



北京大学

本科生毕业论文

题目： 格点规范理论的量子模拟

Quantum Simulation of Lattice

Gauge Theory

姓 名： 王逸飞

学 号： 1800011411

院 系： 物理学院

专 业： 物理学

指导教师： 陈徐宗 教授

刘雄军 教授

二〇二二年五月

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则，引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

摘要

使用冷原子系统对格点规范理论作量子模拟是近年来新兴的研究领域,我们从基础理论到实验实现对这一领域进行了系统的综述. 综述分为三个层次: 从连续时空的规范场论到格点规范理论、格点规范理论的维数截断、维数截断后格点规范理论的量子模拟. 与此同时, 对应综述中的前两个层次, 我们发展了非阿贝尔规范-希格斯理论的哈密顿形式; 对 $U(1)$ 量子连线模型中维数截断的影响进行了数值分析. 基于本文的综述和独立研究内容, 我们对格点规范理论量子模拟这一领域的前景与挑战作出了评述.

关键词: 格点规范理论, 量子模拟, 光晶格, 超冷原子, 转移矩阵, 矩阵乘积态

ABSTRACT

Quantum simulation of lattice gauge theory using ultracold atomic systems is a rising field these years. This thesis aims to provide a systematic review on this field from fundamental theories to experimental realizations. There are three parts in this review, namely from gauge theory in continuous spacetime to lattice gauge theory, dimensional truncation of lattice gauge theory, and quantum simulation of truncated lattice gauge theory. Meanwhile, corresponding to the first two parts of the review, we developed a Hamiltonian form for non-Abelian gauge-Higgs theory, and we performed a numerical test on the effect of dimensional truncation with $U(1)$ quantum link mode. Based on the review and independent research in this thesis, we comment on the prospects and challenges of quantum simulation of lattice gauge theory.

KEY WORDS: lattice gauge theory, quantum simulation, optical lattice, ultracold atoms, transfer matrix, matrix product state

目录

| | |
|---------------------------------------|-----------|
| 第一章 引论 | 1 |
| 1.1 格点规范理论 | 1 |
| 1.2 冷原子与量子模拟 | 1 |
| 1.3 研究的问题与论文结构 | 2 |
| 第二章 杨-Mills 理论和格点规范理论 | 5 |
| 2.1 杨-Mills 理论 | 5 |
| 2.2 格点上的粒子 | 11 |
| 2.2.1 倍增问题和交错费米子 | 11 |
| 2.2.2 希格斯玻色子 | 14 |
| 2.3 Wilson 格点规范理论 | 19 |
| 2.3.1 理论的构建 | 19 |
| 2.3.2 Wilson 圈和夸克禁闭 | 21 |
| 2.3.3 格点规范理论的相结构 | 23 |
| 2.4 Kogut-Susskind 格点规范理论 | 24 |
| 2.4.1 规范场部分 | 25 |
| 2.4.2 包含费米子的模型和高斯定理 | 28 |
| 第三章 格点规范理论的维数截断 | 31 |
| 3.1 量子连线模型 | 31 |
| 3.2 表示空间截断 | 33 |
| 3.3 一维 $U(1)$ 量子连线模型的数值测试 | 38 |
| 3.3.1 基态结构 | 38 |
| 3.3.2 截断维数对基态和能隙的影响 | 41 |
| 3.3.3 弦破坏动力学 | 43 |
| 3.4 结论与讨论 | 45 |
| 第四章 格点规范理论的量子模拟 | 49 |
| 4.1 光晶格中的超冷原子和 Hubbard 模型 | 49 |
| 4.2 格点规范理论的模拟方案 | 51 |
| 4.2.1 $U(1)$ 格点规范理论 | 52 |
| 4.2.2 \mathbb{Z}_2 格点规范理论 | 55 |

| | |
|----------------------------|-----------|
| 4.2.3 非阿贝尔格点规范理论 | 56 |
| 4.3 量子模拟实验的进展和未来 | 57 |
| 第五章 结论和展望 | 59 |
| 附录 A 数学细节 | 61 |
| A.1 规范场和联络 | 61 |
| A.2 Haar 测度 | 64 |
| A.3 Floquet 定理 | 65 |
| 参考文献 | 67 |
| 致谢 | 75 |

第一章 引论

1.1 格点规范理论

格点规范理论有两个理论来源,一是将格点理论规范化,二是将规范理论格点化. 1971 年, F. J. Wegner 从伊辛模型出发得到了 \mathbb{Z}_2 格点规范理论^[1]. 从现代的观点看, 对一个格点模型, 引入背景场实现局域对称性后, 将背景场升级为动力学规范场, 就可得到满足局域规范不变性的理论, 这样的理论中 Elitzur 定理^[2] 成立, 即不满足局域规范不变性的算符不具有非零的期望值. 再加入规范场自身的动力学, 即可得到完整的格点规范理论. 与上述逻辑对应, 将规范理论格点化则是将连续空间中的规范理论定义在格点上.

连续空间中的规范理论起源于电动力学, 电势和磁矢势具有冗余的特性, 为确定其数值需要选取特定的规范, 例如我们熟悉的库仑规范和洛伦兹规范. 20 世纪上半叶, 随着量子理论的出现, 物理学家建立了量子电动力学. 量子电动力学具有 $U(1)$ 的规范冗余, 即物质场在局域地乘上 $\exp(i\theta(x))$ 相位后, 可以对矢势作规范变换使得作用量不变. 1954 年, 为研究同位旋守恒的问题, 杨振宁和 R. L. Mills 将规范场论推广到了非阿贝尔规范群的情形^[3]. 这一理论起初因为规范玻色子不具有质量而在一开始不受重视, 在希格斯 (Higgs) 机制提出后^[4-7], 粒子物理标准模型逐渐基于非阿贝尔规范理论和希格斯机制建立起来^[8-10]. 粒子物理中, 单独的夸克无法被观测到, 这一夸克禁闭 (confinement) 的现象被认为和量子色动力学 (quantum chromodynamics, QCD) 的渐近自由性质有关, 因此需要研究非阿贝尔规范理论在低能强耦合时的行为. 出于上述原因, K. G. Wilson 将规范理论格点化, 在格点规范理论中解释了禁闭效应^[11].

Wilson 使用格点规范理论成功解释禁闭效应之后, 人们开始研究格点规范理论丰富的相结构^[12-18]、和禁闭有关的屏蔽现象和动力学^[19-22]、拓扑性质^[23-25] 等, 格点规范理论与拓扑序、分数拓扑等也有关联^[26]. 因此, 格点规范理论不止是一个高能物理模型的截断, 在高能物理、凝聚态以及相关的交叉方向、形式理论等领域中, 格点规范理论都有其一席之地.

1.2 冷原子与量子模拟

量子力学的基本假设表明^①, 系统的希尔伯特 (Hilbert) 空间是其子系统希尔伯特空间的张量积, 因此系统的希尔伯特空间维数随其尺度指数增大. 对于没有相互作用的系统, 子系统之间没有纠缠, 可以简单分解, 而对于有相互作用的系统, 量子纠缠使得希

① 或许不是基本假设, 见文献^[27].

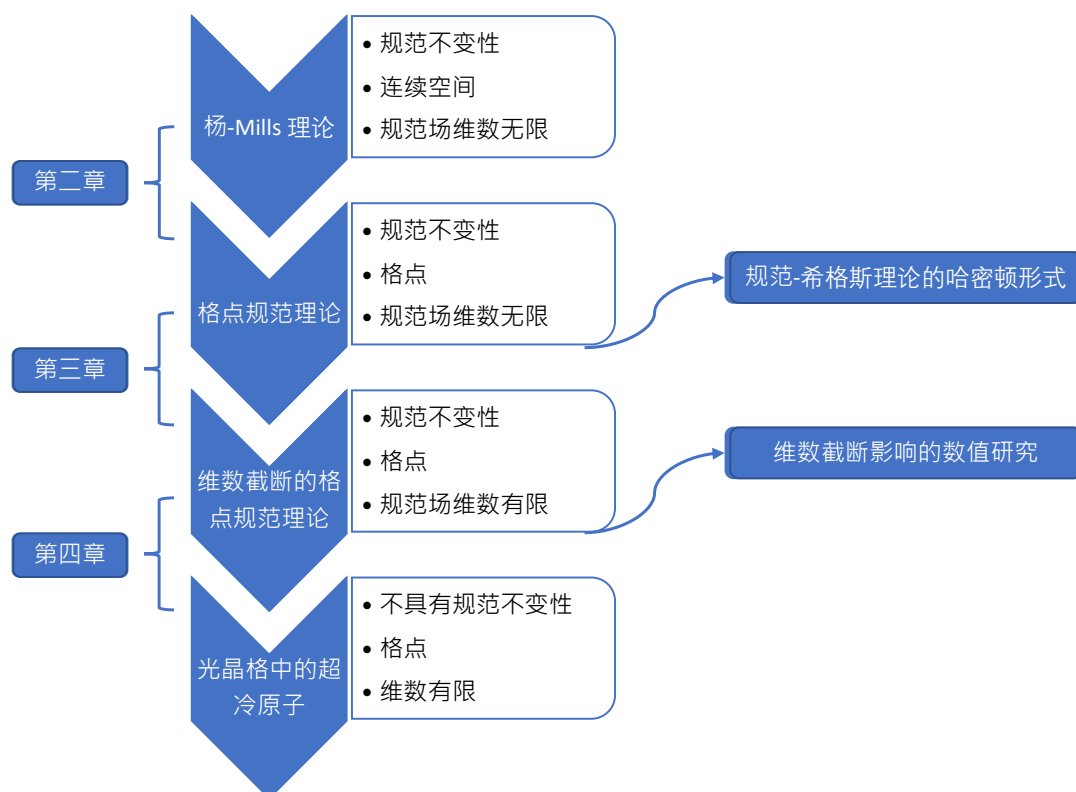


图 1.1 论文结构图

尔伯特空间难以分解, 精确求解这类系统在经典计算机的框架下是困难的. 因此, R. P. Feynman 提出使用量子系统模拟量子系统的设想^[28].

得到一定规模的、可操控的量子系统对于人类的实验技术是一个挑战. 在常温下, 系统的热效应覆盖了量子效应; 对于一个开放的系统, 与环境相互作用导致的退相干也会使其迅速丢失量子性质. 因此量子模拟需要在与外界相对隔绝的低温下进行. 基于光与原子的相互作用, 人们提出用激光俘获原子并对其降温的想法^[29]. 1997 年, Cohen-Tannoudji、朱棣文、William Daniel Phillips 因激光冷却和原子俘陷获得诺贝尔奖. 1995 年, M. H. Anderson 等人利用蒸发冷却技术在磁光阱中实现了 ^{87}Rb 原子的玻色-爱因斯坦凝聚^[30]. 2002 年, M. Greiner 等人使用光晶格中的超冷玻色气体模拟 Hubbard 模型, 实现了超流 (superfluid) 到 Mott 绝缘态的相变. 光晶格中的超冷原子以其良好的可操控性称为量子模拟的重要平台, 自此冷原子量子模拟实验开始蓬勃发展. 关于超冷原子量子模拟的进展, 可以参考综述^[31], 关于超冷原子量子模拟的技术, 可参考综述^[32].

1.3 研究的问题与论文结构

考虑到格点规范理论物理上的重要性和计算上的困难性, 人们希望对其进行量子模拟. 本文关注基于光晶格中冷原子体系的格点规范理论的量子模拟. 需要指出的是,

光晶格中的超冷原子并非量子模拟的唯一平台, 利用离子阱^[33, 34]、Rydberg 原子^[35] 等也可实现格点规范理论的量子模拟. 对于这一领域, 本文希望提供一个从理论基础到实验实现的全面的综述. 本文结构见图 1.1, 我们采用规范理论格点化的路径作为我们理论的出发点. 采取这一路径后, 格点规范理论的量子模拟分为四个层次, 一是连续空间的规范场论, 即杨-Mills 理论; 第二层是将上述理论格点化得到的格点规范理论; 格点规范理论正则量子化后, 其规范场对应的希尔伯特空间是无穷维的, 不适于量子模拟, 因此需要对其进行维数截断. 维数截断后的格点规范理论是量子模拟的直接目标, 但光晶格中的超冷原子不具备局域规范不变性, 这构成了模拟的根本困难.

本文围绕上述四个层次展开, 第一章为引论, 第二章介绍杨-Mills 理论及格点规范理论, 第三章介绍格点规范理论的维数截断, 第四章介绍量子模拟的实验方案和实验实现, 第五章为总结与展望. 除了综述内容外, 本文还就部分问题作了独立研究. 对应第二个层次, 由于量子模拟需要格点规范理论的哈密顿形式, 我们使用转移矩阵的方法得到了规范-希格斯理论的哈密顿形式. 对应第三个层次, 由于我们希望模拟的是格点规范理论而我们只能模拟其截断形式, 讨论这种截断对物理的影响就是必要的. 我们采用数值方法讨论了维数截断对 $1+1$ 维 $U(1)$ 格点规范理论动力学的影响, 论证了结果对于实验的意义.

考虑到该领域的逻辑结构, 本文并未将综述内容与原创内容明显分开, 只是在引言和具体章节处会有所提示.

第二章 杨-Mills 理论和格点规范理论

本章我们从杨-Mills 理论出发, 重点介绍其正则量子化形式. 通过介绍杨-Mills 理论的渐近自由性质, 我们讨论了引入格点规范理论的历史背景和逻辑出发点. 在讨论格点规范理论前, 我们首先讨论了格点上的粒子, 在费米子方面我们主要介绍了费米子的倍增问题以及交错费米子的方案, 在玻色子方面我们讨论了希格斯玻色子, 并使用转移矩阵方法推导了非阿贝尔规范-希格斯理论的哈密顿形式. 随后我们转到格点规范理论的讨论. 我们首先介绍 Wilson 格点规范理论及其对夸克禁闭的解释, 并简要介绍了基于 Wilson 格点规范理论的几种模型的相图. 之后我们介绍了 Kogut 和 Susskind 给出的格点规范理论的哈密顿形式, 其中高斯定理等内容和连续空间杨-Mills 理论有较好的平行关系, 方便我们理解其物理图像. 格点规范理论的哈密顿形式是后文讨论的基础, 但本章其他部分的内容对于完整地理解格点规范理论的量子模拟这一领域也是不可或缺的, 例如 Wilson 格点规范理论在理论研究和蒙特卡洛模拟上较为方便而不适于进行量子模拟, 但理论物理学家基于这一理论得出的相变等物理性质可以作为量子模拟实验的动机.

2.1 杨-Mills 理论

1954 年, 杨振宁和 R. L. Mills 将规范群为 $U(1)$ 的量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 推广到了规范群为一般的非阿贝尔群的情形, 得到了非阿贝尔规范场论^[3]. 这里我们采取一种现代的思路来介绍杨-Mills 理论.

先考虑物质场. 规范场论的构造不依赖于物质场是玻色的还是费米的, 为了和 QED 一致, 我们从狄拉克费米子场开始讨论. 自由狄拉克费米子场的拉格朗日密度为

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x). \quad (2.1)$$

这里 ψ 是旋量, γ^μ 是狄拉克矩阵, 满足反对易关系 $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = -2\eta^{\mu\nu}$, 其中 η 是度规张量^①, 再定义 $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$. 当 ψ 为一个旋量时, 拉格朗日密度在全局 $U(1)$ 变换下不变. 现在假设 ψ 是以旋量为分量的矢量, 并设群 G 在 ψ 张成的矢量空间中的作用为,

$$\psi(x) \rightarrow V\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) V^\dagger. \quad (2.2)$$

则拉格朗日密度在群 G 定义的全局变换下不变. 下面的讨论中我们将变换群限制为

① 在本论文中, 4 维平直时空的度规张量取为 $(-1, 1, 1, 1)$.

$SU(N)$ 和 $U(1)$, 这是 ψ 张成复线性空间时对应的自然情况. 群的生成元 t^a 满足

$$[t^a, t^b] = i f^{abc} t^c, \quad (2.3)$$

这里 f^{abc} 是群的结构常数 (structure constant), 它们是反对称的. 我们进一步引入归一化条件

$$\text{tr}(t^a t^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab}. \quad (2.4)$$

这一条件与自旋 1/2 算符作为矩阵群 $SU(2)$ 的生成元是一致的.

我们希望构造出不仅有全局对称性, 还有局域不变性的理论, 即在变换

$$\psi(x) \rightarrow V(x) \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) V^\dagger(x) \quad (2.5)$$

下, 拉格朗日密度不变. 若理论满足此条件, 则称上述变换为一个规范 (gauge) 变换, G 规范群, 系统在规范变换下不变的属性称为规范不变性 (gauge invariance), 或规范冗余 (gauge redundancy). 构造出规范不变的理论, 考虑沿 n^μ 方向的导数

$$n^\mu \partial_\mu \psi(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\psi(x + hn) - \psi(x)}{h}. \quad (2.6)$$

这一导数在上述变换下显然不具有简单的变换行为, 因为不同点的场以不同的方式变换. 为了调和不同时空点处不同的变换, 我们引入比较子 (comparator) $U(x', x)$, 它是一个么正矩阵, 变换规则为

$$U(x', x) \rightarrow V(x') U(x', x) V^\dagger(x). \quad (2.7)$$

且有 $U(x, x) = \mathbb{I}$. 由此我们可以定义协变导数 (covariant derivative)

$$n^\mu D_\mu \psi(x) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\psi(x + hn) - U(x + hn, x) \psi(x)}{h}. \quad (2.8)$$

协变导数具有简单的变换规则. 将比较子展开并引入联络 (connection) $A_\mu^a(x)$ 和耦合常数 (coupling constant) g , 即

$$U(x + hn, x) = \mathbb{I} + i g h n^\mu A_\mu^a(x) t^a + O(h^2). \quad (2.9)$$

则在点 y 和 z 之间, 沿路径 C 定义的比较子由下式给出

$$U(z, y) = \mathcal{P} \exp \left(i g \int_C dx^\mu A_\mu^a(x) t^a \right), \quad (2.10)$$

其中 \mathcal{P} 表示路径顺序 (path ordering). 从比较子的变换规则 (2.7) 中我们得到规范场 (gauge field) $A_\mu \equiv A_\mu^a t^a$ 的变换规则为

$$A_\mu(x) \rightarrow V(x) \left(A_\mu(x) + \frac{i}{g} \partial_\mu \right) V^\dagger(x). \quad (2.11)$$

利用规范场, 我们可以将协变导数显式地写成

$$D_\mu = \partial_\mu - ig A_\mu(x). \quad (2.12)$$

注意, 上式定义了物质场的协变导数. 作用在规范场上时, D_μ 需要写成

$$D_\mu = \partial_\mu - ig [A_\mu, \cdot]. \quad (2.13)$$

这是规范场作为联络的结果. 附录 A.1 给出了与此相关的更多数学细节. 由上述变换规则知, 将自由狄拉克场的拉格朗日密度中导数替换为协变导数即可得到在局域变换 G 下不变的拉格朗日量.

规范场 A_μ 除了协助物质场实现局域规范不变外, 还可以有自身的动力学. 定义场强张量

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu}(x) &:= \frac{i}{g} [D_\mu, D_\nu] \\ &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig [A_\mu, A_\nu]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

显然, $F_{\mu\nu}$ 的变换规则与 D_μ 相同, 即

$$F_{\mu\nu}(x) \rightarrow V(x) F_{\mu\nu}(x) V^\dagger(x). \quad (2.15)$$

因此, 我们可以构造满足局域规范不变性的拉格朗日密度

$$\mathcal{L}_{\text{YM}} = -\frac{1}{2} \text{tr} (F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}). \quad (2.16)$$

其中角标 YM 指杨-Mills. 为使表达式更明确, 我们引入分量形式, 即将场强按生成元矩阵展开

$$F_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a t^a, \quad F_{\mu\nu}^a = 2 \text{tr} (F_{\mu\nu} t^a). \quad (2.17)$$

分量 $F_{\mu\nu}^a$ 的显式表达为

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc} A_\mu^b A_\nu^c. \quad (2.18)$$

因此

$$\mathcal{L}_{\text{YM}} = -\frac{1}{4} F^{a,\mu\nu} F_{\mu\nu}^a. \quad (2.19)$$

综上, 包含有质量的费米子和无质量的规范玻色子的拉格朗日密度可以写成

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x) (i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi(x) - \frac{1}{4} F^{a,\mu\nu} F_{\mu\nu}^a. \quad (2.20)$$

该式若取规范群为 $U(1)$, 则得到量子电动力学的拉格朗日密度, 其中 ψ 为电子场, A 为光子场, 第一项描述了和光子耦合的电子的动力学, 第二项描述了光子自身的动力学; 若取规范群为 $SU(3)$, 则得到量子色动力学的拉格朗日密度, ψ 为夸克场, A 为胶子场,

第一项描述了和胶子耦合的夸克的动力学, 第二项描述了胶子自身的动力学.

拉格朗日密度 (2.20) 对应的欧拉-拉格朗日方程为

$$\begin{aligned} (i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi(x) &= 0, \\ \partial^\mu F_{\mu\nu}^a(x) + gf^{abc}A^{b,\mu}(x)F_{\mu\nu}^c(x) &= -g\bar{\psi}(x)\gamma_\nu t^a\psi(x). \end{aligned} \quad (2.21)$$

值得一提的是, 对于规范群为 $U(1)$ 的情况, 上式第一个方程正是费米子在电磁场中的运动方程, 第二个方程是有源麦克斯韦方程, 其中流密度为 $J_\mu = -g\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$. 无源麦克斯韦方程对应 $F_{\mu\nu}$ 满足的 Bianchi 恒等式, 这是 $F_{\mu\nu}$ 作为曲率 2-形式的结果, 具体数学细节参见附录 A.1.

我们可以用路径积分方法将上述经典杨-Mills 理论量子化. 客观测量 O 的基态期望值原则上由路径积分

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} O \exp(iS) \quad (2.22)$$

给出, 其中 $S = \int d^4x \mathcal{L}$. 但是, 由于规范冗余的存在, 上述积分将会发散. 通过引入鬼场 (ghost) 和规范固定项, Faddeev-Popov 方法^[36] 可以避免对冗余的规范自由度进行积分进而避免发散. 上述方法的详细讨论可以在任何一本量子场论教科书中找到, 且与本论文主线关系不大, 为了本文的完整性, 我们不加推导地写出结果: 纯规范理论的生成函数为

$$Z(J) \propto \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{c} \mathcal{D}c \exp(iS_{\text{YM}} + iS_{\text{gh}} + iS_{\text{gf}}), \quad (2.23)$$

其中鬼场 \bar{c} 和 c 是 Grassmann 变量, 且

$$S_{\text{YM}}(A, J) = \int d^4x \left(-\frac{1}{4} F^{\mu\nu a} F_{\mu\nu}^a + J^{\mu a} A_\mu^a \right), \quad (2.24)$$

$$S_{\text{gh}} = \int d^4x \bar{c}^a \partial^\mu D_\mu^{ab} c^b = \int d^4x \left(-\partial^\mu \bar{c}^a \partial_\mu c^a + gf^{abc} A_\mu^c \partial^\mu \bar{c}^a c^b \right), \quad (2.25)$$

$$S_{\text{gf}} = \int d^4x \left(-\frac{1}{2\xi} \left(\partial^\mu A_\mu^a \right)^2 \right). \quad (2.26)$$

容易将物质场加入上述表达式. Wick 转动 $t \rightarrow i\tau$ 将时空变为欧氏空间, 在欧氏空间中, 期望值 (2.22) 与统计物理中得到热力学期望值的表达式类似. 这一相似性使得对规范理论使用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法进行数值模拟成为可能.

另一种等价的量子化方式是正则量子化 (canonical quantization). 在正则量子化中, 我们将时空分成一个个等时面, 并在等时面上定义希尔伯特空间, 在等时面之间定义时

间演化. 从拉格朗日密度 (2.20) 出发, 费米子场和规范场对应的动量分别为,

$$\begin{aligned}\pi_F^l &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \psi^l(x))} = i\psi^{\dagger l}(x), \\ \pi^{a,0} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A_0^a(x))} = 0, \\ \pi^{a,k} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 A_k^a(x))} = F^{a,k0}(x),\end{aligned}\tag{2.27}$$

其中 $k = 1, 2, 3$ 为规范场的空间指标. 因此, 哈密顿量为

$$\begin{aligned}H &= \int d^3x (\pi_F^l(x) \partial_0 \psi^l(x) + \pi^{a,k}(x) \partial_0 A_k^a(x) - \mathcal{L}) \\ &= \int d^3x \psi^\dagger(x) (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - g\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(x) + \gamma^0 m) \psi(x) \\ &\quad + \int d^3x \left(-\frac{1}{2} \pi^{a,k}(x) \pi_k^a(x) + \frac{1}{4} F^{a,jk}(x) F_{jk}^a(x) \right) \\ &\quad - \int d^3x A_0^a(x) (\partial^k \pi_k^a(x) + g f^{abc} A^{b,k}(x) \pi_k^c(x) + g \psi^\dagger(x) t^a \psi(x)),\end{aligned}\tag{2.28}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}^k = \gamma^0 \gamma^k$, $\mathbf{A}^k = A^{a,k} t^a$. 因为 $\pi^{a,0} = 0$, 我们选择时间规范 (temporal gauge), 又称 Weyl 规范, 即规范场的时间分量为零, $A_0^a = 0$. 引入正则量子化条件, 对于费米子,

$$\{\psi^a(\mathbf{x}), \psi^{\dagger b}(\mathbf{y})\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta_{ab}, \quad \{\psi^a(\mathbf{x}), \psi^b(\mathbf{y})\} = 0\tag{2.29}$$

对于规范玻色子,

$$[A_k^a(\mathbf{x}), \pi_j^b(\mathbf{y})] = i\delta_{ab} \delta_{kj} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad [A_k^a(\mathbf{x}), A_j^b(\mathbf{y})] = [\pi_k^a(\mathbf{x}), \pi_j^b(\mathbf{y})] = 0.\tag{2.30}$$

上述规范选取和正则量子化条件给出量子化后的哈密顿量

$$\begin{aligned}H &= \int d^3x \psi^\dagger(x) (-i\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - g\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}(x) + \gamma^0 m) \psi(x) \\ &\quad + \int d^3x \left(-\frac{1}{2} \pi^{a,k}(x) \pi_k^a(x) + \frac{1}{4} F^{a,jk}(x) F_{jk}^a(x) \right).\end{aligned}\tag{2.31}$$

此即时间规范下含有狄拉克费米子的杨-Mills 理论的哈密顿形式, 2.4.2 节将给出其格点化后的形式 (2.148) 作为量子模拟的目标模型. 为了进一步理解这一哈密顿量的物理意义, 引入矢势 $\mathbf{A}^a(\mathbf{x})$, 其 k 分量为 $A^{a,k}(\mathbf{x})$, 我们可以定义色电场和色磁场为

$$\begin{aligned}\mathbf{E}^a(\mathbf{x}) &:= -\partial_t \mathbf{A}^a(\mathbf{x}), \\ \mathbf{B}^a(\mathbf{x}) &:= \nabla \times \mathbf{A}^a(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} g f^{abc} \mathbf{A}^b(\mathbf{x}) \times \mathbf{A}^c(\mathbf{x}),\end{aligned}\tag{2.32}$$

其分量形式为

$$E^{a,k} = -F^{a,k0}, \quad B^{a,k} = \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} F^{a,ij}.\tag{2.33}$$

据此, 我们可以将哈密顿量 (2.31) 的第二项写成电场能量和磁场能量的和, $H_{\text{el}} + H_{\text{mag}}$, 其中

$$\begin{aligned} H_{\text{el}} &\equiv \frac{1}{2} \int d^3x \mathbf{E}^a(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}^a(\mathbf{x}) \\ H_{\text{mag}} &\equiv \frac{1}{2} \int d^3x \mathbf{B}^a(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{B}^a(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.34)$$

在 $U(1)$ 的情况下, 这与我们熟知的电磁场能量公式是一致的.

