

# 浅谈计算凝聚态物理

孟敬尧<sup>1</sup> 马天星<sup>1</sup> 林海青<sup>2,3,1,†</sup>

(1 北京师范大学物理学系 北京 100875)

(2 浙江大学物理学院 杭州 310027)

(3 北京计算科学研究中心 北京 100193)

2022-08-22 收到

† email: haiqing0@csrc.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20220902

## Computational condensed matter physics: a brief introduction

MENG Jing-Yao<sup>1</sup> MA Tian-Xing<sup>1</sup> LIN Hai-Qing<sup>2,3,1,†</sup>

(1 Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

(2 School of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

(3 Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100193, China)

**摘要** 计算物理以计算机为工具,以计算方法和计算软件为手段,近年来发展迅速,在研究物质结构及物理规律方面成功解决了大量传统物理难以解决的难题,已经成为研究自然的理论—计算—实验鼎力三足。文章简要介绍了计算物理的起源和发展,重点关注了计算物理在凝聚态物理方面的应用,介绍了包括精确对角化、数值重正化群、蒙特卡罗、动力学平均场等方法,并阐述了各个方法的特点。在探究新奇物理现象、发展计算方法两方面,讨论了计算凝聚态物理的未来发展方向。

**关键词** 密度泛函理论, 精确对角化, 重正化群, 蒙特卡罗, 动力学平均场

**Abstract** Using the computer, combined with numerical methods and software, a field named computational physics has developed rapidly in recent years. In this field, scientists have successfully solved a large number of difficult problems in traditional physics regarding materials design and physical principles, establishing a bridge between theory and experiment. We briefly review the history and development of computational physics from its beginning, then focus on its applications in condensed matter physics. Numerical methods based on exact diagonalization, the numerical renormalization group, Monte Carlo simulation, dynamic mean field theory, etc., are briefly described. The future of computational condensed matter physics is also discussed in terms of exploring novel physical phenomena and developing computational methods.

**Keywords** density functional theory, exact diagonalization, renormalization group, Monte Carlo, dynamical mean-field

## 1 引言

作为过去20年间发展最为迅速的领域之一,计算物理以计算机为工具,以计算方法和计算机软件为手段,研究和发现物质结构及其运动规律,在物理学的各个分支学科发挥了重要的作用,已成为与实验物理和理论物理同等重要并可持续发展的二级学科。最初,物理学家运用早期的计算机研究由相互作用的单个分子组成的物质的状态方程<sup>[1]</sup>和非线性动力学问题<sup>[2]</sup>,计算物理学应运而生。20世纪50年代,以蒙特卡罗方法为代表的数值模拟,解决了大量统计物理和与之相关的问题。70年代中期,Wilson提出了数值重正化群方法<sup>[3]</sup>,解决了物理学中的近藤问题<sup>[4]</sup>。与此同时,密度泛函理论也有了快速的发展,它广泛用于研究各类材料中的电子结构,解释了实验测量的结果,还成功地预测了一些材料的基本特性。发展至今,计算物理研究的范围不断拓展,从基本物理现象扩展到材料科学、化学、信息、生命等领域,已成为解决传统物理研究范式难以解决的难题、减少实验成本甚至替代实验、揭示新的物理规律和效应的必要手段。

凝聚态系统是一个由大量电子和原子核形成的相互作用的量子系统,凝聚态物理是过去40年来物理学研究中发展最快的学科领域之一。通过建模的持续改进和发展高性能计算,计算物理搭建了理论与实验、微观与宏观的桥梁,为凝聚态领域提供了崭新而有效的科学研究方法。计算凝聚态物理针对以固体材料为主的凝聚态系统,研究组成材料原子的空间结构,原子与电子电荷、自旋和轨道自由度的耦合,以及由此涌现出的各种量子态,并发展相应的计算方法。从量子力学出发,计算凝聚态物理在原子层级上设计和确定具有不同功能、结构和组分材料体系,对材料的电子能带结构及其与晶格的相互作用进行计算研究,随之确定材料的基本特性。在此基础上,研究多电子相互作用系统中出现的强关联问题,寻找不同竞争因素所导致的各种衍生量子现象,展示系统在电、光、磁等外场调控下产生的物理

效应,揭示导致诸多效应的物理机理。

近40年来,包括分数量子霍尔效应、铜氧化物高温超导体、铁基超导体、庞磁阻、重费米子、量子临界等在内的大量关联量子现象的发现,丰富了凝聚态物理的研究内涵,促进了多体量子理论的快速发展。诸多新现象来源于系统中电子电荷、自旋、轨道和晶格等微观自由度之间的共存与竞争,通常出现在低维系统中,其共同的特征是电子间的库仑相互作用与量子涨落都很强,不能通过已有的固体理论框架进行解释。当这些自由度之间的关联趋强,传统的研究手段如微扰论并不适用,强关联电子行为也不能通过朗道费米液体理论和Landau—Ginzburg—Wilson对称性破缺理论来描述。想要解决这些问题,必须发展新的理论及计算方法。

