核系统的纠缠熵

Chenyi Gu, [1] Z. H. Sun, [2] G. Hagen, [2,1] 和 T. Papenbrock[1,2]

[1] *Department of Physics and Astronomy, University of Tennessee, Knoxville, Tennessee 37996, USA*

[2] *Physics Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee 37831, USA*

我们研究了核系统中空穴空间的单粒子态与其补空间之间的纠缠熵。基于耦合簇方法得到的解析结果表明，在相互作用足够弱时，纠缠熵与粒子数涨落和空穴空间的耗尽数成正比。一般性论证也表明，核系统中的纠缠熵遵循体积律，而非面积律。我们通过计算配对模型和中子物质的纠缠熵，以及有限原子核的耗尽数，对这些结果进行了检验和验证。

arXiv:2303.04799v1 [nucl-th] 8 Mar 2023

I. 引言

纠缠是量子力学的一项关键属性 [1]。它指的是波函数的非局域特性，通常会使量子多体问题难以通过数值方法求解。“波函数关联”或“涨落”等说法常被用作纠缠的同义词。不过，纠缠的优势在于可以用熵来量化。本文关注的是中子物质和核模型基态的纠缠熵；当单粒子基被划分为两个互补集合时，便会产生这种纠缠熵。

纠缠在物理学的不同领域中得到了广泛研究 [2]。在壳模型计算中，理解纠缠有助于应用密度矩阵重整化群 [3, 4]。近年来，量子信息科学和量子计算的发展也重新激发了人们探索核系统中纠缠的兴趣 [5–13]。因此，更深入地理解纠缠或许能促进原子核的经典计算和量子计算。

下面定义用于量化量子系统纠缠程度的指标。假设希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 可分解为 $\mathcal{H}=\mathcal{H}_A\otimes\mathcal{H}_B$，其中涉及两个子系统的希尔伯特空间 A 和 B。基态 $|\Phi\rangle$ 的密度矩阵为

$$\rho=|\Phi\rangle\langle\Phi|\ , \tag{1}$$

对子系统 A 的约化密度矩阵，可通过对子系统 B求迹得到，即

$$\rho_A=\mathrm{Tr}_B\,\rho\ . \tag{2}$$

密度矩阵 ρ_A 和 ρ 是厄米的、半正定的（即它们的特征值均非负），并满足 $\mathrm{Tr}\,\rho=1$。如果 ρ_A 不能表示为纯态，即 $\mathrm{Tr}\,\rho_A^2<1$，我们就说它与 B 纠缠。熵或互信息等量可用于量化纠缠。本文考虑 R´enyi 熵 [14]

$$S_\alpha=\frac{1}{1-\alpha}\ln\mathrm{Tr}\,\rho_A^\alpha\ . \tag{3}$$

这里 $\alpha\in(0,1)\cup(1,\infty)$，冯·诺依曼熵是 R´enyi 熵在 $\alpha\to1$时的极限情形，即

$$S_1=\lim_{\alpha\to1}S_\alpha=-\,\mathrm{Tr}(\rho_A\ln\rho_A)\ . \tag{4}$$

对于具有局域相互作用的晶格系统，当系统被划分为两个子系统时，纠缠熵通常会随面积成比例增长（并带有一些对数修正） [2]。图1 展示了这一结果符合预期。蓝色子系统中的红色格点与白色补集相连，其数量与边界大小成正比。这使得三维系统中的纠缠熵遵循面积律。

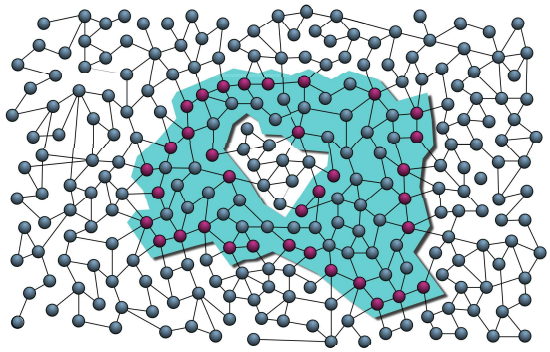

图 1. 晶格系统（格点和链路）划分为两个区域（分别以蓝色和白色表示）。蓝色区域中的红色格点与白色区域中的格点相连。经作者许可，转载自参考文献 [15]；另见参考文献 [2]。

Wolf [16] 以及 Gioev 和 Klich [17] 证明，对于 d 维中的费米子紧束缚哈密顿量和自由费米子，冯·诺依曼纠缠熵分别按 $S_1\sim L^{d-1}\log L$ 的形式标度，其中 L 是子系统 A的线性尺度。因此，这些费米子系统满足带有对数因子的面积律。Gioev 和 Klich[17] 以及 Klich [18]还证明，粒子数涨落 $(\Delta N)^2$ 通过以下关系给出了冯·诺依曼熵的上界和下界：

$$4(\Delta N)^2\le S_1\le\mathcal{O}(\log L)(\Delta N)^2\,. \tag{5}$$

Leschke 等人 [19] 将证明推广到了广义 R´enyi 纠缠熵 S_α。关于相互作用系统（以及精确可解系统）的推广，参见文献 [20, 21]。Masanes [22] 指出，对于费米子态，如果“（i）该态的关联衰减足够快，并且（ii）具有零能量密度的本征态数目不随体积呈指数增长”，则带有对数因子的面积律成立。

虽然我们预计原子核能够满足第一个条件，但第二个条件似乎并不成立。毕竟，原子核是开放量子系统，其中共振态和散射态十分常见。处理有限系统时，如何划分希尔伯特空间也是一个问题。我们将系统划分为参考态的单粒子态（空穴空间）及其补空间（粒子空间）。例如，Hartree-Fock 计算或球壳模型的简单填充都会产生这种划分。两个子空间中的单粒子态通常在位置空间中都是离域的。例如，Hartree-Fock轨道在相空间的能量曲面上局域，但在位置空间中却是弥散的。现在可以设想，在空穴空间和粒子空间中进行幺正基变换，使单粒子态在这两个划分中都变得局域 [23–25]。（不过，正交性要求可能会使单粒子态的局域性有所降低。）图2展示了理想情况。图中的红点表示位置空间中的空穴态。它们的最近邻距离约为 π/k_F，其中 k_F 是费米动量。浅蓝色区域表示参考态占据的“体积”。核体积之外的区域以浅灰色表示。黑点表示粒子空间中的态。它们的最近邻距离约为 π/Λ，其中 Λ 表示动量截断。因此，它们在位置空间中的密度高于红色空穴态的密度；而且，有限希尔伯特空间恒等算符的分辨率也要求在原子核占据的“体积”内有相当数量的粒子态。（灰色和浅蓝色区域中局域态的密度相同。）即使核相互作用的作用距离很短（并且可能是局域的），我们也可以看到，每个空穴态都与粒子态相关联。因此，我们预期粒子空间与空穴空间之间的纠缠熵遵循体积律。

