# 量子相变与解禁闭量子相变介绍

郭文安

北京师范大学物理系

2023年4月





### 相变基础知识

### 相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model,关联函数 数值模拟:蒙特卡洛方法 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets



### 相变基础知识

相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数 数值模拟: 蒙特卡洛方法 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets

#### •相(Phase):

热力学系统(或它的一部分)如果具有均匀的物理性质,称为处于某相

- 传统上物态分类: 固相, 液相, 气相, 等离子体
- 现代观点(Landau): 相由对称性的破缺刻画





固体: 晶格破缺了空间平移和旋转对称性,不同于液体 不同的晶格结构视为不同的相: 破缺对称性的方式不同 液体和气体都没有破缺平移和旋转对称性,实际是一个相

• 相变(Phase Transition): 物质性质的不连续或者不光滑, 突兀的转变

- 从一种相转变成另一种相:比如冰融化就是水的固液相变
- 同一个相也可以: 气液相变 (100度以下烧水, 可避免)

## 丰富多彩的相变与临界现象

- 热力学相变(或经典相变):温度或者说热带来涨落,热涨落驱动
  - ► 气液固三态之间的转变 ► 超导体与正常导体的转 安
  - ▶ 铁磁, 顺磁, 反铁磁之间
     ▶ 超流与正常流体的转变
- 量子相变:零温,没有热涨落,由量子涨落驱动的转变 由调节外参量,改变基态.外参量可以是:压力,磁场强度,参杂浓度。
  - ▶ BEC的超流-Mott绝缘体转 变
  - ▶ 铁磁到量子顺磁

- ▶ Neel 反铁磁到量子顺磁
- 磁性的绝缘体通过掺杂转 变成高温超导体

相变与临界现象总伴随着热力学量的奇异性:

#### 不连续、发散或导数发散!

熟悉的物理:  $\frac{dx}{dt}, \frac{d^2x}{dt^2}, \nabla V$ 可导, 光滑



大量粒子的集体行为(类比于长时间行为)可以非常不同于单个粒子(类比于有限时间行为),

宏观性质变化可以不光滑:相变

# 现代物理学把相变分成两类

### • 一级相变(First Order Phase Transition):



- 连续相变(continuous phase transition),
  - 对称性自发破缺,系统性质(对称性)整体转变,不是一个相从另一个相中 '生长'出来



- 连续相变点称为临界点(Critical Point):高温对称相小磁铁方向乱,低温对称破缺:指向特定方向
- 系统表现出非常特殊的性质称为 临界现象(Critical Phenomena)
  - 通常比热, 磁化率等自由能二级导数发散, 又称二级相变

# 临界现象更有兴趣!

热力学量的发散可以用临界指数来描述

临界指数

•

### 以单轴各向异性铁磁体为例



# 临界指数



from K.S. Huang

• 靠近*T*<sub>c</sub>,磁化率

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} \propto t^{-\gamma}, \quad t = (T_c - T)/T_c$$

▶ 临界指数

$$2D: \gamma = 7/4; \quad 3D: \gamma = 4/3$$

• 在*T*<sub>c</sub>处,

 $h\propto m^{\delta}$ 

▶ 临界指数

 $2D: \delta = 15; \quad 3D: \delta = 5$ 

临界指数



比热 • 3D 情况

$$c \propto |t|^{-\alpha}, \quad t = (T_c - T)/T_c$$

▶ 临界指数

 $\alpha \approx 0.1096 \pm 0.0005$ 

自然界里的新常数?

- 2D 特殊, 对数发散
  - $c \propto -\ln(t).$

 ▶ 临界指数 可以认为α = 0.



- 上面的现象在所有临界点都类似, 但临界指数可以不同
- 很多完全不同的相变却有相同的临界指数一普适类 汽液临界点α与单轴铁磁体(3D)的一样!
- 核心的问题是对称性, 与细节无关

讨论相变问题发展出来的理论和想法都可以直接应用到粒子物理,宇宙 学.....

比如真空,可以处于不同的相,大爆炸后冷却过程中发生多次相变.....

普适性的出现还与尺度有关: Nature is organised by Scale

- little things affect big things: 粒子→ 核→ 原子→ 化学或凝聚态系统→ …
   而不会相反: 星象学
- but rarely affect very big things, but slightly bigger things, and so on 研究椋鸟群聚飞行行为的动物学家不需要研究基本粒子的规律 牛顿, Einstein 不需要知道量子力学就可以写下他们的方程





• 通过研究相变,人们提出了重整化理论,通过它我们可以同时理解不同尺度(scale)的物理: Higgs boson 和椋鸟的群聚 在不同的尺度上涌现 (emerge)出该尺度上的first principle



### 相变基础知识

### 相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model,关联函数 数值模拟:蒙特卡洛方法 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets

# 相互作用多粒子系统的描述:统计物理

▶ 微观状态

- 经典系统,可认为任意力学量与H对易,每个 微观状态Γ有确定能量E(Γ) = H(Γ)
- 平衡态配分函数(partition function)

$$Z = \sum_{\Gamma} e^{-E(\Gamma)/k_B T} = \sum_{\Gamma} W(\Gamma)$$

每个微观状态出现的几率由温度和该状态的能量决定: 正则分布(Canonical distribution)

$$p_{\rm eq}(\Gamma) = W(\Gamma)/Z$$

物理量的统计期望值:  $\langle A \rangle = \sum_{\Gamma} A(\Gamma) \frac{W(\Gamma)}{Z}$ 

Peq带来涨落(同样的系统,同样的参数,不一样的物理量) 本质是热涨落





# 相互作用多粒子系统的描述:统计物理

▶ 微观状态

• 量子系统,哈密顿量的本征态不容易知道

• 平衡态配分函数

$$Z = \operatorname{Tr} e^{-H/k_B T} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H} | \alpha \rangle$$

|α〉是任意正交完备基矢(也可以是|E〉) 物理量的统计期望值

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \operatorname{Tr} \{ A \mathrm{e}^{-\beta H} \}$$

