

# 经典与量子临界现象初步

郭文安

北京师范大学物理系

2017年7月



# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

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

# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

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

# 多粒子系统

## ▶ 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 $\Gamma$ 有确定能量 $E(\Gamma) = H(\Gamma)$

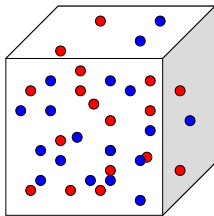
## ● 平衡态配分函数(partition function)

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

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**)

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

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





# 多粒子系统

## ▶ 微观状态

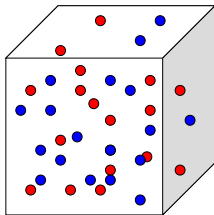
- 量子系统，哈密顿量的本征态不容易知道

## • 平衡态配分函数

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

$|\alpha\rangle$  是任意正交完备基矢  
物理量的统计期望值

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



# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

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

- 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

比如水可以处于固相, 液相, 气相

- 相变(Phase Transition):

从一种相转变成另一种相

比如冰融化就是水的固液相变

# 丰富多彩的相变与临界现象

热力学相变（或经典相变），热涨落驱动：

- ▶ 气液固三态之间的转变
- ▶ 铁磁, 顺磁, 反铁磁之间的转变
- ▶ 超导体与正常导体的转变
- ▶ 超流与正常流体的转变
- ▶ 几何相变：渗流

量子相变，零温，没有热涨落，由调节外参量，改变基态。通常称由量子涨落驱动的量子物态之间的转变。

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

等等

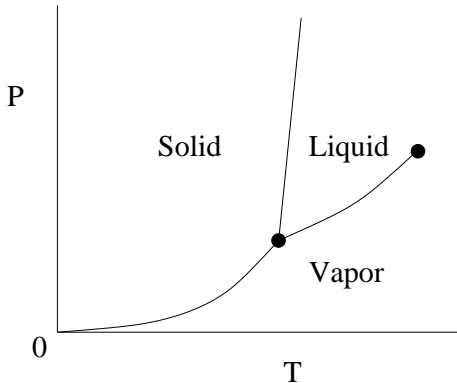
相变与临界现象总伴随着热力学量的**奇异性**:

不连续、发散或导数发散!

# 现代物理学把相变分成两类

- 一级相变(First Order Phase Transition):

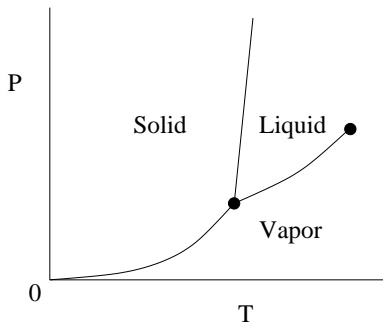
自由能的一级导数不连续，两相（或多相）共存



## 现代物理学把相变分成两类

- 连续相变(continuous phase transition),

两相（或两相以上的相）区别消失成为新的相



- 连续相变点称为**临界点(Critical Point)**
- 系统表现出非常特殊的性质称为 **临界现象(Critical Phenomena)**
  - 比热，磁化率等自由能二级导数发散, 又称二级相变

# 临界指数

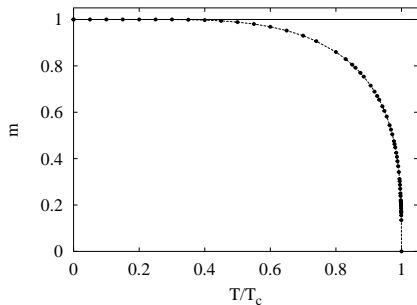
临界现象更有兴趣！

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



- 磁化强度

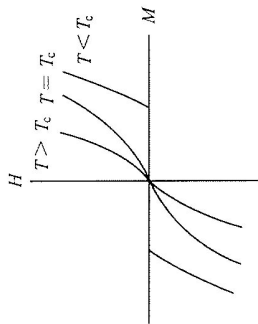
$$m \propto t^\beta \quad t = (T_c - T)/T_c$$

其中  $T_c$ : 居里点, 临界点

- 临界指数

$2D : \beta = 1/8;$	$3D : \beta = 1/3$
---------------------	--------------------

# 临界指数



- 靠近 $T_c$ , 磁化率

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} \propto t^{-\gamma},$$

- ▶ 临界指数

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

- 在 $T_c$ 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

$$c \propto |t|^\alpha,$$

- ▶ 临界指数

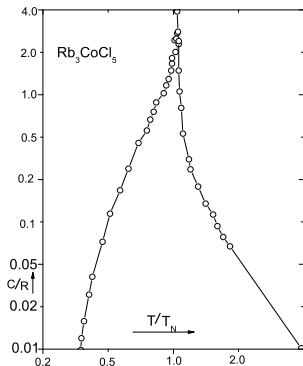
$$\alpha \approx 0.1096 \pm 0.0005$$

- 2D 特殊, 对数发散

$$c \propto -\ln(t).$$

- ▶ 临界指数

可以认为  $\alpha = 0$ .



- 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—普适类

# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

量子临界现象

量子相变与模型

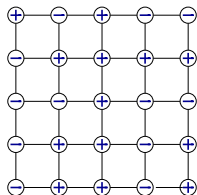
经典量子映射

场论描述与有限尺寸标度

退禁闭量子临界性介绍

# Ising model (经典)

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  $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_N)$ .

总磁矩  $M(\Gamma) = \sum_k s_k$

- $J > 0$ , 铁磁(ferromagnetic)
- $J < 0$ , 反铁磁(antiferromagnetic)

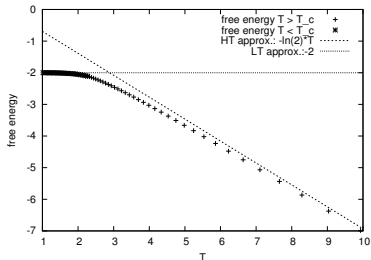
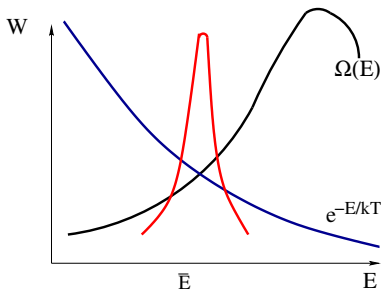
当系统处于热平衡

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

- ▶ 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,

$$Z = \sum_S e^{-\beta H} = \sum_E \Omega(E) e^{-E/k_B T}, \quad \beta = 1/k_B T$$



- 自由能密度

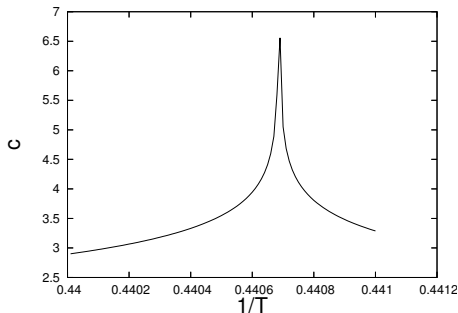
$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \approx \frac{\bar{E}}{N} - k_B T \frac{\ln \Omega(\bar{E})}{N}$$

- 能量与熵的竞争: 高温无序,  $\bar{E} \rightarrow \Omega$ 极大, 低温有序  $\bar{E} \rightarrow E$ 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！

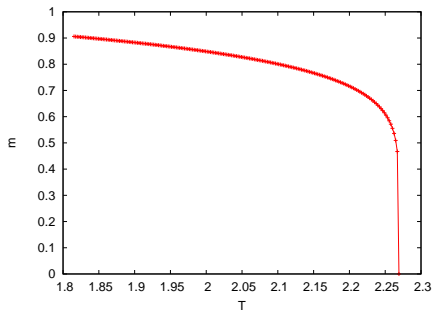


临界点附近比热对数发散

$$c \propto k_B \ln |(T - T_c)/T_c|$$



# 杨振宁的磁化强度



临界温度以下  $T < T_c$ :

$$m = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4 2/T}\right)^{1/8} \propto \left(\frac{|(T - T_c)|}{T_c}\right)^{1/8}$$

