

量子物质拓扑相的核磁共振量子模拟

罗智煌^{1,2}, 彭新华^{2,3}

(1.北京计算科学研究中心,北京 100094;

2.中国科学技术大学近代物理系,中国科学院微观磁共振重点实验室,安徽合肥 230026;

3.合肥微尺度物质科学国家实验室,量子信息与量子科技前沿协同创新中心,安徽合肥 230026)

摘要:拓扑相是一类不能由经典朗道对称破缺理论描述的奇特物质态.这种态具有一些有趣的性质,如依赖于拓扑流形的基态简并度、准粒子分数统计和拓扑纠缠熵等.拓扑相的性质研究在凝聚态物理中本身具有重要意义,如促进新型材料的发现.另一方面,拓扑相提供了一种天然的无噪声介质,在容错量子计算领域也有着潜在的应用.然而,受限于当前苛刻的实验条件和可控的实验手段,在真实体系中观测并探索拓扑相的性质是一件困难的事情.量子模拟用一个可控的量子系统模拟复杂的或难以观测的物理现象,为我们研究拓扑相提供了有力手段.核磁共振体系作为量子模拟的物理实现平台之一,在多量子比特实验中具有成熟的控制技术和精确的测量手段,是一个很好的测试平台.本文首先介绍拓扑相的基本概念和性质,回顾核磁共振在量子模拟中的应用,然后讨论基于该体系完成的关于拓扑相量子模拟的几个实验工作,最后给出总结并展望此研究领域的前景.

关键词:核磁共振;量子模拟;拓扑相;拓扑量子相变;拓扑量子计算

中图分类号: O413; O482.53⁺2 **文献标识码:** A **doi:**10.3969/j.issn.0253-2778.2017.02.003

引用格式: 罗智煌,彭新华.量子物质拓扑相的核磁共振量子模拟[J].中国科学技术大学学报,2017,47(2):117-128.

LUO Zhihuang, PENG Xinhua. Quantum simulation of topological phases of quantum matter with nuclear magnetic resonance[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2017,47(2):117-128.

Quantum simulation of topological phases of quantum matter with nuclear magnetic resonance

LUO Zhihuang^{1,2}, PENG Xinhua^{2,3}

(1. Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100094, China;

2. Department of Modern Physics, and CAS Key Laboratory of Microscale Magnetic Resonance, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China;

3. Hefei National Laboratory for Physical Sciences at the Microscale, and Synergetic Innovation Center of Quantum Information and Quantum Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

收稿日期:2017-01-17; **修回日期:**2017-02-05

基金项目:国家重点基础研究发展(973)计划(2013CB921801),国家自然科学基金(11375167,11425523,11661161018),中国科学院战略先导科技专项B类(XDB01030400)资助

作者简介:罗智煌,男,1986年生,博士.研究方向:基于核磁共振系统的拓扑相量子模拟和拓扑量子计算实验研究.E-mail:lzh@csrc.ac.cn

通讯作者:彭新华,女,1978年生,中国科学技术大学教授,国家杰出青年科学基金获得者,教育部青年长江学者.2003年获中国科学院武汉物理与数学研究所原子分子物理专业博士学位,并获2003年度中国科学院院长优秀奖.2003年作为洪堡学者在德国多特蒙德大学从事合作研究,2008年被中国科学技术大学“百人计划”引进.长期从事基于自旋的量子调控和量子计算的实验研究,已在Physical Review Letters等高水平国际学术期刊上发表实验论文60余篇,他引1600余次.曾获教育部高等学校科学研究优秀成果奖自然科学奖(排名第2)、第十二届中国青年女科学家、霍英东教育基金会第十三届高等院校青年教师奖、中国科学院“百人计划”终期评估优秀入选者、安徽省三八红旗手荣誉称号、“安徽省五一巾帼标兵”称号,安徽省五一劳动奖章等多项荣誉称号.E-mail:xhpeng@ustc.edu.cn



Abstract: Topological phases are exotic states of quantum matter which are beyond the usual symmetry description. These phases have some interesting properties, such as robust ground state degeneracy that depends on the surface topology, quasiparticle fractional statistics, topological entanglement entropy, etc. Topological phases not only play a significant role in the basic scientific research of condensed matter physics, but also provide a natural medium for fault-tolerant quantum computation. Quantum simulation suggests that the complicated or inaccessible physical phenomena can be simulated by a controlled quantum system, which will provide a powerful means to explore topological phases and their topological properties. Nuclear magnetic resonance, as one physical implementation of quantum simulation, is a good test platform due to its sophisticated control and precise measurement in multi-qubit experiments. In this paper, topological phases and nuclear magnetic resonance quantum simulator are reviewed, and three related experiments on quantum simulation of topological phases are introduced. Finally, a summary and an outlook towards topological quantum computation are given.

Key words: nuclear magnetic resonance; quantum simulation; topological phase; topological quantum phase transition; topological quantum computation

0 引言

早在 20 世纪 80 年代,人们就已经知道模拟量子力学体系的行为是一件非常具有挑战性的任务^[1].这是因为当用电子计算机(又称经典计算机)对量子体系进行模拟时需要指数增长的计算资源,例如考虑模拟一个由 30 个自旋为 1/2 的粒子构成的量子系统,经典计算机至少需要内存为 2^{30} ,而计算时间演化则要求一个 $2^{30} \times 2^{30}$ 维矩阵的指数,以目前的经典计算机水平将无法胜任此类任务.因此,为了更深入地了解复杂量子系统的动力学行为,我们在计算机模拟上需要有一个“量子的飞跃”.1982 年, Feynman^[1]首次提出了解决这个问题的办法:用一个可控的量子系统所构成的计算机来模拟量子现象,则运算时间可大幅度减少.这样“量子计算机”的概念诞生了.量子模拟在许多领域都有很重要的应用,例如凝聚态物理、高能物理、原子物理、量子化学和宇宙学等.然而,对于某些物理模拟问题,量子模拟器实验实现的条件相对比较宽松,可以不需要一个普适的量子计算机(即满足 DiVincenzo^[2]提出的所有条件),而且仅仅使用 20~50 个量子比特的量子模拟算法(如分子行为的量子模型)就可能超过经典计算的极限,进行有用的量子模拟任务,充分体现量子计算的优势^[3].因此,量子模拟在实验实现上是更可行的.

许多量子物理系统被提出作为量子模拟器,如中性原子、离子、极性分子、在半导体中的电子、超导电路、核自旋和光子等,但量子计算的真正实现还需

要分阶段、分层次、分体系,多学科合作,进行长时间的研究工作.相比较而言,磁共振是当前技术上最为成熟的量子计算实验手段之一^[4-5].核磁共振核体系已经成为了当前测试和发展量子控制技术以及量子信息处理任务的重要物理平台,例如已经被用来很好地演示许多量子算法^[6-10]、量子模拟^[11-13]以及其他量子信息处理方案^[14].

另一方面,2016 年诺贝尔物理学奖授予戴维·索利斯、邓肯·霍尔丹和迈克尔·科斯特利茨 3 位科学家,以表彰他们发现了物质拓扑相以及在拓扑相变方面做出的理论贡献.2017 年 Oliver E. Buckley 奖颁发给美国麻省理工学院的文小刚教授和加州理工学院的 Alexei Kitaev 教授,获奖的工作是“拓扑序理论和它在众多物理系统中的应用”.他们利用先进的数学方法来研究不同寻常的物质状态,打开了一个未知的世界.然而目前拓扑体系大多在实验上很难制备,因此,量子模拟提供了一个有力的手段去实验探索拓扑相和拓扑相变,以及物质的奇异新状态的性质.

本文将介绍如何利用核磁共振模拟器探索复杂量子系统的拓扑量子相变和拓扑相的相关研究.内容分以下几个部分:节 1 为拓扑相简介;节 2 介绍核磁共振模拟器;节 3 介绍实验实现不同拓扑序间的绝热跃迁;节 4 介绍实验观测动力学量子霍尔效应;节 5 介绍实验识别拓扑有序态.

