arXiv:2302.01795v2 [cond-mat.stat-mech] 6 Feb 2024

有限温度下量子保真度中显现的量子相变特征

Protyush Nandi*Department of Physics, University of Calcutta, 92 Acharya Prafulla Chandra Road, Kolkata 700009, India

Sirshendu Bhattacharyya†Department of Physics, Raja Rammohun Roy Mahavidyalaya, Radhanagar, Hooghly 712406, India

Subinay Dasgupta‡Department of Physics, Harish-Chandra Research Institute, Prayagraj 211019, India

量子相变的特征通常会在有限温度下消失。已观察到的少数能够通过非解析行为体现这一特征的物理量，也仅适用于低温。为寻找一种适用于高温的动态物理量，我们近期基于量子保真度构造了一个函数，它有望在低温范围之外的量子临界点处呈现非解析特征。本文进一步阐述了我们先前的工作，并展示了相应速率函数的行为，以及该函数在不同维度下多个多体哈密顿量中的非解析性稳健性。我们还表明，我们的速率函数在零温下会退化为用于展示动力学量子相变（DQPT）的速率函数。进一步观察发现，与动力学量子相变不同，速率函数的长时间极限也能够可靠地检测平衡量子相变。

I. 引言

量子多体系统达到非零温度时，会呈现出有趣的动力学特征。在低温区域，量子涨落和热涨落都会在量子临界区域内发挥作用。然而，随着温度升高，量子效应会逐渐减弱。因此，由量子涨落驱动的现象，例如量子临界性，通常仅限于低温下探测 [1–7]。另一方面，这类探测也带来了新的挑战：如何在有限温度下追踪量子临界现象的印记 [8]。

量子保真度一直被视为探测量子相变（QPT）的有力工具。保真度定义为淬火前后哈密顿量本征态之间重叠程度的度量，理想情况下可从 1 变化到 0。若淬火跨越量子临界点，由于两个相的基态在结构上存在差异，保真度会接近零，呈现明显的骤降 [9–14]。有限温度下的不同形式的保真度也已得到研究[15–22] ，其中一些形式能够通过其对数在低温下表现出的非解析性来探测量子临界点 [15, 16]。

由于在零温之外无法观测到量子相变，因此人们进行了大量研究，试图在不同响应函数中寻找其踪迹。量子相干性一直是重要的候选量 [23]。据报道，在低温下，吸收能量能够探测量子临界区域 [24]。另一项相关研究表明，在低温下，局域序参量的无穷时期望值在临界点处呈现非解析行为[25]。然而，随着温度升高，这种行为会消失。近期研究发现，在有限温度下研究的洛施密特振幅速率函数的一种形式能够探测量子相变的存在 [26]。跨越量子临界点进行量子淬火或施加脉冲后，功分布函数或磁化强度随时间的变化也呈现出量子相变的特征 [27–32]。另一种量——非时序关联（OTOC）——被发现能够通过其时间平均形式，在一维ANNNI模型的无限温度下探测量子临界点 [33]。应用于一维XXZ模型的量子隐形传态协议，也能够在有限温度下揭示量子临界点 [34, 35]。

上述发现促使我们寻找一种能够在一维系统中体现量子相变特征、且适用于可观温度范围的物理量。在此前的一项研究中，我们定义了一种保真度形式，并发现即使在高温下，其速率函数在量子临界点（QCP）处仍呈现非解析特征 [36]。在零温下，保真度退化为洛施密特回波，后者被用于定义动力学量子相变 [27, 37–48]。本文中，我们拓展了此前的工作，并全面扩展研究了探测器在一维、二维和三维系统中的响应。我们将研究范围限定于高温下的动力学特征。

在三维中，拓扑外尔半金属近来作为一种具有独特电子

* protyush18@gmail.com
† sirs.bh@gmail.com
‡ subinaydasgupta@hri.res.in

结构的新型材料崭露头角。当费米能接近价带与导带的交叉点时，其中的电子有效地表现为相对论性外尔费米子。与拓扑绝缘体或拓扑狄拉克半金属不同，外尔半金属打破了时间反演对称性，从而引发拓扑相变。在零温下，外尔半金属会发生有隙到无隙相变。拓扑节线半金属中也会发生类似的相变。两者的唯一区别在于：外尔半金属的哈密顿量在费米子动量空间中包含彼此孤立的无隙点，而节线半金属则形成无隙线。我们通过数值计算证明，在这两种情况下，即使在有限温度下，上文提到的速率函数也会恰好在临界点处表现出非解析性。

我们还将我们的方法应用于量子自旋霍尔绝缘体 Bi_4Br_4，使用 $k\cdot p$ 为该材料提出的哈密顿量 [49, 50]，并发现我们的（数值计算得到的）速率函数能够在低温和高温下正确预测该材料量子相变的位置。

本文的组织结构如下。在第二节II 中，我们给出保真度函数形式的定义以及速率函数，并推导一般 d维系统的表达式。我们在第三节III 研究一维 XY 模型的速率函数，并在第四节IV研究一维 Su-Schrieffer–Heeger（SSH）模型。第五节V 给出了二维蜂窝晶格上的 Kitaev 模型的相应结果。三维系统，即 Weyl 半金属、拓扑节线半金属以及材料 Bi_4Br_4 的结果见第六节VI 。在第七节VII中，我们讨论零温下探测器的行为。随后在第八节VIII给出总结性评论。

II. 理论

考虑一个哈密顿量为 $\mathcal{H}$ 的系统，它依赖于一个参数；该参数将在时间 $t=0$ 从 p_0 淬火至 p，因此哈密顿量将从 $\mathcal{H}_0=\mathcal{H}(p_0)$ 淬火至 $\mathcal{H}'=\mathcal{H}(p)$。我们假设系统初始处于逆温度为 β 的热平衡态。现在将量子保真度定义为

$$\mathcal{F}_t \equiv \frac{\mathrm{Tr}[\rho_t\cdot\rho_0]}{\mathrm{Tr}\left[\rho_t\right]\,\mathrm{Tr}\left[\rho_0\right]} \tag{1}$$

其中，ρ_0 是时刻 $t=0$ 的密度矩阵，而 ρ_t 是系统演化时间 t 后的密度矩阵。

$$\begin{aligned}\rho_0 &= \exp\left(-\beta\mathcal{H}_0\right)\\ \rho_t &= \exp\left(-i\mathcal{H}'t\right)\exp\left(-\beta\mathcal{H}_0\right)\exp\left(i\mathcal{H}'t\right)\end{aligned} \tag{2}$$

初态与时间演化态之间的重叠概率，即 $|\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2$，被称为洛施密特回波。当哈密顿量跨越量子临界点 [51] 发生淬火时，洛施密特回波的对数会随时间呈现非解析的折点。我们的保真度表达式在零温下会化为这一洛施密特回波。我们可以定义一个称为速率函数的可测量物理量：

$$r(t,\beta,p_0,p)\equiv-\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\log\mathcal{F}_t \tag{3}$$

其中，N 为系统尺寸。我们关注的量是该速率函数的长时间平均值，定义为

$$r_a(\beta,p_0,p)\equiv\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{\tau}\int_0^\tau r(t,\beta,p_0,p)\,dt \tag{4}$$

这是我们用来探测有限温度下是否存在量子临界点的指标。我们将考察该量在零温和非零温下的行为是否体现出量子临界点的特征。为了研究这一速率函数，我们考虑一类系统，其通用哈密顿量可表示为波矢空间 $\vec{q}$ 中一系列彼此对易的 2×2 哈密顿量之和

$$\mathcal{H}=\sum_{\vec{q}}\mathcal{H}_{\vec{q}} \tag{5}$$

并将 $\mathcal{H}_{\vec{q}}$ 表示为

$$\mathcal{H}_{\vec{q}}=a_{\vec{q}}\sigma_1+b_{\vec{q}}\sigma_2+c_{\vec{q}}\sigma_3=\lambda_{\vec{q}}(\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma}) \tag{6}$$

这里，σ_i 是泡利自旋矩阵，$\lambda_{\vec{q}}=\sqrt{a_{\vec{q}}^2+b_{\vec{q}}^2+c_{\vec{q}}^2}$，$\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}=(a_{\vec{q}}/\lambda_{\vec{q}},\ b_{\vec{q}}/\lambda_{\vec{q}},\ c_{\vec{q}}/\lambda_{\vec{q}})$，其中 $\vec{q}$ 是 d维波矢。量子淬火 $p_0\to p$后，哈密顿量变为

$$\mathcal{H}'_{\vec{q}}=\mathcal{H}_{\vec{q}}(p)=\lambda'_{\vec{q}}(\mathcal{V}'_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma})$$

这里，$\lambda'_{\vec{q}}=\sqrt{a'^2_{\vec{q}}+b'^2_{\vec{q}}+c'^2_{\vec{q}}}$，$\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}}=(a'_{\vec{q}}/\lambda'_{\vec{q}},\ b'_{\vec{q}}/\lambda'_{\vec{q}},\ c'_{\vec{q}}/\lambda'_{\vec{q}})$，带撇号的量是淬火后数值。我们可以利用以下性质计算 ρ_0 和 ρ_t 中的指数

$$\mathcal{H}_{\vec{q}}^2=\lambda_{\vec{q}}^2\mathbb{1}\quad\text{and}\quad\mathcal{H}'^2_{\vec{q}}=\lambda'^2_{\vec{q}}\mathbb{1}$$

$(\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma})^2=1$ 并由此得到式 [1] 中的保真度：

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_t(t,\beta,p_0,p)=\frac{1}{2}\Big(1+\tanh^2(\beta\lambda_{\vec{q}})[1-\\ 2\sin^2(\lambda'_{\vec{q}}t)\{1-(\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}}.\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}})^2\}]\Big)\end{aligned} \tag{7}$$

因此，一般哈密顿量（3）5）的速率函数可写为

$$\begin{aligned}r(t,\beta,p_0,p)=\log2-\frac{1}{V}\int_{\vec{q}}d\vec{q}\,\log\left[1+\right.\\ \left.\tanh^2(\beta\lambda_{\vec{q}})\left\{1-2\sin^2(\lambda'_{\vec{q}}t)\,\mathcal{L}_{\vec{q}}\right\}\right]\end{aligned} \tag{8}$$

在 d 维空间中，d 维第一布里渊区的体积写作 $V=\int_{\vec{q}}d\vec{q}$，$\mathcal{L}_{\vec{q}}=1-(\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}\cdot$

$\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}})^2 = \sin^2(\phi_{\vec{q}})$，$\phi_{\vec{q}}$ 是 $\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}$ 与 $\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}}$ 之间的夹角。利用标准结果，我们可以根据方程（4）计算速率函数的长时间平均值 [52]。

$$r_a(\beta, p_0, p) = 3\log 2 - \frac{1}{V}\int_{\vec{q}} \log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} - \frac{2}{V}\int_{\vec{q}} \log\left[1+\sqrt{1-\gamma_{\vec{q}}\mathcal{L}_{\vec{q}}}\right] d\vec{q} \quad (9)$$

