

用量子蒙特卡罗方法研究二维超流-莫特绝缘体相变点附近的希格斯粒子

陈鲲 邓友金

Higgs mode near superfluid-to-Mott-insulator transition studied by the quantum Monte Carlo method

Chen Kun Deng You-Jin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 180201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.180201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.180201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

么正极限附近费米气体反常激发模式的涡旋

[Vortex of an anomalous mode in Fermi gas near unitarity limit](#)

物理学报.2013, 62(14): 140301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.140301>

雪茄形铷原子玻色-爱因斯坦凝聚中单极子模的朗道阻尼和频移

[Landau damping and frequency-shift of monopole mode in an elongated-rubidium Bose-Einstein condensate](#)

物理学报.2013, 62(13): 130307 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.130307>

利用光晶格自旋链中磁振子的激发模拟有限温度下光子的动力学 Casimir 效应

[Simulating dynamical Casimir effect at finite temperature with magnons in spin chain within an optical lattice](#)

物理学报.2013, 62(6): 060302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.060302>

费米-费米散射长度对费米超流气体在么正极限区域的隧穿现象影响

[The tunneling phenomena of the Fermi superfluid gases in unitarity by manipulating the Fermi-Fermi scattering length](#)

物理学报.2012, 61(18): 180303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.180303>

专题: 计算物理的近期发展和应用

编者按 随着计算技术的迅猛发展和计算能力的日益提高以及计算方法的不断进步, 计算物理已经成为物理学中与实验物理和理论物理并行的一个重要分支, 并且起到了联系实验物理和理论物理的桥梁作用. 特别是对复杂系统, 计算物理几乎成了理解新物理现象、预言新量子态、设计新材料的唯一手段, 在当今的科学研究各领域中扮演着关键角色. 例如通过能带计算预言在凝聚态体系中可以找到 Weyl 费米子; 通过结构搜索预言高压下材料的新物态; 通过发展新的计算方法理解放射性核燃料在不同条件下的物理性质; 通过多体理论模型计算探索电子关联引起的新量子态及量子相变; 以及通过第一性原理计算研究提高锂电池、太阳能电池及有机半导体材料的效率等等. 可以预见, 计算物理在今后的物理学发展中将愈发举足轻重.

本刊特组织“计算物理的近期发展和应用”专题, 对近年来的一些计算方法发展进行介绍, 如基于路径积分的分子动力学与热力学积分方法、非平衡态格林函数方法、适于大尺度复杂纳米体系材料模拟的 SCED-LCAO 哈密顿方法以及基于数值原子轨道基组的第一性原理计算软件. 同时对这些方法的应用以及计算物理在各个不同的物理学分支如燃烧系统、有机分子-铁磁界面、多元半导体光伏材料、低维材料、5d 过渡金属氧化物、有 Rashba 自旋轨道耦合的金属表面、谷电子学等领域的应用进行介绍. 我们希望, 通过这些文章, 可以加深人们对计算物理的了解, 推动国内计算物理的发展.

(客座编辑: 北京计算科学研究中心 林海青; 复旦大学 龚新高)

用量子蒙特卡罗方法研究二维超流-莫特绝缘体相变点附近的希格斯粒子*

陈锬[†] 邓友金[‡]

(中国科学技术大学, 合肥微尺度物质科学国家实验室, 合肥 230026)

(University of Massachusetts at Amherst, MA, USA 01002)

(2015年8月17日收到; 2015年9月11日收到修改稿)

与伽利略不变性的超流体不同, 具有洛伦兹不变性的超流体中除了声子模之外, 还存在希格斯振幅模 (Higgs amplitude mode). 在二维情况下, 由于存在十分剧烈的衰变成声子模的过程, 希格斯模是否仍然是一个能产生尖锐线性响应的激发子成为了一个问题. 近年来的进展最终对这一持续数十年的争论做出了肯定的回答, 证实了希格斯的可观测性. 在这里, 我们回顾一系列的数值方面的工作; 它们以二维超流体 (superfluid) 到莫特绝缘体 (Mott insulator) 量子相变点 (SF-MI QCP) 附近的具有洛伦兹不变性的超流体为对象, 成功探测到了希格斯模的线性响应信号. 特别是, 我们介绍了一种如何使用平衡态系统的蒙特卡罗算法计算强关联系统的延迟响应函数 (retarded response function) 的方法. 该方法主要包含两个核心步骤: 即通过路径积分表示下的蠕虫算法这一高效的蒙特卡罗算法计算平衡态系统的虚时间关联函数, 然后利用数值解析延拓方法从虚时间关联函数中获得实时间 (实频率) 的响应函数. 将该数值方法应用于二维 SF-MI QCP 附近的玻色-哈伯德模型 (Bose-Hubbard Model), 结果表明尽管在超流相中, 希格斯模衰变过程非常剧烈, 但是在动能算符相对应的延迟响应函数的虚部中, 仍然可以观测到希格斯模所对应的尖锐的共振峰. 进一步的研究表明, 在莫特绝缘相, 甚至常流体相中, 也可能存在类似的共振峰信号. 由于可以在光晶格中超冷原子系统等凝聚态中观测到 SF-MI QCP, 因此希格斯共振峰有望通过实验进行直接探测. 此外我们指出, 同样的希格斯共振峰还存在于所有和 SF-MI QCP 具有相同普适类 ((2+1) 维相对论性 $U(1)$ 临界性) 的量子临界系统中.

关键词: 线性响应, 量子临界性, 希格斯粒子, 蒙特卡罗

PACS: 02.70.Ss, 03.75.Kk, 14.80.Bn, 67.85.-d

DOI: 10.7498/aps.64.180201

* 国家自然科学基金 (批准号: 11275185) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: chenkun@mail.ustc.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: yjdeng@ustc.edu.cn

1 凝聚态中的希格斯玻色子

我们的讨论从超流体/超导体的低能理论开始. 无论是超流还是超导, 系统的局部序参量都可以用一个随空间与时间缓慢变化的 $U(1)$ 复数场描述,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}. \quad (1)$$

从微观来看, 该复数场可以非常粗略地理解为与玻色子(超流)或者库珀对(超导)的波函数有关. 而系统的低能物理由 $U(1)$ 朗道-金兹堡理论给出^[1]:

$$L[\Psi, \Psi^*] = iK_1 \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - K_2 \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right|^2 + K_3 |\nabla \Psi|^2 - r|\Psi|^2 + U|\Psi|^4. \quad (2)$$

如果局域序参量带电荷, 则(2)式中应引入与电磁规范场的最小耦合, 即 $\partial/\partial t \rightarrow \partial/\partial t - ie\phi(\mathbf{r}, t)$ 以及 $\nabla \rightarrow \nabla - ie\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, 其中 (ϕ, \mathbf{A}) 为电磁场的四维矢量. (2)式中关于时间的一次导数项 K_1 相当于系统的薛定谔运动方程中的时间导数部分. 我们将作用量保留到关于时间的二次导数项 K_2 , 因为在某些系统中, $K_1 \rightarrow 0$, K_2 项会导致显著的物理效应; 在这种情况下, 我们注意到此时系统不仅具有渐进的粒子-空穴对称性, 也具有洛伦兹不变性. 此时, 我们称对应场论为 $D+1$ 维相对论性 $U(1)$ 场论, D 为系统的空间维度.

如果只考虑 r, U 两项势能项, 那么当 $r > 0$, 势能部分呈如图1所示的类似于墨西哥帽子的形状, 此时序参量 $\langle \Psi \rangle = \sqrt{r/U} > 0$ (不失普适性, 此处取相位为0), 即系统处于 $U(1)$ 对称破缺后的有序相. 注意到背景序参量的相位如果出现空间上变化缓慢的长波涨落, 系统的能量增量反比于涨落的特征波长, 因此系统中存在一个与相位涨落相关的无能隙的戈德斯通模(Goldstone mode), 对应超流/超导中的声子模. 而另一方面, 如果考虑序参量振幅的长波涨落, 简单的计算表明其性质取决于 K_1, K_2 的取值: 1) 系统具有伽利略不变性, 即 $K_1 \neq 0$ 且 $K_2 = 0$, 则振幅模的色散与声子一致, 即不存在独立的振幅模; 2) 系统具有洛伦兹不变性, 即 $K_1 = 0$ 且 $K_2 \neq 0$, 则振幅模表现为一个带有非零静止质量 $-2r$ 的相对论性集体模, 我们通常称之为希格斯模(Higgs mode)^[2]. 此外在平均场近似下, 容易证明声子模与希格斯模没有相互作用, 所以后者是一种真正意义上可探测的长寿命激发子.

