{\beta J_H |\chi|^2}{2} - 2 \sum_l \ln(1 + e^{-\beta \xi_l}), \quad \dots (3.15)$$

其中  $\xi_l$  为  $O$  矩阵的本征值。由于  $O$  矩阵为厄米矩阵, 其本征值  $\xi_l$  总是实数, 所以有效作用量也是实数, 于是我们可以利用蒙特卡洛方法来对辅助场进行抽样。

以上是基于路径积分形式理论的表述, 我们还可以从哈密顿量的算符角度看待式 (3.13)。有效作用量 (3.13) 对应的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{J_K}{2} \sum_{i,\sigma} \left( V_i c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \text{H.c.} \right) + \frac{J_H}{2} \sum_{\sigma} \left( \chi f_{1\sigma}^\dagger f_{2\sigma} + \text{H.c.} \right), \quad \dots (3.16)$$

其中赝费米子满足约束条件  $n_f^i = 1$ , 经典随机变量  $V_i$  和  $\chi$  的初始分布为

$$p_0(V_i) \sim \exp(-\beta J_K |V_i|^2/2), \quad p_0(\chi) \sim \exp(-\beta J_H |\chi|^2/2). \quad \dots (3.17)$$

这类体系属于广义的“自旋-费米子”模型 [93–96], 比如有研究者把近藤-海森堡模型中的局域自旋看作经典变量进行研究 [97]。我们则第一次从辅助粒子的

角度来处理局域自旋，这样做好处是能清晰地揭示重费米子体系中的杂化物理。同时，我们还可以借鉴文献中研究“自旋-费米子模型”的方法来研究杂化物理，如利用 traveling cluster approximation (TCA) 近似或者机器学习方法来加速抽样 [98, 99]。

为方便起见，我们在本章的研究中把导带电子的色散关系取为

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -(\cos k_x + \cos k_y)/2. \quad \dots (3.18)$$

此时体系具有粒子空穴对称性，拉格朗日乘子为  $\lambda_i = 0$  [100]，于是辅助场的概率密度函数可以表示为

$$p(\bar{V}_i, V_i, \bar{\chi}, \chi) = \frac{\exp(-S_{\text{eff}})}{Z}, \quad \dots (3.19)$$

其中配分函数  $Z$  为归一化因子。由于辅助场  $V_i$  和  $\chi$  都是复变量且变量个数比较多，我们很难利用直接法来计算杂化分布，因此本文利用 Metropolis 算法来对杂化分布进行抽样。即从任意的初始位形出发，先计算有效作用量  $S_{\text{eff}}^{\text{old}}$ ；然后随机选取一个位形进行更新并计算新位形下的有效作用量  $S_{\text{eff}}^{\text{new}}$ ；其次是生成一个在零到一范围内的随机数  $\alpha$  并与概率  $p = \exp[-(S_{\text{eff}}^{\text{new}} - S_{\text{eff}}^{\text{old}})]$  比较，如果  $\alpha < p$  则接收新位形，反之则不接收新位形。重复这一过程并在系统完全热化后间隔一定步长存储所得的位形，最后所得的位形满足分布 (3.19)。在计算中，我们固定海森堡相互作用强度  $J_H = 0.1$  并把导带电子的半宽设为能量单位。此外，如无特殊说明，两个杂质之间的距离为  $|\mathbf{R}| = |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1| = 1$ 。

### 3.3 互信息

#### 3.3.1 互信息简介

有了杂化的概率密度函数之后，我们可以进一步利用互信息揭示杂化场之间的关联性质。下面我们简单介绍互信息的基本概念和性质。

**定义 3.1.** 对于任意两个随机变量  $X$  和  $Y$ ，它们的联合概率密度函数为  $p(x, y)$ 。 $X$  与  $Y$  之间的互信息定义为

$$I(X; Y) = \iint p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} dx dy, \quad \dots (3.20)$$

其中  $p(x) = \int p(x, y) dy$  和  $p(y) = \int p(x, y) dx$  为边缘概率密度函数。

互信息  $I(X;Y)$  量化了可以从  $Y$  获得的关于  $X$  的信息（反之亦然），其可以表示为

$$I(X;Y) = H(X) + H(Y) - H(X,Y) = H(X) - H(X|Y), \quad \dots (3.21)$$

其中  $H(X) = -\int dx p(x) \log p(x)$  为香农熵，因此式 (3.20) 也被称为香农互信息。在式 (3.20) 中，当对数  $\log$  的底为 2 时，互信息的单位是比特；当  $\log$  的底为  $e$  时，互信息的单位为奈特。本文以比特为互信息的单位。

互信息还可以衡量两个随机变量之间的相互依赖关系，它即能刻画线性相关性也能描述非线性相关性，这可以通过如下例子看出。设随机变量  $X$  取 0, 1, -1 的概率分别为  $1/3$ ，其期望值为  $\mathbb{E}(X) = 0$ ；设随机变量  $Y = X^2$ ，那么  $Y$  取 0 的概率为  $1/3$ ， $Y$  取 1 的概率为  $2/3$ ，其期望值为  $\mathbb{E}(Y) = 2/3$ 。 $X$  和  $Y$  的联合概率分布如表 3.2 所示。根据表 3.2，我们可以求出  $X$  与  $Y$  之间的互信息

$$I(X;Y) = \sum_{x,y} p(x,y) \log \frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} = \frac{1}{3} \log \frac{27}{4}. \quad \dots (3.22)$$

表 3.2 随机变量  $X$  和  $Y$  的联合概率分布  $p(x,y)$ 。

**Table 3.2 The joint probability  $p(x,y)$  of random variables  $X$  and  $Y$ .**

	$X = -1$	$X = 0$	$X = 1$
$Y = 0$	0	$1/3$	0
$Y = 1$	$1/3$	0	$1/3$

值得注意的是， $XY$  的期望值为  $\mathbb{E}(XY) = 0$ ，从而协方差为

$$\text{cov}(X,Y) = \mathbb{E}(XY) - \mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y) = 0. \quad \dots (3.23)$$

我们可以看到尽管  $X$  和  $Y$  的协方差为零，但并不代表  $X$  和  $Y$  不相关。其原因是协方差仅能刻画两个随机变量之间的线性相关性，而互信息不仅可以刻画线性相关性还可以描述非线性相关性。由于有效作用量非常复杂，这意味着辅助场之间具有非常复杂的依赖关性，因此本文利用互信息来度量杂化场之间的关联性质。

### 3.3.2 互信息的神经网络算法

由于我们常常只有关于随机变量分布的样本而没有概率密度函数的解析表达式，因此解析地计算互信息 (3.20) 是很困难的 [101]。在数值上，一种最直接

也最简单的办法是把积分换成求和，即利用直方图统计每个小方格中的样本个数来计算互信息

$$\begin{aligned} I(X;Y) \approx I_{\text{binned}} &= \sum_{ij} p(i,j) \log \frac{p(i,j)}{p_x(i)p_y(j)}, \\ p_x(i) &= \frac{n_x(i)}{N_{\text{tot}}}, \quad p_y(j) = \frac{n_y(j)}{N_{\text{tot}}}, \quad p(i,j) = \frac{n(i,j)}{N_{\text{tot}}}, \end{aligned} \quad \dots (3.24)$$

其中  $N_{\text{tot}}$  为总的样本数， $n_x(i)$  和  $n_y(j)$  分别为第  $i, j$  个小方格中  $X$  和  $Y$  的样本个数， $n(i,j)$  则是两个格子交集中的样本数。但是该方法的缺点是格子的大小不同会对结果产生很大的影响 [102]。值得庆幸的是，在 2018 年，M. I. Belghazi 等人提出了利用神经网络计算互信息的方法 [83]。随后，在 2020 年，A. Nir 等人成功利用该方法计算了经典伊辛模型、XY 模型、以及非热体系中的互信息和熵 [103]。本文也将利用这一新的神经网络方法来计算杂化场的互信息。下面我先简单介绍这一方法的思想。

**定义 3.2.** 任意两个概率密度函数  $f(x)$  和  $g(y)$  之间的 Kullback-Leibler 散度定义为

$$D_{\text{KL}}(f(x) \| g(y)) = \iint dx dy f(x) \log \frac{f(x)}{g(y)}, \quad \dots (3.25)$$

它度量了两个分布之间的差异，也被称为相对熵。

**定理 3.1.** Donsker-Varadhan 表示：设  $p, q$  为  $\mathbb{R}^N$  上的两个概率分布， $\mathcal{F}$  为函数  $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  的集合，则 Kullback-Leibler 散度具有如下变分形式

$$D_{\text{KL}}(p \| q) \geq \sup_{f \in \mathcal{F}} \mathbb{E}_p[f] - \log(\mathbb{E}_q[e^{f_p}]), \quad \dots (3.26)$$

其中  $\sup$  遍历  $\mathcal{F}$  中的所有函数；当  $\mathcal{F}$  的函数空间足够大时，等号成立；当两个期望值都有限时，则等号右边的值也有限 [104]。

根据定义 3.2，我们可以把互信息表示为联合概率密度  $p(x,y)$  和边缘概率密度乘积  $p(x)p(y)$  的 Kullback-Leibler 散度

$$I(X;Y) = D_{\text{KL}}(p(x,y) \| p(x)p(y)). \quad \dots (3.27)$$

把互信息写为 Kullback-Leibler 散度后，再利用定理 3.1，我们可以把互信息表示为

$$I(X;Y) \geq I_\theta(X;Y) = \sup_{\theta \in \Theta} \mathbb{E}_{p(x,y)}[f_\theta] - \log(\mathbb{E}_{p(x)p(y)}[e^{f_\theta}]), \quad \dots (3.28)$$

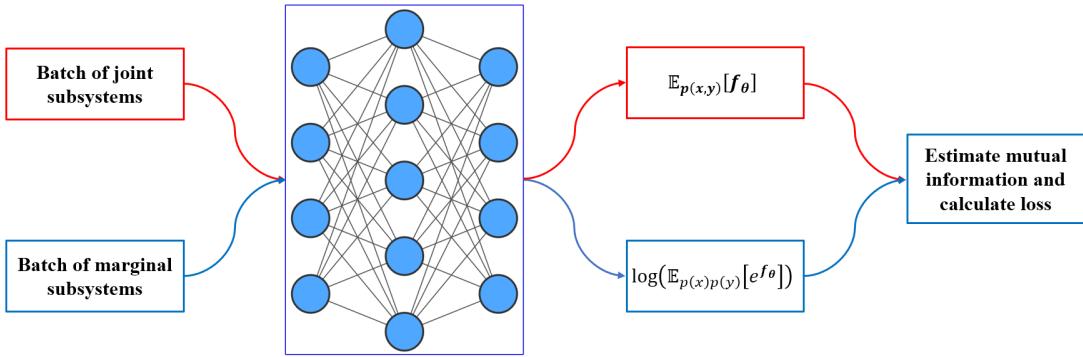


图 3.1 计算互信息的神经网络示意图。

**Figure 3.1** A schematic diagram of the neural network for calculating mutual information.

其中  $f_\theta (\theta \in \Theta)$  是一个可以利用神经网络参数化的函数。 $I_\theta(X;Y)$  给出了真实互信息的下界。当参数空间足够大时，等号成立，此时  $I_\theta(X;Y)$  逼近真实的互信息  $I(X;Y)$ 。经验证，我们可以利用三层神经网络来逼近真实的互信息，于是本文利用 Tensorflow 和 Adam 优化器 [105, 106] 来实现图 3.1 所示的神经网络以用于计算杂化场的振幅和相位互信息。

### 3.4 计算结果

#### 3.4.1 相图

在分析杂化涨落效应之前，我们先分析模型 (3.1) 的平均场相图，这有助于我们初步了解该模型的性质。在平均场近似下，我们假设辅助场均为实数且满足  $V_1 = V_2 = V$ 。利用对自由能求极小的方法我们可以求出序参量  $V$  和  $\chi$  随参数的变化；然后通过分析序参量从零到非零变化的特征温度就可以画出系统的相图。如图 3.2(a) 所示，两杂质近藤-海森堡模型的平均场相图被分为三个区间，与近藤-海森堡晶格模型的平均场相图相似。高温区里序参量都为零，此时导带电子与局域自旋退耦合  $|V| = 0$  且两个自旋之间毫无关联  $|\chi| = 0$ ；随温度降低，在小  $J_K$  时，虽然杂化序参量始终为零，但系统会发生二级相变进入反铁磁相，即在温度  $T = J_H/4$  下  $|\chi| \neq 0$ ，表明两个局域自旋与导带电子退耦合但彼此之间会形成反铁磁单态；保持低温不变而增加  $J_K$ ，系统会发生一级相变进入近藤屏蔽相，即从反铁磁相到近藤屏蔽相序参量  $|V|$  从零到非零之间存在一个跃变，如图 3.2(b) 中虚线所示。由此可见，平均场理论的图像虽然简单清晰，但在有限温时系统会存在相变，这与实验中观察到的渐变行为不一致。另一方面，数值

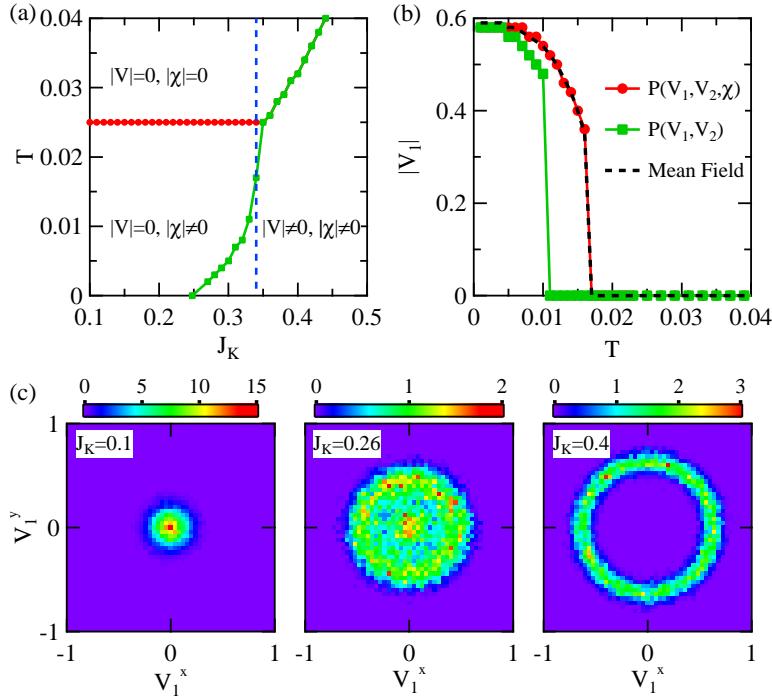


图 3.2 (a) 平均场相图。 (b) 比较  $p(V_1, V_2, \chi)$  和  $p(V_1, V_2)$  的峰值, 以及平均场序参量  $|V_1|$  的值随温度的变化, 这里取  $J_K = 0.34$  (即 (a) 图中的虚线)。 (c) 展示了当温度  $T = 0.001$  时, 复平面  $V_1 = (V_1^x, V_1^y)$  上的边缘概率密度函数  $p(V_1)$  随  $J_K$  变化的演变过程, 从左往右依次为磁性区、临界点以及近藤区。

**Figure 3.2 (a) The mean-field phase diagram. (b) Comparison of the mean-field order parameter  $|V_1|$  and that derived from the peak position of  $p(V_1, V_2, \chi)$  and  $p(V_1, V_2)$  as a function of temperature for  $J_K = 0.34$  (dashed line in (a)). (c) Evolution of the probabilistic distribution  $p(V_1)$  on the complex plane of  $V_1 = (V_1^x, V_1^y)$  at  $T = 0.001$  for three different values of  $J_K$  in the magnetic regime, near the quantum critical point, and in the Kondo regime, respectively.**

重整化群 [79–81] 和共形场理论 [84, 85] 则认为只有在零温下存在一个不稳定的“Varma-Jones”不动点。

文章中常常认为平均场理论的有限温相变在考虑涨落之后将变为正确的渐变行为, 但一直缺乏实际计算的支持 [5, 23]。本文则利用静态辅助场近似与蒙特卡洛方法将杂化场的所有空间的高阶涨落效应包含在内, 为这一观点提供有力的计算支撑。首先, 我们注意到平均场的解对应有效作用量  $S_{\text{eff}}$  的鞍点。图 3.2(b) 比较了当  $J_K = 0.34$  时 (相图3.2(a) 中的虚线), 概率密度函数  $p(V_1, V_2, \chi)$  最大值所对应的  $|V_1|$  与平均场近似下  $|V_1|$  的值随温度的变化关系, 两者符合的

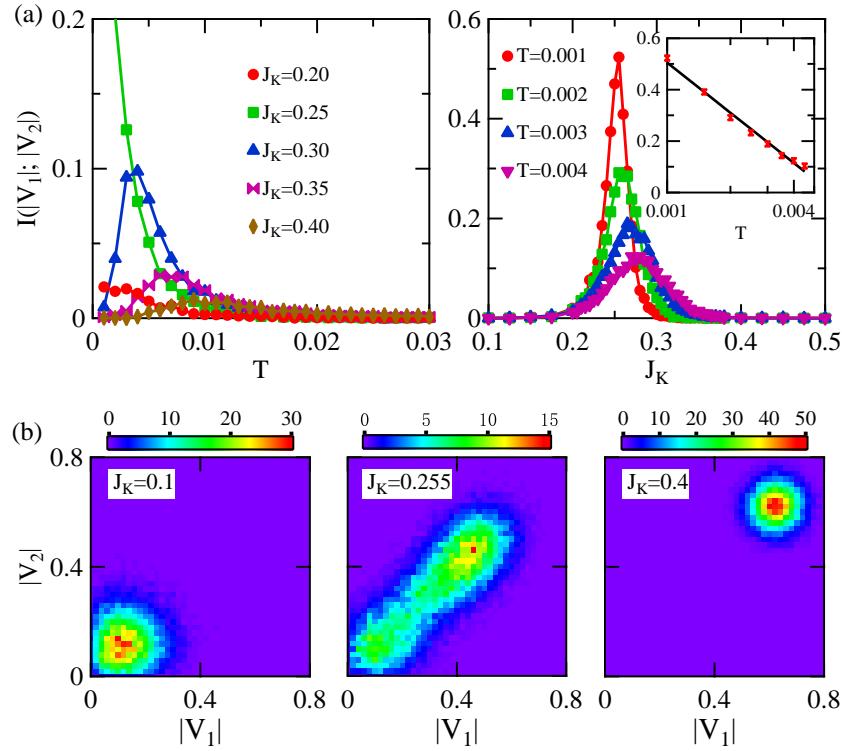


图 3.3 (a) 振幅互信息  $I(|V_1|; |V_2|)$  随温度与近藤耦合强度的变化。右图中的插图展示了互信息最大值随温度降低而对数发散的关系，其中黑色实线是为了方便视觉查看。(b) 当温度  $T = 0.001$  时，分布  $p(|V_1|, |V_2|)$  在不同  $J_K$  处的比较。

**Figure 3.3 (a) The amplitude mutual information  $I(|V_1|; |V_2|)$  as a function of the temperature and Kondo coupling. The right inset shows logarithmic divergence of the maximal mutual information at low temperatures. The black solid line is a guide to the eye. (b) Comparison of the distribution  $p(|V_1|, |V_2|)$  at three different  $J_K$  at  $T = 0.001$ .**

