

國立政治大學理學院應用物理研究所

碩士論文

Graduate Institute of Applied Physics

College of Science

National Chengchi University

Master Thesis

反鐵磁易辛自旋鏈在外加橫場及縱場
的量子蒙地卡羅計算

Quantum Monte Carlo studies of the antiferromagnetic Ising spin
chain in transverse and longitudinal fields

徐哲仁

Zhe-Ren Hsu

指導教授：林瑜瑋 博士

Advisor: Yu-Cheng Lin, Dr. rer. nat.

中華民國 一零三年 七月

July, 2014

致謝

首先誠摯地感謝指導教授林瑜琤老師，悉心的教導使我得以一窺量子多體物理的深奧，並竭盡耐心在碩班學求階段指點我正確的方向。

另外亦得感謝所長楊志開老師、臺灣大學物理系高英哲老師以及清華大學物理系陳柏中老師，不辭舟車勞苦來校主持我的學位口試。

感謝眾位同學共同砥礪，你們的陪伴讓碩班生活變得絢麗多彩。

最後，謹以此文獻給我摯愛、人生道路上持續支持我的雙親。



摘要

磁性物質於絕對零溫時的量子相變為近代凝態物理的主要研究課題之一。在本論文中我們應用量子蒙地卡羅模擬探討橫場及縱場下之反鐵磁易辛自旋鏈的零溫相圖及其臨界現象。近鄰易辛反鐵磁性交互作用驅使系統形成 z 方向的交錯磁有序。隨著橫向磁場 h^x — 此為量子力學參數 — 的改變，易辛自旋鏈將由具反鐵磁性的有序基態（當易辛交互作用為主宰項時）經量子相變至順磁性基態（當外加橫場主宰系統時）。加諸一沿易軸方向的磁場 h^z 能進一步削弱反鐵磁有序。我們考慮兩種類型的交互耦合：一、均質情形：自旋交互作用及加諸於各自旋的磁場均與晶格點位置無關；二、無序情形：自旋交互作用及加諸於各自旋的橫向磁場為隨機無序的。對均質系統而言，在 (h^x, h^z) 相圖平面上一臨界線區隔反鐵磁相及順磁相，該臨界線終止於 $h^x = 0$ 處之多相臨界點，此處發生古典一階相變。數值結果得以驗證均質系統 $h^x > 0$ 的臨界線屬二維古典易辛模型的相變普適類。而對於無序系統來說， $h^z = 0$ 處為一具有無窮大動力學指數的非尋常量子臨界點；在有限縱場之下，我們的數值結果顯示量子相變因無序效應而變模糊不明確。

關鍵字：

量子反鐵磁易辛自旋鏈，量子相變，臨界點，強無序



Abstract

The study of quantum phase transitions in magnetic materials has been a major focus of modern condensed-matter physics. In this thesis we study the zero-temperature phase diagram and critical properties of the antiferromagnetic Ising spin chain in transverse and longitudinal magnetic fields by quantum Monte Carlo simulations. The nearest-neighbor Ising interaction favors staggered magnetic ordering along the z axis. As we vary a transverse magnetic field h^x , which is a quantum mechanical parameter, the Ising spin chain will undergo a quantum phase transition from an antiferromagnetic ordered ground state when the interaction dominates to a paramagnetic ground state when the applied transverse field dominates. A magnetic field h^z applied along the Ising axis can further destabilize antiferromagnetic order. We consider two types of couplings: (i) the homogeneous case where the interaction and the magnetic fields are site-independent; (ii) the disordered case where site-to-site variations of the interaction and the transverse field are random. For the homogeneous case, the antiferromagnetic phase and the paramagnetic phase are separated by a critical line in (h^x, h^z) plane, ending at the multicritical point with $h^x = 0$ where a classical first-order transition occurs. It is found numerically that the critical line for $h^x > 0$ belongs to the universality class of the two-dimensional classical Ising model. For the disordered case, the quantum critical point for $h^z = 0$ is of unconventional infinite-randomness type with infinite dynamic exponent. In a finite longitudinal field, our numerical results suggest that the sharp global quantum phase transition is destroyed by smearing.

Keywords:

quantum antiferromagnetic Ising chain, quantum phase transition, critical point, strong disorder



目錄

致謝	i
中文摘要	iii
英文摘要	v
目錄	vii
第一章 引言	1
第二章 簡述臨界現象與量子相變	3
2.1 相變及臨界現象	3
2.2 量子相變	5
2.3 無序效應	6
第三章 模型概述	9
3.1 橫場下的易辛模型	9
3.2 橫場及縱場下的易辛模型	12
第四章 量子蒙地卡羅模擬方法	17
4.1 量子-古典易辛模型的對應	17
4.2 Metropolis 演算法	22
4.3 複製系統交換演算法	24
4.3.1 古典模型的情況	25
4.3.2 量子模型的情況	28
第五章 易辛反鐵磁的量子蒙地卡羅計算	31
5.1 二維古典易辛反磁鐵之臨界現象	31
5.2 一維均質量子易辛反鐵磁	36
5.3 無序效應對量子相變之影響	45
第六章 總結與展望	51
參考文獻	53



第一章 引言

我們的物質世界是由大量具交互作用的粒子（原子、分子等）組合而成，而關聯性多體系統浮現出的複雜度及多樣性絕非可藉單一粒子或少數粒子的行為作延伸得出的，這也是諾貝爾獎得主 P. W. Anderson 在他著名的文章”*More Is Different*” [1] 中所強調的科學哲學概念。

在關聯性多體系統呈現的許多複雜現象中，「相變」(phase transition) 的發生可說是最引人的研究課題之一。相變在我們日常生活中算是習以為常的現象，例如我們觀察到水達高溫時轉化成蒸氣，或我們觀察到水結成冰的現象。物質一般可處於「固態」、「液態」及「氣態」；這三相態間的轉變即為相變的發生。但物質相態或相變的多樣性遠超過這些「日常現象」，舉凡：導體—絕緣體的轉換、磁性物質磁化的產生或消失、超導現象的形成、玻色—愛因斯坦凝聚 (Bose–Einstein condensation)、或液晶 (liquid crystal) 呈現的數十種豐富相態間的變化等等均是相變現象。理論物理的核心價值之一當然在於建立一可解釋千萬種相變現象的理論，始於二十世紀中期建立的相變理論架構雖已幫助我們瞭解許多相變的機制，但相變牽涉的複雜度還留下許多待解的問號，所以相關研究一直是近代物理領域的焦點。

為定量研究相變現象，理論物理學家常藉助微觀統計力學模型，這類模型引入相關物質的主要特性（如交互作用力的範圍，或粒子的自由度等），但忽略材料的成份（包含哪些特定化學元素等）。如此看似簡化的模型，卻常面臨無法求得解析解的困境，更明確地說，精確解析解僅存在極少數的統計力學模型，所以藉助電腦的數值計算已成為理論多體物理必然發展的一支。事實也顯示，數值計算提供的不是僅是一些帶「小數點的數字」，它們也常釐清理論觀念，其他更廣更深的影響當然包含新模型的建立及計算方法跨領域的應用。

本論文將以電腦計算的方法探討一稱為「量子易辛模型」的相變行為。論文的架構大致如下：下一章概述相變及發生在絕對零度的量子相變，亦簡述含雜質系統的無序效應對相變可能的影響；在第三章我們給出模型的定義，並概述一些已知的性質；第四章描述我們所使用的數值方法—蒙地卡羅演算法；第五章呈現並討論我們的計算結果。



第二章 簡述臨界現象與量子相變

2.1 相變及臨界現象

承引言所提，物質相態千萬種，相變理論的建立首應區分不同的相態，或歸納看似不同卻屬同型的相態。根據 [2,3]，我們可藉幾類指標來區分物質相態：

對稱性 (symmetry)

水（液態）可視具旋轉及平移的對稱性，因為不管從何種旋轉角度或空間位置來看，吾人皆分別不出差異，然而分子呈晶格排列的冰卻不是，就是因為它具排列規則，所以不存在旋轉對稱以及平移對稱性質，稍微有些角度旋轉或空間移動即露出破綻（圖 2.1 (a,b)）；從水到冰即牽涉到旋轉及平移對稱的破壞，也是相變的發生。另一例子：高於居里溫度的鐵磁性物質，提供磁

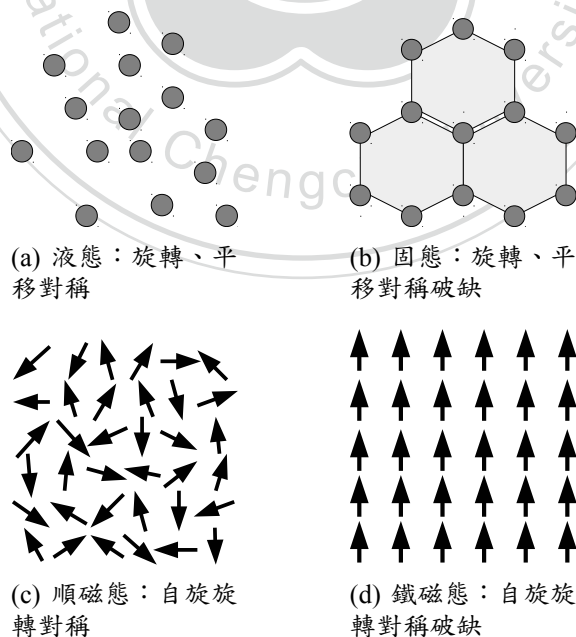


圖 2.1: 不同相態及其對應的對稱性（破缺）

矩的電子自旋因指向凌亂可視為具自旋旋轉對稱性，此時系統處於順磁相 (paramagnetic phase)，溫度降至居里溫度 (Curie temperature) 以下，大部分自旋指向同一方向，此為自旋旋轉對稱性自發性的破壞 (圖 2.1 (c,d))，系統處於鐵磁相 (ferromagnetic phase)。值得一提的是，相變的發生，不一定牽涉對稱性的破壞，如液態及氣態雖屬不同相態，但具有相同的對稱性。

序參數 (order parameter)

Landau 相變理論 [4] 引入序參數來描述相態的有序化程度以及伴隨相變的對稱性質之改變或破壞。一般而言，高對稱性 (無序) 的相態對應零序參數，低對稱性 (有序) 的相態對應有限的序參數。以順磁態-鐵磁態相變為例，序參數可選擇為磁化量 (magnetization)；磁化量在順磁相為零，在鐵磁相則為有限值。

元激發 (elementary excitations)

對稱性的破壞常伴隨元激發。根據 Goldstone 定理 [2]，一個連續對稱性 (例如旋轉或是平移) 破壞伴隨不具有質量的玻色子 (bosons) (又稱 Goldstone Modes) 的產生。例如，在晶體中，由於平移對稱性的破壞而產生聲子 (phonons)；而在磁性物質中，自旋旋轉對稱性的破壞產生磁子 (magnons)。但對應非連續對稱性 (discrete symmetry) 的破壞，如在單軸磁性物質中，並不產生 Goldstone 玻色子，而是有限能量的元激發。

物質從一相態轉換至另一相態即相變的發生，其機制可視為系統內能 E 與熵 S 的抗衡。根據熱力學原理，系統的平衡態對應自由能 $F = E - TS$ (T 為溫度) 最小的狀態。以水為例，系統能量取決於水分子間的交互作用，而當水分子排列成冰的晶格結構時，能量達最小值。熵的大小正比於系統內水分子所有組態數的對數，顯然地，液態水的熵大於冰。如此不難瞭解，低溫時固態具有較小的自由能，而高溫時液態熵的貢獻使得自由能得最小值。調控溫度，改變自由能的值，將使液態水-冰相變發生於 0° (一大氣壓下)。相變點發生處正是描述系統的熱力學函數呈現不解析之點。熱力學函數如熵、比熱等均可以自由能和它的導數表示 (比如熵是自由能對溫度的導數)。只要自由能是解析的，那麼熱力學的其它參數也是連續的。但對有限大小的系統來說，配分函數 (partition function) 及自由能永遠是可解析的，因此相變只發生在熱力學極限條件之下 (粒子數 $N \rightarrow \infty$)。

相變大致可分兩類型：一階的不連續相變，及二階的連續相變。以序參數及對稱性來作一般性描述：若相變發生於對應不同對稱性的相態間，或序參數在相變點呈不連續的改變，這類型的相變屬不連續相變；若相變發生於高對稱性與低對稱性的相態間，或序參數在相變點呈連續的改變，這類型的相變屬連續相變。¹ 更

¹但近年理論及電腦模擬上已發現上述分類的例外情形，例如對應獨立、不同對稱性破缺的兩相態間之直接相變可屬連續相變 [5,6]。

確切地說，不連續相變主要牽涉潛熱，以及相共存 (phase coexistence)。最常見的不連續相變應屬固、液、氣三態間的轉換。連續相變特徵則主要在於無窮大發散的關聯長度 (correlation length)，所謂關聯長度可視為系統的一距離度量，度量多遠兩處的微觀自由度漲落仍具明顯關聯性。在連續相變點（又稱「臨界點」），因為關聯長度發散，系統每一點（無論空間上的實際距離）均緊密互相關聯，這個大量自由度的強關聯性雖一方面看似複雜，另一方面卻也簡化了問題，原因在於：發散的關聯長度也意味微觀結構的不重要，也由此產生所謂普適性 (universality) 的概念。接近臨界點時，關聯長度及其他熱力學量呈現與至臨界點距離 ($|\delta|$) 的冪次方關係，冪次法則的指數稱為「臨界指數」(critical exponents)。以關聯長度 (ξ) 為例， $\xi \sim |\delta|^{-\nu}$ 定義了關聯長度臨界指數 $\nu (> 0)$ 。事實上，千萬種物質的連續相變可歸類於數個普適類 (universality class)，同屬一普適類的相變擁有相同的臨界指數。

臨界點處的冪次法則暗示「尺度不變性」(scale invariance)，其意思是指系統的物理性質不因尺度的改變而有所改變；這也正是「重正規化群方法」(renormalization group methods) [7,8] 的基礎。重正規化群方法的基本概念在於：藉循序改變系統尺度及降低系統自由度數目，持續將物理系統對應至一參數空間內的軌跡，最後我們將到達少數的不動點 (fixed points)，其中包含描述臨界點的不動點解。可簡單地說，在重正規化群過程中，不重要的因子將會於小尺度範圍逐漸消失，最終在大尺度極限留下的則是影響物理的關鍵因子。普適性、尺度標度化（見第五章）及對應不同物理量的臨界指數間的關係均可透過重正規化群法建立起來。

2.2 量子相變

量子相變（又稱零點相變）是指量子多體系統基態性質的驟變 [9]。量子相變之研究，無論在理論或實驗方面，可說是強關聯系統領域的核心。至今最被深入探討的量子相變莫屬於磁性物質基態的磁有序 (magnetic order) 受量子擾動破壞而消失的現象。不同於由熱擾動 (thermal fluctuations) 引發的古典（非量子）相變，造成量子基態性質驟變的變因在於所謂「量子漲落」(quantum fluctuations)；因為發生於絕對零度 $T = 0$ ，控制量子漲落的參數非溫度相關的，而是系統哈密頓算符 (Hamiltonian) 的某一參數 (λ)，如磁場、壓力或化學成分等。

我們將侷限討論連續（二階）量子相變，如同連續古典相變，此類相變的發生伴隨著一在臨界點發散的關聯長度 ξ ：

$$\xi \sim |\lambda - \lambda_c|^{-\nu}, \quad (2.1)$$

這裡 $|\lambda - \lambda_c|$ 定義至量子臨界點 λ_c 的距離，指數 ν 為關聯長度指數。就量子相變

而言，隨著量子臨界點 λ_c 的逼近，基態漲落的特徵能量尺度 Δ 也呈冪次型的消失：

$$\Delta \sim |\lambda - \lambda_c|^{z\nu}, \quad (2.2)$$

定義另一臨界指數 z ，稱為動力學指數 (dynamic exponent)；這裡指的特徵能量尺度可為最低激發態至基態間的能隙，或連續能量譜從最低頻至最高頻的變化指標。綜合式 (2.1) 及 (2.2) 得

$$\Delta \sim \xi^{-z}. \quad (2.3)$$

考慮特徵時間 $\xi_\tau \sim \Delta^{-1}$ ，上式建立了量子相變問題時間上及空間上關聯長度的關係：

$$\xi_\tau \sim \xi^z. \quad (2.4)$$

由此我們也看出在量子相變問題空間及時間的關聯性是不可分的，這也是量子相變與古典相變最大不同處之一。

一般而言，處理量子多體系統及其可能的相變行為較古典多體系統問題來得棘手，其主要原因在於描述量子多體系統哈密頓算符 (\hat{H}) 內稟的不對易項使得一些解析或計算方法不適用或無法直接應用於此。但當我們將溫度 T 於時間 t 作下列轉換時

$$\frac{1}{k_B T} \leftrightarrow \frac{i}{\hbar} t, \quad (2.5)$$

(k_B 為波茲曼常數 (Boltzmann's constant)； \hbar 為 (Planck's constant))，我們可將量子統計力學的波茲曼機率與時間演進算符作對比：

$$e^{-\beta\hat{H}} \leftrightarrow e^{-it\hat{H}} \quad (2.6)$$

這裡及本論文引入 $\beta \equiv 1/k_B T$ ，並為方便我們設常數 $\hbar = 1, k_B = 1$ 。如此許多量子統計力學問題可藉虛數時間的 Feynman 路徑積分方法 [10, 11] 處理。 D 維度量子多體系統配分函數 (partition function) $Z = \text{Tre}^{-\beta\hat{H}}$ 在虛數時間—空間路徑積分表象中，則可表示為 $D + 1$ 維度古典對應系統的配分函數，其中多出的維度為長度 β 的虛數時間。如此許多處理古典相變的方法亦可藉上述量子—古典對應 (quantum-classical mapping) 在 $\beta \rightarrow \infty$ 極限下應用於量子相變問題；這個路徑積分表象也有助我們理解空間與時間在量子相變問題是緊密不可分的。