从定义在格点上的考虑一些基本的相互作用模型出发,科研工作者研究了量子多体系统的物理性质。提出的模型包括Hubbard模型、t—J模型、费米子—自旋耦合模型、Heisenberg模型等,各类强关联格点模型受到了广泛的关注,取得了重要的结果。例如,尽管Hubbard模型极大地简化了固体中的电子—电子相互作用,其仍能描述多种物理现象,包括金属—绝缘体转变、磁序相变、条纹相和超导配对对称性等。经历了高温超导体发现之后的一系列发展,如今Hubbard模型的研究具有更丰富的内涵,如Anderson—Hubbard模型、Holstein—Hubbard模型等包括了无序、电声相互作用等因素,为我们提供了更广阔的应用前景。类似地,Heisenberg模型的研究帮助人们深入理解了量子自旋系统中的新颖物理,如笼目系统中的反铁磁基态,或借助量子蒙特卡罗方法研究自旋玻色子系统等。值得注意的是,求解这些统计模型或量子多体模型并不存在普适的方法,常用的有如下4种方法:精确对角化;数值重正化群,包括Wilson数值重正化群、密度矩阵重正化群、张量重正化群等;量子蒙特卡罗模拟;动力学平均场方法。针对不同的系统和不同研究对象,科研人员通常采用合适的计算方法以解决具体的问题。本文余下的部分安排如下:第2节,简述计算凝聚态物理的内涵和历史;第3节,

介绍计算凝聚态物理领域主要的模型和方法；第4节，简要探讨相关领域近期的研究进展与发展方向。

## 2 计算物理：内涵和历史

计算物理是针对给定物理系统，结合数值算法和计算机编程技术，研究物质结构与规律为目的的一门学科。简单而言，计算物理就是利用先进的计算能力，通过数值计算或模拟去解决复杂的物理问题。在真实系统中，由于涉及许多现实世界因素难以有效地改变，因此研究的效率与范围受到影响；而由于能够方便地设置环境参数，计算物理提供了深度理解系统物理规律的可能<sup>[5]</sup>。在尝试众多解决方案的过程中，计算物理有助于根据已知的物理学规律，发现新的物理现象、探索新的物理效应，解决或解释实验及工程中出现的物理问题；通过对一些具有极端条件而难以使用其他方法来研究的物理系统进行数值模拟，计算物理能帮助我们发现新的物理规律，拓展对物质世界的认知。

计算物理学起源于二战期间的曼哈顿计划，研究人员在无法解析地解决问题并且需要处理的数据太多时，通常运用计算物理进行模拟。在我

国，计算物理始于20世纪50年代，源于国家安全领域重大需求，特别是“两弹一星”任务的牵引。物理学家运用早期的电子计算机研究数值积分、微分方程的数值解、物质状态方程<sup>[1]</sup>和非线性动力学问题<sup>[2]</sup>，将微观世界的一举一动展现在人们眼前。在发展的初始阶段，计算物理主要作为理论物理的辅助工具，用于解决理论或实验物理研究中遇到的复杂计算问题；或者用于解释实验测量或观察到的现象，补充实验表征和测试方法。通常，只有通过计算模拟确定了相关材料的物理特性，才能认为给定的现象或材料特性已被完全理解。

从20世纪40年代第一台计算机被发明以来，在几十年间，计算机性能都按照每18个月翻倍的摩尔定律飞速发展。1982年，Wilson凭借数值重正化群获得诺贝尔物理学奖，宣告了计算机协助解决复杂物理问题时代的到来。80年代后期，在李政道先生的组织下，美国哥伦比亚大学等研究机构联合IBM公司共同推动和开发了并行计算机，促进了高性能计算技术与理论的发展。计算机的发展增强了运算能力，也促使计算物理被用于解决各种领域的数值问题，如生物物理学、天体物理学、化学、材料科学等。最近，随着单核处理器性能进步的逐渐放缓，并行处理已经成为

高性能计算的代表。如图1所示，一系列重要计算方法的提出和完善，催生了一大批重要科研成果的产生，展示了计算物理领域的蓬勃发展。如今，由于设备的高计算能力和高存储带宽，以及标准编程语言和工具的可用性<sup>[6]</sup>，图形处理单元(GPU)已成为大规模并行计算的选择。使用多个GPU能够缩短问题求解时间并提高离散化的精度，而这正是计算凝聚态物理研究需要的。



