

## 二维量子磁晶体中的“幽灵软模”与KT物理\*

李伟<sup>1,†</sup> 孟子杨<sup>2</sup> 戚扬<sup>3</sup>

(1 北京航空航天大学物理学院 北京 100191)

(2 中国科学院物理研究所 北京 100190)

(3 复旦大学物理学系 上海 200438)

2020-02-28收到

† email: w.li@buaa.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20200607

通过大尺寸的量子多体热力学与动力学计算,来自北京航空航天大学、复旦大学、中国科学院物理研究所和香港大学的研究团队,成功“破译”了二维阻挫磁性晶体 $\text{TmMgGaO}_4$ (TMGO)的“材料基因”——三角晶格量子伊辛模型及其精确模型参数<sup>[1]</sup>。籍此,研究者预言指出,磁性晶体TMGO将在特定的温度范围内展现出Kosterlitz—Thouless(KT)相。此前人们在二维超流和超导中观察到KT相变,而此项理论工作首次在实际二维磁性晶体中预言了KT物理的存在。通过分析自旋谱发现了三角晶格反铁磁体中存在类似超流体中的旋子激发,并解释为条纹反铁磁序竞争失败后留下的“幽灵软模”,团队结合赝自旋映射阐明了TMGO磁性晶体中旋子的拓扑起源(图1)。

阻挫反铁磁晶体是一类非常有趣的关联量子材料,丰富的多体效应使得其中涌现出新奇的量子物态与相变,不断吸引着人们在其中探寻凝聚态物理的新范式。在阻挫反铁磁中,由于存在强关联效应和磁有序的激烈相互竞争,开展精确理论

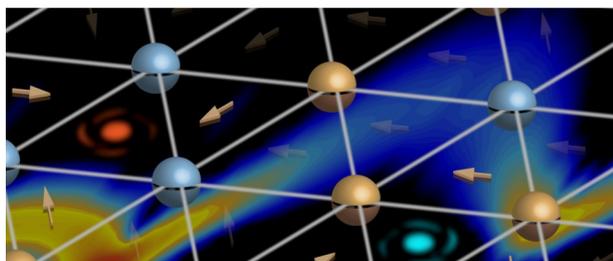


图1 磁性晶体TMGO中的自旋结构与磁振子—涡旋对激发

\* 科技部重点研发计划(批准号: 2016YFA0300502)、中科院先导专项(批准号: XDB28000000)、国家自然科学基金(批准号: 11421092, 11574359, 11674370, 11974036, 11874115, 11834014)、以及香港特别行政区研究资助局(批准号: 17303019)和北航卓越百人计划、北航青年拔尖人才支持计划等项目资助

计算并与实验对比仍然是亟待解决的前沿问题。在这项研究中,通过结合张量重正化群与量子蒙特卡罗方法等多体计算方法,开展了关联量子晶体材料的热力学—动力学的多体研究范式。揭示出反铁磁TMGO晶体的“材料基因”——量子伊辛微观模型及其精确模型参数,弥补了前期工作中的不足。如图2所示,通过指数张量重正化群计算,研究团队发现了一套正确的微观参数,可以在很宽的温度范围内完美地拟合实验观测<sup>[2, 3]</sup>的磁比热、熵曲线、磁化率、磁化曲线等诸多磁热力学性质。同时,采用这套参数进行的量子蒙特卡罗动力学计算与实验自旋谱<sup>[3]</sup>的直接比较也得到完全吻合的结果。因此,通过全方位、精确的关联量子材料模拟,确认TMGO晶体是一个研究多体涌现现象与物理的理想量子材料实验平台。

尤为引人入胜的是,磁性晶体TMGO实现的是一个形式简单但内涵十分丰富的阻挫三角晶格横场伊辛模型。而精确定出的参数使得TMGO晶体处于令人感兴趣的包含KT相的区间内(图3(b))。在这个参数区间内,TMGO存在一种特殊的反铁磁序,“钟态有序”(clock order, 图3(a)),被量子涨落所挑选出来成为基态,而另一个三角晶格反铁磁的有力竞争者“条纹序”(stripe order, 图3(c))在低温不被相互作用所选择。然而,条纹序虽然不能实现在零温稳定的“存活”,但可以在自旋谱的中段能量区间留下幽灵般的痕迹——它们被称为旋子,对应很大的态密度。这些幽灵在比较低的温度下( $\sim 1$  K)被大量激活,TMGO材料发生下临界KT相变,融化反铁磁序。随后系统进入一种类似二维超流态的奇特磁性“液体”状态,即著名的KT相。

