

量子多体中的呐喊与彷徨之五

南方的动力学平均场*

孟子杨[†]

2020-09-05 收到

[†] email: zymeng@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20200909

南方

有两年时间吧，我在美国南方密西西比河畔的一个大学城工作，每天看着河边水沟中晒太阳的小鳄鱼，看着种植园般的小区边、学校里爬满藤蔓的大橡树。日子慢悠悠地过去，就连作为美国主要水路的密西西比河，到了就要进入墨西哥湾的下游，白天里也只是零零星星开过几艘货船。这里夏天闷热潮湿，冬天暖风和煦，此处的 African American 兄弟们，虽然也人高马大、身材健硕，却慢悠悠地待人和善，说话带着温和的南方口音，不像他们在北方大城市的同胞那种 hood 里带出来的强横。这里的风物完全满足了我之前从书本中看到的美国南方那种已经逝去的生活方式，那种乡愁的想象，就是威廉·福克纳、田纳西·威廉姆斯所营造的世界，种植园、沼泽地、爵士乐、潮湿、神秘、善良却多少有些神经质的人们。

就是在这样的地方，美则美矣，慢则慢矣，但是却时时感到孤独。我一边思考着如何把团簇动力学平均场哈伯德模型(Hubbard model)计算从正方晶格扩展到三角晶格，用大规模计算的方法研究纯粹的金属—绝缘体临界莫特相变；一边品味着远离自己文化的孤独，毕竟连中文书都很少见到，在完全陌生的环境中看着生命一天天平静地过

去。真好像诗中说的：

看样子是就这样下去了
平地里什么乐子也没有
除非在街上吃碗馄饨

有时，人生真不如一行波德莱尔
有时，波德莱尔真不如一碗馄饨
——摘自木心《小镇上的艺术家》

这里是连馄饨都没得吃的。有一天实在穷极无聊，我在等待蒙特卡洛计算结果的间隙跑到大学图书馆里盘桓，竟然在某个无人问津落满尘土的书架上看到了中华书局20世纪70年代出版的竖排二十四史中的《宋书》、《南齐书》、《梁书》和《陈书》。谁能想到，在这样偏远的美国南方，一个和中国文化没有任何交集的地方，竟然有人大发善心地为图书馆买来了如此硬核的中国文化。不是什么《史记》、《汉书》这样通行的经典，而是颇为小众的宋齐梁陈，南朝烟雨。这让已经被美国南方的暖风熏到精神迟钝的我足足傻站在书架前有一分多钟，大脑中的逻辑程序怎么都调不通，不能理解当时这些硬核出版物是怎么远涉重洋来到世界的这个角落的。一分钟后回过神来，先定睛看看落地窗外的大橡树，它还在那里，遂确定没有发生时空错乱，然后也不管这些绿皮、硬壳、竖排的史书是怎么流落到此地的，一把抱起它们借出来带回家据为己有，生怕有人和我抢似的。其实我可能是几十年来第一次借这些书的人。

从此之后好一段时间，我的思维就被分散在三角晶格 Hubbard model 的金属—绝缘体相变和宋齐梁陈的生死倏忽与朝代更迭之中。随着工作和阅读的深入，我发现虽然结果都在向着好的方向前进，但不断地思考和体会的同时，我的心情从最初的欣喜慢慢变得沉重起来，影响直到今天。

动力学平均场

先说三角晶格中的莫特转变吧，这是强关联系统中一个公认的难题。三角晶格 Hubbard model 在相互作用弱的时候有一个接近圆形的费米面，没有如正方晶格中半满时候的反铁磁(π, π) 嵌套(nesting)波矢的不稳定性，是一个理想的费米液体；而在相互作用十分强的时候，因为电子电荷自由度被冻结，Hubbard model 退化为三角晶格上的反铁磁海森伯模型，而这个模型的基态为非共线的 120° 长程序反铁磁绝缘体。那么一个显而易见的问题就是，随着 Hubbard U 的增加，费米液体金属是怎么过渡到反铁磁长程序绝缘体的？

这个看似简单的问题其实到现在还没有公认的结果。解析计算对于这样的量子多体问题，目前看起来只能理解弱相互作用时的费米液体金属和强相互作用的反铁磁绝缘体。数值计算的量子蒙特卡洛面临符号问题，无法得到热力学极限的结果。在当时流行的数值计算方法