非常好，表明我们对杂化分布的计算是正确的。但值得注意的是，我们发现积分掉  $\chi$  场后所得边缘概率密度  $p(V_1, V_2)$  的最大值所给出的特征温度比平均场的特征温度低，表明局域自旋的磁涨落会抑制相变温度但不会改变一级相变的特征。我们会在后面物理量的计算中证明只有同时考虑磁性涨落和杂化涨落之后才能得到正确的渐变行为。接下来的计算中，我们考虑辅助场均为复数的情况。为了视觉清晰，我们在图 3.2(c) 中展示了反铁磁区间、相变点附近以及近藤屏蔽相中杂化的边缘概率密度函数  $p(V_1) = (V_1^x, V_1^y)$ （即从  $p(\bar{V}_i, V_i, \bar{\chi}, \chi)$  积分掉  $V_2$  和  $\chi$ ）在低温  $T = 0.001$  下的分布情况。随  $J_K$  增加，杂化分布从以零为中心的斑点慢慢变大，最终在近藤屏蔽相中变为一个圆环，对应“墨西哥帽”势能的形成。

### 3.4.2 杂化场的互信息

由于杂化场为复变量  $V_i = |V_i| e^{i\theta_i}$ , 所以我们先分析杂化场振幅  $|V_1|$  和  $|V_2|$  的互信息。图 3.3(a) 分别展示了振幅互信息  $I(|V_1|; |V_2|)$  随温度与近藤耦合强度的变化关系。在高温区, 无论近藤耦合  $J_K$  是大还是小, 杂化场互信息总为零, 表明高温时两个杂化场之间毫无关联。当  $J_K$  较小时, 随温度降低, 由于局域自旋之间的磁关联增强, 杂化场的振幅互信息也慢慢增加; 当  $J_K$  较大时, 互信息随温度降低先增加后减少, 表明在低温下近藤屏蔽效应会削弱局域自旋之间磁关联。值得注意的是, 如图 3.3(a) 右图所示, 互信息随  $J_K$  增加非单调变化, 其最大值随温度降低而迅速增加, 并呈现出对数发散的行为, 这可以理解为 “Varma-Jones” 不动点引起的量子临界现象。图 3.3(b) 则展示了低温下杂化振幅的边缘概率密度函数  $p(|V_1|, |V_2|)$  在反铁磁区、相变点以及近藤屏蔽区的分布情况。我们发现在相变点附近,  $|V_1|$  和  $|V_2|$  沿着对角线方向分布, 表明两个杂化场协同涨落, 引起互信息的对数发散; 在极坐标下, 小  $J_K$  时  $p(|V_1|, |V_2|)$  的最大值将不再位于原点, 表明即使在反铁磁单态区间也存在很强的杂化涨落。

在研究杂化场的相位互信息之前, 我们需要先对辅助场的相位做规范固定, 其原因是有效作用量 (3.13) 具有规范不变性  $V_i \rightarrow V_i e^{i\phi_i}$ ,  $\chi \rightarrow \chi e^{-i(\phi_1-\phi_2)}$ 。为了体现这一规范不变性, 我们先对有效作用量 (3.13) 做如下化简。利用公式

$$\det \begin{bmatrix} D & C \\ B & A \end{bmatrix} = \det D \det [A - BD^{-1}C], \quad \dots (3.29)$$

我们可以把有效作用量 (3.13) 化简为

$$S_{\text{eff}} = \beta \sum_{i=1}^2 \frac{J_K |V_i|^2}{2} + \frac{\beta J_H |\chi|^2}{2} - 2 \sum_n \ln \det(A_n - i\omega_n) + S_{c0}, \quad \dots (3.30)$$

这里已经利用粒子空穴对称条件使  $\lambda_i = 0$ , 而  $S_{c0} = -\sum_{\mathbf{k}\sigma} \ln [1 + \exp(-\beta\epsilon_{c\mathbf{k}})]$  则为自由电子的作用量, 矩阵  $A_n$  为

$$A_n = \begin{bmatrix} -\Delta_{11}(i\omega_n) & \frac{J_H \chi}{2} - \Delta_{12}(i\omega_n) \\ \frac{J_H \bar{\chi}}{2} - \Delta_{21}(i\omega_n) & -\Delta_{22}(i\omega_n) \end{bmatrix}. \quad \dots (3.31)$$

其中  $\Delta_{ij}(i\omega_n) = \frac{J_K^2 \bar{V}_i V_j}{4N_0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}}{-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{k}}}$ 。由于  $\det(A_n - i\omega_n)$  在变换  $V_i \rightarrow V_i e^{i\phi_i}$ ,  $\chi \rightarrow \chi e^{-i(\phi_1-\phi_2)}$  下保持不变, 所以有效作用量也具有这一规范对称性。我们可以利用这个规范对称性消除掉  $\chi$  场的相位从而使  $\chi$  场为非负实数。

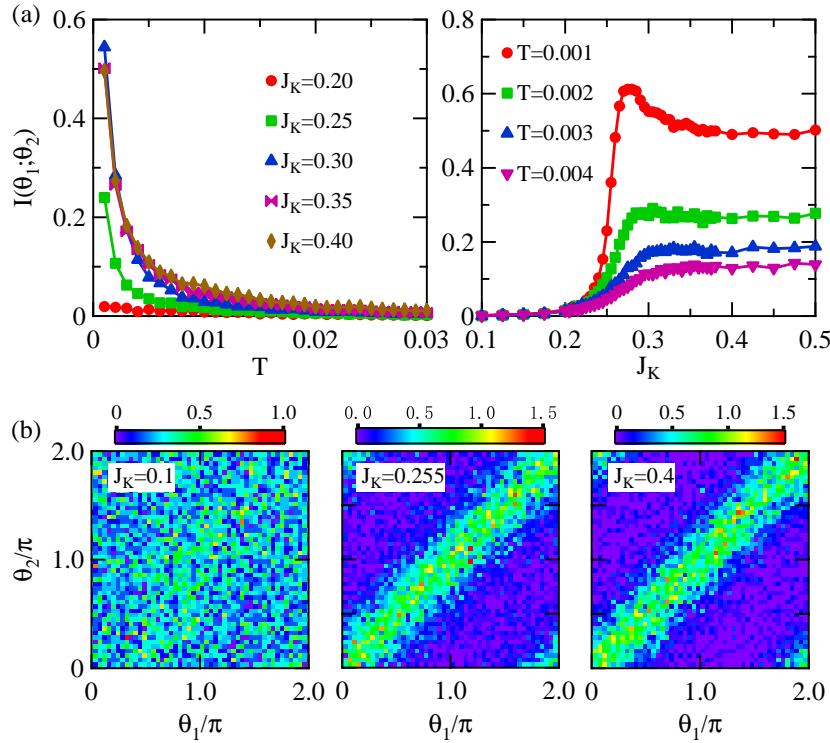


图 3.4 (a) 相位互信息  $I(\theta_1; \theta_2)$  随温度与近藤耦合强度的变化。(b) 当温度  $T = 0.001$  时, 分布  $p(\theta_1, \theta_2)$  在不同  $J_K$  处的比较。

**Figure 3.4 (a)** The phase mutual information  $I(\theta_1; \theta_2)$  as a function of the temperature and Kondo coupling. **(b)** Comparison of the distribution  $p(\theta_1, \theta_2)$  for different  $J_K$  at  $T = 0.001$ .

图 3.4(a) 展示了杂化场的相位互信息  $I(\theta_1; \theta_2)$  随温度和近藤耦合强度的变化关系。与振幅互信息类似, 在高温区间相位互信息也为零, 表明局域自旋间的磁关联很弱, 可以忽略不计。但与振幅互信息不同的是, 相位互信息随温度降低总是增加; 且当  $J_K$  较大时, 相位互信息随温度的变化很小。在近藤屏蔽区间, 较高的相位互信息体现了两个杂化场相位的协同涨落。为了更清楚地体现相位关联, 我们在图 3.4(b) 画出了低温下杂化相位的边缘概率密度函数  $p(\theta_1, \theta_2)$  在反铁磁区、相变点以及近藤屏蔽区的分布情况。当  $J_K$  较小时 (即在反铁磁区间), 相位分布比较均匀, 没有特殊的结构。当  $J_K$  较大时 (相变点附近以及近藤屏蔽区间), 相位分布与振幅分布类似, 都沿对角线方向伸展, 表明两个杂化场的相位“锁定”在一起。需要注意的是, 虽然  $p(\theta_1, \theta_2)$  的图案与规范固定的选择方式有关, 但是互信息是规范不变的,

$$I(\theta_1; \theta_2) = I(\theta_1; \theta_2 - \theta'). \quad \dots (3.32)$$

因此，互信息提供了一个有用的工具来度量杂化场格点间的相位相干性。此外，由于规范对称性的存在，我们还发现相位互信息与相位香农熵有紧密联系

$$I(\theta_1; \theta_2) = \text{const.} - H(\theta), \quad \dots (3.33)$$

其中  $H(\theta) = - \int p(\theta) \log p(\theta) d\theta$  为相位  $\theta = \theta_1 - \theta_2$  的香农熵。

### 3.4.3 杂化涨落和杂化关联对物理量的影响

除了研究杂化分布本身的性质外，我们还可以研究杂化涨落和杂化关联对物理量的影响。比如对于物理量  $Q$ ，其期望值可以表示为

$$\langle Q \rangle = \int D\phi p(\phi) Q_\phi, \quad \phi \equiv (V_1, \bar{V}_1, V_2, \bar{V}_2, \chi, \bar{\chi}), \quad \dots (3.34)$$

$$p(\phi) = \frac{1}{Z} \int D\Psi \exp \left\{ -\Psi^\dagger M[\phi] \Psi - S_0[\phi] \right\} = \frac{\exp(-S_{\text{eff}})}{Z}, \quad \dots (3.35)$$

其中  $S_0[\phi]$  为作用量中与费米子无关的部分。比如，对于格林函数，其定义为

$$G^{\text{Definition}} \equiv \frac{1}{Z} \int D\phi \int D\Psi \exp \left\{ -\Psi^\dagger M[\phi] \Psi - S_0[\phi] \right\} \Psi \Psi^\dagger. \quad \dots (3.36)$$

我们可以先在每一个位形  $\phi$  下计算当前位形的格林函数  $G_\phi$

$$G_\phi = \frac{\int D\Psi \exp \left\{ -\Psi^\dagger M[\phi] \Psi - S_0[\phi] \right\} \Psi \Psi^\dagger}{\int D\Psi \exp \left\{ -\Psi^\dagger M[\phi] \Psi - S_0[\phi] \right\}}, \quad \dots (3.37)$$

然后再对位形平均求解出  $G^{\text{SAF}} = \int D\phi p(\phi) G_\phi$ 。很容易验证  $G^{\text{SAF}}$  与格林函数的定义一致，即

$$G^{\text{SAF}} = G^{\text{Definition}}. \quad \dots (3.38)$$

图 3.5(a) 展示了低温下费米能处的局域态密度 (DOS)  $A_c(i, \omega = 0)$  随近藤耦合强度的变化关系，其中局域态密度的计算方法为

$$A_c(i, \omega = 0) \approx -\frac{\beta}{\pi} G_c(i, \tau = \beta/2), \quad G_c(i, \tau) = -\langle \mathcal{T}_\tau [c_i(\tau) c_i^\dagger(0)] \rangle. \quad \dots (3.39)$$

首先注意到在近藤屏蔽区，杂质处的局域态密度会受到抑制，这与扫描隧道实验的结果一致 [107]。其次相比于平均场的一级相变引起的跃变，考虑涨落之后的局域态密度随  $J_K$  增加而连续变化，表明涨落效应会对平均场的一级相变进行修正。此外，我们还发现在反铁磁区间，态密度就已经开始受到抑制并逐渐形成赝

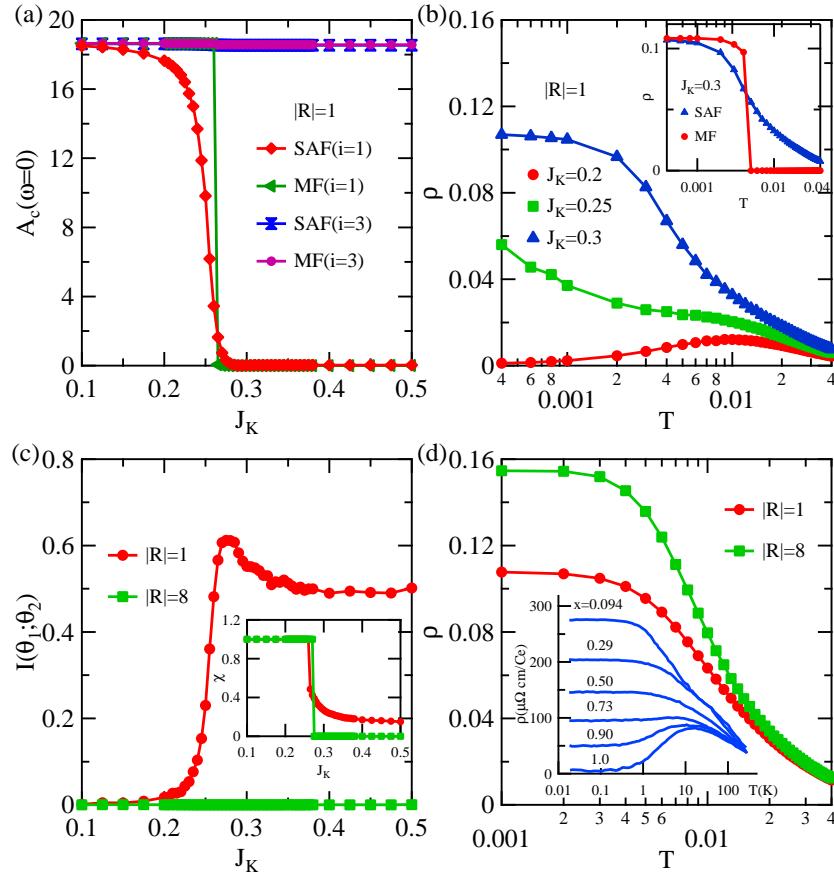


图 3.5 (a) 低温  $T = 0.001$  下我们的方法 (SAF) 和平均场方法 (MF) 的电子谱函数在杂质处 ( $i = 1$ ) 和远离杂质处 ( $i = 3$ ) 的对比, 费米面处的谱函数被抑制 (赝能隙) 表明即使在磁性区间也存在杂化涨落。 (b) 三组不同  $J_K$  处的电阻  $\rho$  随温度的变化关系, 插图展示了与平均场结果的对比。 (c) 低温  $T = 0.001$  下不同杂质间距, 即  $|R| = 1$  和 8 时的相位互信息的对比。插图为平均场序参量  $\chi$  随  $J_K$  的变化。 (d)  $J_K = 0.4$  时电阻随温度的变化, 表明从单杂质极限  $|R| = 8$  到  $|R| = 1$  时, 格点间相位相干性的增加会使电阻急剧下降。插图再现了  $Ce_xLa_{1-x}Cu_6$  在不同  $x$  时的实验电阻率 [3]。

**Figure 3.5 (a) Comparison of the our results (SAF) and the mean-field results (MF) for the electron spectrum at ( $i = 1$ ) and away from ( $i = 3$ ) the impurity sites at  $T = 0.001$ , showing strong suppression (pseudogap) due to hybridization fluctuations even in the magnetic regime. (b) Temperature evolution of the resistivity  $\rho$  at three different  $J_K$  compared with the MF result (inset). (c) Comparison of the phase mutual information for different impurity distances  $|R| = 1$  and 8 at  $T = 0.001$ . The inset shows the mean-field order parameter  $\chi$ . (d) Resistivity as a function of temperature for  $J_K = 0.4$ , showing a significant drop due to the intersite phase coherence for  $|R| = 1$  compared to that of the single impurity limit ( $|R| = 8$ ). The inset reproduces the experimental resistivity of  $Ce_xLa_{1-x}Cu_6$  for various  $x$  [3].**

能隙，表明相变点处很强的杂化涨落会慢慢破坏局域自旋间的反铁磁单态并对物理量产生很大的且可观测的影响。

除局域态密度外，我们还研究了电阻  $\rho \approx \frac{-\pi T^2}{g_{xx}(\tau=\beta/2)}$  随温度的变化关系，其中  $g_{xx}(\tau)$  为流流关联函数

$$g_{xx}(\tau) = -\langle \mathcal{T}_\tau j_x(\tau) j_x(0) \rangle. \quad \dots (3.40)$$

在二维正方晶格中，流算符  $j_x(\tau)$  可以表示为

$$j_x(\tau) = i t \sum_{l\sigma} [c_{l+x,\sigma}^\dagger c_{l,\sigma} - h.c.], \quad \dots (3.41)$$

其中  $t = \frac{1}{4}$  为导带电子近邻跃迁强度。由于在每一个位形  $\phi$  下，作用量可以表示为费米子的双线性，因此我们可以利用 Wick 定理计算每一个位形下的流流关联

$$\begin{aligned} g_{xx}^\phi(\tau) &= t^2 \sum_{i\alpha,j\beta} [G_{i,i+x,\alpha}(\tau,\tau) - G_{i+x,i,\alpha}(\tau,\tau)] [G_{j,j+x,\beta}(0,0) - G_{j+x,j,\beta}(0,0)] \\ &\quad + t^2 \sum_{ij,\alpha} [-G_{j,i+x,\alpha}(-\tau) G_{i,j+x,\alpha}(\tau) + G_{j+x,i+x,\alpha}(-\tau) G_{i,j,\alpha}(\tau) \\ &\quad + G_{j,i,\alpha}(-\tau) G_{i+x,j+x,\alpha}(\tau) - G_{j+x,i,\alpha}(-\tau) G_{i+x,j,\alpha}(\tau)], \end{aligned} \quad \dots (3.42)$$

然后再对位形平均求出最终结果 [108, 109]。图 3.5(b) 展示了电阻随温度的变化关系。我们发现电阻在相变点附近对数发散，在反铁磁区间被抑制，在近藤屏蔽区间达到饱和，分别对应非费米液体，金属态和近藤屏蔽三种不同的行为。此外，如图 3.5(b) 的插图所示，平均场下电阻会出现跃变，而静态辅助场近似下电阻连续变化，表明辅助场的涨落会抑制相变而得到与实验更接近的渐变行为，再一次证明了考虑杂化涨落的重要性和静态辅助场近似的优点。

以上是杂化涨落对物理量的影响。除杂化涨落外，静态辅助场方法还能很好地处理杂化场的空间关联。虽然互信息能比较好地反应杂化关联，但是互信息不是一个可直接测量的物理量。于是我们比较了实验可观测量，比如电阻和互信息随杂质距离  $|\mathbf{R}| = |\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|$  的变化关系来间接揭示互信息对物理量的影响。图 3.5(c) 比较了  $|\mathbf{R}| = 1$  和 8 时的互信息，插图则比较了平均场序参量  $\chi$  的变化。我们发现当杂质间的距离较大 ( $|\mathbf{R}| = 8$ ) 时，在近藤屏蔽区间相位互信息和序参量  $\chi$  同时为零，表明两个杂质相互独立，体系表现出单杂质近藤模型的特征。只有当距离较小 ( $|\mathbf{R}| = 1$ ) 时，近藤屏蔽区间的相位互信息和序参量  $\chi$  才为有限值，

表明两杂质与单杂质模型有根本性的差别；同时表明相位互信息与格点间的磁关联有紧密联系 [6, 26]。图 3.5(d) 则比较了不同距离时电阻的变化关系，我们发现从单杂质极限  $|R| = 8$  到两个杂质之间出现相位关联  $|R| = 1$ ，电阻急剧下降，与  $Ce_xLa_{1-x}Cu_6$  增加  $x$  的实验结果一致 [3, 110]，同时也暗示着近藤晶格模型的相干性可能与杂化场的相位关联有关。

