周期淬火系统中的量子相变

Á. Sáiz[1,2], J. Khalouf-Rivera[3,2,4], J. M. Arias[1,5], P. Pérez-Fernández[2,5], 和 J. Casado-Pascual[6]

[1]塞维利亚大学物理学院原子、分子与核物理系，邮政信箱 1065，E-4108 塞维利亚，西班牙。[2]塞维利亚大学工程高等技术学院应用物理 III 系，E-41092 塞维利亚，西班牙[3]都柏林圣三一学院物理学院，College Green，爱尔兰都柏林 2 区[4]塞维利亚大学综合科学系及物理、数学与计算高级研究中心，塞维利亚大学

韦尔瓦，21071 韦尔瓦，西班牙[5]格拉纳达大学卡洛斯一世理论与计算物理研究所，Fuentenueva s/n，18071 格拉纳达，西班牙[6]塞维利亚大学理论物理系，邮政信箱 1065，41080 塞维利亚，西班牙

arXiv:2302.00382v3 [quant-ph] 3 Jun 2024

量子相变涵盖了量子系统中发生的各种现象，这些系统具有多种可能的对称性。传统上，人们通过连续改变一个连接两种不同对称性构型的控制参数来研究这些相变。本文提出一种替代方法：使控制参数在两个值之间进行突变，并以时间周期性方式切换。这种方法得到的结果与传统方法的结果惊人地相似，并且在难以调节控制参数的情况下，可能具有实验应用价值。

1 引言

物质可以存在于不同的结构态或相中，这些结构态或相具有不同的性质。相之间的转变以系统性质的快速变化为特征。研究和表征相变与临界现象具有重要的物理意义，原因之一是某些普适行为的出现 [1, 2]。通常，从一个相变为另一个相由控制参数（温度或其他适当变量）决定，而相变的特征是序参量在一个相中为零，在另一个相中非零。序参量发生这种变化的方式使得对相变进行分类成为可能 [1, 2]。

近年来，相变现象已扩展到量子区间，由此产生了所谓的量子相变（QPTs） [3, 4, 5]。为此，人们通常考虑一个能够呈现两种不同对称性的物理系统，$\mathcal{S}_1$ 和$\mathcal{S}_2$, 。这两种对称性分别由两个哈密顿量 H_1 和 H_2表示，它们对应系统不同的结构和性质。为了研究从一种对称性向另一种对称性的转变，一个形式为

$$H = \xi H_2 + (1-\xi)H_1 \tag{1}$$

其中考虑了 ξ，它是取值范围为 $\xi \in [0,1]$ 的无量纲参数，充当控制参数。当 $\xi = 0$ 和 $\xi = 1$ 时，系统分别具有对称性$\mathcal{S}_1$ 和$\mathcal{S}_2$, ；而当 ξ 取中间值时，对称性未明确定义，两种对称相之间存在竞争。人们采用了多种静态和动态量来研究并刻画控制参数 ξ 在 0 到 1 之间变化时发生的相变。具体而言，研究表明，对于给定的中间临界值ξ，基态的某些性质会发生突变，从而产生所谓的基态量子相变（GSQPT） [1]。

[1]传统上，缩写 QPT 用于表示基态量子相变。在本文中，QPT 指一般意义上的量子相变。

J. Casado-Pascual: jcasado@us.es

激发态量子相变（ES- QPTs）也有相关报道，其特征是某些激发能量值处的能级密度出现发散（例如，参见文献 [6] 及其中的参考文献）。显然，这些发散出现在热力学极限下，即粒子数趋于无穷大时。然而，对于粒子数有限的小系统，也可以观察到这些发散的前兆。

近年来，研究人员利用周期驱动哈密顿量和弗洛凯理论分析了量子相变 [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]。然而，大多数研究都集中于一种称为弗洛凯动力学量子相变（FDQPT）的新现象，其特征是某些物理量随时间反复出现非解析行为。需要注意的是，这一现象不同于上文提到的基态量子相变和激发态量子相变；后两者主要利用定态哈密顿量进行研究。一个自然产生的问题是：是否也可以利用周期性哈密顿量和弗洛凯理论分析基态量子相变与激发态量子相变？在本文中，我们证明答案是肯定的，从而为利用弗洛凯工程对基态量子相变和激发态量子相变开展实验研究开辟了新的途径。

本文其余部分的结构如下。在第 2节中，将介绍利用 Floquet 技术研究量子相变的程序。为便于阅读，该程序的数学有效性条件详见附录 A。在第 3节中，我们研究该技术在一个特定物理模型——Lipkin-Meshkov-Glick（LMG）模型 [14, 15, 16]中的应用。所得结果将在第 4节中进行分析。为完整起见，在附录 B中，还将所提出的 Floquet 技术应用于一个简单的二能级模型，该模型描述单个原子与双原子同核分子之间的相互作用。最后，第 5节将总结本研究的结论

2 应用于量子相变的 Floquet 技术描述

考虑一个由周期为 T 的周期性时间依赖哈密顿量所表征的系统，其定义在

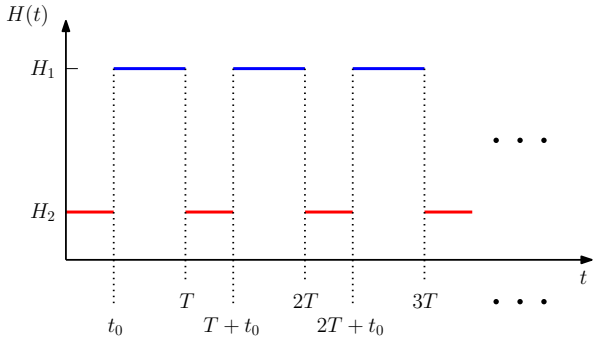

图 1：方程（2）中周期性哈密顿量的示意图。淬火时间 t_0 可以变化，并作为控制参数。

$0 \le t < T$ by

$$H(t) = \begin{cases} H_2 & \text{if } t \in [0, t_0) \\ H_1 & \text{if } t \in [t_0, T), \end{cases} \tag{2}$$

并对所有 t 进行周期性延拓（见图1）。与传统量子相变中一样， H_1 和 H_2 是具有对称性$\mathcal{S}_1$和 $\mathcal{S}_2$, 的时间无关哈密顿量。参数 t_0 （淬火时间）表示每个周期内哈密顿量保持对称性$\mathcal{S}_2$,的时长，并将用作控制参数。显然，当 $t_0 = 0$ 且 $t_0 = T$ 时，哈密顿量与时间无关，分别等于 H_1 和 H_2。

