

阻挫磁体量子蒙特卡罗研究取得进展*

孟子杨[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2015-09-07 收到

[†] email: zymeng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20151005

不论从实验还是理论角度来看,阻挫磁体中可能存在的量子自旋液体都是凝聚态物理研究中的难点与突破点。这种由于量子涨落和磁阻挫的结合而在强关联的电子系统中涌现出的奇异物质形态^[1],自上世纪70年代诺贝尔奖得主 P. W. Anderson 提出以来^[2],反复出现在凝聚态物理研究的各个方向。它可能是最终理解高温超导机制的钥匙^[3],可能是拓扑量子计算的载体^[4],而且更有可能意味着现有的以对称性自发破缺为基础的凝聚态物理相变理论需要做重大的改写甚至重写^[5-7]。因此,对于阻挫磁体中可能存在的量子自旋液体的研究,具有重大的理论和实际意义。但是,由于阻挫磁体极其复杂,属于强关联的量子多体系统,展现出量子临界涨落、磁阻挫、基态拓扑简并、拓扑量子序和长程量子纠缠等效应,传统的以微扰论和平均场为出发点的解析方法已经难以提供定量甚至定性的结果。面对如此困难,以量子蒙特卡罗模拟为代表的无偏差或少偏差的数值方法,随着计算机性能的突飞猛进,在这些艰深的课题上体现出了力量,在模型的层面上已经确定地找到了一系列量子自旋液体^[8-11]。这些结果,有力地帮助人们扩展对于阻挫磁体和其中可能存在的量子自旋液体、量子自旋冰和团簇莫特绝缘体的认识。

量子自旋冰^[12, 13]是三维的量子自旋液体,而团簇莫特绝缘体^[14, 15]则是更广义的概念,它主要是指以团簇为电子绝缘单位的莫特绝缘体,电子在团簇内部仍然具有电荷巡游自由度,但同时由于不同格点之间的电荷库仑相互作用,电子在团簇内的运动在不同的团簇之间又具有微妙的关

联,一般把1/2晶格占据的玻色子团簇莫特绝缘体称作量子自旋冰。量子自旋冰是从经典自旋冰发展而来的概念,经典自旋冰主要存在于烧绿石(pyrochlore)晶格材料之中,比如 $Dy_2Ti_2O_7$ ^[16]和 $Ho_2Ti_2O_7$ ^[17, 18]。这些材料中的稀有金属元素存在于共顶角(corner sharing)的四面体顶点上。由于四面体的顶点之间的磁性相互作用引入几何阻挫,故而系统在极低温度下自旋构型只需要在每个四面体内满足“两进两出”的泡令冰规则(Pauling ice rule),这就造成了系统的基态具有指数形式的简并度,并且基态的熵密度是有限值。更有意思的是,经典自旋冰中由于几何阻挫的存在,系统中的磁激发可以用磁单极子的形式来描述,磁单极

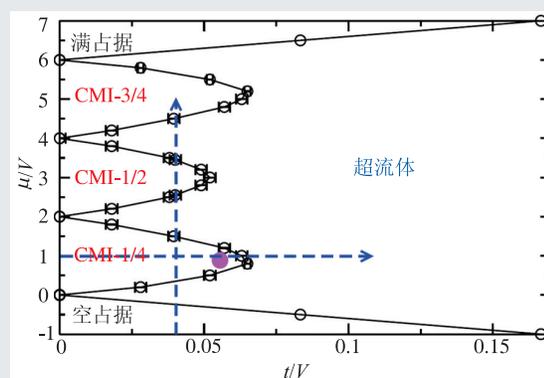


图1 量子蒙特卡罗计算中得到的硬壳玻色子在烧绿石晶格中的相图。横轴是玻色子的动能 t , V 代表玻色子之间的排斥相互作用;纵轴是系统的化学势 μ , 控制玻色子填充数。当玻色子的动能主导时(t/V 较大时),系统处于超流体的状态;当玻色子之间的相互作用主导时(t/V 较小时),在晶格的磁阻挫和量子涨落的结合作用下,系统涌现出三个团簇莫特绝缘体态,分别对应于玻色子1/4填充(CMI-1/4),1/2填充(CMI-1/2)和3/4填充(CMI-3/4)(CMI是cluster Mott insulator的缩写,中文译名为团簇莫特绝缘体)。一般把1/2玻色子占据的团簇莫特绝缘体称为量子自旋冰。另外,在化学势极大时,系统处于玻色子满填充,故其为满占据,而化学势极小时,系统没有玻色子填充,故其为空占据

* 第五批国家青年千人计划资助项目;国家自然科学基金(批准号:11147013, 11405003, 11275185)、国家重点基础研究发展计划(批准号:2011CB921300)资助项目