### 3.5 本章小结

我们提出了研究两杂质近藤-海森堡模型中杂化物理的静态辅助场近似方法，该方法能有效地处理杂化场的空间涨落和空间关联。通过蒙特卡洛方法对杂化分布取样后，我们还进一步利用互信息来揭示杂化分布的物理性质。我们发现杂化场的振幅互信息能揭示零温下的量子相变而相位互信息则能很好地反映不同格点之间的相位相干性。此外，通过计算态密度和电阻，我们证明了当考虑所有的涨落效应后，平均场理论的一级相变会被抑制而变为正确的渐变行为。通过与实验结果的比较，我们还揭示了杂化场的相位相干性的重要性。

静态辅助场近似方法能很容易地推广到多杂质和晶格模型的研究中。在稠密的近藤晶格体系中，即使杂化场的 Ginzburg-Landau 理论也会给出错误的相变预言 [30–32]，我们预期只有充分考虑了所有的高阶涨落效应后才能得到正确的渐变行为。同时我们还希望能利用该方法揭示杂化场的相位相干性与重费米子体系中相干温度之间的联系，以及进一步探索丰富的杂化构型 [111–113]。



## 第4章 量子功的泛函路径积分方法

本章关注多体系统的非平衡性质。我们发展了计算多体系统量子功的泛函路径积分方法，克服了旧方法不易推广到任意非平衡过程的缺点。我们还研究了三个不同模型中的量子功和动力学量子相变，展示了新方法在处理任意非平衡过程中的优点。最后，我们以伊辛-近藤模型为例阐述了如何将路径积分与蒙特卡洛方法结合并推广到强关联电子系统的非平衡物性的研究中。

### 4.1 研究背景

随着涨落关系 [114–121]、多体局域化 [122–124]、时间晶体 [125, 126]、动力学量子相变 [14, 34, 127–129] 等新奇现象的发现和概念的提出，非平衡物理吸引了越来越多科研工作者的关注。在实验方面，得益于实验技术的突飞猛进，人们可以精确地控制越来越大和越来越复杂的量子系统 [130–132]。比如，人们可以在离子阱或冷原子平台上模拟几十甚至上百个量子比特，并在其中观察和验证这些新奇的非平衡现象 [133, 134]。在理论方面，虽然人们发展了一系列诸如 Keldysh 格林函数 [135]、量子主方程 [136]、非平衡版本的密度矩阵重整化群 [137] 和动力学平均场理论 [138] 等方法来试图理解各种各样的非平衡物理并取得了很多重要的进展，但迄今为止，一个统一的理论框架还远远没有建立起来。

量子热力学则试图为我们提供一个新的热力学框架来描述不同体系中的各种非平衡物理现象 [139–143]。众所周知，单粒子系统可由量子力学描述，而阿伏伽德罗常数（热力学极限）个粒子的系统可以由量子统计力学描述。量子热力学则是沟通量子力学和量子统计力学的桥梁，它的研究对象不仅包括少体和多体系统，还涵盖介于单粒子系统和多体系统之间的不“多”不“少”的有限粒子数的体系 [144]。在量子热力学中，量子功是一个最基本但同时也是最重要的物理量。它包含了非平衡过程的所有热力学信息，其在非平衡过程中的地位类似于配分函数在平衡态物理中的地位。它不仅可以刻画非平衡的动力学量子相变和涨落关系 [34, 118, 119]，还可以描述平衡态的量子相变和临界现象 [145, 146]。此外，它还与保真度和 Loschmidt 回波等物理量密切相关 [147]。鉴于量子功的重要性，接下来我们先简单介绍量子功的概念。

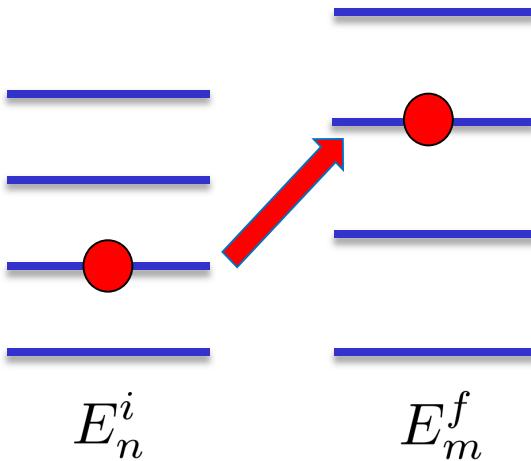


图 4.1 两次投影测量中的量子功示意图。在初始时刻进行第一次测量，体系处于能量为  $E_n^i$  的本征态  $|n^i\rangle$ ，经过一段时间的演化后，进行第二次测量，体系位于能量为  $E_m^f$  的本征态  $|m^f\rangle$ ，这个过程中系统做的功为  $W = E_m^f - E_n^i$ 。

**Figure 4.1 A schematic diagram of the quantum work via two-point energy measurements. The first measurement is performed at initial time and the system is in the eigenstate  $|n^i\rangle$  with energy  $E_n^i$ . After a period of evolution, a second measurement is made and the system is in the eigenstate  $|m^f\rangle$  with energy  $E_m^f$ . The work done in this process is  $W = E_m^f - E_n^i$ .**

如图 4.1 所示，对于一个量子体系，假设在  $t = 0$  时进行第一次测量，体系处于能量为  $E_n^i$  的本征态  $|n^i\rangle$ ，经过一段时间的演化后，在  $t = T_0$  时刻再进行第二次测量，体系位于能量为  $E_m^f$  的本征态  $|m^f\rangle$ 。在这一过程中，体系做的功为  $W = E_m^f - E_n^i$ 。由于每次测量时体系可能塌缩到不同的本征态，因此系统做功也不同。我们需要引入功的概率密度函数来刻画这一随机性

$$p(W) = \sum_{n,m} \delta(W - E_m^f + E_n^i) P(m^f | n^i) P(n^i), \quad \dots (4.1)$$

其中  $P(n^i) = \exp(-\beta E_n^i)/Z(0)$  代表初始时刻的平衡态正则分布， $Z(0)$  为初始时刻的配分函数， $P(m^f | n^i) \equiv |\langle m^f | U(T_0, 0) | n^i \rangle|^2$  则代表从初态  $|n^i\rangle$  到末态  $|m^f\rangle$  的跃迁概率， $U(T_0, 0) = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_0^{T_0} dt H(t) \right]$  为时间演化算符（ $\mathcal{T}$  为时序算符）。在计算过程中，我们把普朗克常数  $\hbar$  设为单位一。

在 2018 年以前，人们常常通过基于哈密顿量的算符形式来研究功分布 [148–153]。这种方法能较好地处理哈密顿量中某个参数突变的情况，但不易推广到任意非平衡过程和有限温过程，而且不能很好地处理开放系统。针对这一问题，K. Funo 和 H. T. Quan 在 2018 年首次引入路径积分表述来研究单粒子体系中的功

分布 [154]。他们通过引入功泛函的概念，证明了功分布的量子经典对应关系，并进一步以孤立和开放系统的谐振子为例说明了量子功路径积分表述的优势。在 2019 年，我们对量子功的路径积分表述做了进一步的推广，首次利用泛函路径积分来研究多体物理中的功分布。我们还以横场伊辛模型、Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型和 Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) 模型为例证明了泛函路径积分方法的有效性和处理任意非平衡过程的优势 [147]。随后，Z. Fei 和 H. T. Quan 利用群表示论中的费米子和玻色子求迹公式推导了双线性模型在任意非平衡过程中的功分布，并以谐振子和一维量子 XY 模型为例展示了该方法的有效性 [155]。对于弱相互作用模型，Z. Fei 和 H. T. Quan 在 2020 年基于 Schwinger-Keldysh 格林函数方法推导了特征函数的微扰展开表达式 [156]。A. Grabarits 等人则在 2021 年利用随机矩阵理论研究了无序自由费米子气体在参数突变情况下的功分布 [157]。由此可见，我们的工作为研究多体系统在任意非平衡条件下的功分布打下了基础。

## 4.2 量子功在多体物理中的应用

量子功在多体物理中有着广泛的应用。比如人们利用量子功研究了横场伊辛模型、XY 模型、XXZ 模型、Luttinger 液体以及低维量子气体中的功分布、Kibble-Zurek 机制、临界指数和动力学量子相变等 [158–168]。本文主要利用量子功研究多体物理中平衡态相变的临界指数以及非平衡动力学量子相变。下面分别予以介绍。

### 4.2.1 临界指数

根据式 (4.1)，我们可以定义出系统的平均功  $\langle W \rangle = \int dW p(W) W$ 。对于孤立系统，功总是大于或等于初末两态的自由能之差  $\Delta F$ ，因此我们可以进一步定义不可逆功  $\langle W_{\text{irr}} \rangle = \langle W \rangle - \Delta F$ 。不可逆功  $\langle W_{\text{irr}} \rangle$  可以用于刻画非平衡过程的不可逆性。对于参数突变的过程，如哈密顿量是外场  $h$  的函数  $H \equiv H(h)$ ，当外场从  $h^i$  突变到  $h^f = h^i + \delta$  时，人们发现零温不可逆功与基态能的二阶导数相联系，于是我们可以通过不可逆功来研究二级量子相变和相应的临界指数。2015 年，S. Sharma 等人发现在热敏感极限下 (heat susceptibility limit)，即  $\delta^{-\nu}$  是最大的特征

尺度时，零温不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle = \langle W \rangle / N^d$  具有如下的标度行为 [145]

$$\begin{aligned} \langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2 &\sim \lambda^{\nu(d+z)-2}, & \delta^{-\nu} > N > \lambda^{-\nu} \\ &\sim N^{2/\nu-(d+z)}, & \delta^{-\nu} > \lambda^{-\nu} > N, \end{aligned} \quad \dots (4.2)$$

其中  $N$  是体系的尺寸， $d$  是空间维度， $\nu$  是关联长度的临界指数， $z$  是动力学指数， $\lambda$  是初始参数与临界点  $h_c$  的距离  $\lambda = |h^i - h_c|$ 。在热力学极限下， $N$  是最大的特征长度，此时标度关系为

$$\begin{aligned} \langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2 &\sim \delta^{\nu(d+z)-2}, & N > \lambda^{-\nu} > \delta^{-\nu} \\ &\sim \lambda^{\nu(d+z)-2}, & N > \delta^{-\nu} > \lambda^{-\nu}. \end{aligned} \quad \dots (4.3)$$

此外，当初始时刻系统非常靠近临界点，即  $\lambda^{-\nu}$  是最大的特征尺度时，零温不可逆功密度的标度行为变为

$$\begin{aligned} \langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2 &\sim \delta^{\nu(d+z)-2}, & \lambda^{-\nu} > N > \delta^{-\nu} \\ &\sim N^{2/\nu-(d+z)}, & \lambda^{-\nu} > \delta^{-\nu} > N. \end{aligned} \quad \dots (4.4)$$

值得注意的是，当  $\nu(d+z)$  超过 2 时， $\langle w_{\text{irr}} \rangle$  是非普适的；当  $\nu(d+z) = 2$  时，不可逆功的标度行为中会存在一个对数修正 [145]。

#### 4.2.2 动力学量子相变

2013 年，M. Heyl 等人在横场伊辛模型的研究中首次提出了动力学量子相变的概念 [34]。随后人们在越来越多的模型中发现了动力学量子相变，如拓扑模型 [169]，非厄米模型 [170]，Floquet 系统 [171]、开放系统 [172] 等。虽然动力学量子相变吸引了很多科学工作者的关注，但由于研究手段的限制，之前的研究主要集中于参数突变或随时间周期性变化的情况 [14, 171, 173]。在本文中，我们借助泛函路径积分方法研究了不同非平衡条件条件下的动力学量子相变，加深了我们对这种发生在时间方向上的相变的认识。下面我们先简单介绍动力学量子相变的概念并阐述如何利用量子功研究动力学量子相变。动力学量子相变中最核心的物理量是 Loschmidt 回波

$$\mathcal{L}(t) = |\langle \psi_0 | e^{-iHt} | \psi_0 \rangle|^2. \quad \dots (4.5)$$

它刻画的是初态  $|\psi_0\rangle$  经过一段时间演化后系统的末态  $|\psi_0(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi_0\rangle$  回到初态的概率幅。Loschmidt 回波可以视为边界配分函数 (boundary partition function)

$Z_B = \langle \psi_0 | e^{-RH} | \psi_0 \rangle$  在时间方向上的推广  $R = it$ 。因此我们可以定义相应的动力学自由能密度

$$\lambda(t) = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^d} \ln \mathcal{L}(t), \quad \dots (4.6)$$

其在时间方向上的奇异性被称为动力学量子相变。值得注意的是，当系统不做功时就代表体系回到了初态，因此  $p(w=0)$  可以被视为 Loschmidt 回波，这意味着我们可以通过分析功分布来研究动力学量子相变。

### 4.3 量子功的泛函路径积分表述

在之前的研究中，人们主要是通过求解哈密顿量本征值的时间演化来计算功分布，这一方法不易推广到混合态和任意非平衡过程。针对这一问题，我们发展了计算多体系统量子功的泛函路径积分方法，这一方法能克服旧方法不易推广的缺点，并且在参数突变的情况下能得到与哈密顿量本征值方法相同的结果。在这一小节中，我们将详细介绍我们的工作。

#### 4.3.1 任意非平衡条件下的量子功

我们先引入功分布的特征函数来消除公式(4.1)中的  $\delta$  函数：

$$\begin{aligned} G(u) &= \int_{-\infty}^{\infty} dW \exp(iuW) p(W) \\ &= Z_0^{-1} \text{Tr} \left[ U^\dagger(T_0, 0) e^{iuH(T_0)} U(T_0, 0) e^{-(iu+\beta)H(0)} \right], \end{aligned} \quad \dots (4.7)$$

其中  $Z_0 = \text{Tr } e^{-\beta H(0)}$  是  $t = 0$  时的配分函数。我们注意到特征函数  $G(u)$  和配分函数  $Z_0$  有很大的相似性，都可以写为对指数函数的求迹。因此如图 4.2 所示，我们可以利用时间切片的方式引入泛函路径积分来计算特征函数  $G(u)$ 。

考虑最简单的双线性模型

$$H(t) = \sum_k \Psi_k^\dagger A_k(t) \Psi_k, \quad \dots (4.8)$$

其中  $A_k(t) = \mathbf{d}_k(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$  为依赖于具体模型的  $2 \times 2$  矩阵， $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$  为泡利矩阵。公式(4.8)虽然简单，但它代表了凝聚态物理中的多个经典模型。对它的深入研究还可以为我们进一步研究相互作用模型中的非平衡物理打下基础。由于模型(4.8)中的动量是一个好量子数，所以特征函数可以写为  $G(u) = \prod_k G_k(u)$ ，

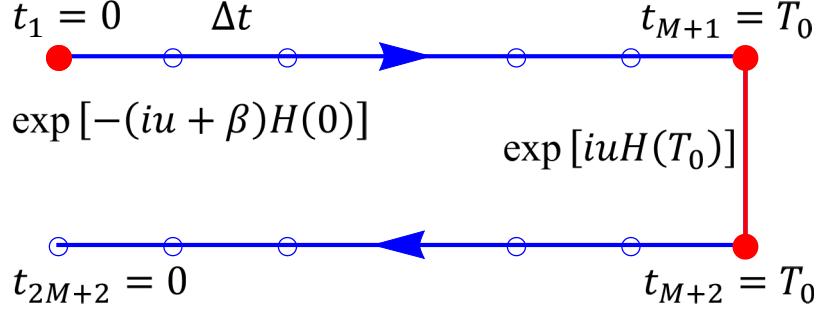


图 4.2 泛函路径积分的时间围道  $C$ 。蓝色圆圈代表离散的时间点，其中  $\Delta t = T_0/M$ 。 $t = 0$  和  $T_0$  处的红色圆点和线表示在这些地方需要额外计算的算符。

**Figure 4.2 Time contour  $C$  for the functional field integral. Blue circles represent discretized time points with  $\Delta t = T_0/M$ . Red dots and line at  $t = 0$  and  $T_0$  denote additional operators to be evaluated at these points.**

其中

$$G_k(u) = \frac{\text{Tr} \left[ U_k(0, T_0) e^{iuH_k(T_0)} U_k(T_0, 0) e^{-(iu+\beta)H_k(0)} \right]}{\text{Tr} [e^{-\beta H_k(0)}]} \quad \dots (4.9)$$

时间演化算符则可以表示为：

$$U_k(T_0, 0) = \lim_{M \rightarrow \infty} e^{-iH_k(t_{M,M+1})\Delta t} \dots e^{-iH_k(t_{1,2})\Delta t} \quad \dots (4.10)$$

这里我们已经把时间  $T_0$  分成了  $M$  份，所以有  $\Delta t = T_0/M$ 。如图 4.2 所示，我们利用费米子相干态的过完备性，在时间回路  $0 \rightarrow T_0 \rightarrow 0$  中的每一个无限小时间间隔  $\Delta t$  处插入单位一

$$\hat{1} = \int d [\bar{\psi}^j, \psi^j] e^{-\bar{\psi}^j \psi^j} |\psi^j\rangle \langle \psi^j|, \quad \dots (4.11)$$

其中  $|\psi^j\rangle$  为定义在时刻  $t_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 2M + 2$ ) 上的相干态 [174]。然后我们再进一步对  $\exp[-(iu + \beta)H_k(0)]$  和  $\exp[iuH_k(T_0)]$  中的系数  $(iu + \beta)$  和  $iu$  做类似的时间切片并插入单位一。最后利用费米子相干态的积分公式

$$\int d [\bar{\psi}, \psi] \exp(-\bar{\psi} A \psi + \bar{\chi} \psi + \bar{\psi} \chi) = \det(A) \exp(\bar{\chi} A^{-1} \chi), \quad \dots (4.12)$$

我们可以把公式 (4.7) 化简为

$$G(u) = \prod_k \frac{2 + \text{Tr} \left[ C_k^\dagger(T_0) e^{iuA_k(T_0)} C_k(T_0) e^{-(iu+\beta)A_k(0)} \right]}{2 + \text{Tr} [e^{-\beta A_k(0)}]}, \quad \dots (4.13)$$

式中

$$C_k(T_0) = \mathcal{T} \exp \left[ -i \int_0^{T_0} dt A_k(t) \right] = e^{-i \Delta t A_k(t_{M,M+1})} \dots e^{-i \Delta t A_k(t_{1,2})}. \quad \dots (4.14)$$

对于任意的非平衡过程，我们可以利用矩阵乘法高效地计算  $C_k(T_0)$ ，从而计算出特征函数。值得注意的是，公式(4.13)是本节的核心公式，原因是我们可以通过特征函数求出体系的各种热力学量，如功分布、平均功，自由能之差，不可逆功，不可逆熵等。

**平均功：**平均功和特征函数的一阶矩相联系  $\langle W \rangle = -i dG(u)/du|_{u=0}$ 。由于功是广延量，我们常常更关心平均功密度  $\langle w \rangle = \langle W \rangle / N^d$ ，其中  $N$  代表格点数， $d$  是空间维度。对于模型(4.8)，平均功密度的表达式为

$$\langle w \rangle = \frac{1}{N^d} \sum_k \frac{\text{Tr} \left[ \left( C_k^\dagger(T_0) A_k(T_0) C_k(T_0) - A_k(0) \right) e^{-\beta A_k(0)} \right]}{2 + \text{Tr} [e^{-\beta A_k(0)}]}. \quad \dots (4.15)$$

**自由能：**众所周知，对于任意的非平衡过程，初末两平衡态的自由能之差  $\Delta F$  与这个过程中外界对该系统所做的功有这样的关系： $\Delta F \leq W$ 。这是一个不等式且只有在准静态过程时等号才成立，因此我们很难用传统的办法求得自由能的变化。1997年，Jarzynski 发现了一个恒等式  $\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F}$ ，为这一问题提供了一个可行的解决方案 [118, 119]。这个恒等式的含义是我们可以通过对功的指数函数做平均来求得自由能变化。虽然 Jarzynski 最初是基于经典系统提出的这个恒等式，但把该等式推广到量子系统是非常容易的。我们把式(4.7)中的  $u$  取为  $i\beta$  就可以得到量子系统的 Jarzynski 恒等式

