

## 量子临界性

2011年2月出版的 *Physics Today* 杂志上,美国哈佛大学物理学教授 Subir Sachdev 和德国马克斯·普朗克固体物理研究所 Bernhard Keimer 所长撰文,就“量子临界性”做了详尽的阐述并指出,在绝对零温度下,由量子涨落导致的相变似乎是一个没有实验意义的、抽象的理论概念,但它却是我们理解众多实验现象的关键。

当代物理学研究中相当大的一部分内容是对量子物质的研究,其目的是描述在足够低的温度下,由大量相互作用的粒子组成的系统和依据量子力学原理所形成的各种物态。对于固体中的电子,所需要的“低温”甚至比室温还要高;而束缚原子气体却需要在绝对温度为  $10^{-9}$  的“超冷温度”范围内,借助于原子核的碰撞,在粒子加速器中实现的夸克等离子体,已经接近宇宙大爆炸刚刚结束时的温度。有意思的是,对特征能量尺度差别如此之大的不同物理系统,一些有关量子物态的概念和原理依然适用。

固体中的电子系统是研究量子物质最合适的系统之一,借助于现代的材料制备技术,人们几乎可以合成出无穷多种用于实验探索和理论研究的各类晶体。本文着重讨论电子系统在绝对零温度下的一些相变,这时系统中不存在热涨落,相变是由依据海森伯不确定原理而存在的量子涨落所导致的。

读者熟悉的电子系统所形成的量子物态有:电子占据部分巡游平面波函数的金属态;电子形成 Cooper 对后无损地传导电荷的超导态;在室温下很难发生的、通过激发电子克服能隙传输电荷的绝缘体;以及在室温下可以激发电子的、具有较小能隙的半导体。这样的分类依据的是电子所携带电荷的运动状态,然而,电子还具有自旋。对电子波函数中自旋构型的详细分析,可以进一步细分电子的量子物态,其中就包括铁磁体、反铁磁体。而磁性物态中电荷自由度是处于金属态、超导态、绝缘等状态。

近期许多实验研究工作是围绕所谓的关联金属材料展开的。在这样的系统中,外层电子大多在原子的 d 轨道或 f 轨道。较小的轨道空间延展性增强了电子间的库仑相互作用,所以电子之间必须关联起来,以保证它们之间尽可能低的作用能。尽管多数关联电子材料在常态下处于上述某个量子物态,但是我们可以通过调节外参量,使得它们在两个或多个物态间转变,这里的外参量可以是加在固体上的压力、磁场强度,或者是通过掺杂手段控制的电子浓度。此时,温度不再是一个主要的外参量,因为我们讨论的是电子基态的变化,其次才是基态之上的热激发。在本文中,我们把可调的外参量记为  $g$ 。当  $g$  发生改变时,特别是在量子相变点  $g = g_c$  处,由于哈密顿量中的一个或几个耦合参数的缓慢变化,系统整体的基态波函数产生了一个定性的改变。

有时两相之间的相变表现为某些物理量突然的跳跃,这种一阶的量子相变类似于热力学中的一阶相变,如水煮沸变成蒸汽。然而,较为有趣和常见的相变则是变化过程平缓的二阶连续相变。二阶量子相变的重要特征体现在临界点处基

态的特性:在远离量子临界点时,系统通常处于以上提到的某个物态,如反铁磁性的金属态,其量子波函数可以写成简单电子构型的一个直积态。然而,对于一阶量子相变,相变点两边的基态波函数可以一直延续到  $g = g_c$ ,相变时系统只是从一边的量子态变到另一边的量子态。然而,对于连续量子相变,波函数在临界点  $g = g_c$  处完全不是一个直积态,它是一个由巨大指数多种构型组成的、包含各种长度尺度涨落的、复杂的量子叠加态。用时尚的语言来说,就是处于临界点的波函数具有长程量子纠缠的属性。Albert Einstein, Boris Podolsky 和 Nathan Rosen 在 1935 年著名的单个电子对的思想实验中,特别强调量子纠缠具有特殊的、非局域的本性,而类似的纠缠属性同样出现在由大量电子组成的关联系统之中。