请注意，在本例中，哈密顿量在任意时刻都具有明确的对称性，而对称性之间的周期性跃迁 $\mathcal{S}_1$ 和$\mathcal{S}_2$ 是不连续的。相比之下，在传统量子相变中，从$\mathcal{S}_2$ 到$\mathcal{S}_1$ 的跃迁是连续的，因为它是通过连续改变控制参数 ξ 从0 到1实现的。此外，方程（1）中的哈密顿量只有在参数 ξ取端点0或1时才具有明确的对称性。尽管存在这些重要差异，令人惊讶的是，方程（2）中的周期性哈密顿量表现出与传统量子相变中观察到的非常相似的行为[方程（1）], ，如下文所述。

由于式（2）中的哈密顿量具有周期性，弗洛凯理论 [17] 可用于分析系统的时间演化。根据弗洛凯定理，与哈密顿量（2）对应的薛定谔方程具有一组完备解，形式如下$|\Psi_j(t)\rangle = e^{-i\epsilon_j t/\hbar}|\Phi_j(t)\rangle$，其中 $j \in \{0, \cdots D-1\}$，其中 D 是态空间的维数。态矢量 $|\Phi_j(t)\rangle$ 是 T 关于时间的周期函数

已于 2024-06-01接收，点击标题进行验证。根据知识共享署名 4.0许可发布。

并称为弗洛凯模。量 ϵ_j 称为准能量，可以（并且将）取值于第一布里渊区$[-\pi\hbar/T, \pi\hbar/T)$ 内。此后，我们假设准能量的标记满足 $\epsilon_{j+1} \geq \epsilon_j$。

Floquet 模的计算 $|\Phi_j(t)\rangle$和准能量 ϵ_j 只需要知道时间演化算符 $U(t,0)$ 从$t = 0$到 $t \in [0,T]$。由于方程（2）中的哈密顿量是分段与时间无关的， $U(t,0)$ 可以显式求出，从而得到

$$U(t,0) = \begin{cases} e^{-itH_2/\hbar} & \text{if } t \in [0,t_0) \\ e^{-i(t-t_0)H_1/\hbar} e^{-it_0H_2/\hbar} & \text{if } t \in [t_0,T). \end{cases} \tag{3}$$

计算 $|\Phi_j(t)\rangle$ 和 ϵ_j 的第一步是获得该算符的本征矢和本征值

$$U(T,0) = e^{-i(T-t_0)H_1/\hbar} e^{-it_0H_2/\hbar}. \tag{4}$$

由于该算符是酉算符，因此它具有由本征矢构成的正交归一基。这些本征矢给出了 $t = 0$ 时的 Floquet 模，即态矢 $|\Phi_j(0)\rangle$。如果 λ_j 是与本征矢 $|\Phi_j(0)\rangle$相对应的 $U(T,0)$ 的本征值，则相应的准能量为

$$\epsilon_j = i\hbar \log(\lambda_j)/T, \tag{5}$$

其中，log 表示对数的主值。最后，在任意时刻 t 的 Floquet 模都可以通过对函数进行周期延拓得到

$$|\Phi_j(t)\rangle = e^{it\epsilon_j/\hbar} U(t,0) |\Phi_j(0)\rangle, \tag{6}$$

其中 $U(t,0)$ 由公式（3）给出。

值得一提的是，准能量ϵ_j可以分解为动力学和几何贡献，即 $\epsilon_j = E_j - \hbar\varphi_j/T$，其中

$$\bar{E}_j = \frac{1}{T}\int_0^T dt\, \langle\Phi_j(t)|H(t)|\Phi_j(t)\rangle \tag{7}$$

是平均能量，且

$$\varphi_j = i\int_0^T dt\, \langle\Phi_j(t)|\frac{d}{dt}|\Phi_j(t)\rangle \tag{8}$$

是 Floquet 模的几何相位。由方程（3）、（6）和（7），容易看出平均能量为

$$\bar{E}_j = \frac{t_0}{T}\langle\Phi_j(0)|H_2|\Phi_j(0)\rangle + \frac{T-t_0}{T}\langle\Phi_j(0)|e^{it_0H_2/\hbar}H_1e^{-it_0H_2/\hbar}|\Phi_j(0)\rangle. \tag{9}$$

如下文将看到的，量ϵ_j、 E_j和φ_j 可用于表征本文所述的量子相变和激发态量子相变。为此，周期 T 必须足够小，相较于特征时间 $T_c = 4\hbar/\sqrt{(E_{1,M} - E_{1,m})(E_{2,M} - E_{2,m})}$而言；其中$E_j$和M 、$E_j$和m 分别是 H_j的最大和最小本征值，j =1, 2（见附录 A）。为避免将准能量谱延伸至第一布里渊区以外的其他布里渊区，只需进一步假设$T/T'_c \leq \pi$，其中$T'_c = \hbar/\max(|E_{1,M}|, |E_{1,m}|, |E_{2,M}|, |E_{2,m}|)$是系统的另一个特征时间（见附录 A）。

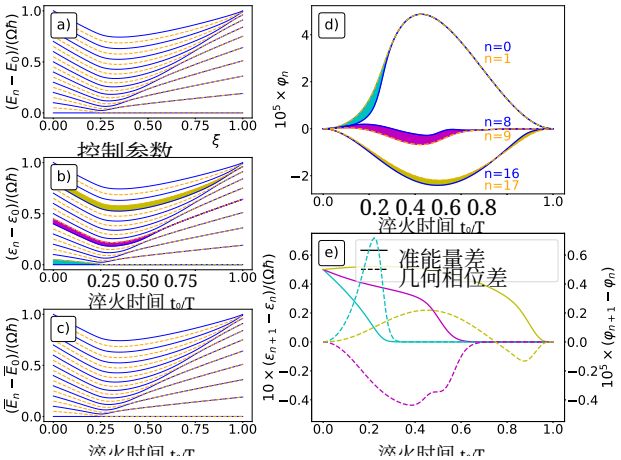

图2：面板 a) 展示了式 (1) 中定态哈密顿量的激发能 $E_n - E_0$随控制参数 ξ的变化，其中 H_1和 H_2由式 (10) 中的 LMG模型给出。蓝色实线对应偶数 n，橙色虚线对应奇数 n。面板 b)、c)、d) 和 e) 对应式 (2) 中的周期性哈密顿量，其中 H_1 和 H_2 由式 (10) 给出，且 $T = 1/\Omega$。面板 b) 和 c) 分别展示了使用式 (5)] 计算的准能量差 $\epsilon_n - \epsilon_0$、 [以及使用式 ( ) 计算的平均能量差 $\bar{E}_n - \bar{E}_0$、[9] 随无量纲淬火时间 t_0/T的变化，线条样式与面板 a) 相同。面板 d) 展示了 Floquet 模 $n = 0$、1、8、9、16 和 17 的几何相位随 t_0/T的变化。面板 e) 展示了差值 $\epsilon_{n+1} - \epsilon_n$（实线，左侧纵轴）和 $\varphi_{n+1} - \varphi_n$（虚线，右侧纵轴）随 t_0/T 的变化，对应 $n = 0$、8 16 和 。这些差值在面板 b) 和 d) 中突出显示。所有面板中 $N = 20$。