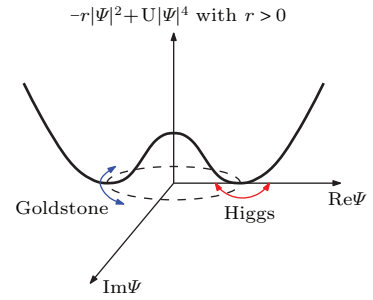


图1 $r > 0$ 时的墨西哥帽状势能图 切向的模(蓝色)为无能隙的戈德斯通模(Goldstone mode), 而径向的模(红色)为有能隙的希格斯模(Higgs mode)

Fig. 1. The “Mexican hat” potential when $r > 0$. The transverse degree of freedom (blue) gives the gapless Goldstone mode, while the longitudinal one (red) gives the gapped Higgs mode.

该粒子被称为希格斯模的原因在于它是标准模型^[3]中的希格斯玻色子在凝聚态物理中的对应. 对于超导/超流体, 如果 Ψ 带有电荷并与电磁场产生耦合, 当 Ψ 发生自发对称破缺时, 根据著名的安德森-希格斯机制^[4,5], 系统内的戈德斯通模与电磁场都将获得质量. 这与标准模型中电弱相互作用粒子通过希格斯场获得质量十分类似. 表1列出了凝聚态与标准模型中的希格斯粒子的对应关系.

表1 凝聚态模型与标准模型的比较

Table 1. A comparison between the superfluid/ superconductor “universe” and the real universe.

| 超导/超流模型 | 标准模型 |
|---------|---------|
| 基态 | 真空 |
| 声速 | 光速 |
| 电磁场 | 电弱相互作用场 |
| 序参量 | 希格斯场 |
| 希格斯模 | 希格斯粒子 |

因此在现实的凝聚态系统中观测这样的希格斯模不仅十分有趣, 还能极大地加深我们对于安德森-希格斯机制和超导/超流的物理性质的理解. 对于 Bardeen-Cooper-Schrieffer(BCS) 超导体, 由于温度远低于超导能隙时自动保证了粒子-空穴的对称性, 希格斯模存在的条件相对容易满足^[6], 因此人们很早便已成功地在 NbSe_2 超导材料中通过拉曼散射技术观测到了希格斯准粒子的共振峰^[7,8]. 而对于超流体情况则不同, 常规的超流系统, 如 ^4He 液体以及其他的弱相互作用玻色气体, 通常并不具有粒子-空穴对称性. 但近十多年来兴起的光晶格中的超冷玻色子系统^[9]为超流体中的希格斯模提供了另一种可能性. 其核心思想在于把众多超冷($\sim \text{nK}$)的碱金属原子装载进激光驻波形

成的立方体光晶格中, 并使得光晶格足够深(激光振幅足够大), 以至于原子被约束在第一能带上, 系统可以用紧束缚近似描述, 即著名的玻色-哈伯德(Bose-Hubbard, BH)模型^[10],

$$\hat{H}_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \sum_i (\mu + V_i)n_i, \quad (3)$$

其中 b_i^\dagger (b_i) 在 i 格点上产生(湮灭)一个玻色子; $\langle i,j \rangle$ 表示对所有的最近邻格点的求和; 模型中的玻色子跳跃项矩阵元 J 由最近邻格点上玻色子波函数的重叠大小决定; 而玻色子间相互作用项 U 则正比于自由空间中玻色子的散射截面. 在超冷原子实验中 J 和 U 可以由激光波长与光晶格的深度来调节. 模型中最后一项包含两部分, 即由系统粒子数决定的全局均匀的化学势项和用来约束原子团的随空间变化的势阱项. 实验上, 通过加强 z 方向上的激光, 压制 z 方向上的跃迁效应, 从而把原子团挤压到 $x-y$ 平面上, 实现二维正方晶格上的 BH 模型. 为了简化讨论, 我们假设 $V_i = 0$, 即系统各向同性, 并且固定 $J = 1$. 在零温下, 当跳跃项占主导时, 玻色子倾向于非局域化, 系统处于超流态(superfluid, SF); 而当相互作用项占主导时, 系统中的玻色子将局域化而形成莫特绝缘体(Mott insulator, MI)态. 更详细的计算表明^[10], 系统在 U 由小到大变化时, 系统将出现由超流到莫特绝缘体的连续相变. 在整数粒子数填充数的参数截线上, 靠近相变点处由 $K_1 \rightarrow 0$ 的朗道-金兹堡模型(2)描述, 其中 Ψ 场为玻色子湮灭算符 \hat{b} 的对偶场. 因此, 系统涌现出了粒子-空穴对称性以及洛伦兹不变性, 我们将这一特殊的相变点称之为超流-莫特绝缘体量子临界点(superfluid-Mott insulator quantum critical point, SF-MI QCP). 图2给出了二维正方晶格上BH模型的填充数 $n = 1$ 附近的相图.

按照前文的讨论, 处于 SF-MI QCP 附近的 BH 模型符合希格斯模存在的先决条件. 由于该点附近属于量子临界区域, 它的上临界维度为3, 也就意味着对于三维BH模型, 上述平均场处理可以渐进正确地描述其中的物理, 希格斯模确实是一个可观测的长寿命激发子(例如, 实验上文献^[12,13]分别给出了三维光晶格超冷原子与三维量子反铁磁体中 QCP 附近的希格斯粒子的观测证据). 而在上临界

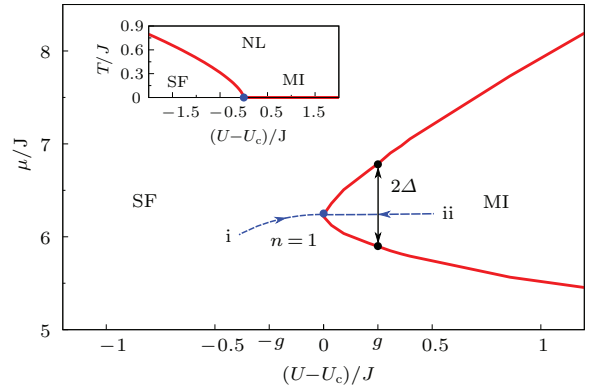


图2 量子蒙特卡罗方法得到的二维正方晶格上BH模型的基态相图以及有限温相图(见小图)^[11] 图中SF表示超流, MI表示莫特绝缘态, NL表示常规液体态(下同); 红线表示SF-MI或者SF-NL相变线, 相变线尖端蓝点即具有洛伦兹不变性的量子临界点(QCP), 位于 $U_c/J = 16.7424(1)$, $\mu_c = 6.21(2)$; 同时在图中用蓝色虚线表示了 $n = 1$ 固定填充数的轨迹, 对于该轨迹之上的系统, 用 $g = (U - U_c)/J$ 表示系统参数相对 QCP 的偏移量(本图修改自文献^[23])

Fig. 2. The ground state phase diagram and finite temperature phase diagram (see the inset) for the two dimensional Bose-Hubbard model on square lattice^[11]. SF represents superfluid phase, MI represents Mott Insulator phase, and NL represents normal liquid phase. The large blue dot on the tip of phase boundary (red) is the quantum critical point(QCP) with emergent Lorentz invariance. It's location is $U_c/J = 16.7424(1)$, $\mu_c = 6.21(2)$. The (blue) dashed curves specify trajectories with filling factor $n = 1$ in parameter space used to detune the system away from the QCP. For system along this trajectory, we use $g = (U - U_c)/J$ to characterize the deviation from QCP. Adapted from Ref.^[23].

维度之下, 对于二维系统, 量子临界区是一个强相互作用系统, 虽然系统的有效场论仍然是上述朗道-金兹堡模型, 但是不仅上述平均场描述失效, 其他基于微扰展开的理论甚至都无法给出定性正确的结果. 在这样的系统中, 希格斯模将与声子模强耦合在一起, 此时希格斯模是否仍然是一个可观测的长寿命激发子便不再确定. 人们早前对这一问题给出了否定的回答, 认为希格斯模将因为强烈地衰减为声子而不可探测^[1,14-16]. 但是近年来, 理论^[17-19]、实验^[20]和数值^[21-25]上一系列的进展却颠覆了这一认识. 特别是由于数值方法上的突破, 对希格斯相关响应函数实现了无系统误差的测量, 证实了二维量子临界点附近, 希格斯模具有可观测性; 但是它在响应函数中的共振峰的宽度与它的静止质量相当, 因此是一个临界定义的准粒子. 此外, 借助数值方法, 我们还可以定量地给出该希格斯模的静止质量(见相应章节). 本文讨论并回顾

近年来蒙特卡罗数值方法对希格斯模的研究.

在下文中,我们将先介绍探测希格斯模的方法,特别是标量响应函数(scalar type response function)的重要意义;在随后的部分将介绍如何使用基于虚时路径积分表示的蒙特卡罗方法来测量标量关联函数,并使用数值解析延拓方法获得真实时间下的标量相应函数;然后给出希格斯模可观测性的证据,并验证它的普适性与洛伦兹不变性;此外还将讨论莫特绝缘体相与常规液体相中的类希格斯模.

