

基于 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态张量网络算法提取Luttinger液体参数 K

王秀娟 李生好

Extracting Luttinger liquid parameter K based on $U(1)$ symmetric infinite matrix product states

Wang Xiu-Juan Li Sheng-Hao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 160201 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190379

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190379>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一维自旋1键交替XXZ链中的量子纠缠和临界指数

Quantum entanglement and critical exponents in one-dimensional spin-1 bond-alternating XXZ chains

物理学报. 2017, 66(12): 120301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.120301>

基于残差矩阵估计的稀疏表示目标跟踪算法

Visual tracking based on the estimation of representation residual matrix

物理学报. 2016, 65(19): 194201 <https://doi.org/10.7498/aps.65.194201>

基于Mueller矩阵成像椭偏仪的纳米结构几何参数大面积测量

Large-scale nanostructure metrology using Mueller matrix imaging ellipsometry

物理学报. 2016, 65(7): 070703 <https://doi.org/10.7498/aps.65.070703>

磁电耦合超材料本构矩阵获取方法的研究

A method of retrieving the constitutive parameter matrix of magnetoelectric coupling metamaterial

物理学报. 2015, 64(4): 044101 <https://doi.org/10.7498/aps.64.044101>

基于联合矩阵分解的节点多属性网络社团检测

Community detection based on joint matrix factorization in networks with node attributes

物理学报. 2015, 64(21): 218901 <https://doi.org/10.7498/aps.64.218901>

半无限深势阱中自旋相关玻色-爱因斯坦凝聚体的量子反射与干涉

Quantum reflection and interference of spin-dependent Bose-Einstein condensates in semi-infinite potential wells

物理学报. 2017, 66(23): 230301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.230301>

基于 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态张量网络算法 提取 Luttinger 液体参数 K *

王秀娟¹⁾ 李生好^{2)3)†}

1) (重庆大学, 输配电装备及系统安全与新技术国家重点实验室, 重庆 400044)

2) (重庆工程职业技术学院, 重庆 400037)

3) (重庆大学, 现代物理中心, 重庆 400044)

(2019年3月17日收到; 2019年5月31日收到修改稿)

本文数值研究了自旋 $S = 1/2, 1, 2$ 的各向异性量子 XXZD 模型的 Luttinger 液体参数 K . 首先, 利用 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态算法 (iMPS) 得到在 Luttinger 液体相中的基态波函数. 通过二分量子涨落 F 和有限纠缠标度指数 κ 的关系可以提取出 Luttinger 液体参数 K . 对于自旋 $S = 1/2, D = 0$ 的量子 XXZD 模型, 本文利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的算法得到的数值结果与精确解符合得很好. 在参数 $D \leq -2$ 的区域, 自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型的哈密顿量可以被映射到一个自旋 $S = 1/2$ 的有效 XXZ 模型, 本文计算了在这个区域内的 Luttinger 液体参数 K 与精确解基本是一致的, 相对误差小于 1%. 此外, 在参数 $\Delta = -0.5, D = 0$ 处, 本文数值计算的 Luttinger 液体参数与密度矩阵重整化群 (DMRG) 的结果也是一致的. 这些研究结果表明: 当系统具有 $U(1)$ 对称性时, 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法可以提取无能隙相中的 Luttinger 液体参数. 本文利用此方法还研究了自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型在其他参数下的 Luttinger 液体参数, 以及自旋 $S = 2$ 的 XXZD 模型的 Luttinger 液体参数.