当温度 $T \rightarrow 0$ ,  $\langle A \rangle = \langle 0 | A | 0 \rangle$ 

当A与H没有共同本征态时,带来涨落,这是量子涨落(系统处于 同样的量子态,可是测量结果可以不同)







#### 相变基础知识

相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model, 天联函数 数值模拟:蒙特卡洛方治 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets

## Ising model (经典), 描述相变的真空球形鸡

描写单轴铁磁体(可以在任意晶格上,以二维正方晶格为例)



$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_k s_k; \quad s_k = \pm 1$$
微观状态 $\Gamma = (s_1, s_2, \cdots, s_N).$ 总磁矩 $M(\Gamma) = \sum_k s_k$   
•  $J > 0$ ,铁磁(ferromagnetic)  
•  $J < 0$ ,反铁磁(antiferromagnetic)

当系统处于热平衡

$$\langle M \rangle = \sum_{\Gamma} M(\Gamma) p_{eq}(\Gamma)$$

▶ 在磁性和相变理论中非常重要

▶ 也是其它统计物理问题的有效模型: 格气(lattice gas), 合金, 原子在表面的吸附问 题等

如果没有外磁场,



• 自由能密度

$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \approx \frac{\bar{E}}{N} - k_B T \frac{\ln \Omega(\bar{E})}{N}$$

 能量与熵的竞争:高温无序, *Ē* → Ω极 大,低温有序*Ē* → *E*极小



## Onsager 的里程碑

看似简单的Ising模型,求解异常困难

对二维Ising模型的求解是统计物理理解相变问题的里程碑!





临界点附近比热对数发散  $c \propto k_B \ln |(T - T_c)/T_c|$ 

# 杨振宁的磁化强度





临界温度以下
$$T < T_c$$
:  
 $m = (1 - \frac{1}{\sinh^4 2/T})^{1/8} \propto (\frac{|(T - T_c)|}{T_c})^{1/8}$ 

```
指数严格为1/8
```

Monte Carlo simulation: 直接求和或积分不可能或不容易时的办法 以Ising model 为例,考虑任意物理量A,计算它的统计平均  $\langle A \rangle = \sum_{\Gamma} A(\Gamma) p(\Gamma)$ 

直接求和不现实: 2<sup>N</sup>个微观状态(位形)

# 重要性抽样(Importance sampling)

[Metropolis, Rusenbluth, Rosenbluth, Teller, and Teller, Phys.Rev.1953]

• 构造一个**随机过程**,得到一系列微观状态 $\Gamma_1, \Gamma_2, \cdots, \Gamma_M$ .

 $\Gamma_{t+1}$ 由 $\Gamma_t$ 按照一定的跃迁几率(transition prob.) $T(\Gamma_{t+1}, \Gamma_t)$ 得到

当 $M \to \infty$ ,任一给定位形 $\Gamma$ 出现的**频率** $\frac{N(\Gamma)}{M} = \frac{e^{-E(\Gamma)/k_BT}}{Z}$ .

 实现按位形的正则分布概率来抽取位形,而不是在相空间等概率地抽取 位形

$$\langle A 
angle pprox A_M = \sum_{\Gamma} rac{N(\Gamma)}{M} A(\Gamma) = rac{1}{M} \sum_l^M A(\Gamma_l)$$

## show

## 理解相变: 序参量

• 如果外场为零,严格按配分函数计算m,对称性要求m永远为零,因为

$$m = \frac{1}{N} \langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\Gamma} M(\Gamma) p(\Gamma)$$

对任意一个 $\Gamma = (s_1, \dots, s_N)$ ,都有唯一一个 $\Gamma' = (-s_1, \dots, -s_N)$ ,  $M(\Gamma) = -M(\Gamma'), \quad p(\Gamma) = p(\Gamma')$ 

这称为翻转对称性(Z<sub>2</sub>).

•  $T > T_c$  在m = 0附近形成单峰,  $T < T_c$  在 $\pm \bar{m}$ 形成对称双峰



- 在热力学极限下
  - 相变破坏了这种对称性,称为对称性自发破缺
  - ▶ 破缺的程度由m来度量,称为序参量

## 关联函数

*T* ≫ *T<sub>c</sub>* 热涨落  $\langle s(r) \rangle = \langle s \rangle = 0$ , *T* → 0. 对称破缺

 $\langle s(r)s(0)\rangle \approx \langle s \rangle^2 \approx 1^2$ , 平移不变 $\rightarrow m = \langle s(r) \rangle = \langle s \rangle$ 是序参量

• 定义涨落关联函数 $G(r) \equiv \langle (s(r) - \langle s \rangle)(s(0) - \langle s \rangle) \rangle = \langle s(r)s(0) \rangle - \langle s \rangle^2$ 

$$G(r) \propto rac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}$$

•  $T \rightarrow T_c$ ,

$$\xi \propto t^{-\nu} \to \infty,$$

ν,η是两个最重要的临界指数,通过标度关系决定所有指数

磁化率与序参量的涨落关系

$$\chi \propto \langle s^2 
angle - \langle s 
angle^2 \propto \int G(r) d^d r \propto \xi^{d-\eta} \propto \left| t 
ight|^{-
u(d-\eta)}$$

G(r)的代数衰减,或者说,  $\xi$ 的发散,导致 $\chi$ 在 $T_c$ 发散!