选择时间规范后, 我们无法从哈密顿量出发推导出对应高斯定理的运动方程, 因此, 运动方程

$$\partial^k \pi_k^a(\mathbf{x}) + g f^{abc} A^{b,k}(\mathbf{x}) \pi_k^c(\mathbf{x}) + \rho^a(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.35)$$

需要被作为约束额外加入描述体系的方程组中. 上式中 $\rho^a(\mathbf{x}) = g \psi^\dagger(\mathbf{x}) t^a \psi(\mathbf{x})$ 是电荷密度分量. 量子地, 这一高斯定理的表达式正是等时面上局域规范变换的生成元. 定义高斯定理算符

$$G^a(\mathbf{x}) = \partial^k \pi_k^a(\mathbf{x}) + g f^{abc} A^{b,k}(\mathbf{x}) \pi_k^c(\mathbf{x}) + \rho^a(\mathbf{x}), \quad (2.36)$$

我们可以验证

$$[G^a(\mathbf{x}), \psi(\mathbf{y})] = -g t^a \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \psi(\mathbf{x}), \quad (2.37)$$

及

$$[G^a(\mathbf{x}), A_k^b(\mathbf{y})] = i \delta_{ab} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \partial_k - i g A^{c,k}(\mathbf{x}) f_{acb} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.38)$$

注意, 对方程 (2.11) 作展开可知, $\theta^a(\mathbf{x}) t^a$ 定义的无穷小变换导致的 A_μ 的改变为

$$\frac{1}{g} t^a \partial_\mu \theta^a(\mathbf{x}) - A^c(\mathbf{x}) t^b f^{acb} \theta^a(\mathbf{x}). \quad (2.39)$$

另外, 高斯定理算符满足对易关系

$$[G^a(\mathbf{x}), G^b(\mathbf{y})] = i g f^{abc} G^c(\mathbf{x}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (2.40)$$

注意到物理可观测量 $G^a(\mathbf{x})$ 守恒,

$$[G^a(\mathbf{x}), H] = 0, \quad (2.41)$$

我们可以将经典的高斯定理约束 $G^a(\mathbf{x}) = 0$ 升级为量子版本, 即要求所有物理态满足

$$G^a(\mathbf{x}) |\Psi\rangle = 0 |\Psi\rangle. \quad (2.42)$$

上式即正则量子化版本的高斯定理. 因为 G^a 和哈密顿量对易, $G^a(\mathbf{x})$ 可以被看作是一个不随时间变化的背景电荷分布.

在详细讨论格点理论前, 我们不妨简要介绍发展格点规范理论的动机. 从重整化

群 (renormalization group, RG) 的分析可知, 一个量子场论的单粒子不可约 (one particle irreducible, 1-PI) 有效场论或 Wilson 有效场论在不同能标下具有不同的耦合常数. 特别地, 对于杨-Mills 理论, 单圈计算表明其耦合常数 g 随能标 μ 的变化关系为^[37, 38],

$$\frac{dg}{d \ln \mu} \equiv \beta(g) = - \left(\frac{11}{3} C(A) - \frac{4}{3} T(R) \right) \frac{g^3}{(4\pi)^2} + O(g^5), \quad (2.43)$$

其中 $C(A)$ 是伴随表示的平方 Casimir, $T(R)$ 是表示 R 的 Dynkin 指标. 量子色动力学 (quantum chromodynamics, QCD) 中, 规范群为 $SU(3)$, 对应的 $C(A) = 3, T(R) = 1/2$, 因此 beta 函数 $\beta(g) < 0$. Beta 函数小于零的性质称为“渐近自由”, 因为具有这一性质的理论在能标越高, 微扰论计算结果就越好, 不存在量子平凡性 (quantum triviality) 等问题^[39]. 但是, 在较低的能标下, 渐近自由的理论成为了一个强耦合的理论, 微扰论计算因此失效. 夸克禁闭 (confinement) 是规范理论中一个典型的强耦合现象, 目前在非阿贝尔规范场论的框架下仍没有解析的证明. 为研究低能下的强耦合现象, 一个自然的思路是对高能涨落求平均进而只留下低能物理的动力学. 这一方案在时空空间上体现为将连续时空离散成格点. 基于这种想法, 我们需要在格点上定义一个规范理论.

2.2 格点上的粒子

格点规范理论一般包括两部分, 一部分是规范场, 另一部分是物质 (粒子) 场, 一个完整的格点规范理论应当包含规范场和物质场的动力学及其相互作用. 本节讨论物质场.

2.2.1 倍增问题和交错费米子

简单地将哈密顿量 (2.31) 离散化会导致问题, 下面我们用最简单的 $1+1$ 维自由费米子的情况来说明这一问题. 考虑哈密顿量

$$H = \int dx \psi^\dagger(x) (-i\gamma^0 \gamma^1 \partial_x) \psi(x). \quad (2.44)$$

其运动方程 $i\partial_t \psi(x) = [\psi(x), H]$ 正是狄拉克方程

$$\partial_t \psi(x) = -\gamma^0 \gamma^1 \partial_x \psi(x). \quad (2.45)$$

利用狄拉克矩阵的 Weyl 表示

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \gamma^0 \gamma^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

和平面波试探解 $\psi(x) = \exp(i(Et - px))u(p, E)$, 我们将定态问题转化为本征值问题

$$\begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & -p \end{pmatrix} u(p, E) = Eu(p, E). \quad (2.47)$$

该本征值问题的解为常见的无质量粒子色散关系 $E = \pm p$ 及与之对应的本征矢量 $u_{\pm}(p, E)$, 这些本征矢量也是算符 γ^5 本征矢量, 对应手征 (chirality) ± 1 .

最简单的离散化由对应关系

$$\psi(x) \rightarrow \frac{\hat{\psi}_n}{\sqrt{a}}, \quad \partial_x \psi(x) \rightarrow \frac{1}{2a^{3/2}} (\hat{\psi}_{n+1} - \hat{\psi}_{n-1}), \quad \int dx \rightarrow a \sum_n \quad (2.48)$$

给出. 作上述代换后, 格点模型的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{n,k} \hat{\psi}_n^\dagger \left(-i\gamma^0 \gamma^1 \frac{1}{2a} (\delta_{k,n+1} - \delta_{k,n-1}) \right) \hat{\psi}_k, \quad (2.49)$$

运动方程为

$$\partial_t \hat{\psi}_n = -\gamma^0 \gamma^1 \frac{1}{2a} (\hat{\psi}_{n+1} - \hat{\psi}_{n-1}). \quad (2.50)$$

仍使用平面波试探解 $\hat{\psi}_n = \exp(i(Et - pna)) \hat{u}(p, E)$, 我们得到本征方程

$$\begin{pmatrix} \sin(pa)/a & 0 \\ 0 & -\sin(pa)/a \end{pmatrix} \hat{u}(p, E) = E \hat{u}(p, E), \quad (2.51)$$

其动量限制在第一布里渊区内取值, $-\pi/a \leq p \leq \pi/a$. 该方程的本征矢量与连续时空内的方程相同, 对应的本征值分别为 $E = \pm \sin(pa)/a$. 与连续时空的情形相比, 格点模型在动量 $p = \pi/a$ 处产生了新的低能模式, 对于每一种手征的费米子, 现在有一个向左移动的模式和一个向右移动的模式. 这些新的模式在连续极限 $a \rightarrow 0$ 下并不会消失. 一般来说, 对于一个 d 维空间 (不包含时间) 上的狄拉克费米子理论, 第一布里渊区内有 2^d 个零点, 即对每一个维度, 零点的数量发生了倍增. 此即费米子的倍增问题.

不仅如此, Nielsen 和 Ninomiya^[40-42] 证明了, 手征费米子的任何厄米的格点模型, 如果满足局域性和平移不变性, 都具有数量相等的左右移动模式. 解决这一倍增问题有多种方案, 这里我们介绍 Kogut 和 Susskind^[43] 提出的交错费米子 (staggered fermion) 模型. 交错费米子保持了模型的手征对称性, 且方便进行量子模拟和张量网络计算.

与简单格点化的哈密顿量 (2.49) 不同, 考虑在每个格点 n 上只有一个分量 $\hat{\phi}_n$ 的哈密顿量,

$$\hat{H} = -\frac{i}{2a} \sum_n (\hat{\phi}_n^\dagger \hat{\phi}_{n+1} - \hat{\phi}_{n+1}^\dagger \hat{\phi}_n). \quad (2.52)$$

这些单分量费米子场仍然满足反对易关系 $\{\hat{\phi}_n, \hat{\phi}_m\} = 0$, $\{\hat{\phi}_n^\dagger, \hat{\phi}_m\} = \delta_{mn}$. 因此运动方程

为

$$\partial_t \hat{\phi}_n = \frac{1}{2a} (\hat{\phi}_{n+1} - \hat{\phi}_{n-1}), \quad (2.53)$$

与方程 (2.50) 中旋量的第二个分量满足的方程相同, 因此只会产生一个左移的模式和一个右移的模式. 对于偶数 $N = 2n$ 将场 $\hat{\phi}_N$ 标记为 $\hat{\psi}_{u,n}$, 对于奇数 $N = 2n + 1$ 将场标记为 $\hat{\psi}_{l,n}$, 进而我们有

$$\partial_t \hat{\psi}_{u,n} = \frac{1}{2a} (\hat{\psi}_{l,n} - \hat{\psi}_{l,n-1}), \quad \partial_t \hat{\psi}_{l,n} = \frac{1}{2a} (\hat{\psi}_{u,n+1} - \hat{\psi}_{u,n}). \quad (2.54)$$

取连续极限 $a \rightarrow 0$, 采用狄拉克矩阵的下述表示,

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \gamma^0 \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

并考虑对应关系

$$\lim_{a \rightarrow 0} \begin{pmatrix} \hat{\psi}_{u,n}/\sqrt{a} \\ \hat{\psi}_{l,n}/\sqrt{a} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = \psi(x). \quad (2.56)$$

我们重新得到狄拉克方程 (2.45). 也可通过直接检查哈密顿量得出连续极限 $a \rightarrow 0$ 下该模型可以给出正确的连续模型.

可通过如下方式给模型加上质量项. 在连续情况下, 质量项为

$$\int dx m \bar{\psi}(x) \psi(x) = \int dx m (\psi_1^\dagger(x) \psi_1(x) - \psi_2^\dagger(x) \psi_2(x)). \quad (2.57)$$

离散化后得到

$$m \sum_n (\hat{\psi}_{u,n}^\dagger \hat{\psi}_{u,n} - \hat{\psi}_{l,n}^\dagger \hat{\psi}_{l,n}) = m \sum_n (-1)^n \hat{\phi}_n^\dagger \hat{\phi}_n. \quad (2.58)$$

因此, 包含动能项和质量项的 d 维空间格点费米子模型哈密顿量为

$$\hat{H} = \epsilon_d \sum_{\mathbf{n}} \sum_{k=1}^d (\hat{\phi}_{\mathbf{n}+e_k}^\dagger \hat{\phi}_{\mathbf{n}} e^{i\theta_k} + \text{h.c.}) + m \sum_{\mathbf{n}} (-1)^{\sum_{k=1}^d n_k} \hat{\phi}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{\phi}_{\mathbf{n}}, \quad (2.59)$$

其中 $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d$ 是给定格点单位矢量 e_k 下分量为 n_k 的格点矢量, ϵ_d 是一个依赖于维数的系数, $\exp(i\theta_k)$ 是依赖于方向的相因子. 在质量项主导时, 哈密顿量的基态为交错填充的半满构型, 因此该模型称为交错费米子. 需要注意的是, 交错费米子模型并不能完全取消倍增的费米子, 例如, 在空间维度为 3 时, 连续极限下 8 个模式减少到了 2 个. 此模型容易拓展到多分量的费米子以加入色自由度.

如果进一步引入规范场, Elitzur 定理^[2] 表明, 只有满足局域规范不变性的算符才具有非零的期望值. 因此, 哈密顿量也必须具有局域规范不变性. 我们将会看到为了实现规范不变性, 我们需要在格点之间的连线 (link) 上引入算符 $D(U_{\mathbf{n},k})$, 它是定义在连线上的规范群元 $U_{\mathbf{n},k}$ 的表示, 该表示由物质场张成的线性空间承载, 我们将在后续章节中

详细讨论其意义. 将方程 (2.59) 中的跃迁项替换为

$$\widehat{\phi}_{n+e_k}^\dagger D(U_{n,k}) \widehat{\phi}_n \quad (2.60)$$

即可实现局域规范不变性. 在很多文献中, 物质场承载基本表示, 而 D 往往被省略不书. 在规范群为 $U(1)$ 的情况下, 我们回到了著名的 Peierls 插入^[44, 45].

2.2.2 希格斯玻色子

除费米子之外, 希格斯玻色子也值得在格点规范理论中讨论^[13]. 标准模型中, 希格斯玻色子通过希格斯机制使得规范玻色子获得质量^[4-7]. 我们从 d 维时空中的复标量场出发, 其作用量为

$$S = \int d^d x \left(-\partial^\mu \phi^\dagger \partial_\mu \phi \right), \quad (2.61)$$

通过下述对应关系可以将时空离散化

$$\phi(x) \rightarrow a^{1-d/2} \phi_n, \quad \partial_\mu \phi(x) \rightarrow a^{-d/2} (\phi_{n+e_\mu} - \phi_n), \quad \int d^d x \rightarrow a^d \sum_n, \quad (2.62)$$

在欧氏时空中, 格点作用量为

$$S = - \sum_{n,\mu} \left(\phi_{n+e_\mu}^\dagger \phi_n + \text{h.c.} \right) + 2d \sum_n \phi_n^\dagger \phi_n. \quad (2.63)$$

在位项可以吸收到质量项中, 我们暂时忽略它. 为了使作用量具有规范不变性, 和费米子的情形类似, 我们在跃迁的两个算符间插入一个连线上规范变量的表示

$$S = - \sum_{n,\mu} \left(\phi_{n+e_\mu}^\dagger D(U_{n,\mu}) \phi_n + \text{c.c.} \right). \quad (2.64)$$

该表示取决于物质场承载的规范群的表示. 对于一个希格斯场, 我们忽略其模长的涨落而将其模长限制为 1, 此时得到的模型与上述无相互作用模型在形式上类似, 但对场有约束条件, 这一约束条件将导致非平凡的相互作用. 这一简化正是 Fradkin 等人研究带希格斯粒子的格点规范理论的相结构时所用的简化^[13], 也是 González 等人推导阿贝尔-希格斯理论的哈密顿形式时所取的条件^[46].

欧氏时空的作用量适合作为理论研究和蒙特卡洛模拟的基础, 但为了在冷原子系统中实现量子模拟, 我们需要得到理论的哈密顿形式. 转移矩阵 (transfer matrix) 法^[47]是从作用量和路径积分形式的量子场论得到哈密顿形式的一般方法. 格点上的阿贝尔-希格斯模型——即阿贝尔规范场和希格斯玻色子组成的模型——的哈密顿形式已经被使用转移矩阵法得到^[46]. 这里我们将从一般形式出发对非阿贝尔-希格斯模型使用转移矩阵方法. 最后为避免其他李代数表示的复杂性, 我们将结论限制在希格斯场承载 $SU(2)$ 群基本表示的情况. 我们的推导也可以回到阿贝尔规范场论的结果.

我们现讨论转移矩阵法的一般形式. 选择一个时间方向 τ , 欧氏场论的配分函数为

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S} = \int \mathcal{D}\phi \prod_{n_\tau} \exp(-S(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau})), \quad (2.65)$$

其中 ϕ_{n_τ} 用来标记所有的 $\phi_{\mathbf{n}, n_\tau}$, 且作用量已被分解为

$$S = \sum_{n_\tau} S(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau}). \quad (2.66)$$

通过转移矩阵定义算符 \hat{T} ,

$$\langle \phi' | \hat{T} | \phi \rangle = \exp(-S(\phi', \phi)). \quad (2.67)$$

这里 $|\phi\rangle$ 是等时截面 n_τ 上希尔伯特空间中的矢量. 对于一个有 N 个等时截面的格点模型, 配分函数可以写成

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \prod_{n_\tau} \langle \phi_{n_\tau+1} | \hat{T} | \phi_{n_\tau} \rangle = \text{tr} \hat{T}^N. \quad (2.68)$$

回忆在量子统计中, 给定体系哈密顿量, 配分函数为

$$Z = \text{tr} e^{-\tau H}. \quad (2.69)$$

由于 d 维空间上的量子统计力学可以被映射到 $d+1$ 维欧氏时空中的量子场论, 其中时间维度上的尺度为 τ ^[48], 对比上两式, 可以得到体系的哈密顿量满足,

$$\langle \phi_{n_\tau+1} | \exp(-a_\tau \hat{H}) | \phi_{n_\tau} \rangle = \exp(-S(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau})), \quad (2.70)$$

上式应在保持 $a_\tau N = \tau$ 并取极限 $a_\tau \rightarrow 0$ 的条件下理解. 定义场算符使得

$$\hat{\phi}_{\mathbf{n}} |\phi\rangle = \phi_{\mathbf{n}} |\phi\rangle. \quad (2.71)$$

如果作用量 S 可以写成一个 ϕ_{n_τ} 项, 一个 $\phi_{n_\tau+1}$ 项和一个交叉项的和, 即,

$$S(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau}) = L(\phi_{n_\tau+1}) + C(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau}) + R(\phi_{n_\tau}), \quad (2.72)$$

那么我们可以将 $\exp(-a_\tau \hat{H})$ 的矩阵元写成

$$\langle \phi_{n_\tau+1} | \exp(-a_\tau L(\hat{\phi}^\dagger)) \exp(-a_\tau \hat{C}) \exp(-a_\tau R(\hat{\phi})) | \phi_{n_\tau} \rangle, \quad (2.73)$$

其中

$$\langle \phi_{n_\tau+1} | \exp(-a_\tau \hat{C}) | \phi_{n_\tau} \rangle = \exp(-C(\phi_{n_\tau+1}, \phi_{n_\tau})). \quad (2.74)$$

将 L, C, R 的算符形式求和即得到哈密顿量.

对于我们希望得到其哈密顿量的希格斯规范理论 (2.64), 同一等时截面上的项是平

凡的. 这里讨论交叉项. 和连续时空中的规范场论一样, 我们选取时间规范 $U_{n,\tau} = 1$. 与文献^[49] 类似, 我们将交叉项写成分量的形式

$$C(\phi_{n_{\tau+1}}, \phi_{n_{\tau}}) = -\frac{a}{a_{\tau}} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\alpha} \phi_{(\mathbf{n}, n_{\tau+1}), \alpha}^* \phi_{(\mathbf{n}, n_{\tau}), \alpha} + \text{c.c.}, \quad (2.75)$$

其中 α 是承载群表示的线性空间中的向量指标. 这里 a_{τ} 是时间方向的格点间距, a 是空间方向的, 我们将固定 a 不变并讨论 $a_{\tau} \rightarrow 0$ 的情况. 注意, 这里我们虽然在形式上基于分量作量子化, 但这里的分量并不具有自由玻色子场的意义. 这是因为我们已经设定了约束条件 $\phi^{\dagger} \phi = 1$. 我们可以, 例如, 将 ϕ 写成规范群元的表示 $\exp(i\varphi^a T^a)$ 乘上一个单位矢量的形式, 其中 T^a 为希格斯场承载的表示的生成元, 此时 φ 是没有约束的自由场.

为得到一个哈密顿量, 首先应指明 τ 的希尔伯特空间. 在每个时刻 τ , 整体的希尔伯特空间是每个格点 \mathbf{n} 上希尔伯特空间的张量积. 在每个格点 \mathbf{n} 上, 希尔伯特空间为

$$\mathcal{H}_{\mathbf{n}} = \bigotimes_{\alpha} \mathcal{H}_{\mathbf{n}, \alpha}. \quad (2.76)$$

令态矢量 $|\phi\rangle$ 和场算符满足

$$\hat{\phi}_{\mathbf{n}, \alpha} |\phi\rangle = \phi_{\mathbf{n}, \alpha} |\phi\rangle. \quad (2.77)$$

这组基在某种测度下是完备的

$$\int [d\phi] |\phi\rangle \langle \phi|. \quad (2.78)$$

对规范群的群元 g 引入算符 $R_{\mathbf{n}}(g)$ 使得

$$R_{\mathbf{n}}(g) |\phi\rangle = |\phi'\rangle, \quad (2.79)$$

其中

$$\phi'_m = \begin{cases} |\phi_m\rangle, & m \neq \mathbf{n}, \\ |D(g) \phi_{\mathbf{n}}\rangle, & m = \mathbf{n}. \end{cases} \quad (2.80)$$

这里 D 是物质场承载的表示. 同时, R 又是规范群的一个作用在希尔伯特空间上的表示. 在格点规范理论尤其是其哈密顿形式中, 规范群的表示可能作用在经典的物质场张成的线性空间中, 这一空间在 QCD 中一般称为色空间; 也可能所用在作用在比较子张成的线性空间中, 一般来说这种表示是左或右群作用; 也可能作用在希尔伯特空间中, 此时表示具有量子算符的性质; 也可能作用在量子算符本身张成的空间中, 此时一般也是伴随表示. 在格点规范理论的讨论中, 基于已经构建出的理论的约定或上下文语境, 很多文献并不会明确写出表示是作用在哪一空间上的, 这可能使初学者甚至新进入该领域的研究人员感到困惑, 因此我们在后文的讨论中会尽量追求这一明确性.

下面仅考虑一个空间位置上的格点并在行文中略去格点的指标, 算符 \widehat{C} 可以写成

$$\begin{aligned}\exp\left(-a_\tau \widehat{C}\right) &= \int [d\phi'] [d\phi] \exp\left(\frac{a}{a_\tau} \phi'^\dagger \phi\right) |\phi'\rangle \langle \phi| \\ &= \int dg [d\phi] \exp\left(\frac{a}{2a_\tau} \phi^\dagger (D(g) + D(g^{-1})) \phi\right) |D(g)\phi\rangle \langle \phi| \\ &= \int dg R(g) \exp\left(\frac{a}{2a_\tau} \phi^\dagger (D(g) + D(g^{-1})) \phi\right).\end{aligned}\quad (2.81)$$

表示 D 的生成元为矩阵 T^a , 满足

$$D(g) = \exp(ix^a T^a). \quad (2.82)$$

希尔伯特空间上的表示 R 的生成元为 Π^a , 满足对易关系

$$\begin{aligned}[\Pi^a, \Pi^b] &= if^{abc} \Pi^c, \\ [\Pi^a, \widehat{\phi}] &= -T^a \widehat{\phi}, \\ [\Pi^a, \widehat{\phi}^\dagger] &= \widehat{\phi}^\dagger T^a.\end{aligned}\quad (2.83)$$

注意, 等式左边对易关系依赖的乘法是希尔伯特空间上算符的乘法, 等式右边 T 和 $\widehat{\phi}$ 的乘法是基于经典指标 α 的矩阵乘法. 这里 Π 可以理解成指数上自由场 φ 的正则动量. 如果 g 是矩阵群元, 其 Haar 测度 (见附录 A.2) 包含对 x^a 的积分

$$d(g(x)) = J(x) dx, \quad (2.84)$$

且满足 $J(x) = J(-x)$. 于是算符 $\exp(-a_\tau \widehat{C})$ 可写成

$$\begin{aligned}\exp\left(-a_\tau \widehat{C}\right) &= \int dx J(x) \exp(ix^a \Pi^a) \exp\left(\frac{a}{2a_\tau} \phi^\dagger (D(g) + D(g^{-1})) \phi\right) \\ &= \int dx J(x) \exp(ix^a \Pi^a) \exp\left(\frac{a}{a_\tau} \phi^\dagger \cos(x^a T^a) \phi\right).\end{aligned}\quad (2.85)$$

在 $a_\tau \rightarrow 0$ 的极限下, 指数因子由鞍点主导. 对于 $SU(2)$ 规范群的基本表示, 我们可以取鞍点近似

$$\cos(x^a T^a) = 1 - \frac{1}{8} x^2 + O(x^4). \quad (2.86)$$

由此得到

$$\exp\left(-a_\tau \widehat{C}\right) = \exp\left(-\frac{2a_\tau \Pi^2}{a}\right). \quad (2.87)$$

这里 $\Pi^2 = \sum_a (\Pi^a)^2$ 是表示 R 的平方 Casimir.

考虑到同一等时面上的贡献, 最终我们得到

$$\begin{aligned} \exp(-a_\tau H) = & \exp\left(\frac{a_\tau}{2a} \sum_{n,k} \phi_{n+e_k} D(U_{n,k}^{-1}) \phi_n^\dagger\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{2a_\tau}{a} \sum_n \Pi_n^2\right) \exp\left(\frac{a_\tau}{2a} \sum_{n,k} \phi_{n+e_k}^\dagger D(U_{n,k}) \phi_n\right). \end{aligned} \quad (2.88)$$

因此格点系统中与规范场耦合的希格斯场的哈密顿量为

$$H = \frac{2}{a} \sum_n \Pi_n^2 - \frac{a_\tau}{2a} \sum_{n,k} (\phi_{n+e_k}^\dagger D(U_{n,k}) \phi_n + \text{h.c.}), \quad (2.89)$$

其中 D 是 $SU(2)$ 群的基本表示, 第一项是场的动能, 第二项包含了简谐相互作用及由约束导致的其他相互作用. 对易关系由方程 (2.83) 给出, 注意这里 ϕ 不满足自由玻色子产生湮灭算符的对易关系. 注意到, 和 González 等人^[46] 的结果类似, 这里 ϕ 和 ϕ^\dagger 不具有玻色子的对易关系. 另外, 如果我们将 $SU(2)$ 基本表示的 Dynkin 指标 $1/4$ 换成 $U(1)$ 基本表示的 Dynkin 指标, 即 1, 我们将回到文献中阿贝尔-希格斯理论的结果^[46].

本节得到的结果可以作为 $SU(2)$ 规范-希格斯模型量子模拟的理论基础. 目前, 人们对格点规范理论的量子模拟的关注主要集中在费米子物质场的模拟, 而 $SU(2)$ 规范-希格斯理论作为标准模型的重要组成部分, 具有诸如禁闭、弦破坏 (string breaking) 等丰富的物理现象^[19-22], 因此对其进行量子模拟是一个有吸引力的方向.

在对更复杂的李代数或李代数更复杂的表示作展开时, 方程 (2.86) 将不再具有简单的形式. 对此, 一种可能的研究路径是仍将形如 (2.89) 的哈密顿量加入 (后文即将介绍的) 格点规范理论的哈密顿量中. 如此得到的哈密顿量能在何种程度上正确描述一般的规范-希格斯模型有待进一步的研究. 另一种可能的路径是将希格斯场自身写成规范群的表示, 得到作用量^[13]

$$S = - \sum_{n,\mu} \text{tr} \left(\phi_{n+e_\mu}^\dagger D(U_{n,\mu}) \phi_n + \text{c.c.} \right). \quad (2.90)$$

重复上述推导, 唯一的区别是展开

$$\text{tr}(\phi^\dagger \cos(x^a T^a) \phi) = d - \frac{T}{2} x^2 + O(x^4), \quad (2.91)$$

其中 d 是表示的维数, T 是表示的 Dynkin 指标. 高斯积分后得到的结果与 (2.89) 有两点区别, 一是 Π^2 项系数不同, 二是希格斯场的分量数目不同: 对于一样的表示, 上文中希格斯场是向量, 而这里是矩阵. 第二点不同意味着对其进行量子模拟所需资源的差异.

2.3 Wilson 格点规范理论

K. G. Wilson 在 1974 年首先提出了格点规范理论以解释夸克禁闭^[11]. 在 Wilson 的构造中, 时间和空间同时被离散化成格点, 理论通过路径积分实现量子化. 尽管这一形式不是非常适合量子模拟, 基于这一形式的研究提供了丰富的物理洞见, 这些内容可以作为量子模拟的动机. 出于上述原因, 本节中我们简要讨论 Wilson 形式的格点规范理论, 我们的介绍主要参考 Y. Makeenko 的专著^[50].