关键词: 无限矩阵乘积态, Luttinger 液体参数, 二分量子涨落

PACS: 02.10.Yn, 71.10.Pm, 42.50.Lc

DOI: 10.7498/aps.68.20190379

1 引言

量子相变^[1]是发生在绝对零度由量子涨落所驱动的一种相变. 量子相变现象为我们展示了一个丰富的量子世界, 目前仍然是凝聚态物理研究领域极为热衷的研究对象. 研究量子强关联多体系统的主要数值方法有密度矩阵重整化群的方法 (DMRG)^[2]、量子蒙特卡罗方法^[3]以及张量网络态算法^[4-14]. DMRG 的方法处理一维系统很是成功, 但在处理二维晶格系统时还是存在一定的限制. 量

子蒙特卡罗在处理费米子系统以及带有阻挫的系统时会遇到一个负号问题. 而张量网络则不存在这些问题, 它既可以处理一维系统也可处理高维系统, 而且被认为是目前解决复杂的带阻挫的量子自旋系统的一种强有力的数值模拟方法. 把 $U(1)$ 对称性应用到张量网络态算法中大大优化了程序, 提高了计算效率, 而且还可以得到具有很大纠缠的系统基态.

纠缠熵是一个量子系统中非局域关联的测量, 在研究黑洞、量子计算等问题中起着非常重要的作用. 在一维系统中, 共形场论和精确对角化已经证

* 国家自然科学基金 (批准号: 11104362)、重庆市基础科学与前沿技术研究专项 (批准号: cstc2018jcyjAX0812)、重庆市教委科学技术研究项目 (批准号: KJQN201801212) 和陕西省自然科学基金 (批准号: 2019JM-017) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: shanshui510@163.com

实了对于一个临界系统, 纠缠熵与系统尺寸存在一个对数函数的标度关系^[15,16]. 实际上, 对于一个具有粒子数或自旋守恒的一维临界系统, 在一个共性不变的子系统中, 涨落的行为类似于纠缠熵, 也是系统尺寸的函数并且是对数发散的. 其系数就是 Luttinger 液体参数 K , K 可以用来描述很多一维系统的低能特征.

本文研究的目的是利用 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态算法 (iMPS) 提取自旋 $S = 1/2, 1, 2$ 的各向异性量子 XXZD 模型的 Luttinger 液体参数 K . 二分涨落在临界系统中与系统尺寸存在一个对数函数的标度关系, 通过对二分涨落 F 的拟合并结合有限纠缠标度的临界指数 κ , 可以提取出无能隙相中的 Luttinger 液体参数 K . 自旋 $S = 1/2, D = 0$ 的量子 XXZD 模型在临界相中 Luttinger 液体参数 K 是精确可解的^[17] $K = (\pi/2)/[\pi - \arccos(\Delta)]$, 其中 Δ 是各向异性参数. 本文利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法提取出的 Luttinger 液体参数 K 与精确 Luttinger 液体参数 K 的值符合得很好, 相对误差小于 4%. 众所周知, 自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型可以被映射到一个自旋 $S = 1/2$ 的有效 XXZ 模型在参数 $D \leq -2$ 的区域内. 文中计算了在这个区域内参数 ($\Delta = -0.05, D = -5$) 的 Luttinger 液体参数 $K = 0.991$, 精确的 Luttinger 液体参数 $K = 1$, 其相对误差小于 1%. 在参考文献^[18] 中 DMRG 在这一点上给出的数值结果是 $K = 0.9976 \pm 0.0004$. 此外, 在参数点 ($\Delta = -0.5, D = 0$) 处, 文献^[18] 中, DMRG 给出的 Luttinger 液体参数 $K = 3.086 \pm 0.002$. 在这个参数点上, 本文方法给出的 Luttinger 液体参数 $K = 3.1275$ 与 DMRG 的结果相对误差小于 2%. 研究表明: 当系统具有 $U(1)$ 对称性时, 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法可以提取无能隙相中的 Luttinger 液体参数. 本文研究的内容安排如下: 第 2 部分介绍 $U(1)$ 对称的 iMPS 算法^[13,14]; 第 3 部详细介绍如何提取量子 XXZD 模型在临界区的 Luttinger 液体参数 K ; 最后部分对本文主要工作进行总结.