其中 $\alpha_{\vec{q}} = \tanh^2(\beta\lambda_{\vec{q}})$、$\gamma_{\vec{q}} = 2\alpha_{\vec{q}}/(1+\alpha_{\vec{q}})$ 和 $= 1 - \mathrm{sech}(2\beta\lambda_{\vec{q}})$。

由于 $\gamma_{\vec{q}}$ 和 $\mathcal{L}_{\vec{q}}$ 的取值都介于 0 和 1 之间，因此我们可以展开式（9）第三项中的被积函数。

$$r_a(\beta, p_0, p) = \log 2 - \frac{1}{V}\int_{\vec{q}} \log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} + \frac{1}{2V}\sum_{n=1}^{\infty} c_n \int_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}}^n \mathcal{L}_{\vec{q}}^n d\vec{q} \quad (10)$$

其中 c_n 是由展开得到的常数，$c_1 = 1$、$c_2 = \frac{3}{8}$、$c_3 = \frac{5}{24}$ 等。式（8）、（9）和（10）的详细推导见附录A。我们的目标是研究量 $r_a(\beta, p_0, p)$ 随该参数的淬火后值 p 变化的情况。实际上，我们将寻找量 $\partial r_a(\beta, p_0, p)/\partial p$ 和/或 $\partial^2 r_a(\beta, p_0, p)/\partial p^2$ 的非解析行为。对式（10）求导时，前两项因不依赖于 p 而变为零。因此，我们关注的是第三项。对于下文讨论的所有哈密顿量，我们都通过数值验证，二阶导数中的非解析行为（若有）的主要贡献来自 $\lambda'_{\vec{q}}$ 变为零的点（称为节点）。因此，在式（10）的第二个积分中，我们将 $\lambda_{\vec{q}}$ 和 $\gamma_{\vec{q}}$ 替换为它们在节点处的值，并将其移到积分号外。于是可以写成

$$r_a(\beta, p_0, p) = \log 2 - \frac{1}{V}\int \log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} + \frac{1}{2V}\sum_n c_n \frac{\gamma^n}{\lambda^{2n}} I_n \quad (11)$$

其中，λ 和 γ 分别是节点处 $\lambda_{\vec{q}}$ 和 $\gamma_{\vec{q}}$ 的值，并且

$$I_n(p_0, p) = \int_{\vec{q}} {\lambda_{\vec{q}}}^{2n} {\mathcal{L}_{\vec{q}}}^n \, d\vec{q}$$

根据我们先前的工作 [36]，，下面将说明非解析性源于积分 I_n；由于I_n 与温度无关，因此预计在所有温度下都能观察到量子临界点存在的特征。

我们将把上述方法应用于若干可积量子自旋模型，即 XY 链、一维 SSH 模型、蜂窝晶格上的 Kitaev 模型、外尔半金属和拓扑节线半金属。这些模型在绝对零度时都存在一个量子临界点。我们将展示，量 r_a 显示该量在任意有限温度下的量子临界点处呈现非解析行为。事实上，这并不意味着有限温度下确实发生了相变，而是说明探测器，即长时间保真度，体现了零温时存在的临界性的特征。此外，由于相关量的计算只涉及积分的求解，我们也可以对三维系统进行数值研究。我们将报告，对于外尔半金属和拓扑节线半金属，在低温下，长时间保真度在相边界处呈现非解析行为。

III. 横场 XY 模型

一维 XY 模型定义如下：

$$\mathcal{H}_{XY} = -\frac{1}{2}(1+h)\sum_{i=1}^{N} s_i^x s_{i+1}^x - \frac{1}{2}(1-h)\sum_{i=1}^{N} s_i^y s_{i+1}^y - \Gamma\sum_{i=1}^{N} s_i^z \quad (12)$$

其中，h是各向异性参数，Γ 是横场，s_i 是泡利矩阵。利用 Jordan-Wigner变换可以证明，[1, 53, 54] 该哈密顿量可写成式（5）的形式，其中

$$\mathcal{H}_q = a_q\sigma_1 + b_q\sigma_3 \quad (13)$$

这里，$a_q = -h\sin(q)$，且 $b_q = \Gamma + \cos(q)$，其中 $0 < q < \pi$。在区域 $|\Gamma| > 1$ 内存在一个无序相，而在 $h > 0$，$|\Gamma| < 1$ 和 $h < 0$，$|\Gamma| < 1$内存在两个有序相。

速率函数的长时间平均值现在由方程（9）给出，其中 $\vec{q}$ 是一个标量。我们将研究两种淬火方案：一种是外场淬火（Γ），另一种是各向异性参数淬火（h）。

A. 外场淬火

我们将 Γ从某个初始值瞬时淬火Γ_0 至 Γ，同时保持 h 不变。数值计算得到的导数 $\partial r_a/\partial\Gamma$在 $\Gamma = 1$ 处出现不连续性，该点是温度 $T = 0$下的量子临界点（图1）。这证明，正如我们在前一篇论文中所报告的，即使在较高温度下，我们的探测器 r_a 也能成功探测到量子临界点。[36]

我们还可以由公式（9）推导出高温下不连续性大小的解析表达式。在这种情况下，参数 p 变为 Γ，V变为π，因为系统是一维的，并且 q 的取值范围为 0 到 π。量 $\mathcal{L}_q$ 变为

$$\mathcal{L}_q = (\Gamma - \Gamma_0)^2 \left(\frac{a_q}{\lambda_q \lambda'_q}\right)^2$$

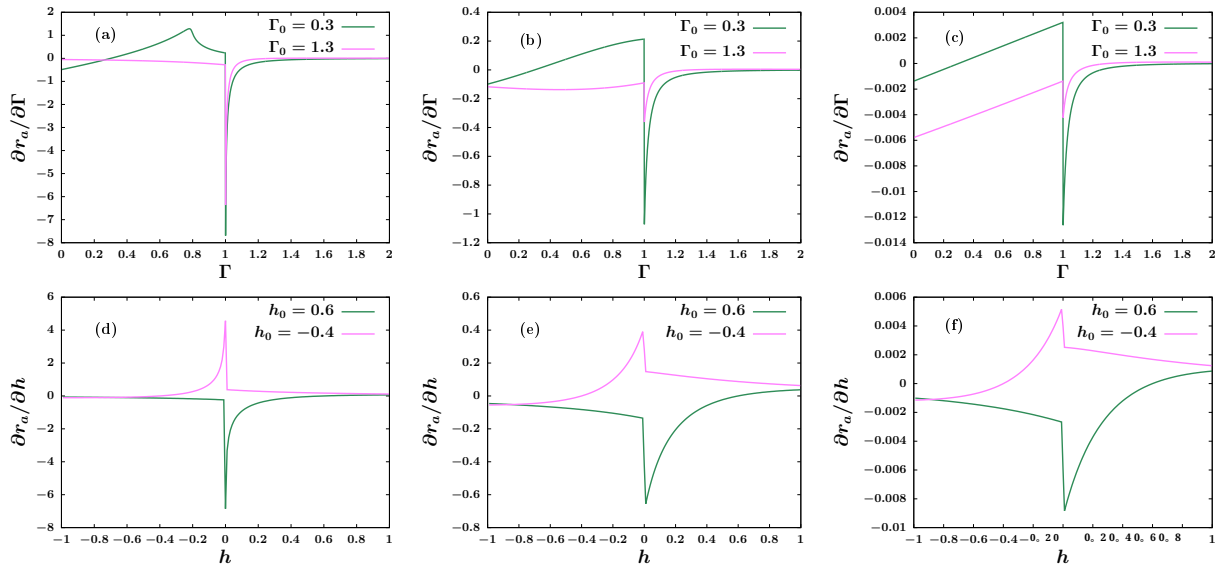


图 1. 横向XY链：对于横向场参数淬火 Γ，在 $h = 0.3$ 时，分别取 (a) $\beta = 10$、(b) $\beta = 1$ 和 (c) $\beta = 0.1$，以及对于各向异性参数淬火 h，在 $\Gamma = 0.3$ 时，分别取 (d) $\beta = 10$、(e) $\beta = 1$ 和 (f) $\beta = 0.1$，数值计算得到的速率函数关于淬火参数的一阶导数。在这两种情况下，$\partial r_a/\partial\Gamma$ 在临界点 $\Gamma = 1$ 和 $h = 0$处均表现出不连续性。

根据公式（11），我们将 I_n 表示为:

$$I_n = (\Gamma - \Gamma_0)^{2n} \int_0^{\pi} \left(\frac{a_q}{\lambda'_q}\right)^{2n} dq \tag{14}$$

对于 $n = 1$，可以直接计算该积分:

$$I_1 = \frac{\pi}{4}(\Gamma - \Gamma_0)^2 \left(1 + \frac{1}{\Gamma^4}\right) \quad \text{for } \Gamma > 1 \tag{15}$$

and

$$I_1 = \frac{\pi}{4}(\Gamma - \Gamma_0)^2 \left(\Gamma^2 + \frac{1}{\Gamma^2}\right) \quad \text{for } \Gamma < 1 \tag{16}$$

当温度较高时，β 较小，而 I_1 是最主要的项（参见附录 C）。此时，量子临界点 $\Gamma = 1$ 处的不连续量为

$$(\partial r_a/\partial\Gamma)_{\Gamma=1+} - (\partial r_a/\partial\Gamma)_{\Gamma=1-} = \beta^2(1 - \Gamma_0^2)/h \tag{17}$$

在高温下，我们对保留 n 所有取值时 $\partial r_a/\partial\Gamma$ 中的不连续性进行了数值计算，发现所得结果与仅保留 $n = 1$ 项时得到的结果处于同一数量级。（参见附录 C ）

B. 各向异性参数的淬火

在这种情况下，我们将 h 从某个初始值瞬时淬火 h_0 至 h 并保持 Γ恒定。数值计算得到的导数$\partial r_a/\partial h$在相边界处显示出不连续性 $h = 0$ （图1）。因此，在这里，我们的探测器 r_a 即使在较高温度下也能成功探测到量子临界点（QCP），正如我们在前一篇论文[36]中所报告的那样。

方程（p 9）中的参数变为 h，在这种情况下，V 变为 π，原因如前一小节所述。$\mathcal{L}_q$ 于是变为

$$\mathcal{L}_q = (h - h_0)^2 \left(\frac{b'_q \sin(q)}{\lambda'_q \lambda_q}\right)^2$$

我们将方程（11）第三项中的积分写为

$$I_n = (h - h_0)^{2n} \int \left(\frac{b'_q \sin(q)}{\lambda'_q}\right)^{2n} dq \tag{18}$$