2.3.1 理论的构建

首先, 将 d 维欧氏时空离散化成 d 维点阵 (lattice), 相邻格点间距为 a . 用 x 标记点阵上的格点 (site)^②, x 取离散值 $(n_1 a, \dots, n_d a)$. 设每个格点 x 上有一个玻色或费米的物质场 $\psi(x)$, 在局域规范变换下的变换规则为

$$\psi(x) \rightarrow V(x)\psi(x). \quad (2.92)$$

与连续场论中的比较子类似, 定义连接格点 x 和 $x + an^\mu$ 的连线 (link) 变量 $U_\mu(x)$, 该变量可看作是 x 上物质场张成的空间到 $x + an^\mu$ 上物质场张成的空间的映射, 在局域规范变换下其变换规则为

$$U_\mu(x) \rightarrow V(x + an^\mu) U_\mu(x) V^\dagger(x). \quad (2.93)$$

我们还要求 $U_{-\mu}(x + an^\mu) = U_\mu^\dagger(x)$. 对于规范群为紧李群 $U(1)$ 和 $SU(N)$ 的情况, 可以将 $U_{n,k}$ 写成指数形式

$$U_\mu(x) = \exp\left(i\Lambda_\mu^a(x)t^a\right), \quad (2.94)$$

其中 $\Lambda_\mu^a(x)$ 是李群的参数. 无穷小形式为

$$U_\mu(x) = \mathbb{I} + i\Lambda_\mu^a(x)t^a + O(\Lambda^2). \quad (2.95)$$

与连续时空的情形比较, 我们得到

$$\frac{1}{ag}\Lambda_\mu^a(x) \rightarrow A_\mu^a(x). \quad (2.96)$$

此即连续空间中规范场在格点中的对应. 需要指出的是, 为了表述方便, 在部分文献及本文后续内容的讨论中, 格点规范理论中“规范场”一词也可以指连线上定义的比较子本身.

一个小格 (plaquette) 是指点阵上最小的方格, 记作 p , 见图 2.1. 小格 p 的有向边界

② 本文依照传统, 将“lattice gauge theory”翻译为“格点规范理论”, 与此相适应, 在不致混淆时将“lattice”译作“格点”. 当我们需要讨论 lattice 的结构时, 我们不能说“格点上的格点”, 因此在这一语境下将“lattice”翻译为“点阵”, 将 lattice 上的 site 称作“格点”.

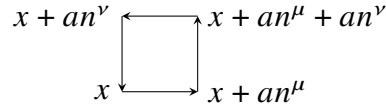


图 2.1 以 ∂p 为边界的小格 p , 箭头表示边界的方向, 亦即当我们把连线上的变量 $U_\mu(x)$ 看作映射时, 定义小格上变量 $U(\partial p)$ 时映射的方向.

记作 ∂p . 小格上可以定义变量

$$U(\partial p) \equiv U_\nu^\dagger(x) U_\mu^\dagger(x + an^\nu) U_\nu(x + an^\mu) U_\mu(x). \quad (2.97)$$

在局域规范变换下, $U(\partial p)$ 变为 $V(x)U(\partial p)V^\dagger(x)$, 因此它的迹是不变的. 因此, 我们可以用 $U(\partial p)$ 定义一个规范不变的局域 (local) 的理论. 如果要求理论的连续极限回到杨-Mills 理论 (2.20), 我们可以如下构造格点规范理论. 考虑到

$$\Lambda_\mu^a(x + an^\nu) = \Lambda_\mu^a(x) + a\partial_\nu \Lambda_\mu^a(x) + O(a^2), \quad (2.98)$$

用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式将 $U(\partial p)$ 展开, 得到

$$\begin{aligned} U(\partial p) &= \exp \left(ia \left(\partial_\mu \Lambda_\nu^a(x) - \partial_\nu \Lambda_\mu^a(x) \right) t^a - if^{abc} \Lambda_\nu^b(x) \Lambda_\mu^c(x) t^a + O(a^3) \right) \\ &= \exp \left(ia^2 g F_{\mu\nu}^a t^a + O(a^3) \right). \end{aligned} \quad (2.99)$$

注意连续极限下 $\Lambda \sim O(a)$. 因此, 小格变量的迹为

$$\text{tr } U(\partial p) = \text{tr } \mathbb{I} - \frac{1}{4} a^4 g^2 \sum_a \left(F_{\mu\nu}^a \right)^2 \quad (2.100)$$

从格点模型得到连续模型可通过代换

$$a^d \sum_x \rightarrow \int d^4x \quad (2.101)$$

实现, 因此, 我们可以构造作用量^③

$$S[U] = -\frac{a^{d-4}}{2g^2} \sum_p (\text{tr } U(\partial p) - \text{tr } \mathbb{I}), \quad (2.102)$$

系数 1/2 用于消去小格边界的两个方向导致的结果的加倍. 该作用量即 Wilson 格点规范理论的作用量.

为了量子化上述理论, 定义配分函数

$$Z = \int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) e^{-S[U]}. \quad (2.103)$$

③ 负号来自得到欧氏场论时的 Wick 旋转.

对于连线变量 $U_\mu(x)$ 的规范不变的泛函 $F[U]$, 其基态期望值为

$$\langle F[U] \rangle = Z^{-1} \int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) e^{-S[U]} F[U]. \quad (2.104)$$

对于规范群为李群的情况, 积分测度取 Haar 测度, 见附录 A.2.

2.3.2 Wilson 圈和夸克禁闭

为讨论夸克禁闭的机制, 我们先考虑阿贝尔规范场论的情形. 沿路径 C 运动的粒子, 其路径积分权重包含因子

$$\exp \left(i g \oint_C dx^\mu A_\mu(x) \right). \quad (2.105)$$

为计算总结面, 需要将这一因子与规范场动力学给出的路径积分权重相乘. 在路径积分的计算中, 如果我们先对规范场积分, 我们得到粒子沿上述路径运动的概率,

$$\left\langle \exp \left(i g \oint_C dx^\mu A_\mu(x) \right) \right\rangle. \quad (2.106)$$

这里我们令路径 C 为一个圈 (loop), 它表示一对正反粒子在同一时空点上产生, 沿路径演化, 并在另一个时空点上一同湮灭. 对于阿贝尔规范理论, 上述概率可以通过下式计算,

$$\exp \left(-g^2 \oint dx^\mu \oint dx'^\nu D_{\mu\nu}(x-x') \right), \quad (2.107)$$

其中 $D_{\mu\nu}(x-x')$ 是自由规范场的传播子. 对于 $(3+1)$ 维 QED, $D_{\mu\nu}(x-x')$ 正比于 $(x-x')^{-2}$. 因此在上式的二重积分中, 较大的 $(x-x')$ 贡献很小, 积分结果正比于圈的周长 P . 对于 $(1+1)$ 维 QED, 即 Schwinger 模型^[51], 传播子在 x 和 x' 距离较远时的渐进行为是 $\ln(x-x')^2$, 因此二重积分的结果正比于 P^2 . 因此, 相比于 $(3+1)$ 的情形, $(1+1)$ 维 QED 中, 大圈路径被严重抑制. 因此, 对于前者费米子之间为库仑相互作用, 单个费米子可以被观测到, 而后者展示出夸克禁闭的行为.

受上述讨论启发, 定义圈

$$C = \{x; \mu_1, \dots, \mu_n\}, \quad (2.108)$$

其中 $n^{\mu_1} + \dots + n^{\mu_n} = 0$, 见图 2.2 的左边. 格点相因子 $U(C)$ 由

$$U(C) = U_{\mu_n}(x + an^{\mu_1} + \dots + an^{\mu_{n-1}}) \cdots U_{\mu_2}(x + an^{\mu_1}) U_{\mu_1}(x) \quad (2.109)$$

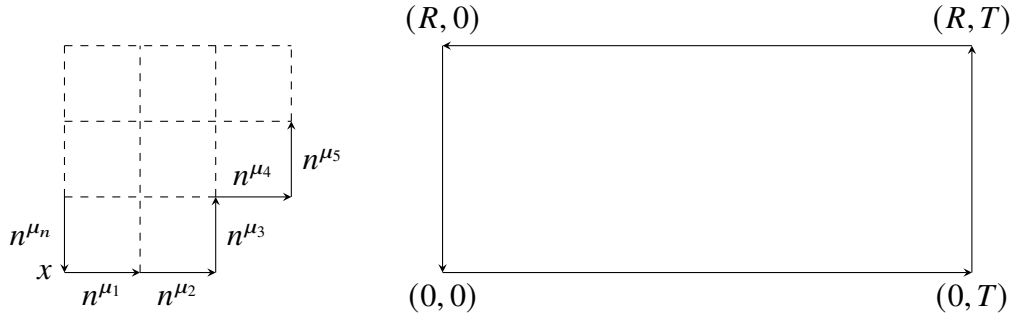


图 2.2 左图: 圈 C 的示意图. 注意圈不必然是二维的. 右图: 大小为 $R \times T$ 的方形圈, 横向为时间方向, 纵向为空间方向.

给出, $U(C)$ 的迹称为 Wilson 圈, 在局域规范变换下不变. Wilson 圈的期望值为

$$\begin{aligned} W(C) &\equiv \langle \text{tr } U(C) \rangle \\ &= Z^{-1} \int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) e^{-S[U]} \text{tr } U(C). \end{aligned} \quad (2.110)$$

在后文的讨论中, “Wilson 圈” 可能指代圈 C 本身、 $U(C)$ 或 $W(C)$, 视语境而定. 显然, Wilson 圈 $W(C)$ 是路径积分权重 (2.106) 的格点版本.

为计算 Wilson 圈, 在强耦合极限下, 我们可以依 $\beta = a^{d-4}/2g^2$ 作展开. 将 Haar 测度归一化为

$$\int dU = 1. \quad (2.111)$$

考虑到对称性和归一化条件, 展开后不为零的项具有下述形式,

$$\int dU U^i_j U^{\dagger k}_l = \frac{1}{N} \delta^i_l \delta^k_j. \quad (2.112)$$

上式可以几何地表示为

$$\frac{i}{l} \xleftrightarrow{\quad} \frac{j}{k} = \frac{1}{N} \times \left(\begin{array}{c} i \\ l \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} j \\ k \end{array} \right), \quad (2.113)$$

其中

$$\begin{array}{c} i \\ j \end{array} \bigg) = \delta^i_j. \quad (2.114)$$

另外,

$$\bigcirc = \delta^i_i = N. \quad (2.115)$$

对于一个小格, Wilson 圈的值为

$$W(\partial p) = \frac{\int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) (1 + \beta \sum_{p'} \text{tr } U(\partial p')) \text{tr } U(\partial p)}{\int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) (1 + \beta \sum_{p'} \text{tr } U(\partial p'))} + O(\beta^2). \quad (2.116)$$

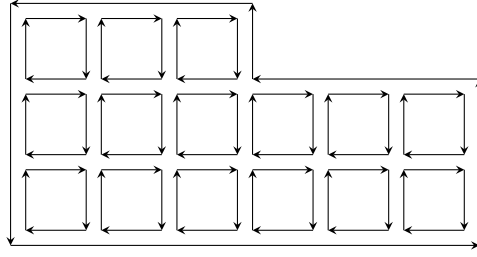


图 2.3 一般 Wilson 圈的最低阶近似.

这里我们没有写出作用量里的常数项. 对于分母, 不存在形如方程 (2.112) 的项, 因此其值为 1. 对于分子, 其非零的微扰项也是 Wilson 圈 $W(\partial p)$ 的一阶近似, 其值为

$$W(\partial p) = \beta \times \left[\partial p' \right] \partial p + O(\beta^2) = \beta \frac{1}{N^4} \times \left(\begin{array}{cc} \bigcirc & \bigcirc \\ \bigcirc & \bigcirc \end{array} \right) + O(\beta^2) = \beta + O(\beta^2). \quad (2.117)$$

为得到一般的 Wilson 圈的一阶近似, 将方程 (2.110) 展开, 使得圈 C 被小格覆盖, 且覆盖面积最小为 $A(C)$, 见图 2.3. 这里面积单位选为小格的面积. 因此 Wilson 圈的值为

$$W(C) = \beta^{A(C)} \frac{A(C)!}{A(C)!} \approx \exp(-KA(C)), \quad (2.118)$$

其中弦张力 (string tension) K 为

$$K = \ln \frac{2g^2}{a^{d-4}}. \quad (2.119)$$

此即著名的面积率 (area law). 与之对应的是上文中出现的周长律 (perimeter law) 对于方形圈 $R \times T$, 见图 2.2, Wilson 圈为

$$W(R \times T) = e^{-KRT/a^2}, \quad (2.120)$$

对 R 和 T 皆成指数关系.

对夸克禁闭的论证是上述讨论的自然结果. 在较长的时间尺度下, Wilson 圈相对于 R 的指数衰减抑制了大圈出现的可能性, 因而将正反夸克对禁闭在一起. 另一方面, 可以证明相互作用势能 $V(R)$ 满足

$$W(R \times T) = e^{-V(R)T}. \quad (2.121)$$

因此正反夸克的相互作用势能正比于距离 R , 存在禁闭效应.

2.3.3 格点规范理论的相结构

为了较好地把握格点规范理论的物理图像, 我们简要介绍它的相结构.

首先考虑纯规范理论. 一般而言, 格点规范理论在强耦合极限下存在禁闭效应, 称为禁闭项, 在弱耦合极限下不存在禁闭效应. 对于 $U(1)$ 格点规范理论, $3+1$ 维时存在

禁闭相和库仑相^[14], 后者中粒子间相互作用为库仑相互作用, 规范玻色子质量为零; 可以证明, $2+1$ 维 $U(1)$ 格点规范理论只有禁闭相^[15]. 而 $1+1$ 维的 $U(1)$ 规范理论, 即 Schwinger 模型, 在有动力学粒子时也是禁闭的^[12]. 在禁闭相中, $U(1)$ 格点规范理论存在狄拉克单极子 (monopole) 的凝聚, $SU(2)$ 和 $SU(3)$ 格点规范理论中有阿贝尔单极子和阿贝尔涡旋 (vortex) 的凝聚^[16].

加入物质场会使得格点规范理论的相更复杂. 这里我们只介绍加入了希格斯场的格点规范理论, 其作用量为^[13]

$$S[\phi(r); U_\mu(r)] = \frac{K}{2} \sum_{(r, \mu\nu)} \text{tr} [U_\mu(r) U_\nu(r + \hat{e}_\mu) U_\mu^\dagger(r + \hat{e}_\nu) U_\nu^\dagger(r) + \text{h.c.}] \\ + \frac{\beta}{2} \sum_{(r, \mu)} [\phi(r) \cdot D\{U_\mu(r)\} \cdot \phi^\dagger(r + \hat{e}_\mu) + \text{c.c.}] \quad (2.122)$$

如果我们引入的希格斯场在其取常矢量, 即么正规范 (unitary gauge) 下仍能保留规范群的某些子群的对称性, 维数较高时 (例如对 \mathbb{Z}_2 规范场维数 $d \geq 3$, 对 $U(1)$ 规范场维数 $d \geq 4$), 理论一般来说存在三种相:

1. 希格斯相, 对应 β 和 K 较大的情况. 其中规范玻色子有质量, 相互作用是短程的, Wilson 圈满足周长律.
2. 自由荷或库仑相, 对应 β 小, K 大的情况. 对连续规范场, 规范玻色子无质量, 静态荷之间的相互作用为库仑相互作用.
3. 禁闭相. Wilson 圈满足面积率, 规范玻色子有质量, 不存在独立的自由荷.

在希格斯场承载规范群基本表示时, 希格斯相和禁闭相可以平滑地连接. 在其他表示下, 希格斯相和禁闭相之间可能存在相边界.

对格点规范理论的相结构的讨论从上世纪 70 年代开始, 至今仍是一个活跃的研究领域^[17, 18], 其丰富的理论成果一方面提供了检验量子模拟试验结果的标尺, 另一方面也为量子模拟提供了丰富的应用场景.

2.4 Kogut-Susskind 格点规范理论

本节我们介绍 Kogut 和 Susskind 给出的格点规范理论的哈密顿形式^[43], 该形式更适合用于张量网络 (tensor network, TN) 数值计算和量子模拟. 我们首先讨论纯规范理论, 它包含一个“电场”部分和一个“磁场”部分, 随后我们以费米子为例, 在模型中加入物质场.

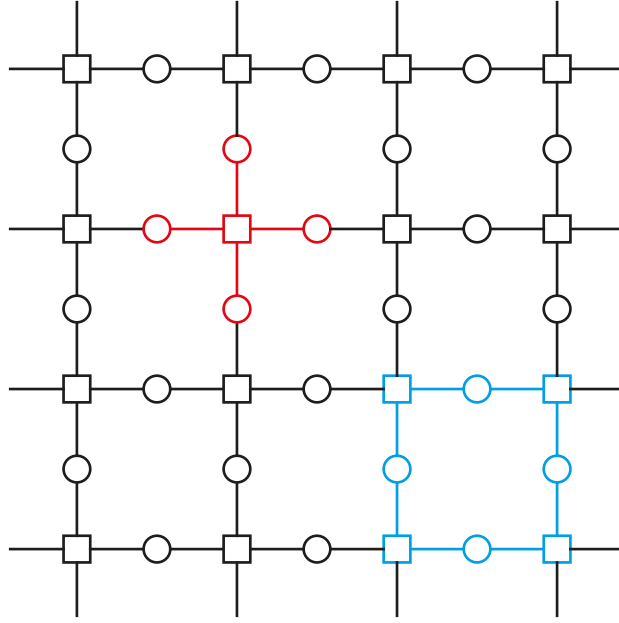


图 2.4 一个 $2+1$ 维时空中格点模型的空间部分. 物质场定义在方块表示的格点上, 比较子 U 定义在相邻格点的连线上. 蓝色的方形部分是一个小格. 在定义正则量子化时, 方块上定义了粒子的希尔伯特空间, 圆圈上定义了规范场的希尔伯特空间. 红色星形部分是一个顶点 (vertex), 一个局域规范变换作用在这样一个顶点上.

2.4.1 规范场部分

一个 $d+1$ 维时空中的点阵包含 d 维空间点阵和一个或连续, 或离散的时间维度, 空间点阵如图 2.4 所示. 上文介绍的 Wilson 格点规范理论中, 空间维度也是离散的, 在本节中我们将考虑连续时间的格点模型. 对 Wilson 格点规范理论使用转移矩阵方法即可得到这样的模型^[49], 在本节中, 我们将按历史发展的思路, 显式地从规范不变性的角度出发构造出相同的模型.

“磁场”部分的构造和 Wilson 格点规范理论类似. 假设每个格点上定义了物质场 ψ_n , 其变换规则为

$$\psi_n \rightarrow V_n \psi_n. \quad (2.123)$$

在格点 n 和 $n + e_k$ 之间的连线上定义 $U_{n,k}$, 在规范变换下其变换规则为

$$U_{n,k} \rightarrow V_{n+e_k} U_{n,k} V_n^\dagger. \quad (2.124)$$

同时要求 $U_{n+e_k,-k} = U_{n,k}^\dagger$. 对紧李群 $U(1)$ 和 $SU(N)$, 将 $U_{n,k}$ 展开

$$U_{n,k} = \exp(i\Lambda_{n,k}^a t^a), \quad (2.125)$$

其中 $\Lambda_{n,k}^a$ 为群参数. 无穷小时的形式为

$$U_{n,k} = \mathbb{I} + i\Lambda_{n,k}^a t^a + \mathcal{O}(\Lambda^2). \quad (2.126)$$

与连续场论比较, 有

$$\frac{1}{ag} \Lambda_{\mathbf{n},k}^a \rightarrow A_k^a(\mathbf{x}). \quad (2.127)$$

为构造磁场的哈密顿量, 考虑到局域性和规范不变性的要求, 考虑如图 2.4 所示的小格上连线变量的乘积

$$U_p \equiv U_{\mathbf{n}+e_j,-j} U_{\mathbf{n}+e_k+e_j,-k} U_{\mathbf{n}+e_k,j} U_{\mathbf{n},k} = U_{\mathbf{n},j}^\dagger U_{\mathbf{n}+e_j,k}^\dagger U_{\mathbf{n}+e_k,j} U_{\mathbf{n},k}. \quad (2.128)$$

为得到连续极限, 将

$$\begin{aligned} \Lambda_{\mathbf{n}+e_k,j}^a &= \Lambda_{\mathbf{n},j}^a + a \partial_k \Lambda_{\mathbf{n},j}^a + O(a^2) \\ \Lambda_{\mathbf{n}+e_j,k}^a &= \Lambda_{\mathbf{n},k}^a + a \partial_j \Lambda_{\mathbf{n},k}^a + O(a^2) \end{aligned} \quad (2.129)$$

展开到 a 的一阶项, 于是小格上比较子乘积的迹为

$$\begin{aligned} \text{tr } U_p &= \text{tr} \exp \left(i a \left(\partial_k \Lambda_{\mathbf{n},j}^a - \partial_j \Lambda_{\mathbf{n},k}^a \right) t^a - i f^{abc} \Lambda_{\mathbf{n},j}^b \Lambda_{\mathbf{n},k}^c t^a \right) \\ &= \text{tr} \exp \left(i a^2 g F_{kj}^a t^a \right) \quad \text{at } a \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (2.130)$$

在连续极限下,

$$\text{tr } U_p = \text{tr} \mathbb{I} - \frac{1}{4} a^4 g^2 \sum_a \left(F_{kj}^a \right)^2. \quad (2.131)$$

因此我们可以构造磁场哈密顿量为

$$H_{\text{mag}} = \frac{a^{d-4}}{g^2} \sum_p \left(\text{tr} \mathbb{I} - \frac{1}{2} (\text{tr } U_p + \text{h.c.}) \right) \quad (2.132)$$

如果我们希望定义时空都为格点的规范理论, 将上式作为作用量, 我们就得到了 Wilson 格点规范理论. 但是如果我们希望在连续时间中定义格点规范理论, 我们需要将磁场限制在空间点阵中, 再通过正则量子化方法定义电场. 另外, 我们需要指出各种变量作为算符应作用在怎样的希尔伯特空间上.

在正则量子化之前, 我们将物质定义在格点上, 将规范场 (比较子) 定义在连线上. 一个自然的选择是在对应的位置定义对应的希尔伯特空间, 见图 2.4. 希尔伯特空间里的量子态可以由规范群表示标记, 例如 $|jmn\rangle$ 对应表示矩阵元 $(U^j)_{mn}$, 其中上角标 j 标记第 j 个不可约表示. 对于连线上的希尔伯特空间, 我们可以定义规范变换的生成元, 其效果分别对应变换在连线变量上的左作用和右作用. 更明确地, 对于左生成元 $L_{\mathbf{n},k}$, 我们有

$$\exp(-i\lambda^a L_{\mathbf{n},k}^a) \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\mu\nu} \exp(i\lambda^a L_{\mathbf{n},k}^a) = (\exp(i\lambda^a t^a))_{\mu\rho}^j \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\rho\nu}, \quad (2.133)$$

对于右生成元 $R_{\mathbf{n},k}^a$, 我们有

$$\exp(-i\lambda^a R_{\mathbf{n},k}^a) \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\mu\nu} \exp(i\lambda^a R_{\mathbf{n},k}^a) = \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\mu\rho} (\exp(-i\lambda^a t^a))_{\rho\nu}^j. \quad (2.134)$$

这里 μ, ν 是经典指标, 对应物质场的分量和比较子的矩阵指标, 而等式左边的乘法为希尔伯特空间中量子算符的乘法. 上述生成元的物理意义可以这样理解, 如果对格点 \mathbf{n} 上的物质场作规范变换, 连线 (\mathbf{n}, k) 上的比较子应作方程 (2.134) 右边的协同变换, 因此右生成元生成了格点 \mathbf{n} 上局域规范变换诱发的比较子的变换; 同理, 左生成元生成了格点 $\mathbf{n} + \mathbf{e}_k$ 上局域规范变换诱发的比较子的变换. 利用 Baker-Hausdorff 展开, 我们得到对易关系

$$\begin{aligned} \left[L_{\mathbf{n},k}^a, \left(U_{\mathbf{n}',k'}^j \right)_{\mu\nu} \right] &= -\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \delta_{kk'} (T^a)_{\mu\rho}^j \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\rho\nu}, \\ \left[R_{\mathbf{n},k}^a, \left(U_{\mathbf{n}',k'}^j \right)_{\mu\nu} \right] &= \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \delta_{kk'} \left(U_{\mathbf{n},k}^j \right)_{\mu\rho} (T^a)_{\rho\nu}^j, \end{aligned} \quad (2.135)$$

其中 T^a 是李代数的表示, 等式两边乘法的意义与上文相同, 即左边是量子的, 右边是经典的. 因为生成元是李代数在希尔伯特空间上的表示, 其对易关系应设定为

$$\begin{aligned} [L_{\mathbf{n},k}^a, L_{\mathbf{n}',k'}^b] &= i\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \delta_{kk'} f^{abc} L_{\mathbf{n},k}^c, \\ [R_{\mathbf{n},k}^a, R_{\mathbf{n}',k'}^b] &= i\delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} \delta_{kk'} f^{abc} R_{\mathbf{n},k}^c, \\ [L_{\mathbf{n},k}^a, R_{\mathbf{n}',k'}^b] &= 0. \end{aligned} \quad (2.136)$$

在正则量子化的连续模型中, 电场 $E^{a,k} = F^{a,0k} = -\pi^{a,k}$ 满足对易关系

$$[E^{a,k}(\mathbf{x}), U(y + h\mathbf{n}, y)] = -\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) g h n^k t^a U(y + h\mathbf{n}, y). \quad (2.137)$$

比较上式与 $L_{\mathbf{n},k}$ 和 $U_{\mathbf{n},k}$ 的对易关系, 可知格点模型与连续模型有如下对应,

$$a^{1-d} g L_{\mathbf{n},k} \rightarrow E^{a,k}(\mathbf{x}). \quad (2.138)$$

因此, 电场能量为

$$H_{\text{el}} = \frac{a^{2-d} g^2}{2} \sum_{\mathbf{n},k} J_{\mathbf{n},k}^2, \quad (2.139)$$

其中 $J_{\mathbf{n},k}^2 \equiv \sum_a L_{\mathbf{n},k}^a L_{\mathbf{n},k}^a = \sum_a R_{\mathbf{n},k}^a R_{\mathbf{n},k}^a$ 为平方 Casimir 算符.

下面我们以 $\text{SU}(2)$ 规范群为例说明上述定义. 对于连线 (\mathbf{n}, k) 上由电场哈密顿量给出的模型, 其基态 $|0\rangle$ 定义为使得 $L|0\rangle = R|0\rangle = 0$ 满足的量子态, 为了简介, 我们略去了 (\mathbf{n}, k) 指标. 我们选取李代数的表示矩阵为 $J_0, J_{1/2}, J_1 \cdots$, 其中 J_j 为角动量矢量算符, 满足 $(J_j)^2 = j(j+1)$. 上述矩阵取算符在 J_j^z 本征态构成的基 $|j, m\rangle$ 下的形式, 其中

$m = -j, -j+1, \dots, j$. 因此 $\left(J_j^z\right)_{lm} = \delta_{lm}m$. 定义量子态 $U_{lr}^j |0\rangle = |jlr\rangle$, 于是我们有

$$\begin{aligned} R^2 |jlr\rangle &= L^2 |jlr\rangle = \sum_{a \in \{x, y, z\}} [L^a, [L^a, U_{lr}^j]] |0\rangle \\ &= \left((J_j^z)^2\right)_{lm} U_{mr}^j |0\rangle \quad j \text{ not summed} \\ &= j(j+1) |jlr\rangle. \end{aligned} \quad (2.140)$$

以及

$$\begin{aligned} L^z |jlr\rangle &= [L^z, U_{lr}^j] |0\rangle \\ &= -\left(J_j^z\right)_{lm} U_{mr}^j |0\rangle \quad j \text{ not summed} \\ &= -l |jlr\rangle. \end{aligned} \quad (2.141)$$

类似地, 我们有 $R |jlr\rangle = r |jlr\rangle$.