2 $U(1)$ 对称的 iMPS 算法

目前, 张量网络算法是研究量子多体系统的一种强有力的数值计算方法. 本文工作在无限矩阵乘积态 (iMPS) 算法的基础上把 $U(1)$ 对称性加到算

法中, 得到优化的张量网络算法, 进一步提高了计算精度, 从而得到更高精度的系统基态. 下面就以平移两个晶格不变的结构为例说明如何把 $U(1)$ 对称性应用到 iMPS 算法中并实现波函数部分的更新, 从而得到量子自旋系统的基态波函数^[13,14]. 对于具有平移不变的一维晶格系统, 其系统基态波函数可以用几个三阶张量和二阶张量刻画的 iMPS 表示. 系统具有 $U(1)$ 对称性也就意味着系统的粒子数是守恒的, 用 n 来标记, 如图 1 所示. 图 1(a) 是组成 iMPS 表示的一个三指标张量 Γ (圆圈表示) 和奇异值矩阵 λ (菱形表示), 以及标记每个键上的粒子数 n . 由于所考虑的系统是平移两个晶格不变的, 因此可以用这四个张量 $\lambda^{[0]}$, $\lambda^{[1]}$, $\Gamma^{[0]}$ 和 $\Gamma^{[1]}$ 来表示系统的基态波函数, 如图 1(b) 所示, 其中, n_l , n_r 和 n_s 分别标记每个键上的粒子数. 每个键上粒子数 n 的符号是“ \pm ”, 图中用输入或输出的箭头表示. 每个格点张量是 $U(1)$ 不变的, 也就是说保证每个格点上的张量输入的粒子数之和等于输出的粒子数总和. 图 1(b) 中的四个张量就是我们选择更新的最小的一个原包结构, 只要更新了最小的原包结构, 整个 iMPS 链就被全部更新.

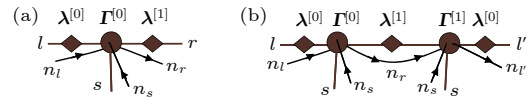


图 1 (i) 三指标张量 Γ , 奇异值矩阵 λ 和粒子数 n ; (ii) 具有 $U(1)$ 对称的 iMPS 表示

Fig. 1. (a) Three index tensor Γ , singular value matrix λ and particle number n ; (b) An $U(1)$ symmetric iMPS representation.

具体的更新过程如图 2 所示, 由以下几个步骤组成: 图 2(a) 两点 U 门作用于具有 $U(1)$ 对称的 iMPS 态上; 图 2(b) 缩并张量以及两点门 U , 从而得到一个新的张量 Θ ; 图 2(c) 对张量 Θ 进行奇异值分解, 得到新的张量 X, Y 和 $\tilde{\lambda}^B$; 图 2(d) 插入逆矩阵 λ^A , 从而还原原来的原胞结构; 图 2(e) 得到更新的张量 \tilde{I}^A, \tilde{I}^B 和 $\tilde{\lambda}^B$ 以及更新过的粒子数 \tilde{n}_r . 值得注意的是它与之前不加 $U(1)$ 对称性的 iMPS 算法的区别在于更新张量的同时, 也要一起更新粒子数 n . 不断地交替作用两点门, 重复以上步骤, 直到系统的基态能量收敛, 便可以得到具有 $U(1)$ 对称的 iMPS 表示的系统基态波函数. 有了波函数之后, 便可以计算想要研究的一些物理量.