2.3 無序效應

任何真實物質內總不免含有雜質或缺陷。一般而言，不均質性使物質傾向處於無序態，在有些情況下，甚至完全破壞有序態；若無序態—有序態相變仍存在，

無序效應也可能會改變臨界行為的普適類。這裡我們只關注與時間無關的雜質或缺陷，也聚焦於無序交互耦合的效應。

判斷無序交互耦合是否對均質臨界點具影響的一重要準則為 Harris 準則 (the Harris criterion) [12]；根據這準則，若對應均質臨界點的關聯長度指數 ν 滿足下列不等式，則無序效應的影響在大尺度範圍可被忽略

$$D\nu > 2, \quad (2.7)$$

其中 D 為系統的維度；也就是，當不等式 (2.7) 成立時，無序系統與未加雜質的均質系統的臨界行為將相等，同屬一相變普適類。反之，若

$$D\nu < 2, \quad (2.8)$$

微量的無序將偏離均質系統的臨界行為。當 $D\nu = 2$ ，則屬不確定的邊緣情況。

上述的 Harris 準則解釋如下：假設一 D 維度的無序系統處於非臨界點，處於溫度 $T (> T_c)$ 。我們將系統劃分成數個區域，每區域的線性長度為關聯長度 ξ ，體積為 ξ^D 。因為無序性質，每區域有所屬的局域臨界溫度，局域臨界溫度與整體系統的臨界溫度不一定相等。從中央極限定理 (central limit theorem)，我們可得出局域溫度的均偏差

$$\delta' \sim \xi^{D/2} / \xi^D \sim \xi^{-D/2}. \quad (2.9)$$

另一方面，由關聯長度與臨界點距離 ($\delta = T - T_c$) 的關係得

$$\delta \sim \xi^{-1/\nu}. \quad (2.10)$$

我們比較局域臨界溫度均偏差 δ' 與系統溫度至臨界點的距離 δ ，若

$$\delta' < \delta, \quad (2.11)$$

則區域性的擾動不顯著，系統整體趨向均質，也就是，存在的不均質不會改變純淨系統的臨界行為。可看出，為滿足式 (2.11) 條件，不等式 (2.7) 必成立。

Harris 準則也適用於量子臨界點。值得注意的是，在這裡不等式中的維度 D 指的是量子系統的維度，而非所對應的古典模型的 $D + 1$ 維度，因為不等式中的維度來自考慮無序自由度所用的中心極限定理，而在對應的 $D + 1$ 古典模型，雜質整體完全地延伸至虛數時間軸方向，並不造成多一維度的無序。另一方面，虛數時間軸上的完全關聯性，也造成無序效應對量子系統的影響常比對古典系統的影響更顯著；以下我們就無序對量子相變的影響作描述。

在均質系統，熱力學量只於相變點發生奇點，偏離相變點這些奇點將消失；但



圖 2.2: 無序鐵磁性物質順磁相 Griffiths 奇點現象機制之示意圖。在無序的順磁相內因非均質性仍存在一局部呈鐵磁相的區塊，這些區塊發生機率不高，但可造成如磁化率等物理量在臨界點外區間亦產生奇點。(a) 白色區域示意在二維古典系統中順磁相內局部鐵磁相的區塊；(b) 在二維量子系統中，空間上的局部鐵磁相的區塊延伸至虛數時間方向，故可造成比在古典系統更明顯的 Griffiths 奇點現象。

在非均質系統，情形可能不同。1969 年 R. B. Griffiths [13] 首先以無序的古典單軸鐵磁性物質模型為例，提出非相變點區域奇點發生的可能性，背後原因在於非均質系統的順磁相內亦隨機存有局部有序鐵磁性的區塊，這些區塊產生的機率很小，但它們卻可使磁化率 (magnetic susceptibility) 及其他物理量產生奇點，這個現象被稱為 Griffiths singularities。雖然理論上 Griffiths 奇點現象可被預期，但在古典系統並不顯著，實驗上也難以被證實。同樣的概念在量子相變點附近卻可非常顯著，因為上述那些局部鐵磁性的區塊並不隨時間改變，它們將在對應的 $D + 1$ 古典模型中形成一多一維度的區塊，進而造成更顯著的影響 [14–16]。簡單地說，上述稀少 $D + 1$ 維區塊對應極長的鬆弛時間，也造成無序量子系統的動力學指數 ν (式 (2.4)) 將較均質系統的 ν 值大 [17–19]。量子 Griffiths 奇點現象已在實驗上被驗證出 [20–22]。

一般來說，在無序量子相變點附近，上述不尋常的動力學指數 ν 將隨至臨界點距離縮小而持續增大，在量子臨界點的動力學指數甚至可達無窮大 $\nu = \infty$ [17, 18]。無窮大的動力學臨界指數已知發生於本文將探討的量子無序易辛模型，一維系統的解是由一針對無序系統設計的重正規化群方法精確求得的 [17, 18]，多維度系統雖缺乏解析解，但其具有的無窮大動力學臨界指數也於一系列的數值計算得出 [23–26]。

第三章 模型概述

本章節描述論文探討的模型：量子易辛模型，及概述其一些相變有關的已知結果。易辛模型 (Ising model) 是探討相變的一典型模型，原用以描述具某一強易軸 (easy axis) 的磁性物質模型。我們稱一個「易辛自旋」(Ising spin) 為自由度為 2 的「粒子」，就電子自旋而言，即 z 分量 (易軸分量) 的上自旋 ("up" spin) 及下自旋 ("down" spin)。因用以探討關聯性系統，易辛自旋間存在某連結關係，此關係使相互連結的自旋選取對應能量低的自由度。

在所謂量子易辛模型上，自旋的狀態不再僅是兩個狀態，而是這兩個狀態的線性疊加 (superposition)，也就是目前熱門的量子資訊術語中的「量子位元」(qubit)。簡言之，量子易辛模型可視為一組具連結關係的量子位元。根據易辛模型的定義，量子模型還是屬非均向性 (anisotropy)，且具一強的、特殊的易軸 (又稱易辛軸)。

3.1 橫場下的易辛模型

LiHoF_4 絕緣體為實驗上常用來實現易辛鐵磁性模型及量子相變的磁性材料。在這個絕緣體中每個 Ho^{3+} 離子提供一淨磁矩，此磁矩由電子自旋及軌道角動量耦合而成，且沿一特定易軸指「上」或指「下」； Ho^{3+} 離子間的主要交互作用為偶極耦合 (magnetic dipole interaction)，此交互作用促使 Ho 離子磁矩 (易辛自旋) 趨於指向同一方向，低溫時當溫度造成的熱擾動不大時， LiHoF_4 將具自發性的磁性，也就是在無外加誘發磁場下大部分的自旋指向同一方向，為自發性對稱破缺 (spontaneously broken symmetry) 的一個例子，破壞的是所謂 \mathbb{Z}_2 對稱；當溫度升高至某一特定值 T_c ，溫度對自旋排列的效應遠大於自旋間交互作用力的有序效應，指向兩相反方向的自旋數目趨於相等，此時材質的磁性消失。這種由溫度調控的相變為古典連續相變的一個例子；臨界溫度 (critical temperature) T_c 界分一低溫時自旋排列有序的相 (ordered phase) 及高溫時無序的「順磁相」(disordered phase, paramagnetic phase)。將 LiHoF_4 置於垂直於上述易辛軸的外加磁場 (橫場) 中，橫場可引發 Ho 離子兩個自旋狀態間的量子穿隧效應 (quantum tunneling)，也就是外加橫場如同溫度可翻轉自旋指向，造成自旋有序排列的干擾。加上橫場這個額外的量子擾動因子， LiHoF_4 的有序—無序相變溫度 T_c 勢將降低，且 T_c 值將隨外

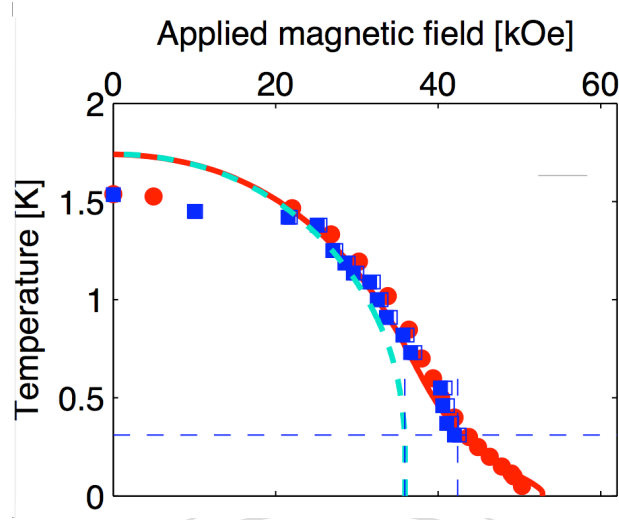


圖 3.1: LiHoF_4 絕緣體在外加橫場的相圖。相邊界（紅點、藍方塊等）分界低溫 ($T \lesssim 1.5\text{K}$) 弱場 ($\lesssim 50\text{ kOe}$) 區域的鐵磁相及高溫強場的順磁相。紅點為測量磁化率得來的相變點 [27]，藍方塊資料由中子散射測量得出。此圖截取自 [28] (論文正式出版於 [29])。

加橫場變大而降低，理論上可降至零點（圖 3.1）。這個現象已由 Bitko, Rosenbaum 和 Aeppli 等人實驗觀察到 [27]。 $T = 0$ 時由橫場調控的相變是完全由量子擾動引發的，故稱為量子相變。

上述置於橫場的易辛模型的哈密頓算符 (Hamiltonian) 可寫為：

$$\hat{H}_{\text{TFIM}} = \hat{H}_{zz} + \hat{H}_x, \quad (3.1)$$

$$\hat{H}_{zz} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z, \quad (3.2)$$

$$\hat{H}_x = -h^x \sum_i \hat{\sigma}_i^x. \quad (3.3)$$

其中的指標 i, j 用以表示模型晶格上的晶格點。 $\hat{\sigma}_i^z$ 和 $\hat{\sigma}_i^x$ 為描述晶格點 i 上自旋分量的厄立矩陣 (Pauli matrices)， \hat{H}_{zz} 描述易辛交互作用， J 為自旋間的交互耦合常數在此我們考慮只有相鄰的自旋間存在交互作用， $\sum_{\langle i,j \rangle}$ 中的 $\langle i, j \rangle$ 代表相鄰的一對自旋。交互耦合 J 的正負號決定系統的有序相是鐵磁性 (ferromagnetism) 或是反鐵磁性 (antiferromagnetism)；明顯地， $J < 0$ 屬鐵磁性耦合， $J > 0$ 屬反鐵磁性耦合。鐵磁性耦合引發相鄰自旋指向同一方向的趨勢（能量較低的狀態），反鐵磁性耦合則促使相鄰自旋指向相反方向。 \hat{H}_x 為橫場項。當橫場為零時， \hat{H}_{TFIM} 中所有算符均為 z 分量的厄立矩陣，故可將算符以其本徵值取代，模型即簡化成古典的易辛模型。當橫場不為零，因 \hat{H}_{zz} 和 \hat{H}_x 的不對易性 $[\hat{H}_{zz}, \hat{H}_x] \neq 0$ ，此時浮現問題的量子性質。

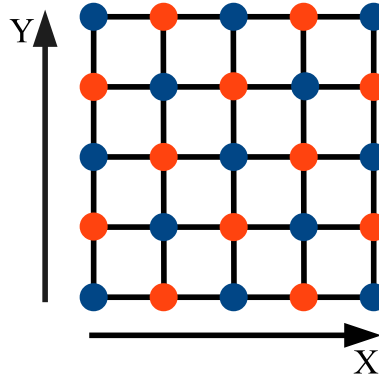


圖 3.2: 方晶格屬具相鄰交互耦合的易辛模型之二分晶格 (bipartite lattice)。我們可定義兩組交錯的子晶格，交互耦合只作用於位於不同子晶格的自旋。圖中藍晶格點及紅晶格點各屬一子晶格。

本論文探討的是易辛反鐵磁，但 \hat{H}_{TFIM} 的相變性質無關系統是鐵磁性或反鐵磁性。因為考慮短程相鄰的交互作用，系統的維度影響相變的性質。在此我們考慮方晶格，並聚焦於一維模型，許多結果也適用多維度的模型。

在熱力學極限（自旋數目 $N \rightarrow \infty$ ），調控橫場及反鐵磁耦合的比值 $\lambda \equiv h^x/J$ 經過一臨界值 $\lambda_c = 1$ 時系統的基態 (ground state) 呈現連續（二階）量子相變。在 $\lambda < \lambda_c$ ，系統基態呈現的是反鐵磁相，用來描述此相態的序參數為如下定義的 z 軸的交錯磁化量 (staggered magnetization) m_s ：首先將兩組交錯的晶格點定義成兩個子晶格，A 和 B，如此對任何晶格點來說，它和相鄰晶格點必分屬不同的子晶格（圖 3.2 以二維方晶格為例），也就是說，只有位於不同子晶格的自旋間才有交互作用，如此， z 軸交錯磁化量定義為

$$\langle m_s \rangle = \frac{1}{N} \langle \phi_0 | \sum_{i=1}^N \eta_i \hat{\sigma}_i^z | \phi_0 \rangle, \quad (3.4)$$

其中 $|\phi_0\rangle$ 為基態波函數， $\eta_i = \pm 1$ 取決於自旋所在晶格點屬於子晶格 A (+1) 或 B (-1)。在橫場消失時 $\lambda = 0$ ，基態呈雙重簡併，對應 $\langle m_s \rangle = 1$ 及 $\langle m_s \rangle = -1$ 的兩個基態波函數分別為：

$$\begin{aligned} |\phi_0^{(1)}\rangle &\equiv |\uparrow_A \downarrow_B\rangle = \bigotimes_{i \in A} |\uparrow\rangle_i \bigotimes_{j \in B} |\downarrow\rangle_j \\ |\phi_0^{(2)}\rangle &\equiv |\downarrow_A \uparrow_B\rangle = \bigotimes_{i \in A} |\downarrow\rangle_i \bigotimes_{j \in B} |\uparrow\rangle_j, \end{aligned} \quad (3.5)$$

其中 $|\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i$ 為在晶格點 i 自旋算符 $\hat{\sigma}_i^z$ 的兩本徵態。當控制參數 λ 稍微調大時，微弱的量子擾動只降低交錯磁化量的值 ($\langle |m_s| \rangle < 1$)，但不會完全地破壞反鐵磁性 [9]。

現在考慮相圖的另一區域 $\lambda > \lambda_c$ 。極限情形，當 $\lambda = \infty$ 且 $J \neq 0$ ， \hat{H}_{TFIM} 的基態為各自旋 σ_i^x 算符本徵態 $|\rightarrow\rangle_i$ 的張量積 (tensor product)

$$|\Rightarrow\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\rightarrow\rangle_i = \frac{1}{2^{N/2}} \bigotimes_{i=1}^N (|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i). \quad (3.6)$$

因為

$$\langle \rightarrow | \hat{\sigma}^z | \rightarrow \rangle = 0, \quad (3.7)$$

極強橫場下 $\lambda = \infty$ 的易辛基態無交錯磁化量 $\langle m_s \rangle = 0$ 。對 $1/\lambda$ 做微擾計算亦可得 $\lambda \ll \lambda_c$ 時基態無反鐵磁性 [9]。

上述模型在一個維度時，可藉由 Jordan-Wigner 轉換 [30] 對應至自由費米子系統而精確解出 [31]，這個方法及精確解析解並不存於多維度系統，但對任何維度的量子易辛模型，我們可用路徑積分 (path integral) 的概念，將系統對應到多一維度的古典模型；多出的維度稱虛數時間軸，該方向的長度為溫度的倒數。以 D 維橫場易辛模型為例，對應的是 $D+1$ 的古典易辛模型（詳細推導於 4.1 節）。如此， D 維橫場易辛模型量子相變與 $D+1$ 維古典易辛模型的熱相變同屬一普適類 (universality class)。

自然存在或人工添加的雜質可能導致交互耦合非均質化，對橫場易辛模型而言，無序效應非常顯著，在量子相變點，動力學指數 (2.4) 變成無窮大 $z = \infty$ ，也就是說，鬆弛時間隨關聯長度成指數般地成長（不同於一般成冪次方成長的情形）。在無序的一維模型，這個非常特殊的動力學現象可用一種針對無序系統設計的重正規化群方法精確求得 [17, 18]。

3.2 橫場及縱場下的易辛模型

我們感興趣的是外加一平行易辛軸 (z 軸) 磁場 (縱場) 的量子易辛模型。此縱場項的哈密頓算符可表示為

$$\hat{H}_z = -h^z \sum_i \hat{\sigma}_i^z. \quad (3.8)$$

綜合而言，易辛反鐵磁在外加橫場及縱場下由以下哈密頓算符描述：

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_{zz} + \hat{H}_x + \hat{H}_z \\ &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - h^x \sum_i \hat{\sigma}_i^x - h^z \sum_i \hat{\sigma}_i^z, \quad J > 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

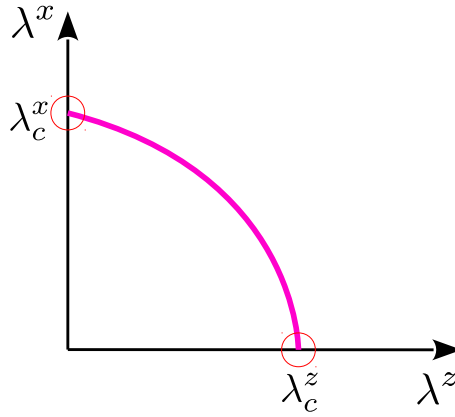


圖 3.3: 零點時 $T = 0$ ，具橫場及縱場的一維反鐵磁易辛模型之相圖。

在縱場下，易辛自旋不僅因反鐵磁交互耦合而呈現相鄰自旋相反指向的趨勢，也同時具共同朝向縱場方向的趨勢，這兩個互相競爭的趨勢導致與鐵磁性系統不同的相變屬性。例如，在縱場中易辛鐵磁的量子相變消失，但易辛反鐵磁的量子相變仍存在。

除了上節討論的橫場易辛模型 $\hat{H}_{\text{TFIM}} = \hat{H}_{zz} + \hat{H}_x$ 外，式 (3.9) 中無橫場的古典反鐵磁易辛模型 $\hat{H}_{\text{cl}} \equiv \hat{H}_{zz} + \hat{H}_z$ 也是一研究相變問題的有趣模型。沒有橫場時，量子擾動項消失，故 \hat{H}_{cl} 為一「古典」易辛模型。在古典的情形，一維具短程交互耦合的模型不具有由熱擾動引起的相變，因為在熱力學極限下破壞長程序 (long range order) 的磁疇壁 (domain wall) 之產生降低了自由能，任何有限溫度下一維系統均處於順磁態。無場時，多維度古典易辛反鐵磁與鐵磁的臨界點及普適類完全相同，但加縱場時，鐵磁的相變被破壞 [32, 33]，反鐵磁的相變卻仍存在 [34, 35]。