这一预期在动量空间中同样成立。在那里，空穴态占据费米球（均匀分布），而粒子态占据其补空间。由于核相互作用在位置空间中是短程的，因此在动量空间中会变成长程的，从而也导致纠缠熵服从体积律。

对于原子核的晶格计算，也有类似的预期 [26]，其中单粒子基由位置空间中的立方晶格组成。考虑一个平均密度为 $n_0 \approx 0.16$ fm^{-3}的原子核。质量数为 A 的原子核占据体积 A/n_0，而其中可用的单粒子态数量

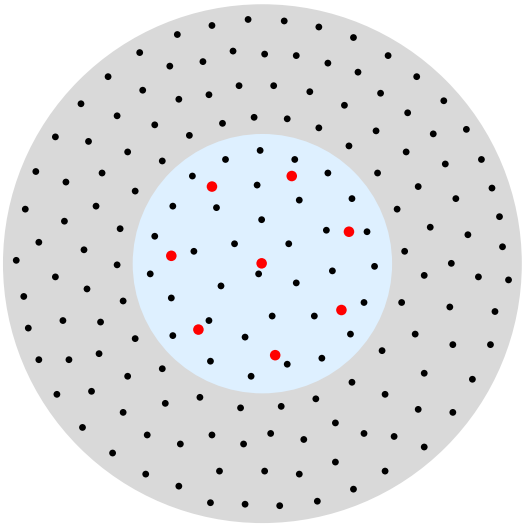

图 2. 有限球形基下核体积（以浅蓝色表示）及其补空间（以灰色表示）的位置空间示意图。红点表示（局域化的）空穴态，黑点则表示局域化的粒子态。前者（后者）的最近邻距离与费米动量（动量截断）成反比。因此，可以预期粒子态与空穴态之间的纠缠熵服从体积律。

该体积

$$\Omega = g_{\rm st}\frac{A}{a^3 n_0}\ , \tag{6}$$

其中，a 为晶格间距，$g_{\rm st}=4$ 为自旋/同位旋简并度。原子核的参考态由 A 个单粒子态组成（同样占据体积 A/n_0）。我们有

$$\Omega - A = \Omega\left(\frac{g_{\rm st}}{a^3 n_0} - 1\right) \tag{7}$$

对于典型的晶格间距 $a = 1.3$ fm 或 $a = 2$fm，[27,28], 我们分别得到 $\Omega - A \approx 10A$ 和 $2A$。因此，我们预期纠缠熵遵循体积律。

我们还注意到，对于 $a \to 0$，$\Omega \sim a^{-3}$，并回顾一下紫外截断为 $\Lambda = \pi/a$。因此，随着核相互作用截断的增大，纠缠预计也会增加。

本文结构安排如下。在第 II 节中，我们给出有限系统纠缠熵的解析结果。在第 III 节中，我们检验这些预测，并给出配对模型、中子物质和有限原子核的结果。

II. 解析结果

在本节中，我们利用耦合簇理论 [29–32] 推导 R´enyi 熵的解析结果，以及

空穴空间的粒子涨落及二者之间的相互关系。

A. 耦合簇理论

遵循标准耦合簇理论表述，对于含有 N 个费米子的多体系统，其基态波函数 $|\Psi\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle = e^{\hat{T}}|\Phi\rangle \,, \tag{8}$$

使用参考态

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^{N} \hat{a}_i^\dagger |0\rangle \,. \tag{9}$$

$\hat{}\,\hat{}\,\hat{}\,\hat{}$ 簇算符 $T = T_1 + T_2 + \cdots + T_N$ 包含所有可能的 k 粒子–k 空穴激发

$$\hat{T}_k = \frac{1}{(k!)^2} \sum_{\substack{i_1,\ldots,i_k;\\ a_1,\ldots,a_k}} t_{i_1\ldots i_k}^{a_1\ldots a_k} \hat{a}_{a_1}^\dagger \ldots \hat{a}_{a_k}^\dagger \hat{a}_{i_k} \ldots \hat{a}_{i_1} \,. \tag{10}$$

这里，指标 i_k 和 a_k 分别表示占据（空穴）和未占据（粒子）轨道。我们采用如下约定：指标 i, j 和 a, b 分别表示空穴态和粒子态。为求得耦合簇振幅 $t_{i_1\ldots i_k}^{a_1\ldots a_k}$，我们求解振幅方程

$$\left\langle \Phi_{i_1 i_2 \ldots}^{a_1 a_2 \cdots} | e^{-\hat{T}} \hat{H} e^{\hat{T}} | \Phi_0 \right\rangle = 0 \tag{11}$$

其中

$$\left|\Phi_{i_1 i_2 \ldots}^{a_1 a_2 \cdots}\right\rangle \equiv \hat{a}_{a_1}^\dagger \hat{a}_{a_2}^\dagger \cdots \hat{a}_{i_2} \hat{a}_{i_1} \left|\Phi_0\right\rangle \tag{12}$$

然后通过以下公式计算能量

$$E = \left\langle \Phi | e^{-\hat{T}} \hat{H} e^{\hat{T}} | \Phi \right\rangle \,. \tag{13}$$

为了分析配对模型和中子物质的结果，我们采用双激发耦合簇（CCD）近似。此处簇算符为 $T = T_2$，基态变为

$$|\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle = \exp(T_2)|\Phi\rangle \,. \tag{14}$$

省略单激发（即 1 粒子–1 空穴激发）是合理的，因为配对模型哈密顿量只会改变成对粒子的占据数；此外，中子物质是在动量空间中构建的，而动量守恒会禁止单粒子激发。对于其他有限系统，在 Hartree-Fock基中，单激发的贡献很小。与基态相关的 N体密度矩阵为

$$\hat{\rho} = \frac{|\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle\langle\Psi_{\mathrm{CCD}}|}{\langle\Psi_{\mathrm{CCD}}|\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle} \,. \tag{15}$$

由于我们将粒子和空穴分开，因此可以将态表示为以下乘积，

$$\left|\Phi_{i_1 i_2 \ldots}^{a_1 a_2 \cdots}\right\rangle = |a_1 a_2 \cdots\rangle \otimes |i_1^{-1} i_2^{-1} \cdots\rangle \,. \tag{16}$$

通过对密度矩阵 ρ 中的粒子态求迹，可得到空穴空间约化密度矩阵 ρ_{H}。 ρ_{H} 的矩阵元为

$$\begin{aligned}
\langle|\rho_{\mathrm{H}}|\rangle &= \langle\Phi|\hat{\rho}|\Phi\rangle \,, \\
\langle i_1^{-1} i_2^{-1}|\rho_{\mathrm{H}}|j_1^{-1} j_2^{-1}\rangle &= \sum_{a_1<a_2} \langle\Phi_{i_1 i_2}^{a_1 a_2}|\hat{\rho}|\Phi_{j_1 j_2}^{a_1 a_2}\rangle \,, \\
&\vdots \\
\langle i_1^{-1}\cdots i_N^{-1}|\rho_{\mathrm{H}}|j_1^{-1}\cdots j_N^{-1}\rangle &= \\
&\sum_{a_1<\cdots<a_N} \langle\Phi_{i_1\cdots i_N}^{a_1\cdots a_N}|\hat{\rho}|\Phi_{j_1\cdots j_N}^{a_1\cdots a_N}\rangle \,.
\end{aligned} \tag{17}$$