夸克禁闭也可在哈密顿形式下讨论^[43, 52]. 将一对正反夸克放在格点 \mathbf{n} 和 $\mathbf{n} + \mathbf{m}$ 上, 这对正反夸克由 $\psi_{\mathbf{n}}^\dagger$ 和 $\psi_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}$ 生成, 为保证局域规范不变性, 由矩阵 U 组成的弦将其连接,

$$\psi_{\mathbf{n}}^\dagger \left(\prod_{\text{from } \mathbf{n} \text{ to } \mathbf{m}} U \right) \psi_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}. \quad (2.142)$$

放入这对正反夸克前, 真空由基态

$$E |0\rangle = 0 \quad (2.143)$$

描述, 其中 E 为 L 或 R . 以 $SU(2)$ 为例, 放入这对正反夸克后, 电场能可通过考虑

$$J^2 U_{lr}^j |0\rangle = j(j+1) U_{lr}^j |0\rangle \quad (2.144)$$

得出. 如果物质场承载基本表示, 则电场能量为

$$V(R) = \frac{a^{2-d} g^2}{2} \frac{3}{4} \frac{R}{a}, \quad (2.145)$$

与距离 $R = |\mathbf{m}|$ 成线性关系, 这一随距离快速增长 (而不是像库仑相互作用那样衰减) 的相互作用能禁止了低能下夸克的存在.

2.4.2 包含费米子的模型和高斯定理

下面我们以费米子为例, 将物质场加入 Kogut-Susskind 格点规范理论中. 正如在我们讨论物质场时已经做过的, 为保持局域规范不变性, 我们在跃迁项的产生和湮灭算符之间加入比较子, 即

$$\psi_{\mathbf{n}+e_k}^\dagger \psi_{\mathbf{n}} \rightarrow \psi_{\mathbf{n}+e_k}^\dagger U_{\mathbf{n},k} \psi_{\mathbf{n}}. \quad (2.146)$$

为了记号简洁, 我们使用 ψ_n 替代 2.2.1 节中的 $\hat{\phi}_n$. 费米子算符之间的对易关系为

$$\{\psi_n, \psi_m\} = 0, \quad \{\psi_n^\dagger, \psi_m\} = \delta_{mn}. \quad (2.147)$$

将上节中的纯规范场哈密顿量和费米子哈密顿量结合, 我们得到包含物质和规范场动力学的完整哈密顿量,

$$H = \epsilon_d \sum_{n,k} (\psi_{n+e_k}^\dagger U_{n,k} \psi_n e^{i\theta_k} + \text{h.c.}) + m \sum_n (-1)^{\sum_k n_k} \psi_n^\dagger \psi_n \\ + \frac{a^{2-d} g^2}{2} \sum_{\text{links}} J^2 + \frac{a^{d-4}}{g^2} \sum_p \left(\text{tr} \mathbb{I} - \frac{1}{2} (\text{tr} U_p + \text{h.c.}) \right). \quad (2.148)$$

上式为 (2.31) 的格点形式, 各项物理意义与 (2.31) 平行, 第一行为与规范场耦合的交错费米子的哈密顿量, 第二行为纯规范场的哈密顿量, 两项分别为电场能量和磁场能量. 注意, 这里跃迁项中算符的顺序与将 $U_{n,k}$ 看作格点间的映射的想法是一致的. 在更常见的约定中, 跃迁项算符顺序与上式相反, 与此同时连线上的左右生成元在几何上看也更自然. 在本文的后续讨论中我们不执着于某一种约定而会明确写出.

最后我们讨论连续场论中高斯定理在格点模型中的对应, 为此我们考虑局域规范变换的生成元. 如上节所述, 完整的局域规范变换会影响格点上的物质场及与格点连接的连线上的规范场, 将连线上规范变换的左右生成元几何地对应到连线的左右两部分, 可以认为局域规范变换作用在图 2.4 所示的一个星形顶点 (vertex) 上, 它包含了一个格点、 d 个进入格点的连线和 d 个从格点发出的连线, d 为空间维数. 因此, 局域规范变换算符为

$$V_n(\lambda^a) = \sum_i \exp(i\lambda^a L_i^a) \sum_o \exp(i\lambda^a R_o^a) \exp(i\lambda^a Q_n^a), \quad (2.149)$$

其中 i 表示 ‘进入’ (incoming), o 表示 ‘发出’ (outcoming), Q^a 是费米子场规范变换的生成元, 满足

$$(\exp(-i\lambda^a Q^a))^j \psi_\mu (\exp(i\lambda^a Q^a))^j = D_{\mu\nu}^j(\lambda^a) \psi_\nu. \quad (2.150)$$

这里 $D^j(\lambda^a)$ 是规范群第 j 个不可约表示在参数 λ^a 确定的变换群元上的取值. 可以证明^[53]

$$(\exp(i\lambda^a Q^a))^j = \exp\left(i\psi_\mu^\dagger q_{\mu\nu} \psi_\nu\right) \det(D^j(-\lambda^a))^N, \quad (2.151)$$

其中 $q_{\mu\nu}$ 是 q^j 的矩阵元, 后者满足 $D^j(\lambda^a) = \exp(iq^j)$, 对于偶子点阵中的格点, $N = 0$, 对于奇子点阵中的格点, $N = 1$. 上式中的行列式因子是费米子的交错导致的. 于是我们立刻得到对于 $SU(N)$ 群, 费米子算符规范变换的生成元为

$$(Q^a)_{SU(N)}^j = \psi_\mu^\dagger (T^a)_{\mu\nu}^j \psi_\nu, \quad (2.152)$$

对于 $U(1)$ 群, 费米子算符规范变换的生成元为

$$Q_{U(1)} = \psi^\dagger \psi - \frac{1}{2} (1 - (-1)^N). \quad (2.153)$$

因为模型在局域规范变换下不变, 物理态 $|\text{phy}\rangle$ 应满足

$$V_n(\lambda^a) |\text{phy}\rangle = e^{i\lambda^a q_n^a} |\text{phy}\rangle, \quad (2.154)$$

其中 q_n^a 是一个实数, 即局域规范变换作用在物理态上只改变了一个全局的相位. 局域规范变换的生成元为

$$G_n^a = \sum_i L_i^a + \sum_o R_o^a + Q_n^a. \quad (2.155)$$

由于哈密顿量是规范不变的, 它与 G_n^a 对易, 因此我们得到了类似于连续情况的高斯定理

$$G_n^a |q^a\rangle = q^a |q^a\rangle. \quad (2.156)$$

这里 q^a 可以看作静态的背景电荷分布.

本节给出的哈密顿量 (2.148) 和高斯定理 (2.156), 是格点规范理论量子模拟的目标模型.

第三章 格点规范理论的维数截断

在上一章介绍的格点规范理论中, 格点之间连线上的希尔伯特空间维数为无穷大, 这一性质使其不便于使用冷原子体系进行量子模拟. 本章我们将对原始的格点规范理论 (2.148) 引入维数截断. 维数截断的基本思路类似于自旋的量子化, 通过群表示论的手段将连续取值的变量替换为有限维希尔伯特空间中的线性映射——即算符. 简单来说, 维数截断就是将电场取值量子化并选取其中一部分作为允许的态. 我们首先介绍两种维数截断的方案, 随后对 $1+1$ 维时空中的 $U(1)$ 规范理论进行数值检验. 我们将基于数值结果对维数截断及其与量子模拟的关系作出评论.

3.1 量子连线模型

在目前的量子模拟中, 对格点规范理论进行维数截断最常见的方案是量子连线模型 (quantum link model, QLM)^[54, 55], 该模型在格点之间的连线 (link) 上引入希尔伯特空间对规范场作量子化, 因此得名.

对于 $U(1)$ 的格点规范理论, 令 $R = -L = E$, 则有在同一连线上对易关系 $[E, U] = U$, $[E, U^\dagger] = ([U, E])^\dagger = -U^\dagger$ 成立. 将连线上的变量映射到自旋算符 $S^i, i \in \{x, y, z\}$ 上,

$$U \mapsto S^+ \equiv S^x + iS^y, \quad U^\dagger \mapsto S^- \equiv S^x - iS^y, \quad E \mapsto S^z. \quad (3.1)$$

上述映射可以通过 Schwinger 代数实现. 考虑两种玻色子 a 和 b , 令

$$S^+ = a^\dagger b, \quad S^z = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b). \quad (3.2)$$

这里 a 和 b 满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1, \quad (3.3)$$

其他对易子均为零. 上述映射保留了 $U(1)$ 格点规范理论中所有的对易关系, 但是新增了

$$[U, U^\dagger] = 2E. \quad (3.4)$$

幸运的是, 这一对易关系并不破坏规范不变性和理论的其他对称性^[56].

一个 $SU(2)$ 的 QLM 可以通过 $SO(5)$ 群的十个生成元构造出来^[54]. 将规范变量 U 分解为实部和虚部,

$$U = U^0 + i\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.5)$$

其中 σ 是泡利矩阵构成的向量. 基于此, 我们令

$$R = \begin{pmatrix} \tau & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tau \end{pmatrix}, \quad U^0 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -i\tau \\ i\tau & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

这里 $\mathbf{1}$ 是 2×2 的单位矩阵, τ 是泡利矩阵组成的向量. 这里使用 τ 而非 σ 是为了强调它们作用于不同的空间.

另一种构造 SU(2) QLM 的方法是基于谐振子前势 (harmonic oscillator pre-potential)^[57]. 在每个连线上, 我们希望构造算符使其满足对易关系

$$\begin{aligned} [L^a, L^b] &= if^{abc} L^c, & [R^a, R^b] &= if^{abc} R^c, \\ [L^a, U] &= -t^a U, & [R^a, U] &= U t^a. \end{aligned} \quad (3.7)$$

这里 t^a 是 SU(2) 群基本表示的生成元, 即自旋 1/2 算符, 它们满足归一化条件

$$[t^a, t^b] = i\epsilon^{abc} t^c, \quad \text{tr}(t^a t^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab}. \quad (3.8)$$

对应于一个连线的左端和右端, 定义玻色子 a^i 和 b^i , 其中 i 是色空间的指标. 基于上述约定, 连线上的算符可以写成

$$\begin{aligned} L^a &= a^{i\dagger} t_{ij}^a a^j, & R^a &= b^{i\dagger} t_{ij}^a b^j, \\ U &= \frac{1}{N} \begin{pmatrix} a^{2\dagger} b^{1\dagger} + a^1 b^2 & a^{2\dagger} b^{2\dagger} - a^1 b^1 \\ -a^{1\dagger} b^{1\dagger} - a^2 b^2 & -a^{1\dagger} b^{2\dagger} + -a^2 b^1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

这里 $N = a^{i\dagger} a^i = b^{i\dagger} b^i$ 是连线左端或右端的玻色子数量, 左右两端玻色子数量相等. 这一数量可以被算符 U 改变.

这一方案可以进一步拓展到 SU(3) 乃至 SU(N) 的情况^[58]. 但其形式过于复杂, 所需维数也很大, 不适于实现量子模拟.

对于一般的 SU(N) 模型, 我们希望构造出满足对易关系 (3.7) 的算符. 这一要求可通过嵌入代数 SU($2N$) 来实现. 或者更显式地, 引入费米子 rishon c_{\pm} , 其中正负号对应连线的左端和右端, 令

$$\begin{aligned} L^a &= c_+^{i\dagger} t_{ij}^a c_+^j, & R^a &= c_-^{i\dagger} t_{ij}^a c_-^j, \\ U^{ij} &= c_+^i c_-^{j\dagger}, & E &= \frac{1}{2} (c_-^{i\dagger} c_-^i - c_+^{i\dagger} c_+^i). \end{aligned} \quad (3.10)$$

这一构造导致了一个新的对易关系

$$[U^{ij}, U^{kl\dagger}] = \delta_{ik} t_{jl}^{a*} R^a - \delta_{jl} t_{ik}^a L^a + 2\delta_{ik} \delta_{jl} E. \quad (3.11)$$

这里我们引入算符 E , 因为上述构造不仅满足 SU(N) 的规范不变性, 还有一 U(1) 的规

范冗余, 后者的生成元为

$$G_n = \psi_n^\dagger \psi_n + \sum_{i,o} (E_{n,o} - E_{n,i}). \quad (3.12)$$

我们可以通过显式地破坏 $U(1)$ 规范不变性来消去它, 例如在哈密顿量中增加一项

$$\gamma \sum_l (\det U_l + \det U_l^\dagger). \quad (3.13)$$

这里 l 表示连线. 注意到

$$\begin{aligned} \det U &= \frac{1}{N!} \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} U^{i_1 i'_1} U^{i_2 i'_2} \dots U^{i_N i'_N} \epsilon_{i'_1 i'_2 \dots i'_N} \\ &= N! c_+^1 c_-^{1\dagger} c_+^2 c_-^{2\dagger} \dots c_+^N c_-^{N\dagger}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

定义守恒算符 $\mathcal{N} = c_+^{i\dagger} c_+^i + c_-^{i\dagger} c_-^i$, 只有当量子态满足 $\mathcal{N} = N$ 时, 上述行列式不为零. 因此我们可将连线上的量子态限制在 $\mathcal{N} = N$ 的情况以得到 $SU(N)$ 的规范理论. 在这一构造中, 一个连线上费米子态的数量为 $(2N)!/(N!)^2$ —— $SU(2)$ 有 6 个态, $SU(3)$ 有 20 个. 连线上要求的量子态的数量在一定程度上反映了实验上实现量子模拟的困难性.

3.2 表示空间截断

E. Zohar 等人^[53] 给出了另一种基于表示空间的维数截断方案. 在这一方案中, $SU(N)$ 的格点规范理论是基于 $SU(N)$ 自身而非 $SU(2N)$ 的表示构造的. 同时, 连线并不像 QLM 中那样被分成左右两端. 这一方案可以选择不同的表示进行截断, 因此在截断维数的选择上有更大的自由度. 本节我们基于本文的约定将该方案重新表述并补全群表示论相关的推导细节. 本节不采用爱因斯坦求和约定, 所有求和将被显式地写出.

对应么正矩阵表示的矩阵元 D_{mn}^j , 正交基 $|jmn\rangle$ 张成了这里需要的群表示空间. 在有限群中, 所有不等价不可约表示维数的平方和等于群的阶, 因此基 $|jmn\rangle$ 的个数和用群元标记的基 $|g\rangle$ 的个数相等. 令它们张成同一线性空间并定义变换关系

$$\langle g | jmn \rangle = \sqrt{\frac{\dim(j)}{|G|}} D_{mn}^j(g). \quad (3.15)$$

注意上述系数保证了

$$\langle g | h \rangle = \sum_{j,m,n} \frac{\dim(j)}{|G|} D_{mn}^j(g) D_{mn}^{j*}(h) = \delta_{gh}, \quad (3.16)$$

即以群元标记的基的正交性.

在讨论该方案的实现之前, 作为准备, 我们简单回顾 Clebsch-Gordan 系数的基本性

质. 如果一个态 $|j, \mu\rangle$ 在群作用 \hat{g} 下依表示 j 变换,

$$\hat{g}|j, \mu\rangle = \sum_{\rho} D_{\rho\mu}^j(g) |j, \rho\rangle, \quad (3.17)$$

同时态 $|k, \nu\rangle$ 在表示 k 下以类似方式变换, 则两个态的张量积的变换可写成

$$\hat{g}|j\mu, k\nu\rangle = \sum_{\rho, \lambda} D_{\rho\mu}^j(g) D_{\lambda\nu}^k(g) |j\rho, k\lambda\rangle, \quad (3.18)$$

得到的仍是一个群表示. 这一表示一般而言是可约的, 可以通过插入完备基 $|J, M\rangle$ 来约化, 即

$$\sum_{J, M, N} |J, N\rangle \langle J, M|j\mu, k\nu\rangle D_{NM}^J(g) = \sum_{J, M, \rho, \lambda} |J, M\rangle \langle J, M|j\rho, k\lambda\rangle D_{\rho\mu}^j(g) D_{\lambda\nu}^k(g). \quad (3.19)$$

两边同时乘 $\langle J, N|$ 得到

$$\sum_M D_{NM}^J(g) \langle JM|j\mu, k\nu\rangle = \sum_{\rho, \lambda} D_{\rho\mu}^j(g) D_{\lambda\nu}^k(g) \langle JN|j\rho, k\lambda\rangle. \quad (3.20)$$

内积 $\langle JM|j\mu, k\nu\rangle$ 被称为 Clebsch-Gordan 系数, 简称为 CG 系数.

将连线上的希尔伯特空间映射到一个 Fock 空间, 后者的真空态记作 $|\Omega\rangle$. 产生算符定义为

$$a_{mn}^{j\dagger} |\Omega\rangle = |jmn\rangle. \quad (3.21)$$

我们限制总粒子数 $N = \sum_{jmn} a_{mn}^{j\dagger} a_{mn}^j$ 为 1. 为满足此限制, 需要哈密顿量与粒子数算符对易, 完成构造后我们会验证这一点. 注意这里的产生湮灭算符可以是玻色的, 也可以是费米的.

定义算符 U^j 为

$$U_{mm'}^j = \sum_{J, M, M', K, N, N'} \sqrt{\frac{\dim(J)}{\dim(K)}} \langle JM, jm|KN\rangle \langle KN'|JM', jm'\rangle a_{NN'}^{K\dagger} a_{MM'}^J. \quad (3.22)$$

在单位占据的条件下, 这一算符的矩阵元为

$$\langle KNN'|U_{mm'}^j|JMM'\rangle = \sqrt{\frac{\dim(J)}{\dim(K)}} \langle JM, jm|KN\rangle \langle KN'|JM', jm'\rangle. \quad (3.23)$$

为得到群元基下的矩阵元, 注意到内积 (3.15) 我们有

$$\langle g|U_{mn}^j|h\rangle = \sum_{J, M, M', K, N, N'} \frac{\dim(J)}{|G|} \langle JM, jm|KN\rangle \langle KN'|JM', jn\rangle D_{NN'}^K(g) D_{MM'}^{J*}(h). \quad (3.24)$$

利用 CG 系数的性质 (3.20),

$$\begin{aligned} \langle g | U_{mn}^j | h \rangle = & \sum_{J, M, M', K, N, M'', m''} \frac{\dim(J)}{|G|} \\ & \times \langle JM, jm | KN \rangle \langle KN | JM'', jm'' \rangle D_{M''M'}^J(g) D_{m''n}^j(g) D_{MM'}^{J*}(h). \end{aligned} \quad (3.25)$$

对 K, N 求和得到单位算符, 进而得到 $\delta_{MM''} \delta_{mm''}$, 因此我们有

$$\langle g | U_{mn}^j | h \rangle = D_{mn}^j \sum_{J, M, M'} \frac{\dim(J)}{|G|} D_{MM'}^J(g) D_{MM'}^{J*}(h). \quad (3.26)$$

再利用群论的标准结论, 得到

$$\langle g | U_{mn}^j | h \rangle = D_{mn}^j \delta_{gh}. \quad (3.27)$$

再定义左右变换算符为

$$\widehat{g}_L = \sum_{j, m, n, l} a_{ml}^{j\dagger} D_{mn}^{j*}(g) a_{nl}^j. \quad (3.28)$$

首先我们可以验证我们的确得到了一个群作用. 考虑群元 g 和 h ,

$$\begin{aligned} \widehat{g}_L \widehat{h}_L &= \sum_{j, m, n, l} \sum_{j', m', n', l'} a_{ml}^{j\dagger} D_{nm}^j(g^{-1}) a_{nl}^j a_{m'l'}^{j'\dagger} D_{n'm'}^{j'}(h^{-1}) a_{n'l'}^{j'} \\ &= \sum_{j, m, n, l, n'} a_{ml}^{j\dagger} D_{nm}^j(g^{-1}) D_{n'n}^j(h^{-1}) a_{n'l}^j \\ &= \sum_{j, m, n', l} a_{ml}^{j\dagger} D_{n'm}^j((gh)^{-1}) a_{n'l}^j \\ &= \widehat{gh}_L. \end{aligned} \quad (3.29)$$

在推导中我们利用了单位占据的性质, 即连续两个湮灭算符将得到零, 所以无论对玻色子还是费米子, 算符 $a_A a_B^\dagger a_C$ 和算符 $\delta_{AB} a_C$ 相等. 我们也利用了表示的么正性. 除此之外, 我们还需验证这一定义与 (2.133) 吻合, 即我们要验证

$$\langle KNN' | \widehat{g}_L^\dagger U_{mn}^j \widehat{g}_L | JMM' \rangle = \langle KNN' | \sum_k D_{mk}^j(g) U_{kn}^j | JMM' \rangle. \quad (3.30)$$

等式右边为

$$\text{R.H.S.} = \sqrt{\frac{\dim(J)}{\dim(K)}} \sum_k D_{mk}^j(g) \langle JM, jk | KN \rangle \langle KN' | JM', jn \rangle. \quad (3.31)$$

等式左边为

$$\text{L.H.S.} = \langle KNN' | \sum_{j', s, t, l} a_{tl}^{j'\dagger} D_{st}^{j'}(g) a_{sl}^{j'} \sum_{\widetilde{J}, \widetilde{M}, \widetilde{M}', \widetilde{K}, \widetilde{N}, \widetilde{N}'} \sqrt{\frac{\dim(\widetilde{J})}{\dim(\widetilde{K})}}$$

$$\times \langle \tilde{J}\tilde{M}, jm | \tilde{K}\tilde{N} \rangle \langle \tilde{K}\tilde{N}' | \tilde{J}\tilde{M}', jn \rangle a_{\tilde{N}\tilde{N}'}^{\tilde{K}^\dagger} a_{\tilde{M}\tilde{M}'}^{\tilde{J}} \sum_{j'', p, q, r} a_{qr}^{j''\dagger} D_{pq}^{j''} (g^{-1}) a_{pr}^{j''} |JMM'\rangle \quad (3.32)$$

利用单位占据条件 $a_A a_B^\dagger a_C = \delta_{AB} a_C$, 我们可以将上述表达式化简为

$$\begin{aligned} \text{L.H.S.} = & \langle KNN' | \sum_{\tilde{K}, \tilde{N}, \tilde{N}', t, \tilde{J}, \tilde{M}, \tilde{M}', p} a_{t\tilde{N}'}^{\tilde{K}^\dagger} D_{\tilde{N}t}^{\tilde{K}}(g) \sqrt{\frac{\dim(\tilde{J})}{\dim(\tilde{K})}} \\ & \times \langle \tilde{J}\tilde{M}, jm | \tilde{K}\tilde{N} \rangle \langle \tilde{K}\tilde{N}' | \tilde{J}\tilde{M}', jn \rangle D_{p\tilde{M}}^{\tilde{J}}(g^{-1}) a_{p\tilde{M}'}^{\tilde{J}} |JMM'\rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

计算上式最左边和最右边的态和算符得到 $\delta_{K\tilde{K}} \delta_{Nt} \delta_{N'\tilde{N}'} \delta_{\tilde{J}J} \delta_{pM} \delta_{\tilde{M}'M'}$, 因此上式化为

$$\text{L.H.S.} = \sqrt{\frac{\dim(J)}{\dim(K)}} \sum_{\tilde{N}, \tilde{M}} D_{\tilde{N}N}^K(g) D_{M\tilde{M}}^J(g^{-1}) \langle \tilde{J}\tilde{M}, jm | K\tilde{N} \rangle \langle K\tilde{N}' | JM', jn \rangle. \quad (3.34)$$

利用方程 (3.20) 可得

$$\begin{aligned} \sum_{\tilde{N}} D_{\tilde{N}N}^K(g) \langle \tilde{J}\tilde{M}, jm | K\tilde{N} \rangle &= \left(\sum_{\tilde{N}} D_{N\tilde{N}}^K(g^{-1}) \langle K\tilde{N} | \tilde{J}\tilde{M}, jm \rangle \right)^* \\ &= \sum_{\tilde{M}', k} D_{\tilde{M}\tilde{M}'}^J(g) D_{mk}^J(g) \langle \tilde{J}\tilde{M}', jk | KN \rangle. \end{aligned} \quad (3.35)$$

最终

$$\begin{aligned} \text{L.H.S.} = & \sqrt{\frac{\dim(J)}{\dim(K)}} \sum_{\tilde{M}, \tilde{M}', k} D_{mk}^J(g) D_{M\tilde{M}}^J(g^{-1}) D_{\tilde{M}\tilde{M}'}^J(g) \\ & \times \langle \tilde{J}\tilde{M}', jk | KN \rangle \langle K\tilde{N}' | JM', jn \rangle = \text{R.H.S.} \end{aligned} \quad (3.36)$$

类似地, 我们可以定义

$$\hat{g}_R = \sum_{j, m, n, l} a_{lm}^{j\dagger} D_{mn}^j(g) a_{ln}^j, \quad (3.37)$$

并验证

$$\langle KNN' | \hat{g}_R^\dagger U_{mn}^j \hat{g}_R | JMM' \rangle = \langle KNN' | \sum_k U_{mk}^j D_{kn}^j(g^{-1}) | JMM' \rangle. \quad (3.38)$$

即 (2.134) 成立.

对于紧李群左右变换算符可以写成

$$\hat{g}_L = \sum_{j, m, n, l} a_{ml}^{j\dagger} (\exp(-i\lambda^a T^a))_{mn}^j a_{nl}^j = \sum_j \exp\left(-i\lambda^a \sum_{m, n, l} a_{ml}^{j\dagger} (T^a)_{mn}^j a_{nl}^j\right). \quad (3.39)$$

如前所述, 第二个等号在单位占据下成立. 因此格点规范理论中的电场可以表示为

$$L^a = - \sum_{j,m,n,l} a_{ml}^{j\dagger} (T^a)_{mn}^j a_{nl}^j. \quad (3.40)$$

注意, 对指标 j 的求和实际上是不同不变子空间上算符的直和. 类似地我们有

$$R^a = \sum_{j,m,n,l} a_{lm}^{j\dagger} (T^a)_{mn}^j a_{ln}^j. \quad (3.41)$$

容易验证对易关系 (2.136) 成立.

为了得到更清晰的图像, 考虑群元基下的磁场项 (2.132). 首先计算

$$\text{Tr } U_p = \sum_{g_1, g_2, g_3, g_4} |g_4^{-1} g_3^{-1} g_2 g_1\rangle \langle g_4^{-1} g_3^{-1} g_2 g_1| \text{Tr } D^j (g_4^{-1} g_3^{-1} g_2 g_1). \quad (3.42)$$

将群的共轭类记作 C , 定义投影算符 $\Pi_C \equiv \sum_{g \in C} |g\rangle \langle g|$. 于是我们可以将迹写成

$$\text{Tr } U_p = \sum_C \chi^j(C) \Pi_C, \quad (3.43)$$

其中 $\chi^j(C)$ 是第 j 个表示在共轭类 C 上的特征标. 因此哈密顿量的磁场项为

$$H_{\text{mg}} = \frac{a^{d-4}}{2g^2} \sum_p \left(1 - \sum_C \chi^j(C) \Pi_{C,p} \right). \quad (3.44)$$

磁场项的基态对应这样的构型: 任意小块 (plaquette) 上规范变量的乘积 $g = e$, 因为最大值 $\max_C \chi^j(C) = j$ 在 $C = \{e\}$ 时取到.