2 响应函数与希格斯模探测器

我们通常通过响应函数(response function)研究系统中准粒子的性质. 对于一个感兴趣的算符 \hat{O} ,我们在系统原哈密顿量上施加微扰项 $\lambda(\mathbf{r},t)\hat{O}_{\mathbf{r}}$. 当扰动强度 λ 足够小时,系统的响应处于线性区域,则 \hat{O} 算符对应的响应函数定义为 $\chi_O(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t')\equiv\delta\langle\hat{O}_{\mathbf{r}}(t)\rangle/\delta\lambda(\mathbf{r}',t')$. 其中 $\langle\hat{O}(t)\rangle$ 为Heisenberg绘景中算符 O 的热力学平均值随着时间的演化. 注意由于 t' 时刻微扰只对该时刻之后($t > t'$)的系统产生影响;而对于该时刻之前($t < t'$)的系统,响应 χ 为零,因此这样定义的响应函数被称之为延迟响应函数(retarded response function).

动量-频率($\omega-\mathbf{k}$)空间的响应函数的虚部 $\text{Im}\chi(\mathbf{k},\omega)$ 具有十分重要的物理意义,因为它正比于系统在 $\lambda(\mathbf{k},\omega)$ 扰动下耗散的功率. 当系统中存在长寿命的准粒子时,如果外界施加微扰的 $\omega-\mathbf{k}$ 组合恰好对应准粒子色散曲线上的一个点,那么系统的耗散功率——也就是响应函数的虚部——将由于准粒子的激发而出现共振现象. 特别是,如果这种现象表现为 $\text{Im}\chi(\mathbf{k},\omega)$ 函数在 $\omega-\mathbf{k}$ 平面上的一个共振峰,那么共振峰的位置 $\omega(\mathbf{k})$ 对应于准粒子的色散曲线,而峰的半高宽 $\Delta\omega$ 将反比于准粒子的寿命. 共振峰的半高宽 $\Delta\omega(\mathbf{k})$ 是否远远小于其频率 $\omega(\mathbf{k})$ 则可以作为准粒子是否定义良好的判断标准. 由此可见,响应函数中的共振峰提供了一种研究准粒子物理性质的有力工具.

就希格斯模而言,最直接的探测方法便是测量“希格斯场” $\Psi(\mathbf{r},t)$ ——实际系统中玻色子的湮灭算符 \hat{b} ——所对应的响应函数 $\chi_{\Psi}(\omega)$,这里我们假定了 $\mathbf{k}=0$. 如果希格斯粒子可探测,那么考虑到希格斯粒子具有非零的静止质量 ω_H ,零动量的

响应函数中应当在 ω_H 处存在共振行为. 对于玻色-哈伯德模型中的超流体来说,系统只有在量子临界点附近是由 $K_1=0$ 的有效场论(2)描述并符合希格斯粒子的存在条件,因此按照平均场论的定性结论,系统中假如存在希格斯粒子,希格斯粒子的静止质量应该始终很小 $\omega_H \ll J$,并且随着系统参数的临界点偏离量 $g=(U-U_c)/J$ (图2)的消失而消失. 然而现有对二维系统的有效场论(2)的理论计算却表明, Ψ 响应函数的虚部有红外发散(infrared singularity)现象,即 $\omega \ll 1$ 时按照 $1/\omega$ 发散,完全覆盖了希格斯模的特征频率处可能存在的共振行为^[1,14-16],由此人们通常认为希格斯模在二维中不可探测. 然而Podolsky教授团队的工作^[17]却指出,相较于 Ψ 响应函数而言, $|\Psi|^2$ 所对应的标量响应函数 $\chi_{|\Psi|^2}(\mathbf{k}=0,\omega)$ 可能是一个更好的希格斯模探测工具. 基于 $1/N$ 微扰计算(在这里 $N=2$)表明,该标量响应函数的虚部在小频率的行为按照 $\sim\omega^3$ 收敛,因此不易对可能存在的希格斯模导致的共振结构造成影响.

对应到玻色-哈伯德系统中,不与哈密顿量对易的最简单的标量算符为系统的动能算符 $\hat{K}=-J\sum_{\langle i,j\rangle}(b_i^\dagger b_j + \text{h.c.})$,因此我们所感兴趣的标量响应函数即量子系统中的动能响应函数 $\chi_{\hat{K}}(\omega)$. 此外,对于二维SF-MI QCP附近的超流系统,我们还可以应用临界标度律^[1]:

$$\text{Im}\chi_{\hat{K}}(\omega) \propto \Delta^{3-2/\nu}\Phi_{\text{SF}}(\omega/\Delta), \quad (4)$$

这里 $\nu=0.6717$ 为 $(2+1)$ 维 $U(1)$ 相对论性场论的关联长度指数(correlation length exponent)^[26,27]. 定义系统的临界点偏离量为 $g=(U-U_c)/J$. 同时,定义系统的能量标度 Δ 为偏离临界点 $|g|$ 的Mott绝缘体的能隙;那么偏离量为 g 的超流系统($g < 0$)的能量标度由它的镜像点即偏离量为 $|g|=-g$ 的Mott绝缘体的能隙决定. 按照临界标度律, $\Delta \propto |g|^\nu$,即系统能量标度在临界点处趋于零. 另外需要指出的是,(4)式中的 $\Phi_{\text{SF}}(x)$ 是量子临界点的普适函数;不仅对于SF-MI QCP,事实上,在所有由 $(2+1)$ 维相对论性 $U(1)$ 理论所描述的量子临界点附近,有序相的动能响应函数都由该函数描述.

再结合有效场论的预言,我们总结出普适函数 $\Phi_{\text{SF}}(x)$ 的行为从 $\Phi_{\text{SF}}(x \rightarrow 0) \propto x^3$ 开始并在大频率下慢慢趋近于一个准平台 $\Phi_{\text{SF}}(x \gg 1) \propto x^{3-2/\nu} \approx x^{0.0225}$. 如果希格斯模可探测,那么它的

共振结构应该出现在系统的能量标度 Δ 附近, 即 Φ_{SF} 函数的 $x \sim 1$ 附近. 为了更好地说明问题, 在图3中, 我们给出了响应函数的两种可能的定性曲线, 分别对应于希格斯模可探测与不可探测的情形.

下文中, 我们将讨论如何在量子蒙特卡罗的框架内计算标量响应函数的虚部, 并对希格斯模在 SF-MI QCP 附近的二维超流体中是否可见做出回答.

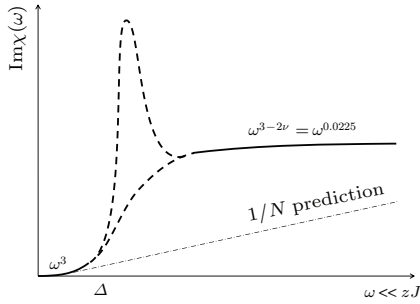


图3 实线表示临界标度律所预言的普适标量响应函数虚部的已知行为, 而虚线部分为它的未知部分, 图中我们举例画出了两种可能性, 其中共振虚线表示希格斯模可探测, 而平滑曲线则反之. 当然, 实际的响应函数可能包含其他的结构. 而图中的点划线则对应 $1/N$ 微扰论对低频律行为的预言 [17] (本图修改自文献 [21])

Fig. 3. The solid line represents universal scaling predictions for the imaginary part of the universal scalar response function, while the dashed line represents unknown region. In the figure, we show two possibilities: the dashed curve with resonance peak means the Higgs mode is detectable (one may also imagine multiple peaks in the crossover region), while the featureless curve means the opposite. The dashed-dotted line depicts prediction of $1/N$ perturbation theory [17]. (Adapted from Ref.[21]).

3 蠕虫算法——一种蒙特卡罗方法的简介

对于多体量子系统的研究, 精确的计算求解通常不可行, 人们不得不依赖于各种数值计算方法. 蒙特卡罗方法是其中一个非常重要的研究方法. 一个典型做法是马尔可夫链蒙特卡罗 (MCMC, Markov-Chain Monte Carlo) 方法: 构造一个马尔可夫链随机过程“抽样”系统状态, 并计算物理量的统计平均值. MCMC 方法在电子计算机面世初期就被应用于统计物理的研究, 如今已被广泛应用于物理学研究的各领域.

