

西斯廷教堂中的对偶变换

孟子杨[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2017-09-24收到

[†] email: zymeng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20180205

题记

这篇文章已写成数月，期间不断有热心的朋友给出反馈，从历史描述的准确性(如米氏的年龄)到科学内容的通俗性(如对偶变换在凝聚态物理学中更多的例子)，都在提醒、督促着笔者进一步将这篇小文扩展、充实。私心里，我也觉得原来的故事讲得有些仓促，情节太浓，呈现得不够从容，也总想找机会再修改一次。无奈几个月来俗务缠身，几近淹没在日常的熙熙攘攘、为稻粱谋之中，没有时间和情绪，静下心来，自由地追求纯粹的知识。只能埋怨自己，在学问上眼高手低，在境界上修行不够，往往进退失据，陷于尴尬的境地。无法如诸多巨公通人，自如地游走在雅俗之间，两方皆为弄潮儿。

日前，这篇文章背后的数值计算科研论文，与另一篇相关的理论的工作，联袂在 *Physical Review X* 上发表^[1, 2]，这又让笔者开始思考这篇小文的修改，遂决意再花些功夫，在文字的排布、科学内容的呈现上，都做了改动，希望使它变得稍微容易接受。

细想来，对于科学的追求和对于艺术的追求，确有相似的地方。精妙的科学发现，亦是一件艺术品。人们似乎都可以理解，对于艺术的追究，需要艺术家付出身心的代价；而大家不见得知道的是，对科学的追究亦然。科学发现之于科学家，亦如艺术品之于艺术家，都是呕心的作品与其创造者之间的关系。对偶变换，作为凝聚态物理学家(理论、数值)，高能物理学家(理论、数值)，弦理论学家等等共同推动的新的物理学领域，乃正在酝酿的新的发现。量子场论模型之间不断发现的对偶变换关系，改变着人们对于什么是相，什么是相变，什么是相互作用下的拓扑物质形态等等基本问题的重新认识。这些深刻的内容，自然不是这篇小文所能够承载的。这里只是讲一个故事，笔者亲历其间的故事，与诸位分享一个具体的创造过程是如何发生的；从事创造的人是如何工作的。如果能在读者诸君中，激发一些兴趣，唤醒一些愿意付出代价的灵魂，吾愿足矣。

当米开朗基罗扭曲着身体，在西斯廷教堂中高高的脚手架上，仰首吃力地描绘着天顶画《创世纪》的时候，他是否知道，自己正在经历着一场对偶变换。身当壮年的艺术家，用了4年的时间，在穹庐下的脚手架上，仰面勾勒出他心中的世界和人类的起源，从上帝和先知，到亚当和夏娃，到诺亚和摩西……，一个个健美、饱满的人体是文艺复兴的巅峰之作，是人类崇高精神的理想体现，而创造出这些不朽精神的艺术家——那个西斯廷教堂中饱受折磨的英雄——却因为炼狱般的工作，因为只身与艺术创造规律搏斗的劳累，变得形如枯槁、身心憔悴。艺术家燃烧了自

己，为人类留下了不朽的作品。作为后来的看客们，我们很难体会米氏在经历着对偶变换时，所承受的煎熬；也许连他自己，在开始这项工作的时候，恐怕也不会料到他要经历的考验、所能承受的极限，和所创造出的人类精神。

真心从事创造者，其命运大抵如此，都是燃烧自己，对偶变换出呕心的作品。

大概三年之前，我们开始在凝聚态物理学强关联电子系统研究中，大力推动量子蒙特卡罗计算。这其中有两个看似不相关的方向，一是相互作用费米子系统

中的解禁闭量子临界行为。起初，我们没有意识到这两项研究工作的相通之处，也没有意识到这些研究工作将我们引领到了凝聚态物理学与高能物理学结合的新领域——对偶变换之网^[2, 3]；

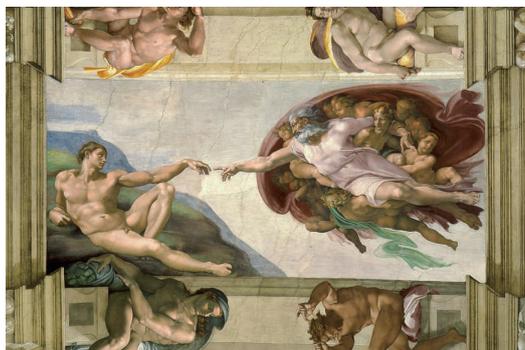


图1 西斯廷教堂天顶画局部:上帝创造亚当(来自Wikipedia)