图1 计算物理领域中一些重要方法和代表性的文章。方法的发展和不断完善帮助我们深化了对各类系统物性的认识

作为发展最为迅速的学科之一，计算物理也为众多受限于现实条件难以进行实验的课题提供了一个可靠的研究手段，甚至是唯一的手段。一方面，对于复杂的物理系统，例如量子多体相互作用系统，尽管已经发展了系统的理论框架，然而严格求解方程或求解由这些方程导出的新方程或公式是几乎不可能的，甚至近似求解都非常困难。另一方面，对于一些现实中的极端条件，例如500 GPa以上的超高压、固体系统中1 mK之下的极低温、50 T以上的稳恒强磁场，目前还很难或甚至不可能开展实际的实验研究。而计算物理则能为以上情况提供合适的解决方案，并成为与实验物理和理论物理同等重要的物理学学科，也是支撑物理学及其交叉学科发展的一个重要支柱。

从规模上看，从事计算物理研究的人员，已经超过了从事理论物理研究的人数。计算模拟拓展了物理学研究的深度及广度，缩短了研究周期，降低了研究成本，加快了研究进程。对于不同的尺度，计算物理的研究内容和方法存在很大不同。因此要进行研究，首先要根据研究对象明确并建立基本的物理模型，在此基础上发展有效的计算方法，之后通过大规模的数值计算与模拟找到问题的解。计算方法的研究包含两部分：一是运用物理或计算数学的思想建立求解问题的核心算法；二是根据物理对象及算法，建立相应的计算软件及数据库。算法是研究的核心，是决定计算模拟效率及可靠性的关键。

作为一个能够、且已经改变传统物理学研究范式的学科，计算物理的应用范围和数据处理效率随着机器计算能力不断增强、算法不断优化得以大幅提升。随着信息化时代网络的普及和发展，计算物理由于其研究成本可控、结果可重复、实用性得到了广泛认可<sup>[7, 8]</sup>。通过有效地屏蔽掉次要因素的影响，计算研究能够从理论高度去概括性地研究复杂体系的物理特性，探索实际体系中的核心或关键科学因素，提高前沿探索的有效性和时效性。同时，它还能够预测新的物理现象、物理效应、物理规律和新材料，实现复杂数据的可

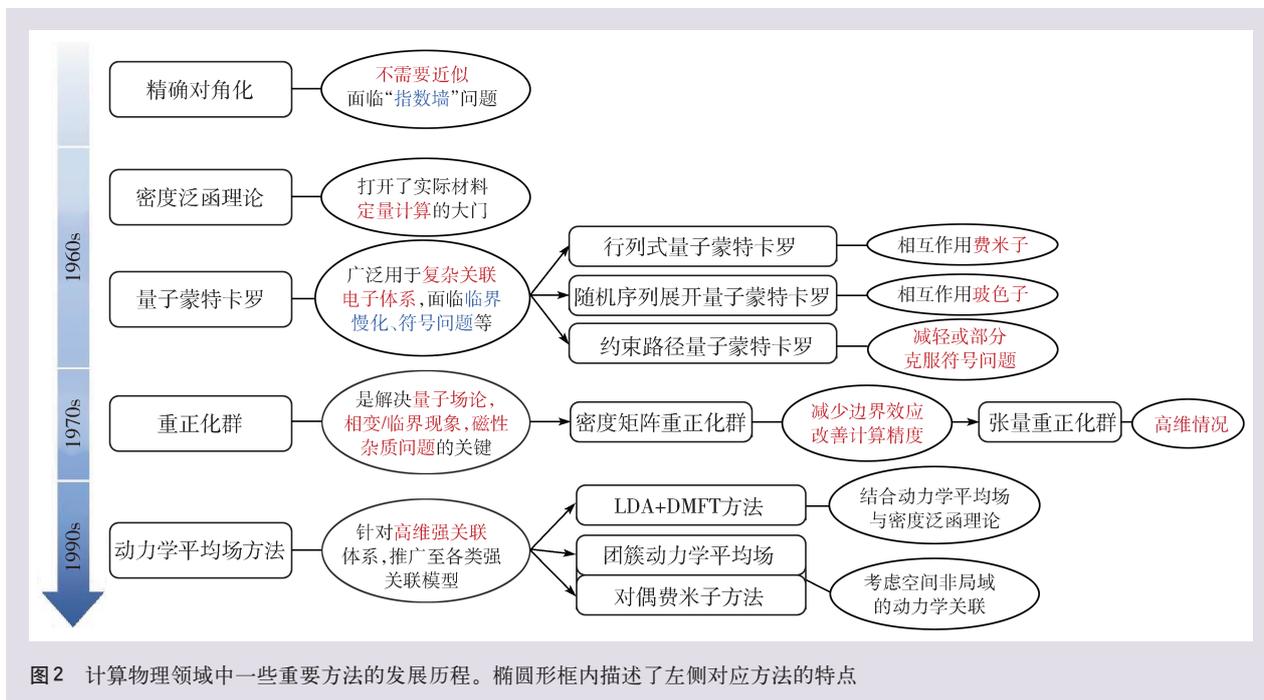
视化、实验的实时控制与分析。随着研究逐渐聚焦于非线性问题、随机环境与非解析解，计算物理还能根据已有的理论框架或模型，解决传统解析研究无法解决的问题。此外，一些全新的理论在建立初期通常没有合适的实验系统用于检验，计算物理能够帮助揭示新的物理效应和规律<sup>[9]</sup>；或辅助研究人员高效探索新型材料物性并获得高于实验的测量精度<sup>[7]</sup>。