1 拓扑相简介

如何对物质的不同相进行描述和分类是凝聚态

物理学中最重要的问题之一.物质的内部结构决定了物质的状态,或称为物质的相(或序).传统的朗道对称破缺理论^[15-16]指出,不同的物质相可以用不同的对称性来描述,当不同的物质发生相变时,它们的对称性发生了变化,即对称破缺.例如,从液体到晶体的相变对应着连续平移对称性改变成离散平移对称性.朗道对称破缺理论是如此的成功,已经成为凝聚态物理学的基石.在很长的时间里,物理学家都认为所有可能的物质序和它们的相变都可以由它来描述.但事实并非如此,自然界存在着更奇特的物质相.随着半导体技术的发展,在低温强场下的二维电子气中发现了分数量子霍尔效应^[17],为凝聚态物理揭开了新的篇章.这是由于这些不同的分数量子霍尔态具有相同的对称性,它们超出了朗道对称破缺理论描述的范畴,不能用局域的序参量来区分.另外,高温超导也有类似的性质^[18].这表明物质的内在结构或组成形式要比对称破缺相更为丰富,需要引进新的概念和新的理论来解释和描述这些新物理现象.

分数量子霍尔态是一种新的物质态.1989年,文小刚首次引入“拓扑相”的概念来描述这些新的物质态.物理上,拓扑相是一种奇特的物质相,可以描述为具有鲁棒性的基态简并和在简并基态下的非阿贝尔几何相^[19-21].更为严格的定义是,如果一个系统处在低温低能和长波长下,所有的观测性质如关联函数在时空流形的光滑形变即微分同胚映射下保持不变,则该系统存在拓扑相^[22].拓扑相具有许多有趣的性质,如不受局域微扰影响的基态简并^[20]、准粒子分数统计^[23]、受保护的边缘态^[24]和拓扑纠缠熵^[25-26]等.研究拓扑相的基本兴趣不仅在于其有趣的性质,这些拓扑性质在凝聚态物理中具有重要意义,如推动新理论的发展和新材料的发现等.另外,拓扑有序态在天然容错量子计算即拓扑量子计算中也有着潜在的应用^[22, 27-28].与拓扑密切相关的简并基态正是实现拓扑量子计算的物理基础.利用拓扑相中不同的具有长程纠缠的简并态来编码量子信息,这些信息被非局域地存储,局域上是不可区分的,信息的操控则通过“编织”的方式绝热交换它们而实现,而系统与环境通常是以局域相互作用耦合在一起,存储的信息无法在简并的子空间内退相干,因而所存储的量子信息不受环境局域噪声的影响,具有内在的容错能力.因此,这些简并基态的鲁棒性和长程纠缠的非局域性,使得拓扑相为量子存储和量子计算提供了一种天然介质.拓扑量子计算由

Alexei Kitaev 教授于 1997 年提出,源于纯的数学概念.分数量子霍尔效应说明拓扑量子计算的元素或许能在真实的物理体系中制备.研究者正努力在实验上寻找真正的拓扑量子比特.2016 年微软宣布采用“拓扑量子计算”方案研制全新量子计算机原型系统.另外,拓扑有序态具有非平庸的边界态.在许多情况下,这些边界态将成为不会产生热能的完美的导电通道.拓扑序在电子设备中将有另一种潜在的应用^[29].

除了自然界真实存在的系统如分数量子霍尔效应,二维自旋晶格模型如 Toric-code 模型^[27]、Kitaev 六角晶格模型^[30]等也被发现存在 Z_2 拓扑序. Toric code 模型如图 1(a)所示,在一个 $N \times N$ 的方晶格里,每条边上放置一个自旋 $1/2$,其哈密顿量为

$$H_{\text{TC}} = - \sum_v A_v - \sum_p B_p \quad (1)$$

由顶点算符 A_v 和面算符 B_p 构成,分别定义如下:

$$A_v = \prod_{j \in \text{star}(v)} \hat{\sigma}_j^z, B_p = \prod_{j \in \text{boundary}(p)} \hat{\sigma}_j^x \quad (2)$$

式中, σ_j^x , σ_j^y 和 σ_j^z 是自旋 j 的泡利算符.

Kitaev 在 2006 年提出了另外一种模型——Kitaev 六角晶格模型,如图 1(b)所示,每一个六角格子的顶点上都有一个自旋 $1/2$.六角格子可以分为两套子格,分别是“偶格”和“奇格”,在图中分别用空心圆和实心圆表示,其哈密顿形式如下:

$$H_{\text{(HC)}} = -J_x \sum_{j-\text{link}} \sigma_j^x \sigma_k^x - J_y \sum_{j-\text{link}} \sigma_j^y \sigma_k^y - J_z \sum_{z-\text{link}} \sigma_j^z \sigma_k^z \quad (3)$$

该模型只涉及两体相互作用,因此吸引了人们广泛的研究兴趣.

这些模型为我们研究拓扑相的性质提供了新的平台.基于这些自旋模型已有大量的理论研究工作^[31-33]和实验实现方案^[34-36].然而,真正的实验实现和拓扑性质的实验探测一直以来面临着巨大的挑战.这主要归结于以下几个方面的原因:①具有拓扑态的真实物理体系一般存在于极端物理条件下(如低温、高磁场下的二维电子气);②晶格自旋模型通常涉及多体相互作用,例如, Toric-code 模型具有四体相互作用,不是一个天然存在的物理系统,驱动和控制这样有着四体相互作用的复杂量子系统在实验上并非易事;③能刻画拓扑相的拓扑不变量与系统的整体性质相关.例如,陈数定义为 Berry 曲率在整个闭合哈密顿量参数空间的积分,是一个很好的拓

扑不变量, 实验中缺乏有效的方法直接探测拓扑相的整体的拓扑性质. 因此, 量子模拟成为连接量子物质拓扑态实验和理论研究的桥梁.

2 核磁共振量子模拟器

核磁共振用于研究原子核在磁场下吸收和辐射电磁波的物理现象, 是当前研究分子结构和动力学反应机制的最有力和用途最广的技术之一^[37-38]. 核磁共振因其能准确、快速、高分辨率且无破坏性地探测物质的结构, 在物理、化学、生物、医学、地质学和材料科学都有着广泛的应用. 近些年来, 一些新的应用如量子计算也被提出. 精确和成熟的控制技术使得核磁共振成为实验验证量子计算的一个很好的测试平台^[4-5].

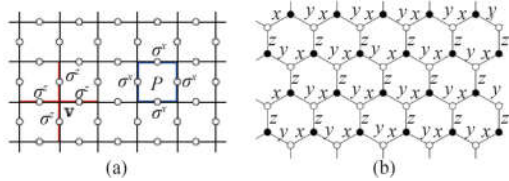


图 1 Toric code 模型 (a) 以及 Kitaev 六角晶格模型 (b)^[27-30]

Fig. 1 Toric code model (a) and Kitaev honeycomb model (b)^[27-30]

自旋量子数为 I 的核自旋有 $2I+1$ 重简并态. 在静磁场 $\mathbf{B}_0 = B_0 \mathbf{e}_z$ 下产生塞曼分裂, 其哈密顿量为

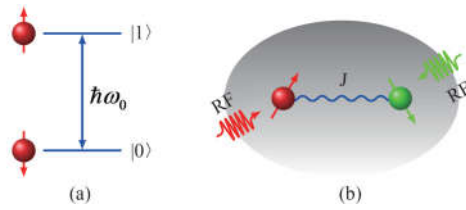
$$H_j^Z = -\hbar\gamma_j B_0 I_j^z = \hbar\omega_0 I_j^z \quad (4)$$

式中, \hbar 为普朗克常数 (通常设为 1); γ_j 为第 j 个核自旋的旋磁比; $\omega_0 = -\gamma_j B_0$ 为 Larmor 频率; $I_j^z = \sigma_j^z/2$, ($\alpha = x, y, z$) 是自旋角动量算符. 现有核磁谱仪常见的静磁场 B_0 大小为 $5 \sim 15$ T, Larmor 频率在几百 MHz 量级. 如果 $I = 1/2$, 塞曼分裂使得自旋成为一个二能级系统, 如图 2(a) 所示. 两个本征能级态记为 $|0\rangle, |1\rangle$, 分别表示自旋朝下和自旋朝上的量子态. 一个自旋 $1/2$ 的核可以作为一个量子比特.

自旋与自旋间可以通过直接或间接的方式形成耦合, 如图 2(b) 所示. 在液体核磁中, 自旋间通过间接耦合或称 J -耦合, 在久期近似下, 其相互作用可简化得到如下形式:

$$H_{jk}^J = 2\pi J_{jk} I_j^z I_k^z \quad (5)$$

这种相互作用主要来源于原子间化学键中的共享电子或者电子波函数的交叠产生的费米接触相互作用. J -耦合大小通常为几个 Hz 到几百 Hz. 其大小依赖于原子核种类, 并随着核间化学键数目的增多而减少.