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dW e^{-\beta W} p(W) = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H(T_0)}]}{\text{Tr} [e^{-\beta H(0)}]} = e^{-\beta \Delta F}. \quad \dots (4.16)$$

于是自由能与特征的函数的关系可以表示为  $\Delta F = -\frac{1}{\beta} \ln G(i\beta)$ 。

**不可逆功：**如前所述，对于孤立系统，功总是大于或等于初末两态的自由能之差，因此我们可以定义不可逆功  $\langle W_{\text{irr}} \rangle = \langle W \rangle - \Delta F$ ，其满足  $\langle W_{\text{irr}} \rangle \geq 0$ 。

**不可逆熵：**当系统没有热传递时，我们还可以进一步定义出系统的不可逆熵  $\Delta S = \beta \langle W_{\text{irr}} \rangle$ 。不可逆功和不可逆熵都可以用于描述非平衡过程的不可逆性。

**功分布：**在实际计算中我们所遇到的特征函数  $G(u)$  常常没有很好的性质，因此我们很难通过数值傅里叶变换求出功分布。为了求出功分布，我们需要用到

Gärter-Ellis 定理 [175, 176]: 量子功随着系统的尺寸呈现出指数依赖关系  $p(w) \sim e^{-N^d r(w)}$ , 其中比率函数 (rate function)  $r(w)$  可以通过 Legendre-Fenchel 变换得到

$$r(w) = -\inf_{R \in \mathbb{R}} [wR - c(R)], \quad \dots (4.17)$$

$$c(R) = -\lim_{N \rightarrow \infty} N^{-d} \ln G(u = iR), \quad \dots (4.18)$$

需要注意的是,  $c(R)$  的值域包含正负无穷  $R = \pm\infty$ 。

### 4.3.2 参数突变情况下的量子功

对于模型 (4.8) 中的一个简单淬火 (quench) 过程, 即当参数从  $t = 0^-$  时的  $A_k^0 = \mathbf{d}_k^0 \cdot \boldsymbol{\sigma}$  突变到  $t = T_0 = 0^+$  时的  $A_k^1 = \mathbf{d}_k^1 \cdot \boldsymbol{\sigma}$ , 利用上一小节中的公式我们可以计算出这一过程的自由能密度  $\Delta f$

$$\Delta f = \frac{\Delta F}{N^d} = -\frac{1}{\beta N^d} \sum_k \ln \frac{\cosh^2(\beta E_k^1/2)}{\cosh^2(\beta E_k^0/2)}, \quad \dots (4.19)$$

和平均功密度  $\langle w \rangle$

$$\langle w \rangle = \frac{1}{N^d} \sum_k \frac{\left[ (E_k^0)^2 - \mathbf{d}_k^0 \cdot \mathbf{d}_k^1 \right] \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E_k^0\right)}{E_k^0}, \quad \dots (4.20)$$

其中  $E_k^{0,1} = |\mathbf{d}_k^{0,1}|$ 。对于一个无穷小的突变过程

$$\mathbf{d}_k^0 = (x_k^0, y_k^0, z_k^0) \rightarrow \mathbf{d}_k^1 = (x_k^0 + \delta, y_k^0, z_k^0), \quad \dots (4.21)$$

对小量  $\delta$  做微扰展开后, 我们发现在零温时的不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle = \langle w \rangle - \Delta f$  与能量的二阶导数相联系

$$\langle w_{\text{irr}} \rangle = \sum_k \frac{\delta^2}{2N^d} \frac{\partial^2 E_k}{\partial x_k^2} \Big|_{x_k=x_k^0}. \quad \dots (4.22)$$

上式意味着我们可以通过不可逆功来研究二级量子相变及其临界指数。

## 4.4 模型与计算结果

我们在前面两节分别介绍了量子功在平衡与非平衡量子相变中的应用以及如何利用泛函路径积分来研究任意双线性模型在任意非平衡条件下的量子功。这一节我们将以横场伊辛模型为例详细展示该方法。我们通过计算参数突变下的功分布并与之前哈密顿量方法的计算结果进行比较来证明泛函路径积分方法的正确性。随后我们将进一步研究 SSH 模型和 BCS 模型中的功分布并将其推广到参数非突变的情况, 从而比较不同非平衡条件下的动力学量子相变。

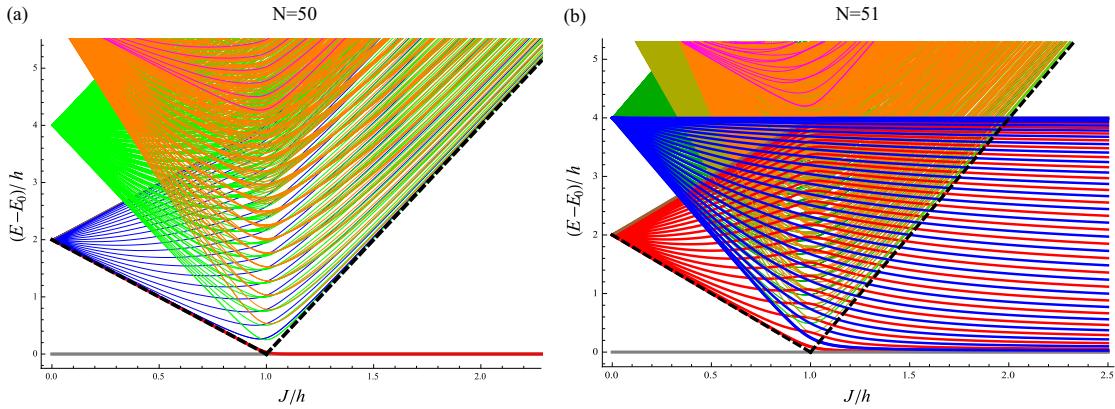


图 4.3 一维周期性边界条件的反铁磁横场伊辛模型的能级图。(a) 偶数格点  $N = 50$ , (b) 奇数格点  $N = 51$ 。图中  $E_0$  为基态能。

**Figure 4.3 The low-energy levels of the antiferromagnetic transverse field Ising model with periodic boundary condition. (a) even number of lattice sites,  $N = 50$ , (b) odd number of lattice sites,  $N = 51$ .  $E_0$  denotes the ground state energy in both figures.**

#### 4.4.1 横场伊辛模型

横场伊辛模型是研究多体物理的最简单模型。对它的深入研究能加深我们对各种物理概念的理解，如量子相变、自发对称破缺、临界现象、阻挫效应、对偶性、重整化、量子经典对应以及动力学量子相变等 [12, 177–179]。横场伊辛模型最早是由 de Gennes 在 1963 年研究磷酸二氢钾晶体的铁电性时提出 [180]，其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - h \sum_{j=1}^N \sigma_j^z, \quad \dots (4.23)$$

其中  $\sigma_j^\alpha (\alpha = x, z)$  为第  $j$  个格点上的泡利矩阵， $\sigma_{N+1}^\alpha = \sigma_1^\alpha$  代表周期性边界条件， $h$  为横向磁场， $J > 0$  代表铁磁相互作用， $J < 0$  则为反铁磁相互作用。de Gennes 发现该模型的平均场相图与实验结果吻合得很好，于是越来越多的科研工作者开始研究这一模型。在 1970 年，P. Pfeuty 求解了一维铁磁相互作用的横场伊辛模型，证明了该模型在零温下会发生量子相变且该相变可以由朗道自发对称破缺理论来描述 [181]。在 2016 年，我们严格求解了周期性边界条件下的一维反铁磁横场伊辛模型，发现当格点数为奇数时，体系存在环阻挫 (Ring frustration) 效应 [182]。我们的研究表明环阻挫效应会诱导出一个新颖的无能隙相且相变时不会发生自发对称破缺，如图 4.3 所示。我们证明了这个无能隙相即使在热力学极限下依然稳定存在且拥有很高的基态纠缠熵。我们还严格求解了该模型在  $J/h > 1$

区间的基态自旋关联函数。我们发现当格点数  $N$  为奇数时，

$$\langle \psi | \sigma_j^x \sigma_{j+r}^x | \psi \rangle^{\text{odd}} = (-1)^r \left( 1 - \frac{h^2}{|J|^2} \right)^{1/4} (1 - 2\alpha), \quad \alpha = \frac{r}{N}. \quad \dots (4.24)$$

当格点数  $N$  为偶数时，

$$\langle \psi | \sigma_j^x \sigma_{j+r}^x | \psi \rangle^{\text{even}} = (-1)^r \left( 1 - \frac{h^2}{|J|^2} \right)^{1/4}. \quad \dots (4.25)$$

因此即使在热力学极限下  $N \rightarrow \infty$ ，我们依然可以固定  $\alpha \rightarrow 0.5$ ，即两个自旋之间的间距也很大时  $r \rightarrow \infty$ ，有环阻挫效应的奇数格点体系的自旋关联函数将变为零，而无环阻挫效应的偶数格点体系的自旋关联函数为常数且不随两个自旋之间的距离  $r$  变化，表明格点数目的奇偶性变化会显著影响体系的物理性质。随后人们在一维 XY 模型、XXZ 模型、海森堡模型以及其他变种模型中也发现了环阻挫效应 [183–193]。这种由于格点数的奇偶性变化引起的量子相变为进一步建立超越朗道相变理论的新框架提供了一个典型案例。

由于做功与体系的能级变化密切相关，因此不同格点数会对功分布造成很大的影响。本小节的目的是利用横场伊辛模型验证我们方法的正确性，为了便于和文献中的结果做比较，我们仅考虑铁磁相互作用和偶数个格点的情况，此时模型在  $h = J$  处发生量子相变。利用 Jordan-Wigner 变换

$$\sigma_j^+ = \frac{(\sigma_j^x + i\sigma_j^y)}{2} = c_j^\dagger \exp\left(i\pi \sum_{l < j} c_l^\dagger c_l\right), \quad \dots (4.26)$$

我们可以把自旋模型映射为无自旋的费米子模型

$$\begin{aligned} H = Nh - 2h \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j - J \sum_{j=1}^{N-1} (c_j^\dagger - c_j) (c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}) \\ + J \exp(i\pi M) (c_N^\dagger - c_N) (c_1^\dagger + c_1), \end{aligned} \quad \dots (4.27)$$

其中  $M = \sum_{l=1}^N c_l^\dagger c_l$  是总粒子数。由于哈密顿量中粒子数的奇偶性不变，因此体系的宇称  $\exp(i\pi M)$  守恒。当粒子数为偶数时，我们可以定义反周期边界条件  $c_{N+1} = -c_1$ ；当粒子数为奇数时，我们可以令费米子满足周期性边界条件  $c_{N+1} = c_1$ 。于是上式可以化简为 [194]

$$H = P^+ H^{(e)} P^+ \oplus P^- H^{(o)} P^-, \quad \dots (4.28)$$

其中

$$P^\pm = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \prod_{n=1}^N \left( 1 - 2c_n^\dagger c_n \right) \right], \quad \dots (4.29)$$

为投影算符，而  $H^{(e/o)}$  则分别代表偶宇称/奇宇称的子空间。原则上我们需要精确求解不同子空间的哈密顿量，但在热力学极限下，两个子空间的能级结构将趋于一致。为了方便起见，本文仅考虑偶宇称的子空间，此时哈密顿量可化简为

$$H = Nh - 2h \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j - J \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger - c_j)(c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}). \quad \dots (4.30)$$

利用傅里叶变换

$$c_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N c_j \exp(i q j), \quad \dots (4.31)$$

我们可以把哈密顿量改写为如下标准形式

$$H = \sum_{k>0} \Psi_k^\dagger (\mathbf{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Psi_k, \quad \dots (4.32)$$

其中

$$\Psi_k^\dagger = (c_k^\dagger, c_{-k}), \quad \mathbf{d}_k = (0, -2J \sin k, -2h - 2J \cos k). \quad \dots (4.33)$$

式中动量  $k$  为  $\pm\pi(2m-1)/N$ , ( $m = 1, \dots, N/2$ )。在后面的计算中，我们把铁磁相互作用强度  $J$  设为单位一。

首先考虑最简单的单次 quench 过程，即外场  $h$  从  $h_0$  突变到  $h_1 = h_0 + \delta$  的情况。此时特征函数可以表示为

$$\begin{aligned} G_k(u) &= \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2(\beta E_k^0/2) \{ 1 + \cos(u E_k^1) \cos[E_k^0(u - i\beta)] \\ &\quad + \frac{\mathbf{d}_k^0 \cdot \mathbf{d}_k^1}{E_k^0 E_k^1} \sin(u E_k^1) \sin[E_k^0(u - i\beta)] \}, \end{aligned} \quad \dots (4.34)$$

其中  $E_k^{0,1} = |\mathbf{d}_k^{0,1}|$ 。然后利用 Gärter-Ellis 定理，我们可以求出体系的功分布。图 4.4(a) 和 4.4(b) 分别为参数突变并跨过相变点时不同温度下的比率函数  $r(w)$  和功分布  $p(w)$ 。计算结果表明功分布  $p(w)$  只在某个区间  $[w_{\min}, w_{\max}]$  内不为零，在这个区间之外功分布恒为零，相应地，比率函数为无穷大  $r(w) = \infty$ 。其原因如下，在零温时，quench 前系统处于基态，当 quench 后的系统也处于基态时，系统做功最小，因此最小功为两个基态的能量差

$$\Delta_{\min} = \Delta f = -\frac{1}{N^d} \sum_k [E_k^1 - E_k^0], \quad \dots (4.35)$$

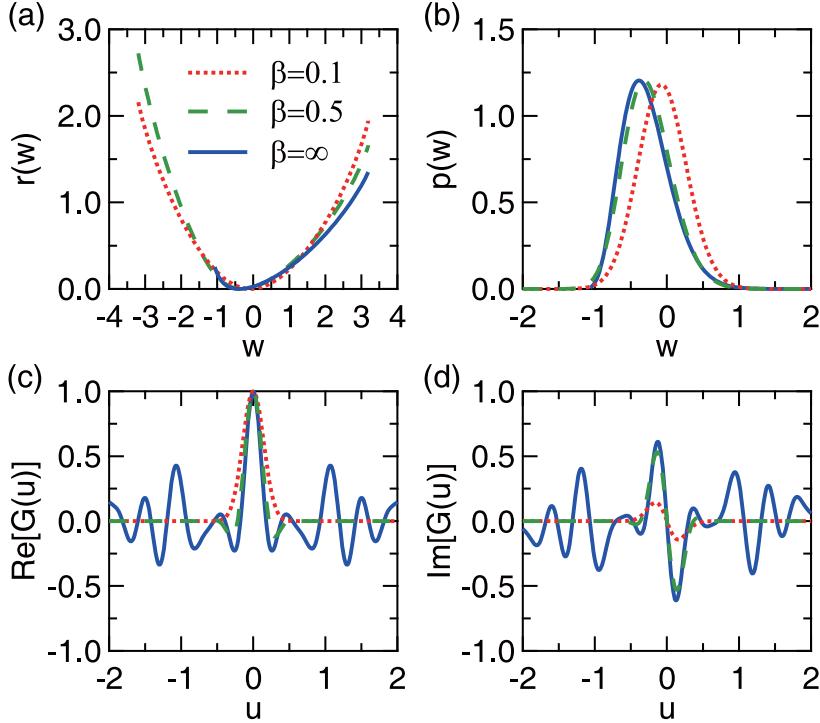


图 4.4 不同逆温度  $\beta$  下, 横场伊辛模型中的参数从  $h_0 = 0.5$  突变到  $h_1 = 2.0$  这一单次 quench 过程中的比率函数  $r(w)$ 。(b) 为相应的功分布函数  $p(w) \sim e^{-Nr(w)}$ 。(c) 和 (d) 分别为特征函数  $G(u)$  的实部和虚部。图中格点大小取为  $N = 20$ 。

**Figure 4.4 (a) The rate function  $r(w)$  for a single quench from  $h_0 = 0.5$  to  $h_1 = 2.0$  in the transverse Ising model at different inverse temperature  $\beta$ . (b) The corresponding work distribution function  $p(w) \sim e^{-Nr(w)}$ . (c) and (d) are the real and imaginary parts of the characteristic function  $G(u)$ , respectively. The lattice size is set to  $N = 20$ .**

功不可能小于这个值, 于是在零温时有  $p(w < \Delta_{\min}) = 0$ 。有限温的情况则有所不同, 由于热效应, quench 前的系统有一定几率处于最高能量态, 即所有准粒子都被激发到激发态, 此时能量密度为  $\epsilon^h = \frac{1}{N^d} \sum_k E_k^0$ , 当 quench 后的系统位于基态  $\epsilon^g = -\frac{1}{N^d} \sum_k E_k^1$  时给出最小功

$$w_{\min} = -\frac{1}{N^d} \sum_k (E_k^1 + E_k^0). \quad \dots (4.36)$$

类似地, 当 quench 前系统处于基态  $\epsilon^g = -\frac{1}{N^d} \sum_k E_k^0$ , quench 后的系统位于最高能量态  $\epsilon^h = \frac{1}{N^d} \sum_k E_k^1$  时, 系统做功最大, 为

$$w_{\max} = \frac{1}{N^d} \sum_k (E_k^1 + E_k^0) = -w_{\min}. \quad \dots (4.37)$$

图 4.4(c) 和 4.4(d) 则分别展示了特征函数的实部和虚部，其满足归一化条件

$$G(0) = \int_{-\infty}^{\infty} dw p(w) = 1, \quad \dots (4.38)$$

符合预期，表明计算结果是正确的。

利用公式 (4.19) 和 (4.20)，我们还可以算出零温时单个 quench 过程中的平均功密度  $\langle w \rangle$  和自由能密度  $\Delta f$ ，以及不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle$

$$\langle w_{\text{irr}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k>0} \left[ \frac{-4\delta(h_0 + \cos k)}{\epsilon_k(h_0)} + \epsilon_k(h_1) - \epsilon_k(h_0) \right], \quad \dots (4.39)$$

其中色散关系为

$$\epsilon_k(h) = |\mathbf{d}_k| = 2\sqrt{1 + h^2 + 2h \cos k}. \quad \dots (4.40)$$

图 4.5(a) 展示了不同格点数时  $\langle w \rangle/\delta$  和  $\langle w_{\text{irr}} \rangle/\delta^2$  随外场  $h_0$  的变化。平均功密度在相变点处连续变化，因此不能用于描述量子相变，但不可逆功密度则随格点数增加呈现出尖峰行为并在热力学极限下发散。如前所述，不可逆功密度与基态自由能的二阶导数相联系，因此能比较好地描述二阶量子相变以及临界现象。图 4.5(b) 到 4.5(g) 为不可逆功密度在不同参数区间的标度行为。我们发现不可逆功密度与  $N, \lambda, \delta$  有对数依赖关系，表明临界指数为  $\nu = z = 1$ ，与横场伊辛模型严格解的结论一致 [12]。