这里我们使用了一种基于虚时间路径积分表示的连续时间蒙特卡罗方法 [28]. 该方法具有非常

广泛的普适性, 可以研究没有符号问题的量子多体系统的平衡态性质. 特别需要指出的是这是一种没有系统误差的计算方法, 因此它给出的结果在统计误差内总是可靠的. 以本文的BH模型为例, 取定义在格点上的玻色子福克态 (Fock state) 为本征态, 我们将哈密顿量写为对角的势能项

$$\hat{V} = \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \sum_i (\mu + V_i)n_i$$

和非对角的动能项

$$\hat{K} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + \text{h.c.}),$$

则 $\hat{H}_0 = \hat{K} + \hat{V}$. 那么对于巨正则系统的玻色-哈伯德模型, 其配分函数 $Z = e^{-\beta \hat{H}_0}$ 可以表示为

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta V} \exp \left(- \int_0^\beta d\tau \hat{K}(\tau) \right), \quad (5)$$

其中 $\beta = 1/T$, 即温度的倒数. 虚时间演化的算符使用相互作用表象表示 $\hat{K}(\tau) = e^{\tau V} \hat{K} e^{-\tau V}$. (5) 式中的指数应当理解为带时序的泰勒展开式

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta V} \left(1 - \int_0^\beta d\tau \hat{K}(\tau) + \int_0^\beta d\tau_1 \int_{\tau_1}^\beta d\tau_2 \hat{K}(\tau_1) \hat{K}(\tau_2) - \dots \right). \quad (6)$$

以 $|\alpha\rangle = |n_1, n_2, \dots\rangle$ 表示系统可能的一个福克态, n_i 表示 i 格点上粒子数, 那么 $\hat{V}|\alpha\rangle = V_\alpha|\alpha\rangle$, 而 $\hat{K}|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} K_{\alpha'\alpha}|\alpha'\rangle$. 注意到由于粒子数守恒, 实际上只有当 $|\alpha\rangle$ 与 $|\alpha'\rangle$ 之间只发生一次最近邻的单个粒子的跃迁时, 系数 $K_{\alpha'\alpha}$ 才取非零值, 并且可以写出它的解析表达式——利用福克态的性质, 如果 i, j 相邻, 且 $|\alpha\rangle = |\dots, n_i, \dots, n_j, \dots\rangle$, $|\alpha'\rangle = |\dots, n_i + 1, \dots, n_j - 1, \dots\rangle$, 那么 $K_{\alpha'\alpha} = -J\sqrt{(n_i + 1)n_j}$. 利用这些性质, 我们可以对 (6) 式使用路径积分的思想, 将福克态的完备性式子 $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$ 插入到 (6) 式的每一个时间节点中, 并利用 $\text{Tr}(\dots) = \sum_\alpha \langle\alpha|\dots|\alpha\rangle$, 我们得到配分函数的路径积分最终表达式:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \int_0^\beta \dots \int_{\tau_{N-1}}^\beta \sum_{\substack{\alpha_0, \dots, \\ \alpha_N = \alpha_0}} W(N; \alpha_0, \dots, \alpha_{N-1}) \equiv \sum_{e \in \Omega} W(e), \quad (7)$$

这里, 我们用 e 代表一组参数 $(N; \alpha_0, \dots, \alpha_{N-1})$, Ω 表示整个参数空间. 而对于每一组参数 e , 权重函数 $W(e)$ 由下式给出:

$$W(N; \alpha_0, \dots, \alpha_{N-1})$$

$$= \prod_{i=1}^N (-K_{\alpha_i \alpha_{i+1}} d\tau_i) \prod_{i=1}^N e^{-V_{\alpha_i} \cdot (\tau_i - \tau_{i-1})}. \quad (8)$$

(7) 式中的每一项 $W(e)$ 都可以用空间维度加上一个虚时间维度的路径积分图像来形象地表达. 图 4(a) 给出了一个六阶项(对应 $N = 7$) 的例子. 系统从 $|\alpha_0\rangle$ 态出发, 每发生一次跃迁, 都会改变一次系统的态, 并在 $\tau = \beta$ 时处于态 $|\alpha_7\rangle$. 由于 $\text{Tr}(\dots)$ 的性质, 合法的图应满足 $|\alpha_7\rangle = |\alpha_0\rangle$, 即在虚时方向有周期性条件——这也就意味着只有偶数阶的图才有贡献. 再考虑到系统中的粒子数守恒, 每一条粒子线都会形成一个闭合的圈, 我们称之为单粒子的世界线. 因此系统的构形空间可以看作不同个数和不同形状的单粒子世界线的集合. 图中的每一个跃迁都会贡献权重因子 $-K_{\alpha_i \alpha_{i+1}} d\tau_i \propto -J$, 而每两次跃迁之间的时间方向没有变化的构型片段则会贡献权重因子 $e^{-V_{\alpha_i} \cdot (\tau_i - \tau_{i-1})}$. 因此, 一旦给定了路径积分图, 对应的权重也就惟一确定了. 值得一提的是, 由于 $K_{\alpha\alpha'} < 0$, 每一张图的权重都是非负的.

在路径积分图的框架内可以很方便地讨论系统的物理性质. 例如当 $U/J \gg 1$ 时, 由于跃迁项贡献的权重很小, 因此每个粒子的世界线倾向于固定在某个格点上不动, 即系统形成了莫特绝缘态. 而另一方面, 当 $U/J \ll 1$ 时, 跃迁项权重大, 单粒子的世界线出现非局域化; 如果空间上系统有周期性边界条件, 某些世界线甚至会在闭合之前在空间方向缠绕数次, 即空间方向的绕数 (spatial winding number) 非零, 即形成了超流态.

很多我们感兴趣的物理量都可以使用路径积分表示计算. 例如, 如果我们对系统动能感兴趣, 则可以在 H_0 上添加正比于动能算符的微扰项 $\lambda \hat{K}$, 即 $H(\lambda) = (1 + \lambda) \hat{K} + \hat{V}$, 则动能测量量为

$$\begin{aligned} \langle \hat{K} \rangle &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \lambda} \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}(\lambda)} \Big|_{\lambda \rightarrow 0} \\ &= -\sum_{e \in \Omega_Z} \frac{N}{\beta} \cdot \frac{W(e)}{Z} = -\frac{\langle N \rangle}{\beta}. \end{aligned} \quad (9)$$

注意 $H(\lambda)$ 系统的路径积分表示的图形结构和原来 H_0 系统的完全相同, 而对于权重而言, 两者的区别仅仅在于跃迁项分别为 $(1 + \lambda)K_{\alpha'\alpha}$ 与 $K_{\alpha'\alpha}$. 在 (9) 式的推导过程中, 因子 N 来自于对新系统中跃迁项的总权重贡献 $\propto (1 + \lambda)^N$ 对 λ 的求导. 此外, 由于 $\lambda \rightarrow 0$ 时新系统的哈密顿量约化为 H_0 , 因此 (9) 式中的 $W(e)$ 即原系统的展开项的权重 (8).

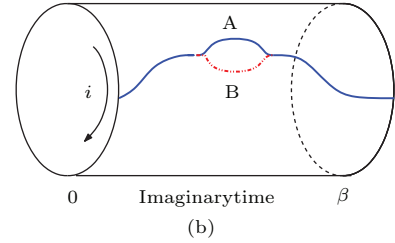
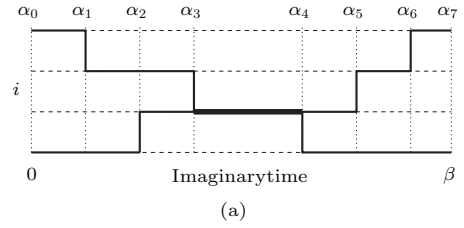


图 4 (a) 一维晶格上配分函数的路径积分图, 纵轴为空间方向, 而横轴为虚时间方向. 虚线表示没有粒子数占据, 实线的粗细表示粒子占据数 n ; (b) 定义在配分函数的路径积分图空间上的一种局域更新, 空间方向假设了晶格的周期性边界条件, 蓝色实线表示更新之前一条粒子的世界线. 在做了一次局域更新后, 删除了世界线中的 A 线段 (蓝色实线); 同时添加了 B 线段 (红色虚线). 更新后整条世界线仍然保持闭合, 为了绘图方便, 尽管原始系统定义在晶格上, 这里的世界线我们以光滑化的曲线代替

Fig. 4. (a) The path-integral representation for the partition function of an one dimensional lattice system. The vertical axis is the spatial direction while the horizontal axis is the imaginary time direction. Dashed lines are unoccupied states, while the solid lines are the occupied states with their thickness as the occupation number n ; (b) a local update defined in the configuration space of the partition function. Periodical boundary condition is enforced on the spatial direction. The blue solid line represents the initial state of a particle worldline. After a local update, the A segment (blue solid) of the particle worldline is replaced by the B segment (red dashed). All the worldlines remain closed after the updates. For convenience, we use smooth curves to represent worldlines on lattice system.