方程（17）中的第一行是对粒子空间中的真空态求迹得到的，第二行则是对双粒子态求迹得到的；最后两行的迹是对 N粒子态求得的。由于我们采用 CCD 近似，所有对奇数个粒子态求得的迹都为零。我们可以轻易验证 $\mathrm{Tr}\,\rho_{\mathrm{H}} = 1$。

B. 近似熵

精确计算所有矩阵元颇具挑战，因此我们采用近似

$$\begin{aligned}
|\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle &\approx \left(1 + \hat{T}_2\right)|\Phi\rangle \\
&= |\Phi\rangle + \frac{1}{4}\sum_{abij} t_{ij}^{ab} |\Phi_{ij}^{ab}\rangle \,.
\end{aligned} \tag{18}$$

$\hat{}$ 假设 T_2 在下文所规定的意义下很小。$\hat{}$ 因此，我们通过求解耦合簇方程获得 T_2 振幅，但在计算密度矩阵时仅采用波函数的线性化近似。于是，

$$\hat{\rho} = C^{-1} |\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle\langle\Psi_{\mathrm{CCD}}| \,, \tag{19}$$

归一化系数为

$$\begin{aligned}
C &\equiv \langle\Psi_{\mathrm{CCD}}|\Psi_{\mathrm{CCD}}\rangle \\
&= 1 + t^2 \,.
\end{aligned} \tag{20}$$

这里我们使用了简写

$$t^2 \equiv \frac{1}{4}\sum_{ijab} t_{ij}^{ab} t_{ij}^{ab} \,. \tag{21}$$

近似（18）对于 $t^2 \ll 1$成立，而这个 $\hat{}$ 量化了 T_2 较小的程度。对粒子空间求迹可得约化密度矩阵

$$\hat{\rho_{\mathrm{H}}} = \frac{1}{C}\left(|\rangle\langle| + \sum_{a<b} t_{ij}^{ab} t_{kl}^{ab} \left|k^{-1} l^{-1}\right\rangle \left\langle j^{-1} i^{-1}\right|\right) \,. \tag{22}$$

这里，$|\rangle$ 表示空穴空间中的真空态。将此表达式改写为分块矩阵很有用

$$\hat{\rho_{\rm H}} = \frac{1}{1+t^2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{\rho}_2 \end{bmatrix} . \tag{23}$$

这里，双空穴–双空穴矩阵 $\hat{\rho}_2$ 的元素为

$$\rho_{ij}^{kl} = \sum_{a<b} t_{ij}^{ab} t_{kl}^{ab} . \tag{24}$$

对于含有 N 个费米子的系统，我们有 $i<j$ 和 $k<l$，矩阵 $\hat{\rho}_2$ 的维数为 $D \equiv N\ (N-1)\ /2$。作为检验，我们看到

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_2 = \sum_{i<j} \rho_{ij}^{ij} = t^2 , \tag{25}$$

并且我们确实有 $\mathrm{Tr}\hat{\rho}_H = 1$。表达式（23）是精确的，可用于利用方程（18）、（3）和（4）数值计算该态的熵。

对于下文，我们将其改写为

$$\hat{\rho}_2 = t^2 \hat{\sigma} , \tag{26}$$

其中 $\hat{\sigma}$ 是密度矩阵，即 $\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma} = 1$。

为计算 Rényi 熵（3），我们使用

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_H^{\alpha} = (1+t^2)^{-\alpha}\left(1 + t^{2\alpha}\,\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}^{\alpha}\right) . \tag{27}$$

从这里开始，我们将讨论范围限制在 $\alpha \geq 1$。为了获得进一步的解析见解，我们使用 $t^2 \ll 1$。于是，

$$S_{\alpha} = \frac{t^{2\alpha}\,\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}^{\alpha} - \alpha t^2}{1-\alpha} + \mathcal{O}(t^4) + \mathcal{O}(t^{4\alpha}) . \tag{28}$$

对于 $\alpha \to 1$，我们运用洛必达法则，得到

$$S_1 = t^2\left[1 - \mathrm{Tr}\,(\hat{\sigma}\log\hat{\sigma}) - \log t^2\right] + \mathcal{O}(t^4) . \tag{29}$$

矩阵 $\hat{\sigma}$ 的维数为 D。因此，$0 \leq -\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}\log\hat{\sigma}) \leq \log D$。这里，当 $\hat{\sigma}$ 除了一个特征值外，其余特征值均为零时，取到最小值；当所有特征值都相等时，取到最大值。方程（28）和（29）是本节的主要结果。由于我们假设 $t^2 \ll 1$,

$$S_{\alpha} = \frac{\alpha}{\alpha-1}t^2 + \mathcal{O}(t^{2\alpha}) + \mathcal{O}(t^4) \quad \text{for } \alpha > 1, \tag{30}$$

即，Rényi 熵在指标 α足够大时，不再依赖矩阵（26）的特征值。

对于任意弱的相互作用（即 $t^2 \to 0$），熵（28）和（29）还可进一步简化，我们得到其渐近行为

$$S_{\alpha} \to \begin{cases} -t^2\log t^2 & \text{for } \alpha = 1 \text{ and } t^2 \to 0 , \\ \dfrac{\alpha}{\alpha-1}t^2 & \text{for } \alpha > 1 \text{ and } t^2 \to 0 . \end{cases} \tag{31}$$

注意，渐近结果与方程（σ 中的矩阵26）无关。这些结果的推导还明确表明，极限 $\alpha \to 1$ 和 $t^2 \to 0$ 不可交换。

C. 空穴空间中的粒子数

空穴空间中粒子的数算符为

$$\hat{N}_{\rm H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_i . \tag{32}$$

其矩阵表示（基底最多包含两个空穴）为

$$\hat{N}_{\rm H} = \begin{bmatrix} N & 0 \\ 0 & N-2 \end{bmatrix} . \tag{33}$$

该矩阵具有与方程$\rho_{\rm H}$ （23）中的 $\hat{}$ 相同的分块结构（及维数）。因此，

$$\begin{aligned} \langle N_{\rm H}\rangle &\equiv \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{\rm H}\hat{N}_{\rm H}) \\ &= N - 2t^2 + \mathcal{O}(t^4) , \end{aligned} \tag{34}$$

and

$$\begin{aligned} \langle N_{\rm H}^2\rangle &\equiv \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_{\rm H}\hat{N}_{\rm H}^2) \\ &= N^2 - 4t^2(N-1) + \mathcal{O}(t^4) , \end{aligned} \tag{35}$$