$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

相变分别破缺不同的对称性

- Z<sub>2</sub> 对称性
- 0(2) 对称性
- O(3) 对称性

热致相变(经典相变)有没有一般性的理解?

- 由热涨落驱动,在临界点关联长度发散,导致奇异性
- 朗道:利用序参量来区分具有不同的对称性的相
- ▶ 粗粒化的连续场论: LGW Hamiltonian

$$H(\mathbf{\Phi}) = \int dV ((\nabla \mathbf{\Phi})^2 + \frac{1}{2}s(T)\mathbf{\Phi}^2 + \frac{1}{4}u(T)(\mathbf{\Phi}^2)^2$$
$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mathbf{\Phi}(x) \ e^{-H(\mathbf{\Phi})}$$

其中 $\Phi(\mathbf{x})$  是局域序参量, 粗粒化场 $\Phi(\mathbf{x}) \sim \sum_{i \in V} \mathbf{S}_i / V$ *s*, *u* functions of *T*.

▶  $s \sim (T - T_c)$ 

▶  $T < T_c$ 长程序 $m = \langle \Phi \rangle \neq 0$ : 对称性自发破缺



2D Ising transition



平均场理论

• 忽略其他可能的位形,只看最可几位形

$$\frac{F}{k_BT} = -\ln Z \propto \frac{1}{2}s\Phi^2 + \frac{1}{4}u\Phi^4 + \cdots$$

• Landau假设:  $s = s_0(T - T_c), u > 0$ , 求使F极小的 $\Phi$ .

$$\blacktriangleright$$
  $T \geq T_c, \Phi = 0$ 

$$T < T_c, \mathbf{\Phi} = \sqrt{-s_0(T - T_c)/u}$$

对单轴铁磁系统,  $\Phi = m$ 



## 平均场理论

还可以计算临界指数:

• 比热不连续, 但是不发散,  $c \propto (T - T_c)^{-\alpha}$ ,  $\alpha = 0$ 

• 磁化强度: 
$$m \propto (T - T_c)^{1/2}$$
,  $\beta = 1/2$ 

• 磁化率: 
$$\chi \propto (T - T_c)^{-1}$$
,  $\gamma = 1$ 

• 状态方程: 
$$h \propto m^3$$
,  $\delta = 3$ 

致命的弱点:

• 与空间维数无关

• 所有问题临界指数一样

#### 过于普适了!

# 相变的重整化群理论

Wilson 计算机很好,但数学天分差点儿 能不能不直接求解配分函数,而找到奇异性的起源?

## Wilson 发展了重整化群(Renormalization Group)理论

▶ 普适类:临界指数由相互作用的对称性和空间维数决定

例如: 2D Ising, 3D Ising, 3D O(2), 3D O(3)



RG 变换:保证微观尺度a不变的前提下,收放系统



• 步骤  

$$t \propto (T - T_c), h \propto$$
外场  
 $H(t, h, u) \xrightarrow{粗粒化} \bar{H}(\tilde{t}, \tilde{h}, \tilde{u}) \xrightarrow{rescale} H'(t', h', u')$ 

• 总自由能不变,密度增加了bd倍

 $f(t, h, u) = b^{-d} f(t', h', u'),$ 

•  $\xi' = \xi/b$ , 临界点关联长度无穷大:  $\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}$ , 因此对应变换的不动 点

$$(t', h', u') = R_b(t, h, u) \to (t^*, h^*, u^*)$$



- 不稳定方向决定临界指数(一般有两 个):ν,η
   流向不动点的方向称为非关涉
- 流向不动点的方向称为非关涉场(irrelevant)
# RG flow 和普适类



- 不稳定方向决定临界指数(一般有两个): ν, η (y<sub>t</sub>, y<sub>h</sub>)
- 不同的物理模型可以流向同一 个不动点
- 一个不动点决定一个普适类!



Fisher, RMP, 1998

 $t' = tb^{\mathbf{y}_t}, h' = hb^{\mathbf{y}_h}, u' = ub^{\mathbf{y}_u}$ 

### 3D XY model and 3D q-state clock model

自旋在二维平面内,哈密顿O(2)旋转不变

$$H = -\sum_{\langle i,j
angle}ec{S}_i\cdotec{S}_j = -\sum_{\langle i,j
angle}\cos( heta_i- heta_j)$$



Three fixed points

- $T > T_c$  Gaussian fixed point
- $T = T_c$  XY fixed point
- *T* < *T<sub>c</sub>* XY low T fixed point (Nambu-Goldstone)



- $T > T_c$  Gaussian fixed point
- $T = T_c$  XY fixed point, O(2) 对称性涌现
- $T < T_c Z_q$  low T fixed point
- $\lambda_q$  称为dangerously irrelevant field: at  $Z_q$  fixed point,  $\lambda_q \neq 0$



#### 相变基础知识

相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数 数值模拟: 蒙特卡洛方泊 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets



材料CONb2O6: Co2+离子的自旋取向只能与晶体场轴向平行或反平行

量子相变

量子横场Ising模型  $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^z s_j^z - h \sum_k s_k^x$ J > 0与经典情况不同,我们考虑T = 0▶  $h \ll J$ , 基态 $|0\rangle = \prod_i |z, +\rangle_i$ 或者 $\prod_i |z, -\rangle_i$ ▶ h >> J, 基态 $|0\rangle = \prod_i |x, +\rangle_i$  注意 $s^z$ ,  $s^x$  不对易, 导致量子涨落!