關聯性多體模型的精確解析解常僅止於一維度的系統，但具橫場及縱場的一維反鐵磁易辛模型 (3.9) 卻至今無解析解；根據精確對角化計算 (exact diagonalization) [36] 及密度函數重正規化群方法 (density matrix renormalization group) 演算結果 [37] 顯示， $T = 0$ 時此系統存在一 $(h^x/J, h^z/J) \equiv (\lambda^x, \lambda^z)$ 相圖平面上的臨界線 (critical line) (圖 3.3)，分界一弱場時的反鐵磁態及強場時的順磁態。在 $(\lambda^x = 1, \lambda^z = 0)$ ，對應的相變點即為上節描述的橫場易辛模型的量子臨界點。另一極端的點為 $(\lambda^x = 0, \lambda^z = 2)$ ，此為無量子擾動的古典一維橫場易辛模型，這裡縱場的改變引起一階不連續的相變。雖無精確解，目前的數值計算結果 [36, 37] 顯示從 $(\lambda^x = 1, \lambda^z = 0)$ 到 $(\lambda^x = 0, \lambda^z = 2)$ 的臨界線屬二維古典易辛的相變普適類。

本節描述的量子自旋系統不僅在相變理論上是有趣值得被研究的模型，它也是近年實驗上受矚目的模型。磁性材料 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ 近來被發現得以實現具橫場及縱場的近似一維易辛反鐵磁 [38, 39]。有趣的是，此模型也可由冷原子系統實現。Jonathan Simon 等人利用冷原子技術 [40]，以被侷限在「傾斜」的光晶格 (optical lattice) 之中的零自旋 (spinless) 超冷 Rb 原子來模擬莫特絕緣體 (Mott insulator)

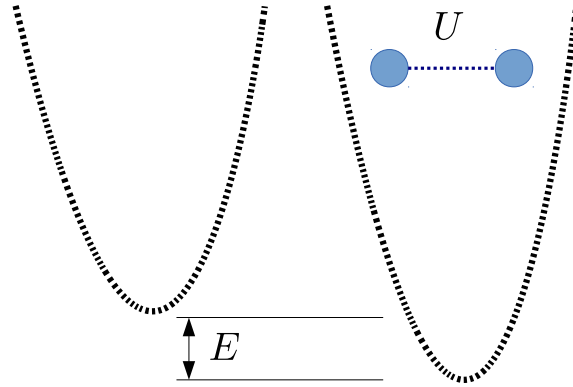


圖 3.4: 光陷阱的位能井能差及原子排斥位能的示意圖。

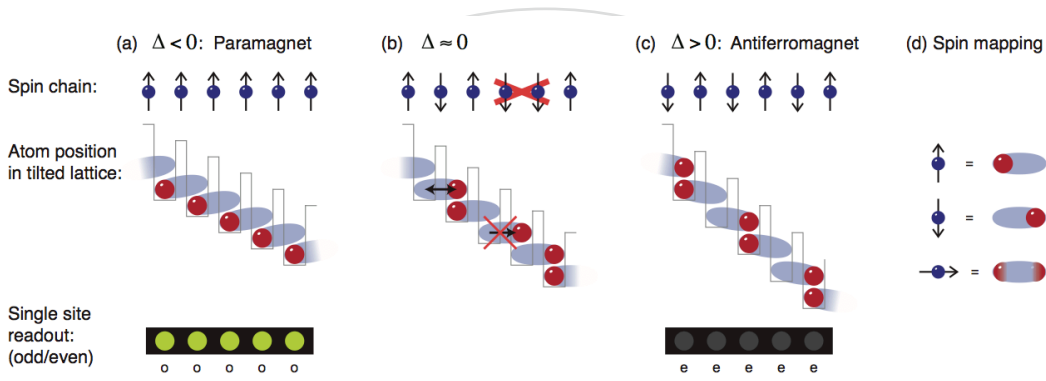


圖 3.5: 利用冷原子實作橫場易辛模型之原理。圖出自於 [45]。

[41–44]，及對應成一維反鐵磁量子易辛模型 [40]。所謂光晶格是由雷射光形成的週期位能。在 Simon 等人的冷原子系統系統中，每個原子感受兩種位能：兩個原子共存於同一位能井的排斥位能 U 及相鄰位能井的位能差 E （見圖 3.4）。量子效應使原子有穿隧至相鄰位能井的機率，此穿隧率以 t 表示。對應易辛自旋的兩個狀態分別為：未穿隧原子狀態對應易辛自旋的上自旋，穿隧原子狀態對應易辛自旋的下自旋。定義 $\Delta \equiv E - U$ 為原子穿隧至相鄰位能井的所需能量。當 $\Delta < 0$ 且 $U \gg t$ 時，每個位能井束縛一原子，即莫特絕緣態，或對應易辛自旋模型的順磁態；當 $\Delta \gtrsim 0$ 時，原子可穿隧到相鄰位能井，若位能井雙重佔據及空缺狀態交錯出現，系統處於完美的反鐵磁態。冷原子系統系統與自旋系統的對應釋於圖 3.5。對應大致如下：自旋間的作用 J 相當於排斥位能 U ，縱場 h^z 與光晶格「傾斜」程度有關，而橫場 h^x 則由穿隧率來對應。

本論文除以量子蒙地卡羅的方法探討具橫場及縱場的一維反鐵磁易辛模型的基態相變行為，也探討無序對其之影響。值得注意的是，已知無序交換耦合對 ($\lambda^x = 1, \lambda^z = 0$) 量子臨界點有巨大影響，導致無窮大的動力學指數，但無序對 $h^z \neq 0$ 臨界線的影響至今尚無有系統的探討文獻，這也正是本論文將探討的問

題。





第四章 量子蒙地卡羅模擬方法

在本章節我們將詳述量子蒙地卡羅方法，討論如何透過此方法來探討量子易辛模型的相變問題。給定描述我們考慮的量子多體系統的哈密頓算符 \hat{H} ，我們需要處理某算符 \hat{O} 描述的物理量（例如磁化量等）之平均值；在溫度 T 時（對應溫度倒數 $\beta \equiv 1/k_B T$ ），其平均值可表示為

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}), \quad (4.1)$$

其中

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}, \quad (4.2)$$

為正則系綜 (canonical ensemble) 的密度矩陣 (density matrix)； Z 為正則配分函數 (canonical partition function)：

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}. \quad (4.3)$$

所謂量子蒙地卡羅方法是以隨機的方式根據 (4.2) 的機率分佈選擇系統的狀態來求平均。

我們使用的量子蒙地卡羅方法是建立在所謂「世界線」路徑積分 (worldline path integral) 的表示法上，在這種表示法上，量子易辛模型將對應到多一個維度的古典易辛模型。蒙地卡羅計算則以此對應的古典模型為基礎。以下我們首先推導量子-古典模型的對應，然後描述在對應模型上的蒙地卡羅計算方法。

4.1 量子-古典易辛模型的對應

考慮含 L 個自旋一維量子易辛模型：

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{i=1}^L J_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z}_{\hat{H}_0} - \underbrace{\sum_{i=1}^L h_i^z \hat{\sigma}_i^z - \sum_{i=1}^L h_i^x \hat{\sigma}_i^x}_{\hat{H}_1}. \quad (4.4)$$

在此我們不侷限於均質系統，故容許交換耦合及場強度與晶格位置 i 有關；另外，我們引入週期性邊界條件：

$$\hat{\sigma}_{L+1} = \hat{\sigma}_1. \quad (4.5)$$

式 (4.4) 中我們標出哈密頓算符 \hat{H} 互不對易的項 \hat{H}_0 及 \hat{H}_1 。

計算配分函數及期望值 (4.1) 時，基本上我們可以選擇任一組完備的基底向量，因為矩陣跡數不會隨基底的選擇而有所改變。這裡我們自然地選擇 \hat{H}_0 的本徵基底，也就是 $\hat{\sigma}_i^z$ 的本徵向量 ($|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$) 之張量積

$$|S^z\rangle \equiv \bigotimes_{i=1}^L |s_i\rangle, \quad |s_i\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle. \quad (4.6)$$

但因為 $[\hat{H}_0, \hat{H}_1] \neq 0$ ，算符 $e^{-\beta\hat{H}}$ 在此基底的表象並非對角化的，對含大量自旋 $L \gg 1$ 的系統，計算將十分棘手。若可單獨處理 $e^{-\beta\hat{H}_0}$ 及 $e^{-\beta\hat{H}_1}$ ，計算將顯得容易些。但也因 \hat{H}_0 和 \hat{H}_1 的不對易性導致

$$e^{-\beta(\hat{H}_0+\hat{H}_1)} \neq e^{-\beta\hat{H}_0}e^{-\beta\hat{H}_1}, \quad (4.7)$$

所以無法將含 \hat{H}_0 項及含 \hat{H}_1 項分解計算。一個常用的技巧是引入一極大值 L_τ ，再利用 Trotter–Suzuki 展開公式 [46,47]

$$e^{-\beta(\hat{H}_0+\hat{H}_1)} = \left(e^{-\frac{\beta}{L_\tau}(\hat{H}_0+\hat{H}_1)} \right)^{L_\tau} = \lim_{L_\tau \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{\beta}{L_\tau}\hat{H}_0} e^{-\frac{\beta}{L_\tau}\hat{H}_1} \right)^{L_\tau}, \quad (4.8)$$

注意上式第二個等號只有在 $L_\tau = \infty$ 情況下才成立。當 $L_\tau \gg 1$ 為有限值時，我們引入 $\Delta\tau \equiv \beta/L_\tau$ ，指數算符分解可近似為

$$e^{-\Delta\tau(\hat{H}_0+\hat{H}_1)} \approx e^{-\Delta\tau\hat{H}_0}e^{-\Delta\tau\hat{H}_1} + \mathcal{O}(\varepsilon), \quad (4.9)$$

$\mathcal{O}(\varepsilon)$ 稱之為 Trotter 誤差，對應最低階展開的誤差為

$$\varepsilon = [\Delta\tau\hat{H}_0, \Delta\tau\hat{H}_1] = (\Delta\tau)^2 [\hat{H}_0, \hat{H}_1] \quad (4.10)$$

式 (4.9) 的近似表示法就是著名的 Trotter–Suzuki 近似法 (Trotter–Suzuki Approximation)。

應用 (4.8) 展開式於配分函數得

$$Z = \text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta(\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
 &= \text{Tr} \left\{ \left(\exp \left[-\frac{\beta}{L_\tau} (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) \right] \right)^{L_\tau} \right\} \\
 &= \lim_{L_\tau \rightarrow \infty} \text{Tr} \left\{ \left[\exp \left(-\frac{\beta}{L_\tau} \hat{H}_0 \right) \exp \left(-\frac{\beta}{L_\tau} \hat{H}_1 \right) \right]^{L_\tau} \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

我們再利用基底向量 $|S^z\rangle$ 的完備性，插入 $L_\tau - 1$ 個單位算符

$$\hat{\mathbb{I}} = \sum_{\{s_i\}} |S^z\rangle \langle S^z|, \tag{4.12}$$

如此式 (4.11) 中算符的冪次可表示為

$$\hat{A}^{L_\tau} = \prod_{\ell=1}^{L_\tau} \hat{A} = \sum_{\{s_i^{(1)}\}} \cdots \sum_{\{s_i^{(L_\tau-1)}\}} \hat{A} |S_{L_\tau-1}^z\rangle \langle S_{L_\tau-1}^z| \cdots \hat{A} |S_2^z\rangle \langle S_2^z| \hat{A} |S_1^z\rangle \langle S_1^z| \hat{A}, \tag{4.13}$$

所以配分函數可寫成：

$$\begin{aligned}
 Z = \sum_{\{s_i^{(0)}\}} \sum_{\{s_i^{(1)}\}} \cdots \sum_{\{s_i^{(L_\tau-1)}\}} &\langle S_0^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}} |S_{L_\tau-1}^z\rangle \langle S_{L_\tau-1}^z | \cdots \\
 &\cdots |S_2^z\rangle \langle S_2^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}} |S_1^z\rangle \langle S_1^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}} |S_0^z\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

或

$$\begin{aligned}
 Z = \lim_{L_\tau \rightarrow \infty} \sum_{\{s_i^{(0)}\}} \sum_{\{s_i^{(1)}\}} \cdots \sum_{\{s_i^{(L_\tau-1)}\}} &\langle S_0^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_0} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} |S_{L_\tau-1}^z\rangle \langle S_{L_\tau-1}^z | \cdots \\
 &\cdots |S_2^z\rangle \langle S_2^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_0} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} |S_1^z\rangle \langle S_1^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_0} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} |S_0^z\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

其中 $\{s_i^{(\ell)}\}$ 代表 $|S_\ell^z\rangle$ 多自旋向量的自旋組態。比照時間演進算符 $e^{-it\hat{H}/\hbar}$ 的形式， $e^{-\Delta\tau \hat{H}}$ 可視為虛數時間演進算符，式 (4.14) 中矩陣元素 $\langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}} |S_\ell^z\rangle$ 則可視為由虛數時間點 ℓ 的自旋狀態 $|S_\ell^z\rangle$ 經時間間隔 $\Delta\tau$ 演進至虛數時間點 $\ell+1$ 的自旋狀態 $|S_{\ell+1}^z\rangle$ 之「機率振幅」，又稱轉移矩陣 (transfer matrix) 元素。轉移矩陣於式 (4.15) 中的分解形式有助於計算，因為含 \hat{H}_0 的指數項可直接作用於它的基底 $\{|S^z\rangle\}$ 得出

$$\langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_0} e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} |S_\ell^z\rangle = e^{-\Delta\tau} e^{\sum_i J_i s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - \sum_i h_i^z s_i^{(\ell)}} \langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau \hat{H}_1} |S_\ell^z\rangle. \tag{4.16}$$

這裡 $s_i^{(\ell)} = \pm 1$ 為對應厄立矩陣 $\hat{\sigma}^z$ 本徵態 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 的本徵值；式中剩餘待解的矩

陣元素可分解為單一自旋指數算符的乘積：

$$\langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau\hat{H}_1} | S_\ell^z \rangle = \langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau \sum_i h_i^z \hat{\sigma}_i^x} | S_\ell^z \rangle = \prod_i \langle s_i^{(\ell+1)} | e^{-\Delta\tau h_i^x \hat{\sigma}_i^x} | s_i^{(\ell)} \rangle. \quad (4.17)$$

利用厄立矩陣平方同等單位矩陣的特性 $(\hat{\sigma}^x)^2 = \hat{\mathbb{I}}$ ，以及下列的關係式，

$$e^{\Delta\tau h^x \hat{\sigma}^x} = \hat{\mathbb{I}} \cosh(\Delta\tau h^x) + \hat{\sigma}^x \sinh(\Delta\tau h^x). \quad (4.18)$$

可得出式 (4.17) 中的單一自旋矩陣元素

$$\langle s'_i | e^{\Delta\tau h_i^x \hat{\sigma}_i^x} | s_i \rangle \equiv C_i^{(\Delta\tau)} e^{\Gamma_i s'_i s_i}, \quad (4.19)$$

上式中的 $C_i^{(\Delta\tau)}$ 和 Γ_i 為

$$\Gamma_i = -\frac{1}{2} \ln \tanh(\Delta\tau h_i^x) > 0 \quad (4.20)$$

$$C_i^{(\Delta\tau)} = [\sinh(\Delta\tau h_i^x) \cosh(\Delta\tau h_i^x)]^{1/2}. \quad (4.21)$$

如此，近似的轉移矩陣元素為

$$\langle S_{\ell+1}^z | e^{-\Delta\tau\hat{H}_1} e^{-\Delta\tau\hat{H}_0} | S_\ell^z \rangle = \left[\prod_i C_i^{(\Delta\tau)} \right] e^{-\Delta\tau \left(\sum_i J_i s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - \sum_i h_i^z s_i^{(\ell)} - \sum_i \Gamma_i s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)} \right)}. \quad (4.22)$$

將矩陣元素 (4.22) 代入式 (4.15) 得

$$Z = \lim_{L_\tau \rightarrow \infty} C \sum_{\{s_i^{(\ell)} = \pm 1\}} e^{-\Delta\tau \left(\sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} J_i s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} h_i^z s_i^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} \Gamma_i s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)} \right)}, \quad (4.23)$$

這裡係數 $C \equiv \prod_\ell \prod_i C_i^{(\ell)}$ 不會影響系統上的自旋當然也不會影響到相態的轉變，此外，在我們計算物理量期望值的過程當中，它也會被消除。仔細觀察即可發現，式 (4.23) 中整理出來的配分函數在有限 L_τ 下具下列形式：

$$Z_{L_\tau} = C \sum_{\{s_i^{(\ell)} = \pm 1\}} e^{-\beta_{\text{cl}} \mathcal{H}_{\text{eff}}}, \quad (4.24)$$

含一個等同於二維古典易辛模型的等效哈密頓函數：

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} J_i^s s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} h_i^z s_i^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} J_i^T s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)}. \quad (4.25)$$

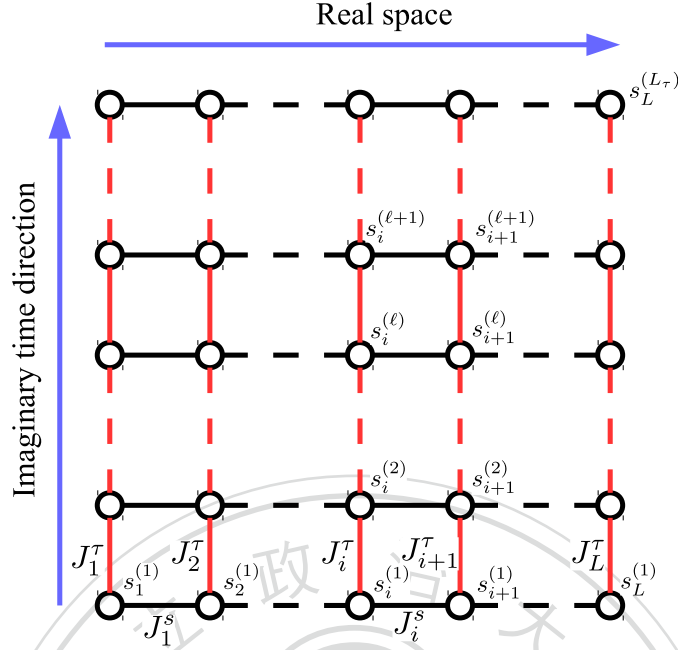


圖 4.1: 採用離散虛數時間對應一維量子易辛模型至 $(1+1)$ -維古典易辛模型。在實空間上，同一層的相鄰自旋交互作用 J_i^s 將沿虛數時間方向散佈至其上每一層；而加諸於每個自旋的橫場則演變為虛數時間方向上相鄰自旋的交互作用 J_i^T 。

多出的維度為虛數時間軸，我們以 (ℓ) 標記軸上的晶格點；虛數時間軸總長度為量子系統溫度的倒數 $\beta (= L_\tau \Delta\tau)$ ，這有別於 (4.24) 中引進的古典模型的溫度倒數 β_{cl} 。我們可以歸納比較，

$$\begin{aligned}\beta_{\text{cl}} J_i^s &= \Delta\tau J_i \\ \beta_{\text{cl}} h_i &= \Delta\tau h_i^z \\ \beta_{\text{cl}} J_i^T &= \Gamma_i,\end{aligned}\tag{4.26}$$

其中 $J_i^s > 0$ 為實空間維度之中相鄰自旋的交互作用， h_i 為作用在自旋 i 的場，而 $J_i^T > 0$ 為多出來虛數時間維度上相鄰自旋的交互作用；注意，對同一實空間晶格點 i 的虛數時間軸上的交換耦合常數值 J_i^T 是不變的，與 ℓ 無關。另外，因為配分函數求跡數的形式，虛數時間維度必須滿足週期性邊界條件： $s_i^{(1)} = s_i^{(L_\tau+1)}$ ；這個虛數時間軸上的邊界條件無關我們實空間上邊界條件的選擇。

本節的討論雖以一維量子易辛模型為例，但可直接地推廣至任一維度 D 的量子易辛模型，以相同的方式對應到 $D+1$ 的古典模型，多出的維度可視為虛數時間維度。對應的古典易辛模型 (4.25) 正是執行蒙地卡羅計算的起點，在下節我們將描述計算方法。若為滿足無 Trotter 誤差的要求，我們必須取 $L_\tau = \infty$ 也就是連續虛數時間極限 $\Delta\tau = 0$ 。量子蒙地卡羅計算確實可以建立在連續虛數時間極限

上，求得無偏差、無系統誤差的數值結果。但因採離散的虛數時間模型不會改變相變普遍性類，為計算方便我們將取 $\Delta\tau = 1$ (即 $L_\tau = \beta$)。

4.2 Metropolis 演算法

Metropolis 演算法是 1953 年於正在進行核武相關計畫研究的美國羅沙拉摩斯國家實驗室 (Los Alamos National Lab, USA) 所發展出來的，該篇發表在 Journal of Chemical Physics 的文章寫道 [48]：

「此篇文章目的在於描述一適合於電腦進行的通用計算方法，可用來計算具交互作用分子所組成的物質之性質。」

“The purpose of this paper is to describe a general method, suitable for fast electronic computing machines, of calculating the properties of any substance which may be considered as composed of interacting individual molecules.”