量子临界物态是迄今为止人们研究过的最复杂的量子态,如何有效地描述它们,已成为量子临界性理论研究的一个重要目标。对几乎所有情形,人们甚至不能写下临界物态的波函数,所以不得不借助于量子场论或数值模拟的工具来剥离出电子之间那微妙的量子关联信息。在  $g = g_c$  处,量子临界物态是由系统基态波函数所确定的,所以严格来说,它只存在于绝对零温度条件下。从实验角度来说,一个连续的量子相变和它的具有奇异性的、量子纠缠的临界点性质,似乎只是一个没有实际意义的、抽象的理论概念。然而,我们将在下面看到,量子临界点的影响实际上扩展到了有限温度相图中的一个宽广的区域,量子临界区域将是我们解释许多实验现象的关键。

### 1 量子 Ising 自旋链

近期实验中的两个非常典型的例子,可以很好地用来说明量子相变和量子临界性。这两个例子都涉及绝缘材料,这时电子的电荷自由度完全局域,所以我们可以集中精力关注电子自旋在不同晶格位置上的空间取向。在  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  材料中,  $\text{Co}^{2+}$  离子上的总的电子自旋可以有一定的空间取向。由于自旋-轨道耦合效应,  $\text{Co}^{2+}$  离子上的自旋空间取向只能与晶体场轴方向平行或反平行,这种自旋称为 Ising 自旋。我们用  $|\uparrow\rangle$  和  $|\downarrow\rangle$  表示在  $i$  格点  $\text{Co}^{2+}$  离子上的电子自旋取向。用量子计算机的术语,每一个  $\text{Co}^{2+}$  离子代表一个量子比特。我们可以用一个包含近邻自旋耦合的、锯齿状的一维 Ising 自旋链模型来描述  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  (见图 1)。这里的  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  基态为铁磁态,其中所有自旋平行排列,可以有如下 2 个可能的铁磁基态波函数:

$$|\uparrow\rangle = \prod_{j=1}^N |\uparrow\rangle_j \text{ 或 } |\downarrow\rangle = \prod_{j=1}^N |\downarrow\rangle_j, \quad (1)$$

这里  $N$  代表链上总自旋数. 正如在远离量子临界点时所预期的那样, 基态波函数是简单的直积态. 非常小的外界扰动就可以使晶体选择其中的一个基态波函数, 同时自旋向上和自旋向下相互转换的性质受到破坏, 同时也破坏了自旋空间内对  $xy$  平面的反射对称性.

正如最近 Radu Coldea 和其合作者<sup>[1]</sup>所做的那样, 外加一个垂直于晶体易磁化轴方向的磁场可以使  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  产生量子相变. 横向磁场强度就是可调参量  $g$ . 当  $g \rightarrow \infty$  时, 完全不同于(1)式的基态就会出现. 由于 Zeeman 耦合, 所有自旋必须平行于外磁场, 这将会导致如下的基态波函数:

$$|\rightarrow\rangle = \prod_{j=1}^N |\rightarrow\rangle_j, \quad (2)$$

这里,  $|\rightarrow\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j)$ . 将(2)式中的直积展开后可以得到一个由  $N$  个量子比特的  $2^N$  个等权重的多体叠加态, 这对量子计算非常有用. 与(1)式给出的态不同, (2)式给出的态具有自旋向上和自旋向下可互相转换的对称性, 同时保持了在自旋空间对  $xy$  平面的反射对称性. 这个量子态完全不同于铁磁态, 称为量子顺磁态.