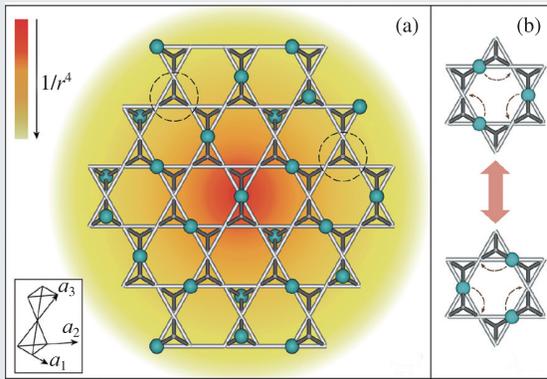


图2 (a)1/4玻色子填充的团簇莫特绝缘体示意图。晶格是三维烧绿石晶格的二维 kagome 平面投影, 每个四面体中有一个玻色子填充。当在系统中加入或者拿出一个玻色子后, 会造成两个分数化的激发, 如图中虚线圆圈所示。背景的颜色代表了团簇莫特绝缘体中的 $1/r^4$ 的电场关联函数(r 是玻色子之间的距离), 这是量子电动力学层展 $U(1)$ 规范场理论的预言, 被我们的量子蒙特卡罗计算所证实; (b)团簇莫特绝缘体中的无能隙“光子”激发示意图。由3个玻色子在 kagome 平面上的六边形中的集体运动构成, 这种激发是量子电动力学层展 $U(1)$ 规范场理论预言中的“光子”, 被我们的量子蒙特卡罗计算所证实(由中国科学院物理研究所理论室博士研究生许霄琰制图)

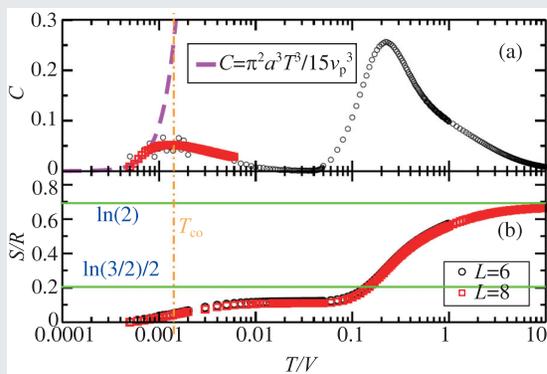


图3 1/4玻色子占据的团簇莫特绝缘体中比热(C)和熵(S/R , R 为理想气体常数)随温度的关系 (a)随着温度的降低, 比热经过两个转变(即两个鼓包), 分别发生在 $T/V \sim 1$ 和 $T/V \sim 0.001$ (V 是玻色子之间的相互作用), 对应于从顺磁态到经典自旋冰的转变($T/V \sim 1$ 处的鼓包)和从经典自旋冰到团簇莫特绝缘体的转变($T/V \sim 0.001$ 处的鼓包), 我们将这个温度定义为转变温度 T_{co} 。在团簇莫特绝缘体中, 可从图中的比热和温度的依赖关系式中估计出“光子”的“光速”。“光子”的出现是层展 $U(1)$ 规范场存在的直接证据; (b)在高温时, 系统展现顺磁态的熵 $S/R = \ln(2)$; 进入经典自旋冰的中间温度范围, 由于磁阻挫造成简并, 系统的熵处在一个平台, $S/R = \ln(3/2)/2$, 不随温度的降低而变化; 更低温时, 系统进入1/4玻色子占据的团簇莫特绝缘体, 量子涨落解除了系统的简并, 熵减小到零

子是分数化的激发, 正负磁单极子之间由没有张力的狄拉克(Dirac)弦连接^[7]。在经典自旋冰中加入量子自旋涨落, 从理论上讲就可能出现量子自旋冰^[11-13, 19], 或者团簇莫特绝缘体^[14]。在量子自旋冰和团簇莫特绝缘体中, 除了有分数化的磁单极子的激发和狄拉克弦之外, 还涌现出满足量子电动力学层展 $U(1)$ 规范场理论所描述的无能隙的低能“光子”激发^[19-22]。这样的物质形态不能用传统的以对称性自发破缺为基础的凝聚态相变理论来描述, 它们的存在对凝聚态理论提出了新的问题, 而且将量子电动力学层展规范场理论和凝聚态相变理论, 以及阻挫磁体的材料制备和物性测量, 进行了有益的结合。量子蒙特卡罗模拟可以为量子自旋冰和团簇莫特绝缘体系统的研究提供定量的数值结果。

最近, 中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)理论室 T03 组孟子杨副研究员, 与安徽师范大学吕建平副教授、复旦大学陈钢教授、中国科学技术大学邓友金教授组成的研究团队, 运用量子蒙特卡罗蠕虫算法, 使用天津国家超级计算中心“天河1号”超级计算机和其他计算平台, 通过大规模量子蒙特卡罗并行计算, 从理论上研究了三维阻挫磁体中可能存在的量子自旋冰和团簇莫特绝缘体^[23]。这项研究成果最近发表在 *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 115: 037202 上。