粒子数涨落为

$$\begin{aligned} (\Delta N_{\rm H})^2 &\equiv \langle N_{\rm H}^2\rangle - \langle N_{\rm H}\rangle^2 \\ &= 4t^2 + \mathcal{O}(t^4) . \end{aligned} \tag{36}$$

因此，$t^2 \approx (\Delta N_{\rm H})^2/4$，将此表达式代入方程（28）和（29）可知，Rényi 熵[及其渐近表达式（31）] 都是粒子数涨落的函数。这些表达式将开创性成果 [18] 推广至有限的相互作用费米子系统。

如下文将会看到，计算期望值（34）远比计算粒子数涨落（36）或纠缠熵简单。特别是，参考态的耗尽数 [33]

$$\begin{aligned} \delta N_{\rm H} &\equiv N - \langle N_{\rm H}\rangle \\ &= 2t^2 + \mathcal{O}(t^4) \end{aligned} \tag{37}$$

在相互作用多体系统中计算起来很简单，这也使我们能够将纠缠熵表示为这一量的函数。因此，

$$\frac{1}{4}(\Delta N_{\rm H})^2 \approx \frac{1}{2}(\delta N_{\rm H}) \approx t^2 \tag{38}$$

而这一关系的修正项是 $\delta N_{\rm H}$ 或 $(\Delta N_{\rm H})^2$ 或 t^2 的更高次幂。

在 CCD 基态近似（ T_2 18）中纳入更高次的 项后，熵与粒子数涨落之间的正比关系不再成立。我们的解析结果（28）、（29）和（31），结合（38），将结果 [18] 推广到了弱相互作用的有限费米系统。

III. 核系统

A. 配对模型

可精确求解的配对模型 [34] 有助于研究纠缠熵。该模型由 $\Omega/2$个双重简并且等间距的轨道组成，每个轨道有两种可能的自旋态 $\sigma = \pm 1$。其哈密顿量为

$$\begin{aligned}\hat{H} =& \delta \sum_{p\sigma} (p-1) a^{\dagger}_{p\sigma} a_{p\sigma} \\ & - \frac{1}{2} g \sum_{pq} a^{\dagger}_{p+} a^{\dagger}_{p-} a_{q-} a_{q+} \ .\end{aligned} \tag{39}$$

取 $p, q = 1, 2, \ldots, \Omega/2$。不失一般性，我们将轨道间距设为 $\delta = 1$，即所有能量（以及耦合 g）均以 δ为单位。

我们考虑半填充时的模型，此时轨道要么为空，要么被双重占据。对于足够小的耦合强度，CCD近似可以准确求解配对模型 [35]。

我们求解双激发振幅 t^{ab}_{ij}，使用方程并以 $\langle \Phi^{ab}_{ij}|$(11)为左矢态。随后我们计算约化密度矩阵（23）和 R´ényi 熵（3）。计算冯·诺依曼熵（4）时，我们对约化密度矩阵进行对角化。结果如图3所示。实心和空心标记分别表示 $\alpha = 1$ 和 $\alpha = 2$的结果，点划线和虚线分别表示解析结果（30）和（31），并结合方程（38）。不同的耦合强度 g 由标记的颜色和形状区分。相同标记表示含有一至十二对粒子系统的结果。随着耦合强度增大以及粒子对数增加，熵（和粒子数涨落）均会增大。总的来说，我们看到，对于足够弱的相互作用，即 $(\Delta N_{\mathrm{H}})^2$的值足够小时，我们的解析结果与数据吻合。

数值结果与解析结果之间的一致性，可以通过绘制两者绝对差值相对于数值结果的归一化值来进一步考察。图 4 展示了这一结果。我们看到，S_1 的解析结果可能只有在 $(\Delta N_{\mathrm{H}})^2 \to 0$时才渐近达到；从图 3中也可以预期这一点。我们还看到，数值结果与解析结果之间的差值 ΔS_2 如预期为 S_2^2量级。我们认为，$g/\delta = 10^{-3}$ 时观察到的偏离这一规律的现象是由数值精度限制造成的；值得注意的是，ΔS 接近机器精度。

当然，一个关键问题是，随着系统尺寸增大，纠缠熵如何变化。对于较小的相互作用强度g/δ，我们可以利用二阶微扰理论解析地回答这个问题。我们将簇振幅 t^{ab}_{ij}写为

$$t^{ab}_{ij} \approx \frac{\langle ab|\hat{v}|ij\rangle}{\varepsilon^{ab}_{ij}} \ , \tag{40}$$

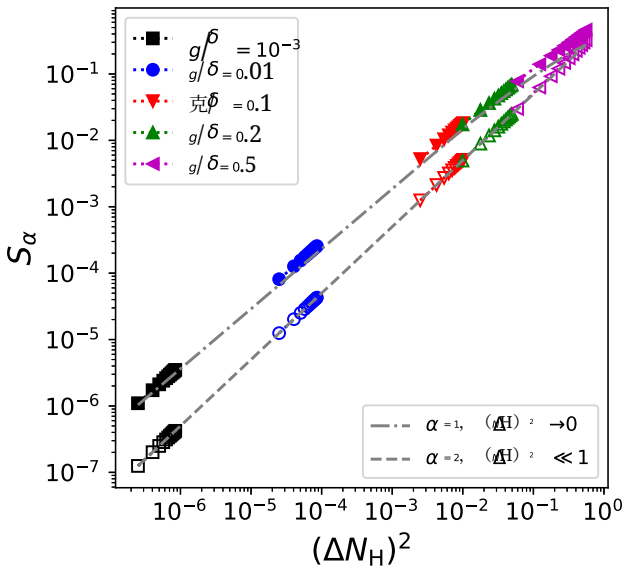

图 3. 半填充配对模型中，空穴空间约化空穴空间密度矩阵 ρ_{H} 的 Rényi 熵 S_1（实心标记）和 S_2（空心标记）随空穴空间的粒子数涨落（ΔN_{H}）^{2} 的变化，其中 $\delta = 1.0$，耦合强度不同，具体如图所示。点划线和虚线分别表示 $\alpha = 1$ 和 $\alpha = 2$ 的解析结果，它们适用于图中所示的 t^2 取值。标记的颜色和形状表示耦合强度；对于给定的耦合，形状相同的标记对应一至十二对粒子的结果。熵随粒子对数增加而增大，也随耦合强度增大而增大。