3 物理实现

为了实现前文讨论的思想，我们将使用一个简单的二能级模型：

LMG模型 [14, 15, 16]。该模型最初由核物理学领域提出，用于验证多体近似方法，随后被广泛应用于许多不同领域。在相变领域，标准的 LMG 哈密顿量可以理解为具有无限相互作用范围的一维 N 位点自旋1/2 晶格 [18, 19]。哈密顿量可写为式（1），其中

$$H_1 = \frac{\Omega S_z}{2S} \quad \text{and} \quad H_2 = -\frac{\Omega S_x^2}{\hbar S^2}, \qquad (10)$$

其中，Ω 是一个具有频率量纲的常数，并引入了集体自旋算符$S_\beta = \sum_{i=1}^{N} s_{i,\beta}$，对于 $\beta = x, y, z$。哈密顿量中的常数项已省略。在此方案中，$S = N/2$ 是最大集体自旋。关于对称性，LMG 哈密顿量具有 $u(2)$代数结构，并拥有两种动力学对称性： $u(2) \supset u(1)$和 $u(2) \supset so(2)$ [20]。对称性 $u(1)$和 $so(2)$分别在我们的形式体系中扮演 S_1 和 S_2 的角色，并分别由式（10）中的哈密顿量 H_1 和 H_2 实现。每种对称性都与系统的一种不同结构（相）相关联。

为将 Floquet 理论应用于 LMG模型，考虑式（2）中的哈密顿量，其中 H_1 和 H_2 由式（10给出。在这一理论框架下，式（4）中的演化算符 $U(T, 0)$、式（6）中的 Floquet 模、式（8）中 Floquet 模的几何相位，以及式（9）中 Floquet 模的平均能量，均可通过解析表达式求得。唯一需要数值计算的步骤是对演化算符$U(T, 0)$进行对角化。

4 结果

此前已有研究通过改变控制参数 ξ（见方程（1）（参见文献 [6] 及其中的参考文献）研究了 LMG 模型中的基态量子相变和激发态量子相变。图2a）对此进行了展示，其中用实线（蓝色，偶 $E_n - E_0$ ）和虚线（橙色，奇 n）绘出了方程（1）和（10）中时间无关 LMG 哈密顿量的激发能 n随控制参数 ξ连续变化的曲线，其变化范围从 $\xi = 0$ [对称性 $u(1)$] 到 $\xi = 1$ [对称性

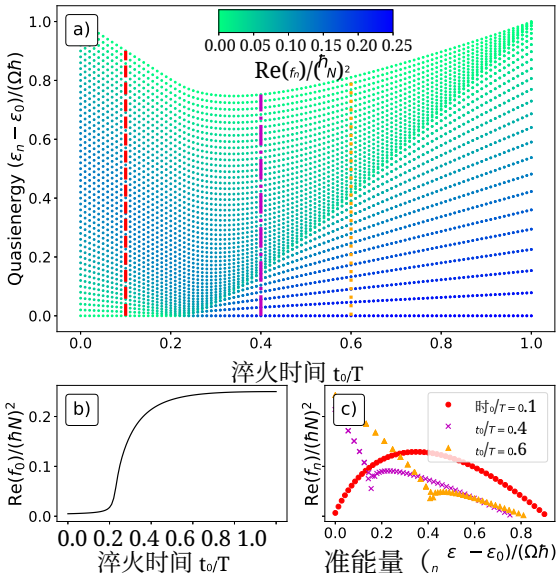

图 3：面板 a) 与图 2b) 相同，但对应于$N = 50$，并使用颜色刻度表示式（11）中双时关联函数实部的数值。面板 b) 展示了第一布里渊区中准能量最低的 Floquet 模所对应的双时关联函数实部随无量纲猝灭时间 t_0/T的变化。面板 c) 展示了固定淬火时间下双时关联函数实部随准能量 $\epsilon_n - \epsilon_0$ 的变化，淬火时间分别为 $t_0/T = 0.1$ （红色圆点）、 $t_0/T = 0.4$ （紫色叉号）和 $t_0/T = 0.6$ （橙色三角形）。这些淬火时间在面板 a) 中分别以红色竖直虚线、紫色点划线和橙色点线标出。在所有面板中， $T = 1/\Omega$。

$so(2)$]。可见有两个相：在一个 [谐振子$u(1)$ 对称性极限]下，激发能非简并且等间距；而在另一个 [$so(2)$ 对称性极限]下，它们则两两简并。对于基态量子相变，在大-N 极限 [21, 22]下，转变发生在 $\xi = 0.2$ 。本文的计算针对 $S = N/2 = 10$，因此有限-N 效应十分重要。此外，在对称性破缺相中，可以清楚地观察到态密度较高的分界线，它标志着激发态量子相变。已有研究使用不同的可观测量来刻画时间无关 LMG 模型 [23]中的基态量子相变和激发态量子相变。

为了确定是否也可以利用 Floquet 理论，并以淬火时间 t_0 作为控制参数来识别基态量子相变和 ES- QPT，现考虑由方程（2）和（10）定义的周期性 LMG 哈密顿量。在这种情况下，考虑的不是能量 E_n，而是 Floquet 准能量 ϵ_n 以及 Floquet 模的平均能量

¯Floquet 模 E_n 分别利用方程（5）和（9）计算得到。对于该模型，很容易看出 $T_c' = 1/\Omega$；若 S 为偶数，则 $T_c = 4/\Omega$（见附录 A）。在我们的计算中，选择周期值为 $T = 1/\Omega$，因此 $T/T_c = 1$ 且 $T/T_c = 1/4$。¯ ¯差值 $\epsilon_n - \epsilon_0$ 和 $E_n - E_0$ 随无量纲淬火时间 t_0/T 变化的结果分别绘于图 2.b）和 2.c）中，所用线型与图 2.a）相同。值得注意的是，图 2.b）和 2.c）与图 2.a）几乎无法区分，这表明，对于周期性系统和定态哈密顿量，得到的关于基态量子相变和激发态量子相变的信息几乎相同。鉴于所选周期性哈密顿量的周期 T 仅为特征时间 T_c 的四分之一，这一点尤为值得注意。尽管图 2.b）和 2.c）中的准能量值与平均能量值彼此非常相似，但并不完全相同。为证实这一点，图 2.d）展示了 Floquet 模 $\varphi_n = (E_n - \epsilon_n)T/\hbar$ 的几何相位 ¯对 t_0/T 的依赖关系。为清晰起见，仅绘出了模 $n = 0$、1、8、9、16 和 17。如图所示，尽管 Floquet 模的几何相位在 $t_0 = 0$ 和 $t_0 = T$ 时为零，但在 t_0 的中间取值处通常不为零。有趣的是，Floquet 模的几何相位会成对简并，其对应的 t_0 值与准能量的简并值大致相同，并沿图 2.b）中的分界线取值。图 2.e）更清楚地展示了这一点，其中绘出了差值 $\epsilon_{n+1} - \epsilon_n$（实线，对应左侧纵轴）和 $\varphi_{n+1} - \varphi_n$（虚线，对应右侧纵轴）随无量纲淬火时间 t_0/T 的变化，所取的 $n = 0$ 为 8 和 16。

