

巡游电子量子临界行为研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6493.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

巡游电子量子临界行为研究取得进展。巡游电子量子临界现象，作为凝聚态物理学关联电子系统的传统难题，反复出现在量子物质科学的诸多研究方向上，对其进行合理的模型设计和正确的理论计算，能够帮助人们理解重费米子材料、铜基和铁基高温超导体、过渡金属氧化物、石墨烯层状结构等体系中普遍出现的反常输运、奇异金属和非费米液体行为。然而，巡游电子量子临界现象是典型的量子多体问题，牵扯到对于无穷多耦合着的量子临界玻色、费米自由度的严格处理，传统的以平均场和微扰论为代表的解析方法无法提供定量甚至是定性正确的结果。故而经过理论凝聚态物理学家数十年的努力，虽然高阶圈图计算和新的重正化群方案以及对于非费米液体行为的猜测一直在向前推进，但是系统临界指数和临界动力学行为等普适的、严格的结论仍然不存在。

近年来，以新的模型设计和算法突破为代表的大规模量子蒙特卡洛计算取得了长足的进展，为定量研究巡游电子量子临界现象，检验诸多解析猜测的正确性和发展新理论框架开辟了道路。研究人员通过将无相互作用的费米面与各种玻色子临界涨落耦合起来，成功设计出伊辛向列相、电荷密度波、铁磁和反铁磁自旋密度波以及Z2或者U(1)规范场等临界涨落与费米子耦合的模型，并且绕过了量子多体系统蒙特卡洛模拟中常见的符号问题，为定量研究众多巡游量子临界系统打开了数值的可能性。同时，物理认识上的进步也在推动蒙特卡洛计算技术上的进展，尤其以自学习蒙特卡洛(Self-learning Monte Carlo)和鸱鹞蒙特卡洛(Elective-momentum ultrasize (EMUS) Monte Carlo)为例，新的蒙特卡洛更新方法降低了传统的费米子行列式蒙特卡洛(Determinantal quantum Monte Carlo, DQMC)计算复杂度，使得更大尺寸和更低温度系统的模拟成为可能，让人们得到更加接近热力学极限的标度行为。

具体而言，人们普遍认为，在平均场层面上的Hertz-Millis-Moriya巡游电子临界行为理论框架，不足以准确描述临界区中的真正标度行为，比如非费米液体的自能和临界玻色传播子的反常标度维度 η (anomalous scaling dimension)。但同时，人们也还没有能够在严格的数值计算中证实这样的理论猜测，到目前为止的巡游量子临界点蒙特卡洛模拟结果，受限于模型设计和计算规模，并没有系统地、自洽地观察到超越Hertz-Millis-Moriya理论的标度行为。这样的情况在日前的一项研究工作中得到了改观，这项研究工作由中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心博士生刘子宏、香港科技大学博士后许霄琰、中科院物理所和中国科学院大学硕士生潘高培、密歇根大学物理系教授孙锴和中科院物理所研究员/香港大学副教授孟子杨组成的研究团队完成。该团队对于正方晶格反铁磁巡游量子临界点($Q = (\pi, \pi)$)进行了大尺寸的量子蒙特卡洛数值模拟，由于模型设计和算法的进步，他们第一次确定性地看到了费米面上的hot spots处的非费米液体行为和临界玻色子的反常标度维度 η ，为推动理论与数值的结合，建立正确的巡游量子临界理论框架走出了重要一步。为了得到接近热力学极限的量子临界行为，该团队设计了如图1(a)所示的晶格模型，其费米子部分的费米面和反铁磁临界玻色子的涨落波矢(Q)如图1(b)

所示，整个系统很好地再现了铜基超导体的Néel反铁磁涨落的模式。在临界区中，费米面上被反铁磁波矢连接的点称为hot spots($\{K, K'\}$)，这里的费米子感受到了最强的临界涨落，同时费米子之间的有效相互作用也反馈给了玻色子，将玻色子的临界行为从纯粹的横场伊辛变成了新的普适类，具有了反常标度维度 η 。在如图1(c)所示的相图中，可以清楚地看到反铁磁相变点和从反铁磁金属到顺磁金属的相边界。