尽管动能测量量的解析表示非常简洁, 但是对于强关联区域 $U/J \sim 1$, 由于高阶项不可忽略, 实际上动能的数值并不能解析地计算出. 此时, 马尔可夫链蒙特卡罗 (Markov chain Monte Carlo) 方法便有了用武之地. 由于图权重 $W(e)$ 的正定性, 且有 $\sum_{e \in \Omega_Z} W(e)/Z = 1$, 因此可以把 $W(e)/Z$ 类比为一种概率. 如果我们能够找到一种随机抽样方法可以按照概率 $P(e) \equiv W(e)/Z$ 产生构型 e , 那么动能就可以通过测量每个随机样本的阶数 N , 取平均后再乘以因子 $-1/\beta$ 获得. 这一思路就是一种蒙特卡罗算法. 与遍历所有的构型来计算 $N \cdot W(e)/Z$ 关于

e 的积分的常规算法相比, 这种蒙特卡罗算法是按照各构型的权重 $W(e)/Z$ 进行抽样的, 即贡献越大的构型 (构型空间中的少数) 抽中的可能性越大, 而贡献越小的构型 (构型空间中的极大多数) 则反之. 通过这种重要性抽样, 蒙特卡罗方法得以实现对物理量的高效且无偏差的估计.

实际操作中, 上述蒙特卡罗算法中的重要性抽样通常通过马尔可夫链随机过程实现, 即设计一种可以遍历构型空间 Ω_Z 的随机行走; 假设每一步随机行走都将一个构型 e 更新到另一个构型 e' , 且转移概率只依赖于构型 e , 而与此前的历史无关. 如果每一步更新的转移概率都满足细致平衡条件

$$P(e \rightarrow e') \frac{W(e)}{Z} = P(e' \rightarrow e) \frac{W(e')}{Z}, \quad (10)$$

这里 $P(e \rightarrow e')$ 为从 e 构型到 e' 构型的转移概率, $P(e' \rightarrow e)$ 为相反方向转移的概率, 而 $W(e)/Z$ 与 $W(e')/Z$ 分别为 e 和 e' 构型的权重, 那么容易证明, 该随机行走产生的随机序列中, 每个构型 e 出现的概率都为 $W(e)/Z$, 由此可以实现对构型的重要性抽样.

当然, 对于 BH 系统, 要实现遍历所有构型的随机行走过程并不是那么显而易见的. 如果我们的更新操作完全是局域的, 例如图 4 (b) 所示的局域圈更新, 实际上无法遍历所有可能的合法构型. 无论做多少次这样的局域更新都无法改变一条世界线在空间方向的绕数, 因此这样的方法是不能直接用来模拟超流系统的. 当然, 我们可以考虑添加其他非局域的操作来实现空间方向绕数的更新; 但是在很多情况下, 非局域的操作意味着更新前后构型差别很大, 可能导致构型之间的转移概率很低, 因此对提升算法效率的帮助有限.

为了解决这些问题, 我们使用了著名的蠕虫算法 (worm algorithm) [29]. 限于篇幅, 在这里只介绍该算法的原理 (算法细节可以在文献 [30] 的相关章节中找到).

实际上, 该算法工作在单体格林函数的虚时间路径积分图空间中,

$$G(\tau_M - \tau_I, i_M - i_I) = T_\tau \langle b_{i_M}^\dagger(\tau_M) b_{i_I}(\tau_I) \rangle. \quad (11)$$

我们定义单体格林函数的路径积分图空间为 Ω_G . 注意到如果 Ira 和 Masha 相遇, 即在同一格点上 $i_M = i_I = i$, 且几乎在同一个时间点上 $\tau_M = \tau_I + 0^+$ (我们标记为 $M = I^+$), 格林函数为

$$G(0^+, 0) = T_\tau \langle b_i^\dagger(\tau_1 + 0^+) b_i(\tau_1) \rangle$$

$$= \sum_{e \in \Omega_Z} n(i, \tau_1) W(e), \quad (12)$$

其中 $n(i, \tau_1)$ 为构型 e 中格点 i , 时间 τ_1 处的粒子数. 此时, $G(0^+, 0)$ 的路径积分图空间也是 Ω_Z , 即和配分函数一样. 因此可以认为 Ω_Z 是 Ω_G 的一个子空间. 当然前者的构型的权重较后者多一个因子, 粒子数 n . 如果能够设计一种马尔可夫链算法实现对格林函数 Ω_G 空间的重要性抽样, 那么通过挑选出样本中属于 Ω_Z 空间的子集就可以实现对配分函数的重要性抽样. 而构型权重中多出的粒子数因子 n , 可以通过在测量量上乘以相应的 $1/n$ 因子加以抵消.

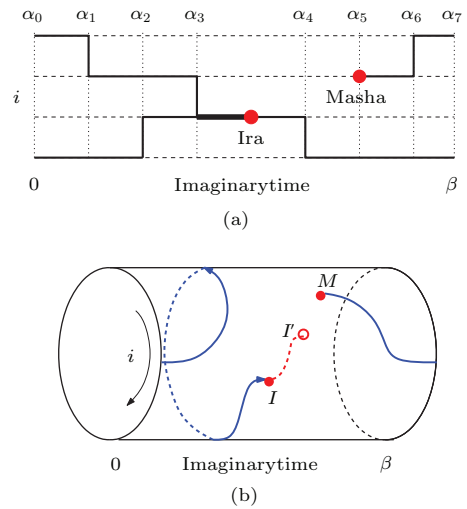


图 5 (a) 一维晶格上单体格林函数的路径积分, 横轴为虚时间方向, 虚线表示没有粒子数占据, 实线的粗细表示粒子占据数, Masha(M) 为一个 b^\dagger 算符, 而 Ira(I) 为一个 b , 分别表示蠕虫头与尾; (b) 定义在单体格林函数空间的路径积分图空间上的局域更新, 蓝色实线表示更新前一条两端都为缺陷粒子的世界线, 例如在 Ira 做了一次局域更新后, 可以从 I 位置走到 I' 位置, 即产生了红色虚线部分的世界线, 每一步更新都可以认为是蠕虫头 Ira 或者蠕虫尾 Ira 在做随机行走

Fig. 5. (a) The path-integral representation for the Green's function of an one dimensional lattice system. The vertical axis is the spatial direction while the horizontal axis is the imaginary time direction. Dashed lines are unoccupied states, while the solid lines are the occupied states with their thickness as the occupation number n . Masha (M), a b^\dagger operator, and Ira(I), a b operator, are the head and tail for a worm respectively; (b) a local update defined in the configuration space of the Green's function. The blue solid line represents the initial state of a particle worldline with defects Ira and Masha. As an example, a local update moves Ira from I to I' , and creates the red dashed line as a new part of this worldline. Each local update can be considered as a random walk of the worm head Ira or worm tail Masha.

引入单体格林函数的意义在于我们很容易设计遍历 Ω_G 空间的局域算法, 实际上蠕虫头或尾的局域随机行走, 如图 5, 就可以实现构型空间的完整更新, 其中包括对非局域的空间方向绕数的更新. 实践的结果表明, 这样一个简单的算法可以实现从 SF 相到 MI 相所有参数空间的高效模拟. 特别是在 SF-MI QCP 附近, 该算法几乎没有临界慢化现象 (critical slowing down), 此外该算法还可以非常自然地应用到无序系统、量子自旋系统甚至很多可以用圈图展开表示的经典系统中 [30].

4 解析延拓: 从虚时间到实时间

基于虚时间路径积分表示的蠕虫算法让我们可以高效而无偏差地计算很多物理量, 然而该算法只针对平衡态系统的虚时间表象下的物理量, 对于前文提到的实时间动力学性质则无能为力. 但是我们注意到, 对于实时间的延时响应函数, 由于它本身的解析性质, 实际上可以通过解析延拓的方法与一个虚时间中定义的测量量关联起来. 具体而言, 按照线性响应理论 [1], 一个测量量——如这里的动能算符 \hat{K} ——的延时响应函数的虚部与它在虚时间中的关联函数存在如下变换关系:

$$C_{\hat{K}}(\tau) = \int_0^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \mathcal{N}(\tau, \omega) \text{Im} \chi_{\hat{K}}(\omega), \quad (13)$$

其中动能算符在虚时间中的关联函数为 $C_{\hat{K}}(\tau) = \langle \hat{K}(\tau) \hat{K}(0) \rangle - \langle \hat{K} \rangle^2$, 而变换核为 $\mathcal{N}(\tau, \omega; T) = [e^{-\omega\tau} + e^{-\omega(1/k_B T - \tau)}] / (1 - e^{-\omega/k_B T})$. 在这个式子中, 虚时间关联函数 $C_{\hat{K}}(\tau)$ 可以用前面一节所描述的蠕虫算法精确地计算出来 (具体细节可见文献 [21]), 因此我们需要解决的问题便是如何由给定的虚时间关联函数反推出响应函数的虚部. 数学上可以证明, 如果虚时间关联函数精确可知, 那么上式给出的响应函数的虚部便是唯一确定的. 但是实际中, 上一节介绍的蒙特卡罗算法给出的答案尽管没有系统误差, 却会存在很小但是始终非零的统计误差, 这使得在数值计算的意义上上述解析延拓问题变得极为困难. 数值计算中, 我们需要将 (14) 式离散化, 即

$$C_{\hat{K}}(\tau_i) = \sum_{j=0}^N \frac{\Delta\omega}{2\pi} \mathcal{N}(\tau_i, \omega_j) \text{Im} \chi_{\hat{K}}(\omega_j), \quad (14)$$