(a) 自旋 $1/2$ 的核在静磁场下产生塞曼分裂, 形成一个二能级系统. 自旋向下和自旋向上的两个态分别标记为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 两能级差为 $\Delta E = \hbar\omega_0$. (b) 样品分子中的核自旋可以通过直接或间接的方式形成耦合. RF 代表作用于每个核上的射频脉冲

图 2 静磁场下自旋 $1/2$ 的核和核自旋耦合形式

Fig. 2 One spin- $1/2$ nucleus under the static magnetic field and the nuclear spin-spin coupling

在 x - y 平面上加入射频场 \mathbf{B}_1 后, 自旋 j 感受到射频场的作用为

$$H_j^{\text{rf}} = -\hbar\gamma_j B_1 [\cos(\omega_j^{\text{rf}} t + \phi_j) I_j^x + \sin(\omega_j^{\text{rf}} t + \phi_j) I_j^y] \quad (6)$$

式中, B_1 , ω_j^{rf} 和 ϕ_j 分别为射频场的强度、频率和相位. 对于液体核磁和固体核磁, 射频场功率 $\omega_1 = -\gamma B_1$ 的典型值分别为 50 kHz 和几百 kHz, 频率 ω_j^{rf} 大小处于或者接近等于 Larmor 进动频率 ω_0 .

上面式 (4) 和式 (5) 构成液体核磁共振系统的内部哈密顿量, 而式 (6) 为系统的外部哈密顿量, 通过设计外部射频哈密顿量的脉冲序列可以实现量子计算和量子模拟中遇到的诸多控制任务. 例如, 局域射频脉冲结合 J -耦合相互作用项可以实现任意单量子比特门和两比特受控非门. 由量子计算理论可知, 将任意单量子比特门与受控非门组合可以得到更复杂的任意的多比特逻辑门, 从而实现普适的量子计算^[3]. 又如, 在量子模拟的应用中, 三体相互作用可以通过下面的脉冲序列从两体相互作用等效地产生出来^[40, 41], 即

$$e^{-i4I_1^z I_2^z \Delta t} = e^{-iI_1^z \pi/2} e^{-iI_1^z I_2^z \pi/4} e^{-i\pi I_1^z} \cdot e^{-i2I_1^z I_2^z \Delta t} e^{iI_1^z \pi/2} e^{-iI_1^z \pi/4} e^{iI_1^z \pi/2} \quad (7)$$

类似地, 四体相互作用也可以通过上面的技术得到. 在下面的实验中将广泛地使用有效哈密顿量来实现一些有趣的量子模拟实验. 以下所有实验都是在室温的布鲁克 Avance III 400 MHz (9.4T) 谱仪下完成的.

3 实验实现不同拓扑序间的绝热过程

不同于一般的量子相变, 拓扑量子相变过程中没有发生对称破缺. 局域的序参数已经不能用于描述这种新的物理现象. 我们不禁要问, 如何探测拓扑相及其相变过程? 文献^[33]给出的数值结果表明,

标准的量子相变探测器如基态能量偏导、体纠缠和基态保真度都不能刻画拓扑量子相变；而非局域的序参数如拓扑纠缠熵和 Wilson-loop 算符则可以。这里我们以存在两种不同 Z_2 拓扑序的 Wen-plaquette 模型为例，通过测量非局域 Wilson loop 算符，首次实验观测到不同拓扑相之间的绝热跃迁^[42]。

Wen-plaquette 模型是一个精确可解的自旋晶格模型^[39]，如图 3(a)所示，其哈密顿量为

$$H_{\text{Wen}} = -J \sum_i F_i \quad (8)$$

式中， $F_i = \sigma_i^x \sigma_{i+\hat{e}_x}^y \sigma_{i+\hat{e}_x+\hat{e}_y}^x \sigma_{i+\hat{e}_y}^y$ 是作用在 4 个自旋上的 plaquette 算符。因为 $F_i^2 = 1$ ，所以 F_i 的本征值为 $F_i = \pm 1$ 。容易发现，当 $J > 0$ 时系统的基态满足所有 $F_i = 1$ ；当 $J < 0$ 时基态满足所有 $F_i = -1$ 。根据投影对称群的分类^[39]，它们分别对应于两种不同的拓扑序： $Z_2 A$ 序和 $Z_2 B$ 序。从哈密顿量中可以明显看出两种拓扑序具有相同的全局对称性。所以我们不能使用自发对称破缺的概念和局域序参量来区分它们。当 $J = 0$ 时，一种新的相变发生在两种不同的序之间。

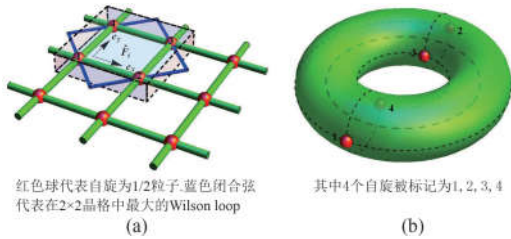


图 3 Wen-plaquette 方晶格模型(a)，以及由 2×2 组成的最小晶格在周期边界条件下形成的圆环面(b)^[42]

Fig.3 Wen-plaquette square lattice model (a), and a torus formed from a 2×2 lattice (i.e., the smallest system) under the periodic boundary condition (b)^[42]

考虑 2×2 晶格在周期边界条件下形成一个圆环面，如图 3(b)所示。这是存在拓扑序的最小的有限系统。在横向场下，它的哈密顿量可以写成

$$H_{\text{Wen}}^4 = -2J (\sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^x \sigma_4^y + \sigma_1^y \sigma_2^x \sigma_3^y \sigma_4^x) - g \sum_i \hat{\sigma}_i^x \quad (9)$$

原来基态的四重简并度被部分打开，基态近似为

$$|\psi_g\rangle \approx \begin{cases} |\psi_{Z_2 B}\rangle = |\phi^+\rangle_{13} |\phi^+\rangle_{24}, J \ll -g < 0 \\ |\psi_{SP}\rangle = |++++\rangle, J = 0 \\ |\psi_{Z_2 A}\rangle = |\phi^+\rangle_{13} |\phi^+\rangle_{24}, J \gg g > 0 \end{cases} \quad (10)$$

式中， $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ ， $|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ 和 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 。从上式可以看出，两种拓扑序是对称的并具有两体纠缠，而自旋极化态是没有纠缠的直积态。

以碘三氟乙烯(C_2F_3I)中的 1 个 ^{13}C 和 3 个 ^{19}F 作为 4 量子比特系统，其分子结构和相关性性质见图 4(a)和图 4(b)。为了使得频率稳定在 1Hz 内，温度涨落要求控制到小于 0.1K。图 4(c)为实验量子线路图，可分成 3 步：①制备到给定某一横场 g 下哈密顿量为 $H_{\text{tot}}[J(0)]$ 的初始基态，这可直接由优化搜索出来的脉宽为 6ms 的 GRAPE 脉冲实现^[43]；②通过改变控制参数 J 从 $J(0)$ 到 $J(T)$ 绝热模拟哈密顿量 $H_{\text{tot}}[J(T)]$ (该过程被优化成离散的 $M = 31$ 步)^[44]；③探测结果后的末态。

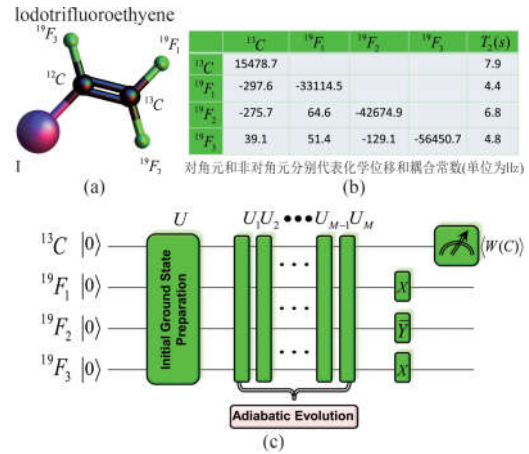
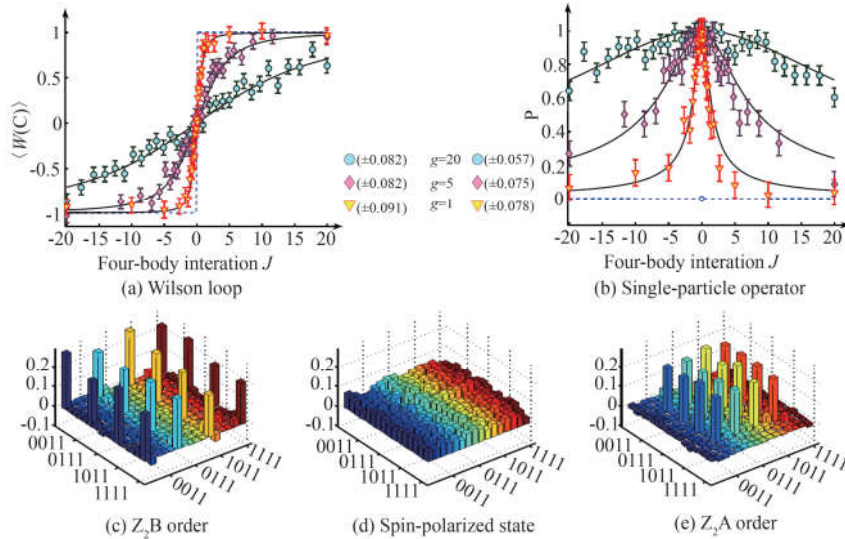