### 3 量子多体计算：计算凝聚态物理的模型和方法

#### 3.1 精确对角化

目前，精确对角化是比较成熟的计算凝聚态物理方法，是研究量子多体系统物理性质重要的工具。它不仅能为近似理论计算和量子蒙特卡罗方法提供基准，也有助于深入了解热力学极限中无法解决多体问题的微妙特性。对于一个有限格点的量子系统，哈密顿量总是可以用一个矩阵来表示。精确对角化方法求解了矩阵的本征值和本征矢量，通过一些最低的本征值和本征矢量计算各种基态期望值和相关函数来研究该系统的物理性质。这种方法的优点是不需要做任何近似，缺点是能处理的系统尺寸很小，或者说粒子数很少。这是由于系统总自由度数，即哈密顿量的矩阵维数是随系统尺寸增加而指数增加的。这个问题也被称之为“指数墙问题”。当然，这种局限性也有可能是表面局限，比如在一维系统中相干长度小于晶格大小时，利用该方法也能得到代表性的物理结果<sup>[10]</sup>。有限温度精确对角化算法，也被应用于研究模型的动力学或有限温度热力学性质。通过与蒙特卡罗方法和动力学平均场的结合，拓展了精确对角化方法可以涉及的理论深度。

其他比较成熟的研究方法有Wilson数值重正化群和密度矩阵重正化群。而包括量子蒙特卡罗、张量重正化群、动力学平均场在内的一系列方法，尽管如图2所示经历了一定程度的发展，相对而言还不够完善，仍需进一步改进。



### 3.2 密度泛函理论

20世纪60年代之前，一般采用近似的方法/理论，例如Hartree近似等来计算凝聚态体系的电子结构。尽管这些方法具有一定的局限性，但它们仍为相关研究提供了工具。60年代，Kohn及其合作者提出密度泛函理论(DFT)<sup>[11]</sup>并建立了Kohn—Sham方程<sup>[12]</sup>，结合局域密度泛函近似，奠定了当代电子结构计算的基础。为此，Kohn和计算化学的创始人Pople分享了1998年的诺贝尔化学奖。80年代，量子蒙特卡罗方法的进步促进了密度泛函理论的发展，一系列适合不同电子密度、提高计算精度的局域密度泛函应运而生。而随着密度泛函理论不断发展，加以计算方法和计算机性能的进步，计算凝聚态物理也逐渐从定性地解释实验数据，转向了定量地用第一性原理预测实际材料中的物化性质。

密度泛函理论的发展引领了对电子结构的研究，被视作计算凝聚态物理的一个重大突破。在诸多领域如核物理、分子物理、化学等受到了重视并被广泛应用。事实上，密度泛函理论不仅广泛地影响了多个学科，同样也得到了各个研究领域的反馈。在密度泛函理论发展的很长一段时间

内，由于其在具体应用时对平均场近似的依赖性，物理学界对密度泛函缺乏足够的重视<sup>[8]</sup>。20世纪80年代初，随着局域密度近似下交换关联能参数化的建立以及广义梯度近似的发展，人们开始大量使用密度泛函理论描述化学反应。在推进理论化学发展的同时，密度泛函也逐渐成为了计算凝聚态物理中一种重要的方法。

### 3.3 蒙特卡罗方法

量子蒙特卡罗算法的根源可以追溯到20世纪50年代，当时Ulam和von Neumann提出了一种想法，通过随机方法(即在矩阵索引空间中随机行走)来计算矩阵的函数。1962年，该想法被Kalos等人首次应用于物理问题。1973年，Kalos等人首次报道了这一概念在多体问题上的应用<sup>[13]</sup>。1977年，Suzuki等人完成了对量子自旋系统的模拟<sup>[14]</sup>。此后，量子蒙特卡罗方法迎来了飞速发展。其主要思想是在计算机上模拟实际过程的概率，然后加以统计处理，该方法适用问题的关键在于随机性。早期的蒙特卡罗方法主要运用Suzuki—Trotter分解模型的维度分开处理，计算其配分函数<sup>[15]</sup>以研究量子磁学模型<sup>[16]</sup>；利用Metropolis算法在相空间中进行有效抽样，满足细致平衡。由