对于两次 quench 过程，即在  $t = 0$  时刻外磁场  $h$  从  $h_0 < 1$  突变到  $h_1 > 1$ ，然后在  $t = T_0$  时刻突变回  $h_0$  的过程，功分布  $p(w = 0, T_0)$  对应 Loschmidt 回波，比率函数  $r(w = 0, T_0)$  对应动力学自由能密度。因此  $r(w = 0, T_0)$  在某个时刻的奇异性对应动力学量子相变。图 4.6 展示了不同功密度  $w = W/N$  的比率函数随时间  $T_0$  的演化。图中清晰地显示了  $r(w = 0, T_0)$  的尖峰结构。但当  $w \neq 0$  时，尖峰结构消失。值得注意的是，平均功密度在  $t_c$  处连续变化，表明平均功密度既不能刻画量子相变也不能刻画动力学量子相变，如图 4.6 的插图所示。我们还发现对于两次 quench 过程，该尖峰结构会周期性地出现在  $t_c = (n + 1/2)T^*$  时刻，其中时间周期为

$$T^* = \frac{\pi}{2\sqrt{1 + (h_1)^2 - 2h_1 \frac{1+h_0h_1}{h_0+h_1}}}. \quad \dots (4.41)$$

这表明时间演化态  $|\psi(t)\rangle$  会周期性地与初态正交。该时间周期的倒数  $\omega^* = 2\pi/T^*$  还定义了动力学相变能量转换的特征尺度。以上的结果与前人利用哈密顿理论

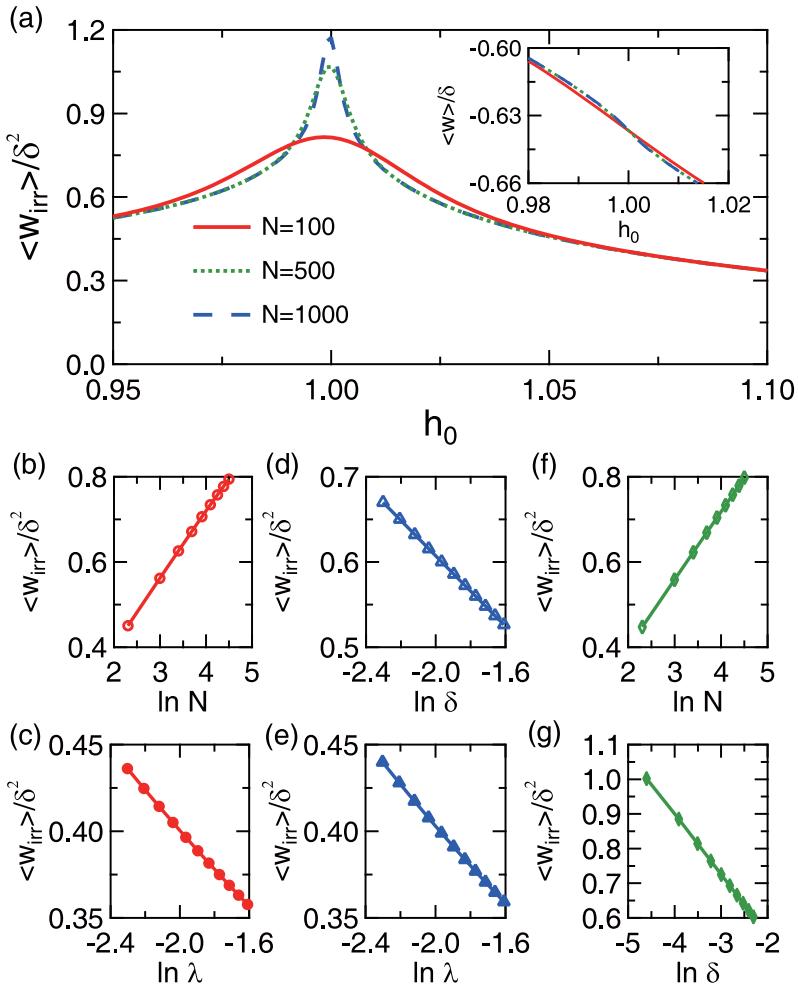
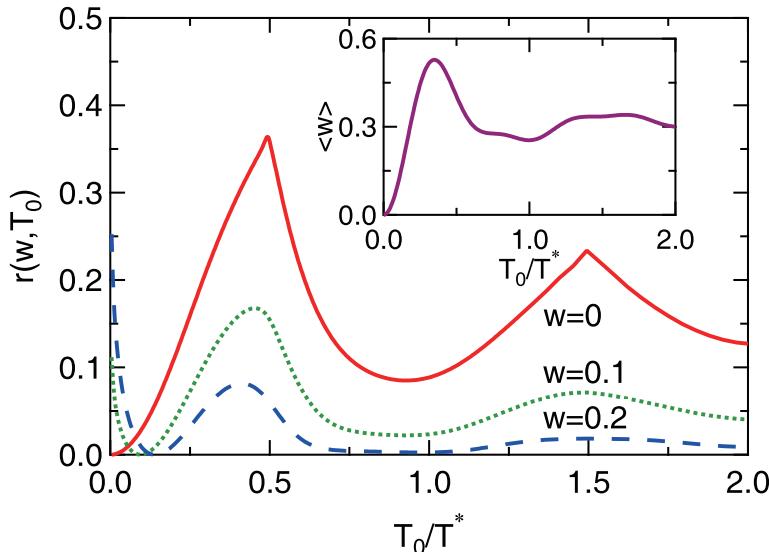


图 4.5 (a) 当格点数  $N$  不同时, 平均不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随参数  $h_0$  的变化曲线。插图为平均功密度  $\langle w \rangle / \delta$  随  $h_0$  的变化曲线。(b) 和 (c) 展示了在热敏感极限 ( $\delta = 0.001$ ) 下  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $N$  和  $\lambda$  的对数依赖关系, (b) 中  $\lambda = 0.005$ , (c) 中  $N = 100$ 。(d) 和 (e) 展示了热力学极限 ( $N = 1000$ ) 下  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $\delta$  和  $\lambda$  的对数依赖关系, (d) 中  $\lambda = 0.01$ , (e) 中  $\delta = 0.01$ 。(f) 和 (g) 展示了  $\lambda = 0.0005$  时  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $N$  和  $\delta$  的对数标度律, 此时  $\lambda^{-\nu}$  是最大的特征长度, 即初始系统非常靠近相变点, (f) 中  $\delta = 0.001$ , (g) 中  $N = 1000$ 。

**Figure 4.5 (a)** The mean irreversible work density,  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ , as a function of  $h_0$  with different lattice size  $N$ . The inset shows the  $h_0$  dependence of the mean work density  $\langle w \rangle / \delta$ . (b) and (c) show the logarithmic dependence of  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  on  $N$  and  $\lambda$  in the heat susceptibility limit ( $\delta = 0.001$ ). Other parameters are  $\lambda = 0.005$  in (b) and  $N = 100$  in (c). (d) and (e) show its logarithmic scaling with respect to  $\delta$  and  $\lambda$  in the thermodynamic limit ( $N = 1000$ ) for  $\lambda = 0.01$  in (d) and  $\delta = 0.01$  in (e). (f) and (g) show the logarithmic scaling with  $N$  and  $\delta$  for  $\lambda = 0.0005$ , such that  $\lambda^{-\nu}$  is the largest length scale and the quench Hamiltonian is very close to the quantum critical point. Other parameters are  $\delta = 0.001$  in (f) and  $N = 1000$  in (g).



**图 4.6** 两次 quench 过程——即从  $h_0 = 0.5$  突变到  $h_1 = 2.0$ , 然后经过一段时间  $T_0$  后再突变回  $h_0$ 。这一过程中横场伊辛模型在零温时的比率函数  $r(w, T_0)$ 。图中格点数为  $N = 100$ 。由于  $w = 0$  的比率函数对应 Loschmidt 回波, 其在  $T_0 = (n + 1/2)T^*$  处的非解析性代表动力学量子相变。插图展示了平均功密度  $\langle w \rangle$  随时间  $T_0$  的连续变化, 没有体现出任何奇异性。

**Figure 4.6 The rate function  $r(w, T_0)$  at zero temperature for a double quench process of the transverse Ising model from  $h_0 = 0.5$  to  $h_1 = 2.0$  and back to  $h_0$  after time  $T_0$ . The lattice size is  $N = 100$ . The rate function for  $w = 0$  corresponds to the Loschmidt echo and its nonanalyticity at  $T_0 = (n + 1/2)T^*$  manifests the dynamical QPTs. The inset shows the mean work density  $\langle w \rangle$ , which exhibits no singularity and is a smooth function of  $T_0$ .**

研究 Loschmidt 回波的结论一致 [34], 再一次表明了我们方法的正确性。但泛函路径积分方法的适用性更广, 克服了哈密顿量方法不容易处理非 quench 过程的缺点。我们会在接下来进一步研究更一般性的非平衡过程对动力学量子相变的影响。

#### 4.4.2 拓扑模型

本小节主要研究拓扑性质对功分布的影响。SSH 模型是最简单的拥有拓扑相变的模型, 它最早被用于研究聚乙炔化合物中的电输运性质 [195]。由于其拥有拓扑孤子激发、分数电荷和非平庸边缘态等奇特物性而受到了广泛关注 [196–200]。

SSH 模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{j=1}^N \left( v c_{A,j}^\dagger c_{B,j} + v' c_{A,j+1}^\dagger c_{B,j} + h.c. \right), \quad \dots (4.42)$$

其中  $A$  和  $B$  分别表示元胞中的两个不等价原子， $N$  为元胞个数。在开边界条件下，当  $v < v'$  时，体系拥有两个边缘态，当  $v > v'$  时边缘态消失。因此  $v = v'$  是系统的拓扑相变点。对于周期性边界条件，我们可以采用如下的傅里叶变换将其变换到动量空间

$$c_{\alpha,j} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{\alpha,k} \exp(i k j), \quad \dots (4.43)$$

其中  $\alpha = A$  或  $B$ ， $k = 2m\pi/N$ , ( $m = 1 - N/2, \dots, N/2$ )。在动量空间，哈密顿量可以写为如下标准形式

$$H = \sum_k \Psi_k^\dagger (\mathbf{d}_k \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Psi_k, \quad \dots (4.44)$$

其中

$$\Psi_k^\dagger = (c_{A,k}^\dagger, c_{B,k}^\dagger), \quad \mathbf{d}_k = (v + \cos k, \sin k, 0). \quad \dots (4.45)$$

这里我们已经把  $v'$  设为了单位一。

对于单次 quench 过程，我们把 SSH 模型的参数  $\mathbf{d}_k$  代入到公式 (4.19) 和 (4.20) 中就可以求出平均功密度  $\langle w \rangle$  和自由能密度  $\Delta f$ ，以及不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle$ ：

$$\langle w_{\text{irr}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \left[ \frac{-\delta(v_0 + \cos k)}{\epsilon_k(v_0)} + \epsilon_k(v_1) - \epsilon_k(v_0) \right], \quad \dots (4.46)$$

其中色散关系为

$$\epsilon_k(v) = |\mathbf{d}_k| = \sqrt{1 + v^2 + 2v \cos k}. \quad \dots (4.47)$$

图 4.7(a) 展示了当  $v$  从  $v_0$  突变到  $v_0 + \delta$  时， $\langle w \rangle$  和  $\langle w_{\text{irr}} \rangle$  随初始跃迁强度  $v_0$  的变化规律。与横场伊辛模型（图 4.5）不同的是，平均功密度在相变点不连续。同时，我们发现不可逆功密度在相变点处除了有一个光滑的背景外，还出现了一个很大的“共振峰”。随着  $N$  增加，相变点处的峰值会减弱，相应地，平均功密度的“光滑背景”演化为一个类似于在横场伊辛模型中观察到的很宽的峰。除了靠近相变点  $v_0 = 1$  附近的一小块区域外，在平滑背景处的其他参数区间内的不可逆功密度均与  $N, \lambda, \delta$  呈对数依赖关系，表明其临界指数与一维铁磁横场伊辛模型一致，都为  $\nu = z = 1$ 。这些区间的标度行为如图 4.7(b) 到图 4.7(e) 所示。

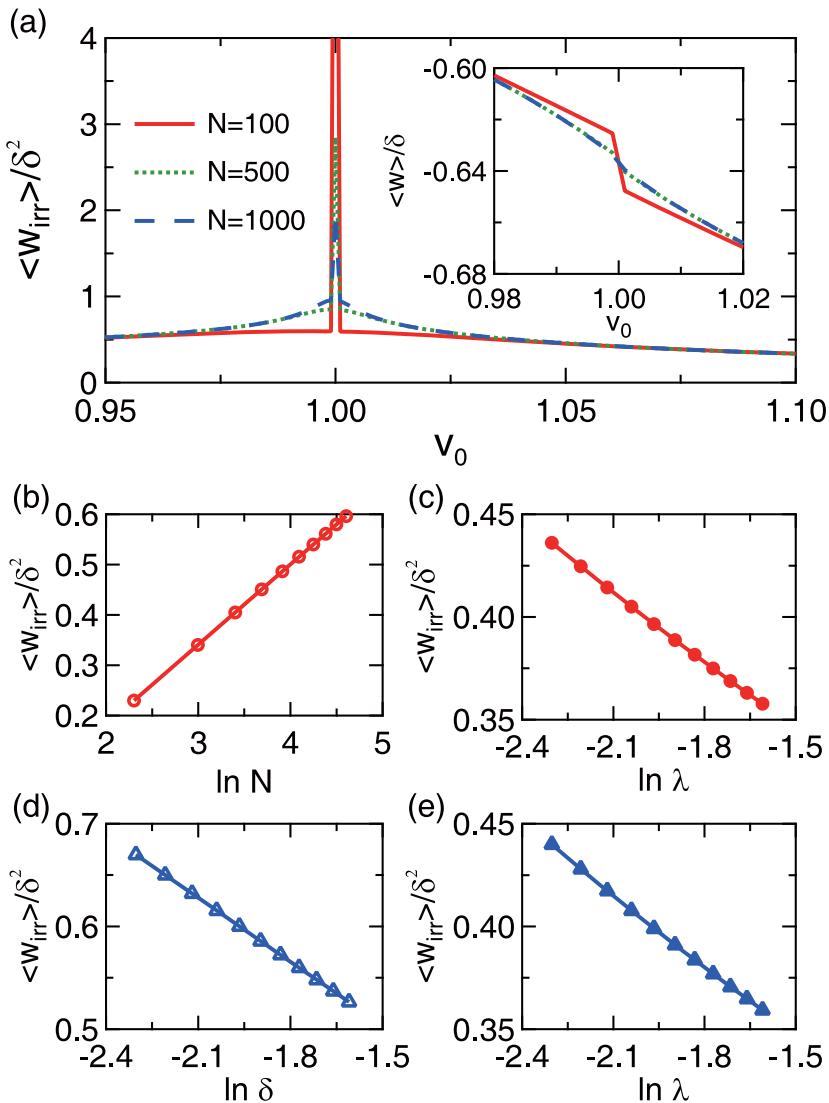


图 4.7 (a) 当格点数  $N$  不同时, 平均不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随参数  $v_0$  的变化曲线。插图为平均功密度  $\langle w \rangle / \delta$  随  $v_0$  的变化曲线, 当  $N$  较小时, 曲线在  $v_0 = 1$  处出现跃变。(b) 和 (c) 展示了在热敏感极限 ( $\delta = 0.001$ ) 下  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $N$  和  $\lambda$  的对数依赖关系, (b) 中  $\lambda = 0.005$ , (c) 中  $N = 100$ 。(d) 和 (e) 展示了在热力学极限 ( $N = 1000$ ) 下  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $\delta$  和  $\lambda$  的对数依赖关系, (d) 中  $\lambda = 0.01$ , (e) 中  $\delta = 0.01$ 。

Figure 4.7 (a) The mean irreversible work density,  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ , as a function of  $v_0$  for different lattice size  $N$ . The inset plots the mean work density  $\langle w \rangle / \delta$  versus  $v_0$ , showing a clear jump at  $v_0 = 1$  for small  $N$ . (b) and (c) show the logarithmic dependence of  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  on  $N$  and  $\lambda$  in the heat susceptibility limit ( $\delta = 0.001$ ) for  $\lambda = 0.005$  in (b) and  $N = 100$  in (c). (d) and (e) show its logarithmic scaling with respect to  $\delta$  and  $\lambda$  in the thermodynamic limit ( $N = 1000$ ) for  $\lambda = 0.01$  in (d) and  $\delta = 0.01$  in (e).

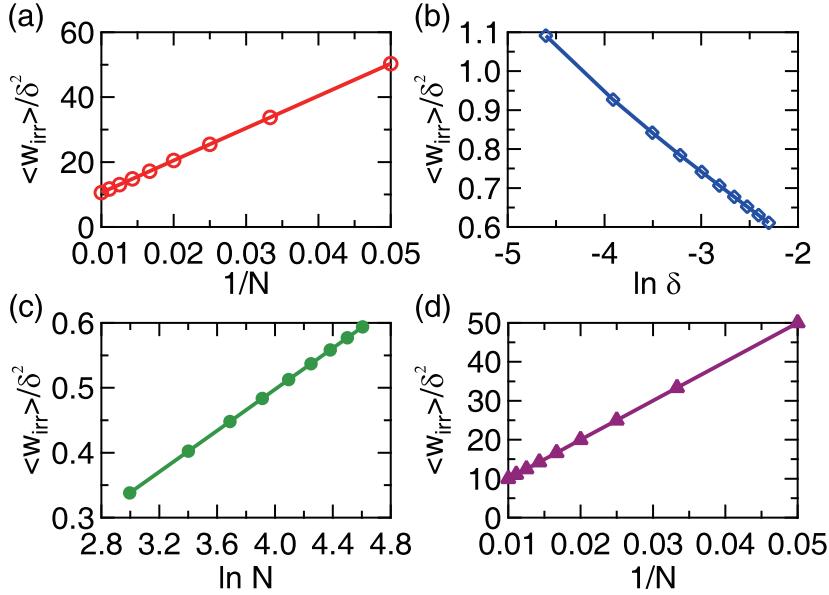


图 4.8 (a) 和 (b) 展示了当 SSH 模型靠近相变点时平均不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $N$  和  $\delta$  的标度关系。其中  $\lambda = 0.0005$ , 表示  $\lambda^{-\nu}$  是系统的最大特征长度。其他参数为: (a) 中  $\delta = 0.001$ , (b) 中  $N = 1000$ 。(a) 中的  $1/N$  标度行为可以分解为 (c) 和 (d) 两部分, 其中 (c) 中较小的  $\ln N$  行为来自量子临界的贡献, 而 (d) 中较大的非普适的  $1/N$  行为则与 SSH 模型相变的拓扑性质有关。

Figure 4.8 (a) and (b) show the scaling behavior of the mean irreversible work density,  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ , with  $N$  and  $\delta$  in the SSH model near the quantum critical point. We take  $\lambda = 0.0005$  such that  $\lambda^{-\nu}$  is the largest length scale of the system. Other parameters are  $\delta = 0.001$  in (a) and  $N = 1000$  in (b). The  $1/N$  scaling in (a) can be separated into (c) a small  $\ln N$  contribution from quantum criticality and (d) a dominant nonuniversal  $1/N$  contribution due to the topological nature of the QPT in the SSH model.