项 I_1 可表示为

$$\begin{aligned} I_1 &= -\frac{\pi}{4}(h - h_0)^2\{6h^2(2\Gamma^2 - 1) \\ &+ 4h(\Gamma^2 - 1) - 2\} \quad \text{for } h < 0 \end{aligned} \tag{19}$$

and

$$\begin{aligned} I_1 &= -\frac{\pi}{4}(h - h_0)^2\{2h^2(4\Gamma^2 - 1) \\ &- 4h(\Gamma^2 - 1) - 2\} \quad \text{for } h > 0 \end{aligned} \tag{20}$$

这给出了高温下量子临界点处的不连续量 $h = 0$，即

$$(\partial r_a/\partial h)_{h=0+} - (\partial r_a/\partial h)_{h=0-} = 2\beta^2 h_0^2(1 - \Gamma^2) \tag{21}$$

与之前一样，保留 n 的所有取值计算得到的不连续性，其数量级与仅保留 $n = 1$ 项得到的结果相同（参见附录 C）。

IV. 一维 SSH 模型

Su-Schrieffer-Heeger（SSH）模型可以看作一条由 N 个晶胞构成的链，每个晶胞由两个不同的格点组成，分别标记为 c和 d [55, 56]。位置空间中的哈密顿量可写为

$$\mathcal{H} = -\sum_n [c_n^\dagger d_n + h c_{n+1}^\dagger d_n + h.c] \tag{22}$$

其中 c_n 和 d_n 分别是在 c 和 d 格点处的费米子湮灭算符，它们位于第 n 个晶胞中，且$c^\dagger$， $d^\dagger$ 是相应的产生算符。经过傅里叶变换后，哈密顿量可写成式（5）

$$\mathcal{H} = \sum_q \mathcal{H}_q \text{ where } \mathcal{H}_q = a_q\sigma_1 + b_q\sigma_2 \tag{23}$$

其中 $a_q = (1 + h\cos(q))$ 和 $b_q = h\sin(q)$，这里 q 的取值范围为 $-\pi$ 到 π。该模型在 $h = \pm 1$ 处发生相变。

参数 h 从 h_0 淬火至 h ，随后系统开始演化。利用式（9），可以数值计算速率函数 r_a 及其导数 $\partial r_a/\partial h$。如 [图 2] 所示， $\partial r_a/\partial h$ 在$h = 1$处不连续，这表明 r_a 即使在有限温度下也能检测到量子临界点。我们可以解析计算量子临界点处 $\partial r_a/\partial h$的不连续量。在这种情况下，量 p 变为 h ， V 等于 2π ，而 $\mathcal{L}_q$为

$$\mathcal{L}_q = \left(\frac{a_q b_q' - b_q a_q'}{\lambda_q \lambda_q'}\right)^2 \tag{24}$$

其中带撇的量是淬火后的参数。

现在，我们可以将式（11）第三项中的积分写为

$$\begin{aligned} I_n &= \int_{q=-\pi}^{\pi} \left(\frac{a_q b_q' - b_q a_q'}{\lambda_q'}\right)^{2n} dq \\ &= (h-h_0)^{2n} \int_{q=-\pi}^{\pi} \left(\frac{\sin^2(q)}{1+h^2+2h\sin(q)}\right)^n dq \end{aligned} \tag{25}$$

在高温下，最主要的贡献来自 I_1，其可以很容易地计算出来。

$$I_1 = \pi(h-h_0)^2 \quad \text{for } h < 1 \tag{26}$$

and

$$I_1 = \pi\frac{(h-h_0)^2}{h^2} \quad \text{for } h > 1 \tag{27}$$

因此， r_a 在 $h = 1$ 处（高温下）的一阶导数的不连续性大小为:

$$\partial r_a/\partial h|_{h=1+} - \partial r_a/\partial h|_{h=1-} = -2\beta^2(h_0-1)^2 \tag{28}$$

与之前一样，保留所有 n 值计算得到的不连续性，与仅保留 $n = 1$ 项得到的不连续性处于相同的数量级（参见附录 C）。

V. 二维情形：Kitaev 模型

蜂窝晶格上 Kitaev 模型的哈密顿量定义如下:

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j}\sum_{\alpha=1}^{3} J_\alpha \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \tag{29}$$

其中 i， j 遍历晶格上的所有最近邻对。该模型包含三个相互作用参数 $J_{1、2、3}$ （图 3）。可以证明 [57–59] 在“无涡旋”扇区中，该哈密顿量同样可以写成式（5）的形式，其中

$$\mathcal{H}_{\vec{q}} = a_{\vec{q}}\sigma_1 + b_{\vec{q}}\sigma_3 \tag{30}$$

这里 $\vec{q} = (q_x,\ q_y)$，其中 $-\pi < (q_x,\ q_y) < \pi$，系数为 [60, 61]

$$\begin{aligned} a_{\vec{q}} &= -J_1\sin(q_x) + J_2\sin(q_y) \\ b_{\vec{q}} &= J_3 - J_1\cos(q_x) - J_2\cos(q_y) \end{aligned} \tag{31}$$

无涡旋态下系统的相图如图 [4] 所示。满足不等式 $|J_1 - J_2| \leq J_3 \leq J_1 + J_2$ 的参数值对应无能隙区域，其他情况下则为有隙区域。这两个相在拓扑上不同 [57–59]，且并非总能通过研究洛施密特回波 [62]来识别。

我们在之前的论文中讨论了 $J_1 = J_2$ 这一情形 [36]。这里我们将讨论更一般的情形 $J_1 \neq J_2$。利用方程（9），可以数值计算参数 J_3 在固定 J_1 和 J_2 （图 5）条件下淬火的速率函数及其导数。我们发现，在 $|J_1 - J_2|$ 和 $J_1 + J_2$ 处会出现非解析性，且速率函数的二阶导数以临界指数 1/2 发散（图 6）。

现在，我们将对 J_3 从 J_0 淬火至 J 的情形 $J_1 \neq J_2$ 进行解析处理。这里，参数 p 为 J， V 为 $4\pi^2$，而 $\mathcal{L}_{\vec{q}}$ 可写为

$$\mathcal{L}_{\vec{q}} = (J-J_0)^2 \frac{a'^2_{\vec{q}}}{\lambda^2_{\vec{q}}\,\lambda'^2_{\vec{q}}}$$

代入

$$M = J_1 + J_2,\ N = J_1 - J_2,\ u = \frac{q_x+q_y}{2},\ v = \frac{q_x-q_y}{2}$$

得到

$$\begin{aligned} a_{\vec{q}} &= -M\cos(u)\sin(v) - N\sin(u)\cos(v) \\ b_{\vec{q}} &= J_3 - M\cos(u)\cos(v) + N\sin(u)\sin(v) \end{aligned} \tag{32}$$

现在，我们可以写出 r_a 的表达式，它来自公式（11）。由于对 J求导后只剩下第三项，我们将计算速率函数第三项中的被积函数，即

$$I_n = 4(J-J_0)^{2n} \int_{u=0}^{\pi/2} du \int_{v=-\pi}^{\pi} dv \left(\frac{a'}{\lambda'}\right)^{2n} \tag{33}$$

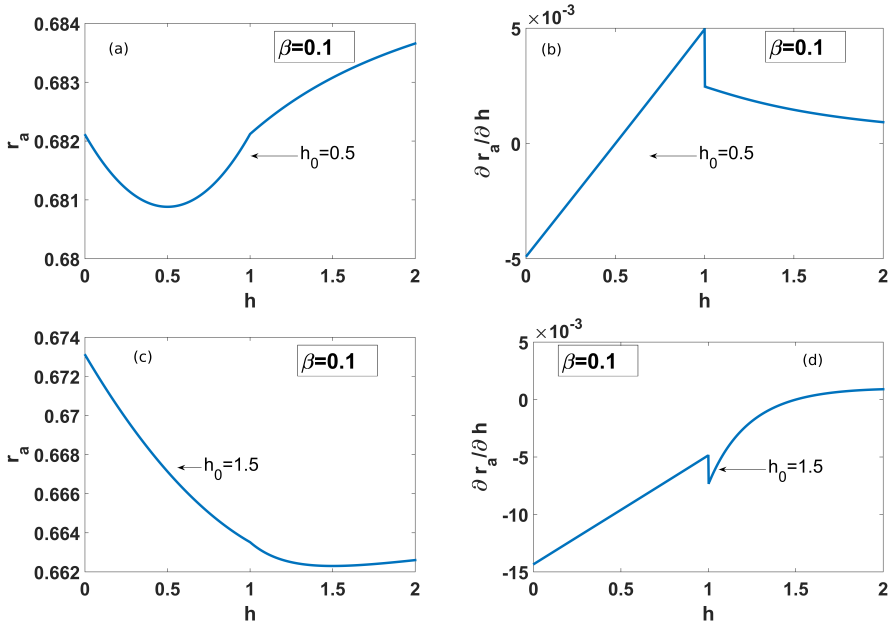


图2. 一维 SSH 模型：图中绘出了逆温度为 $\beta = 0.1$ 时，(a) 和 (b) 中 $h_0 = 0.5$ 以及 (c) 和 (d) 中 $h_0 = 1.5$ 对应的速率函数及其关于淬火后参数 h 的导数

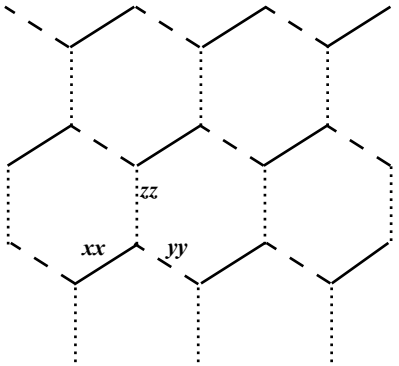


图3. 蜂窝晶格上的 Kitaev 模型。实线、虚线和点线分别对应 xx、yy 和 zz 相互作用，其相互作用强度分别为 J_1、J_2、J_3。

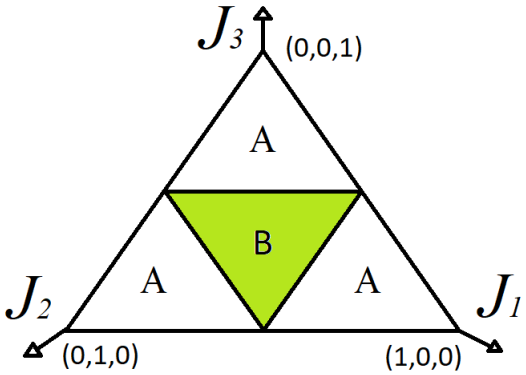


图4. 蜂窝晶格上 Kitaev 模型的相图。标记为 A 的区域是有能隙区域，B 是无能隙区域。[63]

I_1 的解析表达式为（见附录 B）

$$I_1 = \frac{2\pi}{J}(J-J_0)^2[2Ju_c - (M^2-N^2)\frac{\sin(2u_c)}{2J} + \frac{1}{J}(M^2+N^2)(\frac{\pi}{2}-u_c)] \tag{34}$$