以上節推導出的對應量子易辛模型的古典易辛模型為例。若系統共有 N 個自旋，依照排列組合，這樣的系統總共有 2^N 個微觀態 (自旋組態) $c = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ ，每個組態各自有其對應的系統能量 $E_c = \mathcal{H}_{\text{eff}}(c)$ (見 4.25)。在給定溫度 T 的正則系綜當中，式 (4.1) 表示的觀察量平均值可改寫為

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z_{L_\tau}} \sum_c O(c) e^{-\beta c_l E_c}, \quad (4.27)$$

其中 Z_{L_τ} 表示於 (4.24)。如上節所提，針對我們的一維量子易辛模型，值得注意的是溫度 T 的條件是融合於所模擬的對應古典易辛模型的尺度大小；溫度的倒數 $\beta = 1/k_B T$ 正是虛數時間方向模型的長度，取 $\Delta\tau = 1$ ，則 $N = L \times L_\tau = L \times \beta$ 。欲求 (4.27) 數值上當然我們可以隨機地任意選擇一組自旋，再根據能量算出該組態的波茲曼機率因子，並求出對應此組態我們感興趣的物理量之值，接著不斷重複上述步驟，只要重複次數過大，或許我們可逼近該物理量的平均值。然而，這方法相當不實用，因為在熱力學極限下 ($N \gg 1$) 我們有天文數字大的組態數 (2^N)；除此之外，在低溫時，只有少數的組態具有明顯大的波茲曼機率，絕大多數組態只有微不足道的波茲曼機率，這也是說，當我們任意選取一組態，它多半是對平均值貢獻微小的組態，而那些極少數有重要貢獻的組態絕少會在我們的盲目選取中被選中。

Metropolis 演算法的概念即是：捨棄像上述如無頭蒼蠅一般的大海撈針方法，設計一馬可夫鏈 (Markov chain) 來產生一連串的組態，它可以被描述成在組態空間 (configuration space) 的隨機漫步 (random walk)，使每個組態被選取的機率漸

進收斂到穩定的分佈，即波茲曼機率分佈

$$P_c^* = \frac{1}{Z_{L_T}} e^{-\beta_{cl} E_c} . \quad (4.28)$$

達到此穩定分佈後，式 (4.27) 的物理量的平均值即可通過算數平均做計算。

在馬可夫鏈的每一步，系統可以從一個狀態變到另一個狀態，也可以保持當前狀態。每一個新的組態 c' 是由當前組態 c ，以及由 c 到 c' 的躍遷機率 (transition probability) $w_{c,c'}$ 來決定，跟系統過往的歷史無關。根據機率守恆原則，我們可寫下所謂的「主方程式」(master equation) 來描述機率分佈 P_c 隨時間 t 的演化：

$$P_c(t+1) = P_c(t) + \sum_{c'} (w_{c',c} P_{c'}(t) - w_{c,c'} P_c(t)) , \quad (4.29)$$

這裡時間單位為馬可夫鏈的一步。為了確保組態機率收斂至一穩定機率分佈： $\lim_{t \rightarrow \infty} P(t) = P^*(t)$ ，我們要求馬可夫鏈滿足下列條件：

- 遍歷性 (Ergodicity)：
組態空間之中的隨機漫步均有到達任一組態的可能性。
- 細緻平衡 (Detailed balance)：
穩定機率分佈與躍遷機率的關係滿足

$$w_{c,c'} P_c^* = w_{c',c} P_{c'}^* . \quad (4.30)$$

這個稱為細緻平衡條件會使得式 (4.29) 等號右邊第二項在達成平衡時為零；這個條件是充分但非必要。配合平衡時的波茲曼機率分佈，式 (4.30) 即改寫為：

$$\frac{w_{c,c'}}{w_{c',c}} = \frac{P_{c'}^*}{P_c^*} = e^{-\beta_{cl}(E_{c'} - E_c)} . \quad (4.31)$$

理論上有許多種躍遷機率 $w_{c,c'}$ 的選擇可以滿足上述的細緻平衡條件。在標準 Metropolis 演算法中，從組態 c 到組態 c' 的躍遷機率是由以下法則定出：

$$w_{c,c'} = \begin{cases} 1 & \text{for } E_{c'} \leq E_c , \\ e^{-\beta_{cl}(E_{c'} - E_c)} & \text{for } E_{c'} > E_c \end{cases} , \quad (4.32)$$

上式也可以簡化表示為

$$w_{c,c'} = \min [1, e^{-\beta_{cl}(E_{c'} - E_c)}] . \quad (4.33)$$

針對易辛模型，Metropolis 演算法可以用以下步驟來實現：

- (1) 任意選擇一個初始自旋組態 c 。
- (2) 隨機選取一個自旋並試圖翻轉它，使得系統變換到另一個組態 c' 。
- (3) 利用式 (4.32) 的躍遷機率 $w_{c,c'}$ 來決定 $c \rightarrow c'$ 的組態轉換要不要被接受。若接受，設 $c = c'$ 。
- (4) 重複執行步驟 (2) 以及步驟 (3) N 次 (N 為模型的自旋數量)，如此的整個過程被稱為一次完整的「蒙地卡羅步驟」(Monte Carlo sweep)。經過多次蒙地卡羅步驟達穩定機率分佈 P^* 之後，每完成數次蒙地卡羅步驟即測量一次對應當時組態 $c^{(m)}$ 欲觀察的物理量 $O_m \equiv O(c^{(m)})$ (如，磁化量)。
- (5) 測量 M 次 ($M \gg 1$) 後，我們可求得平均值 $\langle O \rangle$

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M O_m \quad (4.34)$$

式 (4.34) 的統計誤差為

$$\Delta O = \sqrt{\frac{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}{M-1}} \quad (4.35)$$

藉由愈多次的蒙地卡羅測量，平均值的統計誤差就愈小。

計算平均值時，我們也希望式 (4.34) 中測量值 O_m 是一組統計獨立的值。我們可對觀察值定義時間相關函數 (time autocorrelation function)：

$$C_O(k) = \langle O_m O_{m+k} \rangle - \langle O_m \rangle^2, \quad (4.36)$$

這裡的時間 m 是以蒙地卡羅步驟為計算。由 (4.36) 我們可再定義關聯時間 τ_{int}

$$\tau_{\text{int}} = \sum_k \frac{C_O(k)}{C_O(0)}. \quad (4.37)$$

只有相隔至少 τ_{int} 個蒙地卡羅步驟的測量值才可視為統計獨立的。關聯時間可用來決定上述步驟 (4) 測量間的時間。

4.3 複製系統交換演算法

上節描述的 Metropolis 演算法確實能以隨機但無偏差的方式計算關聯性多體系統的熱力學量，但因其以單一自旋的改變來進行系統組態的更新，在臨界點附近

將遇到所謂的「臨界遲滯」(critical slowing down)的行為，而使計算效率變差。所謂臨界遲滯是系統（在熱力學極限下 $N \rightarrow \infty$ ）達到平衡態所需的時間尺度—即鬆弛時間 (relaxation time) —在臨界點變成無限大的現象。在蒙地卡羅演算法中，動力學行為或時間的概念雖是以蒙地卡羅步驟為單位來計算，非真實時間的系統動力學現象，但式 (4.37) 以蒙地卡羅步驟為單位定義的關聯時間也有臨界慢化現象。上節描述的 Metropolis 演算法以單一自旋的改變來進行系統組態的更新，兩組相隔一單位時間的組態相關性不小，以二維古典易辛模型為例，在臨界點關聯時間 τ_{int} 隨系統尺度 L 呈

$$\tau_{\text{int}} \propto L^{z_{\text{Metropolis}}}, \quad z_{\text{Metropolis}} \approx 2.1667 \quad (4.38)$$

成長 [49]。除了臨界慢化現象，模擬無序模型時，關聯時間也會因「崎嶇」的自由能樣貌而變長。為達到較短的關聯時間及較佳的計算效益，常見取代 Metropolis 單一自旋更新方法的是所謂「群集更新」(cluster update) 方法；常使用的群集更新方法包含 Swendsen-Wang 演算法、Wolff 演算法等。加了縱場的古典及量子易辛模型因為不存在 \mathbb{Z}_2 (易辛) 對稱，群集更新方法並不適用。

本節描述一建立在特殊系綜的方法 (extended ensemble method)：複製系統交換演算法 (method of replica exchange) [50]，常稱平行回火處理演算法 (parallel tempering algorithm)（又譯為平行調整演算法）[51]。這裡平行調整的是可擾動系統的因子，如產生熱擾動的溫度，或控制引發量子相變的橫場。以下分述古典系統的平行調整溫度方法及量子系統的平行調整橫場方法。

4.3.1 古典模型的情況

平行回火處理演算法的基本概念在於同時模擬一組 (Ω 個) 獨立處於不同溫度的系統，除溫度外，每個系統具完全相同的給定參數，如系統大小、初始自旋組態、交互耦合等。如此，給定一組溫度倒數 $\{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_\Omega\}$ ，平橫時組態 $\{c_1, c_2, \dots, c_\Omega\}$ 出現的機率為

$$P^*(c_1, \beta_1; c_2, \beta_2; \dots; c_\Omega, \beta_\Omega) = \prod_{m=1}^{\Omega} P^*(c_m, \beta_m), \quad (4.39)$$

其中

$$P^*(c_m, \beta_m) = \frac{1}{Z(\beta_m)} e^{-\beta_m E_{c_m}}, \quad (4.40)$$

$Z(\beta_m)$ 為處於溫度 β_m 的系統之配分函數。蒙地卡羅計算中，我們除了對每個在固定溫度系統進行上節討論的 Metropolis 式的單一自旋更新外，也隨機交換處於相鄰兩組溫度 β, β' 的自旋組態 c 與 c' 。我們以 $W(c, \beta; c', \beta')$ 表示處於溫度 β 系

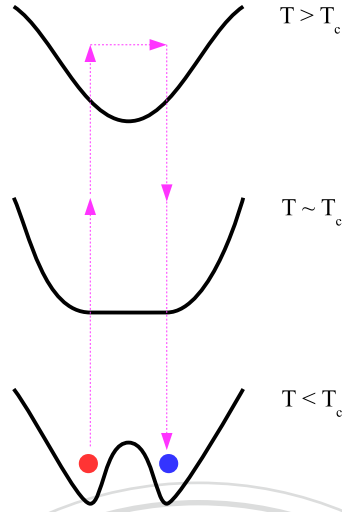


圖 4.2: 不同溫度對應系統自由能之樣貌

統的組態 c 與處於溫度 β' 系統的組態 c' 的交換機率。為了系統能達到（或保持於）平橫態，組態交換更新的機率亦須滿足如上節所討論的細緻平衡條件（參見 (4.31)），故要求

$$\begin{aligned} \frac{W(c, \beta; c', \beta')}{W(c', \beta; c, \beta')} &= \frac{P^*(\dots; c', \beta; c, \beta'; \dots)}{P^*(\dots; c, \beta; c', \beta'; \dots)} \\ &= \frac{e^{-\beta E_{c'}} e^{-\beta' E_c}}{e^{-\beta E_c} e^{-\beta' E_{c'}}} \\ &= e^{-(\beta' - \beta)(E_{c'} - E_c)}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

為滿足式 (4.41)，我們可以類似 Metropolis 方法選擇

$$W(c, \beta; c', \beta') = \min \left[1, e^{-(\beta' - \beta)(E_{c'} - E_c)} \right] \quad (4.42)$$

為 c 和 c' 兩組自旋組態的交換機率。

低溫系統的自由能常呈現難以逃脫的局域最低點。不同溫度的組態交換的效應在於：使系統可以在組態空間有效率地移動，尤其使處於低溫擁有自由能相對低點的系統有機會輕易越過自由能障壁，而快速達到平衡態（見圖 4.2），如此我們也可有效率地計算平橫態時的物理量。圖 4.3 及圖 4.4 以二維古典易辛模型為例，顯示磁化量隨蒙地卡羅步數 M 的演化。低溫時，系統具磁化量，又因自旋反轉的 \mathbb{Z}_2 對稱性，磁化量分佈於 $m_s = \pm 1$ 附近呈雙峰；因雙峰間的能量障壁很大，以單一自旋方法更新組態的 Metropolis 方法無法有效率地使系統從對應 $m_s = -1$ 的組態越過能量障壁到對應 $m_s = 1$ 的組態。同樣低溫下，平行回火處理演算法可藉不同溫度的組態交換，使系統有輕易地隨蒙地卡羅時間演化在兩個對應 $m_s = \pm 1$ 的

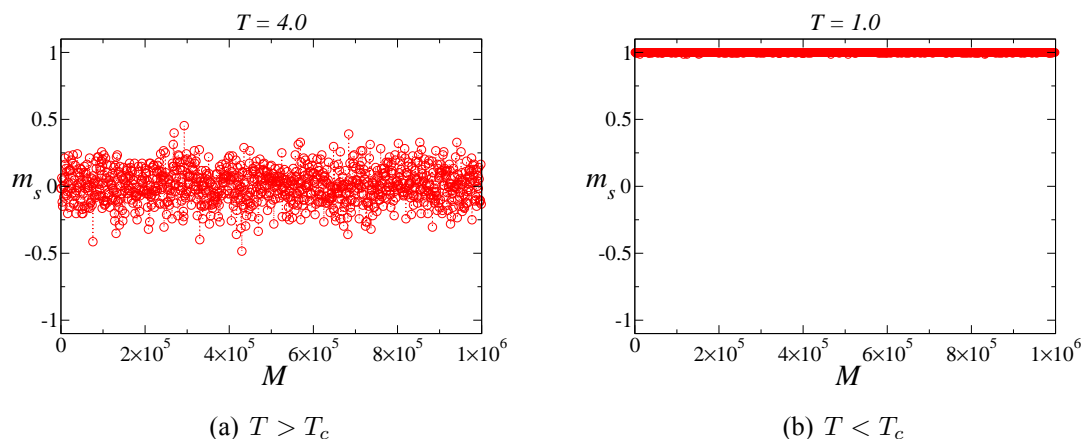


圖 4.3: 標準 Metropolis 蒙地卡羅計算中，古典易辛方格模型的磁化量 (m_s) 對蒙地卡羅時間步數 (M) 作圖。系統尺度為 16×16 ，自旋交互耦合取為 $J = 1$ 。(a) 高溫時 (高於臨界溫度 $T_c \approx 2.269$)，自由能無難以逃脫的局域最低點，系統的磁化量隨時間於 $m_s = 0$ 附近漲落；(b) 低溫時 ($T = 1$)，系統陷於對應磁化量 $m_s = -1$ 的組態，經過長時間的蒙地卡羅計算，也無法越過能量障壁到達對應磁化量 $m_s = +1$ 的組態。

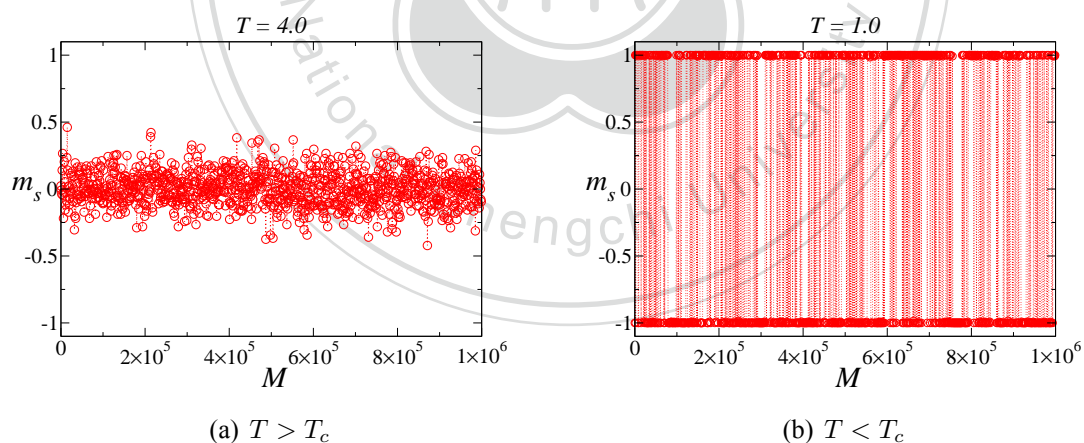


圖 4.4: 模型同圖 4.3。平行回火處理模擬中，磁化量對蒙地卡羅時間步數作圖。相對圖 4.3，低溫時系統能隨時間在對應 $m_s = -1$ 及 $m_s = +1$ 的兩自由能低點間翻越。