该团队采用行列式蒙特卡洛(DQMC)以及鹧鸪蒙特卡洛(EMUS-QMC, EQMC)，辅以自学习蒙卡的更新方法，计算了到目前为止最大规模的相互作用费米子晶格尺度，并与常规的DQMC计算进行了系统的比较。常规DQMC能够计算到 $28 \times 28 \times 200(L \times L \times L\tau)$ 的规模，而EQMC来研究更大的尺寸： $60 \times 60 \times 320$ ，这样的有限尺寸效应影响更小。通过对于量子临界区以及其标度行为的精确研究，他们发现临界区中的玻色子传播子中具有一个很大的反常维数 $\eta \sim 0.125$ (如图3所示)，与Hertz-Millis理论所预言($\eta \sim 0$)有着显著的差别，但是与高阶圈图计算还有重正化群理论猜测定性吻合。同时，他们还观察到了重正化群计算中预言的，费米面在hot spots附近由于临界玻色涨落所引入的有效相互作用所造成的费米速度向着反铁磁波矢方向的旋转(如表1所示)。数值与理论比较对照的结果，弥补了领域中的空白，为成功建立巡游电子量子临界问题的理论框架，提供了严格的素材。

在巡游电子量子临界行为研究的领域，数值计算的进步正在和理论图像上的理解更加紧密地联系起来。有理由相信，许多过去无法严格检验的理论推测，比如非费米液体的能量-动量依赖关系、临界玻色传播子的标度行为，已经可以逐步地、系统地在数值计算中等到检验。同样地，更加正确的理论图像也在指导着更加高效的数值算法和模型设计，使得更大晶格更低温度的计算成为可能。通过数值和理论的良好互动，超越Hertz-Millis-Moriya理论框架，超越朗道费米液体理论的量子物质科学新范式，正在逐步地建立起来。

相关工作发表在最近一期的《美国国家科学院院刊》(PNAS)。

这项工作得到科技部重点研发计划(2016YFA0300502)，中科院先导专项(XDB28000000)，国家自然科学基金委项目(11421092, 11574359, 11674370)，以及香港特别行政区研究资助局Grant C6026-16W，美国National Science Foundation Grant EFRI-1741618和Alfred P. Solan Foundation等机构的支持。研究中所进行的大规模并行计算，在中科院物理所量子模拟科学中心、国家超级计算天津中心的天河一号平台、国家超级计算广州中心天河二号平台上进行。国家超算天津中心应用研发部部长孟祥飞、工程师菅晓东，国家超算广州中心应用推广部部长王栋、工程师崔颖妍等人提供了支持和配合。

论文链接

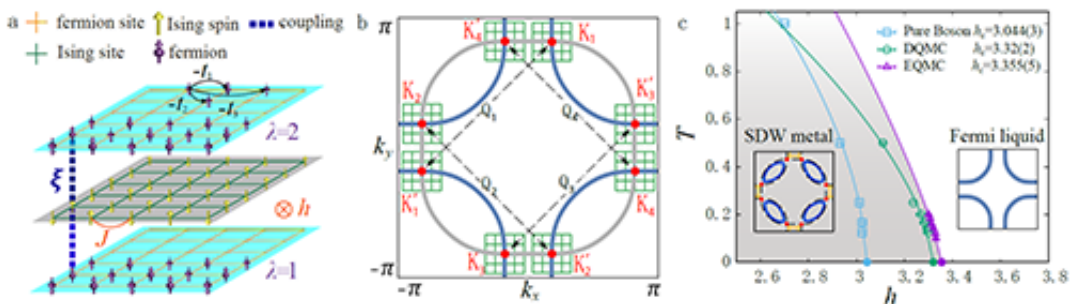


图1: (a) 两层正方晶格费米子耦合反铁磁横场伊辛模型的示意图。(b) 正方晶格上的反铁磁 $Q=(\pi,$

π) 波矢和具有 $\{K, K'\}$ hot spots 的费米面，一对hot spots 被反铁磁涨落波矢 Q 联系起来，此处的费米子感受到最强的临界涨落，在临界区中形成了非费米液体。(c) 反铁磁横场伊辛模型(Pure boson)、费米子和反铁磁横场伊辛耦合模型(DQMC, EQMC)的相图比较。左右的insets为反铁磁相中形成反铁磁自旋密度波的费米面和顺磁相中无相互作用的费米面的比较。