更没有意识到，三年之间，我们自身所经历的对偶变换。

在物理学中，常常遇到这样的事情：同样的物理现象，需要从不同的角度、用不同的语言来描述，方能得到全局性认识。一个简单的例子，就是电子的波粒二相性。服从量子力学描述的电子，既有实空间中的粒子的性质，又有动量空间中波动的性质，而联系这两种不同描述的变换，是一种对偶变换。在电子波粒二相性这个简单的例子里，对偶变换就是从实空间到动量空间的傅里叶变换。

为什么需要对偶变换呢？好处不少，比如可以简化问题，尤其是凝聚态物理学中常常遇到的量子多体问题，求解十分困难，但是在一些特殊的例子里，强关联的量子多体问题可以通过对偶变换简化成为弱关联的问题，然后用微扰论解析求解。比如1+1维的强关联费米子系统，可以通过非局域的费米—玻色对偶变换，即所谓玻色化过程，转化成1+1维弱关联玻色子系统，

微扰求解得到系统的能谱、准粒子激发等等性质。对偶变换更有意义的地方，是让人们从不同的角度认识所面对的物理问题，得到更加深刻的理解。比如电子既有波又有粒子的性质；再比如著名的Kitaev模型中的拓扑相变，其拓扑序参量是非局域的弦序参量，这在问题的自旋的表象中看起来十分抽象。而在2007年，中国科学院物理研究所向涛研究员团队发现^[4]，其实可以通过对偶变换，把Kitaev模型对应到一个带有 Z_2 规范场的费米子模型，为问题提供了新的视角。从费米子的激发谱和局域序参量中可以更加形象地理解Kitaev模型中的各个拓扑相和相变。

这些现象简单明了，已经进入了凝聚态物理学的教科书和综述文章，成为公共的知识。而对偶变换这件事本身，在过去的几年中，在—批凝聚态物理学家、弦理论学家、数学家的共同努力下，得到极大的发展。人们逐渐认识到一些在凝聚态物理学和高能物理学中大家普遍关心的、困难的、看似不同的

物理问题(量子场论模型)，其实可以通过对偶变换彼此转化，使得原本困难的问题变得简单，原本复杂的问题变得易于理解，或者给出了新的理解。比如，原本人们对于量子霍尔效应系统中1/2-filling的朗道能级的无能隙激发没有很好的理解，对偶变换就可以将这个问题转换成无质量狄拉克半金属与量子电动力学规范场耦合的问题，揭示了狄拉克复合费米子问题的实质^[5]。

对偶变换在近几年的发展，掀起凝聚态物理学与高能物理学中的大波澜，改变着人们对于相变理论，对于相互作用下的拓扑物质形态，对于高能物理和凝聚态物理在强关联量子多体问题的计算技术的共通性，在规范场和物质场耦合的物理实质的共通性方面的认识，一张对偶变换之网正在形成^[3]。然而，对偶变换之网中的许多环节，依靠的是科学家们直觉上的预测，并没有严格的数值计算证明，整个领域迫切需要一个可以支持理论正确性的严格计算结果。而我们这几年来在凝聚态物理学强关联电子模型大规模量子蒙特卡罗计算方面，积累了足够经验和技巧，刚好处在可以通过大规模数值计算，为对偶变换之网提供支持性证据的位置。在最近的一个工作中^[1]，我们发现，团队之前研究的两类问题：相互作用费米子系统中的拓扑量子相变，与磁学系统中的解禁闭量子临界行为，恰恰构成了对偶变换之网中的一个重要环节，而我们在这个工作中的量子蒙特卡罗计算结果，给出了支持这个环节是正确的重要证据。