自由能低點間穿梭。

4.3.2 量子模型的情況

量子易辛模型的情形跟古典類似，差別在於考慮量子相變時，引發相變因素不是由溫度導致的熱擾動，而是由橫場導致的量子擾動。故在複製系統交換演算法中，我們同時模擬 Ω 個各處於不同橫場 $\{h_1^x, h_2^x, \dots, h_\Omega^x\}$ 的系統。在對應的 $D+1$ 維度的古典系統，橫場對應的是虛數時間維度上的交換耦合（見 4.1）。同上節，我們要求交換機率滿足細緻平衡條件（式 (4.30)），即

$$\begin{aligned} \frac{W(c, \Gamma; c', \Gamma')}{W(c', \Gamma; c, \Gamma')} &= \frac{P^*(\dots; c', \Gamma; c, \Gamma'; \dots)}{P^*(\dots; c, \Gamma; c', \Gamma'; \dots)} \\ &= \frac{e^{-S_{\text{cl}}(c', \Gamma)} e^{-S_{\text{cl}}(c, \Gamma')}}{e^{-S_{\text{cl}}(c, \Gamma)} e^{-S_{\text{cl}}(c', \Gamma')}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

這裡我們以 $S(c, \Gamma) \equiv \beta_{\text{cl}} \mathcal{H}_{\text{eff}}(c, J^r)$ 標示自旋組態為 c 及虛數時間維度方向的自旋交互耦合為 Γ (定義於式 (4.20)) 的古典作用量 (classical action)。以一維量子易辛模型對應的古典作用量（設虛數時間間隔 $\Delta\tau = 1$ ）為例：

$$S(c, \Gamma) = J \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - h^z \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} s_i^{(\ell)} - \Gamma \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)}, \quad (4.44)$$

我們可得：

$$\frac{W(c, \Gamma; c', \Gamma')}{W(c', \Gamma; c, \Gamma')} = \exp\left[-(\Gamma' - \Gamma) (\Sigma(c') - \Sigma(c))\right], \quad (4.45)$$

這裡 Σ 代表

$$\Sigma = \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{L_\tau} s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)}. \quad (4.46)$$

在圖 4.5 及圖 4.6 中，針對一維量子易辛模型，我們比較磁化量隨蒙地卡羅時間演化在標準 Metropolis 計算法及以平行調整橫場進行回火處理演算法中的情形。平行調整橫場演算法確實如上節討論的平行調整溫度法，能使系統有效率地在組態空間移動，而快速達到平衡態。

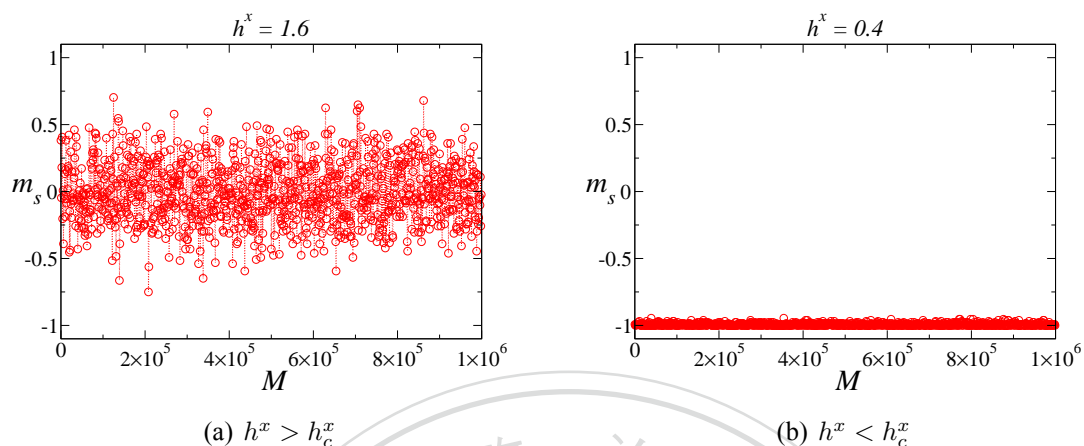


圖 4.5: 標準 Metropolis 蒙地卡羅計算中，一維橫場易辛模型的磁化量 (m_s) 對蒙地卡羅時間步數 (M) 作圖。系統尺度為 $L = 16$ ，自旋交互耦合取為 $J = 1$ ，溫度設為 $\beta = 16$ 。(a) 強場時 $h^x = 1.6 > h_c^x$ ($h_c^x = 1$)，量子擾動大，系統的磁化量隨時間於 $m_s = 0$ 附近漲落；(b) 弱場時 ($h^x = 0.4$)，系統陷於對應磁化量 $m_s = 1$ 的組態，無法越過能量障壁到達對應磁化量 $m_s = -1$ 的組態。

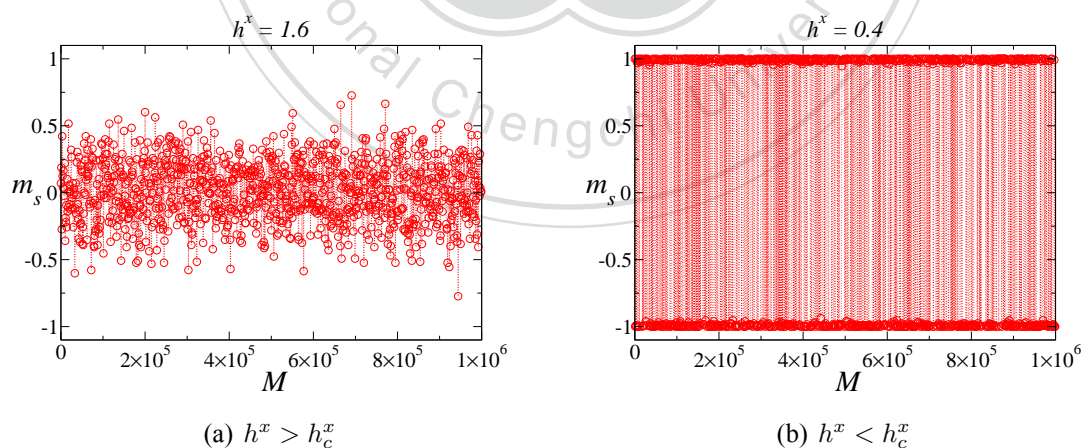


圖 4.6: 模型同圖 4.5。以調整橫場進行平行回火處理模擬中，磁化量對蒙地卡羅時間步數作圖。相對圖 4.5， $h^x = 0.4 < h_c^x$ 時系統能隨時間在對應 $m_s = -1$ 及 $m_s = +1$ 的兩自由能低點間穿越。



第五章 易辛反鐵磁的量子蒙地卡羅 計算

本章節呈現並討論我們的量子蒙地卡羅計算結果。我們將分節敘述一維均質量子模型及一維無序量子模型的結果，也將與古典的易辛模型做比對。探討的模型概述於第三章，具體的一維哈密頓算符如下：

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L J_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - \sum_{i=1}^L h_i^z \hat{\sigma}_i^z - \sum_{i=1}^L h_i^x \hat{\sigma}_i^x, \quad (5.1)$$

其中 $J_i > 0$, $h_i^z > 0$, $h_i^x > 0$ 。所使用的量子蒙地卡羅計算方法建立在非連續虛數時間的古典模型（見第 4.1 節）。

為了比較古典相變與量子相變，我們將首先從二維古典縱場易辛反鐵磁模型的臨界現象出發，包含無序效應的探討。接著依次談論一維量子模型的量子相變，及量子相變的無序效應。

5.1 二維古典易辛反鐵磁之臨界現象

本節探討的二維古典反鐵磁建立於方晶格上，其哈密頓函數定義如下：

$$H_{\text{cl}} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i^z s_i, \quad s_i = \pm 1, \quad (5.2)$$

其中 $J_{ij} > 0$ 為相鄰自旋的反鐵磁性交互耦合。模型的方晶格尺度為 $L \times L$ ，另外我們在 x 及 y 方向各引入週期性邊界條件。注意式 (5.2) 描述的模型正是無橫場的易辛模型（見第 3.2 節），而 s_i 即為自旋算符 $\hat{\sigma}_i^z$ 的本徵值。

我們首先考慮「均質」(homogeneous) 系統，也就是自旋交互耦合及場強度均與晶格位置無關，即 $J_{ij} \equiv J$, $h_i^z \equiv h^z$, $\forall i$ 。在不影響普適性，我們取 $J = 1$ 。在給定場強度 h^z 下，我們探討由溫度 T 變動引發的相變；注意這個相變並不存在於外場下的易辛鐵磁性模型（對應 $J_{ij} < 0$ ）[32,33]。我們以平行回火處理蒙地卡羅

Chapter 5. 易辛反鐵磁的量子蒙地卡羅計算

計算方法（參考第 4.3.1 節）找出溫度 T 對場強 h^z 的平面相圖。進行平行調整溫度計算時，我們利用 MPI（Message Passing Interface，訊息傳遞介面）函式庫將 C 語言程式平行化，於電腦叢集系統不同計算單元上執行對應不同溫度複製系統的 Metropolis 演算，然後藉與其他計算單元的訊息傳遞做自旋組態交換動作；如此，我們不僅可加速蒙地卡羅計算達到系統平衡態，也同時得到對應不同溫度值的結果。

多體系統相變現象只發生於熱力學極限下，也就是當系統的自旋數無窮大時 $L = \infty$ 。若無法直接計算無窮大系統，探討相變問題面臨一重要的課題在於藉「有限尺寸分析」(finite size analysis) 將觀察量推至熱力學極限 [52, 53]。如第二章敘述，在熱力學極限下，關聯長度 ξ 發散於臨界點：

$$\xi \sim |\delta|^{-\nu}, \quad (5.3)$$

這裡， δ 指至臨界溫度 T_c 的距離，定為：

$$\delta = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (5.4)$$

多數觀察量 O 在臨界點附近也呈現冪次方發散的行為，

$$O \sim |\delta|^{-\kappa}, \quad (5.5)$$

定義了對應的臨界指數 κ ；結合式 (5.3)，我們可寫

$$O \sim \xi^{\kappa/\nu} \quad (5.6)$$

但當系統尺度有限時，關聯長度 ξ 最大值受制於系統尺度 L ，所以當 $\xi \rightarrow L$ 時， O 達其有限的最大值 O_{\max} ，且 O_{\max} 與系統尺度 L 呈以下關係

$$O_{\max}(L) \sim L^{\kappa/\nu}. \quad (5.7)$$

最大值 O_{\max} 發生的溫度 T_L^* ，稱為假臨界點 (pseudocritical point)，也與系統尺寸 L 有關：

$$|\delta_L| \sim L^{-1/\nu}. \quad (5.8)$$

簡言之，隨著系統變有限，熱力學極限下的觀察量發散值也將變有限值，且假臨界點 T_L^* 將偏離熱力學極限下的真實臨界點 T_c 。根據標度化理論 [52, 53]，這個現象可更廣義地寫成

$$O(\delta, L) = L^{\kappa/\nu} \tilde{O}(\delta L^{1/\nu}). \quad (5.9)$$

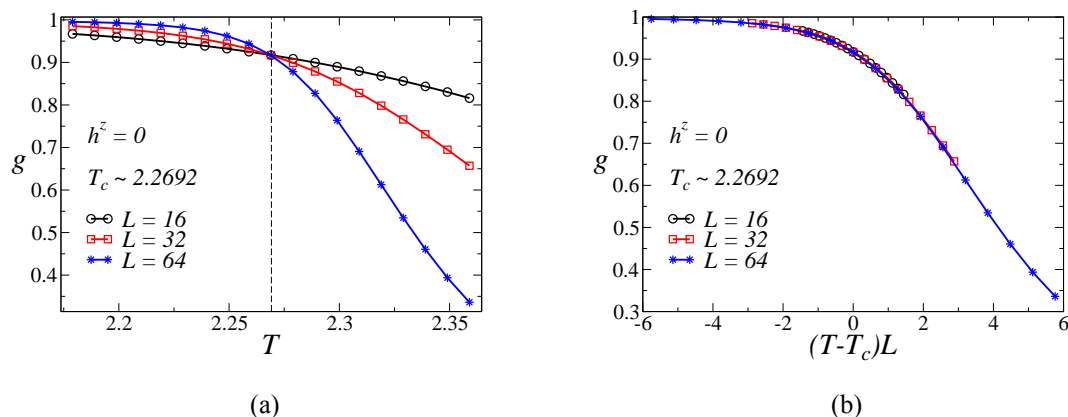


圖 5.1: 無外場 ($h^z = 0$) 情況下，古典二維易辛反磁鐵的交錯磁化量 Binder 比值。(a): 對應不同系統尺寸 L 的 Binder 比值交會於某一點，此點正是臨界溫度為 T_c 所在，這裡交點吻合二維易辛模型已知精確解 $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$ (虛線標示)。(b): (a) 圖數據根據式 (5.12) 之有限尺度標度化處理，利用已知關聯指數 $\nu = 1$ 可讓數據點坐落於同一曲線上。

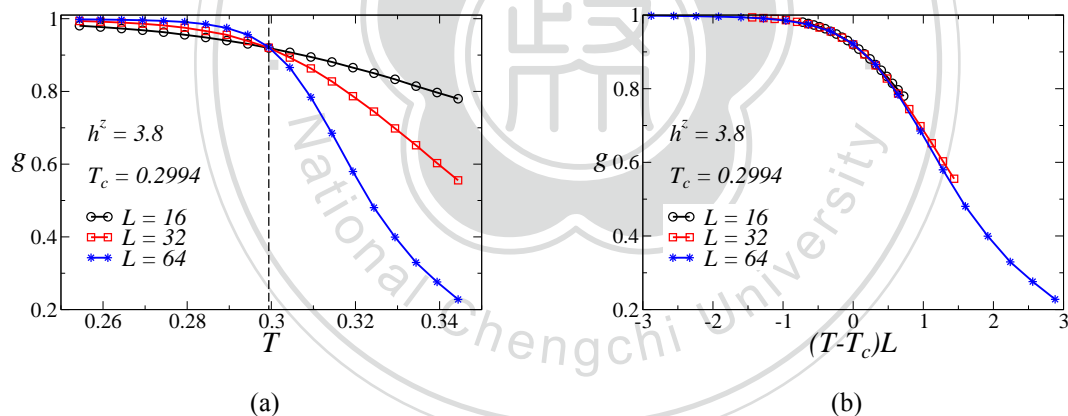


圖 5.2: 強外場 $h^z = 3.8$ 情況下，古典二維易辛反磁鐵的交錯磁化量 Binder 比值。同 $h^z = 0$ 情形 (圖 5.1)，利用式 (5.12) 及關聯指數 $\nu = 1$ 可讓數據點坐落於同一曲線上，這裡臨界溫度為 $T_c = 0.2994$ (圖 (a) 虛線標示)。

或由式 (5.3)，上式也可寫成

$$O(\delta, L) = L^{\kappa/\nu} \tilde{O}\left(\frac{L}{\xi}\right). \quad (5.10)$$

為減少有限尺寸分析涉及太多待定的臨界指數，我們常先分析一無因次的量，如此，式 (5.9) 中的指數為 $\kappa/\nu = 0$ 。常用的無因次觀察量為序參數 (這裡：交錯

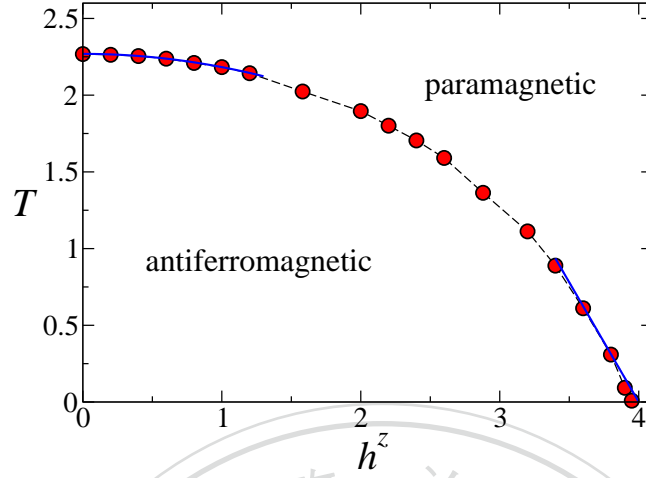


圖 5.3: 二維易辛反鐵磁模型之相圖。實心紅圓圈標示蒙地卡羅計算結果。藍色實線標示式 (5.15) 的近似解。

磁化量 m_s) 的二階矩 (second-order moment) 與四階矩 (fourth-order moment) 組合，又稱 Binder 比值 (Binder ratio, Binder cumulant) [54, 55]：

$$g = \frac{1}{2} \left[3 - \frac{\langle m_s^4 \rangle}{\langle m_s^2 \rangle^2} \right]. \quad (5.11)$$

因為 g 所含的為磁化量四階矩與二階矩平方的比值，明顯地屬無因次量。在臨界點時，無因次量的值與尺寸大小無關，所以

$$g = \tilde{g}(\delta L^{1/\nu}) \quad (5.12)$$

除此，Binder 比值具下述熱力學極限的性質：(一) 在遠離臨界點的順磁態，磁化量的分佈傾向呈以零為中心的高斯型 (Gaussian form)，所以

$$\langle m_s^4 \rangle = 3\langle m_s^2 \rangle^2, \quad \text{也就是 } g = 0; \quad (5.13)$$

(二) 在遠離臨界點的反鐵磁態，磁化量的分佈為位於 $m_s = -1$ 及 $m_s = 1$ 的雙峰型，所以

$$\langle m_s^4 \rangle = \langle m_s^2 \rangle = 1, \quad \text{也就是 } g = 1. \quad (5.14)$$

我們在給定縱場 h^z 下，計算對應不同溫度 T 及系統尺度 L 的交錯磁化量 Binder 比值 (圖 5.1-5.2)。因為 Binder 比值無因次的特性，不同系統尺度 L 的數值將交會於 $\delta = 0$ ，即臨界溫度 T_c 處。我們也可看到，系統愈大的 Binder 比值數據