超流体中的旋子激发是一个非常有趣的问题,自朗道的唯象理论提出后<sup>[4]</sup>,吸引了费曼、昂萨

格等诸多著名物理学家来建立旋子的微观量子理论。昂萨格指出旋子代表超流体中涡管的“幽灵” (The Ghost of a Vanished Vortex Ring)<sup>[5]</sup>；费曼认为旋子对应着量子化的涡旋运动，旋子激发极小点对应着液态结构因子的极大点<sup>[6]</sup>；较为近代的观点认为，超流体旋子激发是近邻固体序竞争导致的软模<sup>[7]</sup>，并在冷原子实验中被多次观察到。在TMGO固态材料研究中，如图4所示，自旋谱上清晰的看到，沿着 $K-\Gamma-M-\Gamma$ 线，在布里渊区的 $M$ 点附近存在一个平方色散的极小点，与超流旋子类似，称为自旋系统的旋子激发。全局来看， $M$ 点是一个鞍点，使得旋子具有很大的态密度，这些与条纹反铁磁序关系密切的残存“幽灵”粒子，随温度升高其能隙逐渐降低、软化(图4(d))。特别地，旋子在靠近上KT相变附近时急剧软化，但并不对应某种具体的对称性恢复，所以从这个意义上TMGO中的旋子确实是一种奇特的“幽灵软模”。

在KT相中，如图4(c)所示旋子和无能隙长波磁振子激发一道，沿着 $K-\Gamma-M$ 线，构成了类似于超流体的声子—旋子谱(著名的朗道能谱)。事实上，这些幽灵软模确实和旋转有关，通过赝自旋映射，研究发现鞍点附近的幽灵模式对应着涡旋—反涡旋对激发(图3(c))。在KT相中，系统演生出连续 $U(1)$ 对称性，对应一个复序参量(赝自旋)，并存在相位的(准)长程相干性(“超流序”)。在条纹反铁磁自旋织构的基础上，自旋的翻转激发会在赝自旋图像

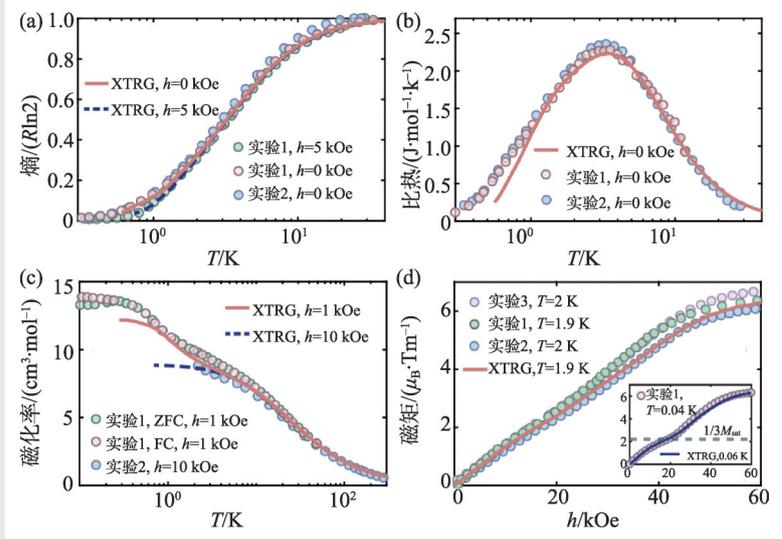


图2 热态张量网络多体计算精确拟合TMGO磁热力学测量数据(图中XTRG是exponential tensor renormalization group, 指数张量重整化群<sup>[8]</sup>)