其中 $u_c = \cos^{-1}(\sqrt{(J^2-N^2)/(M^2-N^2)})$。如果我们从无能隙相趋近于 $|N|$，并将接近 $|N|$ 时的 J 近似为 $|N|+\epsilon$，则得到

$$\frac{\partial^2 I_1}{\partial J^2} = -\frac{4\pi\sqrt{2}(|N|-J_0)^2}{\sqrt{|N|(M^2-N^2)}}\epsilon^{-1/2} \tag{35}$$

至主阶。

同样地，我们可以证明，如果从无能隙相趋近于 M，并将 J 在 M 附近近似为$M-\epsilon$，

$$\frac{\partial^2 I_1}{\partial J^2} = -\frac{4\pi\sqrt{2}(M-J_0)^2}{\sqrt{M(M^2-N^2)}}\epsilon^{-1/2} \tag{36}$$

到主阶为止。

我们得出结论，I_n 的二阶导数也将与 $\epsilon^{-1/2}$ 成正比，达到主阶。因此，r_a 的二阶导数在 $1/2$ 任意温度下的两个临界点附近都呈指数为6的代数发散（图）。尽管我们没有考虑非零温度下的涡旋激发，但

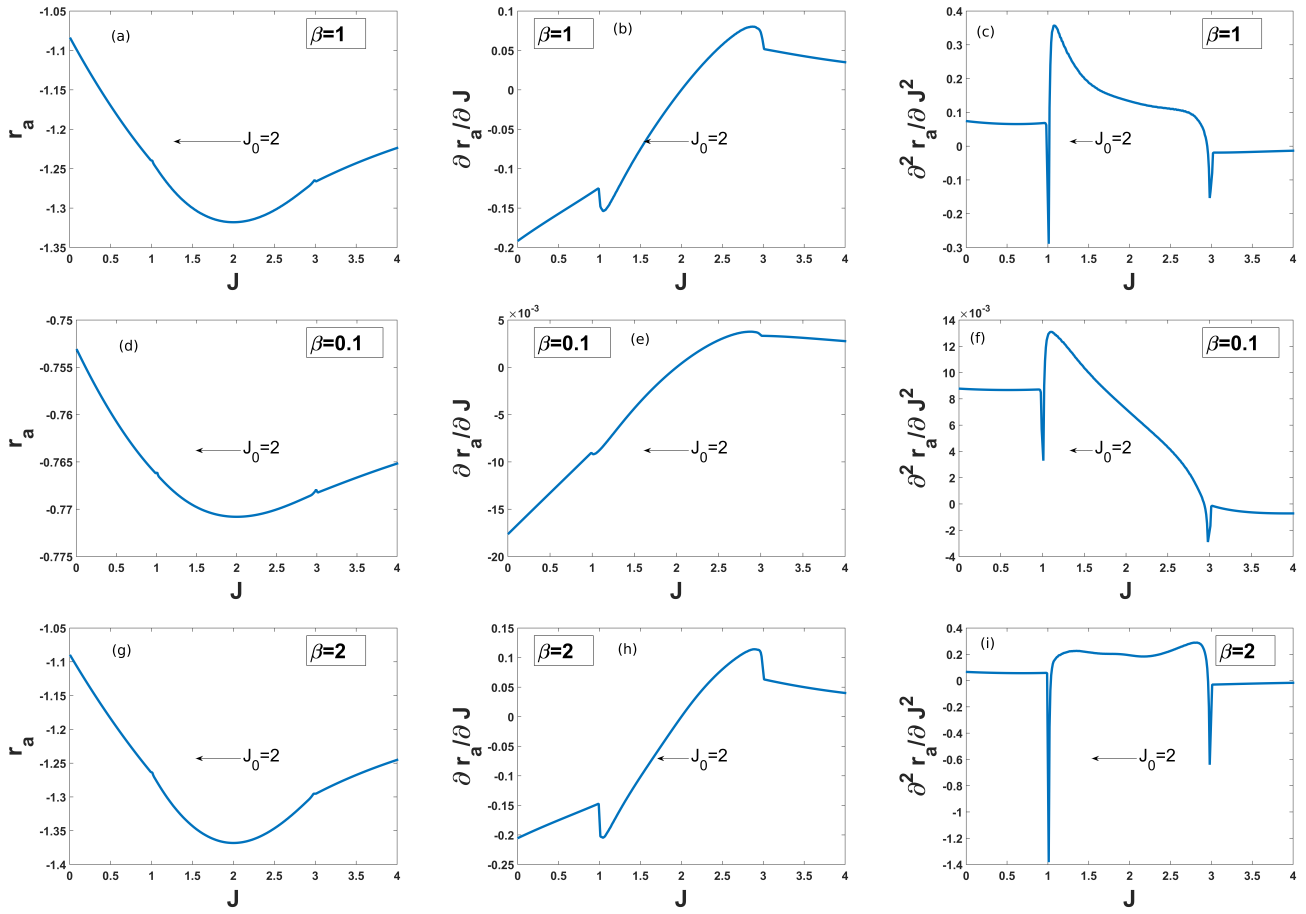


图 5. 蜂窝晶格上的 Kitaev 模型： r_a、 $\partial r_a/\partial J$、 $\partial^2 r_a/\partial J^2$ 随 J 变化的曲线。固定 $J_1 = 2$ 和 $J_2 = 1$。图 (a)、(b) 和 (c) 对应三种不同温度 $\beta = 1$； 图 (c)、(d) 和 (e) 对应 $\beta = 0.1$； 图 (g)、(h) 和 (i) 对应 $\beta = 2$。 J_3 的初始值为 $J_0 = 2$。从图中可以明显看出，速率函数在 $J = 1$ 和 $J = 3$ 处的量子临界点呈现非解析性。

涡旋的激发并不会破坏速率函数 r_a的奇异行为。二维 Kitaev 模型中的涡旋激发随温度绝热变化，不会诱发任何相变 [64]。因此，在非零温度下，无涡旋构型对速率函数的非解析特征贡献最大。

VI. 三维情形

将我们的探测器应用于三维哈密顿量时，我们考虑两类拓扑材料，即外尔半金属和拓扑节线半金属。

A. Weyl 半金属

Weyl 半金属的对易哈密顿量可写为 [65, 66],

$$\mathcal{H}_{\vec{q}} = a_{\vec{q}}\sigma_1 + b_{\vec{q}}\sigma_2 + c_{\vec{q}}\sigma_3 \tag{37}$$

其中 $a_{\vec{q}} = \sin(q_x)$、 $b_{\vec{q}} = \sin(q_y)$、 $c_{\vec{q}} = J_3 - \cos(q_x) - \cos(q_y) - \cos(q_z)$，而 $\vec{q}$遍历范围为 $(-\pi < q_x, q_y, q_z < \pi)$ 的简单立方晶格。

该哈密顿量的基态在 $J_3 < 3$ 时呈现无能隙相，在 $J_3 > 3$时呈现有能隙相。我们考虑一次淬火 $J_3 = J_0 \to J_3 = J$。

我们数值计算速率函数 r_a ，根据公式（9）

$$r_a(\beta, J_0, J) = 3\log 2 - \frac{1}{8\pi^3}\int_{\vec{q}} \log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} - \frac{1}{4\pi^3}\int_{\vec{q}} \log\left[1+\sqrt{1-\gamma_{\vec{q}}\mathcal{L}_{\vec{q}}}\right] d\vec{q} \tag{38}$$

其中，对于 Weyl 半金属， $p = J$、 $V = 8\pi^3$ 和 $\mathcal{L}_{\vec{q}}$ 分别为

$$\mathcal{L}_{\vec{q}} = (J - J_0)^2(\sin^2(q_x) + \sin^2(q_y))/(\lambda_{\vec{q}}\lambda'_{\vec{q}})^2 \tag{39}$$

我们观察到，对于 r_a 关于 J的一阶导数，在 QCP $J = 3$ 处的斜率会发生变化，这两种情况下均如此

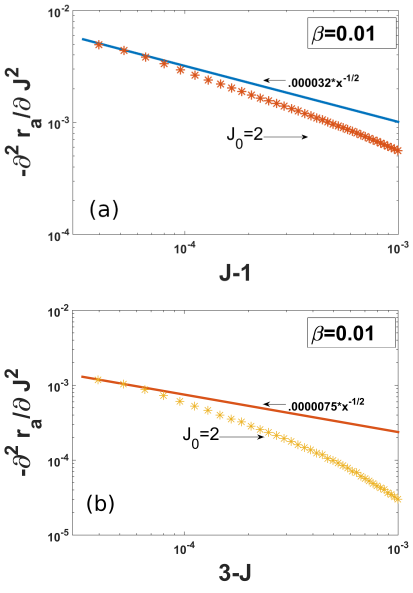


图 6. 蜂窝晶格上的 Kitaev 模型：(a) 绘制了 $-\partial^2 r_a/\partial J$ 与 $J-1$ 随 $J_1=2$ 和 $J_2=1$的变化。当趋近临界点 $J=1$时，它与蓝线重合，并按 $x^{-1/2}$发散。(b) 绘制了 $-\partial^2 r_a/\partial J^2$ 与 $3-J$ 的关系。当趋近临界点 $J=3$时，它开始按 $x^{-1/2}$发散。

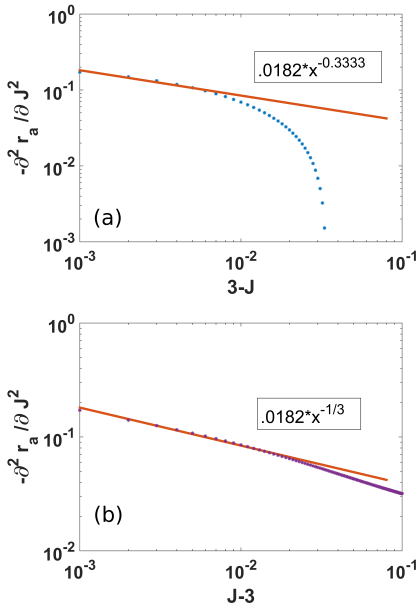


图 8. 三维外尔半金属： (a) 在非常接近量子临界点 $J=3$ 处绘制了 $-\partial^2 r_a/\partial J$ 对 J 的图像。图中显然可见，二阶导数在临界点左侧 (a) 和右侧 (b) 均按代数形式发散，临界指数为 $-1/3$。