这里 τ 与 ω 都做了离散化处理, 离散化间隔 $\Delta\tau$ 与 $\Delta\omega$ 由实际需要决定. 假设我们分别将 τ 与 ω 分为

M 段和 N 段, 则上式可以写为矩阵表达式:

$$\mathbf{C} = \frac{\Delta\omega}{2\pi} \mathbf{N} \mathbf{X}, \quad (15)$$

其中 \mathbf{C} 为虚时间关联函数对应的 $M \times 1$ 矩阵, \mathbf{X} 为响应函数虚部对应的 $N \times 1$ 矩阵, 而 \mathbf{N} 为变换核对应的 $M \times N$ 矩阵. 如果我们为简单起见, 取 $M = N$, 注意到 \mathbf{N} 为一个实对称矩阵, 因此可以用一个正交矩阵 \mathbf{T} 对角化 $\mathbf{N} = \mathbf{T}^{-1} \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) \mathbf{T}$, 这里 $\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ 为它的本征值构成的对角矩阵. 那么原则上我们可以直接通过矩阵运算在给定 \mathbf{C} 时反解出 \mathbf{X} , 即:

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \frac{2\pi}{\Delta\omega} \mathbf{N}^{-1} \mathbf{C} \\ &= \frac{2\pi}{\Delta\omega} \mathbf{T}^{-1} \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_N}\right) \mathbf{T} \mathbf{C}. \end{aligned} \quad (16)$$

我们用一个玩具模型来说明这一思路中存在的问题: 假设取 $\beta = 1$, $N = 100$, 并假设 τ 与 ω 均可离散化为 $0.01, 0.02, \dots, 1$ 确定的 100 个点. 那么可以画出 \mathbf{N} 的前 8 个本征值, 如图 6. 可见本征值的绝大部分都极其小, 接近于零. 如果我们使用 (16) 式求解响应函数, 那么尽管 \mathbf{C} 矩阵可以达到很小的统计误差, 在经过 \mathbf{N} 矩阵中接近于零的本征值的放大之后, 将变成最终的响应函数 \mathbf{X} 中剧烈的高频的涨落, 完全覆盖了真实的信号. 因此, 数值的解析延拓步骤是一个病态定义 (ill-posed) 的问题.

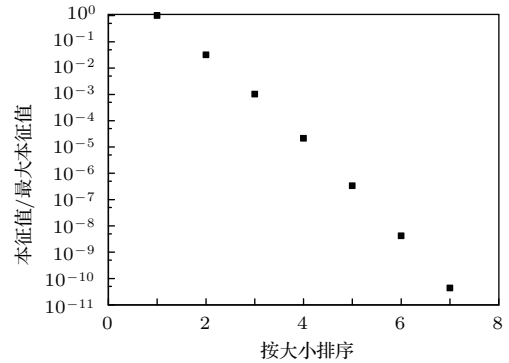


图 6 假设 $\beta = 1$, $N = 100$, 且取 τ 与 ω 为离散点 $0.01, 0.02, \dots, 1$, 这里给出了这个例子中变换核矩阵 \mathbf{N} 的前 8 个本征值, 纵轴为除以最大本征值后的相对本征值, 其中最大本征值为 960.549

Fig. 6. The largest eight eigenvalues of the kernel \mathbf{N} , assuming $\beta = 1$, $N = 100$, and τ and ω as discrete values $0.01, 0.02, \dots, 1$. The vertical axis are the eigenvalues normalized by the largest eigenvalue, which is 960.549 in this example.

为了改善这一问题, 我们需要找到抑制那些极小本征值的干扰的方法. 为此, 人们提出了很多方案 [31–33]. 这里介绍一个常见的思路, 即对

于响应函数的最优解 \mathbf{X} , 我们要求它的目标函数 (objective function) 最小化, 即

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^M \left(\frac{C_i - \sum_{j=1}^N N_{ij} \mathbf{X}_j}{\sigma_i} \right)^2 + \lambda F(\mathbf{X}), \quad (17)$$

(17) 式中 σ_i 为 C_i 点的统计误差, λ 为控制第二项大小的参数, $F(\mathbf{X})$ 是关于可能响应函数的泛函, 并且要求正定. 事实上, 如果没有第二项, 即取 $\lambda = 0$, 那么在每一个 C_i 的统计误差都一样的情况下, 目标函数的最优解即由 (16) 式给出; 当然正如前文所述, 由于极小本征值的存在, 这样的解存在剧烈的涨落. 为此我们需要引入非零的第二项以平滑这些涨落. 例如, 在文献 [34] 中, 作者提出可以取

$$F(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^{N-1} D_j^2 (\mathbf{X}_{j+1} - \mathbf{X}_j)^2 + \sum_{j=1}^N A_j^2 \mathbf{X}_j^2,$$

其中第一项和第二项分别惩罚了 \mathbf{X} 中斜率以及本身数值特别大的点, 从而抑制了 \mathbf{X} 中的涨落. 作者设计了一种自洽算法, 即获得一个可能解 \mathbf{X} , 便可以由该解的涨落性质计算出一组合理的 D_j 和 A_j 的值; 然后根据新的参数重新获得一个更优的可能解 \mathbf{X} , 从而完成一个自洽循环. 因此, 该方法被称之为自洽性约束的方法 (method of consistent constraints). 该方法的有效性在文献 [34] 中得到了仔细的检验. 因此我们可以使用该方法从测量量 $C_{\hat{K}}(\tau)$ 中获取实时间的延迟响应函数 $\text{Im}\chi_{\hat{K}}(\tau)$.

5 希格斯模的可观测性及其性质

在这一节中我们介绍一些关于希格斯模的结果. 通过上文介绍的方法, 文献 [19] 最先给出了 SF-MI QCP 附近希格斯模的观测证据. 主要的结果如图 7. 很显然, 在远离 QCP 时, 即 $U/J < 14$ 时, 系统的响应函数中看不到任何共振峰——这是系统中没有洛伦兹不变性 (粒子-空穴对称性) 的必然结果. 而在越来越靠近 QCP 时, 即 $U/J > 14$ 且 $U/J \rightarrow U_c/J = 16.7424$ 时, 系统开始涌现出洛伦兹不变性 (粒子-空穴对称性), 与此同时, 在响应函数虚部的低频率部分中出现了定义得越来越好的共振峰; 由于希格斯粒子是该系统中惟一可能的带能隙激发子, 所以此共振峰所对应的就是希格斯模的信号. 从曲线簇随着 U/J 变化的性质可以看

出, 希格斯的静止质量随着系统靠近临界点而逐渐变小, 这与之前的平均场预言一致.

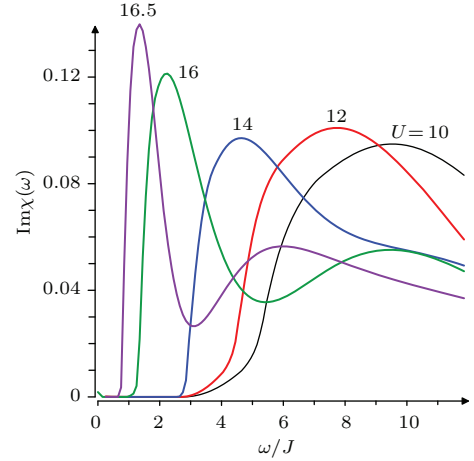


图 7 由蠕虫算法与数值解析延拓方法获得的不同参数 U/J 下动量响应函数的虚部. U/J 沿着图 2 中的轨迹 (i) 趋于 QCP; 此外, 为了更好地比较, 图中每一条曲线下的面积已做归一化; 测量温度 $T/J = 0.1$. 显然, 在低频率下希格斯模所对应的共振峰随着 U/J 越来越接近临界点 $U_c/J = 16.7424$ 而变得越来越尖锐 (本图修改自文献 [21])
Fig. 7. The imaginary part of the kinetic energy response function for different U/J (along the trajectory (i) in Fig. 2) obtained by worm algorithm and analytical continuation method. For comparison, each curve is normalized according to the area under itself. All curves are measured at temperature $T/J = 0.1$. When approaching the quantum critical point at $U_c/J = 16.7424$, a sharp Higgs resonance peak emerges at low frequencies (Adapted from Ref. [21]).