于该算法更新较慢，Wolff等集团更新算法被逐步提出<sup>[17]</sup>。通常在路径积分基础上，一个 $D$ 维量子系统等价于一个 $D+1$ 维经典系统，因此计算量子多体模型的配分函数也可以通过蒙特卡罗模拟来实现。

如今，量子蒙特卡罗方法具有广泛的应用。20世纪80年代初，Blankenbecler等人提出了行列式量子蒙特卡罗算法<sup>[18]</sup>，用以研究相互作用费米子系统；近年来，该方法也被用于研究费米面或狄拉克费米子与临界玻色场耦合的问题<sup>[19]</sup>。对于相互作用玻色子系统和自旋系统，1962年发展起来的Handscomb方法适用于具有最近邻相互作用的自旋 $1/2$  Heisenberg模型，避免了路径积分中固有的系统误差<sup>[6]</sup>。此外，变分蒙特卡罗结合了用于计算电子哈密顿量期望值的蒙特卡罗积分和基态的变分原理，引入了“重要抽样”的思想。而约束路径量子蒙特卡罗方法，通过将基态从任意初始状态的投影转换为Slater行列式空间中的重要抽样分支随机游走并约束随机游走的路径，符号问题可以部分克服，属于在可控近似下求解相互作用费米子体系的一种方法。

### 3.4 数值重正化群

20世纪70年代初期，Wilson介绍了重正化群的基本概念及以他名字命名的数值重正化群方法。在Wilson的公式中，短程、高能涨落被逐步整合，以获得长程、低能下的有效描述。重正化群方法为研究人员提供了用于研究关联/涨落系统的实用工具，对二级相变附近的系统、高能物理学中基本相互作用的概念性理解、量子电动力学中的点电荷发散问题、量子色动力学中的渐进自由问题等起到了关键作用。1992年，White提出了密度矩阵重正化群方法<sup>[20]</sup>，利用约化密度矩阵的特征矢在实空间中的局域性对希尔伯特空间进行降维，通过对变分优化系数的反复迭代，能够有效求解多体波函数。如今密度矩阵重正化群已成为研究一维短程关联系统最为精确和系统的方法，在Hubbard、Heisenberg等模型中给出了接近精确解的结果。此外，密度矩阵重正化方法与量子信

息理论之间的紧密联系开始发力于复杂量子信息理论计算，本身可以通过对其内在原理的新见解以更集中的方式应用。从这个意义上说，密度重正化方法将处于凝聚态物理和量子计算之间日益增长的纠缠的前沿<sup>[21]</sup>。

密度矩阵重正化群主要处理低维强关联的哈密顿量，而当系统的维数超过一维时，由于纠缠熵随系统尺寸增加而增加，所需的计算资源也将随系统尺寸指数增加，使得该方法的应用范围受到了很大限制。解决这个问题的途径之一，就是发展张量网络态的重正化群方法，也简称为张量重正化群方法。2007年，Levin和Nave利用量子信息论的思想发展了张量重正化群方法，可以有效地求解任意二维经典晶格模型，能够免于符号问题并适用于具有复杂权重的模型<sup>[22]</sup>。此后，各种基于变分原理的方法，包括对基态能的变分优化及对定域张量的“全更新”方法也相继被发展起来，用以进一步提高计算精度。需要提到的是，尽管张量重正化群方法仍需发展与完善，但在二维量子格点及三维经典统计模型的一些案例研究中，该方法已经展露出其他方法所不具有的应用潜力。例如，与高温超导电性有关的二维Hubbard模型，张量重正化群方法对计算其最佳变分基态很有利。对无序和多体局域化，已有一系列方法用于研究该领域，包括对能量本征态全谱的表示<sup>[23]</sup>，或者对一维多体局域系统所有本征态的编码方法。

### 3.5 动力学平均场方法

现如今，寻找适合强关联系统的模型或方法仍旧是凝聚态物理领域的一个挑战。由于现有的数值方法具有一定的局限性，因此动力学平均场方法已成为研究人员关注的对象。动力学平均场方法(DMFT)是一种针对高维强关联体系的数值方法。该方法基于将固态物理的完整多体问题映射到量子杂质模型，该模型本质上是在满足自洽条件的浴中嵌入少量量子自由度。该方法提供了相关材料电子结构的最小描述，平等地对待Hubbard带和准粒子带。1989年，Metzner和Vollhardt