从上述结果可以清楚地看出，式（1）中的定态哈密顿量所包含的量子相变信息，在式（2）的周期性哈密顿量中得以保留，并反映在 Floquet 模的准能量、平均能量和几何相位中。由此产生的问题是，能否找到一个基态量子相变的序参量，以及一个良好的激发态量子相变标记。为此，我们在此提出将定义如下的双时刻关联函数的实部作为

$$f_j = \langle \Phi_j(0)|S_x(T)S_x(0)|\Phi_j(0)\rangle\,, \qquad (11)$$

其中，$S_x(t)$对应于算符 S_x ex-在海森堡绘景中表示。

图3再次考察了由式（2）和（10）定义的周期性 LMG 哈密顿量，但此处针对的是 $N = 50$。图3.a)展示了准能量差 $\epsilon_n - \epsilon_0$ 随无量纲淬火时间 t_0/T 的变化，并以颜色标度表示式（11）中双时关联函数的实部。具体而言，对于第一布里渊区中准能量最低的 Floquet 模 [,图3.a)中 $\epsilon_n - \epsilon_0 = 0$ 处的水平线所对应的]„，图3.b)展示了该关联函数实部随 t_0/T 的变化。可以看出，量 Re(f_0) 的表现如同序参量：它在一个相中为零，在另一个相中非零，从而清晰地标示出$t_0/T = 0.2$附近的基态量子相变。图3.c)探讨了利用量 Re(f_n) 探测激发态量子相变的可能性。为此，图3.a)中绘制了三条竖线，标记了不同的淬火时间，分别为 $t_0/T = 0.1$（红色虚线）、0.4（紫色点划线）和0.6（橙色点线）。图3.c)展示了沿这三条竖线，Re(f_n) 随准能量差 $\epsilon_n - \epsilon_0$ 的变化。对于 t_0/T =0.1（红点），Re(f_n) 是$\epsilon_n - \epsilon_0$的平滑函数，这与该淬火时间下系统在任意 $\epsilon_n - \epsilon_0$ [取值时都处于同一相的事实相符，见图3.a)]。相比之下，对于 $t_0/T = 0.4$（紫色叉号）和 $t_0/T = 0.6$（橙色三角形），分别在 $\epsilon_n - \epsilon_0 = 0.18\,\hbar\Omega$和 $\epsilon_n - \epsilon_0 = 0.42\,\hbar\Omega$附近观察到突变，而这些值恰好是图3.a)中发生激发态量子相变的位置。因此，我们得出结论：式（11）中双时关联函数的实部可用作基态量子相变和激发态量子相变的标记，并且利用式（2）的周期性哈密顿量，可以获得关于式（1）中时间无关哈密顿量相图的重要信息。

方程（11）中双时关联函数的定义，隐含地假设系统在初始时刻处于 Floquet 态$t = 0$。鉴于在实际应用中实现此类初始条件可能面临挑战，建议扩展该定义，使其涵盖更广泛的初始条件。除其他益处外，这种扩展还能让我们评估所得序参量对初始条件变化的鲁棒性

。为了扩展该定义，我们首先在时刻$t = 0$将系统初始化为任意态，该态可以是纯态，也可以是混态，并由密度算符$\rho(0)$表征。随后开始驱动，并以mT为时间间隔对可观测量$[S_x(mT)S_x(0) + S_x(0)S_x(mT)]/2$进行频闪测量，其中$m$表示任意正整数。每次测量的期望值由表达式$\mathrm{Tr}[S_x(mT)S_x(0)\rho(0)]$的实部确定。最后，计算足够大的最大周期数$M$内、跨越周期数$m$的测量结果平均值，其形式上可表示为以下极限的实部

$$\bar{f} = \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \mathrm{Tr}\left[S_x(mT)S_x(0)\rho(0)\right]. \quad (12)$$

为了确认$\mathrm{Re}(\bar{f})$作为序参量的有效性并分析潜在的热效应，我们按照上述步骤，通过实际的含时模拟计算了$\mathrm{Re}(\bar{f})$，模拟分别以对应于不同温度的各种热平衡态为初态。具体而言，我们假设系统在初始时刻$t = 0$已达到与初始哈密顿量H_2对应、温度为Θ的热平衡态。因此，初始密度算符为$\rho(0) = e^{-H_2/(k_B\Theta)}/Z(\Theta)$，其中$k_B$表示玻尔兹曼常数，而$Z(\Theta) = \mathrm{Tr}[e^{-H_2/(k_B\Theta)}]$表示温度为$\Theta$时对应的配分函数。图4展示了使用上述步骤得到的不同温度下$\mathrm{Re}(\bar{f})$的结果随t_0/T的变化。N和T的取值与图3中的一致，即$N = 50$和$T = 1/\Omega$；通过选取最大的周期数$M = 10^4$，对公式（12）中的极限进行了数值计算。极限$\Theta \to 0$（红色实线）和$\Theta \to \infty$（橙色实线）分别使用初态$\rho(0) = (|g_2\rangle\langle g_2| + |g_2'\rangle\langle g_2'|)/2$和$\rho(0) = I/(N+1)$计算，其中$\{|g_2\rangle, |g_2'\rangle\}$表示哈密顿量$H_2$的简并基态能级对应的本征矢所构成的正交归一基，而$I$表示单位算符。这些初态分别对应于将正则系综密度算符$e^{-H_2/(k_B\Theta)}/Z(\Theta)$的极限$\Theta \to 0$和$\Theta \to \infty$形式上取为相应值。