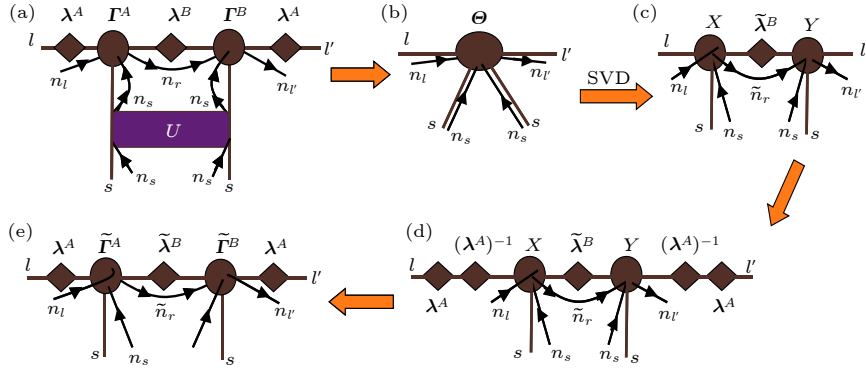


图 2 更新具有 $U(1)$ 对称的 MPS 的过程 (a) 把 U 门作用在具有 $U(1)$ 对称的 MPS 上; (b) 吸收 U 门缩并 (a) 中的张量使之成为一个两指标张量 Θ ; (c) 对张量 Θ 进行奇异值分解 (SVD), 得到新的张量 X , Y 和 $\tilde{\lambda}_B$, 同时得到新的粒子数 \tilde{n}_r ; (d) 插入逆矩阵, 还原原来的原胞结构; (e) 得到更新的张量 $\tilde{\Gamma}^A$, $\tilde{\Gamma}^B$ 和 $\tilde{\lambda}^B$ 及粒子数 \tilde{n}_r .

Fig. 2. The process of update the $U(1)$ symmetric MPS (a) applied gate U on the $U(1)$ symmetric MPS, then contract the tensor network (a) into a single tensor Θ . We compute the singular value decomposition of tensor Θ , and get the new tensor X , Y and $\tilde{\lambda}_B$ and particle number \tilde{n}_r as in (c). (d) Insert inverse matrix and restore the original tensor structure, we obtain the new tensor $\tilde{\Gamma}^A$, $\tilde{\Gamma}^B$, $\tilde{\lambda}^B$ and particle number \tilde{n}_r as in (e).

为了验证这个算法, 本文研究了不同自旋的量子 XXZD 模型. 文中只考虑最近邻两个格点之间有相互作用, 其系统哈密顿量写成:

$$H = \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + D(S_i^z)^2, \quad (1)$$

其中 S_i^α ($\alpha = x, y, z$) 是第 i 个格点上的自旋矩阵, Δ 和 D 分别是交换和单粒子各向异性参数. 目前, 自旋 $S = 1/2, 1$ 的各向异性量子 XXZD 模型已被广泛研究, 在给定参数下该模型具有丰富的基态相图.

3 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 算法提取 Luttinger 液体参数

本节中讨论如何利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 算法提取临界区内的 Luttinger 液体参数 K . 根据 iMPS 表示, 一个临界的基态, 关联长度和系统的截断维数满足如下的标度关系 [19,20]

$$\xi \sim a\chi^\kappa, \quad (2)$$

其中 κ 是有限纠缠标度指数. 关联长度被定义为 $\xi(\chi) = 1/\log_2\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right)$, 其中 λ_1 和 λ_2 分别是转移矩阵的第一大和第二大特征值. 对于一个具有 $U(1)$ 对称的系统, 在临界区另外一个有用的量被参数化就是 Luttinger 液体参数 K . 在量子多体系统中利用粒子数守恒二分量子涨落可以被定义为:

$$F = \sum_n n^2 \sum_i (\lambda_i^n)^2 - \sum_n [n \sum_i (\lambda_i^n)^2]^2, \quad (3)$$

其中 n 是粒子数, λ 是二分系统的斯密特分解系数. 二分量子涨落类似于纠缠熵, 在临界处与系统尺寸 χ 满足一个对数函数的标度关系 [15,16]

$$F = \frac{K\kappa}{2\pi^2} \log(\chi) + \text{const}, \quad (4)$$

本文首先利用 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态算法 (iMPS) 得到在 Luttinger 液体相中的基态波函数. 然后通过二分量子涨落 F 和有限纠缠标度指数 κ 的关系提取出 Luttinger 液体参数 K .