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle \propto \exp(\frac{-|i-j|}{\xi})$$

▶  $h \rightarrow h_c$ , 临界!

$$\xi \sim \left(h-h_c
ight)^{-
u} 
ightarrow \infty, \quad \langle s^z_i s^z_j 
angle \propto rac{1}{|i-j|^\eta}$$

▶ 在h<sub>c</sub>同样导致磁化率的发散!



 $\lim_{|i-j|\to\infty} \langle s_i^z s_j^z \rangle \approx 1$ 

另外一个量子相变的例子

▶ 反铁磁Néel-顺磁量子相变: demerized AF Heisenberg model

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i \cdot S_j$$

$$J_{ij} = J_2, J_1: g = J_2/J_1$$



- *g* < *g<sub>c</sub>*, 反铁磁Néel 序
- g > g<sub>c</sub>, dimer 相; dimer 波函数是(|↑↓⟩ - |↓↑⟩)/√2的直积态,量子顺磁.

### Quantum rotor model

- 每个格点上有一个转子(rotor): 粒子在N 1 维球面上运动. n是它的位置算符, L是它的角动量算符。
- Hamiltonian

$$H_{R} = \frac{Jg}{2} \sum_{i} \mathbf{L}_{i}^{2} - J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{n}_{i} \cdot \mathbf{n}_{j} = \int d\mathbf{x} \left( \frac{Jg\mathbf{L}^{2}}{2} + \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{n})^{2} \right)$$

1/(Jg)转动惯量, J 耦合作用

• g ≫ 1,转动动能主导,量子顺磁

$$\langle 0|\mathbf{n}_i\cdot\mathbf{n}_j|0\rangle\sim e^{-|x_i-x_j|/\xi}$$

• g ≪ 1, 耦合主导, 磁有序

$$\lim_{x_i-x_j|\to\infty} \langle \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j \rangle \approx 1$$



Bose-Hubbard 模型可以描述光晶格中的玻色冷原子



$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} a_i^+ a_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i$$

- t 反映了粒子在近邻格点间的隧穿能量
- U 描述单个格点上的原子间的相互作用(我们只研究 U > 0)
- μ 是化学势



1.  $t \gg U$ , 粒子的位置完全不确定, 系统处于超流相(SF)





2.  $t \ll U$ ,等量填充时,每个格点占据相同数目的原子使总能量取最小,系统 处于 Mott 绝缘体相(MI)





 $|\psi_{MI}
angle_{t=0} \propto \prod^M (a^+_i)^n |0
angle$ 





MI: integer filling, insulating, gaped
 SF: any filling fraction, gapless



量子相变的一般描述

考虑一个Hamiltonian

$$H(g) = H_0 + gH_1$$

▶ [H<sub>0</sub>, H<sub>1</sub>] = 0: 同时对角化,激发态与基态交叉于g<sub>c</sub>:一级相变



▶  $[H_0, H_1] \neq 0$ : 当 $L \rightarrow \infty$ , 两个能级在 $g_c$ 无限靠近, 基态对称性发生变化

• 关联长度发散

$$\xi \sim (g - g_c)^{-\nu},$$

 能隙(或特征能量涨落) △ 定义动力学临界 指数z

$$\Delta \sim (g - g_c)^{z\nu} \sim \xi^{-z}, 1/\Delta = \xi_{\tau}$$

# 经典与量子的映射

考虑一条经典Ising 链, 无外场(B = 0) M 1 2 … i … j …

其配分函数可以通过转移矩阵计算

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s_i\}} e^{-H/T} = \sum_{\{s_i\}} \prod_{i=1,m} T_1(s_i, s_{i+1})$$

其中
$$T_1(s_1, s_2) = e^{Ks_1s_2},, 其中K = J/T$$
  
将其理解为矩阵元

$$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}(T_1^M)$$

其中

$$T_1 = \left(\begin{array}{cc} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{array}\right),$$

称为转移矩阵(transfer matrix)



• T1的本征值为

$$\epsilon_{1,2} = e^{K} \pm e^{-K}$$

• 本征矢为

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix} = |x,+\rangle, \qquad \qquad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\-1 \end{pmatrix} = |x,-\rangle$$

• 自由能密度

$$f = -\frac{T\ln \mathcal{Z}}{M} = -\frac{T}{M}\ln(\epsilon_1^M (1 + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1})^M) \approx T\epsilon_1$$



• 关联函数

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{s} e^{-H/T} s_i s_j = \frac{1}{\mathcal{Z}} \operatorname{Tr}(T_1^i \sigma_z T_1^{j-i} \sigma_z T_1^{M-j})$$

When  $M \to \infty$ , 利用 $T_1$ 本征矢为基矢, 注意 $\sigma_z | x, + \rangle = | x, - \rangle$ 

$$\langle s_i s_j \rangle = \left(\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}\right)^{j-i} = (\tanh K)^{j-i}$$

关联长度ξ

$$e^{-\frac{i-i}{\xi}} = (\tanh K)^{j-i}, \quad \frac{1}{\xi} = -\ln(\tanh K)$$

当 $T \rightarrow 0, K \rightarrow \infty$ , 有 $\xi \rightarrow \infty$ . 可认为 $T_c = 0$ .