但当靠近相变点  $v_0 = 1$  时, 不可逆功密度中的尖峰会导致其标度偏离预期的对数行为, 如图 4.8(a) 和 4.8(b) 所示。事实上, 由于 SSH 的拓扑性质, 在相变点处  $k = \pi$  的能级会发生交叉, 因此我们可以把不可逆功的贡献分成两个部分  $\langle w_{\text{irr}} \rangle = \langle w_{\text{irr}} \rangle_{k \neq \pi} + \langle w_{\text{irr}} \rangle_{k=\pi}$ 。当  $\lambda^{-\nu}$  是最大的特征长度时, 不可逆功的标度可以表示为

$$\begin{aligned} \frac{\langle w_{\text{irr}} \rangle}{\delta^2} &\sim \ln \delta + \frac{2}{N} \frac{1}{\delta} - \frac{2\lambda}{N} \frac{1}{\delta^2}, \quad \lambda^{-\nu} > N > \delta^{-\nu}, \\ &\sim \ln N + \frac{2(\delta - \lambda)}{\delta^2} \frac{1}{N}, \quad \lambda^{-\nu} > \delta^{-\nu} > N. \end{aligned} \quad \dots (4.48)$$

其中对数行为  $\ln \delta$  和  $\ln N$  来自  $\langle w_{\text{irr}} \rangle_{k \neq \pi}$  的贡献, 其余部分则来自  $k = \pi$  点的贡

献

$$\frac{\langle w_{\text{irr}} \rangle_{k=\pi}}{\delta^2} = \frac{2(\delta - \lambda)}{\delta^2} \frac{1}{N}. \quad \dots (4.49)$$

由此可知，当  $\lambda^{-\nu} > \delta^{-\nu} > N$  且  $\nu_0 = 1$ ，即  $\lambda = 0$  时， $1/N$  前面的系数  $2/\delta$  将会变得非常大，甚至会大到掩盖掉正常的  $\ln N$  行为。如图 4.8(a) 所示，我们在这个区间只能观察到  $1/N$  的标度行为。图 4.8(c) 和 4.8(d) 则分别展示了  $k \neq \pi$  和  $k = \pi$  对不可逆功密度的贡献。从图中可以清晰地看到， $\langle w_{\text{irr}} \rangle_{k \neq \pi}$  中对数行为  $\ln N$  的系数较小，而  $\langle w_{\text{irr}} \rangle_{k=\pi}$  贡献了一个非常大的  $1/N$  因子。对于开边界条件，由于边缘态的存在，我们预期其对不可逆功密度也会贡献一个  $1/N$  的因子 [201, 202]。

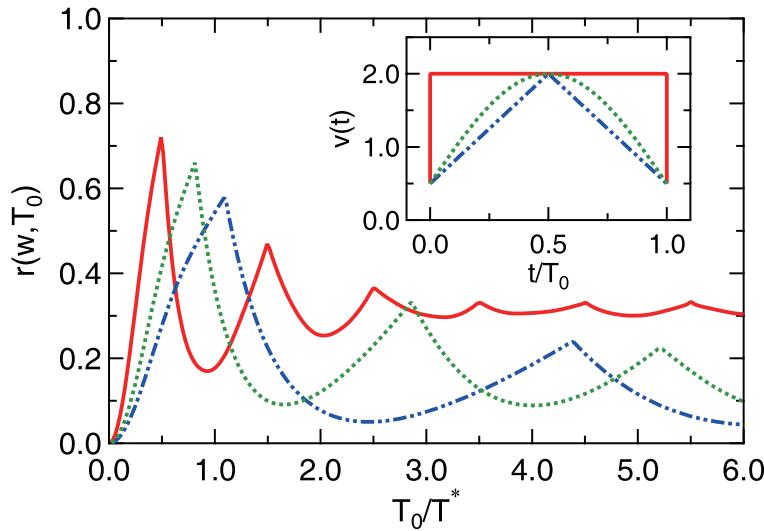


图 4.9 零温下，SSH 模型在三种不同的时间演化方案下的比率函数  $r(w, T_0)$ ，其中  $w = 0$ 。插图为当  $T_0 = 2.0$  时  $v(t)$  的不同演化方案。图中格点数取为  $N = 1000$ 。三种情况下的比率函数都出现了尖峰，代表着在这些时刻发生了动力学量子相变。

**Figure 4.9 The rate function  $r(w, T_0)$  at  $w = 0$  and zero temperature for three different time evolution protocols of the SSH model. The inset plots the corresponding  $v(t)$  with  $T_0 = 2.0$ . The lattice size is  $N = 1000$ . The singularities in the rate function reflect the dynamical QPTs in all three cases.**

如前所述，我们的方法不仅可以用于研究参数突变的情况，还可以用于研究任意非平衡过程。作为示例，我们比较了参数突变过程与其他两种非突变过程中的动力学量子相变，其中  $v(t)$  随时间的演化如图 4.9 的插图所示。图 4.9 的主图则展示了 SSH 模型在三种不同非平衡条件下的比率函数  $r(w=0, T_0)$ 。我们发现对于这三种情况，零温时  $r(w, T_0)$  在  $w = 0$  时都会出现清晰的尖峰结构，这表

明动力学量子相变是一般性的，不局限于参数突变的情况。由于在动量空间中，SSH 模型与横场伊辛模型的哈密顿量具有相似的结构，因此对于两次 quench 过程，SSH 模型中也存在随时间周期出现的动力学量子相变。计算表明该动力学量子相变发生的时间为  $t_c = (n + 1/2)T^*$ ，其中时间周期为

$$T^* = \frac{\pi}{\sqrt{1 + (v_1)^2 - 2v_1 \frac{1+v_0v_1}{v_0+v_1}}}. \quad \dots (4.50)$$

值得注意的是，除了 quench 情况，其他两种非平衡过程的动力学量子相变不再具有时间周期性。

#### 4.4.3 超导模型

这一节我们进一步把我们的方法扩展到超导模型的研究中。由于超导模型是很难解析求解的，这里我们仅考虑最简单的 BCS 平均场哈密顿量 [203]

$$H = \sum_k \Psi_k^\dagger \begin{bmatrix} \xi_k & -\Delta \\ -\Delta & -\xi_k \end{bmatrix} \Psi_k, \quad \dots (4.51)$$

其中

$$\xi_k = -2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)] - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) - \mu, \quad \dots (4.52)$$

是传导电子的色散关系， $\mu$  是化学势， $\Psi_k^\dagger$  是 Nambu 旋量  $\Psi_k^\dagger = (c_{k\uparrow}^\dagger, c_{-k\downarrow})$ ， $\Delta$  则为超导模型的平均场序参量。参数  $t$  和  $t'$  分别代表二维方格子上的近邻和次近邻跃迁强度。这里我们把动量取为  $k_x = 2\pi m/N$  和  $k_y = 2\pi l/N$ ，其中  $m, l = 1 - N/2, \dots, N/2$ ， $N$  是  $x$  和  $y$  方向上的格点数。在后面的计算中，我们把参数设为  $t = 0.435$ ,  $t' = 0.05$ ,  $\mu = 0.5$ 。

首先，我们考虑最简单的单次 quench 过程，即把平均场序参量  $\Delta$  从  $\Delta_0$  突然改变到  $\Delta_1 = \Delta_0 + \delta$ 。此时模型的参数可以表示为

$$\mathbf{d}_k^0 = (-\Delta_0, 0, \xi_k), \quad \mathbf{d}_k^1 = (-\Delta_1, 0, \xi_k). \quad \dots (4.53)$$

这一过程中的不可逆功为

$$\langle w_{\text{irr}} \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_k \left[ \frac{-\delta\Delta_0}{\sqrt{\Delta_0^2 + \xi_k^2}} + \sqrt{\Delta_1^2 + \xi_k^2} - \sqrt{\Delta_0^2 + \xi_k^2} \right], \quad \dots (4.54)$$

图 4.10(a) 展示了不同格点数  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随  $\Delta_0$  的变化。从图中可以看出，当  $N$  很大时，不可逆功随  $\Delta_0$  的减少而对数增加。如图 4.10(b) 与 4.10(c) 所示，在热力

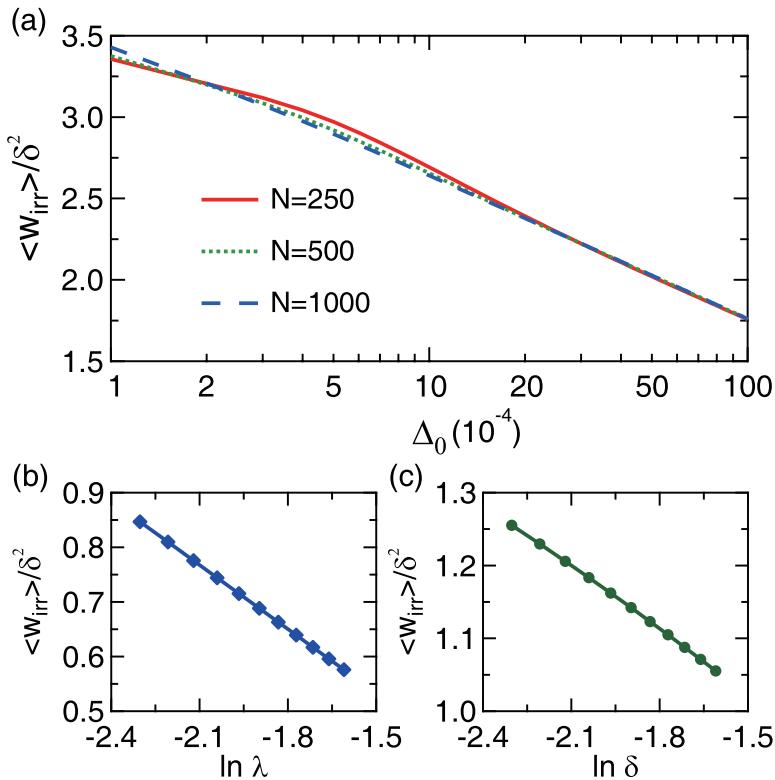


图 4.10 (a) 当格点数  $N$  不同时, BCS 模型在单次 quench 过程中平均不可逆功密度  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$  随初始序参量  $\Delta_0$  的变化曲线。(b) 和 (c) 展示了在热力学极限下, 即  $N = 1000$  时, 平均不可逆功密度随  $\delta$  和  $\lambda$  的对数依赖关系。其他参数为: (b) 中  $\delta = 0.01$ , (c) 中  $\lambda = 0.01$ 。

**Figure 4.10 (a)** The mean irreversible work density,  $\langle w_{\text{irr}} \rangle / \delta^2$ , as a function of the initial order parameter  $\Delta_0$  of the BCS model in a single quench protocol for different values of the lattice size  $N$ . (b) and (c) plot its logarithmic scaling with respect to  $\delta$  and  $\lambda$  in the thermodynamic limit with  $N = 1000$ . Other parameters are  $\delta = 0.01$  in (b) and  $\lambda = 0.01$  in (c).

学极限下 ( $N = \infty$ ), 不可逆功也表现出了随  $\lambda$  和  $\delta$  的对数行为。表明二维平均场 BCS 模型的临界指数为  $v = 1/2$  和  $z = 2$ 。

对于两次 quench 过程 (即在  $t = 0$  时序参量从  $\Delta_0$  突变到  $\Delta_1$ , 然后在  $t = T_0$  时刻突变回  $\Delta_0$ ) , 利用 Gärter-Ellis 定理, 我们可以求出这一过程的比率函数  $r(w, T_0)$ 。图 4.11 展示了当初始序参量  $\Delta_0 = 0$  时,  $r(w, T_0)$  和平均功密度随时间的变化关系。从图中可以清晰的看到, 当  $t_c = (n + 1/2)T^*$ ,  $T^* = \pi/\Delta_1$  时,  $r(w, T_0)$  在  $w = 0$  处呈现出尖峰行为, 表明这一时刻体系发生了动力学量子相变。我们还发现只有当初始序参量为零时才能观察到动力学量子相变, 表明动力学量子相变与超导的不稳定性有一定的相关性。

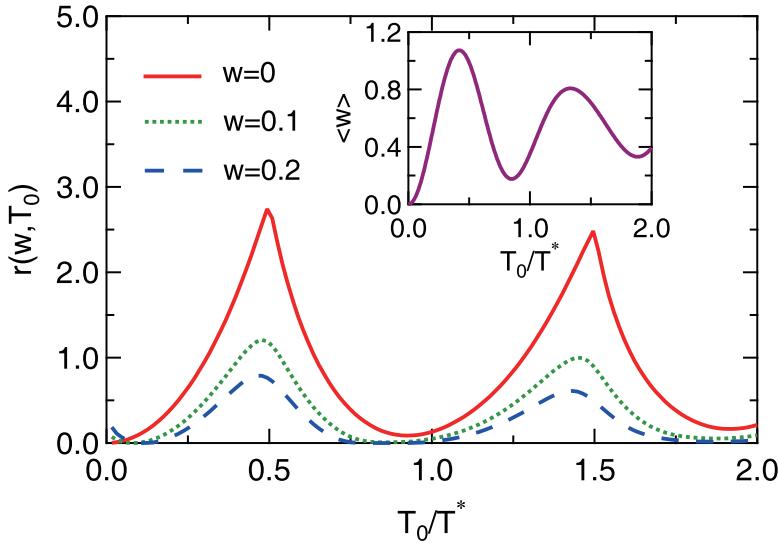


图 4.11 两次 quench 过程——即从  $\Delta_0 = 0.0$  突变到  $\Delta_1 = 2.0$ , 然后经过一段时间  $T_0$  的演化后再突变回  $\Delta_0$ 。这一过程中 BCS 模型在零温时的比率函数  $r(w, T_0)$ 。图中格点数取为  $N = 50$ 。与比率函数在  $T_0 = (n + 1/2)T^*$  处出现奇异行为不同的是, 平均功密度  $\langle w \rangle$  在动力学量子相变点处没有出现任何奇异性, 如插图所示。

**Figure 4.11 The rate function  $r(w, T_0)$  at zero temperature for a double quench of the BCS Hamiltonian from  $\Delta_0 = 0.0$  to  $\Delta_1 = 2.0$  and back to  $\Delta_0$  after time  $T_0$  for  $N = 50$ . In contrast to the singular behavior at  $T_0 = (n + 1/2)T^*$  in the rate function, the mean work density  $\langle w \rangle$  shown in the inset exhibits no singularity from dynamical QPTs.**

#### 4.5 蒙特卡洛方法在量子功中的应用

在前面的章节中, 我们介绍了双线性模型中量子功的泛函路径积分方法。对于一般的相互作用系统, 我们通常很难严格计算出其平衡态的各种物理性质, 因此我们也很难解析地研究其非平衡态物性。平均场近似是研究相互作用系统的常用手段, 这一方法适用于平均场近似能抓住物理实质的体系, 如上节所介绍的 BCS 超导模型。在平均场近似的基础上, 我们还可以利用微扰法对平均场近似做修正, 比如 Z. Fei 和 H. T. Quan 在 2020 年利用微扰展开法计算了特征函数的低阶展开表达式 [156]。但这一方法仅适用于弱相互作用系统。到目前为止, 我们还没有一个非微扰的方法来严格计算强关联系统中的功分布。借鉴平衡态物理中辅助场蒙特卡洛方法的思想 [204], 我们可以利用蒙特卡洛方法来非微扰地研究强关联体系中的量子功。下面以伊辛-近藤模型为例来介绍这一思想。

伊辛-近藤模型的哈密顿量为 [205]

$$H(t) = -g \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) + \frac{J(t)}{2} \sum_{j\sigma} S_j^z \sigma c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad \dots (4.55)$$

其中含时近藤交换作用  $J(t)$  代表任意的非平衡过程,  $c_{j\sigma}^\dagger, c_{j\sigma}$  分别为导带电子的产生和湮灭算符,  $S_j^z$  为局域自旋。我们注意到在这个模型中每个格点上的自旋是守恒量, 即局域自旋不随时间变化, 满足

$$\left[ S_j^z, H \right] = 0. \quad \dots (4.56)$$

当给定一组基  $|s_j\rangle$  时, 有  $S_j^z |s_j\rangle = \frac{s_j}{2} |s_j\rangle$ , 其中  $s_j = \pm 1$ 。在某个特定位形下, 哈密顿量可以写成如下双线性形式

$$H_s(t) = -g \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. \right) + \sum_{j\sigma} \frac{J(t)\sigma}{4} s_j c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} = \Psi^\dagger A(s, t) \Psi, \quad \dots (4.57)$$

其中  $\Psi^\dagger = [c_{1\uparrow}^\dagger, c_{1\downarrow}^\dagger, c_{2\uparrow}^\dagger, \dots, c_{N\downarrow}^\dagger]$ ,  $A(s, t)$  是相应的费米子矩阵。对于这样的双线性模型, 其特征函数的一般表达式为  $G(R) = \frac{\tilde{G}(R)}{Z(0)}$ , 其中

$$\begin{aligned} \tilde{G}(R) &= \text{Tr} \left[ U^\dagger(T_0, 0) e^{-RH(T_0)} U(T_0, 0) e^{(R-\beta)H(0)} \right] \\ &= \text{Tr}_c \text{Tr}_S \left[ U^\dagger(T_0, 0) e^{-RH(T_0)} U(T_0, 0) e^{(R-\beta)H(0)} \right] \\ &= \sum_{\{s_j\}} \text{Tr}_c \left[ U_s^\dagger(T_0, 0) e^{-RH_s(T_0)} U_s(T_0, 0) e^{(R-\beta)H_s(0)} \right]. \end{aligned} \quad \dots (4.58)$$

上式中的求和符号表示需要对所有的伊辛构型求和。进一步利用泛函路径积分方法将费米子积分掉后, 我们可以将特征函数写为

$$G(R) = \frac{\sum_{\{s_j\}} e^{-\beta F(s, 0)} e^{-\beta [F(s, R) - F(s, 0)]}}{\sum_{\{s_j\}} e^{-\beta F(s, 0)}}, \quad \dots (4.59)$$

其中

$$F(s, R) = -\frac{1}{\beta} \ln \det [I + B], \quad \dots (4.60)$$

$I$  为  $N \times N$  的单位矩阵,  $B$  矩阵则包含了时间演化过程

$$\begin{aligned} B &= e^{i\Delta t A(s, t_{1,2})} \dots e^{i\Delta t A(s, t_{M,M+1})} e^{-RA(s, T_0)} \\ &\times e^{-i\Delta t A(s, t_{M,M+1})} \dots e^{-i\Delta t A(s, t_{1,2})} e^{(R-\beta)A(s, 0)}, \end{aligned} \quad \dots (4.61)$$

根据公式 (4.59), 我们可以按照

$$p(s) = \frac{e^{-\beta F(s,0)}}{\sum_{\{s_j\}} e^{-\beta F(s,0)}} \quad \dots (4.62)$$

对初始位形进行抽样, 然后通过对  $e^{-\beta[F(s,R)-F(s,0)]}$  做平均来求解特征函数。最后再利用特征函数求解出系统的功分布、不可逆功等物理量。

## 4.6 本章小结

我们提出了计算多体系统量子功的特征函数的泛函路径积分方法, 该方法克服了哈密顿量方法不易推广到有限温和任意非平衡过程的缺点。通过 Gärter-Ellis 定理和 Jarzynski 恒等式我们可以高效地计算出任意非平衡过程中的功分布、平均功、以及不可逆功等物理量。我们利用新方法研究了横场伊辛模型、SSH 模型和 BCS 模型中的功分布, 证明了新方法的有效性和正确性。对于单次 quench 过程, 我们利用不可逆功研究了不同模型的临界指数。我们发现由于 SSH 模型拓扑相变性质的影响, 不可逆功的标度中存在反常的  $1/N$  修正。对于两次 quench 过程,  $w=0$  的功分布对应 Loschmidt 回波, 因此我们利用功分布  $p(w=0, T_0)$  研究了这三个模型的动力学量子相变。此外, 我们还研究了 SSH 模型在非 quench 下的动力学量子相变, 证明了动力学量子相变是普遍存在的。我们的方法还可以与蒙特卡洛方法结合以方便进一步研究强关联电子体系中的功分布。

## 第5章 总结与展望

### 5.1 总结

在强关联电子体系中，电子之间的强烈相互作用使得基于单电子近似的传统能带理论和基于小量展开的微扰理论失效。于是本文致力于发展新方法来研究强关联电子系统中的各种复杂物理。研究内容可以分为两个部分。