运用该方法研究了无穷维 Hubbard 模型中费米子间的非平庸相关性, 提出在空间维度  $d \rightarrow \infty$  时, Hubbard 模型可以有一个数学上可严格定义的高维极限<sup>[24]</sup>。此后, 该研究获得了广泛关注, 1992 年, Kotliar 和 Georges 研究组取得了突破性的成果<sup>[25]</sup>, 他们将无限维的 Hubbard 模型映射到自洽的单杂质 Anderson 模型上, 然后将所得到的局域自能修正代回到原先的晶格模型, 最后通过一个自洽方程的迭代求解来确定单杂质 Anderson 模型中的热库参数。这种映射在无限配位数的限制下是精确的, 且允许人们在所有相互作用强度下非微扰地研究相关晶格电子动力学。与单粒子理论相反, DMFT 的平均场是能量相关的, 即动态的, 从而充分考虑了局域量子涨落。由此, DMFT 为研究关联晶格模型提供了一个新的理论框架。随后, Anisimov 与 Poteryaev 等人将动力学平均场方法与电子结构技术相结合, 做出了突破性进展。此外 Chitra 和 Kotliar 等人的研究表明动力学平均场方法也可以表述为精确谱密度泛函理论(SDFT)的近似值<sup>[26]</sup>。在此之后, 该方法被迅速推广至各类强关联模型, 取得了极大的成功<sup>[27]</sup>。

## 4 发展与未来

当前, 凝聚态物理中的强关联量子多体问题仍是极具挑战的研究领域。电子间的强关联限制了从第一性原理出发的解决方案。研究人员一般会面向具体问题建立一个描述系统低能电子的模型(例如 Hubbard 模型), 随后通过数值模拟研究系统物性, 揭示物理规律。本节将就关联量子现象的规律及机理中有潜力的研究领域、计算方法的发展两个方面展望相关领域的未来。

### I 关联量子现象的规律及机理中有潜力的研究领域

(1) 高温超导及赝能隙。在世纪之交, 诺贝尔奖获得者 Ginzburg 曾被问到物理学中哪些问题看起来格外重要, 在他的回答中, 室温超导名列前茅。对于高温超导系统中出现的一系列奇异金属行为, 如线性电阻、电荷—自旋分离等, 研究者

发现其与赝能隙紧密联系。赝能隙类似带隙, 实际上是态密度极低的区域, 其对高温超导体的效应一直受到广泛关注。随着计算方法和模拟技术的进步, 现如今, 寻求描述高温超导的理论模型和研究相应的谱函数包括赝能隙已经成为凝聚态物理中的一个重要课题。

(2) 电子—声子相互作用。强关联系统中的电子—电子相互作用和电子—声子相互作用均不可忽视, 然而大多数研究局限于电子—电子相互作用, 忽视了电子—声子相互作用对超导、电荷密度波等的重要影响<sup>[28]</sup>。Holstein 模型是一个广泛研究电子—电子相互作用和电子—声子相互作用的模型<sup>[29]</sup>, 现如今已经有很多方法应用于这个模型的研究: 如约束路径辅助场量子蒙特卡罗方法、精确对角化、行列式量子蒙特卡罗方法等等。研究该模型及其扩展也是一个很重要的课题。

(3) 量子自旋液体的甄别。量子自旋液体被视为自旋系统的“量子无序”基态, 在这些基态中, 零点涨落非常强, 以至于传统的磁长程序不存在。由于具有大量纠缠的基态, 因此量子自旋液体中有相当独特的物理, 如非局域激发、拓扑等。目前, 很少材料被证实为量子自旋液体<sup>[30]</sup>, 因此对自旋模型进行计算模拟以避免实验上的盲目测试是极有必要的。

(4) 非平衡、非厄米量子系统。现实中的系统具有复杂性, 往往偏离了热力学平衡态, 从而提高研究的难度。现有的理论方法尚不足以应对这类问题, 需要发展新的理论和方法。对强关联格点模型而言, 先前的研究往往关注封闭的、具有实数本征能量的厄米系统, 厄米性被视作为研究的核心。然而, 真实的物理系统是开放的, 它们与外部环境进行了能量、粒子和信息的交换, 这意味着很多物理量不再是守恒量<sup>[31]</sup>。因此, 相较于厄米系统被作为一个整体, 研究者很多时候对非厄米系统的有限子空间更感兴趣。在这种情况下, 能量可以在特定的量子子系统和它的环境之间进行交换<sup>[32]</sup>。包括具有增益和损耗的奇偶时间对称光学系统、耗散的玻色—爱因斯坦凝聚体、激子—极化激子系统 and 生物网络等<sup>[33, 34]</sup>。如今,

对凝聚态系统的非厄米描述为阐明非弹性碰撞、无序效应和系统—环境耦合提供了有效的框架，而在拓扑绝缘体被发现后，与凝聚态物理相关的拓扑性研究也变得越来越重要<sup>[35]</sup>。