他们选取了三维阻挫磁体的硬壳玻色子模型, 世界上第一次完整地给出了硬壳玻色子在烧绿石晶格上, 以玻色子填充数和相互作用强度为轴的二维相空间中的相图。如图1所示, 他们发现了1/4, 1/2和3/4玻色子填充的团簇莫特绝缘体(图1中的 CMI-1/4, CMI-1/2和 CMI-3/4), 其中1/4玻色子填充的团簇莫特绝缘体的示意图如图2所示。他们通过计算证实了1/4, 1/2和3/4玻色子填充的团簇莫特绝缘体(其中1/2玻色子填充的团簇莫特绝缘体就是量子自旋冰)是具有量子电动力学层展 $U(1)$ 规范场特性的奇异物质形态; 而且, 世界上第一次通过比热和电场关联函数的综合测量, 直接观测到团簇莫特绝缘体中的层展量子电动力学 $U(1)$ 规范场, 给出了

$U(1)$ 规范场中的“光子”激发的具体参数(比如 $U(1)$ 规范场“光子”的“光速”), 如图3所示。另外, 图3中还完整地给出了随着温度从高到低, 系统如何从顺磁态转变进入经典自旋冰态和从经典自旋冰转变进入团簇莫特绝缘体态的过程。他们的计算结果为量子自旋冰和团簇莫特绝缘体理论的继续发展提供了很有意义的的数据。而且, 他们预计很多阻挫磁体材料都可能是团簇莫特绝缘体, 为接下来与中国科学院物理研究所和国内现有的材料合成、中子散射、RIXS 散射等实验团队进行合作, 填补国内在阻挫磁体(量子自旋液体、量子自旋冰、团簇莫特绝缘体)方面的空白, 尽快在世界发展前沿中占有一席之地奠定了基础。

致谢 该项研究工作得到了中国科学院物理研究所国际合作交流中心的有力配合, 天津国家超级计算中心“天河1号”计算平台帮助进行了大规模的并行计算, 在此一并表示感谢!

参考文献

- [1] Balents L. Nature, 2010, 464: 199
- [2] Anderson P W. Mater. Res. Bull., 1973 8: 153
- [3] Anderson P W. Science, 1987, 235: 1196
- [4] Kitaev A Y. Annals Phys., 2003, 303: 2
- [5] Wen X G. Int. J. Mod. Phys., 1990, B4: 239
- [6] Wen X G. Phys. Rev. B, 2002, 65: 165113
- [7] Wen X G. Quantum Field Theory of Many-body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons. Oxford: Oxford University Press, 2004
- [8] Isakov S V, Kim Y B, Paramakanti A. Phys. Rev. Lett., 2006 97: 207204
- [9] Isakov S V, Hastings M B, Melko R G. Nat. Phys., 2011, 7: 772
- [10] Isakov S V, Melko R G, Hastings M B. Science, 2012, 335: 193
- [11] Banerjee A, Isakov S V, Damle K *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 047208
- [12] Gingras M J P, McClarty P A. Rep. Prog. Phys., 2014, 77: 056501
- [13] Bramwell S T, Gingras M J P. Science, 2001, 294: 1495
- [14] Chen G, Kee H Y, Kim Y B. Phys. Rev. Lett., 2014, 113: 197202
- [15] Shekelton J P, Neilson J R, Soltan D G *et al.* Nature Materials, 2012, 11: 493
- [16] Ramirez A P, Hayashi A, Cava R J *et al.* Nature, 1999, 399: 333
- [17] Castelnovo C, Moessner R, Sondhi S L. Nature, 2008, 451: 42
- [18] Fennell T, Deen P P, Wildes A R *et al.* Science, 2009, 326: 415
- [19] Hermele M, Fisher M P A, Balents L. Phys. Rev. B, 2004, 69: 064404
- [20] Shannon N, Sikora O, Pollmann F *et al.* Phys. Rev. Lett., 2012, 108: 067204
- [21] Benton O, Sikora O, Shannon N. Phys. Rev. B, 2012, 86: 075154
- [22] Bergman D L, Fiete G A, Balents L. Phys. Rev. B, 2006, 73: 134402
- [23] Lv J P, Chen G, Deng Y J *et al.* Phys. Rev. Lett., 2015, 115: 037202

超低温真空探针台



- 无需制冷剂
- 直流, 微波, 光纤
- 4K-800K
- 可增加磁铁
- 多达8个探针臂
- 客户定制
- 模块化设计

实验室低温制冷系统



超低振动

样品在气体中

显微应用

可快速更换



**Advanced Research
Systems**

Email: ars@arscryo.com

www.arscryo.com