* 原文于2020年8月24日在“返朴”微信公众号推送，本文刊登时有所删减。

中，还有一种叫团簇动力学平均场，是运用量子蒙特卡洛求解器首先严格求解一个小的团簇，比如4、8、16这样的格点数，然后再将如此求得的自能和格林函数用自洽方程的方式，与热力学极限下的环境做迭代计算——将团簇上电子多体相互作用的效果传递给环境，将环境无穷大的晶格信息反馈给团簇——如此迭代以至于收敛，在自能和格林函数的戴森方程的层次上可以得到系统的一个近似的解，并且在形式上克服蒙特卡洛晶格计算的指数墙问题。这个方法，在当时看来是一个比较可行的办法。其实我之所以来到这所南方的大学，就是想掌握这样一种研究量子多体系统的计算方法，并用它求解三角晶格 Hubbard model 金属—绝缘体莫特相变。

我们的计算结果如图1所示，其实已经可以相当清楚地看到相互作用是如何改变系统的能带结构。在图1(c)中画出了布里渊区中高对称线上的单粒子能谱，也许是那个时候看古书的缘故，我们特意把结果画成了中国画立轴的样子。随着 U 的增大，可以看到无相互作用的能带，是如何一步步展宽，谱权重是如何从紧贴着色散关系(就是我们在之前的文章中讲到的准粒子寿命无穷长)到弥散到很大的频率范围的。同时，就在 $U \sim 9t$ 的地方，也是相互作用和费米子的带宽相似的地方，原本的一条能带被撕裂成两片分开的谱。金属到绝缘体的相变就发生在此处，费米面上再无准粒子，系统进入绝缘相。这样的结果也呼应我们在之前的文章中提到的^[1]，相互作用的电子系统，费米面的变化可以不再遵循拉廷格(Luttinger)定理，在图1(c)的整个变化过程中，系统的电子填充数并没有发生改