3.1 自旋 $S=1/2$ 的 XXZD 模型

首先讨论 $D = 0$, 自旋 $S = 1/2$ 的情况, 此时, (1) 式中系统的哈密顿量 H 对应着量子 XXZ 模型, 这个模型的基态相图已被广泛地研究. 自旋 $S = 1/2$ 的 XXZ 模型是精确可解的 [21]. XXZ 模型在各向异性参数 $\Delta = -1$ 处发生了一个量子相变, 其对应着各向异性铁磁海森堡模型; 在各向异性反铁磁点 $\Delta = 1$ 处, 系统发生的是一个 BKT 相变. 当各向异性参数 Δ 在 $[-1, 1]$ 的区域, 系统处于无能隙的 XY 液体相中, 此时, 系统的 Luttinger 液体参数 K 是精确可解的 [17] $K = (\pi/2)/[\pi - \arccos(\Delta)]$.

固定各向异性参数 $D = 0$, 改变各向异性参数 Δ 在 $[0, 1]$ 的范围内, 如图 3 所示. 如图 3(左) 所示, 通过执行拟合函数 $\xi \sim a\chi^\kappa$, 分别得到不同参数 Δ 对应的有限纠缠标度指数 κ : 其中 (a) $a = 1.11$, $\kappa = 1.359$, 参数 $\Delta = 0$; (b) $a = 1.206$, $\kappa = 1.316$, 参数 $\Delta = 0.25$; (c) $a = 0.9428$, $\kappa = 1.331$, 参数