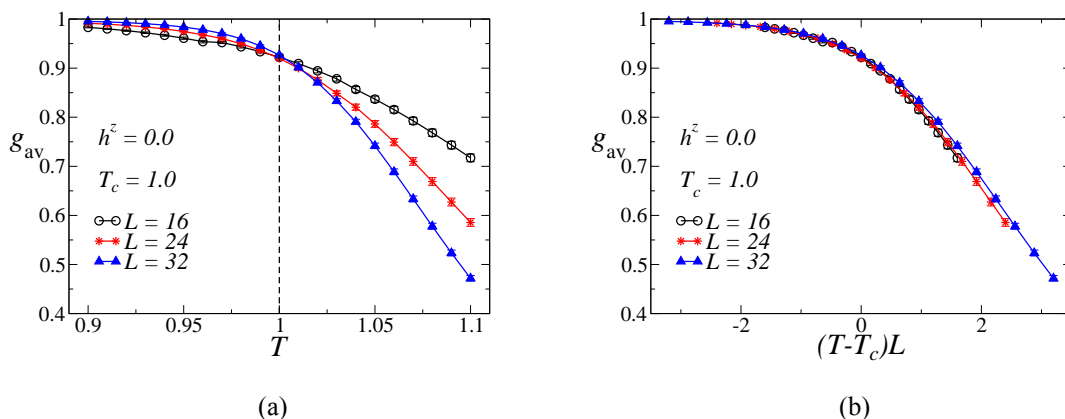


圖 5.4: 無外場 $h^z = 0$ 情況下，無序古典二維易辛反磁鐵的平均交錯磁化量 Binder 比值 (a) 對溫度 T 作圖；(b) 以 $\nu = 1$ 作有限尺度標度化圖。圖中 g_{av} 下標 av 表示不同無序樣本結果之平均值。

曲線，愈明顯地呈現上述 (一)、(二) 描述的熱力學極限情形。圖 5.3 顯示由上述步驟找出的 $T-h^z$ 平面相圖一系列的臨界點，其中 $(T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2}), h^z = 0)$ [56] 及 $(T = 0, h^z = 4)$ [34] 為已知的精確解，兩點間的臨界線存在一些 (半) 解析解或數值解 (見 [34] 及其參考文獻)；我們計算求得在 $T = 0$ 及 $h^z = 0$ 兩點附近的臨界線頗吻合以下的近似 [35]：

$$\begin{aligned} h_c^z &\approx 4 - T \ln(1.89813) & T \rightarrow 0, \\ T_c &\approx \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} [1 - 0.038022(h^z)^2] & h^z \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (5.15)$$

從有限尺度標度化圖，我們也可看出在整條臨界線 $0 \leq h^z < 4$ 的關聯長度指數均吻合二維易辛普適類的 $\nu = 1$ 。

接著我們探討不均勻自旋交互耦合所帶來的無序效應。我們將每對相鄰自旋的易辛交互耦合 J_{ij} 以介於 $(0, 1]$ 間的均勻亂數產生，而外場強度 h^z 保持均勻、與晶格點位置無關。我們同樣以交錯磁化量的 Binder 比值來定位臨界點 (T_c, h_c^z) 。對於無序系統的計算，我們須產生多個無序耦合的樣本 (我們約取 1000 組)，對每個樣本單獨作計算並將結果作平均。計算結果顯示 (圖 5.4, 5.5)，無序的交互耦合明顯改變非屬普適性的臨界點位置，但關聯長度臨界指數在 $h^z = 0$ 及 $h^z \neq 0$ 下大致吻合均質系統時的值 $\nu = 1$ 。根據 Harris 準則 [12] (式 (2.7,2.8))，無序效應對具 $\nu = 1$ 的二維均質系統臨界行為有不確定的影響，屬邊緣情況，一些解析 (如利用重整群法) 及數值 (如蒙地卡羅計算) 研究結果傾向支持無序效應帶來對數型的修正 (logarithmic corrections) [57, 58]。此論文所提供的數值結果無法對這類

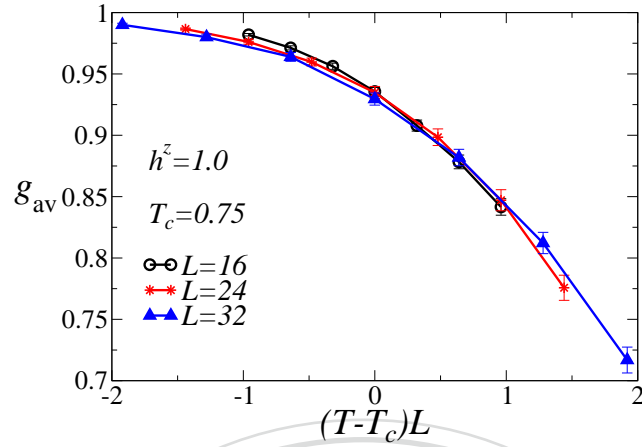


圖 5.5: 加外場 $h^z = 1$ 下，無序古典二維易辛反鐵磁的平均交錯磁化量 Binder 比值的有限尺度標度化圖，配合的關聯指數為 $\nu = 1$ ，臨界溫度為 $T_c = 0.75$ 。

微小的修正作驗證。

值得一提的是在二維不均勻自旋交互耦合易辛模型中，所謂 McCoy-Wu 模型 [15] 或 Shankar-Murthy 模型 [59] 設定 x 方向的交互耦合為無序的亂數值，但 y 軸方向的交互耦合每列均相同；如此安排的交互耦合造成的無序效應非常顯著，對應的臨界現象明顯不屬於二維易辛模型的普遍性類。這型的無序易辛模型也正好是一維量子易辛模型對應的 $(1+1)$ 維古典模型。我們將在第 5.3 節討論量子相變的無序效應。

5.2 一維均質量子易辛反鐵磁

此章節討論的量子易辛反鐵磁鏈之自旋交互耦合、橫場及縱場均與晶格位置無關，即 $J_i \equiv J$, $h_i^x \equiv h^x$, $h_i^z \equiv h^z$, $\forall i$ ，故稱「均質」。在不影響普適性下，我們設 $J = 1$ 。我們亦取週期性邊界條件

$$\hat{\sigma}_{L+1} = \hat{\sigma}_1. \quad (5.16)$$

量子蒙地卡羅計算建立在非連續虛數時間的古典模型（見第 4.1 節）：

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{\beta} J_i^s s_i^{(\ell)} s_{i+1}^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{\beta} h_i s_i^{(\ell)} - \sum_{i=1}^L \sum_{\ell=1}^{\beta} J_i^T s_i^{(\ell)} s_i^{(\ell+1)}, \quad (5.17)$$

式中 $s_i^{(\ell)} = \pm 1$ 為易辛自旋。計算中我們將虛數時間間隔取 $\Delta\tau = 1$ ，所以虛數時間維度的古典易辛自旋數為溫度的倒數： $L_\tau = \beta$ 。雖然虛數時間的非連續化帶來不可消弭的系統誤差（Trotter 誤差），但結果不會影響相變普遍類的探討。注意式 (5.17) 中虛數時間方向的交互耦合 $-J_i^\tau < 0$ 屬「鐵磁性」的，也就是，沿虛數時間方向的自旋 $s_i^{(\ell)}$ 傾向取同值。又如於第 4.1 所示，虛數時間方向必須滿足週期性邊界條件。我們以第 4.3.2 節所討論的量子平行回火處理方法找出零點溫度 $h^x - h^z$ 平面相圖分界反鐵磁基態及順鐵磁基態的臨界線 (h^x, h^z) 。如上一節的計算，我們利用 MPI 函式庫協助於多計算節點的電腦叢集系統上執行平行調整橫場蒙地卡羅方法。

與古典相變相同，量子易辛模型的相變只發生於熱力學極限下 $L \rightarrow \infty$ ，除此，量子相變發生於絕對零度 $\beta = \infty$ ，故在量子蒙地卡羅計算模擬的對應古典模型上的虛數時間維度也須納入有限尺寸分析。同時考慮實空間及虛數時間方向的有限尺寸效應，一觀察量 O 的有限尺寸標度具下列形式 [53]：

$$O = L^{-d_O} \tilde{O}(L/\xi, \beta/\xi_\tau) = L^{-d_O} \tilde{O}'(L/\xi, \beta/L^z), \quad (5.18)$$

也就是說，除了指數 d_O 待定，標度函數 (scaling function) \tilde{O} (或 \tilde{O}') 含有兩個變數，涉及兩個臨界指數：關聯長度指數 ν 及動力學指數 z ；值得注意的是，處理一般古典（非量子）相變的有限尺寸分析，標度函數僅含實空間的變數（見式 (5.10)）。

如同上一節的分析，對應序參數 Binder 比值的指數為 $d_O = 0$ （無因次），如此減少待定的臨界指數方便我們作有限尺寸分析。在序參數計算部分，我們這裡先考慮的交錯磁化量屬局域交錯磁化量 (local staggered magnetization)，其定義如下：

$$m_i = \frac{1}{\beta} \sum_{\ell=1}^{\beta} \langle s_i^{(\ell)} \rangle \quad (5.19)$$

$$\langle m_s \rangle = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \eta_i m_i,$$

式中 $\eta_i = 1$ 若實空間晶格點 i 為奇數值， $\eta_i = -1$ 若 i 為偶數值。局域交錯磁化量的 Binder 比值 g 提供一可同時找出臨界點及動力學臨界指數 z 的方法，據悉這個方法首次在探討量子自旋玻璃時 [60, 61] 被應用於針對自旋玻璃定義的 Binder 比值。給定一組外場強度 (h^x, h^z) 及系統大小 L ，對不同溫度 β 值計算 g 。如圖 5.6， g 值隨著溫度倒數 β 的增加成長至一最大值，然後隨 β 下降。這個現象解釋如下：與實空間尺度 L 比較，當 β 值相對很小或很大時，我們的二維古典系統 (\mathcal{H}_{eff}) 實等效於一維系統，而一維系統並無有序態，故 g 值傾向為零；而這兩極限間，系

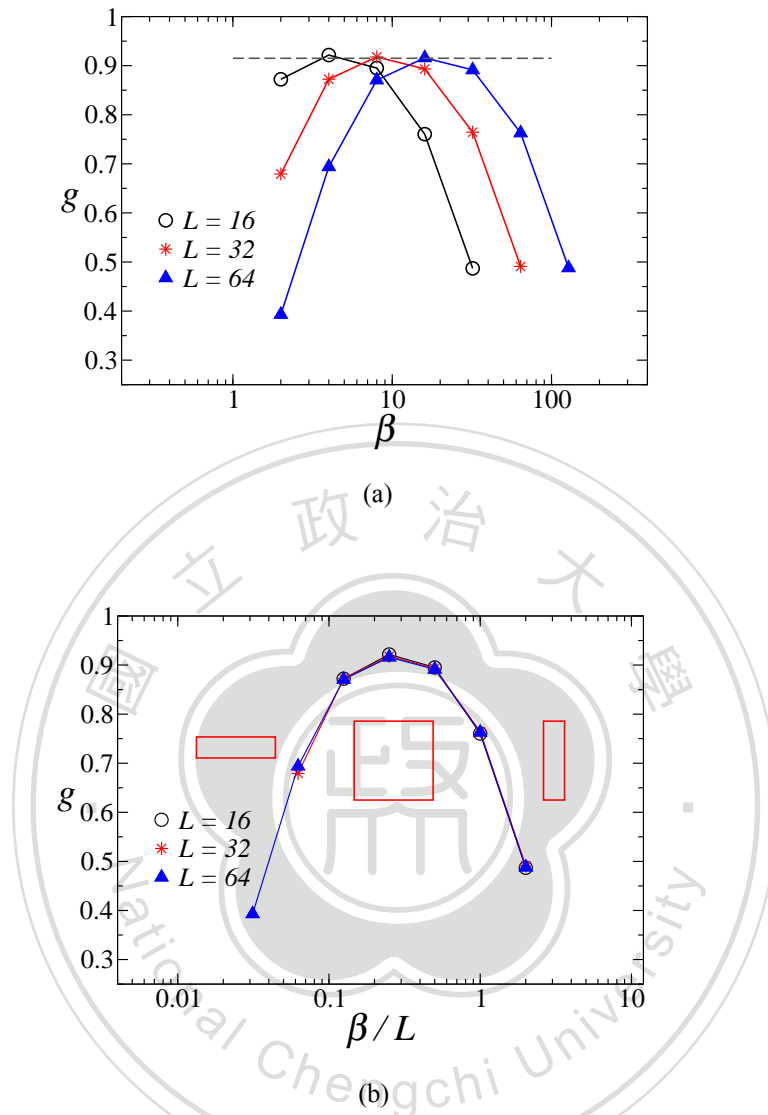


圖 5.6: $h^z = 0, h^x = 1$ 時 (a) 局域交錯磁化量的 Binder 比值 g 對溫度倒數 β 作圖。 g 最大值與系統尺寸 L 明顯無關，顯示系統處於臨界點；(b) 有限尺度標度化結果。 x 坐標轉換成 β/L ，可使數據坐落於一曲線上，表示 $\xi_\tau \sim \xi$ 即 $z = 1$ 。圖中的紅色方格標示虛數時間維度尺度 (β) 與實空間尺度 (L) 的比例關係，當 $\beta \gg L$ 或 $\beta \ll L$ ，系統等效於不具有有序態的一維模型，故 Binder 比值傾向為零。

統確呈二維時， g 達其最大值。在臨界點 (h_c^x, h_c^z) 時，因為無因次性質，對應不同 L 的 g 最大值 (g_{\max}) 將相等；在非臨界點區域， g_{\max} 將隨 L 的增大而呈上升（有序反鐵磁態）或下降（順磁態）。如此，我們可先由 g_{\max} 與 L 變動的關係定出臨界點 (h_c^x, h_c^z) 。接著我們可將待定的動力學臨界指數 z 當調控參數來作有限尺度標度化分析，也就是選配一 z 值使對應不同系統大小的 Binder 比值數據坐落於一曲

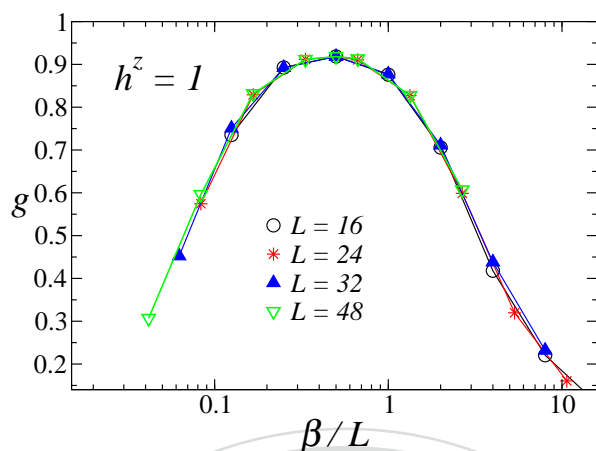
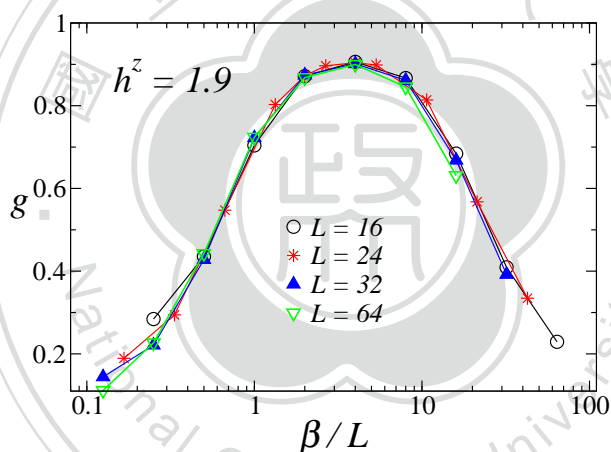
(a) $h^z = 1.0$, $h^x = 0.754$ (b) $h^z = 1.9$, $h^x = 0.1333$

圖 5.7: 對應 $h^z \neq 0$ 時局域交錯磁化量 Binder 比值 g 的有限尺度標度化。 g 最大值與系統尺寸 L 無關，顯示系統處於臨界點。同無縱場時的臨界點（圖 5.6 (b)），這裡的動力學臨界指數亦為 $z = 1$ 。

線上。由圖 5.6-5.7 我們驗證出 $h^z = 0$ 時已知的動力學臨界指數 $z = 1$ [9, 62]，也得出 $h^z \neq 0$ 時動力學臨界指數亦為 $z = 1$ ，這表示時間、空間具均向性：

$$\xi \sim \xi_\tau. \quad (5.20)$$

從對應的非均向 (anisotropic) 二維易辛模型出發，這個關係或許乍看不明顯，但考慮時間上的關聯長度 ξ_τ 與空間上的關聯長度 ξ 在量子臨界點均發散，這時虛數時

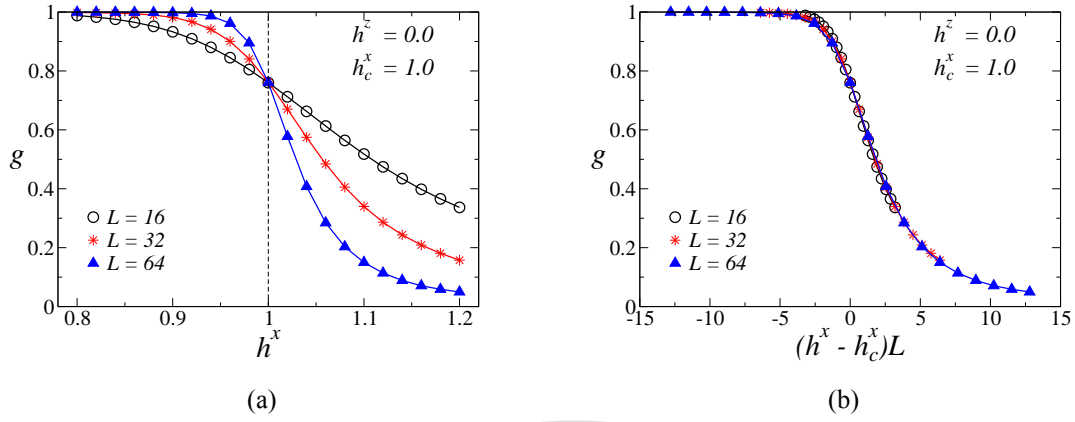


圖 5.8: 固定 $L/\beta = 1$, 給定 $h^z = 0$, (a) 不同尺寸 L 一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量 Binder 比值對橫場 h^x 作圖, 資料曲線交會於臨界點 $h_c^x = 1$; (b) 根據式 (5.23) 的有限尺度標度化處理結果。