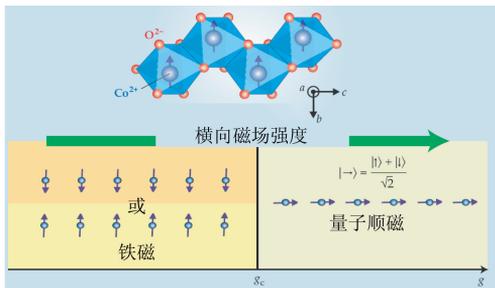


图1  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  材料的晶体结构. 其中  $\text{Co}^{2+}$  离子携带一个  $1/2$  自旋, 并形成锯齿状的一维自旋链. 没有外磁场时, 系统基态在  $ac$  面内形成铁磁态; 外加沿  $b$  轴的横向磁场, 增加磁场强度可以导致自旋沿磁场方向的量子顺磁态, 系统在  $g_c$  处发生二阶量子相变

实际上, 我们无法通过调节参量  $g$  将(1)式的量子铁磁态 ( $g=0$ ) 平缓地变到(2)式的量子顺磁态 ( $g=\infty$ ). 这是因为前者破坏了自旋空间对  $xy$  平面的反射对称性, 而后者却没有. 因此, 系统的基态能量密度函数中一定存在参量  $g$  的一个非解析点. 在那里, 铁磁基态的磁矩完全消失, 破缺的对称性得到恢复, 这就是量子临界点  $g_c$ .

现在, 让我们来更全面地描述连续量子相变, 以及基态波函数作为参量  $g$  的性质. 在  $g \ll g_c$  和  $g \gg g_c$  极限下, 波函数都是一个比较简单的直积态的形式. 在  $g = g_c$  时, 量子临界态则是一个由  $2^N$  自旋构型组成的、非常不寻常的量子叠加态, 其中自旋的关联呈现幂指数衰减形式. 细心的读者已经发现, 实际上(2)式给出的态也是一个由  $2^N$  自旋构型组成的量子叠加态, 但它是一个等权重叠加态, 所以可以写成一个简单的直积态形式. 相反, 我们还找不到一个可以将量子临界态——量子纠缠态, 写成一个简单形式的局域基矢.

当不太远离临界点  $g = g_c$  时, 描述系统的重要物理量是自旋关联长度  $\xi$ . 如果将大于这个关联长度的自旋平均处理后, 那么系统的基态波函数可以分别被约化为  $g \ll g_c$  和  $g \gg g_c$  极限下的简单的直积态; 而小于关联长度的那些自旋, 其整体波函数就像是在  $g = g_c$  时的量子纠缠态. 因为它们无法确定自己到底是处在临界点的哪一边, 所以它们正好刻画了量子临界点多尺度纠缠的属性. 关联长度  $\xi$  的具体数值是可调参量  $g$  的函数, 我们这里讨论的连续相变的共同特征是,  $\xi$  随  $|g - g_c| \rightarrow 0$  都是发散的. 伴随基态波函数随参量  $g$  的变化, 系统的低能激发性质也会发生改变. 利用中子散射实验, 人们就可以探测到这些低能激发准粒子. Coldea 等人已经在  $\text{CoNb}_2\text{O}_6$  材料中证实存在一个连续的量子相变<sup>[1]</sup>.

## 2 二聚化反铁磁体

第2个例子是二聚化反铁磁体,  $\text{TlCuCl}_3$ . 这里  $\text{Cu}^{2+}$  离子携带1个未配对的局域电子, 我们可以用  $S_j$  表示  $j$  格点上的自旋为  $1/2$  的算符, 用  $J_{ij}$  表示  $\text{Cu}^{2+}$  离子间的自旋-自旋耦合强度, 则相应的自旋模型为

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} S_i \cdot S_j, \quad (3)$$

这里  $J_{ij} > 0$ , (3)式中自旋间的耦合都是反铁磁性的, 倾向于反平行排列. 还有当自旋处于二聚化状态时, 每一个自旋都与它唯一的自旋伙伴紧密地耦合在一起, 与其他自旋的耦合非常微弱. 图2描述了这个二聚化反铁磁体, 其中的反铁磁耦合强度分别为  $J$  和  $J/g$  并且  $g \geq 1$ .