指数严格为  $1/8$

# 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 $\Gamma' = (-s_1, \dots, -s_N)$ ，满足

$$M(\Gamma) = -M(\Gamma'), \quad p(\Gamma) = p(\Gamma')$$

这称为翻转对称性( $Z_2$ )。

- 在热力学极限下
  - 相变破坏了这种对称性，这称为对称性的自发破缺 (spontaneous symmetry breaking)。
  - 这种破缺用 $m$ 来度量，称为序参量(order parameter)。

# 关联函数

►  $T \rightarrow 0$

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

►  $T \gg T_c$  热涨落  $\langle s(r) \rangle = \langle s \rangle = 0$ ,  $\langle s(r)s(0) \rangle \propto e^{-r/\xi}$

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

►  $T \rightarrow T_c$ ,

$$\xi \propto t^{-\nu} \rightarrow \infty, \quad G(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}$$

$\nu, \eta$  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

$$\chi \propto \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2 \propto \int G(r) d^d r \propto \xi^{d-\eta} \propto |t|^{-\nu(d-\eta)}$$

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

# 标度关系

在临界点附近 $\xi$ 发散：它是决定一切的唯一物理量

- 考虑一个系统处于 $\xi' = \xi/b$ , 那么
  - ▶ 约化温度 $t' = tb^{y_t}$ , 因为 $t \sim \xi^{-1/\nu}$  (定义 $y_t = 1/\nu$ )
  - ▶ 约化磁场 $h' = hb^{y_h}$ , 设 $h \sim \xi^{-y_h}$

这个系统的自由能奇异部分于原系统自由能奇异部分的关系是什么样的？

# 标度关系

在临界点附近 $\xi$ 发散：它是决定一切的唯一物理量

- 考虑一个系统处于 $\xi' = \xi/b$ , 那么
  - ▶ 约化温度 $t' = tb^{y_t}$ , 因为 $t \sim \xi^{-1/\nu}$  (定义 $y_t = 1/\nu$ )
  - ▶ 约化磁场 $h' = hb^{y_h}$ , 设 $h \sim \xi^{-y_h}$

这个系统的自由能奇异部分于原系统自由能奇异部分的关系是什么样的?

- 可以理解为原系统收缩为 $1/b$ , 所以

$$f_s(t, h) = b^{-d} f_s(tb^{y_t}, hb^{y_h})$$

- 再考虑磁化强度 $m' = mb^{y_m}$ 
  - ▶ at  $T_c$ ,  $\langle m(0)m(r) \rangle \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$
  - ▶  $\langle m'(0)m'(r') \rangle \sim b^{2y_m} \langle m(0)m(r) \rangle$ , 由于收缩, 其中 $r' = r/b$
  - ▶  $2y_m = d - 2 + \eta$
  - ▶  $mhb^{y_m+y_h}b^{-d} = mh$ , 所以 $y_h = (d + 2 - \eta)/2$

# 临界指数和标度律

- ▶ 计算磁化强度  $m$

$$m(t, 0) = \left. \frac{\partial f_s(t, h)}{\partial h} \right|_{h=0} = b^{y_h-d} \left. \frac{\partial f_s(tb^{y_t}, hb^{y_h})}{\partial hb^{y_h}} \right|_{h=0} = b^{y_h-d} m(tb^{y_t}, 0)$$

- ▶ 令  $tb^{y_t} = -1$ ,

$$m(t, 0) = (-t)^{(d-y_h)/y_t}$$

即  $\beta = (d - y_h)/y_t = \nu(d - 2 + \eta)/2$

- 类似地，比热

$$c \sim \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \sim t^{-(2y_t-d)/y_t} \quad \alpha = 2 - \nu d$$

- 磁化率

$$\chi \sim \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} \sim t^{-(2y_h-d)/y_t} \quad \gamma = (2y_h - d)/y_t$$

# 重整化群

能否根据模型直接计算临界性质 $y_t$ 和 $y_h$ ?

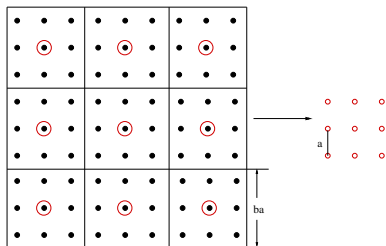
# 重整化群

能否根据模型直接计算临界性质 $y_t$ 和 $y_h$ ?

**Wilson** 发展了重整化方法



# RG 变换



标度因子  $b = 3$

- $\xi' = \xi/b$ , 临界点关联长度无穷大, 因此对应变换的不动点
- 在不动点附近线性化变换, 可以求出  $y_t, y_h, y_u$

$$t' = tb^{y_t}, h' = hb^{y_h}, u' = ub^{y_u}$$

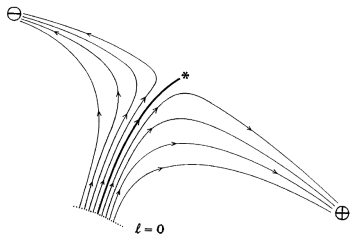
$$H(t, h, u) \xrightarrow{\text{粗粒化}} \bar{H}(\tilde{t}, \tilde{h}, \tilde{u}) \xrightarrow{\text{rescale}} H'(t', h', u')$$

- 总自由能不变, 密度增加了  $b^d$  倍

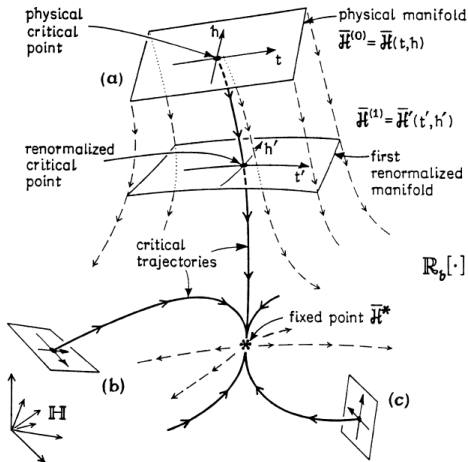
$$f(t, h, u) = b^{-d} f(t', h', u'),$$

- ▶  $y_t > 0, y_h > 0, t, h$  称为关涉场(relevant);
- ▶  $y_u < 0, u$  称为非关涉场(irrelevant) 一般不只一个

# RG flow 和普适类



- 不同的物理模型可以流向同一个不动点
- 不稳定方向决定临界指数 (一般有两个) :  $\nu, \eta (y_t, y_h)$
- 一个不动点决定一个普适类!