至此, 不难验证 U_{mn}^j , L 和 R 中任意一个都与总占据数算符对易. 因此我们可以基于此实现 Kogut-Susskind 哈密顿量的构造. 如果使用所有表示, 我们即可得到完整的哈密顿量. 在此基础上, 我们也可以只使用部分表示以实现截断的目的. 以 $\text{SU}(2)$ 规范理论为例, 我们将其截断到最低阶的两个表示, 即 $j = 0, 1/2$. 我们有

$$L = -\frac{1}{2} a_{ml}^{1/2\dagger} \sigma_{mn} a_{nl}^{1/2}, \quad R = \frac{1}{2} a_{lm}^{1/2\dagger} \sigma_{mn} a_{ln}^{1/2}, \quad (3.45)$$

其中 σ 是泡利矩阵构成的向量. 矩阵 U 可表示为

$$U_{00}^0 = \sum_{mn} a_{mn}^{1/2\dagger} a_{mn}^{1/2}, \quad (3.46)$$

和

$$\begin{aligned} U_{mm'}^{1/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle 00, \frac{1}{2}m \left| \frac{1}{2}m \right\rangle \left\langle \frac{1}{2}m' \left| 00, \frac{1}{2}m' \right\rangle a_{mm'}^{1/2\dagger} a_{00}^0 \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{2} \left\langle \frac{1}{2}(-m), \frac{1}{2}m \left| 00 \right\rangle \left\langle 00 \left| \frac{1}{2}(-m'), \frac{1}{2}m' \right\rangle a_{00}^{0\dagger} a_{(-m)(-m')}^{1/2} \right. \right. \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a_{mm'}^{1/2\dagger} a_{00}^0 + (2\delta_{mm'} - 1) a_{00}^{0\dagger} a_{(-m)(-m')}^{1/2} \right). \end{aligned} \quad (3.47)$$

所有上述算符作用在一个 5 维希尔伯特空间上. 注意, 这一 $SU(2)$ 的截断形式上和谐振子前势得到的结果 (3.9) 相似, 但实际上并不相同, 且这只是一种可能的截断.

3.3 一维 $U(1)$ 量子连线模型的数值测试

本节我们将通过数值手段研究 $U(1)$ 量子连线模型的性质. 对哈密顿量 (2.148) 取 $1+1$ 维 $U(1)$ 的特殊情况, 得到没有截断的格点 Schwinger 模型为

$$H = -t \sum_n (\psi_n^\dagger U_{n,n+1} \psi_{n+1} + \text{h.c.}) + m \sum_n (-1)^n \psi_n^\dagger \psi_n + \frac{g^2}{2} \sum_n E_{n,n+1}^2, \quad (3.48)$$

其中第一项描述和规范场耦合的费米子, 第二项描述交错费米子的在位能量, 最后一项描述电场能量, 因为空间维数为 1, 所以没有磁场能量. 高斯定理算符

$$G_n = \psi_n^\dagger \psi_n - \frac{1}{2} (1 - (-1)^n) - (E_{n,n+1} - E_{n-1,n}). \quad (3.49)$$

Wilson 或 Kogut-Susskind 形式的格点 Schwinger 模型已有的数值研究包括使用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法的研究^[59, 60], 使用强耦合展开 (strong coupling expansion) 的研究^[61-63] 和使用基于矩阵乘积态 (matrix product states, MPS) 的算法的研究^[64, 65].

在 $U(1)$ 量子连线模型中, 我们使用 $SU(2)$ 自旋算符来表示规范场, 即将 U 替换为 S^+ , 将 E 替换为 S^z . E. Rico 等人利用基于 MPS 的算法研究了带有外电场的 $(1+1)$ 维 $U(1)$ 量子连线模型的相图, 其相变对应了荷共轭 (charge conjugation) 和宇称 (parity) 对称性的破缺^[66]. S. Kühn 等人利用相似的数值手段研究了维数截断对能谱的影响以及绝热初态制备的可行性^[67]. 本节我们先讨论模型的基态结构, 由此可以构建对模型物理图像的基本认知. 随后我们重复 S. Kühn 等人关于截断对能谱影响的数值计算^[67], 以展示我们数值方法的有效性. 最后我们将讨论弦破坏 (string breaking) 的动力学过程. 本节的数值模拟使用基于 MPS 的算法, 包括密度矩阵重整化群 (density matrix renormalization group, DMRG) 和时间演化块消减 (time-evolving block decimation, TEBD) 算法. 算法的介绍可以参考教材^[68]. 我们的代码基于 TeNPy^[69] 构建.

3.3.1 基态结构

首先, 由于对任意 n 有 $[G_n, H] = 0$, 哈密顿量的和高斯定理算符 G_n 有共同本征态. 正如我们前面介绍的, G_n 的本征值具有背景电荷的物理意义. 下面我们希望在 $G_n = 0$ 的子空间中讨论问题. 在展开讨论之前, 值得注意的是, 哈密顿量 H 的基态不一定在我们期待的 $G_n = 0$ 子空间中. 为了计算子空间中的基态, 我们有两种方案, 一种是使用保持守恒荷的张量并基于此使用 DMRG 算法, 在这里我们采用另一种代码实现上更简单

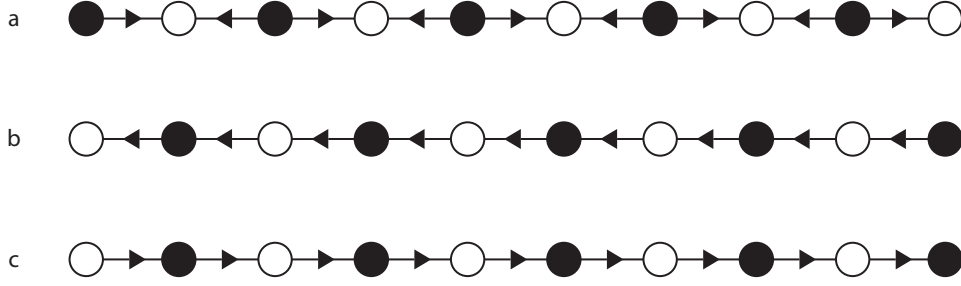


图 3.1 一维 $U(1)$ 量子连线模型在极限条件下的基态, 截断取自旋 $1/2$, **a** 为 $m \rightarrow -\infty$ 时的基态, **b**、**c** 为 $m \rightarrow +\infty$ 时的基态. 圆圈代表格点, 实心代表费米子占据数为 1, 空心代表费米子占据数为 0. 短线代表连线, 箭头向右和向左分别表示 $|\pm 1/2\rangle$ 自旋态.

的方法. 注意到在 $\tau \rightarrow +\infty$ 的极限下,

$$\exp(-\tau H) |\psi\rangle \propto |\psi_0\rangle, \quad (3.50)$$

其中 $|\psi_0\rangle$ 是所有不与 $|\psi\rangle$ 正交的能量本征态中能量最低的. 根据厄米算符的性质, 如果 $|\psi\rangle$ 是 G_n 的一个本征态, 则 G_n 的对应其他本征值的本征态和 $|\psi\rangle$ 正交. 于是上述虚时演化可以保持初态的对称性并得到初态对称性下的基态. 因此我们可以任意选取一个满足 $G_n |\psi\rangle = 0$ 的量子态, 例如马上要讨论的极限形式的基态, 该态形式简单, 可以写成每个格点和连线态的张量积. 对这一量子态作虚时演化, 待能量收敛即可得到满足所需对称性的基态. 为实现该方法, 我们只需使用计算动力学过程的 TEBD 算法的代码即可.

回到对基态的讨论. 我们注意到模型哈密顿量 (3.48) 在宇称变换 P 下具有对称性, 该变换定义为

$$\begin{aligned} P\psi_x &= \psi_{-x}, & P\psi_x^\dagger &= -\psi_{-x}^\dagger, \\ PU_{x,x+1} &= U_{-x-1,-x}^\dagger, & PE_{x,x+1} &= -E_{-x-1,-x}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

在荷共轭 C 下亦有对称性, 该变换定义为

$$\begin{aligned} C\psi_x &= (-1)^{x+1} \psi_{x+1}^\dagger, & C\psi_x^\dagger &= (-1)^{x+1} \psi_{x+1}, \\ CU_{x,x+1} &= U_{x+1,x+2}^\dagger, & CE_{x,x+1} &= -E_{x+1,x+2}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

选取自旋 $1/2$ 的截断, 当 $m \rightarrow +\infty$ 时, 系统基态如图 3.1 (b) 和 (c) 所示, 当 $m \rightarrow -\infty$ 时, 系统基态如图 3.1 (a) 所示. 前者宇称和荷共轭对称性发生了破缺, 对应有序相, 后者未发生破缺, 对应无序相. 两者皆对应半填充的费米海. 若选取整数自旋的截断并引入交错的背景电场, 上述两相也能被观察到. 无论选取整数还是半整数截断, 理论论证和数值结果均表明其相变属于 Ising 普适类^[66].

对于截断取 $S = 1/2$ 的模型, 我们使用虚时演化 TEBD 算法计算其基态, 高斯定理算符取和图 3.1 相同的本征值. 注意到由于开放边界条件的影响, 左右两端格点上这个

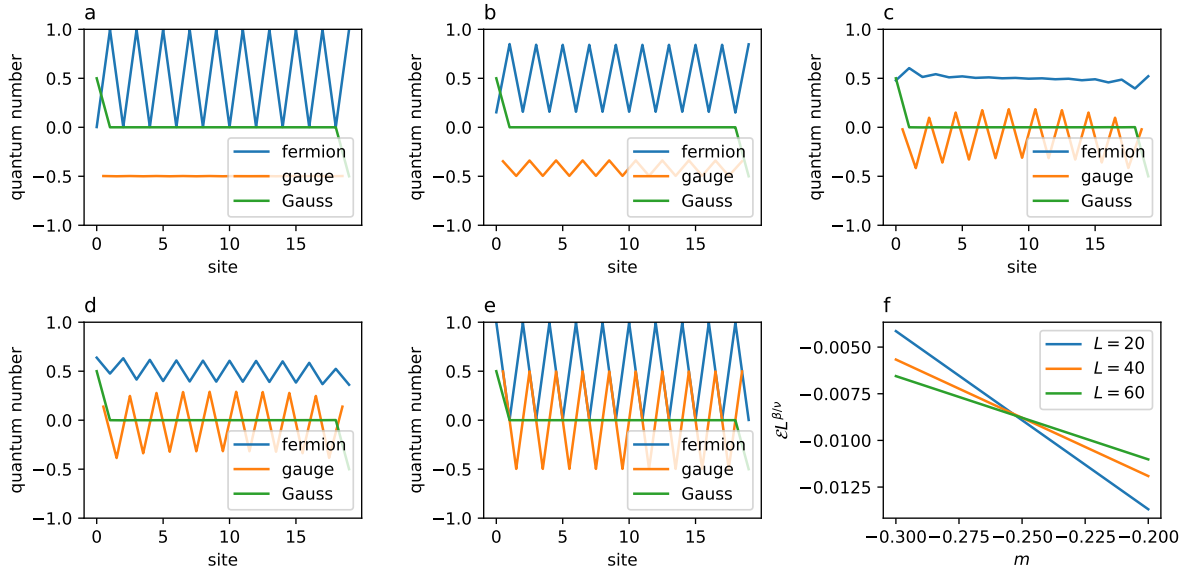


图 3.2 一维 $U(1)$ 量子连线模型的基态结构. 截断取 $S = 1/2$, 固定 $t = 1, g = 1$. **a** 到 **e** 分别是参数为 $m = 10, 1, 0.3, 0, -10$ 时格点上费米子占据数 (fermion)、连线上的电场 (gauge) 和每个格点上高斯定理算符 (Gauss) 的期望值, 两端因取开放边界条件, 对应的高斯定理算符分别为 $\pm 1/2$. **f** 为不同尺度下的 $\mathcal{E}L^{\beta/\nu} - m$ 关系图, 根据有限尺度标度理论 (见正文), 可从图中读出热力学极限条件下相变点在 $m = -0.25$ 附近.

值不为 0, 取左右两端分别为 $\pm 1/2$, 此时 $m \rightarrow +\infty$ 的基态破缺到图 3.1 (b) 所示的构型. 模拟参数选择 $g = 1, t = 1, m \in \{10, 1, 0.3, 0, -10\}$, 链长取 20. 模拟时对时间演化算符取四阶 Trotter 分解, 步长取 0.1, 最大键维数 (bond dimension) 取 100, 收敛条件为 $\Delta E < 10^{-5}$. 我们用最终结果的高斯定理算符期望值来验证演化的可信性, 除 $m = 0.3$ 和 $m = 0$ 这两个数据点外, 其他所有模拟中所有格点上高斯定理算符期望值最大为 10^{-6} 量级, 在 $m = 0$ 处最大在 10^{-4} 量级, 在 $m = 0.3$ 处最大在 10^{-3} 量级. 由此可以认为模拟得到的基态是可靠的. 我们观察到在 $m = 0.3$ 附近虚时演化的数值模拟出现了明显的临界慢化效应, 这也提示了二级相变的存在.

数值模拟的结果见图 3.2 (a) 到 (e). 其中 (a) 和 (e) 对应 $m = \pm 10$, 它们展示的构型与图 3.1 的 (a) 和 (b) 吻合, 分别对应典型的对称破缺相和无序相. 从 (a) 出发, 随着 m 的减小, 费米子占据数的震荡幅度减小, 而电场的震荡幅度增大. 从 (c) 到 (d), 费米子占据数的交错情况发生改变, 随着 m 进一步减小, 系统达到 (e) 所示的构型. 上述过程对应相变的过程, 但由于体系尺度有限, 我们确定相变点的细节.

为了进一步理解上述相变, 我们使用有限尺度标度 (finite size scaling) 方法研究其临界点的性质^[70]. 观察图 3.2 (a) 到 (e) 的结构, 我们可以取序参量为连线上的平均电通量, 即

$$\mathcal{E} = \frac{1}{N-1} \sum_l E_l, \quad (3.53)$$

其中 l 表示连线. 记系统的长度为 L , 在临界点附近, 模型的序参量和控制相变的参数满足标度关系

$$\mathcal{E} \sim L^{-\beta/\nu} f \left[L^{1/\nu} (m - m_c) \right], \quad (3.54)$$

其中 β, ν 是依赖于普适类的临界指数, f 是依赖于普适类的函数. 在二维经典 Ising 模型的普适类中, $\beta = 1/8, \nu = 1$. 由标度关系知当 $m = m_c$ 时, $\mathcal{E}L^{\beta/\nu} = f(0)$ 不依赖 L . 对于长度为 $L = 20, 40, 60$ 的一维系统, 我们作出 $\mathcal{E}L^{\beta/\nu} - m$ 图, 见图 3.2 (f), 不同尺度对应的三条线交于一点, 该点即相变临界点. 从图中看出, $t = 1, g = 1$ 时相变临界点在 $m = -0.25$ 左右. 在作图时我们已经选取 Ising 普适类的临界指数 $\beta = 1/8, \nu = 1$, 三线交于一点也侧面印证了该相变属于 Ising 普适类的理论分析.

对于相变我们可以作出进一步的评述. 根据李-杨相变理论^[71, 72], 有限尺度的系统不存在对称性破缺导致的二级相变. 从我们对 20 个格点的数值模拟可以看出, 体系发生宏观的“定性”改变, 例如费米子交错模式的改变, 发生在 $m = 0$ 到 $m = 0.3$ 之间, 而实际上我们如果计算该体系的可观测量, 并不能在任何参数下得出非解析点. 利用标度理论我们可以通过有限体系的结果给出热力学极限下的相变点, 这一相变点与我们在“有限”体系下观测到的可观测量发生明显变化的点并不一定相同. 另一方面, 使用光晶格对体系进行量子模拟时, 体系的大小是有限的, 目前对于一维 $U(1)$ 量子连线理论的量子模拟最大达到了 71 个格点^[73], 显然此时有限尺度效应仍很明显. 这提醒我们在做量子模拟时, 在大小有限的单一体系下直接测量临界指数、临界点等相变临界参数是不可行的.

3.3.2 截断维数对基态和能隙的影响

这里我们重复 S. Kühn 等人^[67] 的数值结果以说明维数截断对基态能量和第一激发态能隙的影响. 为了得到可以和格点 Schwinger 模型相比较的能谱, 我们需要对量子连线模型的参数稍作修改, 即我们用 $S^+/\sqrt{s(s+1)}$ 而非 S^+ 来表示连线上的规范变量 U , 其中 s 是截断时使用的自旋, 取整数或半整数.

图 3.3 (a) 显示了我们的计算结果. 模拟的哈密顿量为 (3.48), 其中固定 $g = \sqrt{2}$, $m = 0.0001$, 非零的 m 设置是为了保证数值的稳定性, 我们随后会评估其影响. 分别对 3 维和 9 维的截断取 $t \in \{50, 60, 70, 80, 90, 100\}$. 对每个数据点, 我们取链长 $N \in \{50, 100, 150, 200\}$ 分别计算, 并利用

$$E_0(N) = E_0 + \frac{C}{N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (3.55)$$

进行拟合以得到热力学极限下的基态能量^[74]. 定义能量密度 $\omega = E_0/2Nt$, 我们期待这一物理量在截断的量子连线模型和原始的格点 Schwinger 模型间是接近的. 由数值结果

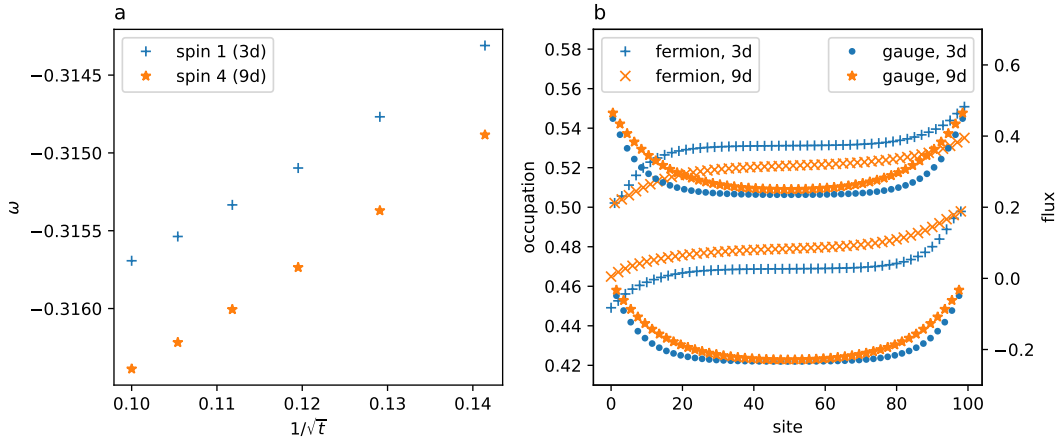


图 3.3 **a.** 不同参数下一维 $U(1)$ 量子连线模型 (截断后的 (3.48)) 的基态能量密度. 我们选取了自旋 1 (3 维) 和自旋 4 (9 维) 的截断, 在模型参数 $g = \sqrt{2}$, $m = 0.00001$ 固定, t 取 50, 60, 70, 80, 90, 100 时计算了热力学极限下的能量密度 ω (定义见正文). **b.** 3 维和 9 维两种不同截断下的基态构型, $t = 50$, 链长 $N = 100$, 其他参数与 (a) 相同. 费米子占据数 (左边纵坐标) 和规范场通量 (右边纵坐标) 具有和图 3.2 中类似的交错结构, 为了不影响两种截断的比较, 我们只画出了数据点.

知, 基态时每个格点的占据数都接近 0.5, 因此有限质量 $m = 0.0001$ 对 ω 的影响大约为 10^{-6} 量级, 可以忽略不计.

上述数值模拟使用 DMRG 算法, 收敛判定条件为 $\Delta E / \max\{|E|, 1\} < 10^{-9}$, 最大键维数取 50. 我们选取部分数据点提高键维数进行模拟, 与当前结果的相对偏差为 10^{-9} , 因此可以认为目前选取的键维数是足够的. 另外我们检查了计算得到的基态的高斯定理算符的期望值, 单个格点上这一数值最大在 10^{-10} 量级, 因此可以确认我们得到的是没有背景电荷的子空间中的基态.

从图 3.3 (a) 可以看出, 提高截断维数对基态能量的影响在 0.2% 的量级. 连续时空的 Schwinger 模型基态为 $-1/\pi \approx -0.31831$ ^[51], 格点 Schwinger 模型的基态能量与 $1/\sqrt{t}$ 之间具有非平凡的依赖关系, 可以通过基于 MPS 的算法计算不同参数下的数值拟合得到^[65]. S. Kühn 等人^[67] 对比了量子连线模型的结果和 Schwinger 模型的精确结果, 确认提高截断维数可以使基态能量更接近格点 Schwinger 模型的结果, 而 9 维截断时两种模型的基态能量已经非常相近. 因此, 相比于格点 Schwinger 模型, 3 维截断导致的误差仍为 2% 的量级. 除基态能量外, 我们还画出了 3 维截断和 9 维截断下基态费米子占据数和电场的期望值, 见图 3.3 (b). 我们发现即使是自旋 4 定义的截断, 其基态电场也没有超过 1, 由此可见连线上多出来的希尔伯特空间维数对基态没有明显贡献. 另外, 对激发态与第一激发态能隙的研究也显示, 当格点系统格间距很小时, 能隙对截断维数的依赖也不明显, 它们的取值都趋向于 Schwinger 模型的值^[67]. 由此可见, 对于基态和第一激发态来说, 低阶的截断已经是一个非常好的方案了.

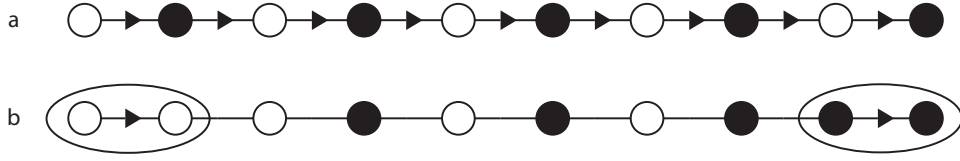


图 3.4 弦破坏动力学示意图, 其中实心圆圈表示占据数为 1 的费米子格点, 空心圆圈表示占据数为 0 的费米子格点, 连线上不带箭头表示电场为 0, 箭头向右表示电场为 1, 箭头向左表示电场为 -1. **a** 表示弦构型, 两端有孤立的正负电荷, 电场线连接两电荷, 电场能量正比于距离. 将其作为初态, 时间演化保持每个格点上高斯定理算符的本征值不变, 在两电荷附近将分别产生起反粒子屏蔽掉中间的电场, 使得电场能量降低. **b** 表示介子构型, 即两端产生介子屏蔽掉电场的情况.

3.3.3 弦破坏动力学

本节我们讨论弦破坏 (string breaking) 的动力学. 一方面, 弦破坏动力学本身有其物理意义, 另一方面, 这种类似于淬火 (quench) 的动力学行为蕴含了更多能谱的信息.

弦破坏动力学是与夸克禁闭现象紧密相关的一种强耦合动力学效应. 我们在 2.4.1 节讨论了哈密顿形式的格点规范理论下夸克禁闭的机制: 正反夸克间相互作用能量和距离成正比. 如果我们将一对夸克强行分开, 在分开较远时, 各自旁边会产生反粒子屏蔽掉它们之间的规范场以使得能量最低, 这样一来仍然无法观测到单独的夸克. 相距较远时他们之间规范场的场线像一根弦, 产生反粒子破坏弦以降低能量的过程称为弦破坏. 考虑一维模型 (3.48), 设链长为 L , 如果初态构型为如图 3.4 (a), 我们称其为弦构型, 则在 $t = 0$ 时其能量为

$$E_{\text{string}} = \frac{g^2}{2} (L - 1) - \frac{mL}{2}. \quad (3.56)$$

如果在两端的电荷附近分别产生起反粒子屏蔽掉中间的电场, 得到如图 3.4 (b) 所示的介子构型, 其能量为

$$E_{\text{meson}} = g^2 - m \left(\frac{L}{2} - 2 \right). \quad (3.57)$$

两种构型能量差为

$$E_{\text{string}} - E_{\text{meson}} = \frac{g^2}{2} (L - 3) - 2m. \quad (3.58)$$

因此, 当链长 $L > 4m/g^2 + 3$ 时, 系统倾向于选择介子构型. 如果我们考虑动力学过程, 在初态为弦构型时, 若 $t \neq 0$ 且链足够长^①, 我们期待观测到弦构型向介子构型的时间演化, 在此过程中电场线拉成的弦发生断裂, 因此该过程称为弦破坏动力学.

动力学物质场的屏蔽现象最初在带有希格斯场的 $SU(2)$ 格点规范理论中找到数值证据^[20], 随后 $SU(2)$ 规范-希格斯理论中弦破坏现象被首次确认^[21, 22]. 在格点 QCD 中, 弦破坏动力学也可被数值地观测到^[75]. M. Pepe 等人^[76] 系统研究了不同表示下 $SU(2)$

① 当 $t = 0$ 时两种构型都是模型的本征态, 不存在非平凡的时间演化.

规范场论中的弦破坏现象. 对于 1+1 维 U(1) 格点规范理论中的弦破坏动力学, T. Pichler 等人^[77] 基于张量网络算法进行了数值研究. 本节的后半部分我们将基于 TEBD 算法对 1+1 维 U(1) 量子连线模型的弦破坏动力学进行数值模拟, 我们模拟的侧重点在于不同截断方式对弦破坏动力学的影响.

图 3.5 展示了我们数值模拟的结果. 我们使用四阶 Trotter 分解的 TEBD 算法, 步长为 0.05, 最大键维度为 100. 我们计算了模拟过程中每个时间点每个格点上高斯定理算符的期望的绝对值, 对每一时刻, 我们取所有格点上上述绝对值最大的一个, 称其为这一时刻的最大高斯值. 图 3.5 (e) 中画出了不同参数下最大高斯值随时间变化的曲线. 对于自旋 1 的截断的发生弦破坏的动力学演化过程, 时间 $\tau = 4$ 之前最大高斯值小于 10^{-14} , 随后逐渐增大到 10^{-5} 量级. 对于更高的截断, 时间小于 3 时最大高斯值小于 10^{-14} , 随后逐渐增大到 10^{-3} 量级. 对于 10^{-1} 量级的占据数和电通量, 非零高斯值意味着最大 1% 量级的数值误差.

图 3.5 (a) 和 (c) 分别展示了自旋 1 截断, $t = 1/\sqrt{2}$, $m = 0$, $g = 1$ 时格点上的粒子数和连线上的电场的演化, (b) 展示了次左端和次右端两个格点上粒子数的时间演化, 这两个格点即图 3.4 中占据数发生变化的两个格点. 从 (a) 中可以看出时间从 $\tau = 0$ 到 $\tau = 2$ 的过程中, 系统经历了内部产生正反费米子对并湮灭的过程, 在 τ 略大于 2 时系统到达 3.4 (b) 所示的构型. 随后粒子数模式经历了反复震荡和衰减. 图 3.5 (b) 给出了和介子产生关系最紧密的两个格点上占据数的演化信息, 对比 (a) 知, 在链上产生的大量正反粒子对湮灭的前夕, 这两个格点上的占据数最接近理想的介子产生情况, 随后进入震荡. 图 (c) 显示电场并未发生交错模式的变化, 只是强度甚至方向在进行有衰减的震荡. 图 (d) 显示了除左右两端两个连线外, 链上电通量的平均值随时间的变化, 即图 3.4 (b) 中电场为零的那些连线上电通量平均值随时间的变化. 从 (d) 中自旋 1, $m = 0$ 对应的曲线可以看出, 电通量的平均值在 τ 略大于 2 时减小到 0, 这与 (a) 中显示的到达介子构型的时刻一致, 随后继续衰减, 在接近 $\tau = 4$ 的时刻到达最小值, 之后继续保持 $\Delta\tau \approx 4$ 的半周期作有衰减的震荡, 并逐渐稳定在一个较小的有限值.