图 4 碘三氟乙烯分子结构图(a)。在 $T = 300K$ 测得的相关参数(b)，以及实验量子线路图(c)^[42]

Fig.4 Molecular structure of iodotrifluoroethylene (a), relevant parameters measured at $T = 300K$, and quantum circuit in the experiment (c)^[42]

实验中分别采用 Wilson loop 算符和单粒子算符来探测两种不同拓扑序之间的跃迁。Wilson loop 算符定义为 $\hat{W}(C) = \prod_C \sigma_i^{\alpha_i}$ ，其中积符号 \prod_C 是穷变闭弦 C 上的所有点。如果 iS 为偶数，则 $\alpha_i = y$ ；否则 $\alpha_i = x$ 。对于 2×2 晶格，这对应为 $\hat{W}(C) = \sigma_1^y \sigma_2^x \sigma_3^y \sigma_4^x$ 。单粒子算符观测量对应于 $P = |\text{Tr}[\hat{\rho}_f(\sigma_i^x - i\sigma_i^y)]|$ ，可以从测量去耦 ^{19}F 的 ^{13}C 谱中得到。这里 $\hat{\rho}_f$ 是每步绝热扫描后的末态。图 5(a)显示当 J 从 -20 改变到 20， $g = 1, g = 5$ 和 $g = 20$ 的 3 组实验数据。如果 $|J|$

$g \gg 1$, $\langle \hat{W}(C) \rangle$ 是接近等于 ± 1 , 分别对应于 Z_2A 或 Z_2B 拓扑序. 在缺乏横场的情况下, 即 $g \rightarrow 0$, 基态在 $J=0$ 处从 Z_2B 到 Z_2A 拓扑序发生一个突然的跃迁. 这是一种发生在不同拓扑序之间的新型的量子相变. 上面的这些结果也表明了 Wilson loop 可以作为区分不同 Z_2 拓扑序的非常有用的非局域序参量. 而图 5(b) 结果显示 P 值关于 $J=0$ 对称, 这意味着不同的拓扑序不能被局域序参量所区分开来.



(a) Wilson loop 算符的测量平均值 $\langle \hat{W}(C) \rangle$; (b) 单粒子算符测量值 P ; (c)~(e) 分别为当 $g=1$ 时, $J=-20, J=0$ 和 $J=20$ 的实验重构密度矩阵的实部, 对应于 Z_2B 拓扑有序态 $|\psi_{Z_2B}\rangle$, 自旋极化态 $|\psi_{SP}\rangle$, 和 Z_2A 拓扑有序态 $|\psi_{Z_2A}\rangle$.

图 5 拓扑序绝热跃迁的实验结果^[42]

Fig.5 Experimental results of adiabatic passage between different topological orders^[42]

最后我们通过完全的量子态层析方法^[45], 重构了在 $g=1$ 的情况下的 Z_2B 序 ($J=-20$)、自旋极化态 ($J=0$) 和 Z_2A 序 ($J=20$) 的密度矩阵. 这些密度矩阵的实部正如图 5(c)~(e) 所示. 实验的保真度分别为 95.2%, 95.6% 和 95.7%. 实验偏差主要来自于 GRAPE 脉冲、初始基态制备和谱线拟合的不完美性. 尽管 2×2 晶格是一个非常小的系统, 拓扑序依然存在于有限尺寸的周期晶格 Wen-plaquette 模型. 实验结果成功地演示了量子模拟强相关量子系统的可行性和利用绝热方法构建拓扑量子存储的有用性.

4 实验观测动力学量子霍尔效应

量子霍尔效应是凝聚态物理中重要的发现之一^[46,17]. 最显著的特征之一是霍尔电导具有量化的值, 由填充因子度量. 填充因子也称陈数, 是一个拓扑不变量^[47]. 拓扑不变量反映了拓扑相的全局性质, 这种性质不会因微小的扰动而改变. 然而, 在实验中直接测量这些拓扑不变量是非常困难的, 尤其是在复杂的多体量子系统中. 比如之前测量 Berry

相的方法通常是用干涉实验^[12,49-52], 但这种方法局限于弱相互作用的简单系统. 为了克服干涉法的局限性, Gritsev 等在 2012 年提出通过观测量对外加参数的改变速率的非绝热响应直接测量 Berry 曲率^[53]. 这些结果可以解释为参数空间下的动力学量子霍尔效应. 如果我们将电场看成是矢量势变化速度, 那么传统的量子霍尔效应可以看成是动力学量子霍尔效应的一个特例. 直接测量 Berry 曲率的方法使得我们可以对任意量子系统从哈密顿量的参数空间中去研究其拓扑性质. 基于这种方法, 已有些实验在一个或两个量子比特的超导系统中观测到了拓扑跃迁^[54-55].

Gritsev 等^[53] 提出, Berry 曲率可以从沿着 μ 方向的广义力对驱动速度 v_ν 的线性响应中抽取出来, 即

$$\mathcal{M}_\mu = \text{const} + \mathcal{F}_{\mu\nu} v_\nu + \mathcal{O}(v^2) \quad (11)$$

其中广义力定义为 $\mathcal{M}_\mu = -\langle \psi_0(t_f) | \partial_\mu H | \psi_0(t_f) \rangle$, Berry 曲率 $\mathcal{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathcal{A}_\nu - \partial_\nu \mathcal{A}_\mu$ 和 Berry 连通 $\mathcal{A}_\mu = i \langle \psi_0 | \partial_\mu | \psi_0 \rangle$. 为了忽略非线性项, 所选择的 v_ν 必须足够小或者说准绝热的. 如果对 Berry 曲率在闭合

的哈密顿量参数空间积分则得到第一陈数, 如下^[48,53]:

$$Ch_1 = \frac{1}{2\pi} \oint_S dS_{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} \quad (12)$$

陈数揭示了基态在整个参数流形中的全局性质. 事实上, Ch_1 精确地反映了参数空间 S 内的基态简并点数. 这些简并点作为 Ch_1 的资源, 类似于参数空间里的磁单极子. 陈数对理解量子效应具有本质的帮助, 它扮演着区分不同拓扑相及拓扑量子相变的非平庸序参数.