对微观模型的数值研究需要利用有限尺寸标度来得到热力学极限下的结论

## 有限尺寸标度

- $T \rightarrow T_c$  时关联长度发散:  $\xi \propto |\delta|^{-\nu}$ ,  $\delta = T - T_c$  (或  $g - g_c$ )
- 导致物理量的奇异性:  $A(T, L \rightarrow \infty) \propto |\delta|^\kappa \propto \xi^{-\kappa/\nu}$
- $T_c$  的尺寸依赖行为, 只需  $\xi \rightarrow L$ :  $A(T_c, L) \propto L^{-\kappa/\nu}$
- 临界点附近:  $A(T, L) = L^{-\kappa/\nu} g(L/\xi) = L^{-\kappa/\nu} f(\delta L^{1/\nu})$

例如磁化率

$$\chi(T, L \rightarrow \infty) \propto \delta^{-\gamma}$$

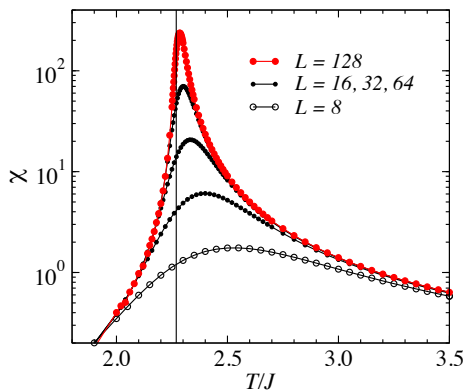
data collapse(数据跌落)

$$\chi(T, L) L^{-\gamma/\nu} = f(\delta L^{1/\nu})$$

2D Ising model  $\gamma = 7/4, \nu = 1$

$T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \sim 2.2692$

如果这些不知道, 就可以作为被拟合的参数



## 有限尺寸标度

- $T \rightarrow T_c$  时关联长度发散:  $\xi \propto |\delta|^{-\nu}, \delta = T - T_c$  (或  $g - g_c$ )
- 导致物理量的奇异性:  $A(T, L \rightarrow \infty) \propto |\delta|^\kappa \propto \xi^{-\kappa/\nu}$
- $T_c$  的尺寸依赖行为, 只需  $\xi \rightarrow L$ :  $A(T_c, L) \propto L^{-\kappa/\nu}$
- 临界点附近:  $A(T, L) = L^{-\kappa/\nu} g(L/\xi) = L^{-\kappa/\nu} f(\delta L^{1/\nu})$

例如磁化率

$$\chi(T, L \rightarrow \infty) \propto \delta^{-\gamma}$$

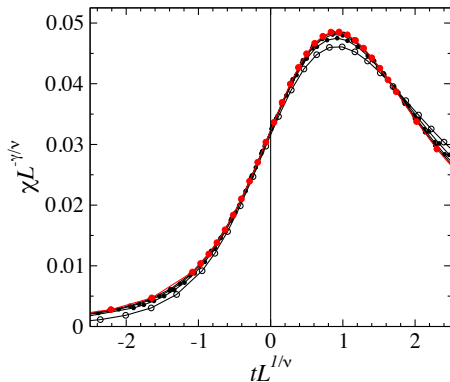
data collapse(数据跌落)

$$\chi(T, L) L^{-\gamma/\nu} = f(\delta L^{1/\nu})$$

2D Ising model  $\gamma = 7/4, \nu = 1$

$T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \sim 2.2692$

如果这些不知道, 就可以作为被拟合的参数



# 标度修正

- 曲线并没有完全重合

$$f_s(\delta, h, u, 1/L) = L^{-d} f_s(\delta L^{y_t}, h L^{y_h}, u L^{y_u}, 1)$$

标度修正(corrections to scaling) due to (RG theory);  $u_i$  是非关涉场(irrelevant fields)

- 磁化率是  $f_s$  对  $h$  的二阶导数

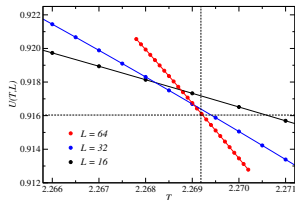
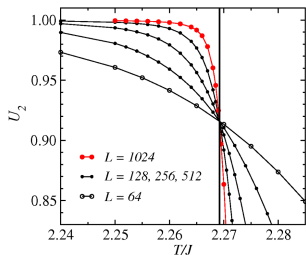
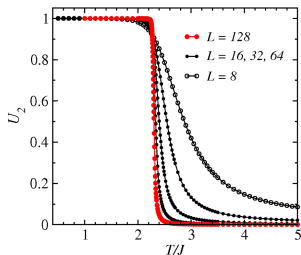
$$\chi(T_c, 0, L) = \frac{\partial^2 f_s(t, h, u, 1/L)}{\partial h^2} = L^{2y_h - d} \frac{\partial^2 f_s(t L^{y_t}, h L^{y_h}, u L^{y_u}, 1)}{(\partial h L^{y_h})^2} = L^{2y_h - d} \chi(0, 0, u L^{y_u}, 1)$$

- ▶  $\chi(T_c, L)$  不是简单正比于  $L^{\gamma/\nu}$ , 其中  $\gamma = (2y_h - d)/y_t$
- ▶  $\chi(T_c, L) \sim L^{\gamma/\nu} (1 + a L^{y_u})$ , 多的这一项就是标度修正项

# Binder 累积量的有限尺寸标度

- Binder cumulant  $U = \frac{1}{2} \left( 3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right)$ , dimensionless  $\kappa = 0$

2D Ising model; MC results



$$U_2(T, L) = f(\delta L^{1/\nu}, u_1 L^{-\omega_1}, u_2 L^{-\omega_2}, \dots, 1) = U_c + a_0(T - T_c)L^{1/\nu} + a_1 u_1 L^{-\omega_1} + \dots$$

# 热致相变 (经典相变)

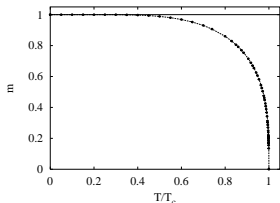
- 由热涨落驱动, 在临界点关联长度发散, 导致奇异性
- 朗道: 利用序参量来区分具有不同的对称性的相
- ▶ 粗粒化的连续场论: **LGW Hamiltonian**

$$H(\Phi) = \int dV ((\nabla\Phi)^2 + s\Phi^2 + u(\Phi^2)^2)$$

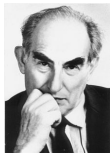
$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\Phi e^{-H(\Phi)}$$

其中  $\Phi$  是局域序参量

- ▶  $s \sim (T - T_c)$
- ▶  $T < T_c$  长程序  $\langle \Phi \rangle \neq 0$ : 自发对称性破缺
- Wilson's **重正化群(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)



3D Ising transition





# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

量子临界现象

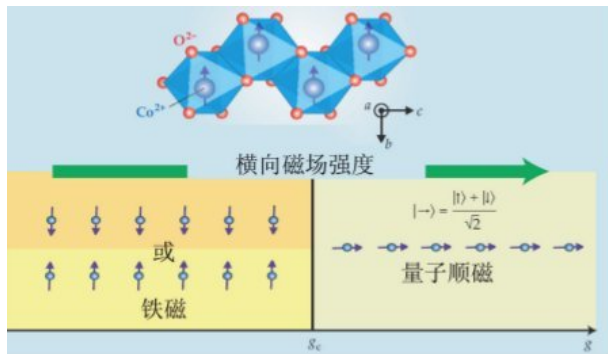
量子相变与模型

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

# 量子相变



材料 $CoNb_2O_6$ :  $Co^{2+}$ 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

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^z s_j^z - h \sum_k s_k^x \quad J > 0$$

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  $\prod_i |z, -\rangle_i$

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

- ▶  $h \gg J$ , 基态  $|0\rangle = \prod_i |x, +\rangle_i$  注意  $s^z, s^x$  不对易，导致量子涨落!

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

- ▶  $h \rightarrow h_c$ , 临界!

$$\xi \sim (h - h_c)^{-\nu} \rightarrow \infty, \quad \langle s_i^z s_j^z \rangle \propto \frac{1}{|i-j|^\eta}$$

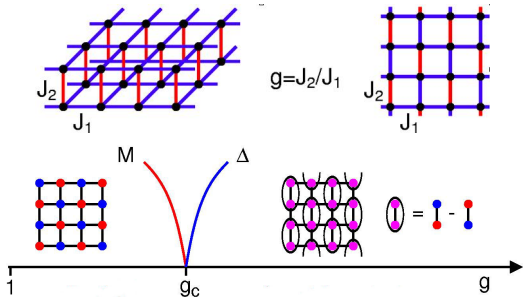
- ▶ 在  $h_c$  同样导致磁化率的发散!