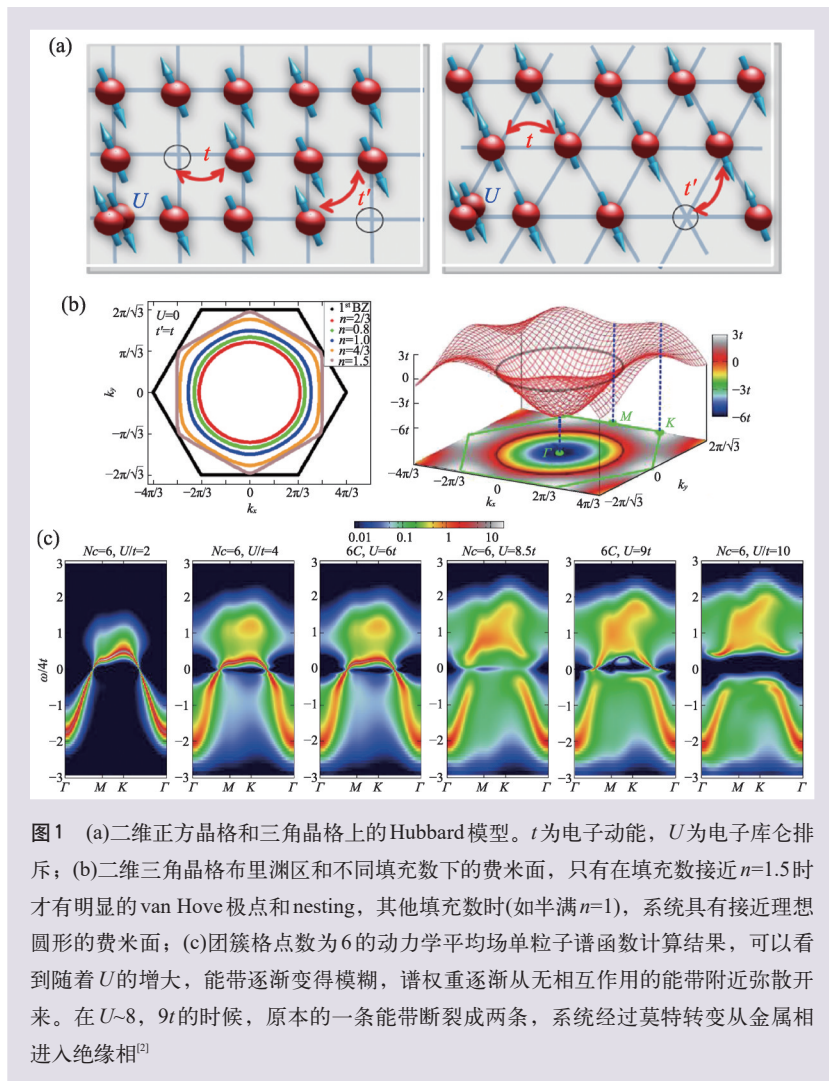


图1 (a)二维正方晶格和三角晶格上的Hubbard模型。 t 为电子动能， U 为电子库仑排斥；(b)二维三角晶格布里渊区和不同填充数下的费米面，只有在填充数接近 $n=1.5$ 时才有明显的van Hove极点和nesting，其他填充数时(如半满 $n=1$)，系统具有接近理想圆形的费米面；(c)团簇格点数为6的动力学平均场单粒子谱函数计算结果，可以看到随着 U 的增大，能带逐渐变得模糊，谱权重逐渐从无相互作用的能带附近弥散开来。在 $U \sim 8, 9t$ 的时候，原本的一条能带断裂成两条，系统经过莫特转变从金属相进入绝缘相^[2]

变，而费米面却硬生生地消失了。

但是团簇动力学平均场计算本身有一个很大的问题，那就是说到底，严格的计算只是在一个量子少体的团簇上进行，而与环境迭代的效果，使得整个计算，也就是最后收敛的自能和格林函数，实质上倾向平均场结果。如果是研究相变左右两个相各自的性质，比如费米面上准粒子权重或者对称性破缺相中序参量的局部结构，也许还是可以给出定性正确的结果；但是如果想要研究相变本身的性质，比如临界行为、涌现分数化激发和拓扑序规范场等等真正抓住问题物理实质的现象，由于计算方法本身并没有严

格处理量子多体系统的配分函数，即不尊重相变点标度不变性也不尊重其共型不变性，团簇动力学平均场其实是无能为力的。

也正是在通过切身的研究意识到这些本质性缺陷之后，我才开始转而投入到发展能够通过量子蒙特卡洛严格的求解晶格模型和算法设计的大潮之中，摒弃通过近似方法研究量子多体相变物理实质的念头，路越走越宽，此处先按下不表。

当然，将近10年过去了，三角晶格 Hubbard model 的莫特转变仍然是一个未解问题。最近有DMRG计算指出其实在费米液体金属和反铁磁莫特绝缘体之间还存在一个手征

量子自旋液体(chiral quantum spin liquid)^[3], 事实上如此的中间相一直是一种可能性, 只是 DMRG 的计算其实也是变分计算, 且只关注基态, 不能回答费米面是如何变化的, 这方面还是有待方法上的突破。另外, 我的朋友, 北京航空航天大学大学的李伟及其小组, 一直在开发热张量网络的计算方法, 可以计算量子多体系统的比热和磁化率等重要物理性质随着温度的变化, 目前已经在三角晶格反铁磁 Heisenberg 模型的比热计算中得到结果^[4], 而费米子 Hubbard model 在正方晶格上也进行了初步的尝试^[5], 从这个方面研究三角晶格 Hubbard model 的相图, 也就是说在有限温度时, 通过计算系统在不同 U/t 时的热力学性质随着温度的依赖关系推断出其不同的基态, 将会是一个有意义的方向。

古代

好的, 三角晶格的莫特转变的问题让我一步步看到了看似强大的团簇动力学平均场方法其实也有着

很大的局限性, 从而转求其他更加本质的研究方法。而那些在图书馆中偶遇的《宋书》、《南齐书》、《梁书》和《陈书》, 却更把我带到了深深的忧虑之中。

事情是这样的, 在古代, 即使偏安一隅的孱弱南方小朝廷, 在介绍某人时, 也经常看到如下重复性的表达:

“某某, …, 出为使持节、散骑常侍、骠骑将军、开府仪同三司、都督江州诸军事、江州刺史…”, “某某, …, 使持节, 转护军将军, 加散骑常侍, 领石头戍事, 封某某县公, 食邑二千户…”, “某某, …, 诏加班剑二十人, 开府仪同三司, 征北将军, 并加督青州及徐州五郡军事…”。

这些官名都很长, 乍一看好像都很重要, 但要说具体是干什么的, 又都说不清楚。这些自古以来的种种让人眼花缭乱的官名, 其实就是今天一样让人眼花缭乱的种种“帽子”。

众所周知, 目前我们科研领域的人才选拔和资源分配制度, 实际上就是由一个又一个的帽子构成的。30 岁左右的人心里想着四青五青, 40 岁左右的人心里想着杰青长江, 如果运气好还能坚持, 那么还有种种国家奖项。如是的是体制和文化, 使得科研资源的分配和各种奖项与人才计划紧密相关, 能否获奖和获得项目直接关系到科研人员及单位的切身利益。笔者认为, 如果可以少一

些名目繁多的人才计划和奖励, 摆脱过多的量化排名和评估, 让科研环境多一些清爽与安宁, 也许会孕育出更多真正有影响力的原创性成果。

在科研人员本身, 这么多的帽子其实极大地混淆了从业人员在工作本身上的注意力。人的精力有限, 科研工作往往又需要长时间专注地思考, 每年从写申请各种项目的本子到开始参与竞争, 个中过程种种, 太多太频繁的种种干扰打断思考, 对科研和科研人员不言自明的困扰, 一定程度上影响了科研领域的生态及发展。长期的持续外力, 更大可能是让大家变得失去自我, 失去了对于探索自然本身的兴趣。如果没有这么多帽子, 或者在评审的过程中不需要本人或者单位申请, 本人根本不知道参与评审这样的事情, 那会减少多少不必要的烦恼啊。

希望这样的现实能够尽快改观, 希望一个宽容、真正鼓励深入思考的环境能够到来。

回到南方

行文至此, 基本内容都讲完。从科学上和情感上, 还有两件后续的小事需要交代一下。一是上文说到团簇动力学平均场仍然不是严格的办法, 因此三角晶格 Hubbard model 中超越 Luttinger 定理的莫特转变, 严格说起来我们还没有看到。那么到底有没有超越 Luttinger 定理, 即费米子的填充数和费米面在布里渊区所占比例不相等的严格结果呢? 其实是有的, 答案很简单, 就是把我们在上一篇文章中(量子多体中的呐喊与彷徨之四^[1])讲到的正交金属相进行掺杂, 然后调节掺杂后的正交金属到费米液体的相变。通过设计晶格模型和进行严格的量子蒙特卡洛计算, 我们看到如

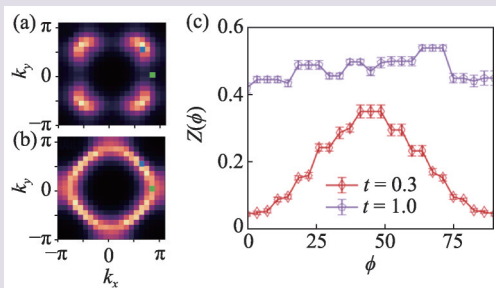


图2 (a)掺杂正交金属中实现了费米弧态。在节点(nodal) (π, π) 方向上有准粒子权重, 而在反节点(antinodal) $(\pi, 0)$ 方向上没有权重, 费米面断裂, 不满足 Luttinger 定理; (b)增大了复合费米子的动能, 将费米弧态调节到了费米液体后的费米面, 费米面完整, 满足 Luttinger 定理; (c)准粒子权重从 antinodal 方向到 nodal 方向, 随着角度变化行为。在费米弧态中, 准粒子只出现在 nodal (π, π) 方向; 而在费米液体中, 在闭合的费米面上都有准粒子^[6]