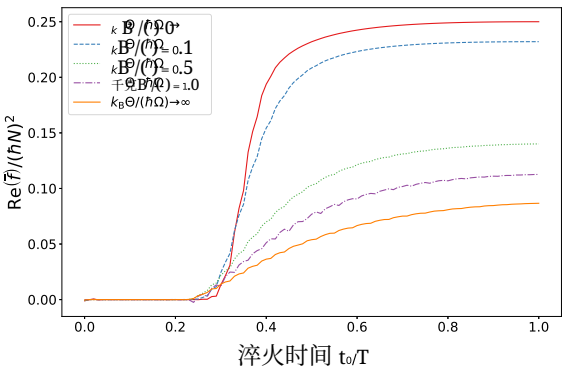

图 4：平均双时关联函数实部（如公式（12）所定义）随无量纲淬火时间t_0/T的变化关系。假设系统初始处于与初始哈密顿量H_2相对应的热平衡状态，绝对温度Θ固定，同时改变无量纲温度$k_B\Theta/(\hbar\Omega)$的取值。参数N和T与图3中的参数保持一致，即$N = 50$和$T = 1/\Omega$。公式（12）中的极限通过数值计算获得，所使用的最大周期数为$M = 10^4$。

温度下，$\mathrm{Re}(\bar{f})$呈现出与图3 b)中观察到的类似行为，即在某个t_0/T值处从接近零转变为非零。$\mathrm{Re}(\bar{f})$的最大值取决于所考虑的温度，并且随着温度升高而降低。发生这一转变时的t_0/T值略微取决于所考虑的温度，但在所有考察的情形下，该值都高于图3 b)中观察到的约0.2。这一增大可能是因为，图3 b)中的初始条件仅涉及第一布里渊区内准能量最低的弗洛凯模，而图4中的曲线则涉及所有弗洛凯模。因此，可以预期，图3 b)所示的序参量更准确地反映了t_0/T发生基态量子相变时的精确值，而图4所示的序参量则因激发态量子相变的影响，使这一数值略微向右偏移。值得注意的是，即使在无限温度下，$\mathrm{Re}(\bar{f})$仍表现为可靠的序参量。因此，所提出的平均序参量表现出抵御周期驱动可能引起的加热效应的鲁棒性。不过，鉴于式（10）中哈密顿量所描述的系统具有可积性，预计系统不会发生无限加热 [24]。

如图4所示，对于所有所考虑的温

5 结论

本文提出利用周期性哈密顿量研究定常系统中的量子相变。该哈密顿量具有两种不同的对称性，并在这两种对称性之间周期性切换。我们以LMG模型为例，在弗洛凯理论框架下通过简单计算（除矩阵对角化外，计算大多可解析完成）表明，只要周期 T 相对于系统的特征时间足够小，定常系统相图的相关信息就能保留在周期性哈密顿量中。具体而言，基态量子相变和激发态量子相变会清晰地体现在弗洛凯模的准能量、平均能量和几何相位上。此外，我们还表明，式（11）中的双时间关联函数实部不仅是基态量子相变的良好标志，也是激发态量子相变的良好标志。因此，这类具有周期淬火的时间依赖哈密顿量可用于研究和表征定常系统的相图与临界点。这一发现为在量子相变领域应用 Floquet 方法开辟了新的前景。尤其是，在难以获取控制参数的情形下，我们的方法可能具有实验应用价值，因为它只需使用该参数的两个特定取值。

致谢

作者谨向 Rodrigo G. Cortiñas 致以诚挚谢意，感谢他进行富有成效的讨论并提供建议。此外，我们感谢由 MCIN/AEI/10.13039/501100011033 和欧盟欧洲区域发展基金资助的项目 PID2022-136228NB-C22。我们还感谢 CEAFMC 和韦尔瓦大学高性能计算机（HPC@UHU）提供的资源；该计算机由欧洲区域发展基金/MINECO 项目 UNHU-15CE-2848 资助。本研究部分得到了安达卢西亚自治区政府（西班牙）经济、知识、企业与大学部通过 FQM-160、FQM-177 研究组及项目 P20-00617、P20-01247 和 US-1380840（欧洲区域发展基金）的支持；此外，还通过项目 PID2019-104002GB-C21、PID2019-104002GB-C22 和 PID2020-114687GB-I00（由 MCIN/AEI/10.13039/50110001103 和“欧洲区域发展基金：建设欧洲的一种方式”资助）获得支持。JKR 还感谢西班牙大学部提供的“玛格丽塔·萨拉斯”奖学金。此外，本研究还获得了西班牙政府数字化转型与公务员事务部通过 QUANTUM ENIA 项目征集——Quantum Spain 项目的部分经费支持，并获得了欧盟通过复苏、转型与韧性计划—下一代欧盟，在 DigitalSpain 2026 议程框架内提供的支持。

A 研究量子相变的 Floquet 技术的适用条件

如第 2 节所示，考虑一个由周期为 T 的周期性哈密顿量表征的系统，该哈密顿量由方程（2）在 $0 \leq t < T$ 上定义，并周期性延拓至所有 t。我们假设哈密顿量 H_1 和 H_2 有界，且$E_{j,\mathrm{M}}$ 和 $E_{j,\mathrm{m}}$ 分别是 H_j 的最大和最小本征值，其中 $j = 1,2$。

要使第 2 节中提出的 Floquet 技术适用，只需方程（1）中的周期性哈密顿量所对应的动力学与以下定态哈密顿量的动力学相似

$$H_{\mathrm{s}} = \left(1 - \frac{t_0}{T}\right) H_1 + \frac{t_0}{T} H_2 \tag{13}$$

对于区间 $[0,T]$内的所有 t_0 值都成立。特别是，对于两个哈密顿量，从 $t = 0$ 到$t = T$ 的时间演化算符应当相似，即

$$e^{-iH_{\mathrm{s}}T/\hbar} \approx e^{-i(T-t_0)H_1/\hbar} e^{-it_0H_2/\hbar} \tag{14}$$

对于所有 $t_0 \in [0,T]$。

通过考虑 Baker-Campbell-Hausdorff 公式 [25]

$$\log\left[e^{-i(T-t_0)H_1/\hbar} e^{-it_0H_2/\hbar}\right] = -\frac{iH_{\mathrm{s}}T}{\hbar} + \Delta(t_0) + \cdots, \tag{15}$$

with

$$\Delta(t_0) = -\frac{(T-t_0)t_0}{2\hbar^2}[H_1, H_2], \tag{16}$$

可以得出结论，要使两种动力学相似，一个可能的条件是$\|\Delta(t_0)\|$对于所有 $t_0 \in [0,T]$都足够小，其中 $\|\cdot\|$表示某种矩阵范数。这里，我们将使用谱范数 $\|\cdot\|_2$(参见例如文献 [26])，对于某个算符 A，其定义为 $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\mathrm{M}}(A^\dagger A)}$，其中 $\lambda_{\mathrm{M}}(A^\dagger A)$ 是 $A^\dagger A$ 的最大本征值。