## 经典与量子的映射

我们改写

$$T_1 = e^K \begin{pmatrix} 1 & e^{-2K} \\ e^{-2K} & 1 \end{pmatrix} = e^K (1 + e^{-2K} \sigma_x)$$
$$\approx e^K (1 + \frac{1}{2\xi} \sigma_x) \approx e^{K + \frac{1}{2\xi} \sigma_x}$$

$$T_1 = e^{-\mathcal{H}_Q}$$

其中 $\mathcal{H}_Q = -K - \frac{1}{2\xi}\sigma_x$ 

$$\mathcal{Z} = \operatorname{Tr}(T_1)^M = \operatorname{Tr} e^{-M\mathcal{H}_Q} = \operatorname{Tr} e^{-\frac{\mathcal{H}_Q}{1/M}}$$

- 这是一个温度 $T = 1/M \rightarrow 0$ 的量子系统!
- 一维无限长经典Ising链等价于零温下一个磁场中的量子自旋!
- $1/\xi = -\ln(\tanh J/T)$ 对应横向磁场.
- 经典系统'相变'温度为T = 0,零温量子系统'相变'磁场为1/ξ
- 能隙Δ = 1/ξ

## (D+1) 维经典⇔D 维量子映射: 转移矩阵



▶ 量子系统的倒温度 $\beta = M \rightarrow \infty$ 

- 二维经典Ising模型  $\rightarrow$  一维量子横场Ising模型,  $J/T \rightarrow J/h$
- 二维经典Heisenberg 模型→一维量子rotor 模型(N = 3)

# 量子蒙卡可以理解为寻找量子模型的经典对应

- An SSE configuration
  - +1 +1 -1 -1 +1 -1 +1 -1



$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\}}{\text{Tr}\,e^{-\beta H}} \rightarrow \frac{\sum_{c} A_{c} W_{c}}{\sum_{c} W_{c}}$$

- Sz basis
- diagonal and loop updates
- observables and estimators
  - energy estimator : number of operators,  $H_c = -n/\beta$
  - spin stiffness estimator : winding number fluctuations

$$\rho_s = \frac{\langle W_\alpha^2 \rangle}{L^{d-2}\beta}$$

- staggered magnetization  $m_{sz} = \sum_{i} (-1)^{i_x + i_y} s_{iz} / N$
- • <del>缺</del>陷:有些量子模型很难找到非负权重的经典 表示→符号问题

# 量子相变的场论描述

- 粗粒化场 $\Phi(\mathbf{r}, \tau) \sim \sum_i \mathbf{s}_i(\tau) / \Delta V$
- •时间可以'转动'为温度
- 通过路径积分 把D维量子系统 映射到D + 1维经典系统, 得到Landau-Ginzburg-Wilson形式的作用量

$$S(\mathbf{\Phi}) = \int dV d\mathbf{\tau} (v^2 (\partial_{\tau} \mathbf{\Phi})^2 + (\nabla_x \mathbf{\Phi})^2 + \frac{1}{2} s \mathbf{\Phi}^2 + \frac{1}{4} u (\mathbf{\Phi}^2)^2$$
$$Z = \int \mathcal{D} \mathbf{\Phi} (x, \mathbf{\tau}) \ e^{-S(\mathbf{\Phi})}$$

- Wilson注意到统计物理与量子场论的深刻联系
- 一般的量子相变都可以用通常的Landau-Ginzburg-Wilson 理论来描述 时空维度D+1和对称性决定普适类





## AF Néel-Paramagnetic 量子相变

• 二维热力学极限,基态破缺O(3)对称性,Néel态

$$\langle \mathbf{m}_s \rangle = \langle \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{S}_i (-1)^{x_i + y_i} \rangle \neq 0$$





普适类: 3D O(3), 已被量子蒙特卡洛模拟证实, LGW 成功!
 实验实现

### What's special about quantum criticality?

- large T > 0 quantum critical "fan" where T is the only relevant energy scale
- 物理量遵从由T = 0临界点决定的power laws



• 改变T等效于改变虚时尺寸 $L_{\tau}$ ,利用有限尺寸标度分析可以得到如下power laws

$C \propto I$	uniform 磁化玄
$C \propto T^2$	比热
$\xi \propto T^{-1}$	关联长度

量子系统的'经典'相变

一个量子系统,固定参数,比如J,g,改变温度,会发生什么?

量子系统的'经典'相变

一个量子系统,固定参数,比如J,g,改变温度,会发生什么?

升高温度后,量子涨落在'宏观小,微观 大'的所谓'介观'尺度内被平均掉:通常 的热涨落驱动的相变,也就是'经典'相 变



- 二维量子Ising 模型 如果h = 0, 在零温下沿z方向自发磁化(有序)。随着温度升高,也会在 居里点变成顺磁态。
   这个相变就是普通的Ising模型相变!
- 在T = 0, 改变横场h,发生的是量子相变, 等价于一个3维经典Ising 模型的热相变!



#### 相变基础知识

相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model, 天联函数 数值模拟: 蒙特卡洛方泊 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

• Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets

### 是不是所有的量子相变都可以纳入朗道-金兹堡-威尔逊范式?

#### 是不是所有的量子相变都可以纳入朗道-金兹堡-威尔逊范式?

事情没有这么简单 或者说比这有趣!