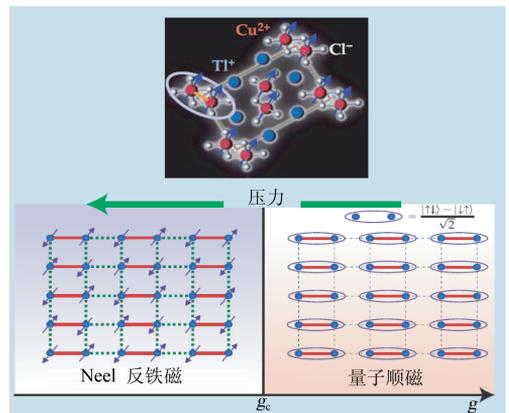


图2 二聚化反铁磁体  $\text{TlCuCl}_3$ . 其中  $\text{Cu}^{2+}$  离子携带一个未配对的局域电子, 自旋为  $1/2$ . 常压下, 最近邻的2个自旋配对形成二聚化的价键单态. 随着压力的增强, 耦合参量  $g$  减小, 系统通过量子相变成为具有 Neel 序的反铁磁体

在这个模型中, 当  $g=1$  时, 系统基态为反铁磁的 Neel 序, 自旋以棋盘状方式排列, 每一个自旋都有各自的空间取向, 系统的自旋旋转对称性被破坏了. 这时, 系统的波函数也是一个简单的直积态的形式, 所以 Neel 序类似于 Ising 自旋链中的铁磁有序, 只是自旋的极化取向是以空间交替模式出现的. 每一个向上自旋都有向下的自旋作为近邻, 并在自旋模型中贡献一个负的能量项.

现在, 让我们看  $g \rightarrow \infty$  时基态波函数的形式: 不同的二

聚化间的耦合完全消失,系统的哈密顿量变成一系列独立的自旋对的集合.我们可以很容易地写下一个二聚化自旋对的波函数,它是一个自旋旋转不变的价键单态,  $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ . 尽管其中的两个自旋总是反平行,但它们在自旋空间却有任意的空间取向. 在  $g = \infty$  时,整个系统的基态波函数就是所有这些价键单态的直积态,它也是一个量子顺磁态.

类似于 Ising 链的讨论,在一定的  $g$  值范围内,系统处于自旋旋转对称破缺的 Neel 态. 对称性的破缺在量子临界点  $g = g_c$  处得到恢复,在临界点之上,系统基态则为量子顺磁的自旋单态. 在  $g = g_c$  处,存在一个连续的相变点,自旋在各个长度尺度范围内具有非平庸的量子纠缠属性. 图 2 给出了  $\text{TiCuCl}_3$  的 2 种基态,它们在 Christian Ruegg 等人<sup>[2]</sup> 的实验中通过调节压力已经被观察到,而且两类不同基态所具有的特殊低能激发:自旋波和稀少自旋三态准粒子,同时也在中子散射实验中被探测到.

### 3 量子临界性

让我们开始讨论孤立量子临界点  $g = g_c$  的实验意义. 为此,我们必须考虑基态下的量子相变在有限温度范围内的影响. 下面我们将看到,量子相变在有限温度相图中的一片区域内留有清晰的痕迹. 图 3 描述了二聚化反铁磁体的温度  $T$  和参量  $g$  的相图. 在非临界的基态,温度升高将产生自旋波或稀少自旋三态准粒子激发,这些自旋波或准粒子的激发可以用准经典模型描述.