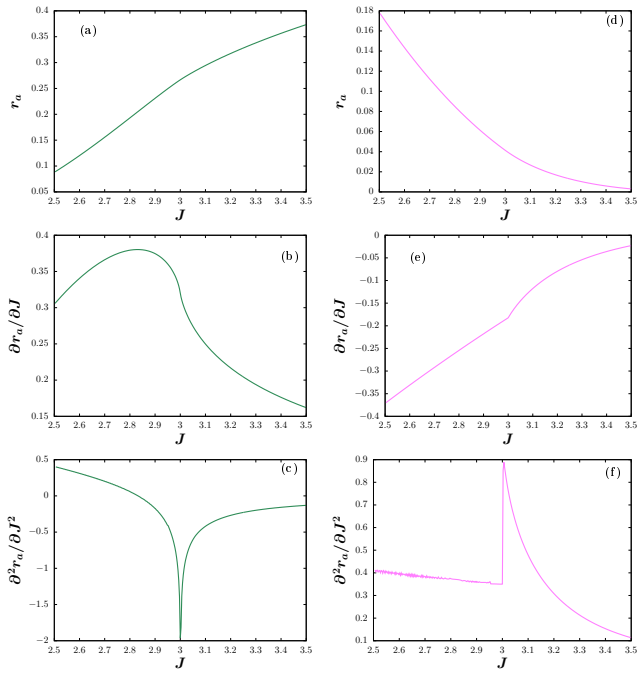


图 7. 三维外尔半金属：速率函数 r_a 及其两个导数，由方程（9）数值计算得到，对参数 $J_0 \to J$ 在 $\beta=4$处进行淬火。对于 (a)、(b) 和 (c)，淬火前的参数值位于无能隙相 $J_0=2$内；而对于 (d)、(e) 和 (f)，则位于有能隙相 $J_0=3.8$内。两种情况下，量 $\partial^2 r_a/\partial J^2$ 都会在相边界 $J=3$处发散。

$J_0<3$ 以及 >3 （图 7），二阶导数按代数形式发散，其临界指数为 $1/3$ （图 8）。需要指出的是，与前两种情况不同，这种奇异性只有在低温下才可见，因此我们无法对 r_a 进行解析研究。

B. 拓扑节线半金属

当 $b_{\vec{q}}=0$ 在方程（37）中时，得到拓扑节线半金属 [67]。我们将彼此对易的哈密顿量写作

$$\mathcal{H}_{\vec{q}} = a_{\vec{q}}\sigma_1 + c_{\vec{q}}\sigma_3 \tag{40}$$

其中 $c_{\vec{q}} = J_3 - \cos(q_x) - \cos(q_y) - \cos(q_z)$，且 $a_{\vec{q}} = \sin(q_z)$。通常，这类材料采用如下哈密顿量

$$\mathcal{H}^0_{\vec{k}} = vk_z\sigma_x + (k^2 - k_0^2)\sigma_z \tag{41}$$

（以 v 和 k_0 为参数）用于这类材料[68–70]。方程（40）中的哈密顿量在平面 $k_x=-k_y$上化简为这种形式，忽略 k的二次项。

哈密顿量 (40) 在区域$J_3>3$ 内具有有能隙相，而在 $J_3<3$ 时则呈现无能隙相。对于从 $J_3=J_0$ 到 $J_3=J$ 的淬火，速率函数 r_a 由方程 (38) 计算得出，其中

$$\mathcal{L}_{\vec{q}} = (J-J_0)^2(\sin(q_z))^2/(\lambda_{\vec{q}}\lambda'_{\vec{q}})^2 \tag{42}$$

在这种情况下，也可以观察到$J=3$ 曲线 $\partial r_a/\partial J$ 相对于 J的斜率变化。（图9）二阶

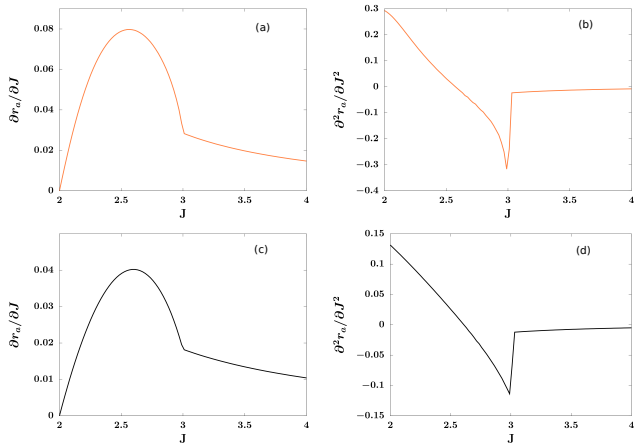


图 9. 三维拓扑节点线半金属：根据方程（9）[ ] $J_0 = 2 \to J$ $\beta = 4$ ）数值计算得到的速率函数的一阶和二阶导数，对参数进行淬火时分别对应 (a) 和 (b)，以及 (c) 和 (d)。在这两种情况下，$\partial^2 r_a/\partial J^2$ 在相边界 $J = 3$处均不连续。

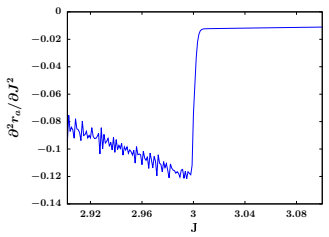


图 10. 三维拓扑节点线半金属：绘出了非常接近量子临界点处，关于 J 的二阶导数随 J 的变化曲线，其中 J $= 3$ 对应于 $\beta = 1$ 和 $J_0 = 2$。从图中可以明显看出存在有限的不连续性。曲线振荡的原因是计算能力有限。

导数在临界点处没有发散，但存在有限的不连续性（图 10）。值得一提的是，随着温度升高，不连续性会变小，因此在这种情况下，我们无法对 r_a 进行解析研究。

C. 拓扑绝缘体 Bi_4Br_4

单层 Bi_4Br_4 是一种量子自旋霍尔绝缘材料。研究表明，多层 Bi_4Br_4 即使在室温下[49, 50] 仍存在拓扑边缘态；其带隙较大[49, 71–75]，因此是室温拓扑绝缘体的理想候选材料。针对该材料，已有研究提出了单层的低能有效 $k \cdot p$ 哈密顿量 [49]。本节将说明，利用该哈密顿量计算得到的速率函数能够正确预测相变。

所提出的哈密顿量为

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} M & A_1 q_x & 0 & A_2 q_y \\ A_1^* q_x & -M & A_2 q_y & 0 \\ 0 & A_2^* q_y & M & -A_1^* q_x \\ A_2^* q_y & 0 & -A_1 q_x & -M \end{bmatrix} \tag{43}$$

其中

$$M = M_0 - B_1 q_x^2 - B_2 q_y^2 \tag{44}$$

和 $A_1 = -1.81 + i0.0461\ eV.\mathring{A}$ $A_2 = -4.15 + i0.141\ eV.\mathring{A}$ $B_1 = 3.86\ eV.\mathring{A}^2$ $B_2 = 0.0032\ eV.\mathring{A}^2$，。我们将参数 M_0 从 M_0 淬火至 M_0'，因为量子临界点位于 $M_0 = 0eV$。利用该哈密顿量的平方为标量乘以单位矩阵这一事实，可以计算淬火前和淬火后哈密顿量的指数函数，并按照第 II节的方法继续计算速率函数。结果得到一个类似于方程（38）的方程：

$$\begin{aligned} r_a(\beta, J_0, J) &= 4\log 2 - \frac{1}{V}\int_{\vec{q}} \log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} \\ &- \frac{2}{V}\int_{\vec{q}} \log\left[1+\sqrt{1-\gamma_{\vec{q}}\mathcal{L}_{\vec{q}}}\right] d\vec{q} \end{aligned} \tag{45}$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\vec{q}} &= \frac{1}{2} - \frac{X}{2\lambda^2\lambda'^2} \\ X &= (MM' + |A_1|^2 q_x^2 + |A_2|^2 q_y^2)^2 - |A_1|^2 q_x^2 (M'-M)^2 \\ &- |A_2|^2 q_y^2 (M'-M)^2) \\ M' &= M_0' - B_1 q_x^2 - B_2 q_y^2 \end{aligned}$$

其中 V 是靠近原点的积分区域面积（见图（11））。根据式（45）数值计算得到的速率函数及其导数随淬火后值 M_0' 的变化绘于图（11）中。结果显示，在室温下，二阶导数在 $M_0' = 0$ 处发散。在其他温度下也能得到二阶导数发散的结果。这表明，尽管材料 Bi_4Br_4，的哈密顿量由 4×4对易矩阵构成，而非 2×2 矩阵（见式 5、43），我们的方法仍然适用。

VII. 零温行为

在零温下，式（3）中的速率函数退化为利用洛施密特回波定义动力学量子相变时所用的速率函数 [37]。当速率函数随时间作图时，发生动力学相变的系统会呈现非解析峰。其开创性观点认为，只有当系统经过淬火

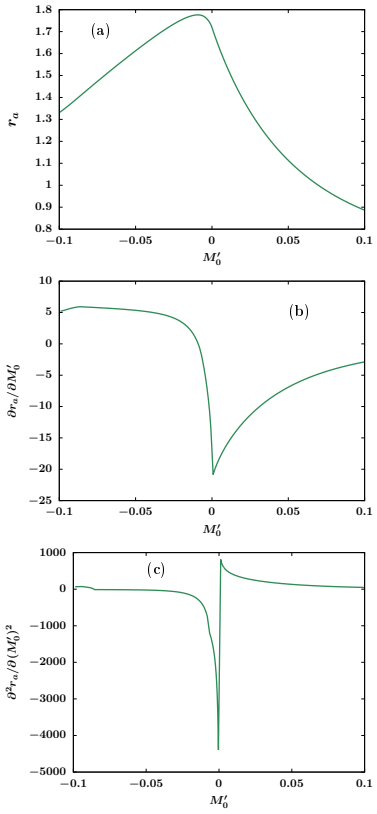


图 11. 室温下，速率函数 r_a (a) 及其一阶 (b) 和二阶 (c) 导数随 M_0' 的变化曲线。由于我们使用了 $k.p$ 哈密顿量，积分在布里渊区中心附近的区域内进行，即 $0.05\mathring{A}^{-1} \leq q_x$, $q_y \leq 0.05\mathring{A}^{-1}$ 遵循 [49]。

穿越平衡态量子临界点时，系统才会发生动力学量子相变。横向伊辛模型就呈现这种行为。但后来的研究表明，淬火穿越临界点时，速率函数随时间变化的图像未必会出现非解析性；而淬火未穿越临界点时，也可能出现非解析性。[48] [62] [76]。我们在此表明，在 $T = 0$ 下，速率函数的长时间极限仅当系统经过淬火穿越临界点时才会出现非解析性。本文考察的所有哈密顿量都符合这一观察结果。零温下速率函数（9）的长时间极限将变为

$$r_a = 2\log 2 - \frac{2}{V}\int_{\vec{q}} \log[1+\sqrt{1-\mathcal{L}_{\vec{q}}}]d\vec{q} \qquad (46)$$