## 另外一个量子相变的例子

- ▶ 反铁磁Néel-顺磁量子相变

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

$H(J_1), H(J_2)$ : dimerized AF Heisenberg Hamiltonian,  $g = J_2/J_1$



- $g < g_c$ , 反铁磁Néel 序
- $g > g_c$ , dimer 相;  
dimer 波函数是  $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$  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.  $\mathbf{n}$ 是它的位置算符,  $\mathbf{L}$ 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

- $g \gg 1$ , 转动动能主导, 量子顺磁

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

- $g \ll 1$ , 耦合主导, 磁有序

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

# Bose-Hubbard 模型

Bose-Hubbard 模型可以描述光晶格中的玻色冷原子

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

$t$  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  $U > 0$ )

$\mu$  是化学势

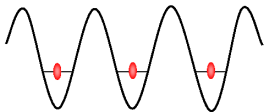
# 基态

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



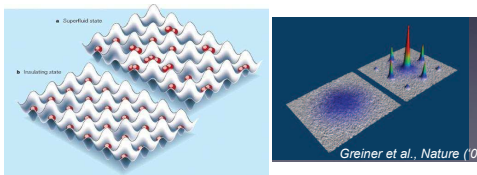
$$|\psi_{SF}\rangle_{U=0} \propto \left( \sum_{i=1}^M a_i^+ \right)^N |0\rangle$$

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)

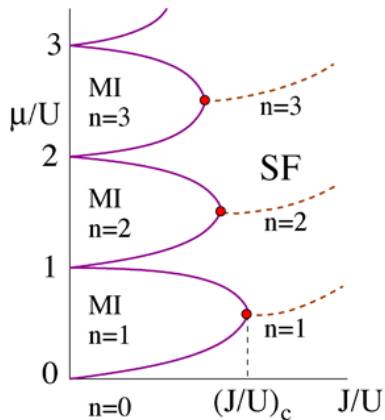


$$|\psi_{MI}\rangle_{t=0} \propto \prod_{i=1}^M (a_i^+)^n |0\rangle$$

# 相图



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



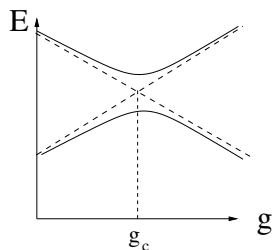
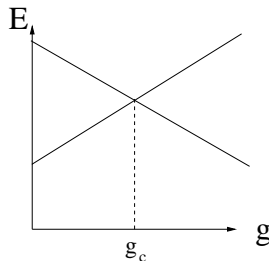


# 量子相变的一般描述

考虑一个Hamiltonian

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

- ▶  $[H_0, H_1] = 0$ : 同时对角化, 激发态与基态交叉于  $g_c$ : 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, 产生奇异性.

- 关联长度发散

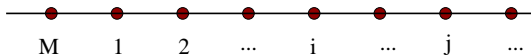
$$\xi \sim (g - g_c)^{-\nu},$$

- 能隙(或特征能量涨落)  $\Delta$  定义动力学临界指数

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

# 经典与量子的映射

考虑一条经典Ising 链, 无外场( $B = 0$ )



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

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

其中

$$T_1 = \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix},$$

称为转移矩阵(transfer matrix)

# 经典与量子的映射



- $T_1$ 的本征值为

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

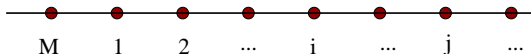
- 本征矢为

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

- 自由能密度

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

# 经典与量子的映射



- 关联函数

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_s e^{-H/T} s_i s_j = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}(T_1^i \sigma^z T_1^{j-i} \sigma^z T_1^{M-j})$$

When  $M \rightarrow \infty$ , 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  $\xi$

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

When  $T \rightarrow 0$ ,  $1/\xi \approx 2e^{-2K}$

# 经典与量子的映射

我们改写

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

在  $\xi \rightarrow \infty$  的极限下,

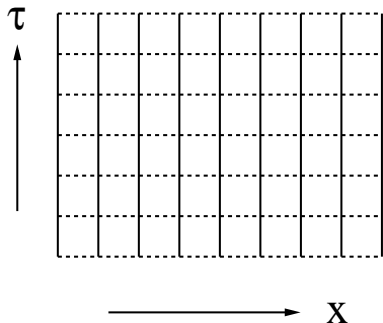
$$T_1 = e^{-\mathcal{H}_Q}$$

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

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

- 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!
- $1/\xi$  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  $1/\xi$
- 能隙  $\Delta = 1/\xi$

# $(D + 1)$ 维经典 $\Leftrightarrow D$ 维量子映射: 转移矩阵



- ▶ 任意挑选一个方向作为(虚)时间方向, 构造转移矩阵  $T$ .

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } T^M$$

- ▶ 转移矩阵把系统状态从一行转移到另一行, 相当于

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

- ▶  $\tau$  方向相互作用贡献非对角项, 比如 ‘横场’

- ▶ 对应一个量子系统的配分函数

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } e^{-M\mathcal{H}_Q} = \text{Tr } e^{-\beta\mathcal{H}_Q}$$

- ▶ 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  $\rightarrow$  一维量子 rotor 模型 ( $N = 3$ )

## $D$ 维量子系统到 $D + 1$ 经典系统映射: 路径积分

- "Time slicing" of the partition function

$$Z = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\} = \text{Tr}\left\{\prod_{l=1}^L e^{-\Delta_\tau H}\right\}, \quad \Delta_\tau = \beta/L$$

- Choose a basis and insert complete sets of states

$$Z = \sum_{\alpha_0} \sum_{\alpha_1} \cdots \sum_{\alpha_{L-1}} \langle \alpha_0 | e^{-\Delta_\tau H} | \alpha_{L-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | e^{-\Delta_\tau H} | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | e^{-\Delta_\tau H} | \alpha_0 \rangle$$

- Approximation; 可用于蒙卡模拟

$$Z \approx \sum_{\{\alpha\}} \langle \alpha_0 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_{L-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_0 \rangle$$

Leads to error  $\propto \Delta_\tau^2$ . Limit  $\Delta_\tau \rightarrow 0$  can be taken.

## Example: hard-core bosons

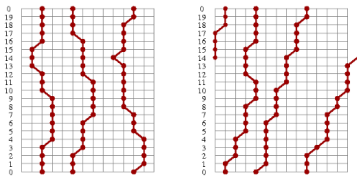
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} = - \sum_{\langle i,j \rangle} (a_j^\dagger a_i + a_i^\dagger a_j) \quad n_i = a_i^\dagger a_i \in \{0, 1\}$$

- Equivalent to  $S = 1/2$  quantum XY model

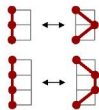
$$H = -2 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) = - \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad S^z = \pm \frac{1}{2}$$

- "World line" representation of

$$Z \approx \sum_{\{\alpha\}} \langle \alpha_0 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_{L-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | (1 - \Delta_\tau H) | \alpha_0 \rangle$$



World line moves for MC updating



$$Z = \sum_{\{\alpha\}} W(\{\alpha\}), \quad W(\{\alpha\}) = \Delta_\tau^{n_K}, \quad n_K = \text{number of "jumps"}$$



## $D$ 维量子系统到 $D + 1$ 经典系统映射: 路径积分

- 将矩阵元写成

$$\langle \alpha_{k+1} | e^{-\Delta_\tau H} | \alpha_k \rangle = \exp[-\Delta_\tau S(\alpha_k)]$$

- 转移矩阵方法的逆过程

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \exp \left[ -\Delta_\tau \sum_{k=0}^{L-1} S(\alpha_k) \right] = \int_{\alpha_0 = \alpha_\beta} \mathcal{D}\alpha(\tau) \exp \left[ -\int_0^\beta d\tau S(\alpha(\tau)) \right]$$

