

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

低維量子自旋系統之研究

Study on low-dimensional quantum spin systems

計畫編號：NSC 96-2112-M-029 -004 -MY3

執行期限：96 年 8 月 1 日至 99 年 7 月 31 日

主持人：楊明峰 執行機構及單位名稱：東海大學物理系

電子信箱(E'mail)位址：mfyang@thu.edu.tw

一、中文摘要

在本計畫中，我們在自旋為 1 且各向異性的一維量子自旋系統中，利用密度矩陣重整化群(Density Matrix Renormalization Group)計算出不同的基態之間的相似度(fidelity)和基態的糾纏熵(entanglement entropy)。研究基態相似度的二次導數在臨界點附近的行為，使得最近提出來的有限尺度關係(finite scaling relation)在數值上得到進一步的確認。不但如此，從我們計算的數據中，透過有限尺度分析，得到臨界點和對應的臨界指數與文獻中所得數值相當吻合。因此，對於利用相似度來鑑定量子相變，我們的工作提供了一個數值上的支持。

關鍵詞：密度矩陣重整化群，量子相變，相似度

Abstract

By means of the density matrix renormalization group technique, the scaling relation of the fidelity susceptibility proposed recently is verified for the spin-one XXZ spin chain with an on-site anisotropic term. Moreover, from the results of both the fidelity susceptibility and the entanglement entropy, the critical points and some of the corresponding critical exponents are determined through a proper finite-size scaling analysis, and these values agree with the findings in the literature. Thus our work provides a numerical support of the use of the fidelity in detecting quantum phase transitions.

Keywords: Density Matrix Renormalization Group, quantum phase transition, fidelity

二、緣由與目的、結果與討論

相變與臨界現象一直是凝體物理學中相當重要的基本課題之一，而量子相變是一種發生在絕對零度，由量子漲落而非熱漲落導致的相變現象。研究零溫量子臨界點的現象，可獲知物質系統更廣泛範圍的行為。

近兩三年來，由於量子資訊學的迅速發展，開始有人利用量子資訊學中的概念來研究量子相變，例如：糾纏熵(entanglement entropy) [1]和相似度(fidelity)[2]。相似度的定義為兩個不同的基態波函數，其中一個波函數在另一個波函數上的投影量。可以想像，當調變漢彌爾頓量中的控制參數做少量變化時，系統的基態也跟著改變。如果參數變化跨過相變點，則在相變點附近且屬於兩個不同相的兩個基態波函數彼此應該只有極少的重疊，因此相似度接近 0；如果參數變化並未跨過相變點而屬於同一個相，兩個不同的基態波函數應該有很大的重疊，即相似度接近 1。因此人們開始嘗試使用基態相似度及其二次導數來偵測量子相變[3]。這個方法的好處在於不需要知道序參量、對稱破缺等以往研究相變理論所必須知道的知識，而可純粹從希爾伯特空間的幾何性質來研究量子相變。缺點則在於理論方面不論是解析或是數值工作上，對於精準計算基態波函數都有相當難度，而實驗上要測量多體系統的基態相似度相似度更是無從下手。

在最近的理論研究指出[4]，系統在臨界點的時，相似度的二次導數隨尺度成冪次關係。然而在數值研究卻沒有一個清楚的例子，原因是為了得到非常準確的基態波函數，數值研究大多利用精確對角化法，而精確對角化法卻因為希爾伯特空間維度

呈指數成長而電腦的記憶體容量有限，所以無法計算到足夠大的尺寸來證實有限尺度律。另一個更有效的數值方法是密度矩陣重整化群，它可以精準計算出較大的尺寸，但是所得到的波函數的基底卻是經過不斷重整化的線性組合。不同的基態波函數有著不同的重整化基底，要計算相似度有一定難度，因此之前研究相似度的工作並無密度矩陣重整化群的計算結果。

我們的研究率先使用密度矩陣重整化群來計算在高斯相變和易辛相變中不同基態間的相似度。在比較大尺寸中($L \geq 100$)，相似度的二次導數的有限尺度律終於在數值上得到證實。同時我們也計算了基態的糾纏熵作為比較，發現相似度的二次導數和糾纏熵在我們選定的參數底下具有相同的能力來研究量子相變現象。另外值得一提的是，在我們選定的參數中，其中高斯相變是一個三階相變，這也是利用相似度研究高於二階相變的首例。

三、計畫成果自評

由上述的結果可以看出，我們的工作推進了相似度在量子相變的應用，並且在密度矩陣重整化群法的應用上更進了一步。這對於國內外相關的後續研究工作有著相當程度的幫助。

然而，我們以上研究的模型的相圖包含有許多相，相變分別對應不同的普適類，我們只針對高斯相變和易辛相變選擇一個相變點做研究。當考慮更高階的高斯相變，或其他的普適類，如：無窮多階的BKT相變，相似度的二次導數是否還能有效地偵測量子相變仍然是一個有趣的問題。該兩部分工作仍在繼續之中。

此外，相關的研究成果[5]均已刊登至 Physical Review A。

四、參考文獻

- [1] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, Rev. Mod. Phys. vol. **80**, 517-576 (2008).
- [2] P. Zanardi and N. Paunković, Phys. Rev. E **74**, 031123 (2006).
- [3] W.-L. You, Y.-W. Li, and S.-J. Gu, Phys. Rev. E **76**, 022101 (2007). P. Zanardi, M. Cozzini, and P. Giorda, J. Stat. Mech.: Theory. Exp. 2007, L02002. M. Cozzini, P. Giorda, and P. Zanardi, Phys. Rev. B **75**, 014439 (2007). M. Cozzini, R. Ionicioiu, and P. Zanardi, Phys. Rev. B **76**, 104420(2007). N. Oelkers and J. Links, Phys. Rev. B **75**, 115119 (2007). P. Zanardi, P. Giorda, and M. Cozzini, Phys. Rev. Lett. **99**, 100603 (2007). S.-J. Gu, H.-M. Kwok, W.-Q. Ning, and H.-Q. Lin, arXiv:0706.2495 (to be published in Phys.Rev. B). S. Chen, L. Wang, S.-J. Gu, and Y. Wang, Phys. Rev. E **76**, 061108 (2007). M.-F. Yang, Phys. Rev. B **76**, 180403(R) (2007). A. Tribedi and I. Bose, Phys. Rev. A **77**, 032307 (2008). N. Paunković and V. R. Vieira, Phys. Rev. E **77**, 011129 (2008). A. Hamma, W. Zhang, S. Haas, and D. A. Lidar, Phys. Rev. B **77**, 155111 (2008). H.-Q. Zhou, R. Orús, and G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **100**, 080601 (2008).
- [4] L. Campos Venuti and P. Zanardi, Phys. Rev. Lett. **99**, 095701 (2007).
- [5] Yu-Chin Tzeng and Min-Fong Yang, Phys. Rev. A **77**, 012311 (2008); Yu-Chin Tzeng, H.-H. Hung, Y.-C. Chen, and Min-Fong Yang, to appear in Phys. Rev. A.