这三位2016年诺贝尔奖获得者将<mark>拓扑</mark>引入了物理学

拓扑相变

$$H = -\sum_{\langle i,j
angle} ec{S}_i \cdot ec{S}_j = -\sum_{\langle i,j
angle} \cos( heta_i - heta_j)$$

没有长程序的二维XY类模型中发生的相变:

#### Kosterltiz-Thouless相变





• 存在拓扑激发(或缺陷): 涡旋



涡旋拓扑荷

$$q = \frac{1}{2\pi} \oint \nabla \theta_{vor} \cdot d\vec{l}$$

拓扑相变

$$H = -\sum_{\langle i,j 
angle} ec{S}_i \cdot ec{S}_j = -\sum_{\langle i,j 
angle} \cos( heta_i - heta_j)$$

没有长程序的二维XY类模型中发生的相变:

### KosterItiz-Thouless相变





- 正负涡旋在T < T<sub>c</sub>时束缚在一起
- T > T<sub>c</sub>涡旋对解束缚导致相变
- 不能用局域序参量描述



# Haldane 的推广

一维量子反铁磁Heisenberg 模型

$$H_0 = J \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$



受KT思想启发,Haldane注意到了路径积分中的拓扑

$$S_n = \frac{1}{2g} \int d\tau \int dx \left[ \frac{1}{c^2} (\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \tau})^2 + (\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x})^2 \right] + S_B; \quad \mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mathbf{n} \ \mathrm{e}^{-S_n}$$

 $\mathbf{n} = (-1)^x \mathbf{S}_i$ ; S<sub>B</sub>是拓扑项, 来自量子力学Berry phase, 带来干涉效应

- 拓扑缺陷skyrmion
- skyrmion number Q类似于涡旋的拓扑荷,  $S_B = i2\pi SQ$
- 自旋整数的系统 $exp(S_B) = 1$ ; Haldane phase, 拓扑导致的边缘态
- 自旋半整数系统exp $(S_B) = (-1)^{\varrho}$ ;临界态 $G(R) \propto r^{-\eta}$



$$Q = \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{x} \ \mathbf{n} \cdot (\partial_1 \mathbf{n} \times \partial_2 \mathbf{n})$$

二维系统?

 在AF Néel序,由于序参量平滑变化,相邻两条链的Berry phase 抵消,即 使*S* = 1/2系统*S*<sub>B</sub>也不起作用

Chakravarty, Halperin, Nelson, PRB 39, 2344(1989)

• 如果考虑引入竞争项,并导致离开反铁磁相的相变,情况就不同了

$$H = J \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + gH_1$$

Demerized Heisenberg 模型每个原胞中有偶数个S = 1/2自旋,

它的无序态是<del>平庸的顺磁态</del>,拓扑激发在其 中不起作用,只是破坏长程序

可以用LGW理论描述,属于3D O(3)普适类

• 更有趣的非磁性基态;每个原胞有一 $\uparrow S = 1/2$ 自旋



# 非磁性而非平庸基态

• 
$$\langle \mathbf{m}_s \rangle = \langle \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{S}_i (-1)^{x_i + y_i} \rangle = 0$$

▶ Valence bond(价键态或自旋单态) <del>≠ → </del>

- resonating valence-bond (RVB) 自旋液体(spin liquid)
   没有任何长程序
- valence-bond solid (价键固体VBS) 破缺了晶格的平移和旋转对称性

VBS 序参量(D<sub>x</sub>, D<sub>y</sub>)

$$D_x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (-1)^{x_i} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\hat{x}}, D_y = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (-1)^{y_i} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\hat{y}}$$

$$\langle (D_x, D_y) \rangle \neq 0$$

VBS由拓扑激发导致 Read and Sachdev, PRL 62, 1694(1989)

• 从Néel到VBS的相变是怎样的?





# Deconfined quantum criticality 解禁闭量子相变

从Néel-VBS的连续相变: 与LGW理论不同 Senthil et al Science (2004)



- 顺磁相quadrupled monopoles 导致VBS: relevant Read and Sachdev,PRL 1989
- 相变点处拓扑激发不起作用: irrelevant, 3D defect-suppressed O(3)普适类
- 后果很严重: violate Landau's rule;
   既不是3D O(3) 也不是3D O(2); 3D Z<sub>4</sub>模型
   中Z<sub>4</sub> 各向异性是dangerously irrelevant

利用spinon场表示的场论

- 两边的序参量都由自旋1/2的spinon场得到
- NCCP<sup>1</sup> action

$$\mathcal{S}_z = \int \mathrm{d}r^2 \mathrm{d}\tau [|(\nabla - iA)z|^2 + s|z|^2 + u(|z|^2)^2) + \kappa(\nabla \times A)^2]$$

• VBS一侧spinon感受到线性势:confined,在临界点deconfine



Q的改变对应monopole

## Expected RG flows in DQC



Skyrmion的dangerously irrelevant行为类似于3D Z<sub>4</sub> models:

### Z<sub>4</sub> 各向异性的dangerously irrelevant

- correlation length  $\xi \propto (g g_c)^{-\nu}$ ;
- cross-over length scale from XY order to  $Z_q$  order  $\xi' \propto (g g_c)^{-\nu'}$

两尺度临界行为!