具体到研究的问题。其一是双层蜂窝晶格费米子模型，如图2左图所示。在这个模型中，通过大规模费米子行列式蒙特卡罗计算，我们发现了一个相互作用驱动的拓

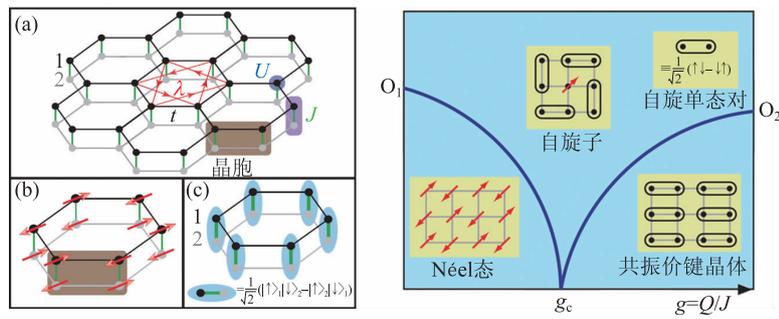


图2 左图：双层蜂窝晶格模型^[6]。(a)每层是一个量子自旋霍尔态，自旋陈数为1，两层自旋陈数为2， U 是库仑相互作用， J 是海森伯相互作用。 $U=0$ 时，系统具有 $SO(4)$ 对称性，系统处在玻色型对称性保护拓扑相，低能激发是四重简并的玻色型 $O(4)$ 矢量；(b)库仑排斥作用 U 增强时，系统进入反铁磁态， $SO(4)$ 对称性破缺；(c)海森伯相互作用 J 增强时，系统进入上下两层自旋单态构成的直积态。这是一个拓扑平凡的物态，但是从(a)到(c)的相变却不平凡，这个相变其实与量子电动力学(QED)中的 $N=2$ 狄拉克费米子的相变一致，更与解禁闭量子临界点对偶。右图：解禁闭量子临界点^[7]。Néel态(在这里是反铁磁AFM-XY态)自发破缺自旋旋转对称性，共振价键晶体态(valence bond crystal, VBC)自发破缺晶格对称性， $g=Q/J$ 是VBC相互作用和反铁磁相互作用的比例， g_c 是解禁闭量子临界点

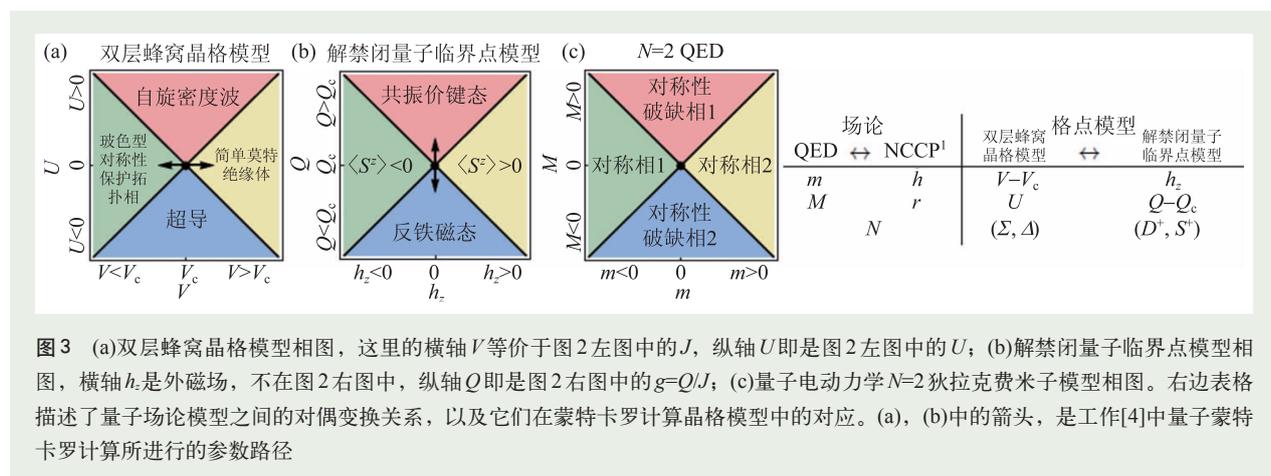
扑量子相变。在图2(a)中,双层的费米子系统处在自旋陈数为2的量子自旋霍尔态,引入层间海森伯相互作用 J ,费米型的边界态首先会变成玻色型,系统进入玻色型对称性保护拓扑相;继续增大 J ,两层上的电子形成局域的自旋单态,拓扑性质消失,系统变为自旋单态的直积态(图2(c))。运用费米子行列式蒙特卡罗计算,我们发现,在对称性保护的拓扑相与自旋单态的直积态之间,有一个连续相变,在相变点处,共有4种玻色型集体激发的能隙关闭,对应于系统所具有的 $SO(4)$ 对称性。量子场论告诉我们,这个相变其实和量子电动力学中的 $N=2$ 无质量狄拉克费米子系统中的相变一致,而对偶变换之网进一步预言,这个相变与下面要提到的解禁闭量子临界点,可以彼此转化。