我们在图 (12)、(13)、(14)、(15) 中绘制了该函数及其导数在不同情况下的曲线。图中仅在量子临界点处显示出非解析性。

VIII. 结论

我们探究了可映射为自由

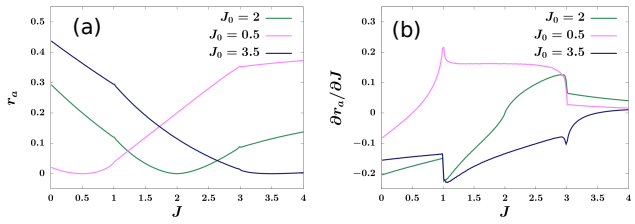


图 12. 速率函数 r_a (a) 及其导数 (b)，根据式 (46)，在零温下利用淬火前参数 $J_0 = 2$ $J_0 = 0.5$ $J_0 = 3.5$ (处于无能隙相) 计算二维 Kitaev 模型，且 (处于有能隙相)。非解析性仅出现在相边界 $J = 3$ 和 $J = 1$处。

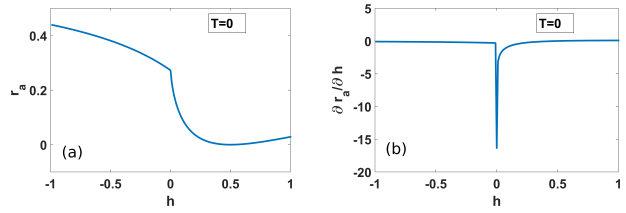


图 13. 速率函数 r_a （a）及其导数（b），根据式（46）计算一维 XY 模型在零温下、淬火前参数为 $h_0 = 0.5$时的结果。非解析性仅出现在相边界 $h = 0$。

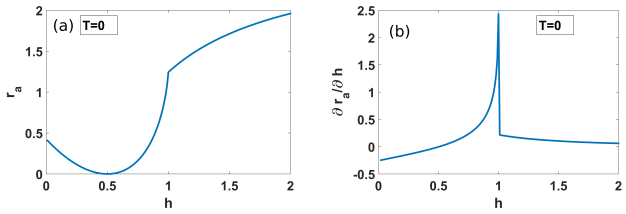


图 14. 速率函数 r_a （a）及其导数（b），根据式（46）计算一维 SSH 模型在零温下、淬火前参数为 $h_0 = 0.5$时的结果。非解析性仅出现在相边界 $h = 1$。

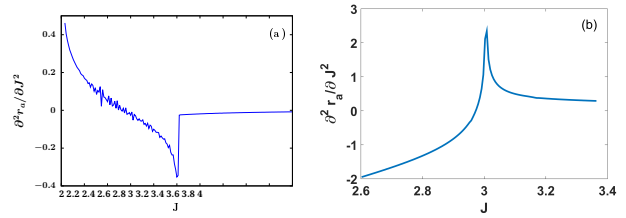


图 15. 速率函数 r_a 及其导数分别对应（a）三维拓扑节线半金属和（b）Weyl 半金属，根据式（46）计算零温下的结果，其中 $J_0 = 2$ 表示 TNLSM 的情况， $J_0 = 2.5$ 表示 Weyl 半金属的情况。非解析性仅出现在相边界 $J = 3$。（a）图中的振荡是由计算限制导致的。

费米子哈密顿量的拓扑系统在有限温度下的保真度响应，并观察到不同维度下对应相边界处的非解析性。在这种情况下，速率函数可写成一个级数，其中每一项都包含一个与温度无关的积分，而积分前的系数则包含温度。我们可以证明，正是该积分导致了非解析行为，因此这一特征在高温下依然存在。

对于一维和二维哈密顿量，该物理量出现非解析行为的原因，可以通过将积分映射到复平面，并识别量子临界点处极点结构的变化来解释。也可以确定不连续性的大小，或发散的指数，具体取决于情况。然而，对于三维哈密顿量，尚无法给出解析解释。我们推测，数值局限是这一特征仅在低温下可见的原因。目前正在朝这个方向开展进一步研究。

我们还表明，速率函数 r_a 的长时间极限仅在 $T=0$ 处的量子临界点呈现非解析性，而洛施密特回波随时间变化图中速率函数的非解析性，未必对应于跨越量子临界点的淬火。

一个自然会想到的问题是，这一特征在三维以上是否仍具有稳健性。我们的主要猜想是，它仍具有稳健性，因为相关积分只会变为一个 d 维积分。不过，还需要更深入的研究来证实这一点。探究我们的速率函数在其他可积和不可积哈密顿量下的表现，也会很有意思。

致谢

作者感谢匿名审稿人对本文早期版本提出的建设性意见。PN 感谢印度大学拨款委员会提供经费支持（参考编号：191620072523），并感谢哈里什·钱德拉研究所提供基础设施使用权限。

附录A

在本附录中，我们详细推导式 (8)、(9) 和 (10) 中速率函数的表达式。根据式 ($\mathcal{H}_{\vec{q}}$和 $\mathcal{H}'_{\vec{q}}$) 及其后一个方程中的表达式，我们可以将 ($\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma}$) 和 ($\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma}$) 的矩阵乘积写为

$$(\hat{\mathcal{V}}_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma})(\hat{\mathcal{V}}'_{\vec{q}}\cdot\vec{\sigma}) = \vec{\mathcal{V}}\cdot\vec{\mathcal{V}}'\,\underline{1} + i\left[\vec{\mathcal{V}}\times\vec{\mathcal{V}}'\right]\cdot\vec{\sigma}$$

由于

$$\mathcal{H}_{\vec{q}}^2 = \lambda_{\vec{q}}^2\underline{1} \quad \text{and} \quad \mathcal{H}_{\vec{q}}'^{\,2} = \lambda_{\vec{q}}'^{\,2}\underline{1}$$

我们得到

$$\begin{aligned} & e^{-\beta\mathcal{H}_{\vec{q}}}\cdot e^{-it\mathcal{H}'_{\vec{q}}} \\ = & \left[\cosh(\beta\lambda)\cos(\lambda' t) + i\sinh(\beta\lambda)\sin(\lambda' t)\,\vec{\mathcal{V}}\cdot\vec{\mathcal{V}}'\right]\underline{1} - \\ & \vec{\sigma}\cdot\Big[\sinh(\beta\lambda)\cos(\lambda' t)\,\vec{\mathcal{V}} + i\cosh(\beta\lambda)\sin(\lambda' t)\,\vec{\mathcal{V}}' + \\ & \sinh(\beta\lambda)\sin(\lambda' t)\,\vec{\mathcal{V}}\times\vec{\mathcal{V}}'\Big] \end{aligned} \tag{A.1}$$

将该表达式中 t 的符号反转，即可得到 $\rho_0 e^{it\mathcal{H}'}$ 的表达式。现在可以计算 $\rho_0\rho_t = \rho_0 e^{-it\mathcal{H}'}\rho_0 e^{it\mathcal{H}'}$ 并对其求迹。结果为

$$\frac{\mathrm{Tr}(\rho_0\rho_t)}{[\mathrm{Tr}(\rho_0)]^2} = \frac{1}{2}\left[1+\tanh^2(\beta\lambda) - 2\mathcal{L}\,\tanh^2(\beta\lambda)\sin^2(\lambda' t)\right] \tag{A.2}$$

其中

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[1 + \left|\vec{\mathcal{V}}\times\vec{\mathcal{V}}'\right|^2 - \left(\vec{\mathcal{V}}\cdot\vec{\mathcal{V}}'\right)^2\right] \tag{A.3}$$

由于 $\vec{\mathcal{V}}$ 和 $\vec{\mathcal{V}}'$ 是单位向量，

$$\mathcal{L} = 1 - \left|\vec{\mathcal{V}}\cdot\vec{\mathcal{V}}'\right|^2 = \sin^2(\phi) \tag{A.4}$$

其中 ϕ 是向量 $\vec{\mathcal{V}}$ 和 $\vec{\mathcal{V}}'$之间的夹角。

利用标准结果 [52], ，我们得到长时间极限为:

$$\begin{aligned} r_a(\beta, p_0, p) &= 3\log 2 - \frac{1}{V}\int_{\vec{q}}\log(1+\alpha_{\vec{q}})d\vec{q} \\ &- \frac{2}{V}\int_{\vec{q}}\log\left[1+\sqrt{1-\gamma_{\vec{q}}\mathcal{L}_{\vec{q}}}\right]d\vec{q} \end{aligned} \tag{A.5}$$

其中，$\alpha_{\vec{q}} = \tanh^2(\beta\lambda_{\vec{q}})$，$\gamma_{\vec{q}} = 2\alpha_{\vec{q}}/(1+\alpha_{\vec{q}}) = 1 - \mathrm{sech}(2\beta\lambda_{\vec{q}})$ 和 $V = \int_{\vec{q}} d\vec{q}$。现在注意到 $0 < \gamma_{\vec{q}}\mathcal{L}_{\vec{q}} < 1$，并使用展开式

$$\log\left[1+\sqrt{1-x}\right] = \log 2 + \frac{1}{4}\left(x + \frac{3}{8}x^2 + \frac{5}{24}x^3\cdots\right) \tag{A.6}$$

从而得到式（10）。

附录B

在本附录中，我们研究蜂窝晶格上的 Kitaev 模型，并通过解析推导表明，二阶导数在所有温度下都会在临界点发散，其指数为 $1/2$。我们考虑在时间 $t=0$ 将J_3 从 J_0 淬火至 J。

我们将首先计算 I_1，将 $n=1$ 代入式（33）即可得到。

$$I_1 = 4(J-J_0)^2\int_{u=0}^{\pi/2}du\int_{v=-\pi}^{\pi}dv\left(\frac{a'}{\lambda'}\right)^2 \tag{B.1}$$

其中，带撇号的量是 b 和λ 在淬火后的值。为简洁起见，我们省略了下标 $\vec{q}$ 。

代入 $z=e^{iv}$，可将 I_1 写为

$$I_1 = -\frac{i(J-J_0)^2}{J}\int_0^{\frac{\pi}{2}} du \oint_{\mathcal{C}} dz F(z) \tag{B.2}$$

其中 $\mathcal{C}$ 是单位圆，且

$$F(z)=\frac{z_0(z^2-\frac{\bar{z_0}}{z_0})^2}{z^2(z-\frac{J}{z_0})(z-\frac{\bar{z_0}}{J})} \tag{B.3}$$

其中 $z_0 = M\cos(u)+iN\sin(u)$

$F(z)$的极点为 $z_1=0$、 $z_2=J/z_0$ 和 $z_3=\bar{z_0}/J$，相应的留数为

$$\begin{aligned} R_1 &= \frac{\bar{z_0}}{J}+\frac{J}{z_0} \\ R_2 &= -\frac{\bar{z_0}}{J}+\frac{J}{z_0} \\ R_3 &= \frac{\bar{z_0}}{J}-\frac{J}{z_0} \end{aligned} \tag{B.4}$$

当 $u<u_c$时，极点 z_1 和 z_2 位于单位圆内；当 $u>u_c$ 时，极点 z_1 和 z_3 位于单位圆内，其中 u_c 满足关系

$$\cos(u_c)=\sqrt{\frac{(J+N)(J-N)}{4J_1J_2}}$$

应用留数定理，我们可以将积分 I_1 计算为

$$I_1=\frac{2\pi}{J}(J-J_0)^2\left[2Ju_c-(M^2-N^2)\frac{\sin(2u_c)}{2J}+\frac{1}{J}(M^2+N^2)(\frac{\pi}{2}-u_c)\right] \tag{B.5}$$

