

量子相变中的对数修正被大规模量子蒙特卡罗模拟证实*

孟子杨[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2016-02-18收到

[†] email: zymeng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20160409

相变和临界现象在自然界中普遍存在,是既具有特异性又具有普适性的物理学行为^[1]。量子临界现象^[2]则是这其中普适性的神奇代表:一个由微观的量子哈密顿量所描述的体系,在临界点附近的行为(包括普适类、临界指数等)却可以完全被体系的宏观性质所决定(如体系和序参量的对称性与维度)。过去,在实验中观测量子相变十分困难,因为需要在临界点附近对温度和量子调控参数(比如磁场、压力)进行精细调节。因此,对于量子相变的研究长期集中在理论领域^[3]。近年来,在以 TiCuCl_3 为代表的二聚反铁磁体中,发现了可以通过磁场和压力精细调控的从二聚非磁态(Dimer-singlet)到奈尔反铁磁态(Néel antiferromagnet)的量子相变,并积累了大量的实验数据,有力地推动了量子相变理论和实验的结合,激发了凝聚态物理学界对于量子临界现象的浓厚兴趣^[4-8]。大家开始重新关注一些悬而未决的问题,这其中就包括量子相变中的对数修正问题。

对数修正问题,是指当系统处在连续相变的上临界维度时,系统的临界行为并不简单地由平均场的临界指数来决定,而是在平均场基础之上还需要考虑的以乘积形式出现的含有对数形式的修正项^[9, 10]。上临界维度处

的对数修正,在相变理论和重正化群理论发展的早期已经有过预测和讨论^[11-14],而且在经典相变中,人们也做过一些简略的数值尝试来寻找对数

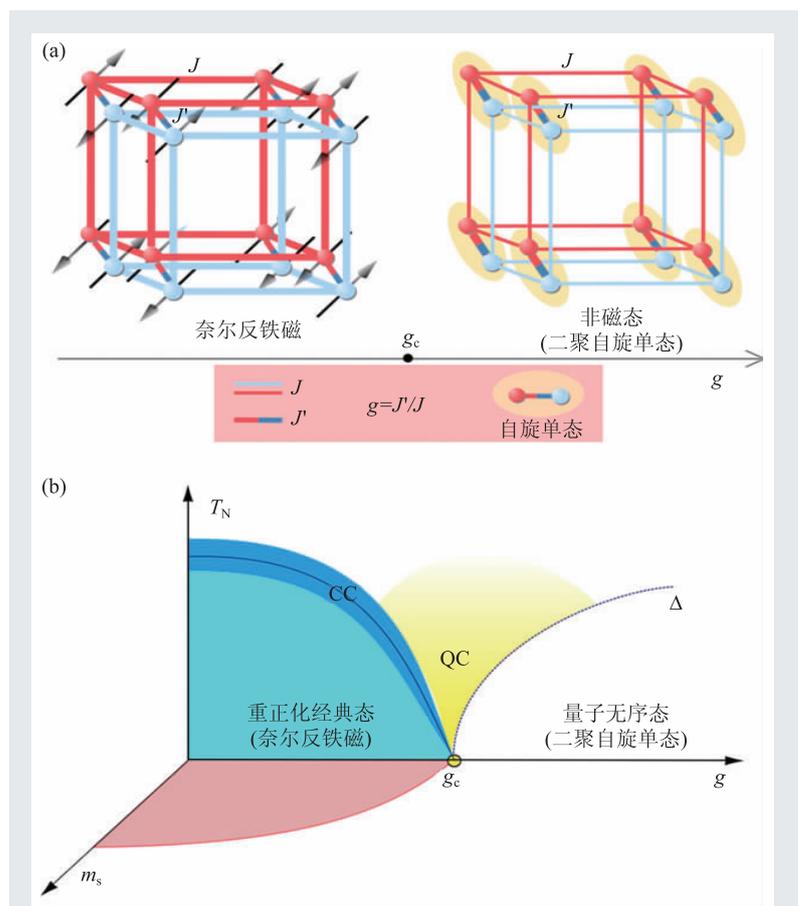


图1 (a)三维自旋1/2二聚反铁磁双立方晶格体系。立方晶格之内的反铁磁相互作用为 J ,立方之间的反铁磁相互作用为 J' , $g=J'/J$ 就是调控系统量子相变的参数。 $g < g_c$ 时系统为奈尔反铁磁, $g > g_c$ 时系统为二聚自旋单态。 $g = g_c$ 时是3+1维 $O(3)$ 量子临界点;(b)系统在反铁磁奈尔温度(T_N)、量子相变调节参数(g)、还有零温时的反铁磁序参量(m_s)三个维度构成的相空间中的相图。除了奈尔反铁磁和二聚自旋单态区域之外,还存在经典临界区(CC)和量子临界区(QC)