其中，对于配对模型，$\varepsilon^{ab}_{ij} = \varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_a - \varepsilon_b$ 且 $\varepsilon_p \equiv (p-1)\delta$。因此，

$$\begin{aligned} t^2 &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \sum_{a=\frac{N}{2}+1}^{\frac{\Omega}{2}} \frac{g^2}{4\delta^2 (i-a)^2} \\ &\approx \frac{g^2}{16\delta^2} \sum_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\int_{\frac{N}{2}+1}^{\frac{\Omega}{2}} \frac{1}{(i-a)^2} da \right] \\ &\approx \frac{g^2}{16\delta^2} \int_1^{\frac{N}{2}} \left[\frac{1}{i - \frac{\Omega}{2}} - \frac{1}{i - \frac{N}{2} - 1} \right] di \\ &= \frac{g^2}{16\delta^2} \log \frac{N(\Omega - N)}{2(\Omega - 2)} \\ &\approx \frac{g^2}{16\delta^2} \log \frac{N}{4} \end{aligned} \tag{41}$$

其中，在半填充时为 $N = \Omega/2$。这里，最后一步在 $N \gg 1$ 时成立，并且我们使用欧拉–麦克劳林公式，通过积分近似求和。该近似引入了阶为 $\mathcal{O}(N^0)$ 的误差。

为说明这一点，我们计算半填充时的相对误差（$\Omega = 2N$）

$$\varepsilon = \frac{\left| t^2 - \frac{g^2}{16\delta^2} \log \frac{N^2}{4(N-1)} \right|}{t^2} \ , \tag{42}$$

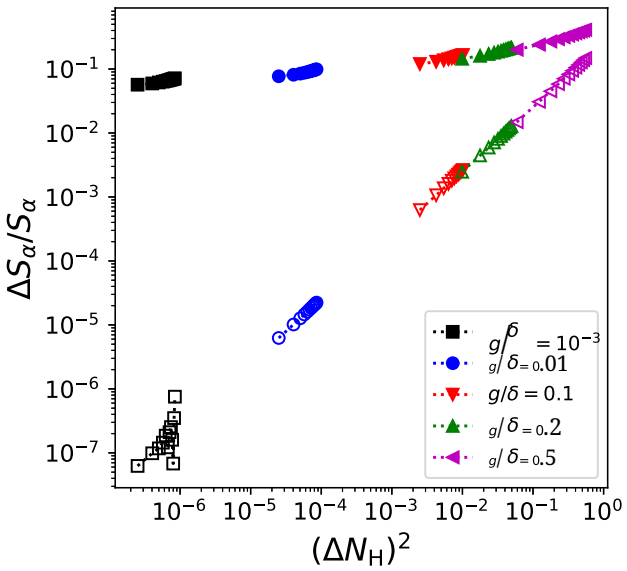

图 4. 数值熵与解析 R´enyi 熵之间的绝对差值，相对于数值熵归一化，并随半填充配对模型中空穴空间的粒子数涨落（$\Delta N_{\rm H}$）^{2} 变化。 S_1 （实心标记）和 S_2 （空心标记）对应不同结果，$\delta = 1.0$ 及不同耦合 g 如图所示。标记的颜色和形状表示耦合强度；对于给定耦合，相同的标记表示一至十二对粒子的结果。

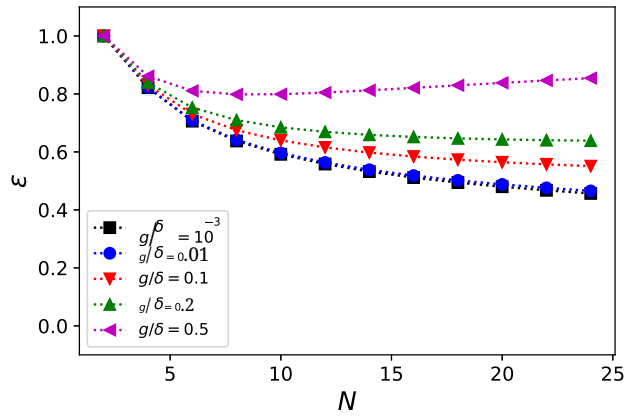

图 5. 近似误差随粒子数的变化，其中 $\delta = 1.0$和 $g = 1e-4$， $1e-3$, $1e-2$， $1e-1$， $2e-1$， $5e-1$。

并在图 5中展示结果。我们可以看到，当 g 足够小时，方程 (40) 是成立的，而 $t^2 \propto \log(N)$ 是主导近似。因此，对于 $\alpha \geq 2$ ，我们有 $S_\alpha \propto \log(N)$。这与一维费米系统的预期一致 [19]。

B. 中子物质

中子物质对于理解富中子原子核和中子星具有重要意义。这里，我们考虑一个基于明尼苏达势 [36]的简单但并非平凡的中子物质模型。与更现实的描述（例如手征有效场论框架下的描述）相比，这是一个简化模型，并且只采用二体力。哈密顿量由动能 $\hat{}\ t_0$ 和明尼苏达势 $\hat{}v$ 组成。

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I = \sum_{i=1}^{A} \hat{t}_0\left(x_i\right) + \sum_{i<j}^{A} \hat{v}\left(r_{ij}\right) \ . \tag{43}$$

明尼苏达势由一个排斥核和一个短程吸引组成，并采用双粒子间距 r 的指数函数 $\exp(-\alpha_i r^2)$。我们使用立方盒中的离散动量态 $|k_x, k_y, k_z\rangle$ 作为基来计算中子物质，并施加周期性边界条件。这遵循了文献 [35]，中的耦合簇计算，并使用了 Python 笔记本 [37]。

立方动量态的数量为 $(2N_{\max}+1)^3$。每个动量态的自旋简并度为$g_{\rm st} = 2$。我们将计算限制在密度为 $n \approx 0.08\ \mathrm{fm}^{-3}$ 的中子物质；这约为核物质饱和密度的一半。对于 N 个中子，体积为 L^3 ，其中 $L = (N/n)^{1/3}$；计算中采用粒子数为 $N = 14$,38,54,66,114 的闭壳层组态。关于基空间的详细信息见文献 [37, 38]。

我们采用了仅基于梯形图的双激发耦合簇近似简化版本。对于明尼苏达势而言，该方法具有足够高的精度 [38] ，并且与辅助场扩散蒙特卡罗（辅助场扩散蒙特卡罗）方法 [39]所得的近乎精确结果一致。

相似变换哈密顿量 $e^{-T_2} H e^{T_2}$ 的相关矩阵元为

$$\begin{aligned}
\bar{H}_{ij}^{ab} &= \left\langle \vec{k}_a \vec{k}_b | v | \vec{k}_i \vec{k}_j \right\rangle \\
&+ P(ab) \sum_c f_c^b t_{ij}^{ac} \\
&- P(ij) \sum_k f_j^k t_{ik}^{ab} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{cd} \left\langle \vec{k}_a \vec{k}_b | v | \vec{k}_c \vec{k}_d \right\rangle t_{ij}^{cd} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{kl} \left\langle \vec{k}_k \vec{k}_l | v | \vec{k}_i \vec{k}_j \right\rangle t_{kl}^{ab} \ .
\end{aligned} \tag{44}$$