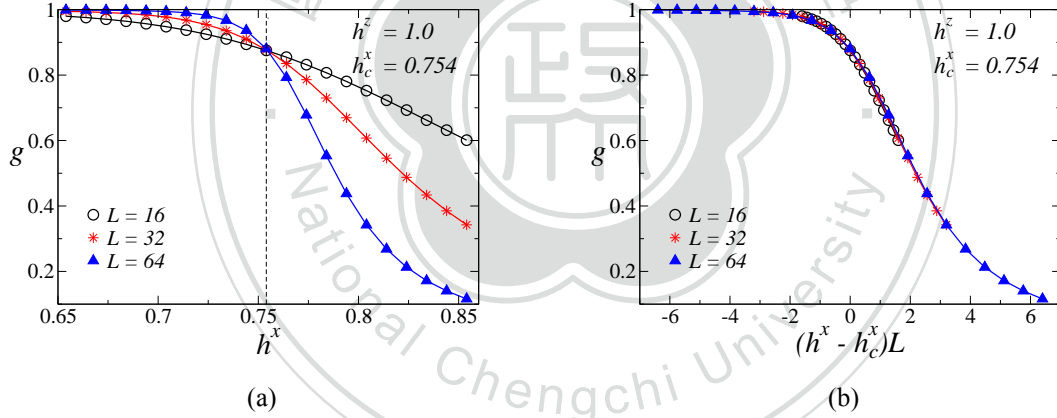


圖 5.9: 固定 $L/\beta = 1$, 給定 $h^z = 1$, (a) 不同尺寸 L 一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量 Binder 比值對橫場 h^x 作圖, 資料曲線交會於臨界點 $h_c^x = 0.754$; (b) 根據式 (5.23) 的有限尺度標度化處理結果。

間及空間維度交互耦合 (J^s 及 J^T) 的差異性消失, 故系統呈現時空均向性。

在已知動力學臨界指數 $z = 1$ 情況下, 我們固定 β/L 的比值關係, 如此觀測量標度函數 \tilde{O} 的變數減少至一個:

$$O = L^{-d_O} \tilde{O}(\delta L^{1/\nu}), \quad (5.21)$$

這裡 δ 為控制參數至臨界點的距離, 例如, 給定縱場 h^z 下, $\delta = |h^x - h_c^x|$; 從

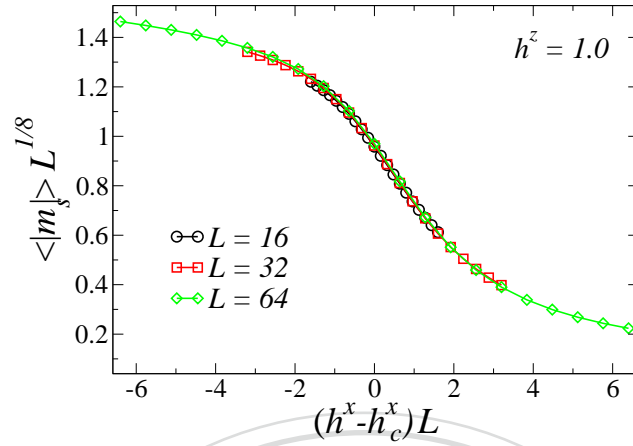


圖 5.10: 固定 $h^z = 1$ 下，一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量在臨界點 $h_c^x \approx 0.754$ 附近的有限尺度標度化結果。應用式 (5.24) 及對應二維古典易辛普適類的臨界指數 $\beta_m = 1/8$, $\nu = 1$ ，可使不同尺度的數據點坐落於單一曲線上。

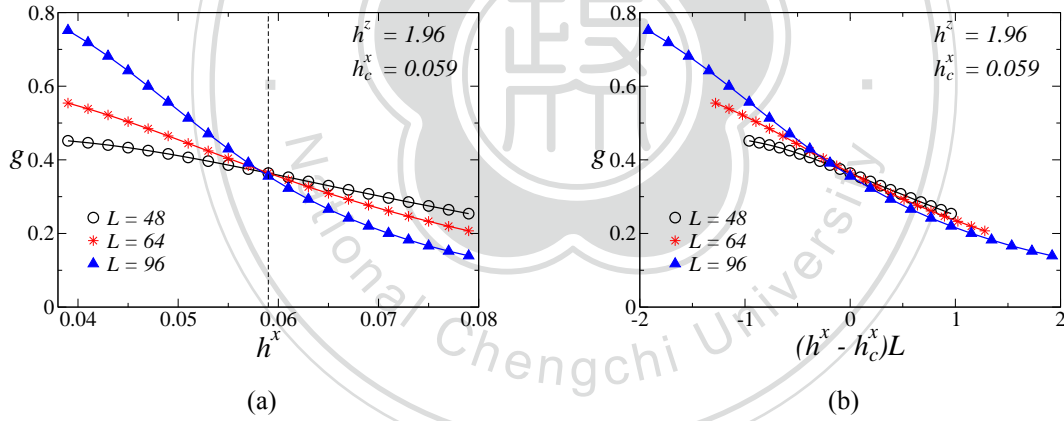


圖 5.11: 給定 $h^z = 1.96$ ，(a) 不同尺寸 L 一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量 Binder 比值對橫場 h^x 作圖，資料曲線交會於臨界點 $h_c^x = 0.059$ ；(b) 根據式 (5.23) 的有限尺度標度化處理結果。

式 (5.18) 到式 (5.21) 我們利用了

$$\xi \sim |\delta|^{-\nu}. \quad (5.22)$$

我們鎖定比值 $L/\beta = 1$ ，在給定縱場 h^z 下，計算對應不同 h^x 值及系統尺度 L 的局域交錯磁化量 Binder 比值；圖 5.8, 5.9, 5.11, 5.12 分別展示對 $h^z = 0$, $h^z = 1$, $h^z = 1.96$ 及 $h^z = 1.98$ 的情形。除 $h^z = 1.98$ (圖 5.12) 外，對應不同系統尺寸 L

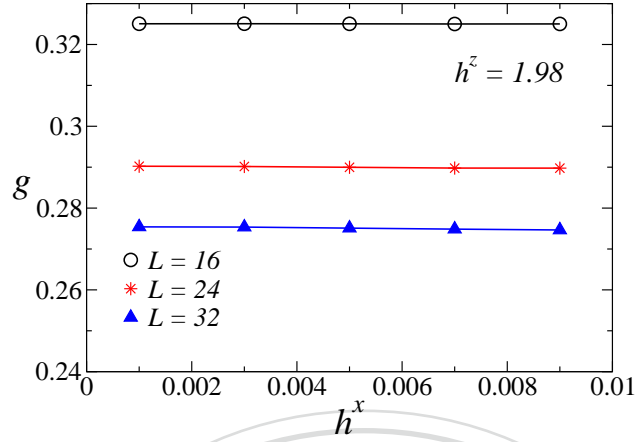


圖 5.12: 給定 $h^z = 1.98$ ，不同尺寸 L 一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量 Binder 比值對橫場 h^x 作圖；所有 h^x 值均對應不到 Binder 比值的交會處。

的 Binder 比值交會在某一特定橫場值，此橫場值及對應所給定的縱場值即為臨界點 (h_c^x, h_c^z) 。根據有限尺寸標度形式 (5.21)，

$$g = \tilde{g}(\delta L^{1/\nu}), \quad (5.23)$$

及屬二維古典易辛普適類的關聯長度指數 $\nu = 1$ ，我們可讓不同系統尺度 L 的 Binder 比值數據坐落於單一曲線上。得出 ν ，我們也可檢驗對應其它物理量的臨界指數，例如，局域交錯磁化量滿足下列有限尺寸標度形式：

$$\langle |m_s| \rangle = L^{-\beta_m/\nu} \tilde{m}_s(\delta L^{1/\nu}), \quad (5.24)$$

其中 $\beta_m = 1/8$ 為二維古典易辛普適類的磁化量臨界指數。當縱場值接近 $h^z \rightarrow 2$ 時（如圖 5.11 (a)），臨界橫場值幾近為零 $h_c^x \rightarrow 0$ ，此時，系統愈接近一維古典易辛鏈的一階相變 [37,40]，我們所考慮的系統尺度 $L \leq 96$ 的有限尺寸標度化結果也漸顯現偏離二維古典易辛普適性類情形。當 $h^z = 1.98$ 時（圖 5.12），在我們的計算中已無法找到橫場臨界值 h_c^x 。

依以上方法我們找出一維反鐵磁量子易辛模型一系列的 (h^x, h^z) 臨界值，結果顯示於圖 5.13 之相圖。 $h^x - h^z$ 相圖的臨界線（除 $(h^x = 1, h^z = 0)$ 點外）無精確解析解，我們對特殊兩臨界點 $(h^x = 1, h^z = 0)$ 、 $(h^x = 0, h^z = 2)$ 附近的臨界線與微擾計算及其它數值解 [37] 作比較。在無縱場下 ($h^z = 0$) 已知能隙 Δ 與至臨界點距離的關係 [31, 63]

$$\Delta \sim |h^x - 1|; \quad (5.25)$$

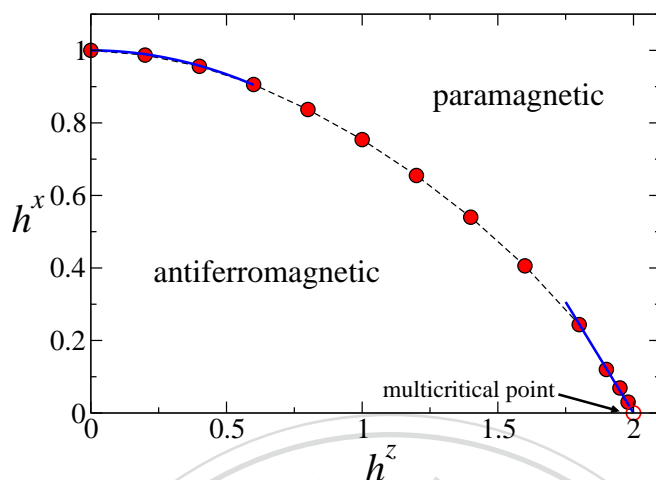


圖 5.13: 一維反鐵磁量子易辛模型之相圖。實心紅圓圈標示蒙地卡羅計算結果，接近 $(h^x = 1, h^z = 0)$ 及 $(h^x = 0, h^z = 2)$ 的藍粗線標示分別根據式 (5.27) 及式 (5.30) 的臨界線近似。除了 $(h^x = 0, h^z = 2)$ (空心紅圓圈) 外，整條臨界線均屬二維古典易辛模型的普適性類；在 $(h^x = 0, h^z = 2)$ 臨界線融入一維古典易辛鏈的不連續一階相變。

又由 $h^z \rightarrow 0$ 處微擾計算得出 [37]

$$\Delta \sim a(h^z)^2. \quad (5.26)$$

綜合式 (5.25) 及 (5.26) 得 $h^z \rightarrow 0$ 附近的臨界線近似為：

$$h_c^x \approx 1 - a(h^z)^2. \quad (5.27)$$

我們的數值結果吻合此關係式，應用曲線配適法至 $h^z \lesssim 0.6$ ，我們得 $a \approx 0.26$ ，而 DMRG 的數值結果為 $a \approx 0.37$ [37]。在接近 $(h^x = 0, h^z = 2)$ 處，微擾計算得出能隙 Δ 與微弱橫場 $h^x \ll 1$ 呈線性關係 [37]

$$\Delta \sim h^x, \quad (5.28)$$

又

$$\Delta \sim |h^z - 2|, \quad (5.29)$$

故得

$$h_c^x \approx b(2 - h^z). \quad (5.30)$$

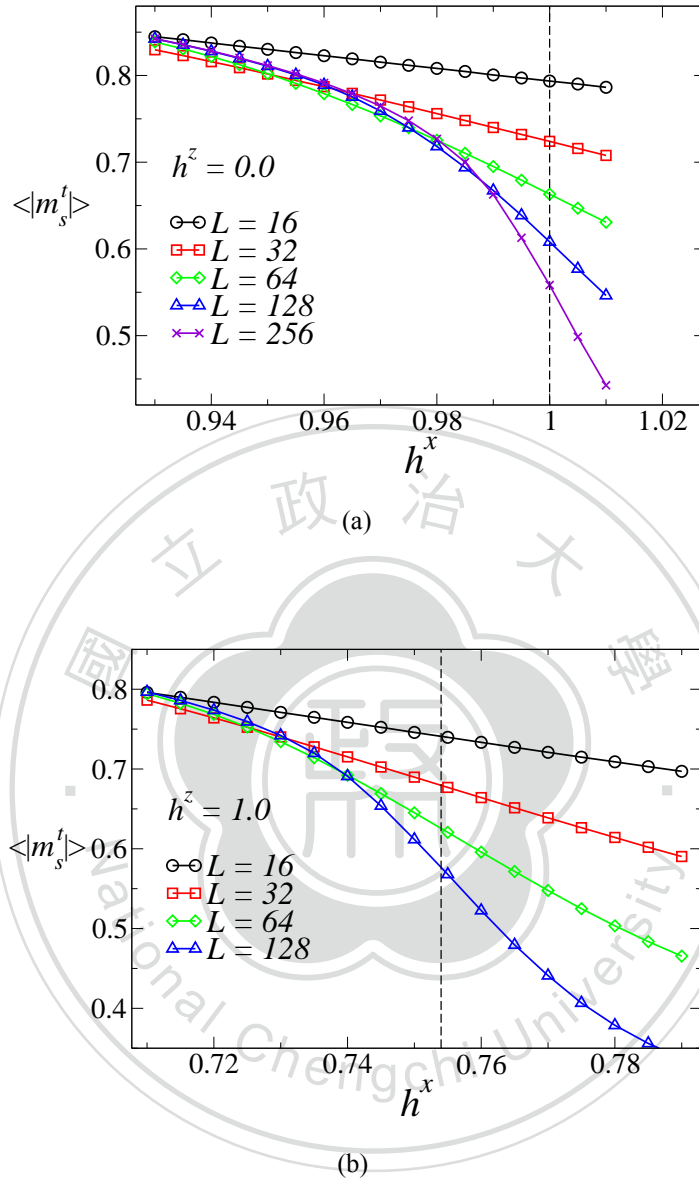


圖 5.14: (a) 無縱場下 $h^z = 0$ 及 (b) 加縱場下 $h^z = 1$ ，不同尺寸 L 一維量子易辛反鐵磁的局域交錯磁化量對橫場 h^x 作圖。縱向虛線標示經由 Binder 比值找到的臨界點位置。

我們也在 $(h^x = 0, h^z = 2)$ 附近的數值臨界線得到吻合的線性關係，並得出 $b \approx 1.23$ (DMRG 的數值結果 [37] 為 $b \approx 1.50$)。

至此我們考慮的是定義於局域交錯磁化量上的 Binder 比值 (見式 5.19)。但若

考慮系統整體的序參數，交錯磁化量在我們建立計算的模型上的定義應如下：

$$m^\ell = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \langle \eta_i s_i^{(\ell)} \rangle$$

$$\langle m_s^t \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{\ell=1}^{\beta} m^\ell. \quad (5.31)$$

不同於局域交錯磁化量，隨著系統溫度降低（ β 增大）交錯磁化量（式 (5.31)）將逼近一定值，如此我們可在未給定動力學指數 z 情況下檢視量子模型基態的磁化量。圖 5.14 顯示交錯磁化量在臨界點附近的變化，我們可看到隨著橫場 h^x 的增強交錯磁化量漸消失，且隨著系統尺度增大，磁化量愈趨明顯地在臨界點處消失。

5.3 無序效應對量子相變之影響

如同第二章所闡述，無序效應對量子相變的影響往往比對古典相變顯著，原因之一在於量子系統低溫時實空間的缺陷在對應的古典模型延伸至整個虛數時間維度，這可造成相對長的鬆弛時間，並進一步影響其他物理量及相變普適類。最極端的量子相變無序效應已知發生於無縱場的量子易辛模型 [17, 18]，其所對應的動力學臨界指數為 $z = \infty$ 。本章節就無序一維量子易辛模型探討無序效應對量子相變之影響，我們首先驗證無縱場 ($h^z = 0$) 的情形，接著我們將探討至今未知加縱場下的無序效應。

我們考慮的無序量子模型（式 (5.1)）的自旋交互耦合 J_i 及場強度安排如下： J_i 為均勻介於 $(0, 1]$ 區間的隨機亂數，橫場 h_i^x 為均勻介於 $(0, h^x]$ 間的亂數，縱場則設為對應各晶格點位置 (i) 為相同值 $h_i^z \equiv h^z$ 。在 $h^z = 0$ 時，如此安排所對應的二維古典模型正是所謂的 Shankar-Murthy 模型 [59]（圖 5.15 (b)）。

同上節，我們亦從局域交錯磁化量的 Binder 比值著手，在這裡我們須對不同的多個無序耦合的樣本作平均。在沒有縱場存在的情況之下，量子相變發生於當 J_i 和 h_i^x 的分佈相同時，也就是 $h^x = 1$ [18, 62]。另外，已知量子臨界點時時間上及空間上的關聯長度之精確關係為 [17, 18]：

$$\xi_\tau \sim \exp(\text{const.} \sqrt{\xi}), \quad (5.32)$$

也就是對應無窮大的動力學指數 $z = \infty$ 。對有限系統而言，式 (5.32) 的關係可轉換成溫度倒數 β （虛數軸方向的長度）與空間尺度 L 的關係：

$$\beta \sim \exp(\text{const.} L^\psi) = \exp(\text{const.} \sqrt{L}), \quad (5.33)$$

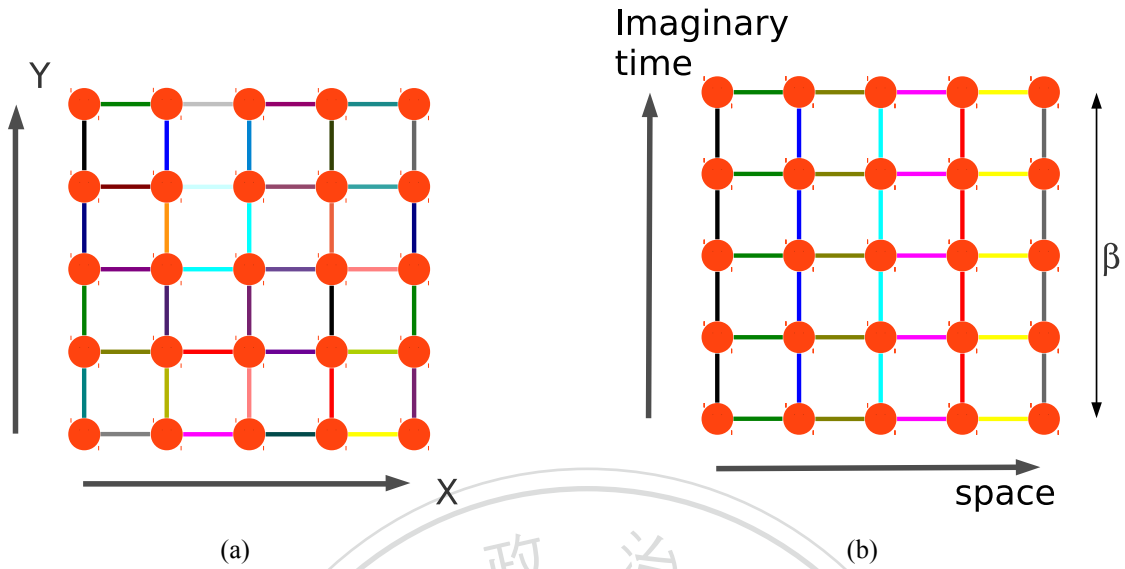


圖 5.15: 二維系統無序交互耦合的兩類型不同的安排。不同顏色代表不同耦合值。(a) x 方向及 y 方向的耦合值均隨機。此模型為第 5.1 節所討論的無序二維古典模型。如此安排的無序耦合並不顯著地改變相變性質。(b) 同一列 x 方向耦合值為隨機亂數，但 y 方向耦合值每列均相同（每行選擇可不同）。此模型為 Shankar 和 Murthy [59] 提出的易辛模型，也對應我們所討論的無序橫場下及具隨機交互耦合的一維量子易辛模型，其中 x 方向為實空間方向， y 方向為虛數時間方向。這類型的無序耦合安排將巨大影響量子相變性質。