*第五批国家青年千人计划、国家自然科学基金(批准号: 11421092, 11574359)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2012CB921704)、中国科学院物理研究所国际合作交流中心、美国国家自然科学基金(批准号: DMR-1410126)、Simons基金会资助项目

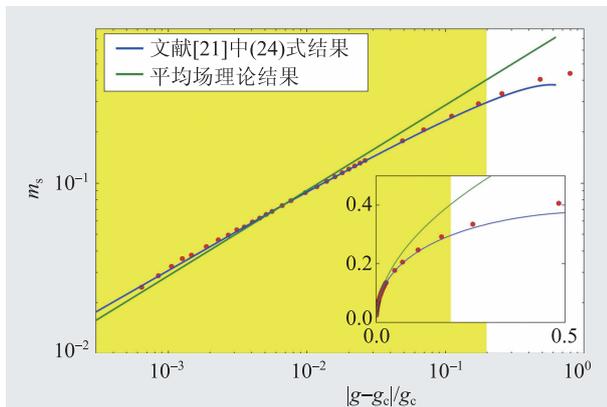


图2 反铁磁序参量(m_s)随着量子相变调控参数($g=J/J_c$),在 g 逐步逼近量子临界点 g_c 的过程中的演变。红色数据点为量子蒙特卡罗计算所得,绿线为3+1维平均场理论的结果,蓝线为考虑量子涨落而得到的对数修正后的理论预测(文献[21]中的(24)式)。数据点明显偏离平均场而符合对数修正的预言。这是量子相变中的对数修正第一次被明确地观测到

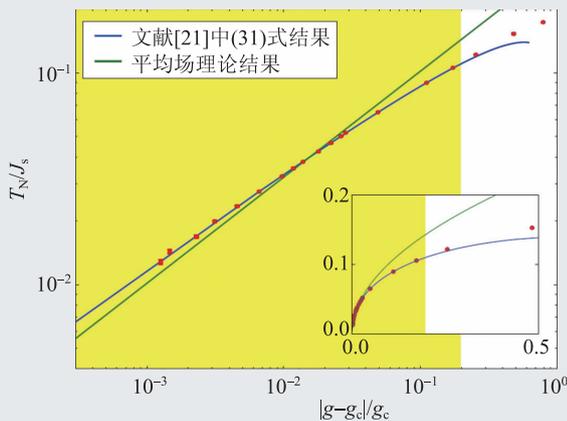


图3 反铁磁奈尔温度(T_N)随着量子相变调控参数($g=J/J_c$),在 g 逐步逼近量子临界点 g_c 的过程中的演变。红色数据点为量子蒙特卡罗计算所得,绿线为3+1维平均场理论的结果,蓝线为考虑量子涨落而得到的对数修正后的理论预测(文献[21]中的(31)式)。数据点明显偏离平均场而符合对数修正的预言。这是量子相变中的对数修正第一次被明确地观测到

修正^[15-17]。但是,在量子相变中的对数修正,到目前为止,还没有被观测到。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态国家实验室(筹)理论室T03组博士研究生秦彦齐、副研究员孟子杨,中国人民大学Bruce Normand教授和美国波士顿大学Anders W. Sandvik教授组成的研究团队,运用大规模的量子蒙特卡罗模拟计算^[18-20],在三维自旋1/2的二聚反铁磁双立方晶格体系中进行了系统的数值研究,对于量子临界行为中

一些实验观测依然困难但在理论上又十分重要的问题,给出了确定性的回答^[21]。这其中包括上临界维度处对于平均场结论的对数修正,量子临界区域中量子涨落和热致涨落的相互影响,以及量子临界区域和经典临界区域之间的比例关系。

如图1所示,三维自旋1/2的二聚反铁磁双立方晶格模型是对实验上已经细致地观察到量子临界行为的二聚反铁磁体 TiCuCl_3 的合理简化,两者都属于3+1维的 $O(3)$ 普适类,处在 $O(3)$ 反铁磁海森伯模型的上临界维度^[22],我们团队的量子蒙特卡罗计算证实了理论上预言但长期未被观测到的量子临界行为的对数修正^[21]。如前所述,对于上临界维度的量子临界行为,量子场论预言体系将在平均场的标度性质之上引入对数修正,这一修正是量子涨落和热涨落纠缠的体现。但是,对这一问题的定量研究十分困难,因为对数修正要求极端接近相变点,对误差十分敏感,需要严格控制误差,包括对于相变点的精确确定,以及物理量外推到热力学极限的精确外插。由于这些困难,之前的工作都没有能够提供量子相变对数修正存在的直接证据,导致对理论框架和相关常数的怀疑。为了观察到量子相变中的对数修正,我们进行了大规模的量子蒙特卡罗模拟(最大的系统尺度包含接近25万个相互作用的自旋)和高精度的有限尺度外插,以前所未有的精度—— 10^{-3} 量级——逼近量子临界点。这样的努力使得我们第一次明确看到了3+1维的 $O(3)$ 普适类中对于平均场临界行为的对数修正,并且首次验证了理论上对于对数修正形式的预言(如图2所示)。同时,我们还通过标度假设^[23]推导了奈尔温度和量子相变调控参数之间的关系,得出了奈尔温度的临界行为应当和序参数的临界行为有着相同的对数修正形式,并通过数值计算进行了验证(如图3所示)。这一结果说明,在整个量子相变区域,量子涨落和热致涨落对物理量有着相似的影响。