这里引入了福克矩阵，其矩阵元为

$$f_q^p = \left\langle \vec{k}_p | t_0 | \vec{k}_q \right\rangle + \sum_i \left\langle \vec{k}_p \vec{k}_i | v | \vec{k}_q \vec{k}_i \right\rangle \ , \tag{45}$$

且 $P(pq)$ 是一个置换算符。求解方程 $\bar{H}_{ij}^{ab} = 0$ ，即可得到振幅 t_{ij}^{ab}。

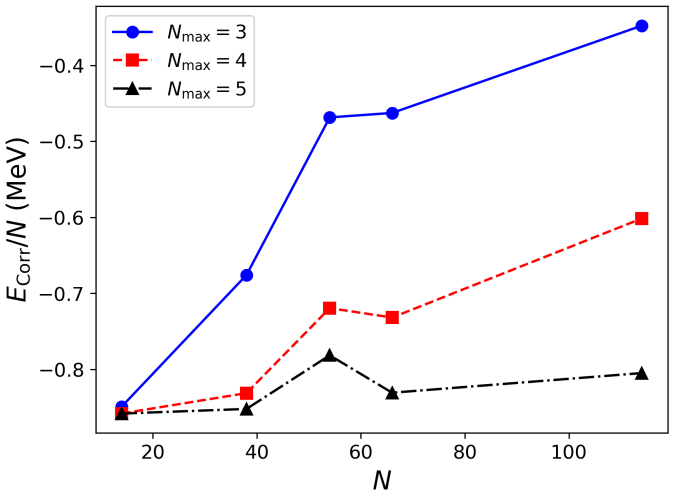

图 6. 不同动量空间大小下， $N = 14$、38、54、66、114 个中子时每个中子的关联能。

图 6 展示了每个中子的关联能随中子数的变化。关联能定义为 CCD能量（13）与 Hartree-Fock能量之差 E_{HF}

$$E_{\mathrm{HF}} = \sum_i \left\langle \vec{k}_i | t_0 | \vec{k}_i \right\rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left\langle \vec{k}_i \vec{k}_j | v | \vec{k}_i \vec{k}_j \right\rangle \qquad (46)$$

参考态的。我们看到，关联能对 N 的依赖较弱（并逐渐趋于常数），其中 $N_{\max} = 5$。我们将 $N = 54$处的峰值归因于有限尺寸效应，即壳层振荡。值得注意的是，采用扭转平均边界条件 [38, 40, 41]可以减弱这些壳层振荡。

表 I 给出了 t^2 由方程 (21) 得到的数值，适用于不同的$N_{\max}$。我们看到， $t^2 \ll 1$这是应用我们关于熵的解析结果所必需的条件，仅在 $N \lesssim 66$时成立。因此，我们将对中子物质的分析限定在 $N \leq 66$。

	$N = 14$	$N = 38$	$N = 54$	$N = 66$	$N = 114$
$N_{\max} = 3$	0.106	0.298	0.246	0.475	1.239
$N_{\max} = 4$	0.106	0.322	0.299	0.557	1.431
$N_{\max} = 5$	0.106	0.324	0.308	0.581	1.565

表 I. 随着动量空间大小增加，不同中子物质模型 $N = 14$、38、54、66、114 的 t^2 数值。

我们通过如下方式划分单粒子基来计算纠缠熵：费米球，即闭壳层组态的 Hartree-Fock 态中被占据的晶格点集合，是空穴空间；所有其他晶格点则构成粒子空间。图 7显示了中子物质的 Rényi 纠缠熵 ，其对应的阶数为 S_α，适用于 $\alpha = 1$、2、4 和 8，并以中子数为函数

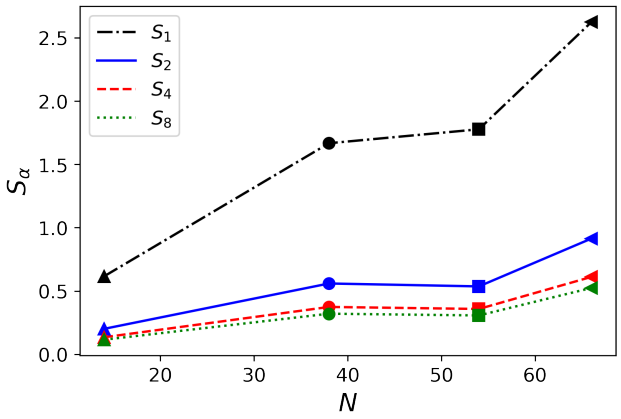

图 7. 动量空间中，R´ényi 熵（冯·诺依曼熵 S_1 作为 R´ényi 熵的极限情形表示）随中子数$N = 14$ 的变化（上三角形）、$N = 38$ （圆形）、 $N = 54$ （正方形）、$N = 66$ （左三角形）。

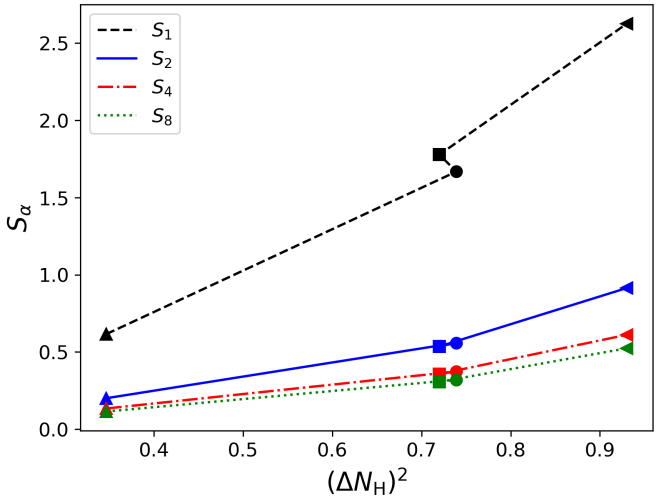

图 8. 动量空间中，R´ényi 熵（冯·诺依曼熵 S_1 作为 R´ényi 熵的极限情形表示）随粒子数涨落的变化，其中 $N = 14$ （上三角形）、 $N = 38$ （圆形）、 $N = 54$（正方形）、 $N = 66$ （左三角形）。

表示 N。熵随中子数增加而近似线性增长（而 $N = 54$ 再次是一个离群值）。这是意料之中的，因为短程明尼苏达势将费米球与粒子空间中的所有动量态耦合起来。因此，在动量空间中，中子物质遵循体积定律。