当然, 注意到图中响应函数虚部的高频部分还没有发展出标度律 (4) 式所指出的准平台现象. 因此图 7 给出的结果还不属于 QCP 附近的普适性质. 在文献 [23] 我们尝试了一些更靠近 QCP 的系统, 其结果如图 8 (a). 对于不同参数的系统, 为了更好地检验标度律 (4) 式, 我们重新将横轴变换为 $\omega/\Delta(-g)$, 而将纵轴变换为 $(\Delta(-g)/J)^{2/\nu-3} \text{Im}\chi_{\hat{K}}(\omega/\Delta)$. 从最终结果可见, 三条不同参数的响应函数虚部曲线都在高频发展出了准平台, 并且在进行重新标度后都在解析延拓的误差范围内重合在一起. 这在一方面证明了模型参数已经足够靠近 QCP, 而另一方面重合后曲线也给出了标度律中最重要的 (2 + 1) 维相对论性 $U(1)$ 临界区域的普适响应函数虚部 $\Phi_{\text{SF}}(\omega/\Delta)$, 如图 8 (b) 所示. 观察整条曲线, 我们发现, 在 $\omega_{\text{H}}/\Delta = 3.3(8)$ 附近, 响应函数虚部中出现了普适的希格斯共振峰; 并且在 $\omega/\Delta \sim 15$

附近存在着一个并不显著的突起;在更高的频率上,则发展为一个准平台. 这里给出的普适希格斯共振峰的结果与其他文献互相吻合. 例如,文献[22,24]对有效作用量(2)使用经典蒙特卡罗方法以及数值解析延拓计算得出峰的位置为 $\omega_H/\Delta = 2.1(4)$,而文献[25]则使用函数重整化方法以及数值解析计算出共振峰的位置为 $\omega_H/\Delta \simeq 2.4$. 这些不同方法的交叉验证了本文的方法与结论的可靠性. 因此,在二维的SF-MI QCP附近的超流相中,希格斯模仍然是可见的. 但在另一方面,我们可以看到共振峰的宽度和 ω_H 是同一个数量级的,因此在该系统中希格斯模并不是一个严格意义上良好定义的激

发子. 通常,人们将这样的希格斯模称之为临界定义的激发子(critical defined excitation)[17].

6 其他相中的类希格斯共振峰

事实上,上面讨论的一整套方法同样可以用来研究SF-MI QCP附近的其他相,例如莫特绝缘相. 首先,我们对动能响应函数写下临界标度律,

$$\text{Im}\chi_{\hat{K}}(\omega) \propto \Delta^{3-2/\nu}\Phi_{\text{MI}}\left(\frac{\omega}{\Delta}\right), \quad (18)$$

形式上,(18)式与超流相的标度律(4)式完全一样,但是两者的普适响应函数,即 Φ_{MI} 与 Φ_{SF} 由于临

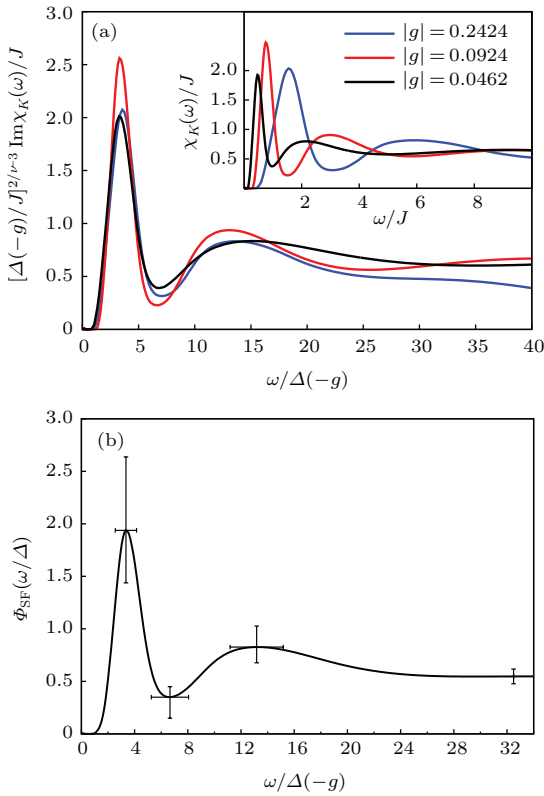


图8 (a) 超流相中,不同参数 $g = (U - U_c)/J$ 的系统的响应函数虚部在做了重新标度后,在解析延拓的误差范围内重合在一起,图中 g 的取值沿着图2中的轨迹(i)趋于QCP,内嵌图为重新标度之前的不同参数的响应函数虚部;(b)根据图(a)重新标度的结果获得的普适的响应函数虚部 $\Phi_{\text{SF}}(\omega/\Delta)$.希格斯共振峰的位置在 $\omega_H/\Delta = 3.3(8)$.曲线的误差由比较图(a)的各条曲线的重合程度获得(本图修改自文献[23])

Fig. 8. (a) Collapse of the imaginary part of response functions for different values of $g = (U - U_c)/J$ along trajectory (i) in the superfluid phase. Inset: original data for response functions; (b) the imaginary part of universal response function $\Phi_{\text{SF}}(\omega/\Delta)$ in the superfluid. The Higgs resonance peak is at $\omega_H/\Delta = 3.3(8)$. The error bars come from the spread of collapsed curves (Adapted from Ref. [23]).

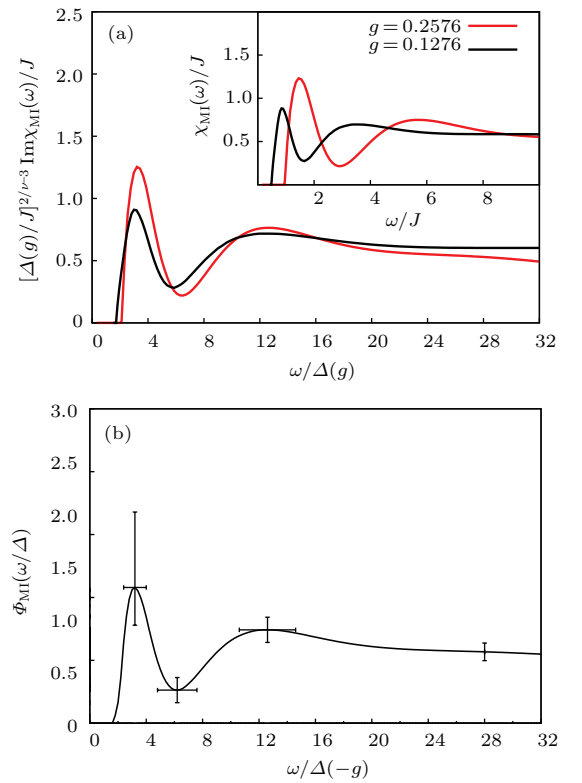


图9 (a) 莫特绝缘相中不同参数 $g = (U - U_c)/J$ 的系统的响应函数虚部在做了重新标度后,在解析延拓的误差范围内重合在一起,图中 g 的取值沿着图2中的轨迹(ii)趋于QCP,内嵌图为重新标度之前的不同参数的响应函数虚部;(b)根据左图重新标度的结果获得的普适的响应函数虚部 $\Phi_{\text{MI}}(\omega/\Delta)$,类希格斯共振峰的位置在 $\omega_H/\Delta = 3.2(8)$.曲线的误差由比较左图的各条曲线的重合程度获得(本图修改自文献[23])

Fig. 9. (a) Collapse of the imaginary part of response functions for different values of $g = (U - U_c)/J$ along trajectory (ii) in the Mott insulator phase. Inset: original data for response functions; (b) the imaginary part of universal response function $\Phi_{\text{MI}}(\omega/\Delta)$ in the Mott insulator. The Higgs-like resonance peak is at $\omega_H/\Delta = 3.2(8)$. The error bars come from the spread of collapsed curves (Adapted from Ref. [23]).

界线的存在而具有不同的形式. 对于莫特绝缘体来说, 普适响应函数虚部在低频率部分存在粒子-空穴对能隙, 其解析表达式为 $\Phi_{\text{MI}}(x) \approx 1/\log^2(4/(x-2))\theta(x-2)$ [18]; 在高频率时, $\Phi_{\text{MI}}(x \gg 1)$ 还是会发展出一个准平台(这与超流相的情况一样). 而对能隙与准平台之间的一部分普适响应函数的虚部, 人们对于其形状并不清楚. 文献 [23] 给出的结果如图 9, 注意在能隙与准平台之间出现了一个预料之外的共振峰, 它的位置在 $\omega_{\text{H}} = 3.2(8)$ 处. 与超流相中的希格斯共振峰相比, 该共振峰的峰高与峰宽之比并没有那么显著, 但与超流相中的共振峰位置基本一致. 某种意义上来说, 我们可以称之为类希格斯共振峰. 其他文献 [22, 25] 实际上也发现了类似的共振结构. 更进一步, 文献 [23] 还报道了有限温度常流体相中类似的共振结构. 但是, 对于莫特绝缘相和常流体相来说, 有效作用量中的势能项都不是墨西哥帽形状的, 平均场处理中并不会出现希格斯模. 因此, 这些共振峰是否存在尚存在争论; 如果存在的话, 它们的起源也缺少理论上的解释.