首先，在重费米子体系中，传统研究手段如平均场、有效场理论和动力学平均场等方法均不能很好地处理杂化涨落和杂化关联。然而杂化涨落和杂化关联又很重要，因为它们会带来新的物理，如实验中观察到的两阶段杂化过程和高温能带弯曲现象等。于是我们基于路径积分理论和蒙特卡洛方法发展了研究重费米子体系杂化物理的静态辅助场方法，该方法能有效地处理杂化涨落和杂化关联。当我们把静态辅助场近似方法应用到两杂质近藤-海森堡模型中时，我们发现杂化涨落会抑制平均场的有限温相变从而得到与实验更接近的渐变行为。为了揭示杂化关联，我们利用最近提出的互信息神经网络估计器研究了杂化场的互信息。我们发现杂化场的振幅互信息可以揭示量子相变，而相位互信息则能反映由 RKKY 相互作用引起的磁关联。

路径积分方法是研究强关联电子系统最强有力的方法之一。在论文第二部分，我们将其推广到非平衡量子热力学的研究中。作为推广的第一步，我们发展了研究多体系统量子功的泛函路径积分方法。量子功既可以刻画平衡态相变的临界行为又可以描述非平衡的动力学量子相变和涨落关系，因此是一个非常重要的物理量。但研究量子功的传统方法不易于推广到任意非平衡过程，而我们提出的新方法则克服了这个缺点。利用这一新方法，我们研究了横场伊辛模型、SSH 模型和 BCS 模型中的功分布和动力学量子相变，证明了新方法的有效性和正确性。特别是在 SSH 模型的研究中，我们发现由于拓扑相变的影响，不可逆功的标度中存在反常的  $1/N$  修正。我们还比较了不同非平衡条件下的动力学量子相变，发现动力学量子相变虽然是普遍存在的，但其时间周期性仅存在于参数突变的情况下。最后，我们以伊辛-近藤模型为例阐述了如何将路径积分与蒙特卡洛方法结合并推广到强关联电子系统的非平衡物性的研究中。

## 5.2 展望

静态辅助场近似方法能比较好地处理杂化涨落和杂化关联。作为发展方法的第一步，我们首先将它应用到两杂质近藤模型并取得了重要进展。该方法能很容易地推广到多杂质模型和晶格模型。我们希望通过晶格模型的研究为二流体理论和两阶段杂化图像提供更坚实的微观理论支持。同时，我们还希望能更加深入地探索重费米子物理中丰富的杂化构型。此外，非平衡物理也是受到广泛关注的研究方向。我们希望结合我们的新方法做更多关于量子功和动力学量子相变的研究，进一步揭示强关联电子体系中的非平衡物性，为建立非平衡的理论框架提供新思路。

## 参考文献

- [1] Haas W J D, Boer J D, Berg G V D. The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures [J]. *Physica*, 1934, **1**(7): 1115.
- [2] Coleman P. *Introduction to many-body physics* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.
- [3] Sumiyama A, Oda Y, Nagano H, et al. Coherent Kondo State in a Dense Kondo Substance:  $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$  [J]. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1986, **55**(4): 1294.
- [4] Pfau H. *Thermal transport in strongly correlated rare-earth intermetallic compounds* [M]. Switzerland: Springer, 2016.
- [5] Senthil T, Sachdev S, Vojta M. Fractionalized Fermi Liquids [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, **90**(21): 216403.
- [6] Yang Y F, Fisk Z, Lee H O, et al. Scaling the Kondo lattice [J]. *Nature*, 2008, **454**(7204): 611.
- [7] Yang Y F, Pines D, Lonzarich G. Quantum critical scaling and fluctuations in Kondo lattice materials [J]. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2017, **114**(24): 6250.
- [8] Chen Q Y, Xu D F, Niu X H, et al. Direct observation of how the heavy-fermion state develops in  $\text{CeCoIn}_5$  [J]. *Phys. Rev. B*, 2017, **96**(4): 045107.
- [9] Liu Y P, Zhang Y J, Dong J J, et al. Hybridization Dynamics in  $\text{CeCoIn}5$  Revealed by Ultrafast Optical Spectroscopy [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, **124**(5): 057404.
- [10] Lavagna M, Lacroix C, Cyrot M. Resistivity of the Kondo lattice [J]. *J. Phys. F*, 1982, **12**(4): 745.
- [11] Hu D, Dong J J, Yang Y F. Hybridization fluctuations in the half-filled periodic Anderson model [J]. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(19): 195133.
- [12] Dutta A, Aeppli G, Chakrabarti B K, et al. *Quantum Phase Transitions in Transverse Field Spin Models: From Statistical Physics to Quantum Information* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2015.
- [13] Hu D, Dong J J, Huang L, et al. Effective classical correspondence of the Mott transition [J]. *Phys. Rev. B*, 2020, **101**(7): 075111.
- [14] Heyl M. Dynamical quantum phase transitions: A brief survey [J]. *Europhys. Lett.*, 2019, **125**(2): 26001.
- [15] Stoof H T, Gubbels K B, Dickerscheid D B. *Ultracold Quantum Fields* [M]. Berlin: Springer, 2009.

- [16] Lancaster T, Blundell S J. Quantum Field Theory for the Gifted Amateur [M]. Oxford: Oxford University Press, 2014.
- [17] Schrieffer J R, Wolff P A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians [J]. Phys. Rev., 1966, **149**(2): 491.
- [18] Kondo J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys [J]. Prog. Theor. Phys., 1964, **32**(1): 37.
- [19] Anderson P W. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem [J]. J. Phys. C: Solid State Phys., 1970, **3**(12): 2436.
- [20] Wilson K G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem [J]. Rev. Mod. Phys., 1975, **47**(4): 773.
- [21] Ruderman M A, Kittel C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons [J]. Phys. Rev., 1954, **96**(1): 99.
- [22] Doniach S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism [J]. Physica B+C, 1977, **91**: 231.
- [23] Senthil T, Vojta M, Sachdev S. Weak magnetism and non-Fermi liquids near heavy-fermion critical points [J]. Phys. Rev. B, 2004, **69**(3): 035111.
- [24] Paul I, Pépin C, Norman M R. Kondo breakdown and hybridization fluctuations in the Kondo-Heisenberg lattice [J]. Phys. Rev. Lett., 2007, **98**(2): 026402.
- [25] Paul I, Pépin C, Norman M R. Multiscale fluctuations near a Kondo breakdown quantum critical point [J]. Phys. Rev. B, 2008, **78**(3): 035109.
- [26] Nakatsuji S, Yeo S, Balicas L, et al. Intersite Coupling Effects in a Kondo Lattice [J]. Phys. Rev. Lett., 2002, **89**(10): 106402.
- [27] Nakatsuji S, Pines D, Fisk Z. Two Fluid Description of the Kondo Lattice [J]. Phys. Rev. Lett., 2004, **92**(1): 016401.
- [28] Curro N J, Young B L, Schmalian J, et al. Scaling in the emergent behavior of heavy-electron materials [J]. Phys. Rev. B, 2004, **70**(23): 235117.
- [29] Yang Y F. Two-fluid model for heavy electron physics [J]. Rep. Prog. Phys., 2016, **79**(7): 074501.
- [30] Hanzawa K, Ohara K. Asymptotic local moment formation in the Kondo lattice [J]. Phys. Rev. B, 2007, **76**(18): 184407.
- [31] Ohara K, Hanzawa K. A generalized Ginzburg-Landau-Wilson theory of the Kondo lattice [J]. J. Phys. Soc. Jpn., 2013, **82**(10): 104713.
- [32] Ohara K, Hanzawa K. Nambu-goldstone and higgs modes in the kondo insulator [J]. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83**(10): 104604.

- [33] Coleman P, Marston J B, Schofield A J. Transport anomalies in a simplified model for a heavy-electron quantum critical point [J]. *Phys. Rev. B*, 2005, **72**(24): 245111.
- [34] Heyl M, Polkovnikov A, Kehrein S. Dynamical quantum phase transitions in the transverse-field ising model [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2013, **110**(13): 135704.
- [35] Krauth W. Statistical mechanics: algorithms and computations [M]. Oxford: Oxford University Press, 2006.
- [36] Anderson P W. More is different [J]. *Science*, 1972, **177**(4047): 393.
- [37] Zeng B, Chen X, Zhou D L, et al. Quantum information meets quantum matter: From quantum entanglement to topological phases of many-body systems [M]. New York: Springer, 2019.
- [38] Cover T M, Thomas J A. Elements of Information Theory [M]. New York: Wiley, 1991.
- [39] Wolf M M, Verstraete F, Hastings M B, et al. Area laws in quantum systems: Mutual information and correlations [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **100**(7): 070502.
- [40] Matsuda H, Kudo K, Nakamura R, et al. Mutual information of Ising systems [J]. *Int. J. Theor. Phys.*, 1996, **35**(4): 839.
- [41] Wicks R T, Chapman S C, Dendy R O. Mutual information as a tool for identifying phase transitions in dynamical complex systems with limited data [J]. *Phys. Rev. E*, 2007, **75**(5): 051125.
- [42] Wilms J, Troyer M, Verstraete F. Mutual information in classical spin models [J]. *J. Stat. Mech.*, 2011, **2011**(10): P10011.
- [43] Wilms J, Vidal J, Verstraete F, et al. Finite-temperature mutual information in a simple phase transition [J]. *J. Stat. Mech.*, 2012, **2012**(1): P01023.
- [44] Iaconis J, Inglis S, Kallin A B, et al. Detecting classical phase transitions with Renyi mutual information [J]. *Phys. Rev. B*, 2013, **87**(19): 195134.
- [45] Lau H W, Grassberger P. Information theoretic aspects of the two-dimensional Ising model [J]. *Phys. Rev. E*, 2013, **87**(2): 022128.
- [46] Casini H, Landea I S, Torroba G. The g-theorem and quantum information theory [J]. *J. High Energy Phys.*, 2016, **2016**(10): 140.
- [47] Hagymási I, Sólyom J, Legeza O. Competition between Hund's coupling and Kondo effect in a one-dimensional extended periodic Anderson model [J]. *Phys. Rev. B*, 2015, **92**(3): 035108.
- [48] Valdez M A, Jaschke D, Vargas D L, et al. Quantifying Complexity in Quantum Phase Transitions via Mutual Information Complex Networks [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, **119**(22): 225301.
- [49] Bagrov A A, Danilov M, Brener S, et al. Detecting quantum critical points in the t-t' Fermi-Hubbard model via complex network theory [J]. *Sci. Rep.*, 2020, **10**(1): 20470.
- [50] Toldin F P, Sato T, Assaad F F. Mutual information in heavy-fermion systems [J]. *Physical Review B*, 2019, **99**(15): 155158.

- [51] Hofmann J S, Assaad F F, Grover T. Kondo breakdown via fractionalization in a frustrated Kondo lattice Model [J]. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(3): 035118.
- [52] Walsh C, Sémond P, Poulin D, et al. Local Entanglement Entropy and Mutual Information across the Mott Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2019, **122**(6): 067203.
- [53] Walsh C, Charlebois M, Sémond P, et al. Information-theoretic measures of superconductivity in a two-dimensional doped Mott insulator [J]. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2021, **118**(25): e2104114118.
- [54] Hewson A C. *The Kondo Problem to Heavy Fermions* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [55] Newns D M, Read N. Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion systems [J]. *Adv. Phys.*, 1987, **36**(6): 799.
- [56] Sire C, Varma C M, Krishnamurthy H R. Theory of the non-Fermi-liquid transition point in the two-impurity Kondo model [J]. *Phys. Rev. B*, 1993, **48**(18): 13833.
- [57] Zhang G M, Yu L. Kondo singlet state coexisting with antiferromagnetic long-range order: A possible ground state for Kondo insulators [J]. *Phys. Rev. B*, 2000, **62**(1): 76.
- [58] Coqblin B, Lacroix C, Gusmão M A, et al. Band-filling effects on Kondo-lattice properties [J]. *Phys. Rev. B*, 2003, **67**(6): 064417.
- [59] Rech J, Coleman P, Zarand G, et al. Schwinger boson approach to the fully screened Kondo model [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, **96**(1): 016601.
- [60] O'Bannon A, Papadimitriou I, Probst J. A holographic two-impurity Kondo model [J]. *J. High Energy Phys.*, 2016, **2016**(01): 103.
- [61] Zhang G, Van Dyke J S, Flint R. Cubic hastatic order in the two-channel Kondo-Heisenberg model [J]. *Phys. Rev. B*, 2018, **98**(23): 235143.
- [62] Wugalter A, Komijani Y, Coleman P. Large-N approach to the two-channel Kondo lattice [J]. *Phys. Rev. B*, 2020, **101**(7): 075133.
- [63] Coleman P. Mixed valence as an almost broken symmetry [J]. *Phys. Rev. B*, 1987, **35**(10): 5072.
- [64] Jones B A, Kotliar B G, Millis A J. Mean-field analysis of two antiferromagnetically coupled Anderson impurities [J]. *Phys. Rev. B*, 1989, **39**(5): 3415.
- [65] Jones B A. Pair correlation effects in heavy fermions [J]. *Physica B*, 1991, **171**(1): 53.
- [66] Auerbach A, Levin K. Kondo Bosons and the Kondo Lattice: Microscopic Basis for the Heavy Fermi Liquid [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1986, **57**(7): 877.
- [67] Fye R M, Hirsch J E. Quantum Monte Carlo study of the two-impurity Kondo Hamiltonian [J]. *Phys. Rev. B*, 1989, **40**(7): 4780.

- [68] Fye R M. “Anomalous fixed point behavior” of two Kondo impurities: A reexamination [J]. Phys. Rev. Lett., 1994, **72**(6): 916.
- [69] Hallberg K, Egger R. Two-impurity Kondo problem for correlated electrons [J]. Phys. Rev. B, 1997, **55**(14): R8646.
- [70] Silva J B, Lima W L, Oliveira W C, et al. Particle-hole asymmetry in the two-impurity kondo model [J]. Phys. Rev. Lett., 1996, **76**(2): 275.
- [71] Campo V L, Oliveira L N. Thermodynamics for the two-impurity Kondo model [J]. Phys. Rev. B, 2004, **70**(15): 153401.
- [72] Bulla R, Costi T A, Pruschke T. Numerical renormalization group method for quantum impurity systems [J]. Rev. Mod. Phys., 2008, **80**(2): 395.
- [73] Zhu L, Zhu J X. Coherence scale of coupled Anderson impurities [J]. Phys. Rev. B, 2011, **83**(19): 195103.
- [74] Bayat A, Bose S, Sodano P, et al. Entanglement probe of two-impurity Kondo physics in a spin chain [J]. Phys. Rev. Lett., 2012, **109**(6): 066403.
- [75] Bayat A, Johannesson H, Bose S, et al. An order parameter for impurity systems at quantum criticality [J]. Nat. Commun., 2014, **5**(1): 3784.
- [76] Raczkowski M, Assaad F F. Emergent Coherent Lattice Behavior in Kondo Nanosystems [J]. Phys. Rev. Lett., 2019, **122**(9): 097203.
- [77] Cai A, Hu H, Ingersent K, et al. Dynamical Kondo effect and Kondo destruction in effective models for quantum-critical heavy fermion metals [J]. arXiv:1904.11471.
- [78] Hu H, Cai A, Si Q. Quantum Criticality and Dynamical Kondo Effect in an SU(2) Anderson Lattice Model [J]. arXiv:2004.04679.
- [79] B. A. Jones and Varma, C. M. Study of Two Magnetic Impurities in a Fermi Gas [J]. Phys. Rev. Lett., 1987, **58**(9): 843.
- [80] Jones B A, Varma C M, Wilkins J W. Low-Temperature Properties of the Two-Impurity Kondo Hamiltonian [J]. Phys. Rev. Lett., 1988, **61**(1): 125.
- [81] Jones B A, Varma C M. Critical point in the solution of the two magnetic impurity problem [J]. Phys. Rev. B, 1989, **40**(1): 324.
- [82] Chen W, Yan Y, Ren M, et al. Two-impurity kondo effect in potassium doped single-layer p-sexiphenyl films [J]. arXiv:2109.02408.
- [83] Belghazi M I, Baratin A, Rajeshwar S, et al. Mutual Information Neural Estimation [C]// Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning: volume 80. PMLR, 2018: 531.
- [84] Affleck I, Ludwig A W W. Exact critical theory of the two-impurity Kondo model [J]. Phys. Rev. Lett., 1992, **68**(7): 1046.

- [85] Affleck I, Ludwig A W W, Jones B A. Conformal-field-theory approach to the two-impurity Kondo problem: Comparison with numerical renormalization-group results [J]. *Phys. Rev. B*, 1995, **52**(13): 9528.
- [86] Zhou Y, Kanoda K, Ng T K. Quantum spin liquid states [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2017, **89**(2): 025003.
- [87] Mukherjee A, Patel N D, Dong S, et al. Testing the Monte Carlo-mean field approximation in the one-band Hubbard model [J]. *Phys. Rev. B*, 2014, **90**(20): 205133.
- [88] Pradhan S, Pai G V. Holstein-Hubbard model at half filling: A static auxiliary field study [J]. *Phys. Rev. B*, 2015, **92**(16): 165124.
- [89] Karmakar M, Majumdar P. Population-imbalanced lattice fermions near the BCS-BEC crossover: Thermal physics of the breached pair and Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov phases [J]. *Phys. Rev. A*, 2016, **93**(5): 053609.
- [90] Patel N D, Mukherjee A, Kaushal N, et al. Non-Fermi Liquid Behavior and Continuously Tunable Resistivity Exponents in the Anderson-Hubbard Model at Finite Temperature [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, **119**(8): 086601.
- [91] Jana G, Mukherjee A. Frustration effects at finite temperature in the half filled Hubbard model [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 2020, **32**(36): 365602.
- [92] Karmakar M. Pauli limited d-wave superconductors: quantum breached pair phase and thermal transitions [J]. *J. Phys. Condens. Matter*, 2020, **32**(40): 405604.
- [93] Farkašovský P, Čenčariková H, Mat'As S. Numerical study of magnetization processes in rare-earth tetraborides [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, **82**(5): 054409.
- [94] Ishizuka H, Motome Y. Partial disorder in an Ising-spin Kondo lattice model on a triangular lattice [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **108**(25): 257205.
- [95] Yang W W, Zhang L, Guo X M, et al. Hidden Anderson localization in disorder-free Ising-Kondo lattice [J]. *Chinese Phys. B*, 2020, **29**(10): 107301.
- [96] Maśka M M, Trivedi N. Temperature-driven BCS-BEC crossover and Cooper-paired metallic phase in coupled boson-fermion systems [J]. *Phys. Rev. B*, 2020, **102**(14): 144506.
- [97] Kato Y, Martin I, Batista C D. Stability of the spontaneous quantum hall state in the triangular Kondo-lattice model [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, **105**(26): 266405.
- [98] Kumar S, Majumdar P. A travelling cluster approximation for lattice fermions strongly coupled to classical degrees of freedom [J]. *Eur. Phys. J. B*, 2006, **50**(4): 571.
- [99] Liu J, Shen H, Qi Y, et al. Self-learning Monte Carlo method and cumulative update in fermion systems [J]. 2017, **95**(24): 241104.
- [100] Saremi S, Lee P A, Senthil T. Unifying Kondo coherence and antiferromagnetic ordering in the honeycomb lattice [J]. *Phys. Rev. B*, 2011, **83**(12): 125120.