这一工作对于验证量子相变理论以及为二聚反铁磁体的实验提供定量的理论指导都有现实的意义。从量子蒙特卡罗模拟角度来看,也为在后

续的工作中如何分析数据、如何正确进行有限尺度到热力学极限的外插起到了范式作用。更为进一步定量研究量子磁体所蕴含的奇异临界现象，如量子自旋液体和自旋冰中的相变行为^[24]，以及进一步拓展我国现有的计算资源在大规模量子模拟方面的计算极限，积累了宝贵的经验。该工作以一篇19页的长文形式发表在 *Phys. Rev. B*, 2015, 92: 214401。

致谢 量子蒙特卡罗模拟所需的大规模的并行计算小部分在中国科学院物理研究所量子模拟科学中心的曙光平台上完成，大部分在天津国家超算中心天河1号平台上完成，计算过程中得到了天津国家超算中心的有力配合，在此感谢。

参考文献

- [1] 于淦,郝柏林,陈晓松. 边缘奇迹:相变和临界现象. 北京: 科学出版社,2005
- [2] Sachdev S. Quantum Phase Transitions. Cambridge University Press,2011
- [3] Sachdev S. Nat. Phys.,2008,4:173
- [4] Matsumoto M,Normand B,Rice T M *et al.* Phys. Rev. Lett.,2002,89:077203
- [5] Matsumoto M,Normand B,Rice T M *et al.* Phys. Rev. B,2004,69:054423
- [6] Rüegg Ch,Furrer A,Sheptyakov D *et al.* Phys. Rev. Lett.,2004,93:257201
- [7] Rüegg Ch,Normand B,Matsumoto M *et al.* Phys. Rev. Lett.,2008,100:205701
- [8] Merchant P,Normand B,Krämer K W *et al.* Nat. Phys.,2014,10:373
- [9] Kenna R. In: Order, Disorder and Criticality. edited by Holovatch Y. Singapore: World Scientific,2012. Vol. 3,Chap.1
- [10] Kenna R. Nucl. Phys. B,2004,691:292
- [11] Wegner F. Phys. Rev. B,1972,5:4529;1972,6:1891
- [12] Wegner F J,Riedel E K. Phys. Rev. B,1973,7:248
- [13] Brézin E,Guillou J C Le,Zinn-Justin J. In: Phase Transitions and Critical Phenomena. edited by Domb C, Green M S. New York:Academic,1976. Vol. 6,p.127
- [14] Aizenman M. Phys. Rev. Lett.,1981,47:1
- [15] Kenna R,Lang C B. Nucl. Phys. B,1993,393:461
- [16] Kenna R,Lang C B. Nucl. Phys. B,1994,411:340
- [17] Kenna R,Lang C B. Phys. Rev. E,1994,49:5012
- [18] Sandvik A W. Phys. Rev. B,1999,59:R14157
- [19] Evertz H G. Adv. Phys.,2003,52:1
- [20] Sandvik A W. Lectures on the Physics of Strongly Correlated Systems XIV: Fourteenth Training Course in the Physics of Strongly Correlated Systems. AIP Conf. Proc.,No. 1297(AIP,New York,2010)
- [21] Qin Y Q,Normand B,Sandvik A W *et al.* Phys. Rev. B,2015,92:214401
- [22] Zinn-Justin J. Quantum Field Theory and Critical Phenomena. Oxford University Press,2002
- [23] Fisher M P A,Weichman P B,Grinstein G *et al.* Phys. Rev. B,1989,40:546
- [24] 孟子杨. 物理,2015,44(10):671



微弱信号检测

半个世纪的骄傲

Model 7230
数字锁相放大器

仪器小巧
成本优胜



Model 5184
超低噪声前置放大器



生产商: 阿美特克商贸(上海)有限公司北京分公司
电话: 010-85262111-10 传真: 010-85262141-10
Email: info@ametek.cn
网址: www.signalrecovery.com.cn

中国代理商: 北京三尼阳光科技发展有限公司
电话: 010-65202180/81 传真: 010-65202182
Email: sales@sunnytek.net
网址: www.sunnytek.net