- $S$ 为作用量
- 若 $S$ 是正实数,  $D$ 维量子系统映射为 $D + 1$ 维经典模型的配分函数
- 当 $T \rightarrow 0$ 时,  $\beta \rightarrow \infty$ , 系统为 $D + 1$ 维热力学极限

## quantum rotor的路径积分映射

- Quantum rotor model 配分函数

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\mathbf{n} e^{-\mathcal{S}_n}$$

$$\mathcal{S}_n = \frac{c}{2\tilde{g}} \int d\tau \int dx \left[ \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial \tau} \right)^2 + \left( \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial x} \right)^2 \right]$$

其中  $c = J\sqrt{g}$ ,  $\tilde{g} = \sqrt{g}$

- 不知道什么原因，这个模型被叫作nonlinear  $\sigma$  模型
- 对称性  $O(N)$

## 另外一种路径积分: Series expansion representation

Taylor expansion  $e^{-\beta H} = \sum_n^\infty \frac{(-\beta)^n}{n!} H^n$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \sum_{\{\alpha\}_n} \langle \alpha_0 | H | \alpha_{n-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H | \alpha_0 \rangle$$

- Similar to the path integral!
- For hard-core bosons, the **allowed path weights** is  $W(\text{path}) = \beta^n / n!$

# Series expansion representation: 与经典统计物理问题的对应

Taylor expansion  $e^{-\beta H} = \sum_n^\infty \frac{(-\beta)^n}{n!} H^n$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \sum_{\{\alpha\}_n} \langle \alpha_0 | H | \alpha_{n-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H | \alpha_0 \rangle$$

For any model,  $He^{-\beta H} = \sum_n^\infty \frac{(-\beta)^n}{n!} H^{n+1}$

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \sum_{\{\alpha\}_{n+1}} \langle \alpha_0 | H | \alpha_n \rangle \cdots \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H | \alpha_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \frac{n}{\beta} \sum_{\{\alpha\}_n} \langle \alpha_0 | H | \alpha_{n-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H | \alpha_0 \rangle$$

$$Z = \sum_{\Gamma} W(\Gamma), \quad \Gamma \text{ 由 } \{\alpha\}_n \text{ 决定, } \langle H \rangle = \frac{\sum_{\Gamma} \frac{n}{\beta} W(\Gamma)}{\sum_{\Gamma} W(\Gamma)} = \frac{\langle n \rangle}{\beta}$$

## Series expansion representation: 与经典统计物理问题的对应

Taylor expansion  $e^{-\beta H} = \sum_n \frac{(-\beta)^n}{n!} H^n$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \sum_{\{\alpha\}_n} \langle \alpha_0 | H | \alpha_{n-1} \rangle \cdots \langle \alpha_2 | H | \alpha_1 \rangle \langle \alpha_1 | H | \alpha_0 \rangle$$

$$Z = \sum_{\Gamma} W(\Gamma), \quad \Gamma \text{ 由 } \{\alpha\}_n \text{ 决定, } \langle H \rangle = \frac{\sum_{\Gamma} \frac{n}{\beta} W(\Gamma)}{\sum_{\Gamma} W(\Gamma)} = \frac{\langle n \rangle}{\beta}$$

similarly,

$$C = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle$$

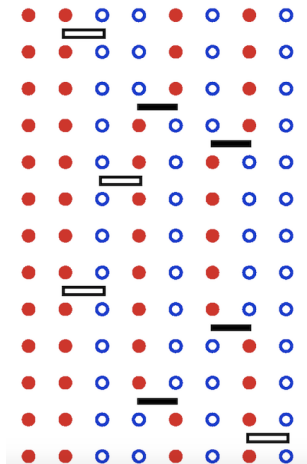
能量正比于  $N$ , 所以  $\langle n \rangle \approx N\beta$ ; 热容量正比于  $N$ ,  $\sigma_n \approx \sqrt{N\beta}$ ,  $n$  的分布很窄!

# 量子蒙卡可以理解为寻找量子模型的经典对应

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}\{Ae^{-\beta H}\}}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \rightarrow \frac{\sum_c A_c W_c}{\sum_c W_c}$$

- An SSE configuration

+1 +1 -1 -1 +1 -1 +1 -1



- $S_z$  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  
 $m_{sz} = \sum_i (-1)^{i_x+i_y} s_{iz}/N$
- 缺陷: 有些量子模型很难找到非负权重的经典表示  $\rightarrow$  符号问题

# 量子相变的场论描述

- 粗粒化场  $\Phi(\mathbf{r}, \tau) \sim \sum_i \mathbf{s}(\tau)$



- ▶ 按照路径积分的想法将  $D$  维量子系统写成  $(D + 1)$  维经典场论

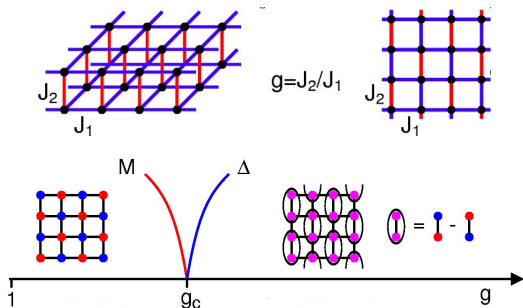
$$\mathcal{S}(\Phi) = \int d\mathbf{r}d\tau ((\partial_\tau \Phi)^2 + v^2(\nabla_x \Phi)^2 + s\Phi^2 + u(\Phi^2)^2)$$

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\Phi e^{-\mathcal{S}(\Phi)}$$

- ▶ 很多量子相变可以通过 Landau-Ginzburg-Wilson 理论框架理解

► 例如: 反铁磁Néel-顺磁量子相变

$H(J_1), H(J_2)$ : dimerized AF Heisenberg Hamiltonian,  $g = J_2/J_1$



- 近似于Quantum rotor model, 或者 $O(3)$  nonlinear  $\sigma$  model
- 3D classical Heisenberg universality class:
- confirmed by QMC
- Experimental realized



# 量子临界性的有限尺寸标度

- $D$ 维量子系统可以映射为 $D + 1$ 维经典系统，但是虚时方向关联要注意

$$\xi \sim \delta^{-\nu}, \quad \xi_\tau \sim \delta^{-z\nu} \sim \xi^z \quad z \text{ 为动力学临界指数}$$

- 根据Wilson重整化理论

$$f_s(\delta, h, u) = b^{-d-z} f_s(\delta b^{y_t}, h b^{y_h}, u b^{y_u})$$

对应的有限尺寸标度为

$$f_s(\delta, h, u, 1/L, 1/\beta) = L^{-d-z} f_s(\delta L^{y_t}, h L^{y_h}, u L^{y_u}, 1, L^z/\beta)$$

- 设 $A(g, L \rightarrow \infty) \sim \delta^\kappa$ ，为对自由能的某个导数得到，通过取 $b = \delta^{-1/y_t}$

$$A(\delta, h, u) = \delta^\kappa f_s(1, 0, u \delta^{-y_u/y_t})$$

那么在有限尺寸

$$A(\delta, h, u, 1/L, 1/\beta) = L^{-\kappa y_t} f_s(\delta L^{y_t}, h L^{y_h}, u L^{y_u}, 1, L^z/\beta)$$

- $\delta = h = 0$ 时，同时保证 $\beta \sim L^z$  或者  $\beta \rightarrow \infty$ ，得到 $A(g_c, L) \sim L^{-\kappa/\nu}$