应当注意，由于任何算符都与一个正比于恒等算符 I 的算符对易，因此，式（16）中的哈密顿量 H_1 和 H_2可以分别替换为 $H_1(\alpha_1) = H_1 + \alpha_1 I$ 和$H_2(\alpha_2) = H_2 + \alpha_2 I$，而不改变 $\Delta(t_0)$ 的值，其中 α_1 和 α_2 是两个任意常数。这一改变也不会影响式（15）中 Baker-Campbell-Hausdorff 公式的后续项，因为这些项也可以表示为算符 H_1 和 H_2 [25] 的嵌套对易子。正如我们稍后将看到的，α_1 和 α_2 的取值将经过选择，使得 $\|\Delta(t_0)\|_2$ 的上界尽可能低。

考虑到谱范数具有次可加性，即 $\|A+B\|_2 \le \|A\|_2 + \|B\|_2$，以及次乘性，即 $\|AB\|_2 \le \|A\|_2\|B\|_2$，并且对于所有 $t_0 \in [0,T]$，都有 $(T-t_0)t_0 \le T^2/4$，不难看出

$$\|\Delta(t_0)\|_2 \le \frac{T^2\|H_1(\alpha_1)\|_2\|H_2(\alpha_2)\|_2}{4\hbar^2}. \tag{17}$$

根据谱范数的定义，可得$\|H_j(\alpha_j)\|_2 = \max(|E_{j,\mathrm{M}} - \alpha_j|, |E_{j,\mathrm{m}} - \alpha_j|)$，对于 $j = 1, 2$。因此，$\|H_j(\alpha_j)\|_2$ 的最小值在 $\alpha_j = (E_{j,\mathrm{M}} + E_{j,\mathrm{m}})/2$时取得，且等于 $(E_{j,\mathrm{M}} - E_{j,\mathrm{m}})/2$。将这些值代入式（17），可得

$$\|\Delta(t_0)\|_2 \le \left(\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}\right)^2, \tag{18}$$

其中，特征时间

$$T_{\mathrm{c}} = \frac{4\hbar}{\sqrt{(E_{1,\mathrm{M}} - E_{1,\mathrm{m}})(E_{2,\mathrm{M}} - E_{2,\mathrm{m}})}} \tag{19}$$

已被引入。根据上述所有内容，第二节中提出的 Floquet 技术适用于研究量子相变的条件是，周期 T 相较于方程（T_{c} 19）中的特征时间 T_{c} 足够小。

需要注意的是，前述条件并不能保证 H_{s} 的所有特征值都必然位于第一布里渊区内。事实上，很容易看出，只需在哈密顿量 $H(t)$ 中添加一个常数项，就始终可以在不改变系统动力学的情况下，确保这些特征值没有一个位于该区间内。通过要求对 t_0 的所有取值，$\|H_{\mathrm{s}}\|_2 \le \pi\hbar/T$，可以得到使 H_{s} 的所有特征值都位于第一布里渊区内的一个充分条件。由于 $\|H_{\mathrm{s}}\|_2 \le \max(\|H_1\|_2, \|H_2\|_2) = \max(|E_{1,\mathrm{M}}|, |E_{1,\mathrm{m}}|, |E_{2,\mathrm{M}}|, |E_{2,\mathrm{m}}|)$，另一个充分条件为 $T/T_{\mathrm{c}} \le \pi$，其中的特征时间

$$T_{\mathrm{c}}' = \frac{\hbar}{\max(|E_{1,\mathrm{M}}|, |E_{1,\mathrm{m}}|, |E_{2,\mathrm{M}}|, |E_{2,\mathrm{m}}|)}. \tag{20}$$

如果周期 T 相较于式 T_{c} （19）中的特征时间足够短，但 H_{s} 的某个本征值位于第一布里渊区之外，则有必要将式（2）中时间周期性哈密顿量对应的准能量延拓至适当的布里渊区，以获得良好的一致性。

对于第3节和第4节所研究的LMG模型，$H_1 = \Omega S_z/(2S)$且 $H_2 = -\Omega S_x^2/(\hbar S^2)$，其中 Ω 是频率量纲的常数。因此，假设 S 为偶数，可得 $E_{1,\mathrm{M}} - E_{1,\mathrm{m}} = E_{2,\mathrm{M}} - E_{2,\mathrm{m}} = \hbar\Omega$，进而有 $T_{\mathrm{c}} = 4/\Omega$。值得注意的是，尽管所选周期 T 仅为时间 T_{c}的四分之一，第4节给出的结果仍出奇地准确。此外，由于$T_{\mathrm{c}}' = 1/\Omega$，所有 H_{s} 的本征值均位于第一布里渊区内的充分条件是 $\Omega T \le \pi$；第4节所用的周期 $T = 1/\Omega$ 满足这一条件。

为说明上述内容，我们提出一种方法，用于量化我们的计算结果相对于静态模型的偏差。首先，我们计算不同周期 T 下，Floquet 模的准能量和平均能量随淬火时间 t_0的变化。随后，我们将所得结果与相同 T 和 t_0取值下，式（13）中静态哈密顿量给出的结果进行比较。具体而言，对于所考虑的每个 T取值，我们计算所有态 n 的差值 $e_n(t_0) - E_n(t_0)$，并考察其随淬火时间 t_0的变化，其中 e_n 表示周期性哈密顿量对应的准能量或平均能量，该哈密顿量见