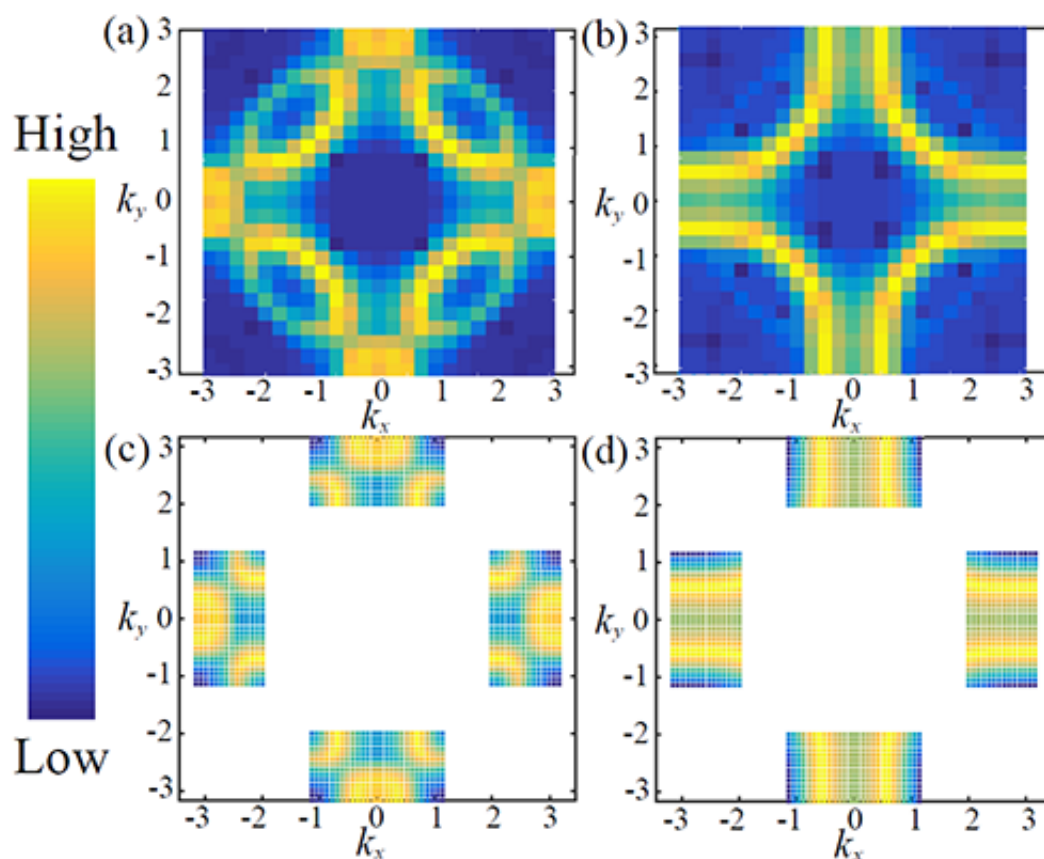


图2: (a),(b) 为DQMC 计算得到的费米面。(c),(d) 为EQMC 计算得到的费米面。(a) 和(c) 在反铁磁相($h < h_c$) 中，能够看到Fermi pocket。(b) 和(d) 为相变点($h = h_c$) 的结果。可以看到EQMC 计算比DQMC 计算具有更高的动量解析度。

表 1: 费米面 hot spot 上费米速度 v_F 的变化

Hot spots 位置	k_x	k_y
	2.5800	0.5615
hot spots 处的费米速度 v_F	$v_{\parallel}$	$v_{\perp}$
量子相变点附近	1.523(8)	1.435(8)
自由费米子	1.506	1.468

