

有温度的量子物理：指数加速的热态张量重正化群方法

从微观出发，研究相互作用的量子系统，探索其中的量子物态和新奇统计性质是凝聚态物理的重要前沿研究任务。其中，人们特别感兴趣的是两维量子物态及其相关材料，因系统兼具强烈的量子涨落和较为丰富的几何结构，孕育了许多非常有趣且未被人们理解的物理现象，如高温超导、量子霍尔效应、拓扑量子自旋液体态等。近年来大量实验的进展使得关联电子领域兼具理论的趣味和研究的挑战性，例如两维费米子问题的精确计算被誉为凝聚态物理的“圣杯”问题。同时关联量子材料的研究也有非常吸引人的应用前景，例如利用拓扑量子物态中的任意子激发实现拓扑量子计算。

为了更好的理解这些关联电子体系，有效和精确的量子多体模拟方法是十分关键的。其中多体系统热力学量，比如，比热、磁化强度、磁化率等，由于能够直接和量子材料的实验测量进行比较，其有限温度性质精确计算是建立量子材料的正确微观模型并进行深入讨论的基础。目前，量子多体系统的模拟方法主要有量子蒙特卡洛和重正化群方法等。其中，由于著名的“负符号”问题，量子蒙特卡洛方法在阻挫磁性系统和（偏离半满的）费米子系统中无法进行高效的抽样计算。另一方面，重正化群方法没有符号问题，但其目前仍主要集中在基态（绝对零度）的研究，将其推广到有限温度，实现两维量子多体系统热力学性质的精确模拟在理论和实验方面都具有重要的价值。

最近，北京航空航天大学国际交叉科学研究院-物理学院的卓越百人副教授李伟（通讯作者）、博士生陈斌斌（第一作者）、本科生陈磊（共同第一作者），与美国布鲁克海文国家实验室的合作者共同提出了一种新型的量子多体系统有限温度模拟方法——指数加速的张量重正化群方法（XTRG）^[1]，并发表在国际顶级物理学期刊 *Phys. Rev. X* 上。相较于传统方法，XTRG 算法在效率和精度上都有着显著的提升，并可以用于模拟两维问题。

XTRG 方法的主要思想及其与传统方法的比较如图 1 所示。图 1 (a) 展示的是传统方法的线性演化方法（LTRG）：从某一高温开始，制备系统的密度算符，然后每次演化很小的虚时间（倒温度），逐步将系统“冷却”到指定的温度。这个方法的缺点可以从图 1 (a) 中非常明显的看出来，在进入低温区域后降温“速度”很慢（图中温度点非常密集的区域），需要“长时间”的演化才能到达指定的温度。

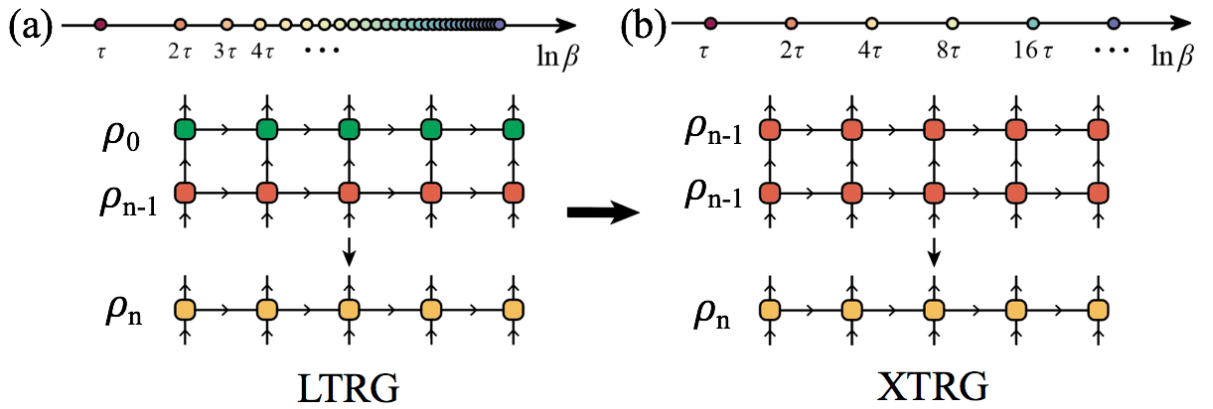


图 1 (a) 线性张量重正化群方法 (LTRG) ; (b) 指数型张量重正化群方法 (XTRG)

最近，人们通过共形场论的推导展示^[2,3]，在一维多体临界系统中热态的纠缠熵随着倒温度 β 呈对数增长 $S_E \sim \frac{c}{3} \ln(\beta)$ 。这就意味着，系统只有在温度减半（倒温度加倍）的时候才会发生纠缠熵的显著变化。这启发我们想到采用指数型的演化方式【图 1 (b)】，将系统快速“制冷”，指数加速地接近系统的低温性质。这样的加速是可实现的，因为纠缠熵呈现对数增长，使得计算代价只会随计算步数呈代数增长；同时大大减少了计算迭代步数及剪裁误差，使得量子系统低温性质的精确高效模拟成为可能。