当 J 从下方趋近 M 时，我们可以在方程（ J中用 $M-\epsilon$ 替换B.5）中的 ϵ 非常小时，对 I_1 关于 J 求导，得到

$$\frac{\partial^2 I_1}{\partial J^2}\approx -\frac{4\pi\sqrt{2}(M-J_0)^2}{(M(M^2-N^2))^{\frac{1}{2}}}\epsilon^{-\frac{1}{2}} \tag{B.6}$$

保留至主阶。

当 J 从下方趋近 $|N|$ 时，我们可以在方程（ J中用 $|N|+\epsilon$ 替换B.5）中的 ϵ 很小时，对I_1 关于 J 求导，得到

$$\frac{\partial^2 I_1}{\partial J^2}\approx -\frac{4\pi\sqrt{2}(|N|-J_0)^2}{(|N|(M^2-N^2))^{\frac{1}{2}}}\epsilon^{-\frac{1}{2}} \tag{B.7}$$

保留至主阶。

这证明，在 I_1 为主导项的高温条件下，速率函数的二阶导数将在两个临界点处以指数 $1/2$ 发散。但在较低温度下，I_n 与 $n>1$ 也会对二阶导数产生贡献。我们将证明，对于 I_n 与 $n>1$，临界指数保持不变。我们需要计算积分 I_n，代入 $z=e^{iv}$ 后可将其写为

$$I_n=-\frac{4i(J-J_0)^{2n}}{(4J)^n}\int_0^{\frac{\pi}{2}} du \oint F^{(n)}dz \tag{B.8}$$

其中

$$F^{(n)}=\frac{z_0^n(z^2-\frac{\bar{z_0}}{z_0})^{2n}}{z^{n+1}(z-\frac{J}{z_0})^n(z-\frac{\bar{z_0}}{J})^n} \tag{B.9}$$

应用留数定理，可将积分I_n 写为

$$I_n=\frac{8\pi(J-J_0)^{2n}}{(4J)^n}\left[\int_0^{\frac{\pi}{2}} R_1^{(n)}du+\int_0^{u_c} R_2^{(n)}du+\int_{u_c}^{\frac{\pi}{2}} R_3^{(n)}du\right]$$

其中， $R_1^{(n)}$ 、 $R_2^{(n)}$ 和 $R_3^{(n)}$ 分别是极点$z_1=0$、$z_2=J/z_0$ 和 $z_3=\bar{z_0}/J$ 的留数。

由于非解析性源于留数 $R_2^{(n)}$ 和 $R_3^{(n)}$，我们将证明 $R_2^{(n)}$ 和 $R_3^{(n)}$ 分别与 R_2 和 R_3 成正比，且这一关系在主阶成立。

我们可以将 R_2^n 写为

$$\begin{aligned} R_2^{(n)} &= \lim_{z\to z_2}\frac{1}{(n-1)!}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}\frac{z_0^n(z^2-\frac{\bar{z_0}}{z_0})^{2n}}{z^{n+1}(z-\frac{\bar{z_0}}{J})^n} \\ &= \lim_{z\to z_2}\frac{1}{(n-1)!}\frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}}\frac{G^n}{z} \end{aligned} \tag{B.10}$$

其中，我们将 $G(z)$定义为

$$G(z)=\frac{z_0(z^2-\frac{\bar{z_0}}{z_0})^2}{z(z-\frac{\bar{z_0}}{J})} \tag{B.11}$$

我们观察到

$$\frac{d^{n-1}(G^n/z)}{dz^{n-1}}=\frac{G}{z}\left[n!\left(\frac{dG}{dz}\right)^{n-1}+\Gamma\right] \tag{B.12}$$

其中，Γ 包含将 G^k 或 G^k/z作为因子的项，其中 $k\geqslant 1$。我们知道 $(G/z)_{z=z_2}=R_2^1$ 以及 $(dG/dz)_{z=z_2}=2J+z_0\bar{z_0}/J$。因此

$$\left(\frac{dG}{dz}|_{z=z_2}\right)^{n-1}\approx\left(\frac{2M^2+z_0\bar{z_0}}{M}\right)^{n-1}(1+c\epsilon)^{n-1} \quad \text{when } J=M-\epsilon$$

$$\left(\frac{dG}{dz}|_{z=z_2}\right)^{n-1}\approx\left(\frac{2N^2+z_0\bar{z_0}}{|N|}\right)^{n-1}(1+c'\epsilon)^{n-1} \quad \text{when } J=|N|+\epsilon$$

其中， c 和 c' 是常数。代入$\left(\frac{dG}{dz}|_{z=z_2}\right)^{n-1}$和 $\left(\frac{G}{z}\right)_{z=z_2}$ 的值，我们得到 –

$$R_2^{(n)} \approx n\left(\frac{2M^2+z_0\bar{z_0}}{M}\right)^{n-1} R_2^{(1)} \quad \text{when } J=M-\epsilon$$
$$R_2^{(n)} \approx n\left(\frac{2N^2+z_0\bar{z_0}}{|N|}\right)^{n-1} R_2^{(1)} \quad \text{when } J=|N|+\epsilon \tag{B.13}$$

对 $R_3^{(n)}$ 也可以进行类似的计算。因此，我们证明 I_n 在两个量子临界点处也会以指数 $1/2$ 发散。

附录 C

在图 C.1、C.2 和 C.3中，我们通过数值计算表明，对于高温下的一维模型，速率函数对淬火参数最终值的导数出现的不连续性，可以用式（ $n=1$11）中的项的导数近似表示。即使对于高温下的二维 Kitaev 模型，速率函数在临界点附近的行为也可以用 I_1 近似表示，这一点已在 [36]中得到证实。

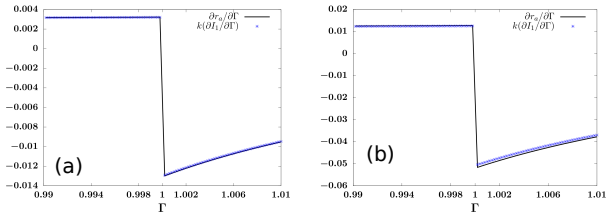


图 C.1. 横向 XY 模型：图中显示， $\partial r_a/\partial\Gamma$ 中的不连续性主要源于$\partial I_1/\partial\Gamma$ 在高温下的不连续性。 k 是常数（$c_1\gamma$）/（$2V\lambda^2$），它乘在 I_1 上，见方程（11）。图 (a) 对应$\beta=0.1$，图 (b) 对应 $\beta=0.2$。两种情况均为对 Γ 参数进行淬火。

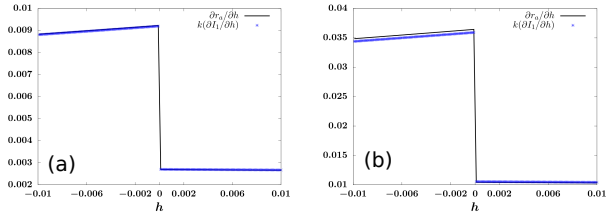


图 C.2. 横向 XY 模型：图中显示， $\partial r_a/\partial h$ 中的不连续性主要源于$\partial I_1/\partial h$ 在高温下的不连续性。 k 是常数（$c_1\gamma$）/（$2V\lambda^2$），它乘在 I_1 上，见方程（11）。图 (a) 对应$\beta=0.1$，图 (b) 对应 $\beta=0.2$。两种情况均为对 h 参数进行淬火。

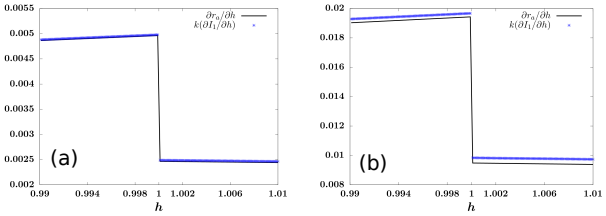


图 C.3. SSH 模型：该图表明，不连续性主要来自$\partial r_a/\partial h$ 在 $\partial I_1/\partial h$ 高温下的不连续性。 k 是常数（$c_1\gamma$）/（$2V\lambda^2$），该常数乘以方程（11）中的 I_1。图 (a) 对应 $\beta=0.1$，图 (b) 对应 $\beta=0.2$。两种情况均为 h 参数淬火。