下面以一维的海森堡自旋链为例来解释多体相互作用体系中动力学量子霍尔效应. 在外加磁场 \mathbf{h} 下, 它的哈密顿量为

$$H = - \sum_{j=1}^N \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\sigma}_j - J \sum_{j=1}^{N-1} \boldsymbol{\sigma}_j \cdot \boldsymbol{\sigma}_{j+1} \quad (13)$$

式中, $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T$, J 是相邻自旋间的各向同性的耦合相互作用强度. 在测量 Berry 曲率过程中, 先让系统处在外磁场的球参数空间的北极点所对应的初始基态, 然后沿着蓝色的路径经历准绝热演化, 如图 6(a) 所示. 在蓝色的准绝热演化路径中, $\phi = 0$ 并且改变 $\theta(t) = v_\theta^2 t^2 / 2\pi$ 从 $t = 0$ 到 $t = \pi/v_\theta$. 这样的路径选择是为了确保驱动速度被光滑地打开和系统不会被激发到激发态上去. 通过简单推导, 我们可以得到广义力在 $t = \pi/v_\theta$ 处,

$$\mathcal{M}_\phi = - \langle \partial_\phi H \rangle |_{\phi=0, t=\pi/v_\theta} = \sum_{j=1}^N \langle \sigma_y^j \rangle \quad (14)$$

广义力即为沿着 y 方向的总的磁化矢量. 图 6(b) 示意了 2 量子比特情况下计算得到的驱动速度 v_θ 的极限. 这个结果与 3 量子比特和 4 量子比特情况相类似. 在线性区即 $v_\theta \leq 1.53$, $M_y \propto v_\theta$, 线性响应在该区间里能近似得很好. 通过式(11)可得 Berry 曲率. 如果对 Berry 曲率在球表面积分, 就可以

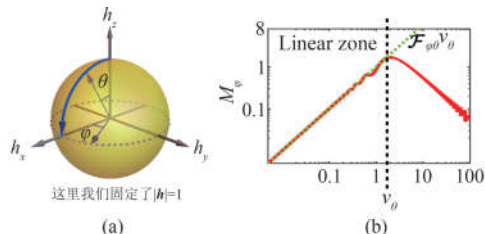


图 6 在外磁场 \mathbf{h} 球形参数空间里的准绝热演化路径(蓝线)(a), 以及对于 2 量子比特情况磁化矢量与驱动速度 v_θ 的关系曲线(b)^[57]

Fig.6 The quasiadiabatic evolution path (blue) in the spherical parameter space of external magnetic field \mathbf{h} (a), and the magnetization as a function of v_θ for the two-qubit case (b)^[57]

得到陈数. 由于海森堡自旋链的相互作用具有旋转不变性, Berry 曲率的积分可以简化成直接乘上球的面积 4π . 因此由式(12), 有 $Ch_1 = 2\mathcal{F}_{\phi\theta}$.

我们将实验研究不同尺寸(2,3,4 自旋)的一维海森堡自旋链中的动力学量子霍尔效应. 这里先以 2-自旋体系来说明. 实验中采用标记 ^{13}C 氯仿中的 1 个 ^{13}C 和 1 个 ^1H 核作为 2-自旋体系, 氯仿的分子结构见图 7(a). 系统先被制备到赝纯态 $\hat{\rho}_{00} = \frac{1-\epsilon}{4} I + \epsilon |00\rangle\langle 00|$, 然后通过一个 5ms 的 GRAPE 脉冲作用于 $\hat{\rho}_{00}$ 可以得到北极点处的初始基态. 经过准绝热演化后, 测量总的磁化矢量, 其累加去耦实验谱如图 7(c) 所示. 根据线性响应理论, 可以得到 $\mathcal{F}_{\phi\theta}$ 以及 Ch_1 , 结果见图 7(d). 图 7(b) 为 $N=2$ 的海森堡自旋链能级结构. 图中基态和第一激发态的能级交叉点正好对应于 Berry 曲率发生突变处, 这反映了由相互作用诱导了拓扑跃迁. 3, 4-自旋物理系统分别采用了氟丙二酸二乙酯分子中的 1 个 ^1H , ^{13}C 和 ^{19}F 和碘三氯乙烯分子中的 1 个 ^{13}C 和 3 个 ^{19}F . 实验结果见图 8(c) 和图 8(d). 注意到 3-自旋实验中 Berry 曲率从非零值开始, 这是不同于偶数-自旋实验结果的, 反映了奇数和偶数反铁磁自旋链具有不同的基态简并情况, 很好地符合理论预期.

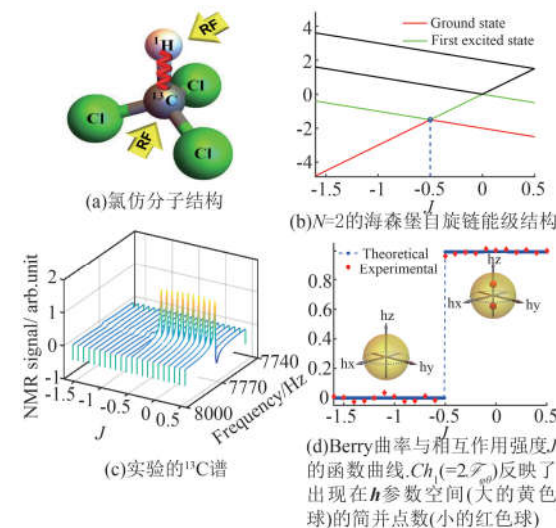


图 7 2 自旋海森堡链实验^[57]

Fig.7 Dynamical quantum Hall effect in a 2-spin Heisenberg chain^[57]

我们^[57]利用核磁共振量子模拟器实验模拟了一维海森堡自旋链中的动力学量子霍尔效应, 观测

特约评述

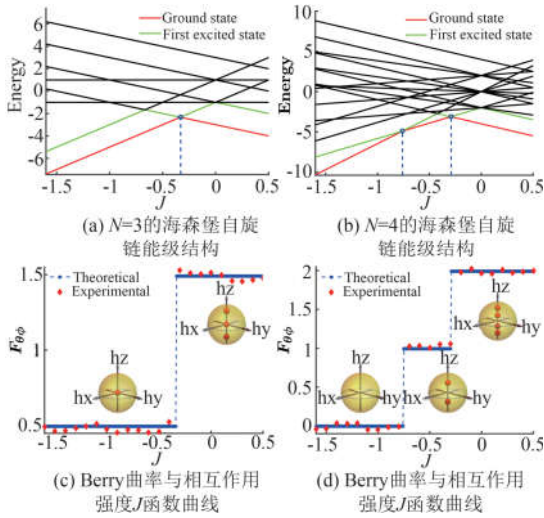


图 8 3,4 自旋海森堡链中的动力学量子霍尔效应^[57]
Fig.8 Dynamical quantum Hall effects in 3-spin and 4-spin Heisenberg chains^[57]

到了由相互作用诱导的拓扑跃迁. 实验得到的 Berry 曲率和陈数就像哈密顿量的指纹一样, 可以获得哈密顿量几何结构的信息, 尤其是基态简并信息. 类似于传统的量子霍尔效应, 动力学量子霍尔效应中出现的量化平台也可以用于哈密顿量中参数的精确测量. 事实上, 如果处在一些特殊条件比如低场下, 核磁系统本身具有强耦合相互作用, 那么我们是有可能在真实的体系中观测到非常有趣的物理现象的.

5 实验识别拓扑有序态

凝聚态理论中极其重要的任务之一是需要区分出现在复杂多体量子系统中的拓扑序. 最近有理论工作表明, 编码在简并基态中的非阿贝尔几何相可以完全地识别拓扑有序态^[59-66]. 非阿贝尔几何相在 $SL(2, \mathbf{Z})$ 表示下为调制 \mathbf{S} 和 \mathbf{T} 矩阵. 从任意子理论或者么正调制张量范畴理论可知^[30, 67], 调制 \mathbf{S} 的矩阵元确定了准粒子的互统计; 而 \mathbf{T} 的矩阵元决定了拓扑自旋性质. 根据 Verlinde 公式, 可以从 \mathbf{S} 矩阵进一步构建出融聚系数. 融聚规则和编织规则是任意子的两个主要的代数结构. 拓扑序的性质与基本的激发子或任意子密切相关. 所以, \mathbf{S} 和 \mathbf{T} 提供了完整的描述, 可以作为拓扑序的非局域序参数.

那么一个自然的问题也由此而出: 若给定一个二维晶格的微观哈密顿量, 能否直接从实验测量结果识别它的拓扑序呢? 下面以 Kitaev toric code 模

型作为一个具体的例子来说明如何通过测量调制矩阵确定该模型所存在的 Z_2 拓扑序.