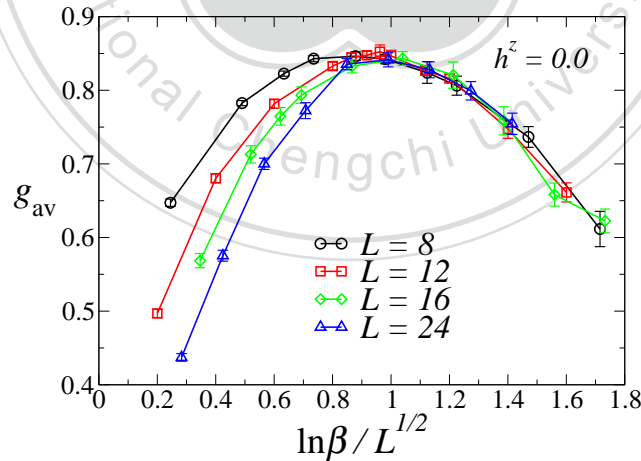
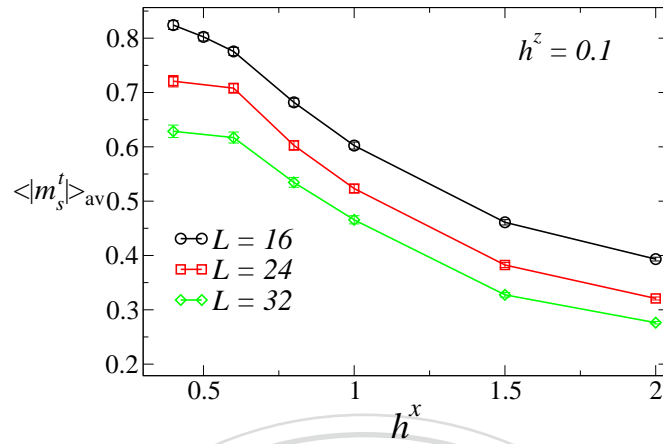


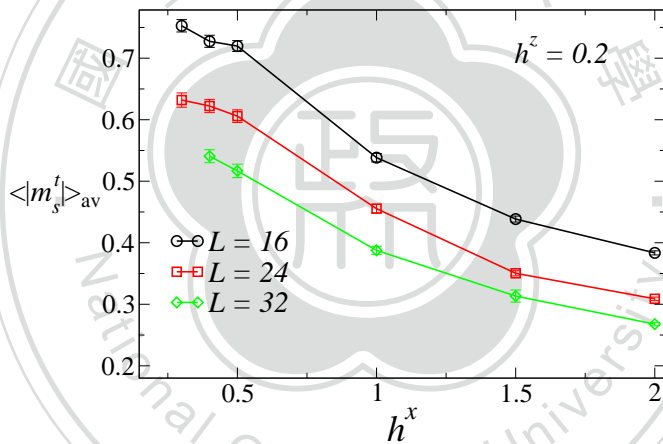
圖 5.16: 無縱場 (h^z) 的無序一維量子易辛模型的局域交錯磁化量 Binder 比值對 $\ln \beta / \sqrt{L}$ 作圖。

其中 $\psi = 1/2$ 。

利用式 (5.33) 的關係，我們將 $h^z = 0, h^x = 1$ 時不同尺度 L 的平均 Binder 比



(a)



(b)

圖 5.17: (a) $h^z = 0.1$ 時平均交錯磁化量隨橫場 h^x 的變化；(b) $h^z = 0.2$ 時平均交錯磁化量隨橫場 h^x 的變化。

值 g_{av} 對 $\ln \beta / L^{1/2}$ 作圖 (圖 5.16)，結果顯示平均 Binder 比值在此臨界點的最大值確實與 L 無關，同時我們也觀察到數據在大 β 值區域坐落在一起，印證式 (5.32) 不尋常的動力學標度化及無窮大的動力學臨界指數；雖然小 β 值區域的值無法貼齊，但嘗試其他標度化形式 (如對應有限的 z 值)，我們也無法在此 L 範圍達到更好的吻合。

我們也將上述的計算和分析應用於加縱場 ($h^z \neq 0$) 的系統。令我們感到訝異及困惑的是：局域交錯磁化量隨溫度倒數 β 呈「拋物型」變化的特性在微弱縱場下 $h^z \lesssim 0.1$ 即消失。此現象阻礙我們定位對應 $h^z \neq 0$ 的臨界點，也使得我們無法深

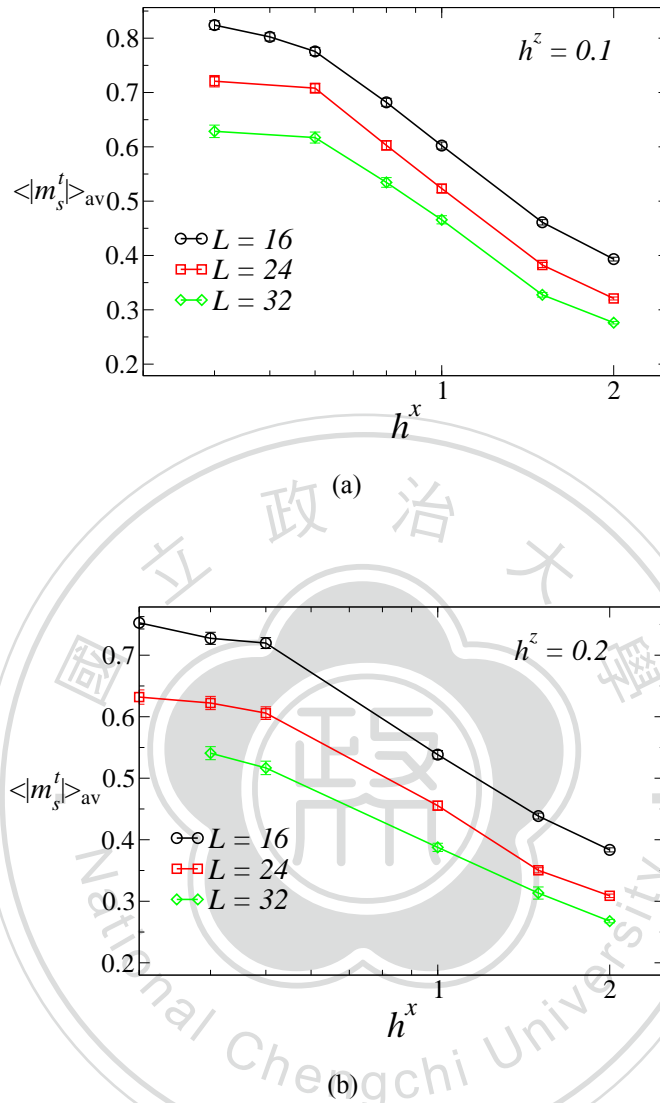


圖 5.18: 圖 5.17 的結果，但橫場值取對數。

入探討無序效應對圖 5.13 中除 ($h^x = 1, h^z = 0$) 外的臨界線及其性質之影響。為了進一步檢驗，我們也計算平均交錯磁化量 $\langle |m_s^t| \rangle_{\text{av}}$ (定義於式 (5.31)，但須對多個無序樣本作平均) 隨橫場 h^x 的變化；對 $h^z = 0.1$ 和 $h^z = 0.2$ 的結果展示於圖 5.17。比較均質系統的情形 (圖 5.14)，無序系統的交錯磁化量隨平均橫場值增大呈現緩慢遞減之現象；事實上若考量如 $h^z = 0$ 處對應 $z = \infty$ 特殊的標度關係，控制參數至臨界點距離應定為 [18]：

$$\delta \equiv [\ln h^x]_{\text{av}} - [\ln J]_{\text{av}}. \quad (5.34)$$

圖 5.18 為圖 5.17 的平均交錯磁化量對 $\ln h^x$ 作圖。雖然我們僅有系統尺度至 $L = 32$ 的數據，但平均交錯磁化量在強橫場區域呈現的「長尾巴」隱含著：在縱場下無序量子相變點位置變得不明確，即所謂「模糊相變」(smeared phase transition) [64, 65]。這類型相變的出現可解釋如下：隨機無序的自旋耦合與橫場造成無序態形成局域有序的反鐵磁態（見第 2.3 節），無縱場時 $h^z = 0$ ，這些局域有序的區塊具很長的鬆弛時間，因為翻轉它們需要同時變動一大區域的控制參數，這正是導致 Griffiths 奇點現象發生的原因，且於量子臨界點處呈現無窮大動力學指數 $z = \infty$ ；在縱場作用下，局域有序的區塊的反鐵磁性須與縱場抗衡，這可導致區塊的動力現象完全中止，而各自發展序參數，也就是不同區塊可於不同橫場值（控制參數值）呈有序態，這導致整體系統的相變變「模糊」。





第六章 總結與展望

本論文以蒙地卡羅的方法探討在橫場及縱場下的易辛反鐵磁模型之相變行為。我們主要就以下三重點作討論：

- (1) 橫場消失時，模型為純古典（非量子）性質。就我們討論的短序交互耦合系統而言，臨界點僅存在於二維及多維度情形。我們探討二維模型由熱擾動所引發的臨界現象，並找出溫度 (T) – 縱場 (h^z) 平面圖的臨界線。此臨界線連結 ($T = 2/\ln(1 + \sqrt{2}), h^z = 0$) 與 ($T = 0, h^z = 4$) 兩點，在 $h^z = 0$ 附近，臨界溫度與縱場平方成正比下降： $\Delta T_c \propto -(h^z)^2$ ；在 $T = 0$ 附近，臨界場隨溫度的上升呈線性下降： $\Delta h_c^z \propto -T$ 。縱場 $0 < h^z < 4$ 區間的臨界線均與 $h^z = 0$ 時的臨界行為相同，屬同一相變普適類。
- (2) 橫場對自旋排列而言，如同溫度一般傾向破壞長程有序的反鐵磁性，可引發反鐵磁態 – 順磁態間的相變。但橫場屬量子擾動，亦可引發絕對零度時基態的相變，即量子相變。我們探討在橫場及縱場下的一維模型之量子相變，找出橫場 (h^x) – 縱場 (h^z) 平面相圖連結 ($h^x = 1, h^z = 0$) 與 ($h^x = 0, h^z = 2$) 兩點的量子臨界線。我們亦發現 $h^z = 0$ 附近，臨界橫場與縱場平方成正比下降；而在 $h^x = 0$ 附近，臨界橫場隨縱場的上升呈線性下降。雖然對應的 $(1+1)$ 維度古典帶縱場易辛模型沿 x 方向（實空間方向）的自旋交換耦合屬反鐵磁性，而沿 y 方向（虛數時間方向）的自旋交換耦合屬鐵磁性，但在臨界線上因為無窮大發散的關聯長度，使得交換耦合的非同向性顯得不重要，系統確實具時空同向性：

$$\xi_\tau \sim \xi \quad (6.1)$$

對應的動力學臨界指數為 $z = 1$ 。且 $0 \leq h^x < 2$ 區間量子臨界行為應同屬 (1) 的二維易辛相變普適類；我們的計算結果符合這預期。

- (3) 我們亦探討無序效應對 (1)、(2) 點所提的臨界行為之影響。我們藉無序隨機的交互耦合及無序橫場來產生系統的非均質性。Harris 不等式 (2.7, 2.8) 提供一判斷無序效應是否影響臨界行為的基礎。依據 Harris 準則，無序對二維古典易辛模型臨界行為之影響屬不確定的邊緣情形 ($D\nu = 2$)，我們的數

值計算結果也發現，無序臨界點並無明顯偏離均質臨界現象，只改變臨界線的位置。一維量子易辛模型的臨界點則屬 Harris 準則中易受無序影響的例子 ($D\nu = 1 < 2$)； $h^z = 0$ 時我們確實觀察到無窮發散的動力學臨界指數 $z = \infty$ ，當 $h^z > 0$ 時無序量子臨界點似變模糊 (smeared phase transition)；但對於 $h^z > 0$ 情形，我們仍需更可靠的數值結果。

本論文探討的量子模型雖看似簡單，卻具非常豐富的相變行為，至今也僅存有少數已知的精確解及零星的數值計算結果。針對這個系統未知的部份，建議幾個深入探討的方向：(一) 針對無序效應部份，可應用無 Trotter 誤差的量子蒙地卡羅方法 (如連續時間量子蒙地卡羅方法 [66]，或 Stochastic Series Expansion (SSE) 量子蒙地卡羅法 [67]) 進行更精確的計算，或輔以有效率的圖形處理單元 (GPU) 加速運算；(二) 針對均質系統臨界線，尤其靠近零橫場處 $h^x = 0$ ，值得計算其他物理量來驗證一系列的臨界指數及標度修正，甚至可探討同樣具普適性質的量子糾纏熵 (entanglement entropy)。



參考文獻

- [1] P. W. Anderson, *Science* **177**, 393 (1972).
- [2] J. P. Sethna, *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity*, Oxford University Press, 2006.
- [3] N. D. Mermin, *Phys. Rev. Lett.* **26**, 957 (1971).
- [4] M. Le Bellac, *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics*, Cambridge University Press, 2004.
- [5] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M. P. A. Fisher, *Science* **303**, 1490 (2004).
- [6] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 227202 (2007).
- [7] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [8] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3184 (1971).
- [9] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, second edition, 2011, Cambridge Books Online.
- [10] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [11] A. R. H. Richard P. Feynman, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Companies, 1965.
- [12] A. B. Harris, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **7**, 1671 (1974).
- [13] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17 (1969).
- [14] B. M. McCoy, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 383 (1969).
- [15] B. M. McCoy and T. T. Wu, *Phys. Rev.* **176**, 631 (1968).

- [16] M. Thill and D. Huse, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **214**, 321 (1995).
- [17] D. S. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 534 (1992).
- [18] D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **51**, 6411 (1995).
- [19] H. Rieger and A. P. Young, *Phys. Rev. B* **54**, 3328 (1996).
- [20] S. Guo et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 017209 (2008).
- [21] T. Westerkamp et al., *Phys. Rev. Lett.* **102**, 206404 (2009).
- [22] S. Ubaid-Kassis, T. Vojta, and A. Schroeder, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 066402 (2010).
- [23] C. Pich, A. P. Young, H. Rieger, and N. Kawashima, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5916 (1998).
- [24] O. Motrunich, S.-C. Mau, D. A. Huse, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **61**, 1160 (2000).
- [25] Y.-C. Lin, F. Iglói, and H. Rieger, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 147202 (2007).
- [26] I. A. Kovács and F. Iglói, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 404204 (2011).
- [27] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 940 (1996).
- [28] H. M. Rønnow et al., arXiv preprint cond-mat/0505064 (2005).
- [29] H. M. Rønnow et al., *Science* **308**, 389 (2005).
- [30] P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
- [31] P. Pfeuty, *Annals of Physics* **57**, 79 (1970).
- [32] C. N. Yang and T. D. Lee, *Phys. Rev.* **87**, 404 (1952).
- [33] T. D. Lee and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **87**, 410 (1952).
- [34] R. Dobrushin, J. Kolafa, and S. Shlosman, *Communications in Mathematical Physics* **102**, 89 (1985).
- [35] X. Wu and F. Wu, *Physics Letters A* **144**, 123 (1990).
- [36] P. Sen, *Phys. Rev. E* **63**, 016112 (2000).

- [37] A. A. Ovchinnikov, D. V. Dmitriev, V. Y. Krivnov, and V. O. Cheranovskii, *Phys. Rev. B* **68**, 214406 (2003).
- [38] S. K. Niesen et al., *Phys. Rev. B* **87**, 224413 (2013).
- [39] S. Kimura et al., *Journal of Physics: Conference Series* **51**, 99 (2006).
- [40] J. Simon et al., *Nature* **472**, 307 (2011).
- [41] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Nature* **415**, 39 (2002).
- [42] M. P. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- [43] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).
- [44] S. Sachdev, K. Sengupta, and S. Girvin, *Phys. Rev. B* **66**, 075128 (2002).
- [45] J. Simon et al., arXiv preprint 1103.1372 (2011).
- [46] H. F. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [47] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
- [48] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [49] M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. B* **62**, 1089 (2000).
- [50] K. Hukushima and K. Nemoto, *Journal of the Physical Society of Japan* **65**, 1604 (1996).
- [51] D. J. Earl and M. W. Deem, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 3910 (2005).
- [52] V. Privman, *Finite-size scaling theory*, volume 1, Singapore: World Scientific, 1990.
- [53] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 1996.
- [54] K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
- [55] K. Binder, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* **43**, 119 (1981).

- [56] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [57] V. S. Dotsenko and V. S. Dotsenko, Advances in Physics **32**, 129 (1983).
- [58] B. Shalaev, Physics Reports **237**, 129 (1994).
- [59] R. Shankar and G. Murthy, Phys. Rev. B **36**, 536 (1987).
- [60] M. Guo, R. N. Bhatt, and D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **72**, 4137 (1994).
- [61] H. Rieger and A. P. Young, Phys. Rev. Lett. **72**, 4141 (1994).
- [62] P. Pfeuty, Phys. Lett. A **72**, 245 (1979).
- [63] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Annals of Physics **16**, 407 (1961).
- [64] T. Vojta, Phys. Rev. Lett. **90**, 107202 (2003).
- [65] T. Vojta, Journal of Physics A: Mathematical and General **39**, R143 (2006).
- [66] H. Rieger and N. Kawashima, Eur. Phys. J. B **9**, 233 (1990).
- [67] A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **68**, 056701 (2003).