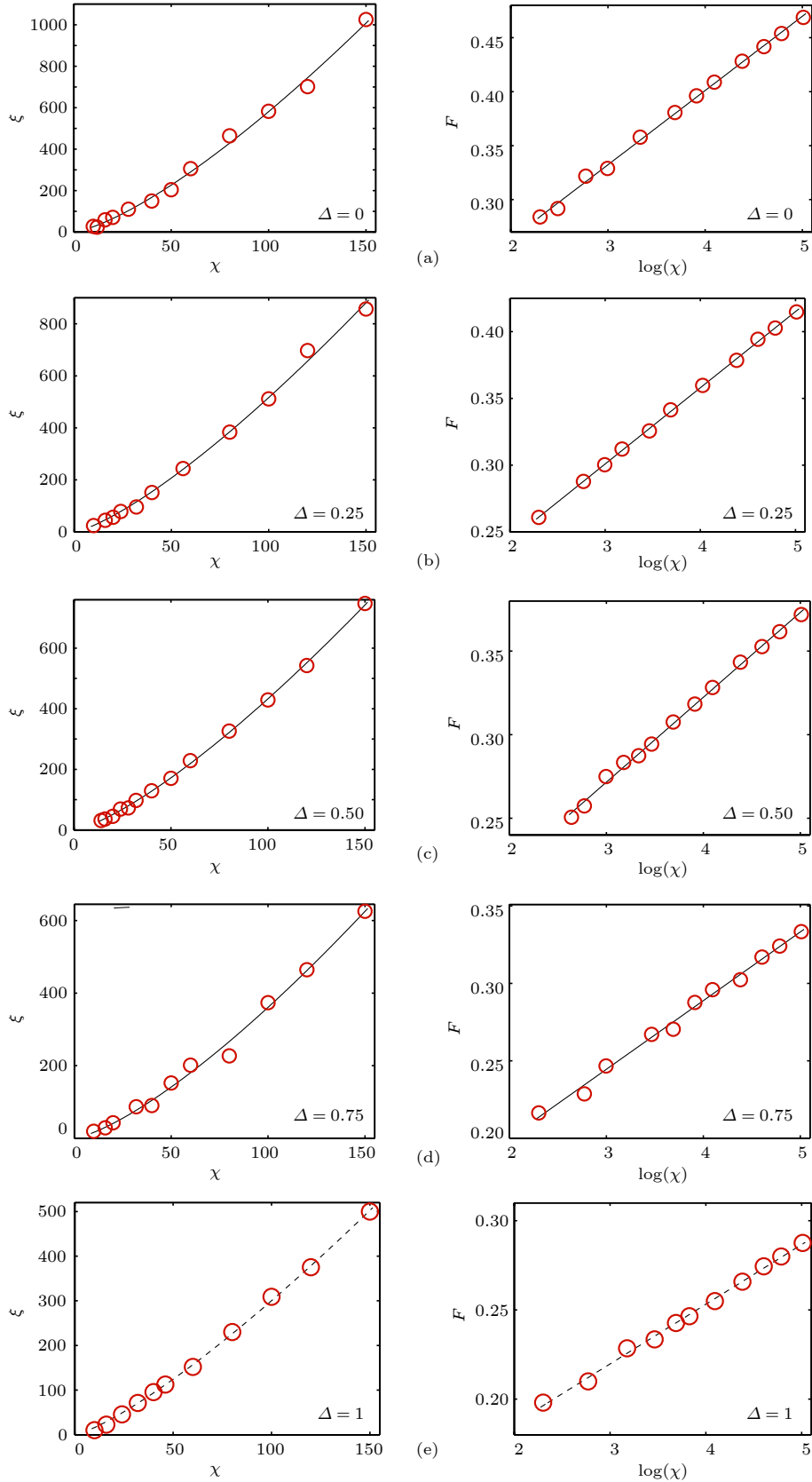


图 3 在不同控制参量条件下, 自旋 $S = 1/2$ 的 XXZD 模型的关联长度 ξ 和涨落 F 是截断维数 χ 的函数. 其中, 参数 $D = 0$
 Fig. 3. Correlation length ξ and fluctuation F of spin $S = 1/2$ XXZD model as a function of the truncation dimension χ for various parameters Δ . Here, fixed parameter $D = 0$.

$\Delta = 0.5$; (d) $a = 0.6996$, $\kappa = 1.356$, 参数 $\Delta = 0.75$; (e) $a = 0.863$, $\kappa = 1.271$, 参数 $\Delta = 1$. 然后, 根据粒子数守恒的二分涨落的定义计算出涨落的大小, 再通过涨落与系统尺寸之间存在一个对数函数的标度关系执行拟合, 如图 3 所示, 拟合函数 $F = \frac{K\kappa}{2\pi^2} \log(\chi) + b$. 得到如下的拟合结果: (a) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.06878$, $b = 0.1259$, 参数 $\Delta = 0$; (b) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.05707$, $b = 0.1296$, 参数 $\Delta = 0.25$; (c) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.05077$, $b = 0.1193$, 参数 $\Delta = 0.5$; (d) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.04436$, $b = 0.1114$, 参数 $\Delta = 0.75$; (e) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.03347$, $b = 0.1193$, 参数 $\Delta = 1$. 由此, 可以数值提取出自旋 $S = 1/2$ 的 XXZ 模型在临界区内的 Luttinger 液体参数 K , 如表 1 所示. 同时, 表 1 也给出了 Luttinger 液体参数 K 的精确解以及相对误差.

表 1 自旋 $S = 1/2$ 的 XXZD 模型在临界区的 Luttinger 液体参数 K , 其中参数 $D = 0$

Table 1. Estimates for Luttinger liquid parameter K in the critical phase of spin $S = 1/2$ XXZD model with the parameter $D = 0$.

Δ	0	0.25	0.5	0.75	1
K[精确]	1.0	0.8614...	0.75	0.6493...	0.5
K[数值]	0.999	0.856	0.7529	0.6457	0.5198
相对误差	0.001	0.0063	0.0039	0.0053	0.0396

从表 1 可以看出, 我们的计算结果和精确解符合得很好, 在参数 $\Delta = 1$ 时, 本文得到的结果与精确解的相对误差小于 4%, 其他参数点得到的结果与精确解相比相对误差均小于 1%, 这表明用 $U(1)$ 对称的 iMPS 算法提取 Luttinger 液体参数 K 是可行的.