下面考虑粒子质量对弦破坏动力学的影响. 随着质量增大, 产生介子所需要的能量也会增大, 弦破坏动力学会受到抑制. 根据上文的讨论, 在我们设置的参数下, 发生弦破坏的临界质量为 4.25. 我们在图 3.5 (d) 中展示了自旋 1 截断下, $t = 1/\sqrt{2}$, $g = 1$, m 分别为 0, 1, 4.5 时的电通量时间演化行为. 零质量情形已在上一段中讨论. 质量为 1 时, 平均电通量也有衰减, 但衰减幅度小于零质量时的情况; 有小幅震荡, 频率比零质量时高. 质量为 4.5 时, 电通量只在初始位置附近作小幅震荡, 频率高于 $m = 1$ 时的情况, 此时弦破坏已经完全被抑制.

最后我们考察增加截断维数对弦破坏动力学的影响. 图 3.5 (d) 中展示了截断为自旋 1 (3 维), 自旋 2 (5 维), 自旋 3 (7 维) 和自旋 4 (9 维) 时平均电通量的时间演化. 参

数 $g = 0, m = 0, t = 1/\sqrt{s(s+1)}$, 其中 s 为截断的自旋量子数, 如此选取参数是因为上一节的分析显示, 截断维数提高时, 这组参数的基态能量具有一致性. 对于不同截断的数值模拟, 时间演化的初态均为图 3.4 (a) 中展示的弦构型. 数值结果显示, 无论选取何种整数截断, 电通量的时间演化都是有衰减的震荡, 且震荡周期对截断维数没有明显依赖. 当截断维数从自旋 1 提高到自旋 2 时, 系统稳定时的电场也随之提高, 而当截断维数从自旋 2 增加到自旋 3、4 时, 末态电场没有明显的改变. 事实上, 观察整个时间演化曲线, 自旋 2 截断和自旋 3 截断非常接近, 而自旋 3 截断和自旋 4 截断已经几乎重合. 我们知道, 动力学行为依赖于哈密顿量的本征态和本征值谱, 例如周期行为取决于和初态重合最高的那些本征态及其能量. 因此, 上述不同截断下的动力学行为表明, 在和弦构型重合较多的激发态的范围内, 高于自旋 1 的整数自旋维数截断对能谱和本征态没有明显的定量影响, 而比较自旋 1 和高于自旋 1 的维数截断可知, 和弦构型重合较多的激发态中, 截断维数对能谱的影响也不大.

3.4 结论与讨论

本章概述了两种对格点规范理论进行维数截断的方案, 即量子连线模型和表示空间截断, 并基于第一种方案对维数截断的影响作了数值研究.

上节中对 $1+1$ 维格点 Schwinger 模型在不同截断下基态和动力学行为的分析显示, 如果我们关心的是与基态和较低激发态相关的物理, 低阶截断已经可以给出较好的定量结果. 对于维数更高的时空或非阿贝尔规范理论, 维数截断对低能物理的影响有待进一步研究. 下面我们对上述结果、研究前景及其与量子模拟的关系加以评述.

对于 $1+1$ 维 $U(1)$ 模型, 如果我们关心的是模型定性的物理性质, 或者和相变、普适类等相关的临界现象, 对具体模型的量子模拟的数值精度没有很高的要求, 那么, 低维截断是足够的. 如果我们关心具体模型精确的数值结果, 我们需要很高的截断维度, 在冷原子实验上这意味着需要精确调控很多种原子或原子的很多个内态, 这在实验实现上非常困难, 更普适的量子计算更适合这一目的.

正是因为实现高维截断的量子模拟较为困难, 我们需要更一般的模型中关心低维截断的有效性. 对于非阿贝尔规范理论, 3.2 节介绍的表示空间截断的方案起到了很好的辅助作用. 这种方案相比于量子连线模型, 可以更自由地设置截断, 因此可以数值检验不同表示空间截断下模型的行为. 如果结论与 $U(1)$ 的情况一致, 即增加截断维数不明显影响低能物理, 我们就可以使用较为简单的量子连线模型进行量子模拟, 于是表示空间截断仅起到理论上的辅助作用. 如果低能的物理行为较明显地依赖于截断, 那么相比于量子连线模型, 表示空间截断将起到更重要的作用, 而量子模拟的实现也会更为困难.

目前的实验进展主要仍集中在阿贝尔规范理论的量子模拟, 但发展非阿贝尔规范理论的量子模拟是这一领域的长期目标, 为实现这一目标, 对非阿贝尔格点规范理论的维数截断进行上文所述的数值研究是非常必要的.

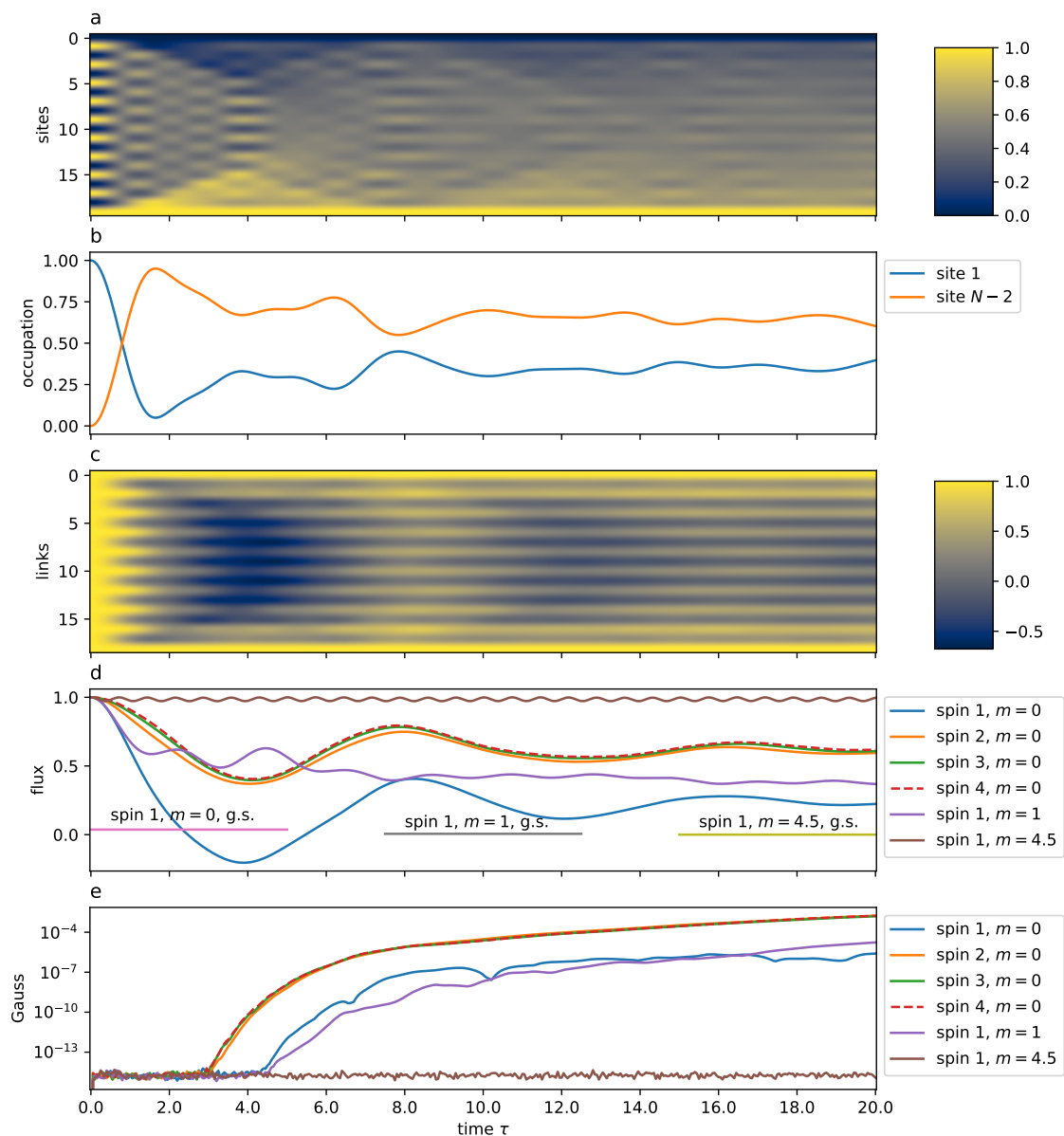


图 3.5 弦破坏动力学的数值模拟. **a-c** 展示了自旋 1 截断下 $m=0, t=1/\sqrt{2}, g=1$ 时体系构型随时间的变化. **a**. 所有格点上粒子数随时间的变化. **b**. 左右两端与边界相邻的格点上粒子数的变化, 两个格点标记为 1 和 $N-2$, 即图 3.4 中变化的格点. **c**. 连线上电场随时间的变化. **d**. 不同截断 (用自旋 s 表示) 和不同质量下去除两端的连线后连线上电通量的平均值随时间的变化. 其他参数取 $t=1/\sqrt{s(s+1)}, g=1$. 自旋 1 截断下不同质量对应的基态 (ground state, g.s.) 也在图中画出. **e**. (d) 中不同截断和参数下模拟过程中最大高斯值随时间的变化, 具体讨论见正文, 该数值反映了时间演化模拟的可靠性.

第四章 格点规范理论的量子模拟

本章介绍使用光晶格中的超冷原子系统对格点规范理论进行量子模拟的方案和实验实现. 我们首先介绍光晶格中量子模拟的最简单的模型, 再梳理近年来量子模拟格点规范理论的实验方案, 最后简要介绍已经实现或部分实现的实验进展.

4.1 光晶格中的超冷原子和 Hubbard 模型

对于希尔伯特空间维数很大且难以作简单分解的系统, 例如多体强关联系统, 使用经典计算方法精确求解具有指数的复杂性. 1982 年, R. P. Feynman 提出使用量子系统模拟量子系统的设想^[28], 随后发展成量子模拟的理念. 光晶格中的超冷原子系统以其精确可操控性成为量子模拟的理想平台, 2002 年, M. Greiner 等人在光晶格中的超冷玻色气体中实现了超流 (superfluid) 到 Mott 绝缘态的相变^[78], 揭开了使用冷原子系统进行多体量子模拟的序幕. 光晶格中的超冷原子可近似由 Hubbard 模型描述, 本节我们基于 M. Greiner 的博士论文^[79] 简要介绍使用光晶格中的超冷原子进行量子模拟的基本原理.

电磁波 (激光) 中的原子被诱导出一个偶极子, 偶极子在电场中感受到一个势能. 可以证明这个势能正比于激光光强, 且其符号与大小与“失谐”有关. 所谓失谐, 即激光频率与原子本征频率的差. 对于红失谐, 即激光频率小于原子本征频率, 原子感受到一个吸引势; 反之对于蓝失谐, 原子感受到排斥势.

两束对射的激光形成驻波, 进而形成周期性的光强分布, 即光晶格. 对于高斯激光, 柱坐标下的光强分布为

$$I(r, z) = \frac{2P}{\pi w^2(z)} e^{-2\frac{r^2}{w^2(z)}}, \quad (4.1)$$

其中 P 为激光总功率, $w(z) = w_0 (1 + (z/z_R)^2)^{1/2}$ 是 $1/e^2$ 的半径. 定义 $z_R = \pi w_0^2/\lambda$ 为瑞利 (Rayleigh) 长度. 一维下, 光晶格的势能为

$$V(r, z) = -V_{\text{lat}} \cdot e^{-2r^2/w_0^2} \cdot \sin^2(kz) \simeq -V_{\text{lat}} \cdot \left(1 - 2\frac{r^2}{w_0^2}\right) \cdot \sin^2(kz). \quad (4.2)$$

定义反冲能量 $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$, 其中 k 为激光的波数, m 为原子的质量; 又记原子的频率为 ω_0 , 激光的频率为 ω , 失谐为 $\Delta = \omega - \omega_0$, 则上式中光晶格的振幅 (阱深) 为

$$\frac{V_{\text{lat}}}{E_r} = \frac{2m}{\hbar^2 k^2} \cdot \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \cdot \frac{\Gamma}{\Delta} \cdot \frac{2P}{\pi w_0^2}. \quad (4.3)$$

三维光晶格的情况类似, 近似后我们得到一个周期势与简谐阱的叠加,

$$V(\mathbf{x}) \simeq V_x \cdot \sin^2(kx) + V_y \cdot \sin^2(ky) + V_z \cdot \sin^2(kz) + \frac{m}{2} \left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2 \right), \quad (4.4)$$

其中

$$\omega_x^2 = \frac{4}{m} \left(\frac{V_y}{w_y^2} + \frac{V_z}{w_z^2} \right) = \frac{2\hbar^2 k^2}{m^2} \left(\frac{V_y/E_r}{w_y^2} + \frac{V_z/E_r}{w_z^2} \right), \quad (4.5)$$

另外两个方向只需循环角标. 我们在实验中一般用反冲能量 E_r 作为包括阱深在内的各种能量的单位.

设上述简谐势背景可忽略, 只考虑周期势部分, 仍记为 $V^{\text{ex}}(\mathbf{x})$. 则考虑二体相互作用 $V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$, 体系的哈密顿量为

$$H = \sum_i \left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{x}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j). \quad (4.6)$$

定义上述光晶格中无相互作用部分的本征态为布洛赫态, 它们构成能带 (Bloch band). 布洛赫态用 \mathbf{q} 标记, \mathbf{q} 的取值在第一布里渊区. 通过数值计算我们可以得到本征态 $|n, \mathbf{q}\rangle$ 按平面波展开的表达式. 对布洛赫态作傅立叶变换可以得到瓦尼尔 (Wannier) 态,

$$|n, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j} |n, \mathbf{q}\rangle. \quad (4.7)$$

布洛赫态和瓦尼尔态均构成光晶格周期势中单体希尔伯特空间中的一组完备正交基.

对上述哈密顿量用瓦尼尔态展开并作二次量子化. 假设不同格点对应的瓦尼尔态重合不大, 则对于费米系统, 其哈密顿量为

$$\hat{H} = -t_\alpha \sum_{\alpha} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{i,\alpha}^\dagger \hat{a}_{j,\alpha} + \sum_{\alpha} \sum_i (\varepsilon_{i,\alpha} - \mu_\alpha) \hat{a}_{i,\alpha}^\dagger \hat{a}_{i,\alpha} + U \sum_i \hat{a}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{a}_{i,\downarrow} \hat{a}_{i,\uparrow}, \quad (4.8)$$

对于玻色系统, 其哈密顿量为

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i (\varepsilon_i - \mu) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i, \quad (4.9)$$

其中各系数定义为

$$\varepsilon_i = \int d\mathbf{x} w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V^{\text{ex}}(\mathbf{x}) \right\} w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad (4.10)$$

$$t_{i,j} = - \int d\mathbf{x} w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V^{\text{ex}}(\mathbf{x}) \right\} w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (4.11)$$

$$U = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' w_0^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w_0^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) V(\mathbf{x} - \mathbf{x}') w_0(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) w_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i). \quad (4.12)$$

上述哈密顿量即 Hubbard 模型.

Hubbard 模型哈密顿量的物理意义如下. 以玻色系统为例, 方程 (4.9) 中右边第一项描述相邻格点间粒子的跃迁, t 表征了跃迁的强度; 第二项中 ε_i 表示第 i 个格点上外场带来的能量, 一般是外场的不均匀所致, 例如用高斯激光生成光晶格时外场在晶格之上就有一个高斯的包络, μ 表示系统整体的化学势, 我们也可以形式地定义 $\mu_i = \mu - \varepsilon_i$ 作为局部的化学势. 第三项是同一格点上的相互作用项, U 表示相互作用强度, 产生湮灭算符可以用粒子数算符表示为 $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i = \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)$, 这样就明确显示出两两相互作用的图像.

以玻色子为例, 将光晶格产生的具体参数带入 (4.10), (4.11), (4.12), 得到 Hubbard 模型的参数为

$$\varepsilon_i = V_{\text{ext}}(\mathbf{x}_i), \quad (4.13)$$

$$t = - \int d^3\mathbf{x} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) (-\hbar^2 \nabla^2 / 2m + V_{\text{lat}}(\mathbf{x})) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (4.14)$$

$$U = (4\pi\hbar^2 a_s / m) \int |w(\mathbf{x})|^4 d^3x, \quad (4.15)$$

其中 V_{ext} 为光晶格势场中周期势之外的部分, 例如实验中使用高斯光束产生的背景简谐阱; a_s 为粒子间相互作用的散射长度, 实验上可借助 Feshbach 共振通过调节磁场来控制其大小^[80, 81].

4.2 格点规范理论的模拟方案

Hubbard 模型是描述静止光晶格中超冷原子行为最自然的模型, 实际实验操作中, 我们可以通过转动或震动光晶格、加激光使原子内态和原子运动或相互作用相耦合等方法实现更复杂的模型. 在实现完整的格点规范理论的量子模拟前, 人们通过上述各种不同方法实现了没有动力学的人工规范场, 对于这一领域可参考综述^[82]. 在上述无动力学人工规范场之后, 物理学家提出并实现了密度依赖 (density-dependent) 规范场的量子模拟^[83, 84]. 本节我们主要讨论完整的格点规范理论量子模拟的方案.

使用光晶格中的超冷原子对格点规范理论作量子模拟, 就是要将格点规范理论或者其截断版本中的各项通过光晶格中的超冷原子实现. 用光晶格中的超冷原子实现格点规范理论的量子模拟有两个主要困难, 一是实现规范场辅助的跃迁和小格上的多点相互作用, 二是实现局域规范不变性, 即高斯定理. 梳理现有方案, 我们注意到一个格点规范理论量子模拟的方案一般可以分为三个层次,

1. 通过实验手段, 利用原子之间或原子与光的相互作用使得原子系统哈密顿量具有模拟所需的项;
2. 通过原子系统的有效理论实现被模拟模型哈密顿量的部分或全部项;

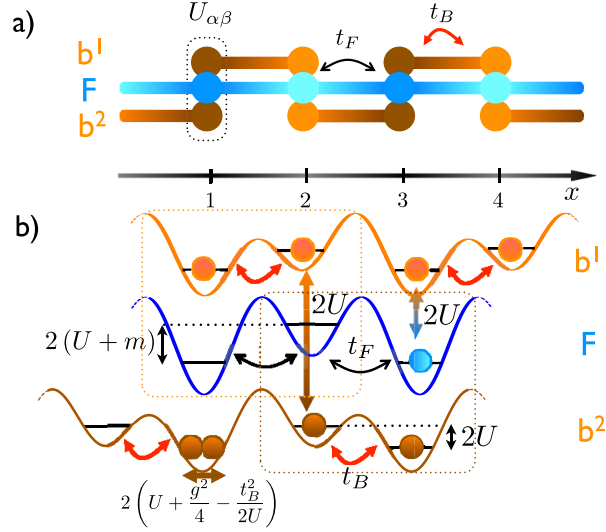


图 4.1 模拟 1 + 1 维的 U (1) 格点规范理论的方案示意. 其中玻色-费米和玻色-玻色相互作用强度为 $U_{1F} = U_{2F} = U_{12} = 2U$, 同种玻色子的相互作用为 $U_{11} = U_{22} = 2U + g^2/2 - t_B^2/U$. 超晶格的偏置为 $2U_1 = 2U_2 = 2U$, $2U_F = 2(U + m)$. 图摘自文献^[85].

3. 实现规范不变性.

其中, 如果第二点被完全实现, 则原则上不需要额外考虑第三点, 否则需要更多手段来实现第三点. 规范不变性是否实现是检验一个量子模拟实验是否可靠的重要指标.

上述三个层次分别有不同的实现方案. 对于产生原子系统哈密顿量中 Hubbard 模型之外的项, 主要方法有多体相互作用、拉曼辅助的跃迁 (Raman-assisted tunnelling) 等. 对于得到和被模拟模型一致的有效理论, 主要方法有微扰论下的有效哈密顿量、周期驱动下的 Floquet 有效哈密顿量等. 对于实现规范不变性, 主要方法有加一个很大的高斯定理算符项以禁止不满足高斯定理的过程, 我们称其为高斯势垒, 或直接利用系统的内禀守恒性质等.

下面我们依照模型梳理目前已有的方案, 其中我们重点关注上述不同层次的不同方法是如何发挥作用的, 因此与本论文前几章风格不同, 我们略去大部分不重要的推导细节.

4.2.1 U (1) 格点规范理论

2012 年 D. Banerjee 等人提出的模拟 1 + 1 维的 U (1) 格点规范理论的方案^[85] 在概念和物理图像上非常简明, 因此可以看作使用二阶微扰有效理论得到模拟哈密顿量并使用势垒禁止非高斯定理过程的范式. 他们模拟的模型是用自旋算符取代规范场的量子连线模型

$$H = -t \sum_x [\psi_x^\dagger U_{x,x+1} \psi_{x+1} + \text{h.c.}] + m \sum_x (-1)^x \psi_x^\dagger \psi_x + \frac{g^2}{2} \sum_x E_{x,x+1}^2. \quad (4.16)$$

与本论文 3.3 节所研究的模型 (3.48) 一致. 他们使用图 4.1 所示的超晶格 (superlattice), 在每个格点上有两种玻色子, 分别由 $b^{1\dagger}$ 和 $b^{2\dagger}$ 产生, 对应偶数和奇数格点发出的电场, 其与规范场的关联由 Schwinger 表示给出

$$U_{x,x+1} = b_{x+1}^{\sigma\dagger} b_x^\sigma, \quad E_{x,x+1} = \frac{1}{2} \left(b_{x+1}^{\sigma\dagger} b_{x+1}^\sigma - b_x^{\sigma\dagger} b_x^\sigma \right). \quad (4.17)$$

超晶格上的费米子表示物质粒子. 利用 $b_x^{\sigma\dagger} b_x^\sigma + b_{x+1}^{\sigma\dagger} b_{x+1}^\sigma = 2S$, 高斯定理算符可表示为

$$\tilde{G}_x = n_x^F + n_x^1 + n_x^2 - 2S + \frac{1}{2} [(-1)^x - 1]. \quad (4.18)$$

上述方案中冷原子系统的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & -t_B \sum_{x \text{ odd}} b_x^{1\dagger} b_{x+1}^1 - t_B \sum_{x \text{ even}} b_x^{2\dagger} b_{x+1}^2 - t_F \sum_x \psi_x^\dagger \psi_{x+1} \\ & + \text{h.c.} + \sum_{x,\alpha,\beta} n_x^\alpha U_{\alpha\beta} n_x^\beta + \sum_{x,\alpha} (-1)^x U_\alpha n_x^\alpha \end{aligned} \quad (4.19)$$

我们使玻色子处于 Mott 绝缘相, 即存在很大的同位排斥势, 此时可将跃迁项视作微扰. 相互作用项可整理为

$$\begin{aligned} \tilde{H}_U = & \left(U + \frac{g^2}{4} \right) \sum_{x,\sigma=1,2} (n_x^\sigma)^2 + 2U \sum_x n_x^1 n_x^2 + U \sum_{x,\sigma=1,2} (-1)^x n_x^\sigma \\ & + 2U \sum_{x,\sigma=1,2} n_x^F n_x^\sigma + (U+m) \sum_x (-1)^x n_x^F \\ = & U \sum_x \tilde{G}_x^2 + \frac{g^2}{2} \sum_x E_{x,x+1}^2 + m \sum_x (-1)^x \psi_x^\dagger \psi_x. \end{aligned} \quad (4.20)$$

其中第一项禁止了非高斯的过程. 再对跃迁项作微扰, 可得二阶等效哈密顿量

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = & \left(\frac{g^2}{2} + \frac{t_B^2}{U} \right) \sum_x E_{x,x+1}^2 + m \sum_x (-1)^x \psi_x^\dagger \psi_x \\ & - \frac{t_F t_B}{U} \sum_x \left[\psi_x^\dagger U_{x,x+1} \psi_{x+1} + \psi_{x+1}^\dagger U_{x,x+1}^\dagger \psi_x \right] - \frac{t_F^2}{U} \sum_x \psi_x^\dagger \psi_x \left(1 - \psi_{x+1}^\dagger \psi_{x+1} \right). \end{aligned} \quad (4.21)$$

其中最后一项是规范不变的, 可添加到原始哈密顿量中. 该构造中, 规范场辅助的跃迁是二阶微扰有效理论的结果, 图像上它是能量守恒的要求. 规范不变性被高斯定理算符项的能量保证, 是低能有效.

与上述构造几乎同时, E. Zohar 等人提出了 2+1 维 U(1) 纯规范理论量子模拟的方案^[86]. 该方案模拟的模型为

$$H_l = \frac{g^2}{2} \sum_{n,k} (L_{zn}^k)^2 - \frac{1}{2g^2[l(l+1)]^2} \sum_n \left(L_{+,n}^1 L_{+,n+1}^2 \hat{L}_{-,n+2}^1 L_{-,n}^2 + \text{h.c.} \right), \quad (4.22)$$

其中, n 是格点, $k = 1, 2$ 是格点发出的连线的方向, L_{sn}^k 中, $s = x, y, z, \pm$ 表示自旋算符的

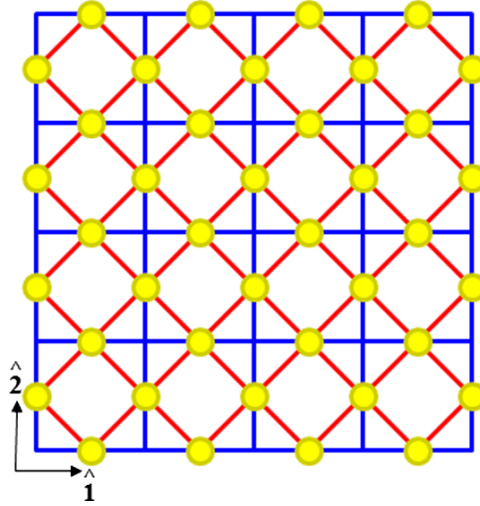


图 4.2 模拟 2+1 维的 U(1) 格点规范理论的方案示意. 连线上的黄色圆圈代表放置自旋 1 粒子的位点, 粒子沿蓝线跃迁的跃迁率为 t_α^s , 沿红线跃迁的跃迁率为 t_α^d . 图摘自文献^[86].

相应指标. 该模型仍是 U(1) 量子连线模型. 文献^[86] 中详述了实现自旋 1 截断的方法. 该方案中, 自旋 1 粒子被放置在连线上, 如图 4.2, 水平连线上的粒子用算符 a 表示, 竖直连线上的粒子用算符 b 表示, 粒子自旋为 1, 可以用三种粒子或三个内态 $\{+, 0, -\}$ 实现. 定义在位粒子数算符 $N_{n,\alpha}^1 = a_{n,\alpha}^\dagger a_{n,\alpha}$, $N_{n,\alpha}^2 = b_{n,\alpha}^\dagger b_{n,\alpha}$, $N_n^k = \sum_\alpha N_{n,\alpha}^k$, 定义在位自旋为 S_n^k . 这一方案利用了光晶格中冷原子自身的三体相互作用^[87], 实现了如下冷原子哈密顿量

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{n,\alpha} \left(t_\alpha^s \left(a_{n,\alpha}^\dagger a_{n+1,\alpha} + b_{n,\alpha}^\dagger b_{n+2,\alpha} \right) \right. \\
 & + t_\alpha^d \left(a_{n,\alpha}^\dagger b_{n,\alpha} + a_{n,\alpha}^\dagger b_{n+1,\alpha} + b_{n,\alpha}^\dagger a_{n+2,\alpha} + a_{n+2,\alpha}^\dagger b_{n+1,\alpha} \right) + \text{h.c.} \Big) \\
 & + \sum_{n,k,\alpha} \Delta_{n,\alpha}^k N_{n,\alpha}^k + \frac{U_o}{2} \sum_{n,k} N_n^k (N_n^k - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_{n,k} \left((S_n^k)^2 - 2N_n^k \right).
 \end{aligned} \quad (4.23)$$

在这一哈密顿量的基础上, 和前文所述方法类似, 适当选择参数得到类似方程 (4.20) 结果第一项的高斯定理项, 这一项系数很大, 因此禁止了非高斯的过程, 同时得到电场项. 磁场项 (即小块上四个算符相乘) 由二阶微扰得到. 上述得到有效哈密顿量的过程这里不再赘述. 总结来说, 该方案利用冷原子自身的多体相互作用实现了被模拟模型一些项中的因子, 再利用微扰有效哈密顿量给出了被模拟哈密顿量. 该方案中规范不变性也是低能有效.