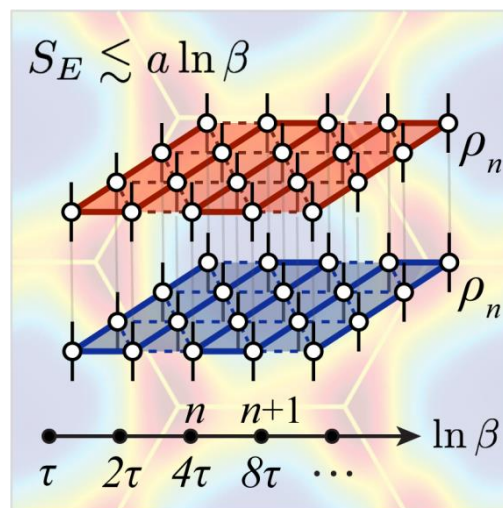


图 2 XTRG 算法示意图

如图 2 所示，基于这一想法，我们提出了指数型张量重正化群方法（XTRG）：从某一高温的密度算符 ρ_0 出发，在每次迭代中，将上一步迭代得到的密度算符 ρ_{n-1} 投影到它本身得到本次迭代的密度算符，即 $\rho_n = \rho_{n-1} \cdot \rho_{n-1}$ ，直到温度达到 β 。

XTRG 可以应用于精确模拟二维量子磁性系统。在图 3、4 中，我们展示 XTRG 模拟二维量子自旋格点模型的结果，包括图 3 中的正方格子 XXZ 海森堡模型和图 4 中的阻挫三角晶格海森堡模型。

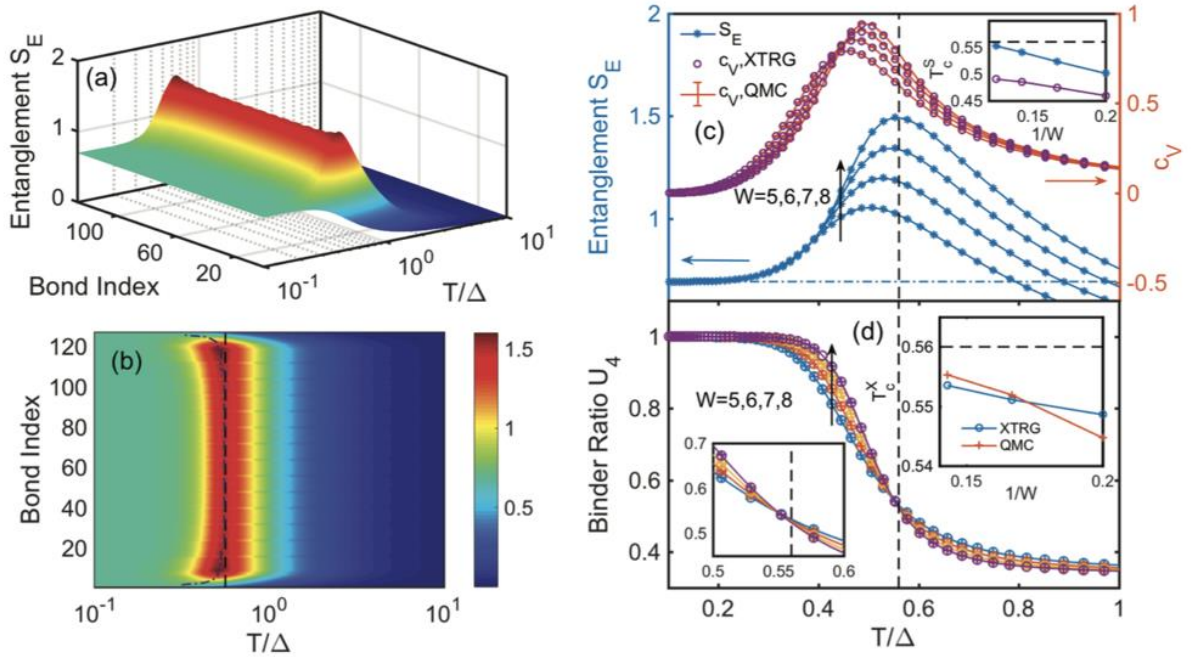


图 3 二维正方格子海森堡 XXZ 模型的有限温度相变。（a-b）纠缠熵在不同温度、不同键指标下的轮廓；（c）纠缠熵（左）、比热（右）在不同温度 T 下的变化；（d）Binder ratio U_4 在不同温度下的变化。

在图 3 中，我们应用 XTRG 计算了二维正方格子海森堡 XXZ 模型（轴各向异性参数 $\Delta=5$ ）在不同温度下的纠缠熵、比热、Binder ratio U_4 等有限温度性质。我们发现，纠缠熵的峰值出现在体系的精确相变温度 $T_c=0.56^{[4]}$ 附近[图 2(a-b)]。通过计算不同尺寸系统的 Binder ratio，收集它们的交叉点进行外推，我们得到了体系的相变温度 $T=0.554$ ，这一结果十分精确，其误差不到 1%。通过正方格子海森堡模型的计算，我们确认了 XTRG 可以用于精确模拟量子系统的有限温度性质，确定其相变温度。