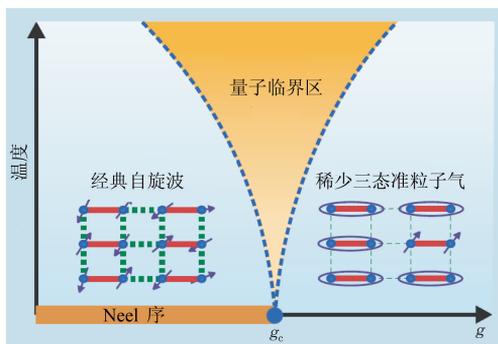


图 3 对应于图 2 的二聚化反铁磁体在温度  $T$  和可调参量  $g$  平面内的相图

正如我们已经注意到的那样,在靠近  $g = g_c$  时,基态波函数在小于关联长度范围内具有量子纠缠的临界形式;在大于关联长度范围内,波函数是非临界的直积态. 在有限温度下,系统还有一个特征长度,即在临界点处激发粒子的德布罗意热波长:  $\hbar c/k_B T$ . 当  $\xi < \hbar c/k_B T$  时,即关联长度小于热波长,波函数具有直积态的形式,所以热涨落只是激发非临界的自旋波或准粒子.

反常的量子临界区域出现在相反的极限下,即  $\hbar c/k_B T < \xi$ . 由于关联长度  $\xi \sim |g - g_c|^{-1} \rightarrow 0$  而发散,所以这个反常区域呈扇形. 然而,令人惊奇且似乎有点反常的是,甚至在远离  $T = 0$  处的孤立量子临界点之上,量子临界性随温度升高反而变得愈发重要(当然,一旦热涨落能量接近自旋-自旋的耦合强度  $J$ , 上

面的讨论将失效,所以图 3 仅适用于温度远远小于  $J$  的范围). 由于德布罗意热波长小于关联长度,热涨落可以直接影响到量子临界纠缠态,因此,我们必须建立一个能描述复杂临界量子态激发准粒子及其相互作用的理论.

如何描述量子临界动力学是目前面对的主要挑战,也是许多研究的主题. 除了 1 维体系中的一些特殊情形外,目前在凝聚态物理领域内还没有任何解析的、半经典的方法或数值方法可以给出准确的结果. 但是,一个可以用于描述几乎所有 2 维和 3 维强关联量子临界点的重要物理量就是热平衡时间  $\tau_{\text{eq}}$ ,即系统被外界扰动后,通过弛豫回到原来局域热平衡状态所需要的时间. 在量子临界区,它为

$$\tau_{\text{eq}} = C_{\text{eq}} \frac{\hbar}{k_B T}, \quad (4)$$

这里  $C_{\text{eq}}$  是一个无量纲的普适常数,它不依赖于哈密顿量中的微观细节,仅依赖于系统的空间维数或模型中总自旋的对称性. 由于在其他区域内的量子动力学过程,都会需要更长的热平衡时间  $\tau_{\text{eq}}$ ,所以量子临界性最突出的特征就是,具有量子力学所能容许的最短的热平衡时间. 因此,处在量子临界区的系统几乎可以被视为理想流体.

在中子散射实验中,(4)式对量子涨落区域内的自旋涨落谱函数具有重要意义:能量为  $\hbar\omega$  的准粒子的散射强度将仅依赖于热运动能量  $k_B T$ ,而与模型中的能量参量,如交换能  $J$  无关. 这种对  $k_B T$  的依赖关系是量子临界区域的独特性质,它不适用于非临界区域. 在临界区域,不同温度下的测量数值都将落在一条以  $\hbar\omega/k_B T$  为变量的普适曲线上. 实际上,这样的谱函数已经在自旋为 1/2 的 1 维链和 2 维几何阻挫的量子磁体中被观察到,同时在靠近反铁磁量子相变点附近的铜氧化物超导体、含稀土元素的中间金属化合物中也被观测到.