图 8 显示了纠缠熵随粒子数涨落的变化。与前面一样，两者之间的关系近似呈线性。

本节的结果表明，中子物质在动量空间中的纠缠熵近似正比于中子数；它们也近似正比于

粒子数涨落。后一结果不如配对模型中的结果精确。这是因为 T_2 振幅的大小相当显著。也就是说，我们有 $t^2 < 1$，但并非真正的 $t^2 \ll 1$。

C. 有限原子核

计算有限原子核的纠缠熵是一项计算上极具挑战性的任务：模型空间由$\mathcal{O}$个单粒子态构成，而完成这项任务所需的空穴空间密度矩阵是一个多体算符。我们转而使用耗尽数（37）作为纠缠判据，因为在簇振幅较小时，耗尽数与 Rényi 熵成正比，见方程（30）和（38）。正如我们将在下一段中所述，利用耦合簇理论可以准确计算耗尽数。相比之下，空穴空间的粒子数涨落是两个大数相消后得到的一个小数。由于耦合簇方法不是厄米的，因此无法保证粒子数涨落非负。

我们使用参考文献 [42] 中的相互作用，对闭壳层原子核 ^{4}He、^{16}O、 ^{40}Ca 和 ^{100}Sn 进行耦合簇单激发与双激发（CCSD）计算。CCSD 近似可以描述约 90% 的关联能，且是一种广延尺寸方法，即关联能的误差与质量数 A 成正比。在计算中，我们采用包含 15 个主要谐振子壳层的模型空间，振子间距为 $\hbar\omega = 16$ MeV。我们进行 Hartree-Fock 计算以获得参考态 $|\Phi\rangle$，并由此确定空穴空间。随后求解 CCSD 方程，并计算相似变换哈密顿量 H 其中

$$\overline{O} \equiv e^{-\hat{T}} \hat{O} e^{\hat{T}} \tag{47}$$

对于任意算符 $\hat{O}$。我们求解 H 的左基态 $\langle L| \equiv \langle\Phi|(1+\Lambda)$；其中 Λ 是一个单粒子-单空穴和双粒子-双空穴退激发算符。随后我们计算空穴空间占据数

$$\langle N_{\rm H}\rangle = \langle L|\overline{N}|\Phi\rangle \ , \tag{48}$$

耗尽数变为

$$\delta A = A - \langle N_{\rm H}\rangle \tag{49}$$

对于质量数为 A 的原子核。这种方法对于较大的耦合簇振幅同样适用。

图 9 展示了采用参考文献 [42] 中的相互作用计算得到的耗尽数（49），对应 ^{4}He、 ^{16}O、 ^{40}Ca 和 ^{100}Sn，并给出了其随质量数 A变化的结果。标签中的数字表示分别用于二体和三体相互作用的动量截断值（单位：fm^{-1}）。对于“较硬”的相互作用，即动量截断较大的情况，耗尽数更大，这与我们的预期一致。

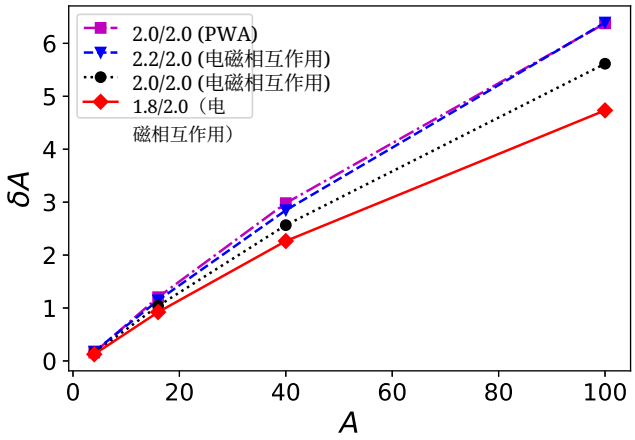

图9. 原子核^{4}He、 ^{16}O、 ^{40}Ca 和 ^{100}Sn 中空穴空间的耗尽数 δA，采用参考文献 [42] 所示的相互作用计算，随质量数 A的变化。

这些相互作用的动量截断较大，因此耗尽数也更大，这符合我们的预期。我们还发现，耗尽数近似为一个广延量（即与 A成线性关系）。它随 A 的标度关系显然更接近 A^1，而非 $A^{2/3}$，因此更符合体积律而非面积律。这与第I节中的论述一致。

IV. 总结

我们基于将单粒子空间划分为空穴和粒子，研究了核系统中的纠缠。这是有限系统中最自然的选择。基于耦合簇理论的解析论证表明，对于 $\alpha > 1$，Rényi 熵 S_α 与数目涨落和空穴空间的耗尽数成正比。这将针对非相互作用费米子的解析论证推广到了相互作用足够弱的系统。对于任意弱相互作用，我们还得到了冯·诺依曼熵 S_1的普适结果。

我们利用配对模型的数值解验证了解析结果。对于中子物质的半现实模型，我们表明，费米球的纠缠熵与空穴空间的粒子数涨落以及中子数近似成正比。前者证实了解析结果，后者则符合短程相互作用的预期。最后，我们使用手征有效场论中的相互作用，计算了有限原子核中的耗尽数。我们发现，纠缠见证量随所用相互作用截断的增大而增加，并且再次呈现出与质量数近似线性的增长。

致谢

本材料基于美国能源部科学办公室核物理办公室资助的研究工作，资助编号为 DE-FG02-96ER40963、DE-SC0021642 和 DE-SC0018223（NUCLEI SciDAC-4 合作项目）、NUCLEI SciDAC-5 合作项目，以及国家量子信息科学研究中心的资助。

美国能源部。计算时间由理论与实验创新及新型计算影响（INCITE）计划提供。本研究使用了位于橡树岭国家实验室的橡树岭领导力计算设施的资源；该设施由美国能源部科学办公室根据合同编号 DE-AC05-00OR22725 提供支持。

[1] Ryszard Horodecki、Pawe-l Horodecki、Micha-l Horodecki 和 Karol Horodecki，《量子纠缠》，《现代物理评论》81，865–942（2009）。[2] J. Eisert、M. Cramer 和 M. B. Plenio，《专题综述：纠缠熵的面积律》，《现代物理评论》82，277–306（2010）。[3] ¨O. Legeza、L. Veis、A. Poves 和 J. Dukelsky，《用于核结构计算的先进密度矩阵重整化群方法》，Phys. Rev. C 92，051303（2015）。[4] A. Tichai、S. Knecht、A. T. Kruppa、¨O. Legeza、C. P. Moca、A. Schwenk、M. A. Werner 和 G. Zarand，《将介质内相似性重整化群与密度矩阵重整化群相结合：壳层结构与信息熵》，arXiv:2207.01438（2022）。[5] Silas R. Beane、David B. Kaplan、Natalie Klco 和 Mar- tin J. Savage，《强相互作用中的纠缠抑制与涌现对称性》，Phys. Rev. Lett. 122，102001（2019）。[6] Caroline Robin、Martin J. Savage 和 Nathalie Pillet，《自洽核结构计算中的纠缠重排》，Phys. Rev. C 103，034325（2021）。[7] Javier Faba、Vicente Mart´ín 和 Luis Robledo，《可解模型中的关联能与量子关联》，Phys. Rev. A 104，032428（2021）。[8] A. T. Kruppa、J. Kov´acs、P. Salamon、 ¨O. Legeza 和 G. Zar´and，《纠缠与资深度》，Phys. Rev. C 106，024303（2022）。[9] Ehoud Pazy，《核结构中短程关联对的轨道纠缠熵》（2022）。[10] Dong Bai 和 Zhongzhou Ren，《少核子散射中的纠缠生成》，Phys. Rev. C 106，064005（2022）。[11] Denis Lacroix、A. B. Balantekin、Michael J. Cervia、Amol V. Patwardhan 和 Pooja Siwach，《非高斯量子涨落在中微子纠缠中的作用》，Phys. Rev. D 106，123006（2022）。[12] Aurel Bulgac、Matthew Kafker 和 Ibrahim Abdurrahman，《费米子多体系统中的复杂性与纠缠度量》，arXiv 预印本，arXiv:2203.04843（2022）。[13] Calvin W. Johnson 和 Oliver C. Gorton，《核壳模型中的质子-中子纠缠》，arXiv 预印本，arXiv:2210.14338（2022）。[14] Alfr´ed R´enyi，《熵与信息的度量》，载于 *Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*，*Volume 1: Contributions to the Theory of Statistics*，论文集