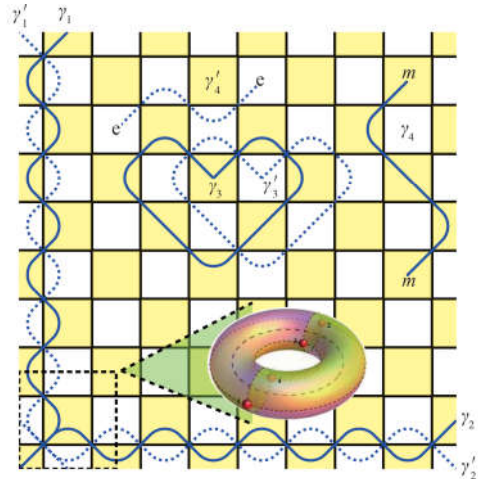
先回顾一下具有 Z_2 拓扑序的 Kitaev toric code 模型(见图 1(a) 或图 9)^[27], 它的哈密顿量由式(1)描述. 采用该模型的一个基本单元即 2×2 方晶格作为实验的测试系统, 其哈密顿量为

$$H_{Z_2}^4 = -2(\sigma_1^x \sigma_2^x \sigma_3^x \sigma_4^x + \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_3^z \sigma_4^z) \quad (15)$$

它的四重简并基态为

$$\begin{aligned} |\psi_g^{(0,0)}\rangle &= (|0000\rangle + |1111\rangle) / \sqrt{2} \\ |\psi_g^{(0,1)}\rangle &= (|0011\rangle + |1100\rangle) / \sqrt{2} \\ |\psi_g^{(1,0)}\rangle &= (|0110\rangle + |1001\rangle) / \sqrt{2} \\ |\psi_g^{(1,1)}\rangle &= (|0101\rangle + |1010\rangle) / \sqrt{2} \end{aligned} \quad (16)$$

将这个简并基态空间记为 \mathcal{L} .



蓝色实线弦 ($\gamma_1 \sim \gamma_4$) 和它们的对偶虚线弦 ($\gamma'_1 \sim \gamma'_4$) 分别定义在黄色子晶格和白色子晶格上. e 和 m 代表基本的激发子(任意子); 电荷和磁涡旋. 黑色虚线方框是方晶格的一个基本单元

图 9 在一个圆环面上的 Kitaev toric code 自旋晶格模型
Fig.9 Kitaev Toric code model on a torus

图 10(a) 和 10(b) 清晰地显示了 $\pi/2$ 旋转和 Dehn 扭曲所对应的实验操作分别为 SWAP_{13} 和 SWAP_{12} . 在这样的门操作下, Toric code 模型的哈密顿量依然保持不变. 当 SWAP_{13} 和 SWAP_{12} 作用到式(16)中基矢下, 通过计算得到调制 \mathbf{S} 和 \mathbf{T} 矩阵分别如下:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

将 \mathbf{T} 对角化后可以得到标准的 \mathbf{S} 和 \mathbf{T} 矩阵. 这与

toric code 模型的标准 S 和 T 完全吻合. 对于一个 $N \times N$ 的 toric code 晶格, 对应于 S 和 T 的 $\pi/2$ 旋转和 Dehn 扭曲实验上等价为一些 SWAP 门操作, SWAP 门操作数不会大于 N^2 . 所以物理实现 S, T 操作是随着系统尺寸多项式增加的, 这说明实验的测量在更大系统下也是有效的.

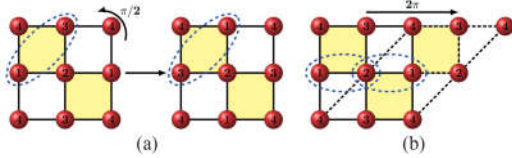


图 10 2×2 方晶格圆环面上的 $\pi/2$ 旋转和 Dehn 扭曲分别等价于 SWAP₁₃ 操作 (a) 和 SWAP₁₂ 操作 (b)^[69]

Fig.10 On a 2×2 torus, $\frac{\pi}{2}$ roation is equivalent to a SWAP₁₃ operation (a), and Dehn twist is equivalent to a SWAP operation (b)^[69]

对给定的 2×2 自旋晶格哈密顿量式(15), 现在需要通过测量出它的调制矩阵直接从实验上识别出现在该模型中的拓扑序类型. 实验中采用了溶解于 N-(4-甲氧基苯亚甲基)-4-丁基苯胺液晶中的 1-溴-2,4,5-氟苯核磁样品, 其中 3 个 ^{19}F 自旋和 2 个 ^1H 组成 1 个 5 比特的量子寄存器, 其分子结构和标记的量子比特如图 11(a) 所示. 标记为 0 的第一个自旋用作辅助比特, 剩余的标记为 1~4 的自旋则构成 2×2 自旋晶格系统. 与液体样品不同, 该液晶多了一项空间平均后的偶极相互作用(DD-耦合), 其等效哈密顿量在双旋转坐标下有

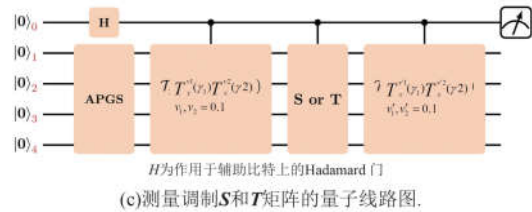


图 11 调制矩阵测量的物理系统和量子线路图^[69]

Fig.11 Physical system and quantum circuit for measuring the modular matrices^[69]

$$H_{\text{NMR}} = \sum_{j=1}^5 \pi \nu_j \sigma_j^z + \sum_{1 \leq j < k \leq 5} \frac{\pi}{2} (J_{jk} + 2D_{jk}) \sigma_j^z \sigma_k^z \quad (18)$$

相关参数见图 11(b).

图 11(c) 为实验的量子线路, 主要包括基态的绝热制备 (APGS), 两个受控弦算符和一个受控 S 或 T 变换. 这里引进一个辅助量子比特用作干涉测量. 利用线选方法, 量子系统首先制备到初始赝纯态 (PPS): $\hat{\rho}_{00000} = \frac{1-\epsilon}{32} \mathbf{I} + \epsilon |00000\rangle\langle 00000|$. 这里 \mathbf{I} 是 32×32 单位矩阵, $\epsilon \approx 10^{-5}$ 为极化度. 辅助比特通过 Hadamard 门制备到叠加态, 即 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_0 + |1\rangle_0)$. 注意到 $|0000\rangle$ 正好是哈密顿量 $H_0 = -\sum_{j=1}^4 \sigma_j^z$ 的基态. 通过足够缓慢地改变下面的含时哈密顿量:

$$H(t) = [1 - s(t)]H_0 + s(t)H_{\text{w.en}} \quad (19)$$

可以绝热地制备到哈密顿量(式(15))的 1 个拓扑基态 $|\psi_g^{(0,0)}\rangle$.

一旦初始的拓扑有序态 $|\psi_g^{(0,0)}\rangle$ 通过绝热演化制备出来, 将不可以压缩的弦算符 $\mathcal{P}_x^1(\gamma_1)\mathcal{P}_x^2(\gamma_2)$ (取不同的 ν_1, ν_2) 作用到 $|\psi_g^{(0,0)}\rangle$ 上, 则可以得到 \mathcal{L} 中的其他拓扑态. 关于绝热制备拓扑序的详细的实验过程可参见文献[68], 最近研究^[58] 也已经提出数值上能有效地找到这些弦算符. 为简便起见, 将 S 或 T 的实验操作记为 \hat{O} . 在其作用后在辅助量子比特上测量得到最后的 NMR 信号为

$$\text{Tr}(\hat{\rho}_f \hat{F}_0^+) = \frac{1}{2} \langle \psi_g^{(\nu_1, \nu_2)} | \hat{O} | \psi_g^{(\nu_1, \nu_2)} \rangle \quad (20)$$

式中, $\hat{F}_0^+ = |0\rangle_0\langle 1|$ 为辅助量子比特上的观测算符. 当取不同的 ν_1, ν_2, ν_1 和 ν_2 时, S 和 T 在 \mathcal{L} 的矩阵表象可以获得, 实验结果如下:

$$\mathbf{S}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} 0.98 & 0.00 & 0.00 & 0.02 \\ -0.02 & 0.03 & 0.97 & 0.02 \\ -0.03 & 0.95 & 0.02 & 0.01 \\ -0.01 & -0.03 & 0.02 & 0.97 \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$\mathbf{T}_{\text{exp}} = \begin{pmatrix} 0.94 & 0.03 & 0.00 & 0.02 \\ -0.01 & 0.99 & 0.02 & 0.02 \\ -0.02 & -0.02 & 0.03 & 0.96 \\ -0.02 & -0.02 & 0.98 & 0.01 \end{pmatrix} \quad (22)$$

通过对角化后, \mathbf{T}_{exp} 的本征值为 0.95, 0.98, 0.98, -0.95, 即为基本的激发子 I, e, m, f 实验得到的拓扑自旋统计相位. 其他的拓扑性质也可以从实验

特
约
评
述

得到的 S 和 T 获得. 实验结果表明, 出现在哈密顿量式(15)中的态正是与 toric code 相同的 Z_2 拓扑序.