7 结 论

在前面的讨论中, 我们简单回顾了二维超流-莫特绝缘体量子相变点附近的希格斯模的发现过程. 本文中提到的系列工作主要从数值计算方面提供了一套使用平衡态系统的虚时间蒙特卡罗方法研究线性响应理论中的延迟响应函数的方法, 其中使用了路径积分表示中的蠕虫方法和数值解析延拓技术. 通过这种数值方法, 我们可以对无法用微扰技术研究的强关联系统进行研究, 实现对平衡态系统的虚时间关联函数的无系统误差的测量; 最后通过解析延拓技术计算出实时间(实频率)的响应函数.

对于希格斯模, 文中使用上述方法讨论了不同参数的系统的动能响应函数的虚部. 结合临界标度律, 我们还获得了 $(2+1)$ 维相对论性 $U(1)$ 所描述的量子临界区域的普适的响应函数. 由于普适响应函数的虚部中存在低频率的共振峰, 我们最终得出二维超流-莫特绝缘体量子相变点附近的超流相中存在可观测的希格斯模的结论. 这一结果颠覆了人们之前对 $(2+1)$ 维相对论性 $U(1)$ 理论中的希格斯模的认识. 该结果意味着, 在二维超冷原子、二维

氦-4 薄膜等凝聚态中, 如果系统涌现出了洛伦兹不变性/粒子-空穴对称性, 通过恰当的实验方案就观测到希格斯模的线性响应. 事实上, 近年来已有实验组在二维光晶格中的超冷原子系统中观测到了希格斯模存在的间接证据 [20], 但是较为遗憾的是, 由于超冷原子团被约束在一个简谐势阱中, 系统不具有平移对称性, 再加上系统温度较高等因素, 最终未能在响应函数中直接观测到希格斯共振峰. 因此, 能否在实验上实现对超流体中希格斯共振峰的直接观测仍然是一个悬而未决的重要问题.

最后我们需要强调的是本文中所讨论的方法实际上为线性响应理论框架下的量子动力学的研究提供了一种较为普适的技术. 由于很多关联函数都存在虚时间路径积分表示, 这些关联函数所对应的响应函数都有可能通过上述方法获得. 除了希格斯模相关的动能响应函数之外, 我们还可以使用蒙特卡罗与解析延拓相结合的数值技术研究凝聚态系统的量子输运性质, 如电导率(即电流响应函数)或者中子散射的微分散射截面(对应自旋响应函数)等.

感谢黄远在本文写作过程中给予的极大帮助.

参考文献

- [1] Sachdev S 2011 *Quantum Phase Transitions* (2nd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [2] Goldstone J 1961 *Nuovo. Cim.* **19** 154
- [3] Weinberg S 1996 *The quantum theory of fields*(Vol. 2) (Cambridge: Cambridge University Press)
- [4] Anderson P W 1963 *Phys. Rev.* **130** 439
- [5] Higgs P W 1964 *Phys. Rev. Lett.* **13** 508
- [6] Pekker D, Varma C M 2015 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6** 269
- [7] Sooryakumar R, Klein M V 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 660
- [8] Sooryakumar R, Klein M V 1981 *Phys. Rev. B* **23** 3213
- [9] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [10] Fisher M P A, Weichman P B, Grinstein G, Fisher D S 1989 *Phys. Rev. B* **40** 546
- [11] Capogrosso-Sansone B, Söyler S G, Prokof'ev N V, Svistunov B V 2008 *Phys. Rev. A* **77** 015602
- [12] Bissbort U, Götze S, Li Y, Heinze J, Krauser J S, Weinberg M, Becker C, Sengstock K, Hofstetter W 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 205303
- [13] Rüegg Ch, Normand B, Matsumoto M, Furrer A, McMorrow D F, Krämer K W, Güdel H U, Gvasaliya S N, Mutka H, Boehm M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 205701

- [14] Chubukov A V, Sachdev S, Ye J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 11919
- [15] Sachdev S 1999 *Phys. Rev. B* **59** 14054
- [16] Zwerger W 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 027203
- [17] Podolsky D, Auerbach A, Arovas D P 2011 *Phys. Rev. B* **84** 174522
- [18] Podolsky D, Sachdev S 2012 *Phys. Rev. B* **86** 054508
- [19] Katan Y T, Podolsky D 2015 *Phys. Rev. B* **91** 075132
- [20] Endres M, Fukuhara T, Pekker D, Cheneau M, Schauß P, Gross C, Demler E, Kuhr S, Bloch I 2012 *Nature* **487** 454
- [21] Pollet L, Prokof'ev N 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 010401
- [22] Gazit S, Podolsky D, Auerbach A 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 140401
- [23] Chen K, Liu L, Deng Y, Pollet L, Prokof'ev N 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 170403
- [24] Gazit S, Podolsky D, Auerbach A, Arovas D P 2013 *Phys. Rev. B* **88** 235108
- [25] Rancon A, Dupuis N 2014 *Phys. Rev. B* **89** 180501
- [26] Burovski E, Machta J, Prokof'ev N V, Svistunov B V 2006 *Phys. Rev. B* **74** 132502
- [27] Campostrini M, Hasenbusch M, Pelissetto A, Vicari E 2006 *Phys. Rev. B* **74** 144506
- [28] Prokof'ev N V, Svistunov B V, Tupitsyn I S 1998 *Sov. Phys.-JETP* **87** 310
- [29] Prokof'ev N V, Svistunov B V, Tupitsyn I S 1998 *Phys. Lett. A* **238** 253
- [30] Carr L D 2010 *Understanding Quantum Phase Transitions* (Boca Raton: Taylor & Francis)
- [31] Mishchenko A S, Prokof'ev N V, Sakamoto A, Svistunov B V 2000 *Phys. Rev. B* **62** 6317
- [32] Silver R N, Sivia D S, Gubernatis J E 1990 *Phys. Rev. B* **41** 2380
- [33] Jarrell M, Gubernatis J E 1996 *Phys. Rep* **269** 133
- [34] Prokof'ev N V, Svistunov B V 2013 *Jetp Lett.* **97** 649

SPECIAL ISSUE—Recent developments and applications of computational physics

Higgs mode near superfluid-to-Mott-insulator transition studied by the quantum Monte Carlo method*

Chen Kun[†] Deng You-Jin[‡]

(National Laboratory for Physical Sciences at Microscale and Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(University of Massachusetts at Amherst, MA 01002, USA)

(Received 17 August 2015; revised manuscript received 11 September 2015)

Abstract

In addition to the phonon (massless Goldstone mode) in Galilean invariant superfluid, there is another type of mode known as the Higgs amplitude mode in superfluid with emergent Lorentz invariance. In two dimensions, due to the strong decay into phonons, whether this Higgs mode is a detectable excitation with sharp linear response has been controversial for decades. Recent progress gives a positive answer to this question. Here, we review a series of numerical studies of the linear response of a two-dimensional Lorentz invariant superfluid near the superfluid-Mott insulator quantum critical point (SF-MI QCP). Particularly, we introduce a numerical procedure to unbiasedly calculate the linear response properties of strongly correlated systems. The numerical procedure contains two crucial steps, i.e., one is to use a highly efficient quantum Monte Carlo method, the worm algorithm in the imaginary-time path-integral representation, to calculate the imaginary time correlation functions for the system in equilibrium; and then, the other is, based on the imaginary time correlation functions, to use the numerical analytical continuation method for obtaining the real-time (real-frequency) linear response function. Applying this numerical procedure to the two-dimensional Bose Hubbard model near SF-MI QCP, it is found that despite strong damping, the Higgs boson survives as a prominent resonance peak in the kinetic energy response function. Further investigations also suggest a similar but less prominent resonance peak near SF-MI QCP on the MI side, and even on the normal liquid side. Since SF-MI quantum criticality can be realized by ultracold atoms in optical lattice, the Higgs resonance peak can be directly observed in experiment. In addition, we point out that the same Higgs resonance peak exists in all quantum critical systems with the same universality, namely $(2 + 1)$ -dimensional relativistic $U(1)$ criticality, as SF-MI QCP.

Keywords: linear response, quantum criticality, Higgs mode, Monte Carlo

PACS: 02.70.Ss, 03.75.Kk, 14.80.Bn, 67.85.-d

DOI: 10.7498/aps.64.180201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11275185).

† Corresponding author. E-mail: chenkun@mail.ustc.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: yjdeng@ustc.edu.cn