## II 计算方法的改进与发展

(5)克服量子多体系统的指数墙问题。在量子多体系统研究中，随着粒子数/系统尺度的增加，系统的希尔伯特空间维度将呈指数发散，复杂性也指数型增加，以当今计算机的性能还不足以完全解决。这为描述量子多体波函数或计算相关物理量带来了极大困难，被诺贝尔化学奖得主Kohn称为“指数墙”。几十年来，研究人员为解决这一难题做出了大量努力，如密度矩阵重正化群方法应用于针对低维强关联系统、量子蒙特卡罗方法等。然而，目前还没有一种能够解决所有问题的方法。

(6)改善量子蒙特卡罗方法中的负符号问题。在过去的几十年里，量子蒙特卡罗方法作为解决各个学科难题的有效工具，在化学、凝聚态物理、核物理等领域中起到了举足轻重的作用。然而，当重要性采样中特定量子配置的概率变为负时，就会出现符号问题，极大地限制了该方法的应用。一方面来说，减轻甚或解决符号问题是计算凝聚态物理的核心课题之一；另一方面，Mondaini等人讨论了行列式量子蒙特卡罗方法中的符号问题与量子临界行为的关系<sup>[36]</sup>，使得相关研究更具挑战性。

(7)张量重正化群方法的发展和完善。现如今，蒙特卡罗方法已被证明是一种成功的非微扰数值方法。然而，符号问题的存在使得该方法的使用受到了限制。2007年，Levin和Nave提出张量重正化群方法，通过使用奇异值分解近似计算张量网络的收缩，能够免于符号问题并适用于具有复杂权重的模型。张量重正化群具有其他方法所不具有的应用潜力，是富有潜力的研究方向。而一系列问题，张量维数增加时的精度问题、非线性导致的变分优化的稳定性问题、精确计算非厄米转移矩阵本征值等问题表明该方法仍有很大的进步空间，为相关领域提出了新的研究思路。

(8)发展并推广动力学平均场方法。动力学平

均场经过30年发展，如今需要新的创新带来突破。一方面，不断有研究尝试将动力学平均场理论推广至非平衡系统，如通过映射到自洽杂质问题降低计算的复杂性<sup>[37]</sup>，取得了一定进展，但缺乏长时间演化下可靠的杂质求解器仍然限制了该方法的发展。另一方面，对无经验参数的强关联电子结构的研究，通常采用线性判别降维算法和动力学平均场方法相结合，而由于该方法需要提前设置部分经验参数，并不能完全满足研究的需求。

(9)计算物理需要进一步发展算法和开发软件，这是一个长期且庞大的工程，需要足够的人力和物力投入。随着高性能计算机的发展，开发并拥有自主知识产权的软件对于科学技术与物质模拟变得越来越重要，无论对国家、学界和个人都是如此。计算凝聚态物理领域中，计算软件具有较高的开发商业化程度，在材料设计方面发挥了重要作用。其中第一性原理电子结构计算程序开发及其在材料设计方面的应用是一个重要的研究方向，基于密度泛函理论(DFT)发展的计算软件，如VASP、WIEN2K、CASTEP、QE等软件包的开发降低了第一性原理方法的使用难度，也促进了相关领域的发展。当前，欧洲是第一性原理软件发展最活跃的地区，美国、日本也有较强的研究实力。我国在发展软件方面起步晚、投入少，对软件的开发和商业化不足，迄今仍然难以摆脱对国外软件产品的依赖。要改变这种现状，必须加强计算物理方法和软件人才的培养，重视并大力支持软件的商业开发研究。

(10)机器学习方法应用于量子多体系统。随着人工智能和大数据处理的发展，机器学习方法在物理学多个领域以及各类交叉学科中开始有了广泛的应用，对计算凝聚态物理产生了重要的影响。随着机器学习方法的介入，计算物理领域全新的方法论正在逐步形成<sup>[8]</sup>。例如，可以使用深层神经网络判断和刻画相变、表征量子多体波函数；在张量重正化群中运用自动微分技术；通过机器学习提高蒙特卡罗更新效率等。我们期待机器学习方法能够为强关联电子领域提供新的研究视角和思路。

## 5 结论

计算物理是以计算机为工具,以计算方法和软件为手段研究物质结构及规律的学科。作为近20年来发展最为迅速的领域之一,计算物理从量子力学出发,能够在原子层级上设计和确定具有不同功能、结构与组分材料体系,为解释诸多物理现象提供有力的研究手段。在出现伊始,计算物理主要用于研究物质状态方程和非线性动力学问题等。随着计算机能力的增强,计算物理的研究范围也越来越广,不仅解决了诸多解析理论无法解决的问题,将理论与实验结果有机结合,更做到了预测新的物理现象、物理效应、物理规律和新材料等。随着凝聚态领域研究的不断深入,材料的结构与物性越发丰富,研究重点向非线性问题、随机环境与非解析解转移,而计算物理由