# 利用有限尺寸导出标度律

- 量子系统的物理量有时不能与自由能导数联系

比如玻色系统的压缩率 $\kappa$ , 可以理解为虚时方向序参量扭曲 $\pi$ 角带来的自由能增量

$$\Delta f_s \sim \kappa(\pi/\beta)^2$$

- 选取 $b = \xi$

$$f_s(\delta, 0, 1/L, 1/\beta) = \xi^{-d-z} f_s(1, 0, \xi/L, \xi^z/\beta)$$

- 临界点附近 $\xi \rightarrow \infty, L = \xi, \beta = \xi^z$
- 自由能增量 $\Delta f_s \sim \xi^{-d-z}(f_s(\pi) - f_s(0))$

$$\kappa \sim \beta^2 \Delta f_s \sim \xi^{2z-d-z} \sim \delta^{(d-z)\nu}$$

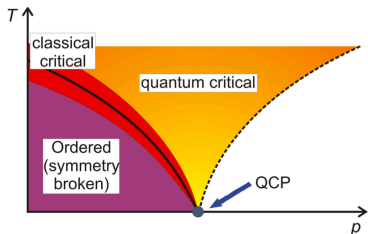
# 量子系统的‘经典’相变

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**



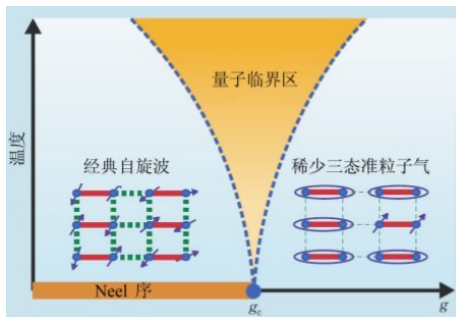
- 二维量子Ising 模型

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！**

# 量子相变发生在零温，有没有物理意义？



- 另一个特征长度  $\lambda_d = \hbar c/k_B T$
- 如果  $\xi < \lambda_d$ , 基态可以表示为直积态, 相反, 临界!
- 但是以上讨论只适用于  $T \ll J$ : 热涨落能量要小于耦合强度

# 提纲

多体平衡态统计物理基础

相变基础知识

临界现象模型与理论

Ising model, 关联函数

标度理论与重整化群

有限尺寸标度

LGW 连续场论描述

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

## 量子相变里的拓扑



这三位2016年诺贝尔奖获得者将拓扑引入了物理学



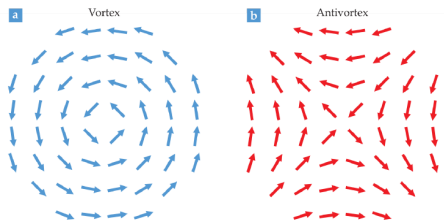
# 拓扑相变

没有长程序的二维XY类模型中发生的相变:

## Kosterlitz-Thouless相变



- 存在拓扑激发(或缺陷): 涡旋
- 正负涡旋在 $T < T_c$ 时束缚在一起
- $T > T_c$ 涡旋对解束缚导致相变
- 不能用局域序参量描述



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

# Haldane 的推广

一维量子反铁磁Heisenberg 模型

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

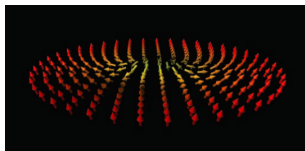


受KT思想启发，Haldane注意到了路径积分中的拓扑

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

$\mathbf{n} = (-1)^x \mathbf{S}_i$ ; 其中最后一项是拓扑项, 来自量子力学Berry phase

- 拓扑缺陷skyrmion
- skyrmion number  $Q$ 类似于涡旋的拓扑荷
- 自旋整数的系统 $\exp(S_B) = 1$ ; 拓扑平庸
- 自旋半整数系统 $\exp(S_B) = (-1)^Q$



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

拓扑项怎么来的？

# 自旋相干态(spin coherent states)

- ▶  $\mathbf{N}$  是3维单位矢量,  $|\mathbf{N}\rangle$  是由 $\mathbf{N}$ 标志的态
- ▶ 完备性

$$\langle \mathbf{N} | \mathbf{S} | \mathbf{N} \rangle = S \mathbf{N}, \quad S \text{ 为自旋量子数}$$

$$(2S + 1) \int \frac{d\mathbf{N}}{4\pi} |\mathbf{N}\rangle \langle \mathbf{N}| = 1$$

- 考虑一个外磁场中的量子自旋

$$H(\mathbf{S}) = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}$$

- 利用路径积分写出其配分函数, 其中

$$\langle \mathbf{N}(\tau + \Delta) | e^{-\Delta H(\mathbf{S})} | \mathbf{N}(\tau) \rangle = 1 - \Delta \left( \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} \mathbf{N}(\tau) \rangle + H(\mathbf{S}\mathbf{N}) \right)$$

$$\approx \exp \left[ -\Delta \left( \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} \mathbf{N}(\tau) \rangle + H(\mathbf{S}\mathbf{N}) \right) \right]$$

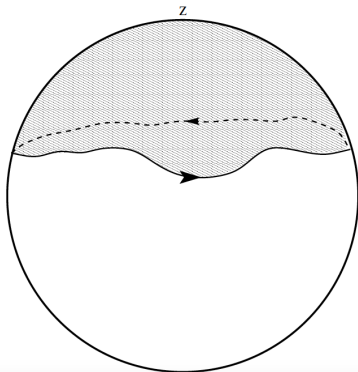
$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{N} \exp \left[ -\int d\tau H(\mathbf{S}\mathbf{N}(\tau)) - \mathcal{S}_B \right]$$

其中

$$\mathcal{S}_B = \int_0^\beta d\tau \langle \mathbf{N}(\tau) | \frac{d}{d\tau} | \mathbf{N}(\tau) \rangle$$

# Berry phase

$$\mathcal{S}_B = iS \int_0^\beta d\tau \int_0^1 du \mathbf{N} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \tau} \right)$$



## 二维系统?

- 在AF Néel序, 由于序参量平滑变化, 即使 $S = 1/2$ 系统 $S_B$ 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

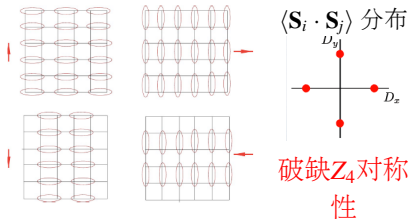
$$H = J \sum \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + gH_1$$

- Demerized Heisenberg 模型每个原胞中有偶数个 $S = 1/2$ 自旋, 它的无序态是平庸的顺磁态, 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

- 但是在非平庸的量子顺磁态, 拓扑激发可以起重要作用: 比如导致破缺平移对称性的VBS态

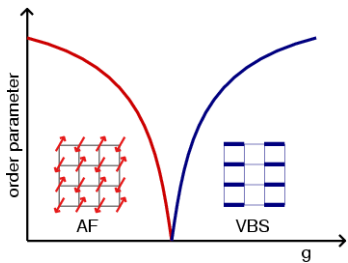
Read and Sachdev, PRL 62, 1694(1989)

- 从Néel态到VBS态相变会是怎样的?