3.2 自旋 $S=1$ 的 XXZD 模型

为了检验这个提取 Luttinger 液体参数方法的可靠性, 研究了自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型. 自旋 $S = 1$ 的 XXZ 模型加入单粒子各向异性参数 D 后, 这个模型呈现出了一个丰富的相图 [22]. 其基态相图包含 Haldane 相、large- D 相、两个 XY ($XY1$, $XY2$ 相)、铁磁相和 Neel 相. 每两个相之间发生了各种类型的相变, 如在 Haldane 和 large- D 相之间发生的是从有能隙到有能隙的高斯相变; XY 相和 Haldane 相、large- D 相之间发生的是有能隙到无能隙的 BKT 相变等.

在 $XY2$ 相中, 当参数 $D \leq -2$ 时, 自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型可被映射到一个有效的 $1/2$ 的 XXZ 自旋链:

$$H^{\text{eff}} = \sum_i (\tilde{S}_i^x \tilde{S}_{i+1}^x + \tilde{S}_i^y \tilde{S}_{i+1}^y + \tilde{\Delta} \tilde{S}_i^z \tilde{S}_{i+1}^z), \quad (5)$$

其中 $\tilde{\Delta} = 4\Delta|D| + 1$, \tilde{S}_i 是自旋- $1/2$ 的算符. 我们在 $XY2$ 相中选取一点 ($\Delta = -0.05, D = -5$), 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的算法提取出了 Luttinger 液体参数 $K = 0.991$. 通过关系式 $\tilde{\Delta} = 4\Delta|D| + 1$, 这个参数点可以被映射到自旋 $1/2$ 的精确可解的 XXZ 模型, 其对应的参数点就是 $\tilde{\Delta} = 0$, 该点处的 Luttinger 液体参数是 $K = 1$. 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法得到的 Luttinger 液体参数 K 与精确解的相对误差是 0.1%. 在参考文献 [18] 中 DMRG 在这一点上给出的数值结果是 $K = 0.9976 \pm 0.0004$, 我们的计算结果与 DMRG 数值结果的相对误差小于 1%. 通过与精确解以及 DMRG 数值结果的比较, 表明我们的计算结果是可靠的.

此外, 利用 $U(1)$ 对称的算法也研究了其他一些参数点的 Luttinger 液体参数 K . 图 4 给出了自旋为 1 的 XXZD 模型的关联长度和二分涨落分别对不同的参数 D , 它们是截断维数 χ 的函数. 在这里, 固定参数 $\Delta = -0.5$, 改变参数 D 在 $[-0.3, 0.6]$ 范围内, 也即是从 $XY2$ 相到 $XY1$ 相变化. 如图 4(左) 所示, 我们分别执行拟合 $\xi \sim a\chi^\kappa$ 对不同的参数 D , 得到 κ 的拟合结果如下: (a) $a = 1.173$, $\kappa = 1.273$, 参数 $D = -0.3$; (b) $a = 0.9994$, $\kappa = 1.321$, 参数 $D = 0$; (c) $a = 1.106$, $\kappa = 1.291$, 参数 $D = 0.3$; (d) $a = 1.095$, $\kappa = 1.287$, 参数 $D = 0.5$; (e) $a = 1.075$, $\kappa = 1.287$, 参数 $D = 0.6$. 图 4(右) 所示为分别执行拟合 $F \sim \frac{K\kappa}{2\pi^2} \log(\chi) + b$ 对不同的参数 D , 从而得到 $\frac{K\kappa}{2\pi^2}$ 的拟合结果: (a) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.2171$, $b = 0.2609$, 参数 $D = -0.3$; (b) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.2093$, $b = 0.1787$, 参数 $D = 0$; (c) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1755$, $b = 0.207$, 参数 $D = 0.3$; (d) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1573$, $b = 0.2078$, 参数 $D = 0.5$; (e) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1483$, $b = 0.199$, 参数 $D = 0.6$. 结合上面的拟合结果可以得到不同控制参量 D 对应的 Luttinger 液体参数 K , 如表 2 所示.