我们研究的问题,其二是磁学系统中的解禁闭量子临界点,如图2右图所示。它描述反铁磁相互作用下长程反铁磁AFM-XY态(antiferromagnetic XY ordered phase)和四体自旋相互作用下的VBC态(valence bond crystal),在调节两种相互作用的比例时,发生了一个从AFM-XY态到VBC态的连续相变。这样的相变不是朗道对称性破缺理论框架所能够解释的,简单来说,

AFM-XY态自发破缺了自旋的旋转对称性(这里是 $O(2)$ 对称性),VBC态自发破缺了晶格中的平移和旋转对称性,这两个自发破缺相的序参量,如果在一个相变点处相遇,朗道理论告诉我们,一定是一个一级相变。但是,在我们所构造的量子磁学模型中,大规模的路径积分蒙特卡罗计算揭示了一个连续相变:AFM-XY序参量消失之处,正是VBC序参量萌芽之所。这个相变被称为解禁闭量子临界点,在相变点上,系统中涌现出 $SO(4)$ 对称性,涌现出分数化的自旋子(spinon)激发,还有传递自旋子相互作用的规范场。一如高能物理中,夸克在能量高时渐进自由解除禁闭,从强子分化出来。解禁闭量子临界点本身已经很新奇,现在,对偶变换进一步告诉人们,它和相互作用驱动的拓扑量子相变具有本质联系。

相互作用费米子拓扑相变点与磁性系统中的解禁闭量子临界点,这两个相变中的任意一个,都是凝聚态物理学中大家关心的问题。而对偶变换之网进一步预言,这两个相变,其低能场论模型其实是一致的^[2],这种关系在图3中展示。图3(a)为相互作用费米子拓扑相变模型相图,图3(b)为解禁闭量子临界点模型相图,图3(c)为 $N=2$ 的量子电

力学狄拉克费米子模型相图。3个相图中,相同颜色的区域可以对偶变换成为彼此,(a)–(c)3个相图中心的3个量子临界点,其实是同一个。我们在工作[1]中大规模量子蒙特卡罗计算的结果,就是证实了这件事。如此看来,对偶变换已经超越了相变理论中普适类的框架,即两个不同的相变点如果属于同一个普适类,要求其模型的对称性一致,但是我们研究的相互作用拓扑相变模型和解禁闭量子临界点模型,其在相变发生的路径上(图3(a),(b)中的箭头),对称性并不相同。而量子蒙特卡罗计算所揭示的,是它们的临界指数是一致的,比如,拓扑相变模型的奇异性维度临界指数为 $\eta=0.10\pm 0.01$,而解禁闭量子临界点的奇异性维度临界指数为 $\eta=0.13\pm 0.03$,在误差之内二者相等。两个模型的其他临界指数,如关联长度临界指数,也通过蒙特卡罗计算,发现符合对偶变换之网的预言。这说明确实是对偶变换,可能是超越普适类的相变理论的更加深刻的描述,两个或者多个看似不同的场论模型,只要符合对偶变换之网中的连接,其低能下的物理性质,其实是一样的。我们对于两个模型的蒙特卡罗计算、有限尺度标度数值分析,以及最终得到的对偶变换之



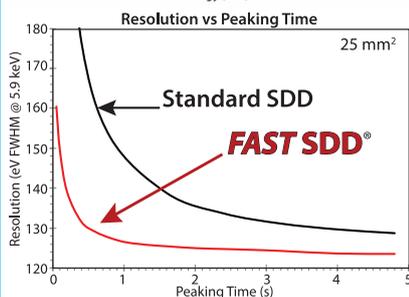
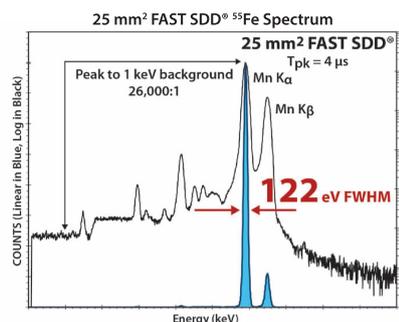
Ultra High Performance Silicon Drift Detector