# 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)



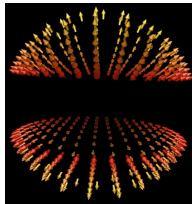
- 顺磁相quadrupled Skyrmion 导致VBS: **relevant**  
Read and Sachdev,PRL 1989
- 相变点处拓扑激发不起作用: **irrelevant**,  
**3D defect-suppressed O(3)**普适类
- **dangerously irrelevant**: 两个发散尺度
- 后果很严重: **violate Landau's rule**;  
既不是3D O(3) 也不是3D O(2); 3D Z<sub>4</sub>模型  
中Z<sub>4</sub> 各向异性是**dangerously irrelevant**

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
- $NCCP^1$  action

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

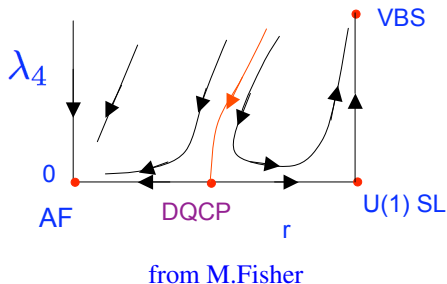
- VBS一侧spinon感受到线性势:confined, 在临界点deconfine



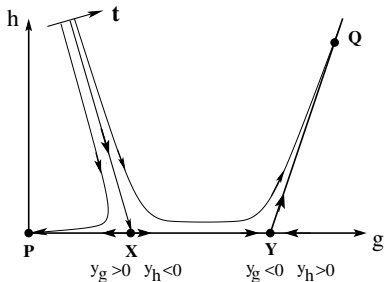
Q的改变对应hedgehog

# Expected RG flows in DQC

$\lambda_4$ 是拓扑缺陷的逸度(fugacity)



$Z_q$  模型的重整化流图



Skymion的dangerously irrelevant行为类似于3D  $Z_4$  models:

$Z_4$  各向异性的dangerously irrelevant

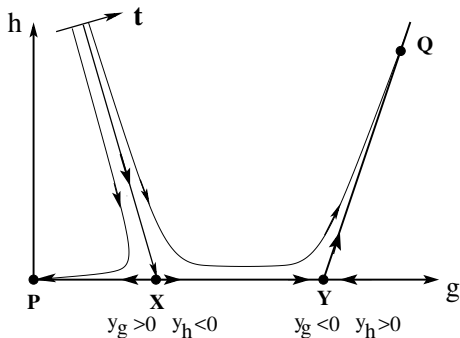


# Dangerously irrelevant perturbations: two length scales

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \cos(q\theta_i)$$



$$q = 6$$



*h* is dangerously irrelevant

- irrelevant at critical point
- relevant at ordered state

**Fixed points:**

P = paramagnet

X = 3D XY critical

Y = XY symmetry breaking

Q =  $Z_q$  symmetry breaking

Okubu et al PRB 2015

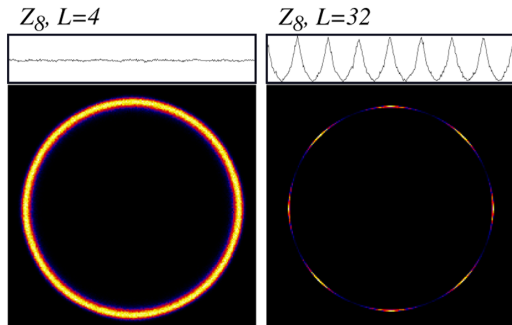
- correlation length  $\xi \propto (g - g_c)^{-\nu}$ ;
- cross-over length scale from XY order to  $Z_q$  order  $\xi' \propto (g - g_c)^{-\nu'}$

## 通过MC 模拟显示 $Z_q$ 模型的crossover 行为

- standard order parameter  $(m_x, m_y)$

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

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



- quantified with 'angular order parameter'

$$m_q = \int d\theta \cos(q\theta) P(\theta)$$

- ▶ 当  $L < \xi'$ ,  $m_q = 0$
- ▶ 当  $L > \xi'$ ,  $m_q \neq 0$

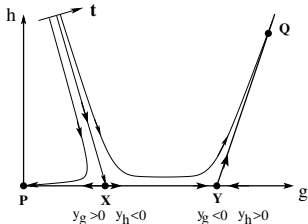
# study RG flows with MC

Shao, Guo, Sandvik, work in progress

- Binder cumulant at fixed points

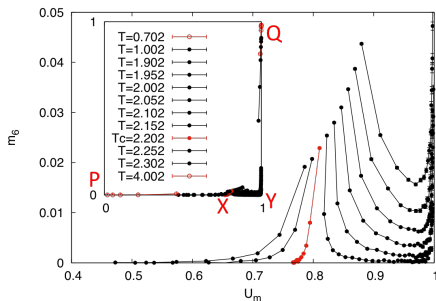
$$U_m = 2 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2},$$

- $m_q$  quantifies the degree of  $Z_q$  anisotropy



给定 $T$ , 随着 $L$ 增大,  $U_m$ 分别流向不同的不动点

$$U_m = \begin{cases} 0, & PM \\ 0.77, & T_c \\ 1, & XYFM \end{cases} \\ L = 2, 3, 4, \dots$$



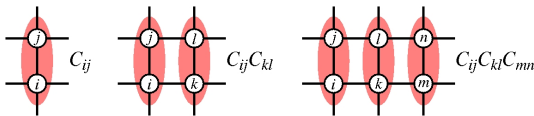
定量看到crossover尺度

# 数值模拟方法研究DQC

海森堡模型加上多自旋祥和作用: ”人造” $J$ - $Q$  模型

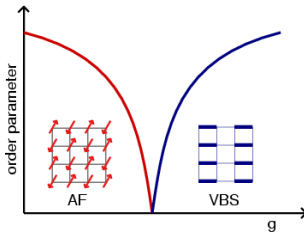
Sandvik, PRL, 2007

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} C_{ij} - Q \sum_{\langle ijkl \rangle} C_{ij} C_{kl}, \quad C_{ij} = \left( \frac{1}{4} - \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)$$



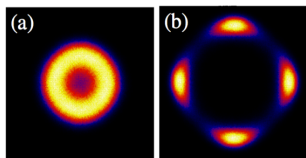
Lattice symmetries are kept

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

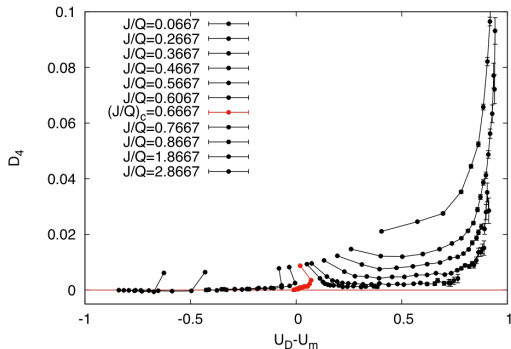
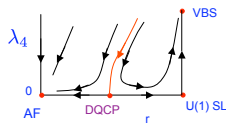


# Emergent U(1) and RG flows in the $J-Q_3$ model

$P(D_x, D_y)$ : 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
- Shows similarity with the  $Z_q$  models, but  $Z_q$  models only have one ordered phase, **different universality expected**



Shao, Guo, Sandvik (work in progress)

# 标度失效: Winding numbers 的奇怪标度行为

- 两个序参量的FSS定出 $\eta_s \approx \eta_D \approx 0.27$ : 一个连续相变; 不同于3D O(3)

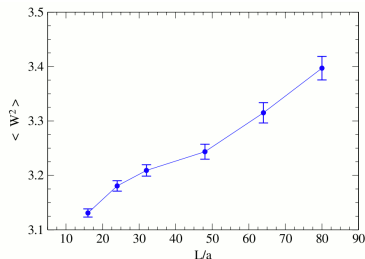
Winding number 与自旋硬度和磁化率的关系

$$\langle W^2 \rangle = 2\beta\rho_s + \frac{4N}{\beta}\chi$$



对于 $J$ - $Q$  模型  $z = 1$ , 意味着 $\beta \propto L$ ; 通常的有限尺寸标度 $\rightarrow$ 临界点

$$\rho_s \propto L^{-1}, \chi \propto L^{-1} \rightarrow \langle W^2 \rangle = \text{constant}$$

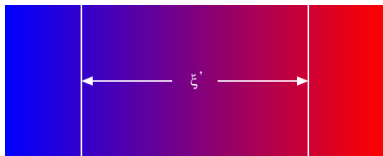
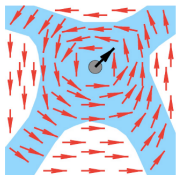