## 通过MC 模拟显示 $Z_q$ 模型的crossover 行为

• standard order parameter  $(m_x, m_y)$ 

$$m_x = \frac{1}{N} \sum_i \cos(\theta_i), \qquad m_y = \frac{1}{N} \sum_i \sin(\theta_i)$$

• probability distribution  $P(m_x, m_y)$  shows cross-over from U(1) to  $Z_q$  for  $T < T_c$ 



**Lou, Balents, Sandvik, PRL 2007** 在同一个温度下,不同尺寸的行为

## Deconfined Quantum Criticality, picture from VBS side



• Topological defect: Z<sub>4</sub> vortex form at nexus of four domain walls



- ξ' is the thickness of domain wall, diverges faster than ξ
- At the core, there's an unpaired spin  $\rightarrow$  spinon

different from  $Z_4$  vortex of the q = 4 clock model



- Spinons bind together in the VBS state (confinement) and condensate in the Néel state, deconfine at the critical point
- leading to a continuous phase transition in a New universality

Levin and Senthil, PRB 70, 2004

numerical study of the DQC
# 数值模拟方法研究DQC-JQ model

#### 海森堡模型加上多自旋相互作用: "人造"*J-Q* 模型 Sandvik, PRL, 2007



Lattice symmetries are kept

- large Q, columnar VBS
- small Q, Néel
- No sign problem
- ideal for QMC study of the DQC physics



## Emergent U(1) and RG flows in the J- $Q_3$ model

 $P(D_x, D_y)$ : emergent U(1) symm



- Define  $D_4$  as  $m_q$  in the  $Z_q$  model to quantify  $Z_q$  anisotropy
- Use Binder cumulants  $U_m$  and  $U_D$ 
  - $U_m U_D$  shows flows to dqc, Neel and VBS



Shao, Guo, Sandvik (work in progress)

• Shows similarity with the  $Z_q$  models, but  $Z_q$  models only have one ordered phase, different universality expected

## 标度失效(scaling violation)

自旋劲度
$$\rho_s \propto \delta^{\nu(d+z-2)}$$
, 磁化率 $\chi \propto \delta^{(d-z)\nu}$ Conventional FSS

$$\rho_s(\delta, L) = L^{-\nu(d+z-2)/\nu} f(\delta L^{1/\nu}), \qquad \chi(\delta, L) = L^{-\nu(d-z)/\nu} f(\delta L^{1/\nu})$$



•  $z \neq 1$  does not work

- large scaling corrections? Sandvik PRL 2010, Bartosch PRB 2013
- weak first-order transition? Chen et al PRL 2013 这意味着DQC理论的失败 困境! Nahum et al PRX, 2015; arXiv: 1506.06798

# 量子临界两尺度标度

#### Shao, Guo, and Sandvik, Science 2016

- 两个发散长度由一个参数控制 $\xi \propto \delta^{-\nu}, \xi' \propto \delta^{-\nu'}$
- 某个物理量A的有限尺寸标度,在热力学极限下 $A \propto \delta^{\kappa}$
- Conventional scenario

$$A(\delta,L) = L^{-\kappa/\nu} f(\delta L^{1/\nu}, \delta L^{1/\nu'}), \quad A(\delta = 0, L) \propto L^{-\kappa/\nu}$$

$$L \to \infty, f(\delta L^{1/\nu}, \delta L^{1/\nu'}) \to (\delta L^{1/\nu})^{\kappa}$$
, recovers  $A \propto \delta^{\kappa}$ 

• We propose

$$A(\delta,L) = L^{-\kappa/\nu'} f(\delta L^{1/\nu}, \delta L^{1/\nu'}), \quad \boxed{A(\delta = 0, L) \propto L^{-\kappa/\nu'}}$$

when  $L \to \infty$ ,  $f(\delta L^{1/\nu}, \delta L^{1/\nu'}) \to (\delta L^{1/\nu'})^{\kappa}$  leads to  $A \propto \delta^{\kappa}$ For example: spin stiffness  $\rho_s$ ,  $\kappa = \nu(d + z - 2) = 1$ . At  $q_c$ 

**NOT** 
$$\rho_s \propto L^{-1}$$
, **BUT**  $\rho_s \propto L^{-\nu/\nu'}$ 

• We provide a phenomenological explanation

### Evidence for unconventional scaling

Shao, Guo, and Sandvik, Science 2016 according to our scaling form

 $\rho_s \sim L^{-\nu/\nu'}, \quad \text{instead of } \rho_s \sim L^{-1}$   $\chi \sim L^{-\nu/\nu'}, \quad \text{instead of } \chi \sim L^{-1}$ 



• This explains drifts in  $L\rho_s$  and  $\chi L$  in J-Q and other models (z = 1, d = 2)

## 有限温度下的反常标度行为

• 
$$\beta = 1/T$$
 也是'有限尺寸':  
 $L \rightarrow \beta^{1/z}$ 



新的标度,考虑ν/ν':



Shao, Guo, and Sandvik, Science 2016



- 简单的两尺度标度假设可以解释"标度违背"
- 对于T > 0 我们利用有限尺寸标度形式可以得到新的标度律

Reference:

1 Science 354, 213 (2016)



#### 相变基础知识

相变的统计物理描述

#### 临界现象模型与理论

Ising model, 天联函数 数值模拟: 蒙特卡洛方泊 序参量与关联函数 LGW 连续场论描述 标度理论与重整化群

#### 量子临界现象

量子相变与模型 经典量子映射 场论描述与有限尺寸标度

#### 退禁闭量子临界性介绍

拓扑相变和拓扑激发 理论介绍 微观模型及其数值研究

#### • Spin-liquid-like state in disordered 2D quantum magnets

• Searching for Spin-liquid-like state in 2D quantum magnets

### Random Singlet state

- Random Singlet (RS) state: No any longrange order, correlations decay algebraically, a spin-liquid-like state
- 1D: Random Singlet state in random J S = 1/2 chain is well known
  - Each spin is paired with one other spin that maybe very far away