FAST SDD®

Count Rate = >1,000,000 CPS

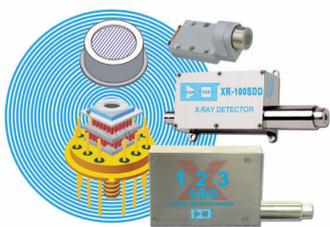
The True State-of-the-Art

- New in-house manufacturing
- Lower noise
- Lower leakage current
- Better charge collection



Options:

- 25 mm² active area collimated to 17 mm²
- 70 mm² collimated to 50 mm²
- Windows: Be (0.5 mil) 12.5 μm, or C Series (Si3N4)
- TO-8 package fits all Amptek configurations



Please see our web site for complete specifications and vacuum application



AMPTK Inc.
sales@amptek.com
www.amptek.com

网所预言的两个模型临界指数之间的数值关系，等等细节，可以参考文献[1]。

证实了相互作用费米子拓扑相变点与解禁闭量子临界点满足对偶变换关系，就证实了对偶变换之网的一个重要环节是正确的，这既让人们对于相互作用的拓扑相变点和解禁闭量子临界点有了更深刻的认识，更为对偶变换之网的进一步发展，比如拓扑序和量子自旋液体中可能存在的其他更加高级的对偶变换，给出了有力的支撑。这项工作^[1]，与同期的一篇相关的理论文章^[2]，在 *Phys. Rev. X* 上联袂发表。

这些结果，来之不易，笔者本人，也没有料到这些研究工作所需要的身心投入。三年以来，我们这个团队在北京、圣塔芭芭拉、波士顿之间穿梭，付出了极大的努力；量子蒙特卡罗计算所使用的方法（费米子行列式蒙特卡罗和玻色子路径积分蒙特卡罗）和动用的计算资源（国家超级计算中心天河1号），也体现了领域中少有的水平和规模，尤其是运用两种不同的量子蒙特卡罗计算方法，从不同的角度得出一致的结论，这样研究方法对于数值计算的技术水平和计算所使用的平台，都有一定的要求；探讨的物理问题，牵扯到了高能物理、凝聚态物理、量子场论等等广泛的领域。而我们每个参与者，在这三年中，也经历了各自人生中角色、境遇的起伏，其中甘苦，不足为外人道也。唯愿，能够拿出米开朗基罗在

西斯廷教堂中与《创世纪》搏斗时的毅力、魄力与定力，不在熙攘纷乱的世相中迷失，真心从事创造，对偶变换出新的科学知识、新的科学领域，不负先贤已经达到的高度。

致谢 笔者感谢团队成员，三年以来的合作者，加州大学圣塔芭芭拉分校许岑珂副教授，哈佛大学尤亦庄博士，对于这篇文章提出的中肯的修改意见。感谢团队中优秀的博士生秦彦齐（已经顺利博士毕业）、何院耀（正在全力以赴地开拓新的计算方法），感谢你们全身心、全天候的投入。还要感谢国家超级计算天津中心，孟祥飞博士、赵洋工程师、管晓东工程师等人对我们大规模蒙特卡罗计算所提供的资源、技术方面的有力支持。他们一方面帮助我们进行计算程序的MPI+OPENMP优化，使得更大晶格的计算变得可行；另一方面，在天河1号系统升级计算资源紧张的情况下，仍然帮助我们调配节点，使得总计600个计算节点、7200核的大规模并行蒙特卡罗计算得以顺利完成。几年来的经历，使笔者深感国内的超算平台，除了在浮点运算规模上领先世界之外，这些平台实质性地助力基础科学研究的时机已然到来。今后基础科学研究单位和国家超级计算中心更加精彩的合作，必将不断涌现。

参考文献

- [1] Qin Y Q, He Y Y, You Y Z *et al.* *Phys. Rev. X*, 2017, 7:031052
- [2] Wang C, Nahum A, Metlitski M A *et al.* *Phys. Rev. X*, 2017, 7:031051
- [3] Seiberg N, Senthil T, Wang C *et al.* *Annals of Physics*, 2016, 374:395
- [4] Feng X Y, Zhang G M, Xiang T. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98:087204
- [5] Son D T. *Phys. Rev. X*, 2015, 5:031027
- [6] He Y Y, Wu H Q, You Y Z *et al.* *Phys. Rev. B*, 2016, 93:195163
- [7] Singh R R P. *Physics*, 2010, 3:35