于能根据已有的理论框架或模型、解决传统解析研究无法解决的问题,受到了广泛的关注与期待,也面临着困难与挑战。在面临电子强关联和量子涨落大的前提下,发展新的理论与计算方法是迫切而必要的。

当前,面对强关联电子体系,精确对角化、数值重正化群、量子蒙特卡罗模拟和动力学平均场方法是4种较为常用的方法。每种方法各有优劣,在面向不同适用范围的同时具有相应的优点和局限性。这些方法并不能满足研究人员对于计算精度和可计算建模等方面的需求,诸如指数墙问题、量子蒙特卡罗中负符号问题等问题的存在说明现有计算方法仍有很大的改进和发展空间。此外,关联量子现象的规律及机理如高温超导机理、量子自旋液体态、非厄米量子系统等问题仍然是广大研究者关注的课题,这些课题的研究以及解决都和计算物理的发展息息相关。

## 参考文献

- [1] Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N *et al.* The Journal of Chemical Physics, 1953, 21: 1087
- [2] Fermi E, Pasta P, Ulam S *et al.* 1955, DOI: 10.2172/4376203
- [3] Wilson K G. Scientific American, 1979, 241: 158
- [4] Wilson K G. Rev. Mod. Phys., 1975, 47: 773
- [5] Kang K J, Cheng J P, Chen Y H *et al.* Journal of Physics: Conference Series, 2010, 203: 012028
- [6] Bernaschi M, Bisson M, Fatica M *et al.* The European Physical Journal Special Topics, 2012, 210: 17
- [7] Katsikas G, Sarafidis C, Kioseoglou J. physica status solidi (b), 2021, 258: 2000600
- [8] 国家自然科学基金委员会,中国科学院. 中国学科发展战略: 计算物理学. 北京: 科学出版社, 2022
- [9] Senthil T, Vishwanath A, Balents L *et al.* Science, 2004, 303: 1490
- [10] Lin H, Gubernatis J, Gould H *et al.* Computers in Physics, 1993, 7: 400
- [11] Hohenberg P, Kohn W. Phys. Rev., 1964, 136: B864
- [12] Kohn W, Sham L J. Phys. Rev., 1965, 140: A1133
- [13] Kalos M H, Levesque D, Verlet L. Phys. Rev. A, 1974, 9: 2178
- [14] Suzuki M, Miyashita S, Kuroda A. Progress of Theoretical Physics, 1977, 58: 1377
- [15] Trotter H F. Proceedings of the American Mathematical Society, 1959, 10: 545
- [16] Handscomb D C. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 1962, 58: 594
- [17] Evertz H G, Lana G, Marcu M. Phys. Rev. Lett., 1993, 70: 875
- [18] Blankenbecler R, Scalapino D J, Sugar R L. Phys. Rev. D, 1981, 24: 2278
- [19] Berg E, Metlitski M A, Sachdev S. Science, 2012, 338: 1606
- [20] White S R. Phys. Rev. Lett., 1992, 69: 2863
- [21] Schollwöck U. Rev. Mod. Phys., 2005, 77: 259
- [22] Levin M, Nave C P. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 120601
- [23] Orús R. Nature Reviews Physics, 2019, 1: 538
- [24] Metzner W, Vollhardt D. Phys. Rev. Lett., 1989, 62: 1066
- [25] Georges A, Kotliar G. Phys. Rev. B, 1992, 45: 6479
- [26] Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K *et al.* Rev. Mod. Phys., 2006, 78: 865
- [27] Georges A, Kotliar G, Krauth W *et al.* Rev. Mod. Phys., 1996, 68: 13
- [28] Zhang Y X, Chiu W T, Costa N C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2019, 122: 077602
- [29] Han Z, Kivelson S A, Yao H. Phys. Rev. Lett., 2020, 125: 167001
- [30] Clark L, Abdeldaim A H. Annual Review of Materials Research, 2021, 51: 495
- [31] Hosseini M V, Askari M. Scientific Reports, 2021, 11: 22206
- [32] El-Ganainy R, Makris K G, Khajavikhan M *et al.* Nature Physics, 2018, 14: 11
- [33] Xu Z, Chen S. Phys. Rev. B, 2020, 102: 035153
- [34] Gong Z, Ashida Y, Kawabata K *et al.* Phys. Rev. X, 2018, 8: 031079
- [35] Zhang X Z, Song Z. Phys. Rev. B, 2020, 102: 174303
- [36] Mondaini R, Tarat S, Scalettar R T. Science, 2022, 375: 418
- [37] Aoki H, Tsuji N, Eckstein M *et al.* Rev. Mod. Phys., 2014, 86: 779