[1] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, 第2版（剑桥大学出版社，2011年）。[2] S. Hofferberth、I. Lesanovsky、T. Schumm、A. Imambekov、V. Gritsev、E. Demler 和 J. Schmiedmayer, 《探测相互作用多体系统中的量子噪声和热噪声》, 《自然·物理》4，489（2008）。[3] M. Campisi、P. H¨anggi 和 P. Talkner, 《专题综述：量子涨落关系：基础与应用》, 《现代物理评论》83，771（2011）。[4] M. Greiner、O. Mandel、T. Esslinger、T. W. H¨ansch 和 I. Bloch, 《超冷原子气体中从超流体到莫特绝缘体的量子相变》, 《自然》415，39（2002）。[5] E. Haller、R. Hart、M. J. Mark、J. G. Danzl、L. Re¨ichs¨ollner、M. Gustavsson、M. Dalmonte、G. Pupillo 和 H.-C. N¨agerl, 《强相互作用玻色子吕廷格液体中的钉扎量子相变》, 《自然》466，597（2010）。[6] X. Zhang、C.-L. Hung、S.-K. Tung 和 C. Chin, 《在光学晶格中的超冷原子里观测量子临界性》, 《科学》335，1070（2012）。[7] X.-W. Guan、M. T. Batchelor 和 C. Lee, 《一维费米气体：从贝特拟设到实验》, 《现代物理评论》85，1633（2013）。[8] S. L. Sondhi、S. M. Girvin、J. P. Carini 和 D. Shahar, 《连续量子相变》, 《现代物理评论》69，315（1997）。[9] P. Zanardi 和 N. Paunkovi´c, 《基态重叠与量子相变》, 《物理评论 E》74，031123（2006）。[10] P. Zanardi、M. Cozzini 和 P. Giorda, 《自由费米子系统中的基态保真度与量子相变》, 《统计力学杂志：理论与实验》2007，L02002（2007）。[11] M. Cozzini、P. Giorda 和 P. Zanardi, 《自由费米子图中的量子相变与量子保真度》, 《物理评论B》75，014439（2007）。[12] H.-Q. Zhou 和 J. P. Barjaktarevic, 《保真度与量子相变》, J. Phys. A：Math. Theor. 41，412001（2008）。[13] S.-J. Gu, 《量子相变的保真度方法》, 《国际现代物理学杂志 B》24，4371（2010）。[14] B. Damski, 《量子伊辛模型中量子相变的保真度方法》, 收录于 *Quantum Criticality in Condensed Matter: Phenomena Materials and Ideas in Theory and Experiment* 2016（世界科学出版社，）第159–182页。[15] N. T. Jacobson、L. C. Venuti 和 P. Zanardi, 《热态发生量子猝灭后的幺正平衡化》, 《物理评论 A》84，022115（2011）。[16] P. Zanardi、H. T. Quan、X. Wang 和 C. P. Sun, 《有限温度下的混合态保真度与量子临界性》, 《物理评论 A》75，032109（2007）。[17] S. T. Amin、B. Mera、C. Vlachou、N. Paunkovi´c 和 V. R. Vieira, 《二维拓扑相变的保真度与乌尔曼联络分析》, 《物理评论B》98，245141（2018）。[18] H. T. Quan 和 F. M. Cucchietti, 《量子保真度与热相变》, 《物理评论 E》79，031101（2009）。[19] Y.-W. Dai, Q.-Q. Shi, S. Y. Cho, M. T. Batchelor, 和 H.-Q. Zhou, 《蜂窝自旋晶格中量子伊辛相互作用下的有限温度保真度与冯·诺依曼熵》, 《物理评论B》95，214409（2017）。[20] Y.-C. Liang, Y.-H. Yeh, P. E. M. F. Mendon¸ca, R. Y. Teh, M. D. Reid, 和 P. D. Drummond, 《混合态的量子保真度度量》, 《物理学进展报告》82，076001（2019）。[21] M. Bia·lo´nczyk, F. J. G´omez-Ruiz, 和 A. del Campo, 《有限温度下可积自旋链的乌尔曼保真度与保真度易感性：精确结果》, 《新物理学杂志》23，093033（2021）。[22] B. Mera, C. Vlachou, N. Paunkovi´c, V. R. Vieira, 和 O. Viyuela, 《由保真度和干涉洛施密特回波诱导度量揭示的有限温度动力学相变》, 《物理评论B》97，094110（2018）。[23] Y. C. Li, J. Zhang, 和 H.-Q. Lin, 《量子相干谱与量子相变》, 《物理评论B》101，115142（2020）。[24] S. Haldar, S. Roy, T. Chanda, 和 A. Sen(De), 《宏观与微观动力学量化指标对量子临界区域的响应》, 《物理评论研究》2，033249（2020）。[25] S. Roy, R. Moessner, 和 A. Das, 《利用局域体观测量中的非平衡特征定位拓扑相变》, 《物理评论B》95，041105（2017）。[26] X.-Y. Hou, Q.-C. Gao, H. Guo, 和 C.-C. Chien, 《有限温度下双淬火过程中的变形动力学量子相变》, 《物理评论B》106，014301（2022）。[27] N. O. Abeling 和 S. Kehrein, 《非零温度下横场伊辛模型中的量子淬火动力学》, 《物理评论B》93，104302（2016）。[28] A. A. Zvyagin, 《交错场诱导的量子自旋链动力学效应》, 《物理评论B》97，214425（2018）。[29] A. A. Zvyagin, 《具有配对的量子系统的脉冲动力学》, 《物理评论B》92，184507（2015）。[30] A. A. Zvyagin, 《脉冲作用后具有两种费米子的系统的非平衡动力学》, 《物理评论B》95，075122（2017）。[31] A. A. Zvyagin, 《动力学量子相变（综述文章）》, 《低温物理学》42，971（2016）。[32] A. Zvyagin, *Quantum Theory of One-dimensional SpinSystems*, 《哈尔科夫物理与数学丛书》（剑桥科学出版社，2010）。[33] S. Bandyopadhyay, A. Polkovnikov, 和 A. Dutta, 《量子淬火下局域弦状观测量的晚期临界行为》, 《物理评论B》107，064105（2023）。[34] G. A. P. Ribeiro 和 G. Rigolin, 《通过量子隐形传态在有限温度下检测量子临界点》, 《物理评论A》107，052420（2023）。[35] G. Ribeiro 和 G. Rigolin, 《通过量子隐形传态在有限温度下检测量子临界点：更多模型》, arXiv 预印本 arXiv:2311.00105（2023）。[36] P. Nandi, S. Bhattacharyya, 和 S. Dasgupta, 《在可积自旋模型中检测有限温度下的量子相界》, 《物理评论快报》128，247201（2022）。[37] M. Heyl, A. Polkovnikov, 和 S. Kehrein, 《横场伊辛模型中的动力学量子相变》, 《物理评论快报》110，135704（2013）。

[38] C. Karrasch 和 D. Schuricht，《非可积模型淬火后的动力学相变》，《物理评论B》87，195104（2013）。[39] J. N. Kriel, C. Karrasch, 和 S. Kehrein，《轴向次近邻伊辛链中的动力学量子相变》，《物理评论B》90，125106（2014）。[40] E. Canovi, P. Werner, 和 M. Eckstein，《一级动力学相变》，《物理评论快报》113，265702（2014）。[41] M. Heyl，《具有对称性破缺相的系统中的动力学量子相变》，《物理评论快报》113，205701（2014）。[42] J. M. Hickey, S. Genway, 和 J. P. Garrahan，《动力学相变、时间积分观测量与态的几何》，《物理评论B》89，054301（2014）。[43] F. Andraschko 和 J. Sirker，《动力学量子相变与洛施密特回波：转移矩阵方法》，《物理评论B》89，125120（2014）。[44] A. J. A. James 和 R. M. Konik，《利用链阵列矩阵乘积态研究二维空间中的量子淬火》，《物理评论B》92，161111（2015）。[45] S. Vajna 和 B. D´ora，《动力学相变的拓扑分类》，《物理评论B》91，155127（2015）。[46] M. Heyl，《动力学量子相变中的标度与普适性》，《物理评论快报》115，140602（2015）。[47] J. C. Budich 和 M. Heyl，《远离平衡时的动力学拓扑序参数》，《物理评论B》93，085416（2016）。[48] S. Vajna 和 B. D´ora，《区分动力学相变与平衡相变》，《物理评论B》89，161105（2014）。[49] J.-J. Zhou, W. Feng, G.-B. Liu, 和 Y. Yao，《单层与多层 Bi_4Br_4中的拓扑边缘态》，《新物理学杂志》17，015004（2015）。[50] N. Shumiya, M. S. Hossain, J.-X. Yin, Z. Wang, M. Litskevich, C. Yoon, Y. Li, Y. Yang, Y.-X. Jiang, G. Cheng, *et al.*，《高阶拓扑绝缘体中室温量子自旋霍尔边缘态的证据》，《自然·材料》21，1111（2022）。[51] M. Heyl，《动力学量子相变：综述》，《物理学进展报告》81，054001（2018）。[52] I. S. Gradshteyn 和 I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series and products* 2014 （学术出版社，）。[53] E. Lieb, T. Schultz, 和 D. Mattis，《反铁磁链的两个可解模型》，《物理学年鉴》16，407（1961）。[54] P. Pfeuty，《具有横场的一维伊辛模型》，《物理学年鉴》57，79（1970）。[55] W. P. Su, J. R. Schrieffer, 和 A. J. Heeger，《聚乙炔中的孤子》，《物理评论快报》42，1698（1979）。[56] W. P. Su, J. R. Schrieffer, 和 A. J. Heeger，《聚乙炔中的孤子激发》，《物理评论B》22，2099（1980）。[57] A. Kitaev，《精确求解模型及其推广中的任意子》，《物理学年鉴》321，2（2006）。[58] X.-Y. Feng, G.-M. Zhang, 和 T. Xiang，《自旋-1/2 模型，《物理评论快报》98, 087204 (2007). [59] A. Kitaev 和 C. Laumann, *Topological phases and quantum computation* 2010 101 (牛津大学出版社，) p. . [60] K. Sengupta、D. Sen 和 S. Mondal，二维模型中淬火动力学与缺陷产生的精确结果，《物理评论快报》100, 077204 (2008). [61] S. Mondal、D. Sen 和 K. Sengupta，Kitaev 模型和扩展Kitaev模型中的淬火动力学与缺陷产生，《物理评论B》78, 045101 (2008). [62] M. Schmitt 和 S. Kehrein，Kitaev蜂窝模型中的动力学量子相变，《物理评论B》92, 075114 (2015). [63] U. Bhattacharya、S. Dasgupta 和 A. Dutta，周期驱动Kitaev蜂窝模型中狄拉克点的动力学合并，《欧洲物理学杂志B辑》89, 1 2016( ). [64] J. Nasu、M. Udagawa 和 Y. Motome，Kitaev自旋液体的气化，《物理评论快报》113, 197205 (2014). [65] N. P. Armitage、E. J. Mele 和 A. Vishwanath，三维固体中的外尔和狄拉克半金属，《现代物理评论》90, 015001 (2018). [66] S. Rao，外尔半金属：简要综述，《印度科学院杂志》96:2, 1454 (2016). [67] R. Okugawa 和 S. Murakami，无自旋节点线与外尔半金属的普适相变和能带结构，《物理评论B》96, 115201 (2017). [68] A. A. Burkov、M. D. Hook 和 L. Balents，拓扑节点半金属，《物理评论B》84, 235126 (2011). [69] N. P. Armitage、E. J. Mele 和 A. Vishwanath，三维固体中的外尔和狄拉克半金属，《现代物理评论》90, 015001 (2018). [70] M. Yang、W. Luo 和 W. Chen，拓扑节点线半金属中的量子输运，《物理学进展：X》7, 2065216 (2022). [71] J.-J. Zhou、W. Feng、C.-C. Liu、S. Guan 和 Y. Yao，单层一溴化铋中的大带隙量子自旋霍尔绝缘体 Bi_4Br_4，《纳米快报》14, 4767 (2014)，pMID: 25058154. [72] C.-C. Liu、J.-J. Zhou、Y. Yao 和 F. Zhang，弱拓扑绝缘体与复合外尔半金属：$\beta - Bi_4X_4$ (X=Br, I)，《物理评论快报》116, 066801 (2016). [73] C.-H. Hsu、X. Zhou、Q. Ma、N. Gedik、A. Bansil、V. M. Pereira、H. Lin、L. Fu、S.-Y. Xu 和 T.-R. Chang，纯旋转对称性保护的拓扑晶体绝缘体 $\alpha - Bi_4Br_4$，《二维材料》6, 031004 (2019). [74] X. Li、D. Chen、M. Jin、D. Ma 及其他作者 Yanfeng Ge，准一维拓扑晶体绝缘体中的压力诱导相变和超导性 $\alpha - Bi_4Br_4$，《美国国家科学院院刊》116, 17696 (2019). [75] C. Yoon、C.-C. Liu、H. Min 和 F. Zhang，准一维高阶拓扑绝缘体，arXiv 预印本 arXiv:2005.14710 (2020). [76] A. Lahiri 和 S. Bera，外尔半金属中的动力学量子相变，《物理评论B》99, 174311 (2019).