在量子临界点,一些守恒量的运动,如自旋、电荷或动量同样具有不寻常的普适行为. 那些建立局域热平衡的碰撞和耗散过程与确定各种守恒量阻尼系数的过程完全类似,根据(4)式,我们发现阻尼系数也具有普适的形式. 例如,量子临界流体的线性动量,相应的阻尼系数称为剪切粘度,由下式给出:

$$\frac{\eta}{s} = C_m \frac{\hbar}{k_B}, \quad (5)$$

这里  $s$  是熵密度,  $C_m$  是另外一个数量级为 1 的普适无量纲常数. 目前,人们还不能在量子物质中测量到相互作用电子的剪切粘度. 然而,在超冷原子和夸克-胶子等离子体中,这样的测量是很自然的,并且是已经进行了的<sup>[3]</sup>. 量子临界输运性质的普适性同样可以扩展到包括电荷、自旋的输运及其各自的电导行为中去.

在一些简单的例子中,主要是对于绝缘体,量子临界点可以用被称为共性场论(CFT)的数学框架来描绘. 众所周知,统计力学和弦理论涉及一些时空对称性,如重要的相对论不变性和标度不变性. 例如,图 2 所示的平方晶格上的反铁磁体绝缘体,它的临界点就可以用一个以自旋波速代替光速的共性场论来描绘. 那些可以用共性场论来描绘的量子临界点,是量子临界解析理论的最新进展. 这部分原因是人们发现了所谓的 AdS/CFT 对应关系,它将量子临界性与一个

特殊时空(Anti de Sitter)中黑洞视界附近的动力学相联系,这个特殊时空比普通的 CFT 多一维空间维数.令人惊喜的是,(4)式给出的量子临界的特征时间恰好对应黑洞附近的引力场、电磁场的准正则模式的衰减时间,其中温度  $T$  由黑洞的 Hawking 辐射确定.在过去的 2 年里,许多工作都试图将这些弦理论中的想法用于非相对论形式下的量子临界性的研究,并已取得一些可喜的成果<sup>[4]</sup>.

#### 4 金属和超导体

到目前为止,我们讨论的都是绝缘体,但是,绝大多数奇异量子物态和相变的实验研究都集中在金属化合物上.3 种元素或更多种元素可以组成丰富多彩的晶态物质,新的实验发现层出不穷.其中最令人关注的是铜氧化物高温超导体,如  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . 其实,铜氧化物超导体的母体化合物,却是像  $\text{TlCuCl}_3$  一样具有 Neel 序的绝缘体.然而,通过调节 Sr 的相对浓度,可以引入载流子.当载流子浓度足够高时,它就变成良好的金属,进而实现高临界温度的超导电性.在这些变化过程中,伴随着许多有趣的量子相变.最近的例子就是铁磷化物,如  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ ,它同样具有包含超导在内的一系列的量子物态.

在这些具有量子相变的材料中,一个新的、在绝缘体中不存在的重要特征就是费米面.在简单金属中,电子占据动量本征函数的平面波态;那些占据态在动量空间处在费米面以下.由于费米面确定了金属中低能激发态的起始位置,所以费米面具有非常重要的物理意义.电子从费米面下的占据态被激发到费米面之上的未占据态,当金属发生量子相变时,如在 Neel 序刚开始建立时,费米面的形状将会发生剧烈的改变.因此,一个描述金属 Neel 有序量子相变点的理论必须包括自旋涨落的集体激发,即自旋波或自旋三态准粒子,这些在绝缘体中涉及的、与 Neel 序的出现相关的性质,同时还必须考虑费米面形状及其占据电子态的变化.

在过去的 20 年里,人们花费了大量精力试图建立金属中量子相变的最简单的范式,其中有一些理论可以很好地用来处理 3 维体系.但是,2 维体系更为重要,因为大多数有意思的具有金属量子相变的实验体系,如铜基和铁基超导体,其中电子的运动都被约束在晶面内.相应的理论都需要在 2 维空间,考虑自旋和电荷强耦合的性质,但是目前已有的结果非常有限.