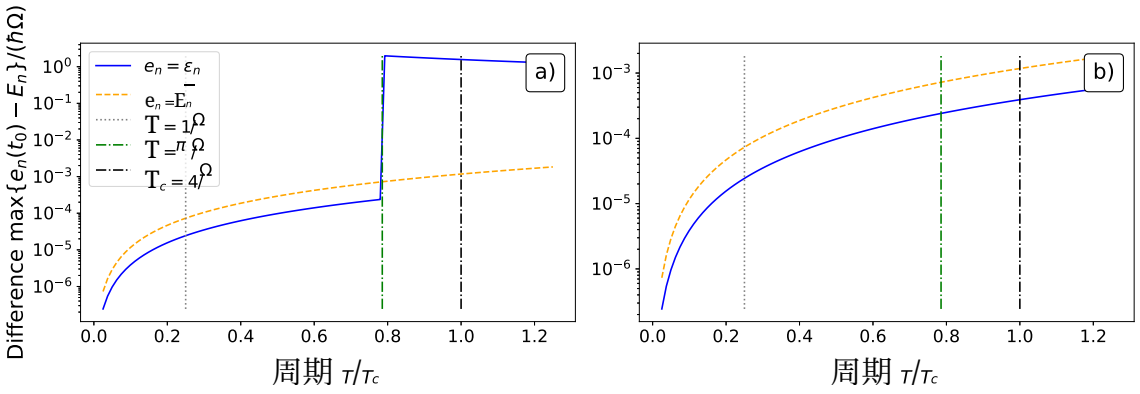

图5：LMG模型中，周期性哈密顿量 $H(t)$ [式（2）] 与静态哈密顿量 H_s [式（13）] 所得结果之间的最大偏差随无量纲周期 T/T_c 的变化。通过比较 $H(t)$的准能量与 H_s 的相应本征值所得的最大偏差以蓝色实线表示；通过比较 $H(t)$的平均值（而非准能量）所得的最大偏差则以橙色虚线表示。图 a) 与图 b) 的区别在于：图 a) 中的准能量被限制在第一布里渊区内，而图 b) 中则在必要时将其扩展至其他布里渊区。竖线表示以下数值：$T = 1/\Omega = T_c/4$ （灰色点线），即第4节中使用的周期值；$T = \pi/\Omega = \pi T_c/4$ （绿色虚线），即部分 H_s 的本征值开始离开第一布里渊区时对应的数值；以及 $T = 4/\Omega$（黑色点划线），即特征时间 T_c对应的数值。

式（2），而 $E_n(t_0)$ 表示式（13）中静态哈密顿量的本征值。我们选取最大值

$$D(T) = \max_{\{n,t_0\}} \left[|e_n(t_0) - E_n(t_0)| \right], \qquad (21)$$

这对应于相对于静态 LMG模型的最大偏差，我们将该值绘制为无量纲周期的函数T/T_c （图5）。图5 两个面板中的蓝色实线表示准能量的最大偏差，橙色虚线则表示平均能量。值得注意的是，对于 $T \geq \pi/\Omega = \pi T_c/4$，静态哈密顿量 H_s 存在一些不属于第一布里渊区的本征值。因此，如果将准能量限制在第一布里渊区内，便会在 $T/T_c = \pi/4$处出现不连续性（绿色竖直虚线），如图5a）所示。这种不连续性是由对准能量施加的限制所导致的。事实上，如果将相应的准能量扩展到适当的布里渊区，不连续性便会消失，如图5b）所示。另外两条竖直线分别对应于第 $T = 1/\Omega$ 节中使用的周期4 （灰色点线）和特征时间 T_c （黑色点划线）。如图5所示，相较于平均能量，准能量更接近静态模型的计算结果，但两者的所选周期 $T = 1/\Omega$ 下两种量的最大偏差约为 10^{-5}–10^{-4}。

B 原子–双原子分子共存模型

本文提出了一种新思路：无论从时间无关哈密顿量还是时间依赖淬火哈密顿量中，都可以得到关于相图的相同信息。这一概念在第 3 节和第 4 节中以 LMG模型为例进行了说明。不过，为强调这一概念并不局限于 LMG模型，本文还提供了一个额外示例，涉及一个简单的二能级模型，用于描述单个原子与双原子同核分子之间的相互作用。图 6展示了该模型的示意图。

为了用玻色子公式描述该模型，我们引入两类玻色子： a代表单个原子， b代表双原子分子。每个单个原子的能量为 $\hbar\omega_0/2$，而双原子分子的能量为 $\hbar\omega$。这些粒子之间存在相互作用，并考虑了两种极限情形

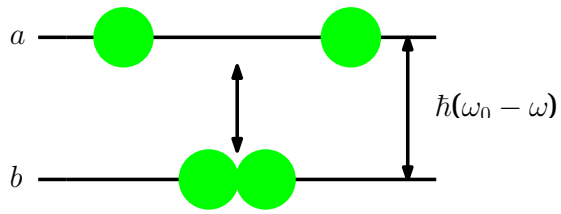

图6：原子-双原子分子模型的示意图。在此模型中，双原子分子（b）占据较低能级，而单个原子（a）位于较高能级。能量差记为$\hbar(\omega_0-\omega)$，对应于将分子解离为其两个组成原子所需的能量。此图改编自 [27]。

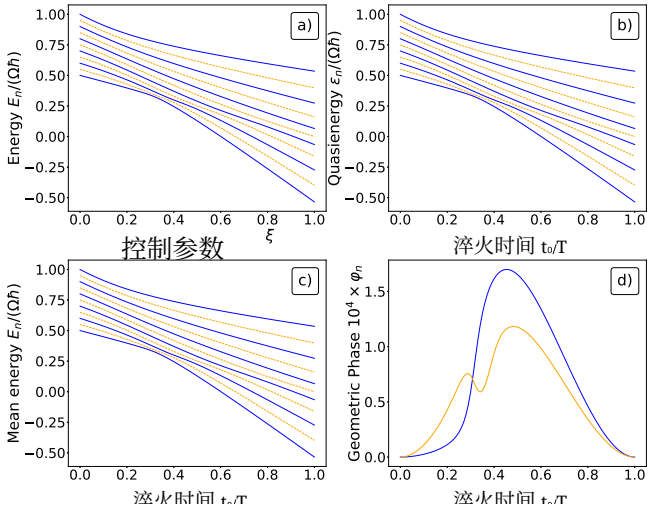

图 7：原子-双原子分子模型的能量关联图 [方程（22）和（23）]。图 a) 显示了方程（1）中定态哈密顿量的关联能量图随控制参数 ξ的变化。图 b) 显示了 Floquet 时间依赖形式下准能量的关联能量图。图 c) 展示了 Floquet平均能量的关联能量图。最后，图 d) 显示了基态和第一激发态的 Floquet几何相位。所有计算均在 $M=20$、 $\omega_0=2\Omega$和 $\omega=\Omega$条件下进行。

在参考文献 [27]中，哈密顿量为

$$H_1=\frac{\hbar}{2M}\left(\omega_0 n_a+2\omega n_b\right), \tag{22}$$

其中， $n_a=a^\dagger a$ 是类型为 a 的玻色子（原子）的粒子数算符， $n_b=b^\dagger b$ 是类型为 b 的玻色子（双原子分子）的粒子数算符，并且

$$H_2=\frac{\hbar\Omega}{M^{3/2}}\left(b^\dagger aa+ba^\dagger a^\dagger\right), \tag{23}$$