通过测量调制 S 和 T 矩阵, 我们^[69]第一次从实验上识别了拓扑序, 一些有趣的性质如准粒子统计也可以从实验得到的调制矩阵中获得. 尽管这里实验中所采用的系统比较小, 测得的 S 和 T 仍然可以给出比传统的拓扑纠缠熵更为完备的关于拓扑序的信息; 另外, 原则上这个测量的方法可以推广到更大的系统和其他物理体系中. 我们相信这里核磁系统的实验实现将会对凝聚态中的这种奇特的物质相的实验分类有很大的促进作用, 同时也会将这里的测量方法推广到其他的更有趣的拓扑相研究中.

6 结论与展望

核磁共振体系成熟的控制技术使得拓扑相的量子模拟实验研究成为可能. 我们分别从测量非局域的 Wilson-loop 算符、陈数和调制矩阵三个角度对拓扑相的性质进行了探索. 所采用的测量方法并不局限于核磁共振系统, 在其他的量子模拟物理体系如超导中, 甚至是在真实的凝聚态物理系统中依然有效. 同时我们将此方法推广到更为复杂的量子系统中去研究拓扑相的性质. 系列的演示性实验不仅加深了我们对拓扑相的理解, 也为将来构建天然的容错量子计算即拓扑量子计算打下了坚实的基础, 因为实现拓扑量子计算的第一步就是要找到一个合适的具有拓扑相的物理系统. 在不久的将来, 我们希望能有这样的拓扑系统中实现具有鲁棒性的量子存储、拓扑保护的单量子门和受控非门, 以及简单的量子算法演示. 拓扑量子计算在容错量子计算中将会是一个极具潜能和可行性的应用, 而不是只停留在抽象的理论中.

参考文献(References)

- [1] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers [J]. *Int J Theor Phys*, 1982, 21: 467-488.
- [2] DIVINCENZO D P. The Physical Implementation of Quantum Computation [J]. *Fortschr Phys*, 2000, 48: 771-783.
- [3] NIELSEN M A, CHUANG I L. *Quantum Computation And Quantum Information* [M]. Cambridge, U K: Cambridge University Press, 2000.
- [4] CORY D G, FAHMY A F, HAVEL T F. Ensemble quantum computing by NMR spectroscopy [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1997, 94 (5): 1634-1639.
- [5] GERSHENFELD N A, CHUANG I L. Bulk spin-resonance quantum computation [J]. *Science*, 1997, 275 (5298): 350-356.
- [6] CHUANG I L, VANDERSYPEN L, ZHOU X, et al. Experimental realization of a quantum algorithm [J]. *Nature*, 1998, 393: 143-146.
- [7] WU Z, LI J, ZHENG W Q, et al. Experimental demonstration of the Deutsch-Jozsa algorithm inhomonuclear multispin systems [J]. *Phys Rev A*, 2011, 84: 042312.
- [8] JONES J, MOSCA M, HANSEN R. Implementation of a quantum search algorithm on a quantum computer [J]. *Nature*, 1998, 393: 344-346.
- [9] VANDERSYPEN L M K, STEFFEN M, BREYTA G, et al. Experimental realization of Shor's quantum factoring algorithm using nuclear magnetic resonance [J]. *Nature*, 2001, 414: 883-887.
- [10] LU D W, ZHU J, ZOU P, et al. Experimental implementation of a quantum random-walk search algorithm using strongly dipolar coupled spins [J]. *Phys Rev A*, 2010, 81: 022308.
- [11] DU J F, XU N Y, PENG X H, et al. NMR implementation of a molecular hydrogen quantum simulation with adiabatic state preparation [J]. *Phys Rev Lett*, 2010, 104: 030502.
- [12] PENG X H, WU S F, LI J, et al. Observation of the ground-state geometric phase in a Heisenberg XY model [J]. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 240405.
- [13] FENG G R, LONG G L, LAFLAMME R. Experimental simulation of anyonic fractional statistics with an NMR quantum-information processor [J]. *Phys Rev A*, 2013, 88: 022305.
- [14] GEORGESCU I M, ASHHAB S, NORI F. Quantum simulation [J]. *Rev Mod Phys*, 2014, 86: 153-185.
- [15] LANDAU L D. Theory of phase transformations [J]. *Phys Zs Sowjet*, 1937, 11: 26.
- [16] GINZBURG V L, LANDAU L D. On the theory of superconductivity [J]. *J Exp Theor Phys*, 1950, 20: 1064.
- [17] TSUI D C, STORMER H L, GOSSARD A C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit [J]. *Phys Rev Lett*, 1982, 48: 1559.
- [18] BEDNORZ G, MUELLER K A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system [J]. *Z Phys B*, 1986, 64 (2): 189-193.
- [19] WEN X G. Topological orders in rigid states [J]. *Int J Mod Phys B*, 1990, 4: 239; doi: 10.1142/S0217979290000139.
- [20] WEN X G, NIU Q. Ground-state degeneracy of the

- fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces [J]. *Phys Rev B*, 1990, 41: 9377.
- [21] WEN X G. Quantum Field Theory of Many-Body Systems [M]. Oxford, UK : Oxford University Press, 2004.
- [22] NAYAK C, SIMON S H, STERN A, et al. Non-Abelian anyons and topological quantum computation [J]. *Rev Mod Phys*, 2008, 80: 1083-1159.
- [23] AROVAS D, SCHRIEFFER J R, WILCZEK F. Fractional statistics and the quantum Hall effect [J]. *Phys Rev Lett*, 1984, 53: 722.
- [24] WEN X G. Topological orders and edge excitations in FQH states [J]. *Adv Phys*, 1995, 44: 405.
- [25] KITAEV A, PRESKILL J. Topological entanglement entropy [J]. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 110404.
- [26] LEVIN M, WEN X G. Detecting topological order in a ground state wave function [J]. *Phys Rev Lett*, 2006, 96: 110405.
- [27] KITAEV A. Fault-tolerant quantum computation by anyons [J]. *Ann Phys*, 2003, 303: 2-30.
- [28] STERN A, LINDNER N H. Topological quantum computation) from basic concepts to first experiments [J]. *Science*, 2013, 339: 1179-1181.
- [29] LEVIN M, WEN X G. Colloquium: Photons and electrons as emergent phenomena [J]. *Rev Mod Phys*, 2005, 77: 871-879.
- [30] KITAEV A. Anyons in an exactly solved model and beyond [J]. *Ann Phys*, 2006, 321: 2-111.
- [31] KOU S P, YU J, WEN X G. Mutual Chern-Simons Landau-Ginzburg theory for continuous quantum phase transition of Z₂ topological order [J]. *Phys Rev B*, 2009, 80: 125101.
- [32] HAMMA A, LIDAR D A. Adiabatic preparation of topological order [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 030502.
- [33] HAMMA A, ZHANG W, HAAS S, et al. Entanglement, fidelity, and topological entropy in a quantum phase transition to topological order [J]. *Phys Rev B*, 2008, 77: 155111.
- [34] DUAN L M, DEMLER E, LUKIN M D. Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices [J]. *Phys Rev Lett*, 2003, 91: 090402.
- [35] MICHELIA, BRENNEN G K, ZOLLER P. A toolbox for lattice-spin models with polar molecules [J]. *Nat Phys*, 2006, 2: 341-347.
- [36] YOU J Q, SHI X F, NORI F. Quantum emulation of a spin system with topologically protected ground states using superconducting quantum circuits [J]. *Phys Rev B*, 2010, 81: 014505.
- [37] RABI I I, ZACHARIAS J R, MILLMAN S, et al. A new method of measuring nuclear magnetic moment [J]. *Phys Rev*, 1938, 53 (4): 318-327.
- [38] LEVITT M H. Spin Dynamics; Basics of Nuclear Magnetic Resonance [M]. Chichester, England: John Wiley and Sons Ltd, 2008.
- [39] WEN X G. Quantum orders in an exact soluble model [J]. *Phys Rev Lett*, 2003, 90: 016803.
- [40] TSENG C H, SOMAROO S, SHARF Y, et al. Quantum simulation of a three-body-interaction Hamiltonian on an NMR quantum computer [J]. *Phys Rev A*, 1999, 61: 012302.
- [41] PENG X H, ZHANG J F, DU J F, et al. Quantum simulation of a system with competing two and three-body interactions [J]. *Phys Rev Lett*, 2009, 103: 140501.
- [42] PENG X H, LUO Z H, ZHENG W Q, et al. Experimental implementation of adiabatic passage between different topological orders [J]. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 080404.
- [43] KHANEJA N, REISS T, KEHLET C, et al. Optimal control of coupled spin dynamics; Design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms [J]. *J Magn Reson*, 2005, 172: 296-305.
- [44] MESSIAH A. Quantum Mechanics [M]. New York: Wiley, 1976.
- [45] LEE J S. The quantum state tomography on an NMR system [J]. *Phys Lett A*, 2002, 305: 349 - 353.
- [46] KLITZING K V, DORDA G, PEPPER M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance [J]. *Phys Rev Lett*, 1980, 45: 494.
- [47] CHERN S S. Characteristic classes of Hermitian manifolds [J]. *Ann Math*, 1946, 47: 85-121.
- [48] XIAO D, CHANG M C, NIU Q. Berry phase effects on electronic properties [J]. *Rev Mod Phys*, 2010, 82: 1959-2007.
- [49] SUTER D, CHINGAS G C, HARRIS R A, et al. Berry's phase in magnetic resonance [J]. *Mol Phys*, 1987, 61: 1327-1340.
- [50] LEEK P J, FINK J M, BLAIS A, et al. Observation of Berry's phase in a solid-state qubit [J]. *Science*, 2007, 318: 1889-1892.
- [51] BERGER S, PECHAL M, PUGNETTI S, et al. Geometric phases in superconducting qubits beyond the two-level approximation [J]. *Phys Rev B*, 2012, 85: 220502.
- [52] BERGER S, PECHAL M, ABDUMALIKOV A A, et al. Exploring the effect of noise on the Berry phase [J]. *Phys Rev A*, 2013, 87: 060303.