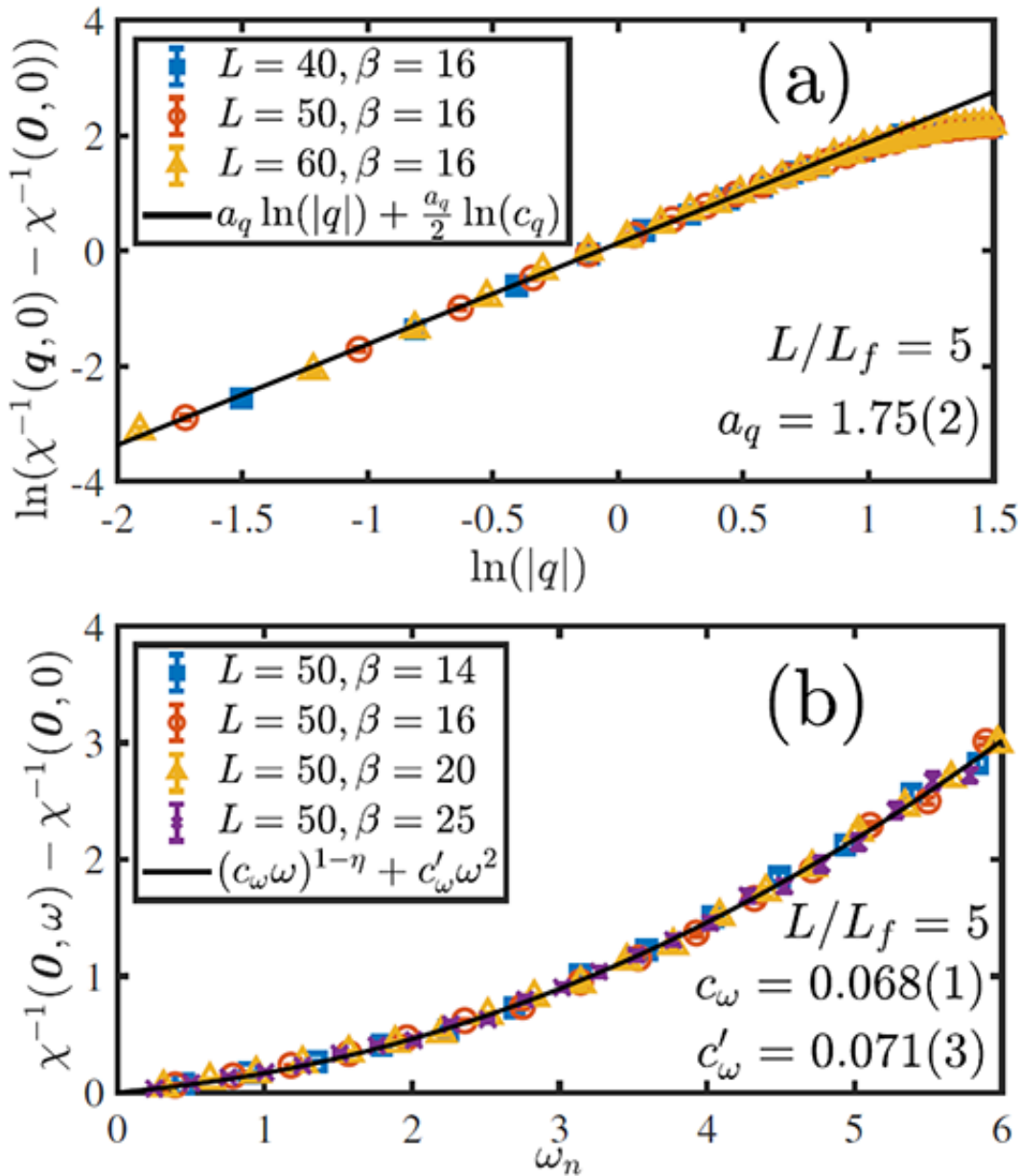


图3: (a) 玻色磁化率(传播子) χ ($T = 0, h = hc, q, \omega$) 在反铁磁临界点处关于动量 $|q|$ 的依赖关系, 能够从中观察到反常维数 $\chi^{-1}(q) \sim |q|^{2(1-\eta)}$, 其中 $\eta = 0.125$ 。(b) 同样的可以看到 χ ($T = 0, h = hc, q, \omega$) 关于频率 ω 的依赖关系。小 ω 时能够看到反常维数 $\chi^{-1}(\omega) \sim \omega^{1-\eta}$, 这是系统低能下的超越Hertz-Millis平均场的新行为; 大 ω 时能够看到 $\chi^{-1}(\omega) \sim \omega^2$ 的形式, 这是系统在高能端和平均场理论吻合的表现。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发