其中， $M=n_a+2n_b$ 表示原子的总数，该数目守恒；Ω 是耦合强度。

利用式 (1) 中的哈密顿量，可以轻松得到该模型的定态能量关联图。图 7 的 a) 面板展示了式 (1) 中定态哈密顿量的能量关联图，该图以连续控制参数 ξ 为函数。遵循第 2 节提出的思路，也可以利用式 (2) 中的含时哈密顿量来研究同一问题。图 7 的 b) 和 c) 面板分别展示了 Floquet 准能量和平均能量随淬火时间 t_0变化的结果，周期为 $T=1/\Omega$。在此情况下， $T_c'=1/\Omega$，且式 (19) 中的阈值为 $T_c\approx5.4695$ Ω；对于我们选取的 T，满足两个条件T/T'c $\leq\pi$和 T/T_c足够小。尽管采用了不同的理论框架，a) 面板（定态）与 b)、c) 面板（含时）之间的相似性显而易见，这一点也与图 2 中 LMG模型的情况相同。为全面展示结果，d) 面板给出了基态和第一激发态的 Floquet几何相位。

为了验证这些思路在物理学不同分支中的适用性，除了第3 节和第 4 节中介绍的模型以及本附录前文讨论的模型外，我们还对以下其他模型进行了计算：

- 扩展的 Lipkin模型（见参考文献 [28]），其基态中存在一级量子相变。该模型的相图与相互作用玻色子模型的相图相似，而后者在核物理学中颇受关注。

- 振子模型的二维极限（参见文献 [29]），与分子弯曲光谱的研究相关。

- 塔维斯-康明斯模型（参见文献 [30]），该模型描述辐射与物质之间的相互作用，在量子光学领域颇受关注。

对于所有这些情形，所得结果进一步支持了本文报告的结论。

参考文献

[1] H.E. Stanley. “相变与临界现象导论”。国际物理学专著丛书。牛津大学出版社。(1987)。[2]H. Nishimori and G. Ortiz. “相变与临界现象要义”。牛津大学出版社。(2010)。[3] S. Sachdev. “量子相变”。剑桥大学出版社。(2011)。[4]M. Vojta. “量子相变”。Rep. Prog. Phys. 66, 2069 (2003)。[5]L. Carr, 编者。“理解量子相变”。CRC出版社。(2010)。[6]P. Cejnar, P. Stránský, M. Macek, and M. Kloc. “激发态量子相变”。J. Phys. A: Math. Theor. 54, 133001 (2021)。[7]V. M. Bastidas, P. Pérez-Fernández, M. Vogl, and T. Brandes. “踢顶模型中的量子临界性与动力学不稳定性”。Phys. Rev. Lett. 112, 140408 (2014)。[8]V. M. Bastidas, G. Engelhardt, P. Pérez-Fernández, M. Vogl, and T. Brandes. “驱动多体系统中的临界准能量态”。Phys. Rev. A 90, 063628 (2014)。[9]M. Rodriguez-Vega, M. Vogl, and G. A. Fiete. “低频与莫尔-弗洛凯工程：综述”。Annals of Physics 435, 168434 (2021)。[10]L. Zhou and Q. Du. “周期淬火系统中的弗洛凯动力学量子相变”。J. Phys.: Condens. Mat- ter 33, 345403 (2021)。[11] A. Deger, S. Roy, and A. Lazarides. “通过动力学约束遏制经典多体混沌”。Phys. Rev. Lett. 129, 160601 (2022)。[12] S. K. Zhao, Z.-Y. Ge, Z. Xiang, G. M. Xue, H. S. Yan, Z. T. Wang, Z. Wang, H. K. Xu, F. F. Su, Z. H. Yang, H. Zhang, Y.-R. Zhang, X.-Y. Guo, K. Xu, Y. Tian, H. F. Yu, D. N. Zheng, H. Fan, and S. P. Zhao. “通过超导电路中的弗洛凯工程探测算符扩展”。Physical Review Letters 129, 160602 (2022).[13] M. Jangjan, L. E. F. Foa Torres, and M. V. Hosseini. “周期淬火二聚体中的弗洛凯拓扑相变”。Physical Review B 106, 224306 (2022).[14]H. J. Lipkin, N. Meshkov, and A. J. Glick. “可解模型中多体近似方法的有效性：(I) 精确解与微扰理论”。Nucl. Phys. 62, 188 (1965).[15]N. Meshkov, A. J. Glick, and H. J. Lipkin. “可解模型中多体近似方法的有效性：(II) 线性化过程”。Nucl. Phys. 62, 199 (1965).[16] A. J. Glick, H. J. Lipkin, and N. Meshkov. “可解模型中多体近似方法的有效性：(III) 图求和”。Nucl. Phys. 62, 211 (1965).[17] M. Grifoni and P. Hänggi. “驱动量子隧穿”。Phys. Rep. 304, 229 (1998).[18] P. Richerme, Z.-X. Gong, A. Lee, C. Senko, J. Smith, M. Foss-Feig, S. Michalakis, A.V. Gorshkov, and C. Monroe. “长程相互作用量子系统中关联的非局域传播”。Nature 511, 198 (2014).[19]P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt, and C. F. Roos. “量子多体系统中的准粒子工程与纠缠传播”。Nature 511, 202 (2014).[20]A. Frank and P. Van Isacker. “分子与核结构物理学中的代数方法”。John Wiley and Sons, 纽约。(1994).[21] S. Dusuel and J. Vidal. “Lipkin-Meshkov-Glick模型的有限尺寸标度指数”。Phys. Rev. Lett. 93, 237204 (2004).[22] E. Romera, M. Calixto, and O. Castaños. “Lipkin–Meshkov–Glick模型中一阶、二阶和三阶量子相变的相空间分析”。Phys. Scr. 89, 095103 (2014).[23] P. Ribeiro, J. Vidal, and R. Mosseri. “Lipkin-Meshkov-Glick模型的精确谱

在热力学极限下及有限尺寸修正”。 Physical Review E 78, 021106 (2008).[24] Luca D’Alessio and Anatoli Polkovnikov. “周期驱动系统中的多体能量局域化转变”。 Annals of Physics 333, 19 (2013).[25]B. J. Hall. “李群、李代数与表示”。Springer New York。(2015).[26] R. A. Horn and C. R. Johnson. “矩阵分析”。剑桥大学出版社。(1985).[27] P. Pérez-Fernández, P. Cejnar, J. M. Arias, J. Dukelsky, J. E. García-Ramos, and A. Re-laño. “受激发态相变影响的量子猝灭”。 Physical Review A 83, 033802 (2011).[28]J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos. “用于研究 Casten 三角形中相互作用玻色子模型相图的标量双能级玻色子模型”。 Phys. Rev. C 73, 054305 (2006).[29]F. Pérez-Bernal and F. Iachello. “二维系统的代数方法：形状相变、单值化与热力学量”。 Phys. Rev. A 77, 032115 (2008).[30]M. Tavis and F. W. Cummings. “ N-分子—辐射场哈密顿量的精确解”。Phys. Rev. 170, 379–384 (1968).