图2(a)所示, 掺杂的正交金属终于显示出了与铜基超导体在赝能隙区域中类似的费米面形状, 即不闭合的费米弧(Fermi arc), 并且从图2(a)的费米弧到图2(b)的费米液体相变过程中, 系统的电子填充数没有发生改变。显然, 费米弧态超越了Luttinger定理, 感兴趣的读者可以深入阅读文献[6]。也正是这样的结果, 使我觉得通过晶格模型设计和严格的数值计算, 辅之以抓出问题物理实质的场论分析, 这样的道路会越来越宽。

第二是让我们再回到本文开头的那个美国南方小城。虽说在文化上我在那里体会到了孤独的滋味, 但是在实际的科研工作和日常生活上, 还是受到了诸多师长和朋友真诚的照顾。尽管离开之后还没有回去过, 但是夜阑人静时那种慢悠悠平静而略带忧郁的南方风物总是从心里冒出来, 时时想起夏日里从墨西哥湾上吹来的燥热的风和冬日的暖阳, 想起沼泽地、密西西比河、Jambalaya 和 Cajun food。

最近一段时间, 那里好几位曾经对我有过帮助的师长都去世了,

包括去年的 Mark Jarrell (动量空间团簇动力学平均场的发明人)和今年的 Ward Plummer 老先生, 关于后者中国科学院物理研究所的郭建东研究员刚刚写了一篇至情的怀念文章^[7]。Mark、Ward 还有张坚地等等师长构成了我对于那片迷人土地的记忆, 受到的教导、扶持和关怀是不能忘怀的。郭建东老师的文字有几句与本文也有契合之处, 他提到: “Ward 一直把他有的最好的资源都倾注给了身边的年轻人, 他最引以为自豪的就是他培养学生和学者的成就”, Ward 自己也讲到:

My legacy will be the minds I molded; not the papers I wrote or the prizes I won.

——Ward Plummer

诚哉斯言, 伤哉斯人。学者的贡献在于发扬真理, 脱心志于俗谛之桎梏, 在于铸造后起的头脑, 不在于自己头上有多少帽子。这也许就是那片平静而略带忧郁的土地, 教给我的深沉的、困难的、但是仍要勉力追求下去的人生课题吧。

参考文献

- [1] 孟子杨. 量子多体中的呐喊与彷徨之四: 历史的终结与最后的人. 物理, 2020, 49(7):481
- [2] Chen K S, Meng Z Y, Yu U J *et al.* Unconventional superconductivity on the triangular lattice Hubbard model. Phys. Rev. B, 2013, 88:041103(R)
- [3] Szasz A, Motruk J, Zaletel M P *et al.* Chiral spin liquid phase of the triangular lattice hubbard model; a density matrix renormalization group study. Phys. Rev. X, 2020, 10:021042
- [4] Chen L, Qu D W, Li H *et al.* Two-temperature scales in the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. B, 2019, 99:140404(R)
- [5] Chen B B, Chen C, Chen Z Y *et al.* Quantum many-body simulations of the 2D Fermi-Hubbard model in ultracold optical lattices. arXiv:2008.02179
- [6] Chen C, Yuan T, Qi Y *et al.* Doped orthogonal metals become Fermi arcs. arXiv:2007.05543
- [7] 传奇还将继续——怀念一代宗师 Ward Plummer. 郭建东, <https://mp.weixin.qq.com/s/Vwfyh1snSzqE5n-Uuk-4Fg>. 2020.8.3

读者和编者

订阅《物理》得好礼

——超值回馈《岁月留痕——<物理>四十年集萃》

部特推出优惠订阅活动: 向编辑部连续订阅2年《物理》杂志, 将获赠《岁月留痕——<物理>四十年集萃》一本。该书收录了1972年到2012年《物理》发表的40篇文章, 476页精美印刷, 定价68元, 值得收藏。

希望读者们爱上《物理》!

为答谢广大读者长期以来的关爱和支持, 《物理》编辑

订阅方式(编辑部直接订阅优惠价180元/年)

(1) 邮局汇款

收款人地址: 北京市中关村南三街8号中科院物理所, 100190

收款人姓名: 《物理》编辑部

(2) 银行汇款

开户行: 农行北京科院南路支行

户名: 中国科学院物理研究所

帐号: 11 250 1010 4000 5699

(请注明《物理》编辑部)

咨询电话: 010-82649029; 82649277

Email: physics@iphy.ac.cn