在图 4 中，我们考虑三角晶格反铁磁体。自从 Anderson 在阻挫三角晶格反铁

磁海森堡模型中提出共振价键态（RVB）^[5]以来，阻挫磁体持续不断地吸引着人们。很早的研究中人们就发现，三角晶格反铁磁体的热力学性质存在反常，与人们在基态研究中公认的 120° 长程序存在一定矛盾。由于长期缺乏有效模拟多体系统低温性质的数值方法，人们在问题提出后长达数十年间并没有办法给出明确方案来理解这一热力学反常。

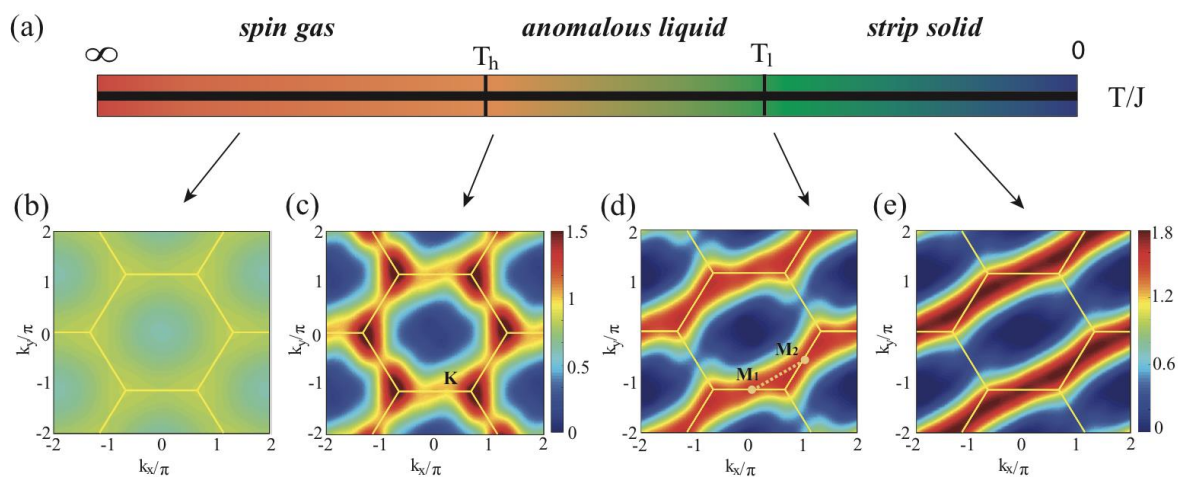


图 4 三角格子海森堡模型的有限温度相图（从右往左）：高温顺磁区；反常“液体”区；条带状“固态”区

通过模拟卷在窄（宽度 $W=4$ ）三角晶格圆筒上的反铁磁海森堡模型，我们发现，相比于正方格子，三角晶格反铁磁体的热力学性质更加有趣，系统中存在两个温度尺度。图 4 展示不同温度下的自旋结构因子 $S(q)$ ，和对应的体系有限温度相图，其中包括：（1）高温顺磁，自旋结构无显著特征，体系处于“气体”相；（2）中间温度， 120° 序与“条带状”序的强烈竞争，并激活了“旋子”激发，体系处于反常液体相；（3）低温区，由于体系的有限尺寸效应，“条带状”序最终胜出。通过 XTRG 的模拟，我们“生动”地观察随着系统冷却，系统磁结构的变化，这充分展现了 XTRG 在模拟多体系统低温性质的优势。

除了阻挫反铁磁体，对于相互作用费米问题、有限温度动力学性质等非常吸引人的问题，XTRG 也大有可为。我们期待在不久的将来能够在这些方面取得更大的突破。

李伟, 物理科学与核能工程学院, 副教授, E-mail:w.li@buaa.edu.cn

参考文献

[1]B. Chen, L. Chen, Z. Chen, W. Li*, and A. Weichselbaum, Exponential Thermal Tensor Network Approach for Quantum Lattice Models, *Phys. Rev. X* 8, 031082 (2018).

[2]T. Barthel, One-dimensional quantum systems at finite temperatures can be simulated efficiently on classical computers, arXiv:1708.09349.

[3]J. Dubail, Entanglement scaling of operators: a conformal field theory approach, with a glimpse of simulability of long-time dynamics in $1 + 1d$, *J. Phys. A* 50, 234001 (2017).

[4]S. Göttel, S. Andergassen, C. Honerkamp, D. Schuricht, and S. Wessel, Critical scales in anisotropic spin systems from functional renormalization, *Phys. Rev. B* 85, 214406 (2012).

[5]P. W. Anderson, Resonating valence bonds: A new kind of insulator, *Mater. Res. Bull.* 8, 153 (1973).