- [53] GRITSEV V, POLKOVNIKOV A. Dynamical quantum Hall effect in the parameter space[J]. Proc Natl Acad Sci, 2012, 109: 6457-6462.
- [54] SCHROER M D, KOLODRUBETZ M H, KINDEL W F, et al. Measuring a topological transition in an artificial spin-1/2 system[J]. Phys Rev Lett, 2014, 113:050402.
- [55] ROUSHAN P, NEILL C, CHEN Y, et al. Observation of topological transitions in interacting quantum circuits[J]. Nature, 2014, 515: 241-244.
- [56] YANG X C, ZHANG DW, XU P, et al. Simulating the dynamical quantum Hall effect with superconducting qubits [J]. Phys Rev A, 2015, 91: 022303.
- [57] LUO Z H, LEI C, LI J, et al. Experimental observation of topological transitions in multispin interacting systems [J]. Phys Rev A, 2016, 93: 052116.
- [58] BRIDGEMAN J C, FLAMMIA S T, POULIN D. Detecting topological order with ribbon operators[J]. Phys Rev B, 2016, 94: 205123.
- [59] KESKI-VAKKURIE, WEN X G. Ground state structure of hierarchical QH states on torus and modular transformation[J]. Int J Mod Phys B, 1993, 7: 4227.
- [60] WEN X G. Modular transformation and bosonic/fermionic topological orders in Abelian fractional quantum Hall states[EB/OL]. (2012-12-27) [2017-01-05]. <https://arxiv.org/abs/1212.5121>.
- [61] ZHANG Y, GROVER T, TURNER A, et al. Quasiparticle statistics and braiding from ground-state entanglement[J]. Phys Rev B, 2012, 85: 235151.
- [62] ZALETEL M P, MONG R S K, POLLMANN F. Topological characterization of fractional quantum Hall ground states from microscopic Hamiltonians[J]. Phys Rev Lett, 2013, 110: 236801.
- [63] BONDERSON P, SHTENDEL K, SLINGERLAND J K. Probing non-abelian statistics with quasiparticle interferometry[J]. Phys Rev Lett, 2006, 97: 016401.
- [64] CINCIO L, VIDAL G. Characterizing topological order by studying the ground states on an infinite cylinder [J]. Phys Rev Lett, 2013, 110: 067208.
- [65] MEI J W, WEN X G. Modular matrices from universal wave-function overlaps in Gutzwiller-projected parton wave functions[J]. Phys Rev B, 2015, 91: 125123.
- [66] MORIDI H, WEN X G. Universal wave-function overlap and universal topological data from generic gapped ground states [J]. Phys Rev Lett, 2015, 115:036802.
- [67] BARKESHLI M, BONDERSON P, CHENG M, et al. Symmetry, defects, and gauging of topological phases [EB/OL]. (2014-11-12) [2017-01-05]. <https://arxiv.org/abs/1410.4540v2>.
- [68] LUO Z H, LI J, LI Z K, et al. Experimental preparation of topologically ordered states via adiabatic evolution [EB/OL]. (2016-08-24) [2017-01-05]. <https://arxiv.org/abs/1608.06963v1>.
- [69] LUO Z H, LI J, LI Z K, et al. Identifying topological order by measuring the modular S and T matrices[EB/OL]. (2016-08-24) [2017-01-05]. <https://arxiv.org/abs/1608.06978v1>.

sp² 杂化三维碳材料构建研究进展

朱彦武,陶柱晨,倪堃

(中国科学院能量转换材料重点实验室,中国科学技术大学材料科学与工程系,能源材料化学协同创新中心,安徽合肥 230026)

摘要: sp² 杂化是碳碳成键的重要方式之一,利用其三重对称空间构型可以得到稳定的石墨结构和亚稳定的富勒烯、纳米碳管、石墨烯等碳纳米结构;未参与杂化的电子形成游离的 π 键,使得以上材料具有较好的电子导电性或其他独特的电学性质.因其优异的物理、化学、生物等特性,sp² 杂化碳材料,尤其是 sp² 杂化纳米碳材料引起了巨大关注,有望在电子、能源、生物医疗、制药、功能材料等领域得到广泛应用.在已经进行的众多研究中,经常需要把上述碳纳米材料进行组装、构建成三维材料,从而在更大的尺度和空间中体现纳米基元的优异特性.本文综述了基于 sp² 杂化的三维碳材料的最新进展,以构建方式和构建基元之间的相互作用为出发点进行相关评述.

关键词: 碳材料;纳米碳材料;sp² 杂化;三维碳材料;可控制备

中图分类号: O613.71 **文献标识码:** A **doi:** 10.3969/j.issn.0253-2778.2017.02.004

引用格式: 朱彦武,陶柱晨,倪堃. sp² 杂化三维碳材料构建研究进展[J]. 中国科学技术大学学报,2017,47(2): 129-141.

ZHU Yanwu, TAO Zhuchen, NI Kun. Research progress in construction of three-dimensional carbon materials based on sp² hybridization[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2017,47(2):129-141.

特
约
评
述

Research progress in construction of three-dimensional carbon materials based on sp² hybridization

ZHU Yanwu, TAO Zhuchen, NI Kun

(CAS Key Laboratory of Materials for Energy Conversion, Department of Materials Science and Engineering, Collaborative Innovation Center of Chemistry for Energy Materials, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: sp² hybridization is one of the most important forms of carbon-carbon bondings, and the threefold symmetry related to the bonding has led to the formation of stable graphite structure and meso-stable structures of fullerenes, carbon nanotubes and graphene. The electrons that are not involved in the hybridization form π bonds with good electric conductivity and other unique electronic properties especially in carbon nanostructures. With exotic physical, chemical and biological properties, sp² hybridized carbon nanomaterials have attracted great attention and are expected to be applied in the fields of electronics, energy, biomedical, pharmaceutical, functional materials, etc. In the present many studies, the above-

收稿日期: 2016-11-24; **修回日期:** 2016-12-20

基金项目: 国家自然科学基金(51322204)资助

作者简介: 朱彦武(通讯作者),教授,博士生导师,国家自然科学基金委优秀青年基金获得者,入选中组部第二批国家“青年千人计划”和教育部2012年度“新世纪优秀人才支持计划”.2000年在国防科学技术大学取得应用物理学学士学位,2003年在北京大学取得凝聚态物理硕士学位,2007年在新加坡国立大学取得物理学博士学位,期间获新加坡国立大学校长奖学金和中国教育部优秀自费留学生奖.自2006年8月起在新加坡国立大学纳米科学启动项目任博士后研究员,2008年5月起在美国德克萨斯大学奥斯丁分校进行博士后研究,2011年至今任中国科学技术大学教授、博士生导师.主要研究方向为新型碳材料的制备及其在能量存储中的应用,发表论文100余篇,共被引用15000余次.E-mail: zhuyanwu@ustc.edu.cn