- [101] Poole B, Ozair S, Van Den Oord A, et al. On Variational Bounds of Mutual Information [C]// Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning: volume 97. PMLR, 2019: 5171.
- [102] Kraskov A, Stögbauer H, Grassberger P. Estimating mutual information [J]. Phys. Rev. E, 2004, **69**(6): 066138.
- [103] Nir A, Sela E, Beck R, et al. Machine-learning iterative calculation of entropy for physical systems [J]. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2020, **117**(48): 30234.
- [104] Donsker M D, Varadhan S R S. Asymptotic evaluation of certain markov process expectations for large time, I [J]. Commun. Pure Appl. Math., 1975, **28**(1): 1.
- [105] Abadi M, Barham P, Chen J, et al. TensorFlow: A System for Large-Scale Machine Learning [C]//12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16). Savannah, GA, 2016: 265.
- [106] Kingma D P, Ba J. Adam: A Method for Stochastic Optimization [J]. arXiv:1412.6980.
- [107] Spinelli A, Gerrits M, Toskovic R, et al. Exploring the phase diagram of the two-impurity Kondo problem [J]. Nat. Commun., 2015, **6**(1): 10046.
- [108] Wei L Y, Yang Y F. Doping-induced perturbation and percolation in the two-dimensional Anderson lattice [J]. Sci. Rep., 2017, **7**(1): 46089.
- [109] Huang E W, Sheppard R, Moritz B, et al. Strange metallicity in the doped Hubbard model [J]. Science, 2019, **366**(6468): 987.
- [110] Ōnuki Y, Komatsubara T. Heavy fermion state in CeCu<sub>6</sub> [J]. J. Magn. Magn. Mater., 1987, **63-64**: 281.
- [111] Zhu J X, Martin I, Bishop A R. Kondo stripes in an Anderson-Heisenberg model of heavy fermion systems [J]. Phys. Rev. Lett., 2008, **100**(23): 236403.
- [112] Pépin C, Norman M R, Burdin S, et al. Modulated spin liquid: A new paradigm for URu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> [J]. Phys. Rev. Lett., 2011, **106**(10): 106601.
- [113] Thomson A, Sachdev S. Fractionalized Fermi liquid on the surface of a topological Kondo insulator [J]. Phys. Rev. B, 2016, **93**(12): 125103.
- [114] Talkner P, Lutz E, Hänggi P. Fluctuation theorems: Work is not an observable [J]. Phys. Rev. E, 2007, **75**(5): 050102(R).
- [115] Talkner P, Hänggi P. The Tasaki-Crooks quantum fluctuation theorem [J]. J. Phys. A: Math. Theor., 2007, **40**(26): F569.
- [116] Crooks G E. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation [J]. Phys. Rev. E, 1999, **60**(3): 2721.
- [117] Tasaki H. Jarzynski Relations for Quantum Systems and Some Applications [J]. arXiv:cond-mat/0009244.

- [118] Jarzynski C. Nonequilibrium equality for free energy differences [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**(14): 2690.
- [119] Jarzynski C. Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurements: A master-equation approach [J]. *Phys. Rev. E*, 1997, **56**(5): 5018.
- [120] Esposito M, Harbola U, Mukamel S. Nonequilibrium fluctuations, fluctuation theorems, and counting statistics in quantum systems [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2009, **81**(4): 1665.
- [121] Campisi M, Hänggi P, Talkner P. Colloquium: Quantum fluctuation relations: Foundations and applications [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, **83**(3): 771.
- [122] Pal A, Huse D A. Many-body localization phase transition [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, **82**(17): 174411.
- [123] Vosk R, Huse D A, Altman E. Theory of the Many-Body Localization Transition in One-Dimensional Systems [J]. *Phys. Rev. X*, 2015, **5**(3): 031032.
- [124] Nandkishore R, Huse D A. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics [J]. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2015, **6**(1): 15.
- [125] Wilczek F. Quantum time crystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**(16): 160401.
- [126] Else D V, Bauer B, Nayak C. Floquet Time Crystals [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2016, **117**(9): 090402.
- [127] Budich J C, Heyl M. Dynamical topological order parameters far from equilibrium [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, **93**(8): 085416.
- [128] Lang J, Frank B, Halimeh J C. Dynamical Quantum Phase Transitions: A Geometric Picture [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **121**(13): 130603.
- [129] Yu W C, Sacramento P D, Li Y C, et al. Correlations and dynamical quantum phase transitions in an interacting topological insulator [J]. *Phys. Rev. B*, 2021, **104**(8): 085104.
- [130] Wall S, Brida D, Clark S R, et al. Quantum interference between charge excitation paths in a solid-state Mott insulator [J]. *Nat. Phys.*, 2011, **7**(2): 114.
- [131] An S, Zhang J N, Um M, et al. Experimental test of the quantum Jarzynski equality with a trapped-ion system [J]. *Nat. Phys.*, 2015, **11**(2): 193.
- [132] Xiong T P, Yan L L, Zhou F, et al. Experimental Verification of a Jarzynski-Related Information-Theoretic Equality by a Single Trapped Ion [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **120**(1): 010601.
- [133] Bloch I, Dalibard J, Zwerger W. Many-body physics with ultracold gases [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2008, **80**(3): 885.
- [134] Polkovnikov A, Sengupta K, Silva A, et al. Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2011, **83**(3): 863.

- [135] Kamenev A, Levchenko A. Keldysh technique and non-linear-model: Basic principles and applications [J]. *Adv. Phys.*, 2009, **58**(3): 197.
- [136] Breuer H P, Petruccione F. *The Theory of Open Quantum Systems* [M]. Oxford: Oxford University Press, 2002.
- [137] Schollwöck U. The density-matrix renormalization group [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2005, **77**(1): 259.
- [138] Aoki H, Tsuji N, Eckstein M, et al. Nonequilibrium dynamical mean-field theory and its applications [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2014, **86**(2): 779.
- [139] Imparato A, Peliti L. Work distribution and path integrals in general mean-field systems [J]. *Europhys. Lett.*, 2005, **70**(6): 740.
- [140] Engel A, Nolte R. Jarzynski equation for a simple quantum system: Comparing two definitions of work [J]. *Europhys. Lett.*, 2007, **79**(1): 10003.
- [141] Pálmai T, Sotiriadis S. Quench echo and work statistics in integrable quantum field theories [J]. *Phys. Rev. E*, 2014, **90**(5): 052102.
- [142] Russomanno A, Sharma S, Dutta A, et al. Asymptotic work statistics of periodically driven Ising chains [J]. *J. Stat. Mech.*, 2016, **2016**(3): P08030.
- [143] Jarzynski C, Quan H T, Rahav S. Quantum-classical correspondence principle for work distributions [J]. *Phys. Rev. X*, 2015, **5**(3): 031038.
- [144] Binder F, Correa L A, Gogolin C, et al. Thermodynamics in the quantum regime: fundamental aspects and new directions: volume 195 [M]. Switzerland: Springer, 2019.
- [145] Sharma S, Dutta A. One- and two-dimensional quantum models: Quenches and the scaling of irreversible entropy [J]. *Phys. Rev. E*, 2015, **92**(2): 022108.
- [146] Nigro D, Rossini D, Vicari E. Scaling properties of work fluctuations after quenches near quantum transitions [J]. *J. Stat. Mech.*, 2019, **2019**(2): 023104.
- [147] Dong J J, Yang Y F. Functional field integral approach to quantum work [J]. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(3): 035124.
- [148] Fusco L, Pigeon S, Apollaro T J, et al. Assessing the nonequilibrium thermodynamics in a quenched quantum many-body system via single projective measurements [J]. *Phys. Rev. X*, 2014, **4**(3): 031029.
- [149] Talkner P, Hänggi P. Aspects of quantum work [J]. *Phys. Rev. E*, 2016, **93**(2): 022131.
- [150] Łobejko M, Łuczka J, Talkner P. Work distributions for random sudden quantum quenches [J]. *Phys. Rev. E*, 2017, **95**(5): 052137.
- [151] Modak R, Rigol M. Work extraction in an isolated quantum lattice system: Grand canonical and generalized Gibbs ensemble predictions [J]. *Phys. Rev. E*, 2017, **95**(6): 062145.

- [152] Wang Q, Quan H T. Understanding quantum work in a quantum many-body system [J]. *Phys. Rev. E*, 2017, **95**(3): 032113.
- [153] Lovas I, Grabarits A, Kormos M, et al. Theory of quantum work in metallic grains [J]. *Phys. Rev. R*, 2020, **2**(2): 023224.
- [154] Funo K, Quan H T. Path Integral Approach to Quantum Thermodynamics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2018, **121**(4): 040602.
- [155] Fei Z, Quan H T. Group-theoretical approach to the calculation of quantum work distribution [J]. *Phys. Rev. Research*, 2019, **1**(3): 033175.
- [156] Fei Z, Quan H T. Nonequilibrium Green's Function's Approach to the Calculation of Work Statistics [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, **124**(24): 240603.
- [157] Grabarits A, Kormos M, Lovas I, et al. Classical Theory of Quantum Work Distribution in Chaotic Fermion Systems [J]. arXiv:2107.10245.
- [158] Silva A. Statistics of the work done on a quantum critical system by quenching a control parameter [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **101**(12): 120603.
- [159] Dorner R, Goold J, Cormick C, et al. Emergent Thermodynamics in a Quenched Quantum Many-Body System [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**(16): 160601.
- [160] Bayocboc F A, Paraan F N. Exact work statistics of quantum quenches in the anisotropic XY model [J]. *Phys. Rev. E*, 2015, **92**(3): 032142.
- [161] Mascarenhas E, Bragança H, Dorner R, et al. Work and quantum phase transitions: Quantum latency [J]. *Phys. Rev. E*, 2014, **89**(6): 062103.
- [162] Dóra B, Bácsi D, Zaránd G. Generalized Gibbs ensemble and work statistics of a quenched Luttinger liquid [J]. *Phys. Rev. B*, 2012, **86**(16): 161109(R).
- [163] Gambassi A, Silva A. Large deviations and universality in quantum quenches [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, **109**(25): 250602.
- [164] Sotiriadis S, Gambassi A, Silva A. Statistics of the work done by splitting a one-dimensional quasicondensate [J]. *Phys. Rev. E*, 2013, **87**(5): 052129.
- [165] Shchadilova Y E, Ribeiro P, Haque M. Quantum quenches and work distributions in ultralow-density systems [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, **112**(7): 070601.
- [166] Smacchia P, Silva A. Work distribution and edge singularities for generic time-dependent protocols in extended systems [J]. *Phys. Rev. E*, 2013, **88**(4): 042109.
- [167] Fei Z, Freitas N, Cavina V, et al. Work Statistics across a Quantum Phase Transition [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2020, **124**(17): 170603.
- [168] Dziarmaga J. Dynamics of a quantum phase transition: Exact solution of the quantum Ising model [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **95**(24): 245701.

- [169] Heyl M, Budich J C. Dynamical topological quantum phase transitions for mixed states [J]. *Phys. Rev. B*, 2017, **96**(18): 180304(R).
- [170] Zhou L, Wang Q H, Wang H, et al. Dynamical quantum phase transitions in non-Hermitian lattices [J]. *Phys. Rev. A*, 2018, **98**(2): 022129.
- [171] Yang K, Zhou L, Ma W, et al. Floquet dynamical quantum phase transitions [J]. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(8): 085308.
- [172] Lang H, Chen Y, Hong Q, et al. Dynamical quantum phase transition for mixed states in open systems [J]. *Phys. Rev. B*, 2018, **94**(13): 134310.
- [173] Jurcevic P, Shen H, Hauke P, et al. Direct Observation of Dynamical Quantum Phase Transitions in an Interacting Many-Body System [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2017, **119**(8): 080501.
- [174] Kamenev A. Field Theory of Nonequilibrium Systems [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [175] Abeling N O, Kehrein S. Quantum quench dynamics in the transverse field Ising model at nonzero temperatures [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, **93**(10): 104302.
- [176] Majumdar S N, Schehr G. Large Deviations [J]. arXiv:1711.07571.
- [177] Suzuki S, Inoue J I, Chakrabarti B K. Quantum Ising phases and transitions in transverse Ising models: volume 862 [M]. Berlin: Springer, 2012.
- [178] Franchini F. An introduction to integrable techniques for one-dimensional quantum systems [M]. Berlin: Springer, 2017.
- [179] Piccitto G, Silva A. Dynamical phase transition in the transverse field Ising chain characterized by the transverse magnetization spectral function [J]. *Phys. Rev. B*, 2019, **100**(13): 134311.
- [180] De Gennes P. Collective motions of hydrogen bonds [J]. *Solid State Commun.*, 1963, **1**(6): 132.
- [181] Pfeuty P. The one-dimensional Ising model with a transverse field [J]. *Ann. Phys.*, 1970, **57**(1): 79.
- [182] Dong J J, Li P, Chen Q H. The a-cycle problem for transverse Ising ring [J]. *J. Stat. Mech.*, 2016, **2016**(11): 113102.
- [183] Dong J J, Li P. The a-cycle problem in XY model with ring frustration [J]. *Mod. Phys. Lett. B*, 2017, **31**(06): 1750061.
- [184] Li P, He Y. Ring frustration and factorizable correlation functions of critical spin rings [J]. *Phys. Rev. E*, 2019, **99**(3): 032135.
- [185] Kou H C, Zheng Z Y, Li P. Impurity-driven transitions in frustrated quantum Ising rings [J]. *Phys. Rev. E*, 2021, **103**(3): 032129.

- [186] Zheng Z Y, Kou H C, Li P. Quaternary Jordan-Wigner mapping and topological extended-kink phase in the interacting Kitaev ring [J]. Phys. Rev. B, 2019, **100**(23): 235127.
- [187] Torre G, Marić V, Franchini F, et al. Effects of defects in the XY chain with frustrated boundary conditions [J]. Phys. Rev. B, 2021, **103**(1): 014429.
- [188] Marić V, Giampaolo S M, Kuić D, et al. The frustration of being odd: How boundary conditions can destroy local order [J]. New J. Phys., 2020, **22**(8): 083024.
- [189] Giampaolo S M, Ramos F B, Franchini F. The frustration of being odd: Universal area law violation in local systems [J]. J. Phys. Commun., 2019, **3**(8): 081001.
- [190] Marić V, Giampaolo S M, Franchini F. Quantum phase transition induced by topological frustration [J]. Commun. Phys., 2020, **3**(1): 220.
- [191] Marić V, Franchini F, Kuić D, et al. Resilience of the topological phases to frustration [J]. Sci. Rep., 2021, **11**(1): 6508.
- [192] Tang M, He Y. Nonlocal behaviors of spin correlations in the Haldane-Shastry model [J]. Physics Letters A, 2020, **384**(1): 126043.
- [193] Bi S, He Y, Li P. Ring-frustrated non-Hermitian XY model [J]. Physics Letters A, 2021, **395**(1): 127208.
- [194] Dong J J, Zheng Z Y, Li P. Rigorous proof for the nonlocal correlation function in the transverse Ising model with ring frustration [J]. Phys. Rev. E, 2018, **97**(1): 012133.
- [195] Su W P, Schrieffer J R, Heeger A J. Solitons in polyacetylene [J]. Phys. Rev. Lett., 1979, **42**(25): 1698.
- [196] Shen S Q. Topological Insulator: Dirac Equation in Condensed Matters [M]. Berlin: Springer, 2012.
- [197] Bernevig B A, Hughes T L. Topological Insulators and Topological Superconductors [M]. New Jersey: Princeton University Press, 2013.
- [198] Asboth J K, Oroszlany L, Palyi A. A Short Course on Topological Insulators: Band-Structure Topology and Edge States in One and Two Dimensions [M]. Berlin: Springer, 2016.
- [199] Li L, Xu Z, Chen S. Topological phases of generalized Su-Schrieffer-Heeger models [J]. Phys. Rev. B, 2014, **89**(8): 085111.
- [200] He Y, Chien C C. Boundary-induced dynamics in one-dimensional topological systems and memory effects of edge modes [J]. Phys. Rev. B, 2016, **94**(2): 024308.
- [201] Wang Y, Miao J J, Jin H K, et al. Characterization of topological phases of dimerized Kitaev chain via edge correlation functions [J]. Phys. Rev. B, 2017, **96**(20): 205428.
- [202] Wang Y. Detecting topological phases via survival probabilities of edge Majorana fermions [J]. Phys. Rev. E, 2018, **98**(4): 042128.

- [203] Altland A, Simons B. Condensed Matter Field Theory [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [204] Gubernatis J, Kawashima N, Werner P. Quantum Monte Carlo Methods: Algorithms for Lattice Models [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2016.
- [205] Yang W W, Zhao J, Luo H G, et al. Exactly solvable Kondo lattice model in the anisotropic limit [J]. Phys. Rev. B, 2019, **100**(4): 045148.



## 致 谢

值此学位论文完成之际，我向曾经给予我学业上指导和帮助的人表示诚挚谢意。

首先，我非常感谢我的博士导师杨义峰研究员。杨老师知识渊博，严谨认真，待人宽厚，尽职尽责，在学习和研究中给予我细心指导和帮助，使我在学术研究中取得了很大进步。我也非常感谢我的硕士导师李鹏教授引领我进入科研的大门。

其次，感谢王江帆、徐远骥、胡丹青、韩儒磊、黄东宸、盛玉韬、曹迎迎、陈佳林、王梦凡、龙卓青、秦琼、武振超、张帅康、张本源、程渊淏、柴德民、王梓豪、张树峰、李宇、刘哲、王倩倩等同学在学习和生活中给予我帮助，陪伴我度过了博士研究生生涯。

最后，我十分感谢我的家人对我的支持和鼓励，他们是我追求学术研究的坚强后盾。



## 作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果

### 基本情况：

董建军，男，汉族，四川省乐山市人，1993年08月出生。

### 教育情况：

2010年09月—2014年06月，在四川大学物理学院获得学士学位。

2014年09月—2017年06月，在四川大学物理学院获得硕士学位。

2017年09月—2021年12月，在中国科学院物理研究所攻读博士学位。

### 联系方式：

dongjianjun@iphy.ac.cn

### 获奖情况：

2018年06月荣获中国科学院大学三好学生。

2019年07月荣获第五届全国统计物理与复杂系统学术会议优秀海报奖。

2019年12月荣获中国科学院物理研究所所长表彰奖。

### 已发表的学术论文：

- [1] **J.-J. Dong**, D. Huang, and Y.-F. Yang, Mutual information, quantum phase transition, and phase coherence in Kondo systems, *Phys. Rev. B* **104**, L081115 (2021).
- [2] **J.-J. Dong** and Y.-F. Yang, Functional field integral approach to quantum work, *Phys. Rev. B* **100**, 035124 (2019).
- [3] **J.-J. Dong**, Z.-Y. Zheng, and P. Li, Rigorous proof for the nonlocal correlation function in the transverse Ising model with ring frustration, *Phys. Rev. E* **97**, 012133 (2018).
- [4] **J.-J. Dong** and P. Li, The a-cycle problem in XY model with ring frustration, *Mod. Phys. Lett. B* **31**, 1750061 (2017).

- [5] **J.-J. Dong**, P. Li, and Q.-H. Chen, The a-cycle problem for transverse Ising ring, *J. Stat. Mech.* 113102 (2016).
- [6] D. Hu, **J.-J. Dong**, and Y.-F. Yang, Hybridization fluctuations in the half-filled periodic Anderson model, *Phys. Rev. B* **100**, 195133 (2019).
- [7] D. Hu, **J.-J. Dong**, L. Huang, L. Wang, and Y.-F. Yang, Effective classical correspondence of the Mott transition, *Phys. Rev. B* **101**, 075111 (2020).
- [8] Y.-P. Liu, Y.-J. Zhang, **J.-J. Dong**, H. Lee, Z.-X. Wei, W.-L. Zhang, C.-Y. Chen, H.-Q. Yuan, Y.-F. Yang, and J. Qi, Hybridization Dynamics in CeCoIn<sub>5</sub> Revealed by Ultrafast Optical Spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 057404 (2020).