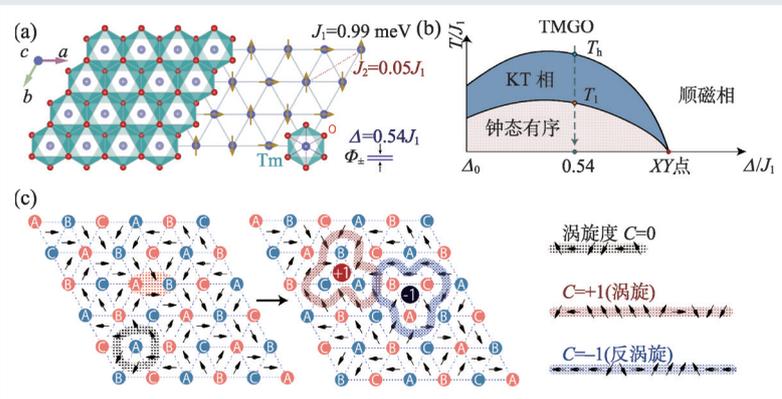


图3 (a) TMGO晶体结构及钟态有序示意图；(b)热力学相图；(c)条纹状有序、赝自旋映射、自旋翻转与涡旋对激发图像

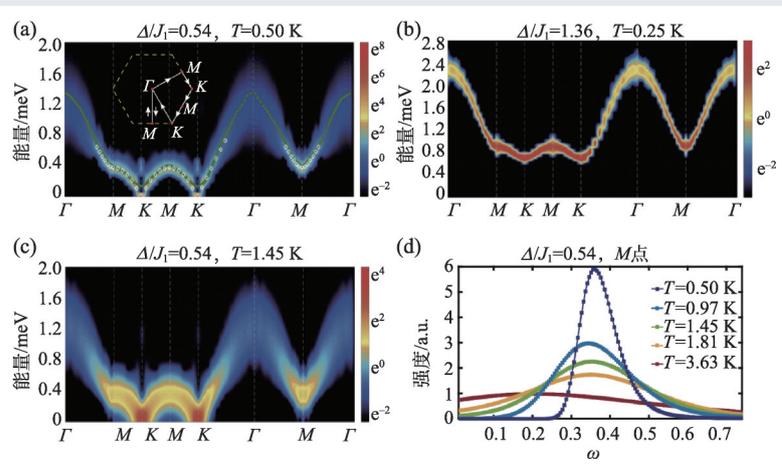


图4 二维自旋阻挫量子磁体TMGO的量子多体蒙特卡罗动力学谱学模拟结果 (a)、(c)和(d)运用了正确的微观模型参数；(b)为之前工作中不准确的参数结果，在本团队的研究工作中得到了纠正

**PARATERA 并行®**  
并/行/超/算/云 用/超/算/更/省/心

## 并行超算云

### 更省心的超算云服务平台

并行超算云是并行科技基于中国国家网络与云计算技术,结合自身在高性能计算领域多年研发经验推出的一站式超算服务平台。




#### 省时

对接全国超算中心资源, 30亿核时核时, 免去排队等待

#### 省钱

免去机建预算, 按需租赁  
成本节约50%以上



#### 省力

一键操作, 全图形可视化使用;  
200+应用软件SaaS服务, 零门槛, 易上手

#### 放心

2000+专属微信群, 提供7×24小时在线服务  
20+行业, 20000+用户正在使用



扫码添加工程师微信, 免费领取2000核时  
获取专属超算服务方案

www.paratera.com | 并行科技官方联系方式: 400-650-1286

上激发一对涡旋(图3(c))。当温度超过上KT相变温度时, 系统中的涡旋一反涡旋被拆散, 发生十分有趣的拓扑相变, 提供给系统破坏“超流序”的独特涡旋缺陷。随着涡旋等激发的数目激增, 系统从可以类比于超流的“液态”自旋KT相最终进入人们所熟悉的高温“气态”顺磁。

综上, 量子晶体TMGO提供了十分理想的实验平台, 供人们研究有着丰富多体物理涌现性质的三角横场伊辛模型。例如, 可以通过进一步测量热力学数据在实验上得到系统的一些普适反常标度指数; 通过动力学测量来探测二维磁性系统中的KT相, 以及其中无耗散等“超流特性”的对应磁学性质等。因此, 此项研究为进一步深入探讨二维量子磁性晶体TMGO提供了坚实的理论基础, 并做出了若干进一步的实验预言。此外, 对TMGO的研究同时也展示了综合平衡态与动力学多体计算开展精确研究关联量子晶体材料的新范式。

相关工作于2020年2月28日以“Kosterlitz-Thouless Melting of Magnetic Order in the Triangular Quantum Ising Material  $TmMgGaO_4$ ”为题在线发表于综合学术期刊《自然·通讯》(Nature Communications)<sup>[1]</sup>。

**致谢** 研究所进行的大规模并行计算, 在中国科学院物理研究所量子模拟科学中心、国家超级计算天津中心天河一号平台和天河三号原型机平台、国家超级计算广州中心天河二号平台上进行。研究团队特别感谢国家超级计算天津中心应用研发部孟祥飞部长、管晓东工程师, 国家超级计算广州中心应用推广部王栋部长、崔颖妍工程师等人的有力支持和配合。

#### 参考文献

- [1] Li H, Liao Y D, Chen B B *et al.* Nat. Commun., 2020, 11: 1111
- [2] Li Y, Bachus S, Deng H *et al.* Phys. Rev. X, 2020, 10: 011007
- [3] Shen Y, Liu C, Qin Y *et al.* Nat. Commun., 2019, 10: 4530
- [4] Landau L. Phys. Rev., 1949, 75: 884
- [5] Donnelly R J. The ghost of a vanished vortex ring, in Quantum Statistical Mechanics in the Natural Sciences: A Volume Dedicated to Lars Onsager on the Occasion of his Seventieth Birthday. edited by Mintz S L, Widmayer S M. US Springer, Boston, 1974. pp. 359—402
- [6] Feynman R P. Progress in Low Temperature Physics: Chapter II, Application of Quantum Mechanics to Liquid Helium. edited by Gorter C G, North Holland, 1955, Vol.1
- [7] Nozieres P. J. Low Temp. Phys., 2004, 137: 45
- [8] Chen B B, Chen L, Chen Z Y *et al.* Phys. Rev. X, 2018, 8: 031082