2013 年, E. Zohar 等人在上述纯规范理论的基础上加入了狄拉克费米子^[88]. 这一方案没有采用交错费米子的形式, 而是采用简单的二分量费米子. 和纯规范模型类似, 模拟规范场的玻色子被加载在连线上, 费米子被加载在格点上. 被模拟模型中各项仍然可以由微扰有效哈密顿量给出. 特殊的是, 高斯定理算符现在包含了玻色-费米相互作用

项, 这一项可以通过调节冷原子的散射给出. 这一方案中规范不变性仍然是低能有效.

4.2.2 \mathbb{Z}_2 格点规范理论

本论文从高能物理的背景出发, 一直没有仔细探讨 \mathbb{Z}_2 格点规范理论. 由于规范群是最简单的非平凡阿贝尔群, \mathbb{Z}_2 格点规范理论在数学形式上也最简单, 适合进行量子模拟. 2019 年, L. Barbiero 等人^[89]和 C. Schweizer 等人^[90]分别从理论和实验上考察了使用震动的光晶格模拟 \mathbb{Z}_2 格点规范理论的可能. 考虑 1 维哈密顿量

$$H = - \sum_j J_a \left(\tau_{\langle j, j+1 \rangle}^z a_j^\dagger a_{j+1} + \text{h.c.} \right) - \sum_j J_f \tau_{\langle j, j+1 \rangle}^x, \quad (4.24)$$

其中 τ 为泡利矩阵. 该模型与用自旋算符截断的 $U(1)$ 模型在形式上类似, 但不完全相同^①. 定义 $n_j^a = a_j^\dagger a_j$, $Q_j = \exp(i\pi n_j^a)$, 则高斯定理算符为

$$G_j = Q_j \prod_{i: \langle i, j \rangle} \tau_{\langle i, j \rangle}^x. \quad (4.25)$$

该算符是局域规范变换的生成元, 其物理意义与连续群的格点规范理论没有区别.

考虑两个格点上的实现. 使用两种玻色子 (或同种玻色子的两个内态) a 和 f 表示物质粒子和规范场, 例如令 $\tau_{\langle j, j+1 \rangle}^z = n_{j+1}^f - n_j^f$, 且 $\tau_{\langle j, j+1 \rangle}^x = f_j^\dagger f_{j+1} + f_{j+1}^\dagger f_j$. 考虑一个对不同粒子作用不同的双阱, 其在位相互作用远大于跃迁幅度, $U \gg J$, 并加上频率为 $\hbar\omega = \sqrt{U^2 + 4J^2}$ 的接近共振的调制, 其哈密顿量为

$$H(t) = -J \left(a_2^\dagger a_1 + f_2^\dagger f_1 + \text{h.c.} \right) + U \sum_{j=1,2} n_j^a n_j^f + \Delta_f n_1^f + A \cos(\omega t + \phi) (n_1^a + n_1^f). \quad (4.26)$$

从物理图像看, 共振调制可以看作光子辅助的跃迁 (photon-assisted tunnelling), 一个粒子可以跃迁到能级差为 $\nu\hbar\omega$ 的另一个态上, 其中 ν 是整数. 数学上, 高频驱动下系统可由 Floquet 有效哈密顿量描述, 见附录 A.3. 定义驱动参数 $\chi = A/(\hbar\omega)$, 则在 $\phi = 0$ 时, 系统的有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = -J_a \tau^z \left(a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2 \right) - J_f \tau^x, \quad (4.27)$$

其中, $J_a = J |\mathcal{J}_{\pm 1}(\chi)|$, $J_f = J \mathcal{J}_0(\chi) n_1^a + J \mathcal{J}_2(\chi) n_2^a$, 这里 \mathcal{J}_ν 为 ν 阶贝塞尔函数. 控制调制幅度使 $\mathcal{J}_0(\chi_0) = \mathcal{J}_2(\chi_0)$, 例如取 $\chi_0 \approx 1.84$, 即可使 J_f 不依赖于物质粒子的分布情况.

该方案中, 被模拟的规范理论由 Floquet 有效哈密顿量实现, 规范不变性在这个意义上是有效理论固有的属性, 但原子系统的其他相互作用可能会破坏规范不变性. 该方案可拓展到 1 维链等更大规模的情况.

^① 这里的 \mathbb{Z}_2 模型与文献^[67]中使用的 \mathbb{Z}_d 模型也不完全一致.

4.2.3 非阿贝尔格点规范理论

2013 年, E. Zohar 等人提出了模拟 1 + 1 维 SU (2) 格点规范理论的方案^[91]. 被模拟的模型为

$$H = \sum_n \left[\frac{g^2}{2} L_n^2 + m(-1)^n \psi_n^\dagger \psi_n + i\beta (\psi_n^\dagger U_n \psi_{n+1} - \text{h.c.}) \right], \quad (4.28)$$

该模型也是此前介绍的模拟目标 (2.148) 的特殊形式, 分别包含了电场项、交错费米子质量项以及与规范场耦合的费米子跃迁项, 因为空间维数为 1 不包含磁场项, 采用的截断方式与 3.1 中所述的谐振子前势的构造类似. 平行于这种构造的图像, 每个连线的左右两边各有两种玻色子, 分别用 $a_{1,2}, b_{1,2}$ 标记, 电场项通过玻色子的在位相互作用实现. 交错费米子 ψ 的结构通过超晶格实现. 为实现规范场辅助的跃迁, 作者在每个连线的中心处引入了一个辅助费米子 χ , 并在左右两边再各引入两种玻色子, 分别用 $c_{1,2}, d_{1,2}$ 标记. 由于瓦尼尔函数的重合, 系统自然存在跃迁项

$$H_f = \frac{\epsilon}{2^{1/4}\alpha} \sum_{n,i,j} \left[(\psi_n^\dagger)_i (\tilde{W}_{L,n})_{ij} (\chi_n)_j + (\chi_n^\dagger)_i (\tilde{W}_{R,n})_{ij} (\psi_{n+1})_j + \text{h.c.} \right], \quad (4.29)$$

其中散射系数 ϵ/α 由系统微观参量决定, 矩阵

$$\tilde{W}_L = \begin{pmatrix} a_1^\dagger c_1 & -a_2^\dagger c_2^\dagger \\ a_2^\dagger c_2 & a_1 c_1^\dagger \end{pmatrix}; \quad \tilde{W}_R = \begin{pmatrix} b_1^\dagger d_1 & b_2^\dagger d_2 \\ -b_2 d_2^\dagger & b_1 d_1^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

上述跃迁保持角动量守恒, 因此, 选择合适的内态即可保证高斯定理. 例如, 对于玻色子 ^{17}Li 和费米子 ^{40}K , 可选择 $m(A_1) = 3, m(A_2) = 2, m(B_1) = -3, m(B_2) = -2, m(C_1) = 1, m(C_2) = -3, m(D_1) = -1, m(D_2) = 3, m(\psi_1) = 3/2, m(\psi_2) = -3/2, m(\chi_1) = 7/2, m(\chi_2) = -7/2$. 在这一方案中, 费米子的交错在位项和跃迁项仍然由二阶微扰有效哈密顿量给出, 而规范不变性不再低能有效, 而是靠系统的内禀对称性保证的.

同年, D. Banerjee 等人提出了模拟 U(N) 和 SU(N) 格点规范理论的方案^[92]. 该方案模拟的 $d+1$ 维格点规范理论模型为

$$H = -t \sum_{\langle xy \rangle} \left(s_{xy} \psi_x^{i\dagger} U_{xy}^{ij} \psi_y^j + \text{h.c.} \right) + m \sum_x s_x \psi_x^{i\dagger} \psi_x^i \quad (4.31)$$

其中 $s_x = (-1)^{x_1 + \dots + x_d}$, $s_{xy} = (-1)^{x_1 + \dots + x_{k-1}}$, k 表示 x 到 y 连线的方向. 这里作者忽略了规范场的动力学, 而只考虑了规范场中粒子的动力学. 采用 3.1 节所述的 rishon 表示截断, 将费米子放在格点上, 将 rishon 粒子放在连线的左、右部分. Rishon 粒子的在位排斥能限制了每个连线上每一边的 rishon 粒子数; 一个费米子可以跃迁到相邻的 rishon 位点转化成一个 rishon, 在二阶微扰下, 可以得到被模拟模型中的跃迁项; 费米子的交错在位能由超晶格实现; 交错模型所需的不同相位由拉曼辅助跃迁或光晶格的震动实现. 这一实现方案仍然使用二阶微扰得到所需项, 但是规范不变性是系统的内禀属性保证的.

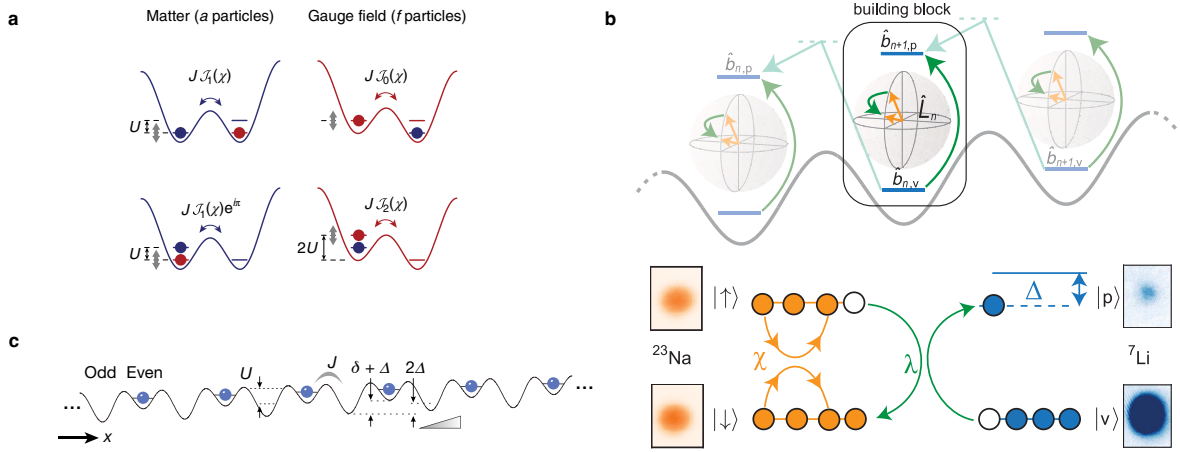


图 4.3 格点规范理论量子模拟的实验实现示意图. **a.** \mathbb{Z}_2 格点规范理论的量子模拟示意图, 图中展示了 Floquet 等效哈密顿量中不同共振跃迁的过程. 图摘自文献^[90]. **b.** 在单一基本单元中实现 $U(1)$ 格点规范理论量子模拟的示意图, 不同基本单元用拉曼辅助的跃迁相联系, 同一单元内用 ^{23}Na 表示规范场, 用 ^7Li 表示物质粒子, 通过自旋改变碰撞实现规范场和粒子的耦合. 图摘自文献^[93]. **c.** 在 71 个格点上实现格点规范理论量子模拟的示意图. 图摘自文献^[73].

4.3 量子模拟实验的进展和未来

格点规范理论量子模拟的实验实现在理论和技术上都较为困难, 目前学界对其的研究还处于起步阶段.

2019 年, C. Schweizer 等人用双阱实现了 4.2.2 节所述 \mathbb{Z}_2 格点规范理论量子模拟的方案^[90], 其中 a 和 f 两种粒子分别由 ^{87}Rb 原子的基态超精细能实现, $|a\rangle = |F=1, m_F=-1\rangle$, $|f\rangle = |F=1, m_F=+1\rangle$, \mathbb{Z}_2 算符表示为 $\tau_{\langle j,j+1\rangle}^z = n_{j+1}^f - n_j^f$ 和 $\tau_{\langle j,j+1\rangle}^x = f_j^\dagger f_{j+1} + f_{j+1}^\dagger f_j$. 通过 4.2.2 节所述的调制双阱参数的方法, 他们实现了 Floquet 有效哈密顿量

$$H_{\text{eff}} = -J_a \tau^z \left(a_2^\dagger a_1 + a_1^\dagger a_2 \right) - J_f \tau^x, \quad (4.32)$$

$$J_a = J |\mathcal{I}_{\pm 1}(\chi)|, \quad J_f = J \mathcal{I}_0(\chi) n_1^a + J \mathcal{I}_2(\chi) n_2^a.$$

如图 4.3 (a) 所示, 蓝色圆圈表示物质粒子, 红色圆圈表示规范玻色子, 途中零阶共振跃迁和二阶共振跃迁对应 τ^x 项, 一阶共振跃迁对应物质粒子的跃迁项. 他们实验上观测了不同初态下物质荷 Q_j 和连线上算符 τ^z 的演化, 其定性行为和理论预期一致.

2020 年, A. Mill 等人粒子间的自旋改变碰撞 (spin-changing collision) 实现了 $U(1)$ 格点规范理论量子模拟的基本单元^[93], 他们的方案并未将格点和连线上的自由度在几何上分开实现, 而是在单个格点上用 ^{23}Na 表示规范场, 用 ^7Li 表示物质粒子. 两种粒子的自旋改变碰撞实现规范场和物质粒子的耦合. 总的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_n \left[\hat{H}_n + \hbar \Omega \left(\hat{b}_{n,p}^\dagger \hat{b}_{n,v} + \hat{b}_{n,v}^\dagger \hat{b}_{n,p} \right) \right], \quad (4.33)$$

其中基本单元的哈密顿量 \hat{H}_n 为

$$\hat{H}_n/\hbar = \chi \hat{L}_z^2 + \frac{\Delta}{2} (\hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p - \hat{b}_v^\dagger \hat{b}_v) + \lambda (\hat{b}_p^\dagger \hat{L}_- \hat{b}_v + \hat{b}_v^\dagger \hat{L}_+ \hat{b}_p). \quad (4.34)$$

如图 4.3 (b) 所示, 拉曼辅助的跃迁实现了不同基本单元之间的连接, 即 (4.33) 中方括号内的第二项, 同一个基本单元内用 ^{23}Na 的能级 $|\uparrow\rangle = |m_F = 0\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle = |m_F\rangle = 1$ 来表示规范场, 用 ^{17}Li 的能级 $|p\rangle = |m_F = 0\rangle$ 和 $|v\rangle = |m_F = 1\rangle$ 来表示粒子 (particle) 和真空 (vacuum), 图中箭头所示的过程给出了 (4.34) 的第一项电场能量和第三项与电场耦合的粒子跃迁, 该式第二项由 ^{17}Li 不同能级的能量差给出. 他们在单个格点中比较了不加规范场 (Na 原子) 和加规范场时物质粒子的动力学, 不加规范场时物质粒子不显示明显的动力学, 观测结果以噪声为主, 加规范场时物质的动力学与平均场预测基本吻合. 他们提出用拉曼辅助的跃迁可以将不同单元组合起来实现较大点阵上 $U(1)$ 格点规范理论的模拟.

同年, B. Yang 等人实现了 71 个格点上 $U(1)$ 格点规范理论的模拟^[73], 被模拟模型是重定义了参数的量子连线模型, 取最低的 2 维截断. 如图 4.3 (c) 所示, 超晶格中偶数格点表示粒子所在的格点, 奇数格点表示规范场所在的连线, 使用倾斜的超晶格, 使 ^{87}Rb 超冷原子系统处在 Mott 相内, 适当设置参数后该模型是 Hubbard 模型的低能有效模型. 如何由 Hubbard 模型在强相互作用下的微扰有效理论得到格点规范理论可参考 4.2.1 节. 他们通过缓慢调节参数实现了 3.3.1 节讨论的相变, 比较了动力学量子相变的实验和计算结果, 测量了系统不同相下粒子密度的空间关联并分析了频域信息. 上述实验结果和理论均能较好吻合. 最后, 他们测量了动力学过程中规范不变性的破坏情况, 展示其较好地实现了规范不变性.

梳理当下已有的使用光晶格中超冷原子系统模拟格点规范理论的实验方案和实验实现, 我们注意到, 就实验方案来说, 空间维数大于 1 的系统, 尤其是对于非阿贝尔规范理论, 其磁场项如何模拟仍需进一步研究; 就实验实现来说, 已有的实验方案对于空间维数高于 1 的或规范群为非阿贝尔的理论, 所需粒子内态很多, 晶格构造较为复杂, 如何在实验上实现仍需进一步研究.

第五章 结论和展望

本文依照领域发展的逻辑, 从理论基础到实验实现, 系统地梳理了使用光晶格中的超冷原子体系模拟格点规范理论的背景和最新进展, 并就其中的部分问题进行了独立研究.

格点规范理论一方面起源于对伊辛模型引入局域不变性的尝试, 另一方面起源于对杨-Mills 理论低能强耦合性质的研究. 杨-Mills 理论是量子电动力学的推广, 它将量子电动力学的 $U(1)$ 规范群推广到了一般的非阿贝尔群. 该理论在希格斯机制发展之后成为粒子物理标准模型的理论基础. 杨-Mills 理论具有渐近自由的性质, 即低能下其耦合常数很大以致于微扰论失效, 夸克禁闭等现象被认为和强耦合下的低能规范理论有关, 但由于微扰论的失效很难解析地研究. 为了研究禁闭机制, Wilson 引入了格点规范理论. 格点规范理论具有丰富的相结构, 例如禁闭相、库仑相等. 在 Wilson 引入格点规范理论后不久, Kogut 和 Susskind 将该理论写成了哈密顿形式. 格点规范理论中的粒子需要特殊讨论, 在格点系统中, 简单地引入费米子存在倍增现象, 交错费米子是一种解决方案, 它具有较好的哈密顿形式, 且保持手征对称性; 希格斯玻色子在 $SU(2)$ 基本表示下或使用矩阵表示粒子场时可通过转移矩阵的方法写成哈密顿形式. 在上述讨论的基础上, 包含规范场和粒子的格点规范理论的哈密顿形式是量子模拟的目标模型.

在格点规范理论中, 若规范群为连续群, 则规范场对应的希尔伯特空间维数为无穷大, 这一性质不适合进行量子模拟. 为实现量子模拟, 人们提出了不同的方式对希尔伯特空间作维数截断. 一种常见的维数截断方式称为量子连线模型, 该模型使用自旋算符替换 $U(1)$ 规范场, 因此可提供不同的截断维数; 使用 *rishon* 表示截断一般的非阿贝尔规范场; 对 $U(2)$ 规范场, 谐振子前势给出的截断一般也被称为量子连线模型. 量子连线模型对于非阿贝尔规范理论的构造, 一般都将连线分成了左右两个部分, 每个部分上分别定义希尔伯特空间, 对应格点规范理论中的左右生成元. 另一种截断方式是基于表示空间的截断, 这种截断不区分连线上的左右希尔伯特空间, 其截断维数的设置更为自由, 但数学形式较复杂.

既然量子模拟的直接对象成为了截断后的模型, 研究截断的性质就十分必要. 目前已有基于基态和能隙对 $1+1$ 维 $U(1)$ 格点规范理论截断的研究, 结果显示它和 Schwinger 模型或格点 Schwinger 模型差别不大. 本文在这一研究的基础上, 使用数值方法拓展研究了截断维数对弦破坏动力学的影响. 动力学过程包含了能谱的信息, 因此较基态和能隙信息可以更全面地反映模型的性质. 我们的结果显示, 从 3 维截断提升到 5 维截断, 对弦构型初态下的动力学没有定性改变, 从 5 维截断提升到 7 维和 9 维截断, 定量影

响也变得非常微小. 因此对于 $1+1$ 维 $U(1)$ 格点规范理论, 提升截断维数并无太大必要. 为了论证量子模拟结果的效力, 未来研究截断对高维或非阿贝尔群的模型的影响也是必要的, 对于非阿贝尔规范理论的截断维数的影响, 表示空间截断方案提供了较为合适的理论基础. 但如果研究结果显示截断影响不大, 量子连线模型中的 *rishon* 表示将是更合适的实验目标.

基于量子连线模型, 不同的量子模拟实验方案被相继提出. 这些实验方案聚焦三个层次, 一是通过原子与原子或原子和光的相互作用在实验系统的哈密顿量中加入模拟所需的项, 二是通过微扰有效理论或周期驱动的光晶格中的 Floquet 有效理论实现被模拟的格点规范理论, 局域规范不变性这一格点规范理论的核心要素可以由高斯势垒或系统内禀对称性实现. 目前的模拟方案中, 最困难的部分是小格上的磁场项, 尤其是在非阿贝尔规范理论中. 自 2019 年以来, 格点规范理论量子模拟逐渐被真正实现, 但目前最好的结果也仅限于对 $1+1$ 维 $U(1)$ 格点规范理论 2 维截断的模拟, 实现高维和非阿贝尔理论的量子模拟是这一领域未来的发展目标.

附录 A 数学细节

A.1 规范场和联络

数学上, 连续空间中的规范群由矢量丛的联络来描述. 这里我们简要介绍相关的数学概念并指出其与物理对象的联系.

我们以陈省身的教材^[94]中给出的矢量丛的定义为出发点. 设 E 是流形 M 上的矢量丛, $\Gamma(E)$ 是矢量丛 E 的光滑截面的集合, 矢量丛 E 上的联络为一个映射

$$D : \Gamma(E) \rightarrow \Gamma(E \otimes T^*(M)), \quad (\text{A.1})$$

满足如下条件

1. 对任意 $s_1, s_2 \in \Gamma(E)$,

$$D(s_1 + s_2) = Ds_1 + Ds_2. \quad (\text{A.2})$$

2. 对 $s \in \Gamma(E)$ 和任意 $\alpha \in C^\infty(M)$,

$$D(s\alpha) = s \otimes d\alpha + (Ds)\alpha. \quad (\text{A.3})$$

设 X 是 M 上的光滑切矢量场, 定义截面 s 沿 X 的协变导数为

$$D_X s = \langle X, Ds \rangle. \quad (\text{A.4})$$

我们可以将联络的定义拓展到更一般的情况. 定义 $\Omega_M^p(E) = \Gamma(E \otimes \wedge^p T^*M)$. 于是联络可以定义为映射

$$D : \Omega_M^p(E) \rightarrow \Omega_M^{p+1}(E), \quad (\text{A.5})$$

满足

1. 对任意 $s_1, s_2 \in \Omega_M^p(E)$,

$$D(s_1 + s_2) = Ds_1 + Ds_2. \quad (\text{A.6})$$

2. 对 $s \in \Omega_M^0(E)$ 和一个 p -形式 $\alpha \in \Omega_M^p$,

$$D(s \otimes \alpha) = s \otimes d\alpha + D(s) \wedge \alpha. \quad (\text{A.7})$$

对于 $p = 0$, 该定义回到了上一个定义.

我们可以进一步考察 $\Omega_M^p(\text{End}(E))$, 其中的截面将 $\Omega_M^r(E)$ 中的一个截面自然地映射到 $\Omega_M^{p+r}(E)$ 中一个截面. 对于一个映射 $\phi \in \text{End}(E)$, 我们说映射 $\tilde{\phi} \in \Omega_M^p(\text{End}(E))$

是“自然”的, 如果对 $s \in \Omega_M^0(E)$ 和一个 p -形式 $\alpha \in \Omega_M^p$ 我们有

$$\widetilde{\phi}(s \otimes \alpha) = \phi(s) \wedge \alpha. \quad (\text{A.8})$$

因为 E 上的内射是线性映射, 所以上述定义是合理的. 对 $\phi \in \Omega_M^p(\text{End}(E))$ 和 $s \in \Omega_M^0(E)$, 定义 $D\phi \in \Omega_M^{p+1}(\text{End}(E))$ 使得

$$(D\phi)s = D(\phi s) - (-1)^p \phi(Ds). \quad (\text{A.9})$$

下面定义曲率. 曲率 $F \in \Omega_M^2(\text{End}(E))$ 定义为对任意 $s \in \Omega_M^0(E)$,

$$D^2s = Fs. \quad (\text{A.10})$$

于是立即得出 Bianchi 恒等式

$$(DF)s = D(Fs) - F(Ds) = D^3s - D^3s = 0, \quad (\text{A.11})$$

即

$$DF = 0. \quad (\text{A.12})$$

这里我们利用了如下性质: 当作用在 $\Omega_M^p(E)$ 上时, F 仍然和 D^2 等价.

注意, 上文中定义的所有对象都是几何的, 即它们不依赖于坐标的选取, 物理学家也称它们为“物理的”. 为方便计算, 引入矢量丛的线性无关的局部标架场 $\widehat{s}_i \in \Omega_M^0(E)$, 它们在局部张成了矢量丛. 为了将联络写成坐标形式, 定义 $\Gamma_{j\mu}^i$ 为

$$D\widehat{s}_i = \widehat{s}_j \otimes \Gamma_{i\mu}^j dx^\mu. \quad (\text{A.13})$$

引入矩阵值的 1-形式 $\omega \in \Omega_M^1(\text{End}(E))$

$$\omega = \Gamma_{i\mu}^j dx^\mu, \quad (\text{A.14})$$

称为联络形式. 为了记号的简介, 我们用 s 指代截面 $s = s^i \widehat{s}_i \otimes \alpha \in \Omega_M^p(E)$, 其中 α 是一个 p -形式, 或分量 s^i 形成的矢量. 基于上述定义, 联络为

$$D(s^i \widehat{s}_i \otimes \alpha) = \left(\partial_\mu s^i + \Gamma_{j\mu}^i s^j \right) \widehat{s}_i \otimes dx^\mu \wedge \alpha, \quad (\text{A.15})$$

或者在符号上更简洁地,

$$Ds = ds + \omega \wedge s. \quad (\text{A.16})$$

对于 $\phi \in \Omega_M^p(\text{End}(E))$, 在给出局部标架场后, 其分量可以看作一个矩阵, 我们有

$$\phi s = \phi \wedge s, \quad (\text{A.17})$$

上式的分量是矩阵和矢量相乘. 令 $s \in \Omega_M^0(E)$, 将 D 作用在 ϕ 上得到

$$(D\phi)s = D(\phi s) - (-1)^p \phi(Ds) = d(\phi s) + \omega \wedge \phi s - (-1)^p (\phi \wedge ds + \phi \wedge \omega s), \quad (\text{A.18})$$

因此

$$D\phi = d\phi + \omega \wedge \phi - (-1)^p \phi \wedge \omega. \quad (\text{A.19})$$

在局部标架场下, 曲率为

$$F = d\omega + \omega \wedge \omega, \quad (\text{A.20})$$

Bianchi 恒等式的形式为

$$dF + \omega \wedge F - F \wedge \omega = 0. \quad (\text{A.21})$$

考虑导致坐标变换 $s' = Vs$ 的标架场变换, 坐标方程 (A.16) 应变换为

$$Ds' = VDs, \quad (\text{A.22})$$

即,

$$ds' + \omega' \wedge s' = Vd(V^{-1}s') + V\omega \wedge V^{-1}s'. \quad (\text{A.23})$$

比较系数, 我们有

$$\omega' = V(\partial_\mu dx^\mu + \omega)V^{-1}. \quad (\text{A.24})$$

依定义, 曲率 F 是“物理的”, 因此我们期待它满足自然的变换规则

$$F' = VFV^{-1}. \quad (\text{A.25})$$

容易验证

$$\begin{aligned} F' &= d\omega' + \omega' \wedge \omega' \\ &= \partial_\nu V dx^\nu \wedge (dx^\mu \partial_\mu + \omega)V^{-1} - V(dx^\mu \partial_\mu + \omega) \wedge dx^\nu \partial_\nu V^{-1} \\ &\quad + V\partial_\mu V^{-1}V\partial_\nu V^{-1}dx^\mu \wedge dx^\nu + V\partial_\mu V^{-1}Vdx^\mu \wedge \omega V^{-1} + V\omega \wedge dx^\mu \partial_\mu V^{-1} + VFV^{-1} \\ &= VFV^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

有了上述矢量丛的联络的基础知识, 我们可以作代换

$$\omega \rightarrow -igA_\mu dx^\mu, \quad (\text{A.27})$$

$$F \rightarrow -\frac{ig}{2}F_{\mu\nu}dx^\mu \wedge dx^\nu. \quad (\text{A.28})$$

因此, 方程 (A.16) 变为

$$D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu. \quad (\text{A.29})$$

方程 (A.20) 变为

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig [A_\mu, A_\nu]. \quad (\text{A.30})$$

方程 (A.24) 变为

$$A'_\mu = V \left(A_\mu + \frac{i}{g} \partial_\mu \right) V^{-1}. \quad (\text{A.31})$$

作用在 $F_{\mu\nu}$ 上的协变导数应为 (A.19), 即

$$D_\rho F_{\mu\nu} = \partial_\rho F_{\mu\nu} - ig [A_\rho, F_{\mu\nu}]. \quad (\text{A.32})$$

最后我们有 Bianchi 恒等式 (A.21)

$$D_{[\rho} F_{\mu\nu]} = 0, \quad (\text{A.33})$$

它给出了无源的麦克斯韦方程.