Jiang et al. 2008

- **large scaling corrections?**  
Sandvik PRL 2010, Bartosch PRB 2013
- **weak first-order transition?**  
Chen et al PRL 2013
- 对此困境的综述  
Nahum et al, PRX, 2015

## 两个长度尺度—畴壁

- 对  $\xi' \sim \delta^{-\nu'}$  的直观理解:  $Z_4$  模型中的畴壁厚度  
粗粒化的自旋连续旋转!  $\rightarrow$  临界行为 3D O(2),  $\xi \sim \delta^{-\nu}, \nu < \nu'$



from Sentil 2004

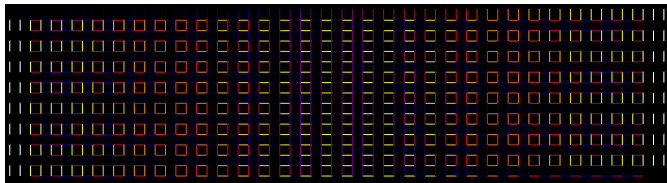
设置边界条件制造畴壁,  
自由能增加

$$\delta F = F_{\text{wall}} - F_{\text{uniform}}$$

$$\text{定义 } \kappa = \delta F / L^{d+z-1}$$

$$\kappa \sim \frac{1}{\xi \xi'}$$

- VBS domain wall 应该有类似性质



# 对3D $Z_q$ 模型畴壁的有限尺寸标度研究

3D q-state clock model ( $q > 4$ ) ( $Z_q$  类):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

- ▶  $\theta$  只能取  $q = 6$  个角度

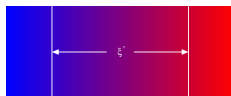


- 热力学极限下，畴壁能

$$\kappa \sim \frac{1}{\xi \xi'}$$

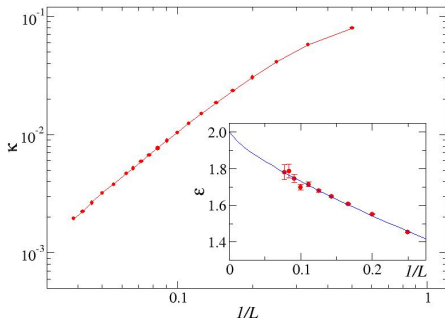
- 模拟表明  $T_c$  处的有限尺寸行为是

$$\kappa \sim L^{-2}$$



$$\xi \sim \xi'^{\nu/\nu'}, \nu/\nu' \approx 0.47, \nu' \text{ is universal}$$

Léonard and Delamotte, PRL 2015



有限尺寸标度对应  $\xi \rightarrow L, \xi' \rightarrow L$

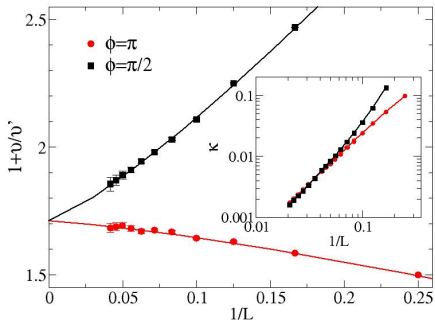
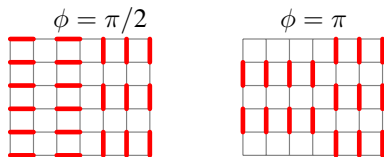


# VBS domain-wall scaling in the critical J-Q model

- 开放边界条件制造两种畴壁
- 根据DQC理论

$$\kappa \propto \frac{1}{\xi\xi'}$$

- 有限尺寸标度
  - ▶  $\xi \rightarrow L, \xi' \rightarrow L: \kappa \sim L^{-2}$  ?
  - ▶  $\xi' \rightarrow L$ , 由于  $\xi < \xi'$ , 因此  $\xi$  饱和于  $L^{\nu/\nu'}$ :  $\kappa \sim L^{-(1+\nu/\nu')}$  ?
- 数值结果表明  $\nu/\nu' = 0.72(2)$  符合之前独立算出的  $\nu = 0.45(1), \nu' = 0.58(2)$



- 直接显示了DQC理论中的两尺度行为!
- 又不同于经典系统中的“dangerously irrelevant perturbation”

## 量子临界两尺度标度

- 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**

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

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

**For example:** spin stiffness  $\rho_s$ ,  $\kappa = \nu(d + z - 2) = 1$ . At  $q_c$

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

- We provide a phenomenological explanation

# General scaling theory for $\rho_s$ , single length scale

Fisher et al PRB,40,546(1989)

Free energy density scales

$$f_s(\delta, L, \beta) \sim \xi^{-(d+z)} Y\left(\frac{\xi}{L}, \frac{\xi^z}{\beta}\right), \quad \xi \sim \delta^{-\nu}$$

- $\rho_s \frac{\Delta^2 \phi}{L^2}$  is the excess energy due to a **twist along apace**:

$$\Delta f(\delta, L, \beta) \sim \xi^{-(d+z)} \tilde{Y}\left(\frac{\xi}{L}, \frac{\xi^z}{\beta}\right) \sim \rho_s \frac{\pi^2}{L^2}$$

- $\tilde{Y}$  has to behave like  $(\xi/L)^2$ , thus

$$\rho_s \sim \xi^{2-(d+z)} \sim \delta^{\nu(d+z-2)}$$

- replacing  $\xi$  to  $L$ , we have  $\rho_s \sim L^{-(d+z-2)}$

## Two length scales scenario

Free energy density scales

$$f_s(\delta, L, \beta) \sim \xi^{-(d+z)} Y\left(\frac{\xi}{L}, \frac{\xi^z}{\beta}, \frac{\xi'}{L}, \frac{\xi'^z}{\beta}\right)$$

- the excess energy due to a twist along apace:

$$\rho_s \left(\frac{\Delta\phi}{L}\right)^2 \sim \Delta f(\delta, L, \beta) \sim \xi^{-(d+z)} \tilde{Y}_s\left(\frac{\xi}{L}, \frac{\xi^z}{\beta}, \frac{\xi'}{L}, \frac{\xi'^z}{\beta}\right)$$

which means

$$\tilde{Y}_s \sim \left(\frac{\xi}{L}\right)^a \left(\frac{\xi'}{L}\right)^{2-a}$$

- The larger correlation length  $\xi'$  reaches  $L$  first, so  $L = \xi'$   
we have  $a = 2$ , and

$$\rho_s \sim \xi^{-(d+z-2)} \sim \delta^{\nu(d+z-2)}$$

but, since  $L = \xi'$ ,  $\xi$  saturates at  $\xi = L^{\nu/\nu'}$ ,

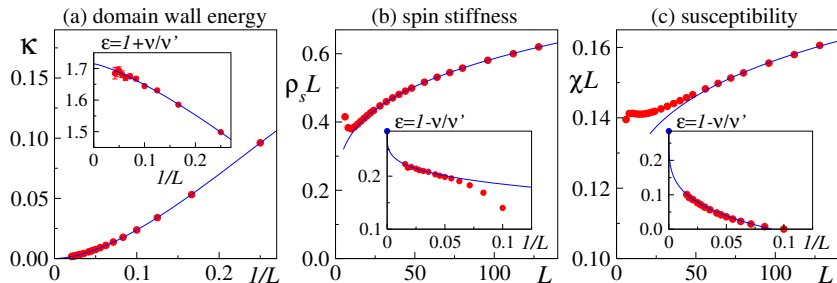
$$\rho_s \sim L^{-(d+z-2)\nu/\nu'}$$

# Evidence for unconventional scaling

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 ( $z = 1, d = 2$ )

## 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).