- · using SDRG, properties of the Infinite Randomness Fixed Point are found
- very slow dynamics  $z \to \infty$
- typical corr.  $C^{typ}(r) \propto \exp(-cr^{1/2})$
- but mean spin correlation  $C(r) \propto 1/r^2$ , dominated by rare long VBs

Dasgupta and Ma, PRB 22, 1305(1980); D. Fisher, PRB 50, 3799 (1994)

• exist (or stable) in 2D unfrustrated systems? Controversial

## Simpler system: site diluted Heisenberg dimer system





#### For intact system

•  $J_2/J_1 > 1.91$  dimerized phase

When diluted

- Unpaired 'dangling spin' moments form in gapped host system
- Effective bipartite interactions Nagaosa, et al J.P.S.J, 1996
- Moments form weak AFM order

Is this the faith of the spinons in the square-lattice disordered VBS?

- Kimchi, Nahum and Senthil: Most likely yes frustrated interactions required to induce RS state PRX 2018
- Our conclusion: RS phase exists in 2D unfrustrated systems

### Models, schematic phase diagrams

• Introduce randomness to the 2D J-Q<sub>3</sub> model

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} C_{ij} - Q \sum_{\langle ijklmn \rangle} C_{ij}C_{kl}C_{mn},$$
  

$$C_{ij} = (\frac{1}{4} - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$$

- ▶ random Q: e.g.  $Q_{ijklmn} = 0, 2Q$  randomly
- ▶ random J: e.g.  $J_{ij} = 0, 1 \text{ or } J_{ij} \in [1 \Delta, 1 + \Delta]$
- We find the schematic phase diagrams:  $\Lambda$  represents disorder strength



## Mechanism of RS state formation

- Clean system, there's no static domain wall
- spinon pairs move in the whole space-time

#### However, when disorder introduced

- According to Imry-Ma argument,
  - any amount of disorder in a VBS will cause domain formation: destroy VBS
- Spinons form in pairs (Not random distribution) and frozen: a pair (left) and a quadruplet (right)
- domain walls mediate spinon-spinon interactions
- pairing avoids AFM order, instead power-law correlations





## Properties of the RS phase: correlations

• *C<sub>s</sub>*: spin-spin correlation;



For large Q/J:

- $C_s(L/2, L/2) \propto 1/L^2$
- Scaling:  $C_s(r) \propto 1/r^{D+z-2+\eta}$

therefore,

$$z + \eta = 2$$

(a) *O/J=1.2* 10 ×" <sup>10</sup> L=16 10 L=32 • L=48 L=64 10 0.01 0.1 T/J10 (b) Q/J=2.0 10 *"* L=8L = 1610 L=32 o L=48 I=64 0.1 T/J

• Finite temperature behavior of the uniform susceptibility

$$\chi_u \propto T^{d/z-1}$$

we found

- z = 2 at transition points
- z > 2 inside the RS phases

### Similar results found in frustrated system

H.D. Ren, T.Y. Xiong, H.Q. Wu, D.N. Sheng, and S.S. Gong, arXiv: 2004.02128



- DMRG calculations with 2D  $J_1$ - $J_2$  Heisenberg model, frustrated system
- confirm universal RS state with  $z + \eta = 2$

#### RS state, Not just in JQ model, a universal behavior

### Experiments: Some 'disordered spin liquids' may actually be RS states

Recent example  $Sr_2CuTe_{1-x}W_xO_6$ 

square lattice S = 1/2 system with  $J_1$  or  $J_2$  randomly on plaquettes



## Experiments: Some 'disordered spin liquids' may actually be RS states

Experiment done by ShiLiang Li's group Hong, Liu, et al, PRL, 126, 037201 (2021)





Time-dependent zero-field  $\mu$ SR spectra

• The relaxation rate exhibits quantum-critical scaling with dynamic exponent z > 2

$$\lambda \propto T^{-a}$$
  $a = 1 - d/z$ .

We found

• for 
$$x = 0.05$$
,  $a = 0.35 \pm 0.03 \rightarrow z = 3.0 \pm 0.2$ 

• for x = 0.1,  $a = 0.42 \pm 0.03 \rightarrow z = 3.5 \pm 0.3$ 

## Conclusions

- We found RS phase in unfrustrated 2D system; but not infinite-randomness fixed point (z is finite)
- · We can not rigorously exclude weak AFM order
  - unlikely, in light of well-characterized AFM-RS critical point
- The RS phase may be universal
  - properties can be investigated in great detail with QMC
  - comparisons with experiments possible, e.g., varying z. Some 'disordered spin liquids' may actually be RS states

References:

- 1. L. Liu, H.Shao, Y.Lin, WG, A. Sandvik, Phys. Rev. X 8, 041040 (2018)
- 2. L. Liu, WG, A. Sandvik, Phys. Rev. B 102, 054443(2020)
- 3. W. Hong, L. Liu, et al, Phys. Rev. Lett. 126, 037201 (2021)

主要参考文献

- 1 S. Sachdev, Quantum Phase Transitions (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1999).
- 2 A. W. Sandvik, AIP Conf. Proc. 1297, 135 (2010).