对 2 维金属材料,在与费米面变化相关的量子相变的实验研究中,一个非常普遍的现象是所谓的奇异金属行为.其中电阻率随温度的线性依赖关系则是一个非常重要的特征,这个行为与常规金属态的费米液体理论所预言的结果  $\rho \sim \rho_0 + AT^2$  明显不同.图 4 给出了一些奇异金属的例子,图中存在一片形状与前面讨论过的绝缘体量子临界类似的区域,这种相似性为把奇异金属态解释成与费米面改变相关的量子临界性提供了有力支持.在图 4(a)中的铁基超导体  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$  和图 4(b)中的电子型掺杂的铜氧化物超导体  $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  的相图中,同样可以看到费米面的变化与反铁磁性的出现相伴随.

图 4 的另外一个显著特点是,低温下“裸”的量子临界性

被另外的量子物态所覆盖.最为常见的情形是非常规超导电性,如在铜氧化物和铁磷化物超导体中所见.在传统的常规超导体中,Cooper 对的电子波函数在空间是各向同性的;而在非常规超导体中,Cooper 对的电子波函数具有不寻常的空间依赖性,并且在动量空间的不同区域有符号的变化,这已在众多漂亮的实验中被发现.具有反铁磁量子临界性金属的理论,也已给出在临界点附近这种非常规超导不稳定性存在的有力证据.

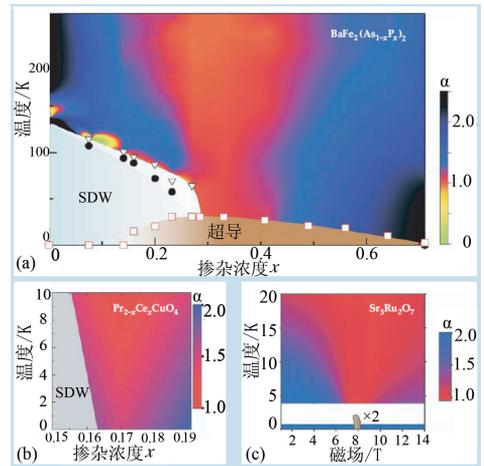


图 4 电阻随温度的依赖关系在各种关联电子材料中的体现,其中色度代表关系式  $\rho \sim \rho_0 + AT^\alpha$  中与温度相关的指数大小,SDW 代表反铁磁自旋密度波有序态

金属量子临界性还有一个有趣的不稳定性,就是所谓的电子线列态,如同复杂流体中出现的液晶序,电子运动自发地破坏了晶体空间旋转的对称性.电子线列态最早是在  $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$  中得到确认的.之后,在铜氧化物和铁磷化物超导体靠近反铁磁有序相附近,人们发现了电子线列态关联的有力证据.

在量子相变点附近,新量子序的不断出现使得量子相变变成材料物理学研究的重要资源,它指导人们不断寻找具有潜在应用价值的新型材料.未来我们需要建立一个能处理多种有序现象及其费米面附近电子激发行为的综合理论.特别是对各种有序态之间的非线性效应需要给出全面的解释,例如,一个长程有序态或其涨落态是如何增强或抑制其他长程有序态的? 这些理解可以帮助人们描述在强磁场下系统的相图,因为磁场在有些系统中提供了另外一个可调参量<sup>[5]</sup>.这种实验已经成为检验理论模型的重要手段.随着过去几年实验方面的快速发展,我们必将建立起系统描述量子临界性和金属中竞争序及强关联效应的新理论.

#### 参考文献

- [ 1 ] Coldea R *et al.* Science, 2010, 327: 177
- [ 2 ] Ruegg C *et al.* Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 205701
- [ 3 ] Shuryak E. Physics, 2010, 3: 105
- [ 4 ] McGreevy J. Physics, 2010, 3: 83
- [ 5 ] Taillefer L *et al.* Annu. Rev. Condens. Matt. Phys., 2010, 1: 51

(清华大学物理系张广铭 编译自 *Physics Today*, 2011, (2): 29)