值得一提的是, 在流形 (的切空间) 上引入黎曼度量, 将一般的矢量丛换成切丛, 并考虑 Christoffel 联络, 我们就得到了广义相对论的几何基础.

A.2 Haar 测度

Haar 测度是李群上的左不变体积元, 对于紧李群它也是右不变的. 对于参数空间为 \mathbb{R}^r 的李群 G , Haar 测度的一般表达式为^[95]

$$d\mu(g) = \det^{-1} \left(\frac{\partial f^j(g, \mathbf{x})}{\partial x^i} \right) \bigg|_{\mathbf{x}=0} d^r g, \quad (\text{A.34})$$

其中 $g \in G$, $d^r g$ 是参数空间的欧氏体积元, f 是结构函数, 满足 $g(\mathbf{x})g(\mathbf{y}) = g(f(\mathbf{x}, \mathbf{y}))$. 例如, 对于两个 n 阶矩阵 A 和 B ,

$$\frac{\partial (AB)_{ij}}{\partial B_{kl}} = A_{ik} \delta_{jl}, \quad (\text{A.35})$$

因此如果我们将 ij 重排为一个一维序列 $11, 21, \dots, n1, 12, 22, \dots, n2, \dots, nn$, 雅可比矩阵具有分块对角的形式

$$\left(\frac{\partial (AB)}{\partial B} \right)_{ij}^{kl} = \begin{pmatrix} A & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A \end{pmatrix}. \quad (\text{A.36})$$

因此群 $U(N)$ 的 Haar 测度为

$$\int dU \cdots = \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i,j} d\text{Re } U_{ij} d\text{Im } U_{ij} \delta^{(N^2)} (UU^\dagger - \mathbb{I}) \cdots. \quad (\text{A.37})$$

A.3 Floquet 定理

Floquet 定理描述了形如

$$\dot{x} = A(t)x, \quad A(t+T) = A(t) \quad (\text{A.38})$$

的微分方程的解的结构, 其中字母上加点表示对时间 t 求导, T 为实数表示周期. 这里用量子力学的语言表述这一定理^[96].

对于薛定谔 (Schrödinger) 方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (\text{A.39})$$

若哈密顿量具有周期性, $H(t+T) = H(t)$, 则时间演化算符满足对 $t \in [t_0, t_0+T]$,

$$U(t+nT, t_0) = U(t, t_0) [U(t_0+T, t_0)]^n. \quad (\text{A.40})$$

因此, 解出 $U(t, t_0)$ 即可得到方程的解. 定义 Floquet 哈密顿量 H_F 使得

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_F T\right) = U(t_0+T, t_0), \quad (\text{A.41})$$

则其本征态构成希尔伯特空间的一组完备积, 称为 Floquet 模式, 本征值称为准能量 (quasi-energy),

$$H_F |u_j(t_0)\rangle = \epsilon_j |u_j(t_0)\rangle. \quad (\text{A.42})$$

在此基础上, 微分方程的完备解集为

$$|\psi_j(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_j (t - t_0)\right) |u_j(t)\rangle, \quad (\text{A.43})$$

其中 $|u_j(t+T)\rangle = |u_j(t)\rangle$.

这一定理与空间周期势中的布洛赫定理类似, 揭示了周期驱动下时间演化的准周期结构. 当驱动周期很小时, Floquet 哈密顿量可以近似看作系统的有效哈密顿量, 这与晶格常数很小时布洛赫哈密顿量可看作低能下系统的有效哈密顿量是一致的.

参考文献

- [1] WEGNER F J. Duality in generalized Ising models and phase transitions without local order parameters[J]. Journal of Mathematical Physics, 1971, 12(10): 2259-2272.
- [2] ELITZUR S. Impossibility of spontaneously breaking local symmetries[J/OL]. Phys. Rev. D, 1975, 12: 3978-3982. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.12.3978>. DOI: 10.1103/PhysRevD.12.3978.
- [3] YANG C N, MILLS R L. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance[J/OL]. Phys. Rev., 1954, 96: 191-195. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.96.191>. DOI: 10.1103/PhysRev.96.191.
- [4] ANDERSON P W. Plasmons, Gauge Invariance, and Mass[J/OL]. Phys. Rev., 1963, 130: 439-442. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.130.439>. DOI: 10.1103/PhysRev.130.439.
- [5] ENGLERT F, BROUT R. Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1964, 13: 321-323. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.13.321>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.13.321.
- [6] HIGGS P W. Broken Symmetries and the Masses of Gauge Bosons[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1964, 13: 508-509. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.13.508>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.13.508.
- [7] GURALNIK G S, HAGEN C R, KIBBLE T W B. Global Conservation Laws and Massless Particles[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1964, 13: 585-587. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.13.585>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.13.585.
- [8] GLASHOW S L. Partial-symmetries of weak interactions[J/OL]. Nuclear Physics, 1961, 22(4): 579-588. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029558261904692>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(61\)90469-2](https://doi.org/10.1016/0029-5582(61)90469-2).
- [9] WEINBERG S. A Model of Leptons[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1967, 19: 1264-1266. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.19.1264>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.19.1264.
- [10] SALAM A. Weak and electromagnetic interactions, in Elementary particle physics: relativistic groups and analyticity[J]. Svartholm, ed, 1968: 367.
- [11] WILSON K G. Confinement of quarks[J/OL]. Phys. Rev. D, 1974, 10: 2445-2459. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.10.2445>. DOI: 10.1103/PhysRevD.10.2445.
- [12] COLEMAN S, JACKIW R, SUSSKIND L. Charge shielding and quark confinement in the massive schwinger model[J/OL]. Annals of Physics, 1975, 93: 267-275. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491675902122>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(75\)90212-2](https://doi.org/10.1016/0003-4916(75)90212-2).
- [13] FRADKIN E, SHENKER S H. Phase diagrams of lattice gauge theories with Higgs fields[J/OL]. Phys. Rev. D, 1979, 19: 3682-3697. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.19.3682>. DOI: 10.1103/PhysRevD.19.3682.
- [14] DEGRAND T A, TOUSSAINT D. Potential in lattice U(1) gauge theory[J/OL]. Phys. Rev. D, 1981, 24: 466-470. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.24.466>. DOI: 10.1103/PhysRevD.24.466.

- [15] GÖPFERT M, MACK G. Proof of confinement of static quarks in 3-dimensional $U(1)$ lattice gauge theory for all values of the coupling constant[J/OL]. Communications in Mathematical Physics, 1982, 82: 545-606. <https://doi.org/10.1007/BF01961240>. DOI: 10.1007/BF01961240.
- [16] CEA P, COSMAI L. Abelian monopole and vortex condensation in lattice gauge theories[J/OL]. Journal of High Energy Physics, 2001, 2001: 64. <https://doi.org/10.1088/1126-6708/2001/11/064>. DOI: 10.1088/1126-6708/2001/11/064.
- [17] BONATI C, FRANCHI A, PELISSETTO A, et al. Phase diagram and Higgs phases of three-dimensional lattice $SU(N_c)$ gauge theories with multiparameter scalar potentials[J/OL]. Phys. Rev. E, 2021, 104: 064111. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.104.064111>. DOI: 10.1103/PhysRevE.104.064111.
- [18] BORLA U, JEEVANESAN B, POLLMANN F, et al. Quantum phases of two-dimensional \mathbb{Z}_2 gauge theory coupled to single-component fermion matter[J/OL]. Phys. Rev. B, 2022, 105: 075132. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.075132>. DOI: 10.1103/PhysRevB.105.075132.
- [19] KUTI J, POLONYI J, SZLACHANYI K. Monte Carlo study of $SU(2)$ gauge theory at finite temperature[J]. Physics Letters B, 1981, 98(3): 199-204.
- [20] BOCK W, EVERTZ H, JANSEN K, et al. Screening of the confinement potential in the $SU(2)$ lattice gauge theory with scalar matter[J]. Zeitschrift für Physik C Particles and Fields, 1990, 45(4): 597-605.
- [21] PHILIPSEN O, WITTIG H. String Breaking in Non-Abelian Gauge Theories with Fundamental Matter Fields[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1998, 81: 4056-4059. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.4056>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.4056.
- [22] KNECHTLIF, SOMMER R. String breaking as a mixing phenomenon in the $SU(2)$ Higgs model[J/OL]. Nuclear Physics B, 2000, 590(1): 309-328. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321300004703>. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(00\)00470-3](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(00)00470-3).
- [23] WOIT P. Topological Charge in Lattice Gauge Theory[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1983, 51: 638-641. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.51.638>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.51.638.
- [24] IWASAKI Y, YOSHIE T. Instantons and topological charge in lattice gauge theory[J/OL]. Physics Letters B, 1983, 131(1): 159-164. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269383911115>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(83\)91111-5](https://doi.org/10.1016/0370-2693(83)91111-5).
- [25] TEPER M. The topological susceptibility in $SU(2)$ lattice gauge theory: An exploratory study[J/OL]. Physics Letters B, 1986, 171(1): 86-94. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037026938691004X>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(86\)91004-X](https://doi.org/10.1016/0370-2693(86)91004-X).
- [26] VIJAY S, HAAH J, FU L. Fracton topological order, generalized lattice gauge theory, and duality[J/OL]. Phys. Rev. B, 2016, 94: 235157. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.235157>. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.235157.
- [27] CARCASSI G, MACCONE L, AIDALA C A. Four Postulates of Quantum Mechanics Are Three[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2021, 126: 110402. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.110402>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.110402.
- [28] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers[J/OL]. International Journal of Theoretical Physics, 1982, 21: 467-488. <https://doi.org/10.1007/BF02650179>. DOI: 10.1007/BF02650179.

- [29] ASHKIN A. Trapping of Atoms by Resonance Radiation Pressure[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1978, 40: 729-732. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.40.729>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.40.729.
- [30] ANDERSON M H, ENSHER J R, MATTHEWS M R, et al. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor[J/OL]. Science, 1995, 269(5221): 198-201. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.269.5221.198>. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.269.5221.198>. DOI: 10.1126/science.269.5221.198.
- [31] GROSS C, BLOCH I. Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices[J/OL]. Science, 2017, 357(6355): 995-1001. eprint: <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aal3837>. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aal3837>. DOI: 10.1126/science.aal3837.
- [32] SCHÄFER F, FUKUHARA T, SUGAWA S, et al. Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices[J/OL]. Nature Reviews Physics, 2020, 2: 411-425. <https://doi.org/10.1038/s42254-020-0195-3>. DOI: 10.1038/s42254-020-0195-3.
- [33] MARTINEZ E A, MUSCHIK C A, SCHINDLER P, et al. Real-time dynamics of lattice gauge theories with a few-qubit quantum computer[J/OL]. Nature, 2016, 534: 516-519. <https://doi.org/10.1038/nature18318>. DOI: 10.1038/nature18318.
- [34] DAVOUDI Z, HAFEZI M, MONROE C, et al. Towards analog quantum simulations of lattice gauge theories with trapped ions[J/OL]. Phys. Rev. Research, 2020, 2: 023015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.023015>. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.023015.
- [35] TAGLIACOZZO L, CELI A, ZAMORA A, et al. Optical Abelian lattice gauge theories[J/OL]. Annals of Physics, 2013, 330: 160-191. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491612001819>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aop.2012.11.009>.
- [36] FADDEEV L, POPOV V. Feynman diagrams for the Yang-Mills field[J/OL]. Physics Letters B, 1967, 25(1): 29-30. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269367900676>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(67\)90067-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(67)90067-6).
- [37] GROSS D J, WILCZEK F. Ultraviolet Behavior of Non-Abelian Gauge Theories[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1973, 30: 1343-1346. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.30.1343>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.30.1343.
- [38] POLITZER H D. Reliable Perturbative Results for Strong Interactions?[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1973, 30: 1346-1349. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.30.1346>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.30.1346.
- [39] ABRIKOSOV A, LANDAU L, KHALATNIKOV I. On the elimination of infinities in quantum electrodynamics[C]//Dokl. Akad. Nauk SSSR: vol. 95. [S.l. : s.n.], 1954: 497.
- [40] NIELSEN H, NINOMIYA M. A no-go theorem for regularizing chiral fermions[J/OL]. Physics Letters B, 1981, 105(2): 219-223. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269381910261>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(81\)91026-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(81)91026-1).
- [41] NIELSEN H, NINOMIYA M. Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory[J/OL]. Nuclear Physics B, 1981, 185(1): 20-40. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321381903618>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(81\)90361-8](https://doi.org/10.1016/0550-3213(81)90361-8).

- [42] NIELSEN H, NINOMIYA M. Absence of neutrinos on a lattice: (II). Intuitive topological proof[J/OL]. Nuclear Physics B, 1981, 193(1): 173-194. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321381905241>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(81\)90524-1](https://doi.org/10.1016/0550-3213(81)90524-1).
- [43] KOGUT J, SUSSKIND L. Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories[J/OL]. Phys. Rev. D, 1975, 11: 395-408. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.11.395>. DOI: [10.1103/PhysRevD.11.395](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.11.395).
- [44] PEIERLS R. Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen[J/OL]. Zeitschrift für Physik, 1933, 80: 763-791. <https://doi.org/10.1007/BF01342591>. DOI: [10.1007/BF01342591](https://doi.org/10.1007/BF01342591).
- [45] HOFSTADTER D R. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields[J/OL]. Phys. Rev. B, 1976, 14: 2239-2249. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.14.2239>. DOI: [10.1103/PhysRevB.14.2239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.2239).
- [46] GONZÁLEZ-CUADRA D, ZOHAR E, CIRAC J I. Quantum simulation of the Abelian-Higgs lattice gauge theory with ultracold atoms[J/OL]. New Journal of Physics, 2017, 19: 063038. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1367-2630/aa6f37>. DOI: [10.1088/1367-2630/aa6f37](https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa6f37).
- [47] SCHULTZ T D, MATTIS D C, LIEB E H. Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions[J/OL]. Rev. Mod. Phys., 1964, 36: 856-871. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.36.856>. DOI: [10.1103/RevModPhys.36.856](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.36.856).
- [48] ZEE A. Quantum field theory in a nutshell[M]. 2nd ed. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2010.
- [49] CREUTZ M. Gauge fixing, the transfer matrix, and confinement on a lattice[J/OL]. Phys. Rev. D, 1977, 15: 1128-1136. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.15.1128>. DOI: [10.1103/PhysRevD.15.1128](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.15.1128).
- [50] MAKEENKO Y. Methods of Contemporary Gauge Theory[M]. [S.l.]: Cambridge University Press, 2002. DOI: [10.1017/CBO9780511535147](https://doi.org/10.1017/CBO9780511535147).
- [51] SCHWINGER J. Gauge Invariance and Mass. II[J/OL]. Phys. Rev., 1962, 128: 2425-2429. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.128.2425>. DOI: [10.1103/PhysRev.128.2425](https://doi.org/10.1103/PhysRev.128.2425).
- [52] KOGUT J B. The lattice gauge theory approach to quantum chromodynamics[J/OL]. Rev. Mod. Phys., 1983, 55: 775-836. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.55.775>. DOI: [10.1103/RevModPhys.55.775](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.55.775).
- [53] ZOHAR E, BURRELLO M. Formulation of lattice gauge theories for quantum simulations[J/OL]. Phys. Rev. D, 2015, 91: 054506. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.91.054506>. DOI: [10.1103/PhysRevD.91.054506](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.91.054506).
- [54] CHANDRASEKHARAN S, WIESE U J. Quantum link models: A discrete approach to gauge theories[J/OL]. Nuclear Physics B, 1997, 492(1): 455-471. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321397800417>. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(97\)80041-7](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(97)80041-7).
- [55] BROWER R, CHANDRASEKHARAN S, RIEDERER S, et al. D-theory: field quantization by dimensional reduction of discrete variables[J/OL]. Nuclear Physics B, 2004, 693: 149-175. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0550321304004067>. DOI: [10.1016/j.nuclphysb.2004.06.007](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2004.06.007).

- [56] WIESE U J. Ultracold quantum gases and lattice systems: quantum simulation of lattice gauge theories[J/OL]. *Annalen der Physik*, 2013, 525: 777-796. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/andp.201300104>. DOI: 10.1002/andp.201300104.
- [57] MATHUR M. Harmonic oscillator pre-potentials in SU(2) lattice gauge theory[J/OL]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2005, 38(46): 10015-10025. <https://doi.org/10.1088/0305-4470/38/46/008>. DOI: 10.1088/0305-4470/38/46/008.
- [58] ANISHETTY R, MATHUR M, RAYCHOWDHURY I. Prepotential formulation of SU(3) lattice gauge theory[J/OL]. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2009, 43(3): 035403. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/43/3/035403>. DOI: 10.1088/1751-8113/43/3/035403.
- [59] MARTIN O, OTTO S. The Schwinger model via a local Monte Carlo algorithm[J/OL]. *Nuclear Physics B*, 1982, 203(2): 297-310. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321382900335>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(82\)90033-5](https://doi.org/10.1016/0550-3213(82)90033-5).
- [60] SCHILLER A, RANFT J. The massive schwinger model on the lattice studied via a local hamiltonian Monte Carlo method[J/OL]. *Nuclear Physics B*, 1983, 225(2): 204-220. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321383900494>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(83\)90049-4](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90049-4).
- [61] BANKS T, SUSSKIND L, KOGUT J. Strong-coupling calculations of lattice gauge theories: (1 + 1)-dimensional exercises[J/OL]. *Phys. Rev. D*, 1976, 13: 1043-1053. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.13.1043>. DOI: 10.1103/PhysRevD.13.1043.
- [62] HAMER C J, WEIHONG Z, OITMAA J. Series expansions for the massive Schwinger model in Hamiltonian lattice theory[J/OL]. *Phys. Rev. D*, 1997, 56: 55-67. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.56.55>. DOI: 10.1103/PhysRevD.56.55.
- [63] BERRUTO F, GRIGNANI G, SEMENOFF G W, et al. Chiral symmetry breaking on the lattice: A study of the strongly coupled lattice Schwinger model[J/OL]. *Phys. Rev. D*, 1998, 57: 5070-5083. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.57.5070>. DOI: 10.1103/PhysRevD.57.5070.
- [64] BYRNES T M R, SRIGANESH P, BURSILL R J, et al. Density matrix renormalization group approach to the massive Schwinger model[J/OL]. *Phys. Rev. D*, 2002, 66: 013002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.66.013002>. DOI: 10.1103/PhysRevD.66.013002.
- [65] BAÑULS M C, CICHY K, CIRAC J I, et al. The mass spectrum of the Schwinger model with matrix product states[J/OL]. *Journal of High Energy Physics*, 2013, 2013: 158. [https://doi.org/10.1007/JHEP11\(2013\)158](https://doi.org/10.1007/JHEP11(2013)158). DOI: 10.1007/JHEP11(2013)158.
- [66] RICO E, PICHLER T, DALMONTE M, et al. Tensor Networks for Lattice Gauge Theories and Atomic Quantum Simulation[J/OL]. *Phys. Rev. Lett.*, 2014, 112: 201601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.201601>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.201601.
- [67] KÜHN S, CIRAC J I, BAÑULS M C. Quantum simulation of the Schwinger model: A study of feasibility[J/OL]. *Phys. Rev. A*, 2014, 90: 042305. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.90.042305>. DOI: 10.1103/PhysRevA.90.042305.
- [68] MONTANGERO S. *Introduction to Tensor Network Methods*[M]. 1st ed. Basel, Switzerland: Springer International Publishing, 2018.

- [69] HAUSCHILD J, POLLMANN F. Efficient numerical simulations with Tensor Networks: Tensor Network Python (TeNPy)[J/OL]. SciPost Phys. Lect. Notes, 2018: 5. arXiv: 1805.00055. <https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.5>. DOI: 10.21468/SciPostPhysLectNotes.5.
- [70] FISHER M E, BARBER M N. Scaling Theory for Finite-Size Effects in the Critical Region[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 1972, 28: 1516-1519. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.28.1516>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.28.1516.
- [71] YANG C N, LEE T D. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation[J/OL]. Phys. Rev., 1952, 87: 404-409. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.404>. DOI: 10.1103/PhysRev.87.404.
- [72] LEE T D, YANG C N. Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model[J/OL]. Phys. Rev., 1952, 87: 410-419. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.87.410>. DOI: 10.1103/PhysRev.87.410.
- [73] YANG B, SUN H, OTT R, et al. Observation of gauge invariance in a 71-site Bose–Hubbard quantum simulator[J/OL]. Nature, 2020, 587: 392-396. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2910-8>. DOI: 10.1038/s41586-020-2910-8.
- [74] CREWETHER D, HAMER C. Eigenvalues for the massive Schwinger model from a finite-lattice Hamiltonian approach[J/OL]. Nuclear Physics B, 1980, 170(2): 353-368. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0550321380901546>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(80\)90154-6](https://doi.org/10.1016/0550-3213(80)90154-6).
- [75] BALI G S, NEFF H, DÜSSEL T, et al. Observation of string breaking in QCD[J/OL]. Phys. Rev. D, 2005, 71: 114513. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.71.114513>. DOI: 10.1103/PhysRevD.71.114513.
- [76] PEPE M, WIESE U J. From Decay to Complete Breaking: Pulling the Strings in $SU(2)$ Yang-Mills Theory[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 191601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.191601>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.191601.
- [77] PICHLER T, DALMONTE M, RICO E, et al. Real-Time Dynamics in $U(1)$ Lattice Gauge Theories with Tensor Networks[J/OL]. Phys. Rev. X, 2016, 6: 011023. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.6.011023>. DOI: 10.1103/PhysRevX.6.011023.
- [78] GREINER M, MANDEL O, ESSLINGER T, et al. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms[J/OL]. Nature, 2002, 415: 39-44. <https://doi.org/10.1038/415039a>. DOI: 10.1038/415039a.
- [79] GREINER M. Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials[D]. LMU, 2003.
- [80] FESHBACH H. A unified theory of nuclear reactions. II[J/OL]. Annals of Physics, 1962, 19(2): 287-313. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000349166290221X>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0003-4916\(62\)90221-X](https://doi.org/10.1016/0003-4916(62)90221-X).
- [81] INOUE S, ANDREWS M R, STENGER J, et al. Observation of Feshbach resonances in a Bose–Einstein condensate[J/OL]. Nature, 1998, 392: 151-154. <https://doi.org/10.1038/32354>. DOI: 10.1038/32354.

-
- [82] GOLDMANN N, JUZELINAS G, ÖHBERG P, et al. Light-induced gauge fields for ultracold atoms[J/OL]. Reports on Progress in Physics, 2014, 77: 126401. <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0034-4885/77/12/126401>. DOI: 10.1088/0034-4885/77/12/126401.
 - [83] CLARK L W, ANDERSON B M, FENG L, et al. Observation of Density-Dependent Gauge Fields in a Bose-Einstein Condensate Based on Micromotion Control in a Shaken Two-Dimensional Lattice[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2018, 121: 030402. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.030402>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.030402.
 - [84] GÖRG F, SANDHOLZER K, MINGUZZI J, et al. Realization of density-dependent Peierls phases to engineer quantized gauge fields coupled to ultracold matter[J/OL]. Nature Physics, 2019, 15: 1161-1167. <http://www.nature.com/articles/s41567-019-0615-4>. DOI: 10.1038/s41567-019-0615-4.
 - [85] BANERJEE D, DALMONTE M, MÜLLER M, et al. Atomic Quantum Simulation of Dynamical Gauge Fields Coupled to Fermionic Matter: From String Breaking to Evolution after a Quench[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2012, 109: 175302. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.175302>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.175302.
 - [86] ZOHAR E, CIRAC J I, REZNIK B. Simulating Compact Quantum Electrodynamics with Ultracold Atoms: Probing Confinement and Nonperturbative Effects[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2012, 109: 125302. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.125302>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.125302.
 - [87] MAZZA L, RIZZI M, LEWENSTEIN M, et al. Emerging bosons with three-body interactions from spin-1 atoms in optical lattices[J/OL]. Phys. Rev. A, 2010, 82: 043629. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.82.043629>. DOI: 10.1103/PhysRevA.82.043629.
 - [88] ZOHAR E, CIRAC J I, REZNIK B. Simulating $(2 + 1)$ -Dimensional Lattice QED with Dynamical Matter Using Ultracold Atoms[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2013, 110: 055302. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.055302>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.055302.
 - [89] BARBIERO L, SCHWEIZER C, AIDELSBURGER M, et al. Coupling ultracold matter to dynamical gauge fields in optical lattices: From flux attachment to \mathbb{Z}_2 lattice gauge theories[J/OL]. Science Advances, 2019, 5(10): eaav7444. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/sciadv.aav7444>. DOI: 10.1126/sciadv.aav7444.
 - [90] SCHWEIZER C, GRUSDT F, BERNGRUBER M, et al. Floquet approach to \mathbb{Z}_2 lattice gauge theories with ultracold atoms in optical lattices[J/OL]. Nature Physics, 2019, 15: 1168-1173. <http://www.nature.com/articles/s41567-019-0649-7>. DOI: 10.1038/s41567-019-0649-7.
 - [91] ZOHAR E, CIRAC J I, REZNIK B. Cold-Atom Quantum Simulator for $SU(2)$ Yang-Mills Lattice Gauge Theory[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2013, 110: 125304. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.125304>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.125304.
 - [92] BANERJEE D, BÖGLI M, DALMONTE M, et al. Atomic Quantum Simulation of $U(N)$ and $SU(N)$ Non-Abelian Lattice Gauge Theories[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2013, 110: 125303. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.125303>. DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.125303.
 - [93] MIL A, ZACHE T V, HEGDE A, et al. A scalable realization of local $U(1)$ gauge invariance in cold atomic mixtures[J/OL]. Science, 2020, 367(6482): 1128-1130. eprint: <https://www.science.org/doi>

- [i/pdf/10.1126/science.aaz5312](https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.aaz5312). <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aaz5312>. DOI: 10.1126/science.aaz5312.
- [94] CHERN S S, CHEN W H, LAM K S. Lectures on Differential Geometry[M/OL]. [S.l.]: WORLD SCIENTIFIC, 1999. eprint: <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/3812>. <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/3812>. DOI: 10.1142/3812.
- [95] HASSANI S. Mathematical physics: a modern introduction to its foundations[M]. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013.
- [96] SANTORO G E. Introduction to Floquet[J]. Lecture Notes, 2019.

致谢

本文的作者感谢陈徐宗老师的支持和指导, 感谢刘雄军老师的支持. 本文的数值结果均在北京大学高性能计算平台上完成, 作者感谢平台的协助, 感谢樊春老师对于使用该平台的帮助. 作者感谢周鑫池学长和赵鹏举学长指导性的讨论, 感谢韩泽尧同学和顾周洲同学发现初稿中的错误, 感谢刘金禹同学启发性的讨论, 感谢顾颖飞老师和李定平老师的修改建议.