选自《伯克利数学统计与概率研讨会》，Jerzy Neyman 编（加利福尼亚大学出版社，加利福尼亚州伯克利，1961 年），第 547–561 页。[15] J. Eisert、M. Cramer 和 M. B. Plenio，“纠缠熵的面积律——综述”（2008），10.48550/arXiv.0808.3773。[16] Michael M. Wolf，“费米子的熵面积律违反”，Phys. Rev. Lett. 96, 010404 (2006)。[17] Dimitri Gioev 和 Israel Klich，“任意维度费米子的纠缠熵与 Widom猜想”，Phys. Rev. Lett. 96, 100503 (2006)。[18] Israel Klich，“费米海中的熵下界与粒子数涨落”，Journal of Physics A: Mathematical and General 39, L85–L91 (2006)。[19] Hajo Leschke、Alexander V. Sobolev 和 Wolfgang Spitzer，“自由费米气体基态的 Rényi 纠缠熵标度：严格证明”，Phys. Rev. Lett. 112, 160403 (2014)。[20] Thomas Barthel、S´ebastien Dusuel 和 Julien Vidal，“超越自由情形的纠缠熵”，Phys. Rev. Lett. 97, 220402 (2006)。[21] M. B. Plenio、J. Eisert、J. Dreißig 和 M. Cramer，“熵、纠缠与面积：谐振晶格系统的解析结果”，Phys. Rev. Lett. 94, 060503 (2005)。[22] Llu´ís Masanes，“低能态的熵面积律”，Phys. Rev. A 80, 052104 (2009)。[23] J. M. Foster 和 S. F. Boys，“正则组态相互作用程序”，《现代物理评论》32, 300–302 (1960)。[24] Clyde Edmiston 和 Klaus Ruedenberg，“局域化的原子与分子轨道”，《现代物理评论》35, 457 464 1963– ( )。[25] Ida-Marie Hoyvik、Branislav Jansik 和 Poul Jorgensen，“通过最小化四阶中心矩实现轨道局域化”，The Journal of Chemical Physics 137, 224114 (2012)。[26] Dean Lee，“少体与多体系统的晶格模拟”，Prog. Part. Nucl. Phys. 63, 117 – 154 (2009)。[27]Serdar Elhatisari、Ning Li、Alexander Rokash、Jose Manuel Alarc´on、Dechuan Du、Nico Klein、Bing- nan Lu、Ulf-G. Meißner、Evgeny Epelbaum、Hermann Krebs、Timo A. L¨ahde、Dean Lee 和 Gautam Rupak，“量子相变附近的核结合”，Phys. Rev. Lett. 117, 132501 (2016)。[28]Bing-Nan Lu、Ning Li、Serdar Elhatisari、Dean Lee、Evgeny Epelbaum 和 Ulf-G. Meißner，“核结合的基本要素”，Physics Letters B 797, 134863 2019( )。

[29]H. K¨ummel、K. H. L¨uhrmann 和 J. G. Zabolitzky，“expS-（或耦合簇）形式的多费米子理论”，《物理学报告》36, 1 – 63 (1978)。[30] R. F. Bishop，“耦合簇理论及其在物理学中的应用概述”，《理论化学学报》：理论、计算与建模（Theo- retica Chimica Acta）80, 95–148 (1991)。[31] Rodney J. Bartlett 和 Monika Musia-l，“量子化学中的耦合簇理论”，《现代物理评论》79, 291– 352 (2007)。[32] G. Hagen、T. Papenbrock、M. Hjorth-Jensen 和 D. J. Dean，“原子核的耦合簇计算”，Rep. Prog. Phys. 77, 096302 (2014)。[33] W. H. Dickhoff 和 D. Van Neck，*Many-body Theory Exposed!: Propagator Description of Quantum Mechanics in Many-body Systems*（新加坡：World Scientific, 2005）。[34] J. Dukelsky、S. Pittel 和 G. Sierra，“专题综述：多体量子系统的精确可解 Richardson-Gaudin模型”，《现代物理评论》76, 643–662 (2004)。[35] Justin G. Lietz、Samuel Novario、Gustav R. Jansen、Gaute Hagen 和 Morten Hjorth-Jensen，“计算核物理与后Hartree-Fock方法”，Lecture Notes in Physics，293–399 (2017)。[36] D. R. Thompson、M. Lemere 和 Y. C. Tang，“系统使用共振群方法对散射问题进行系统研究，” Nucl. Phys. A 286, 53–66 (1977). [37]T. Papenbrock，“耦合簇方法”，https://nucleartalent.github.io/ManyBody2018/doc/pub/CCM/html/CCM.html (2018)，访问日期：2023-02-06.[38] G. Hagen, T. Papenbrock, A. Ekstr¨om, K. A. Wendt, G. Baardsen, S. Gandolfi, M. Hjorth-Jensen, 和 C. J. Horowitz，“核物质的耦合簇计算”，Phys. Rev. C 89, 014319 (2014). [39] S. Gandolfi, A. Yu. Illarionov, K. E. Schmidt, F. Ped- eriva, 和 S. Fantoni，“中子物质状态方程的量子蒙特卡罗计算”，Phys. Rev. C 79, 054005 (2009).[40] Claudius Gros，“精确对角化研究中有限尺寸修正的控制”，Phys. Rev. B 53, 6865– 6868 (1996). [41] C. Lin, F. H. Zong, 和 D. M. Ceperley，“ 连续体量子蒙特卡罗算法中的扭转平均边界条件”，Phys. Rev. E 64, 016702 (2001). [42] K. Hebeler, S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, A. Nogga, 和 A. Schwenk，“基于手征低动量相互作用改进核物质计算”，Phys. Rev. C 83, 031301 (2011).