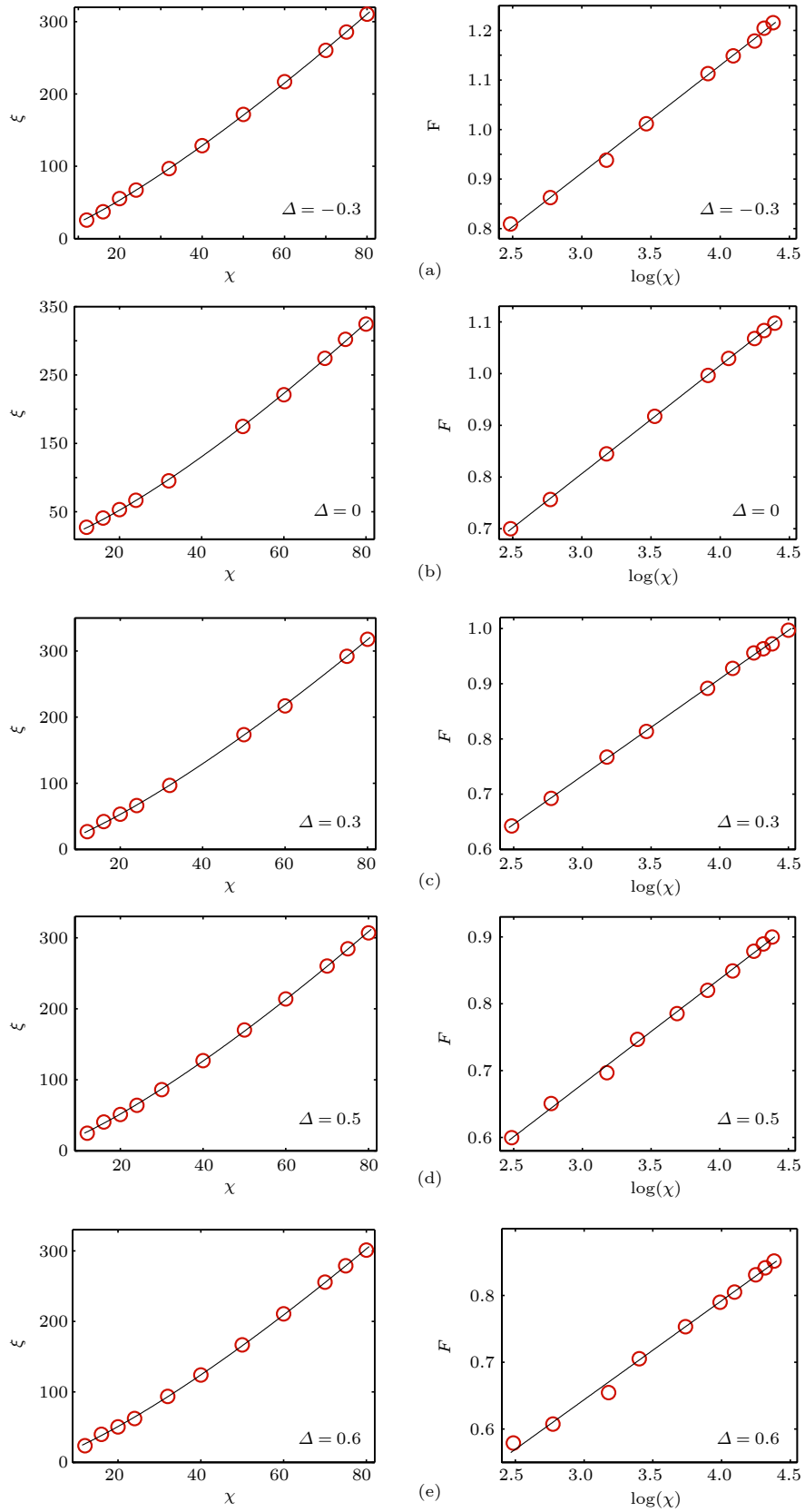


图 4 在不同控制参量条件下, 自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型的关联长度 ξ 和涨落 F 是截断维数 χ 的函数. 其中, 各向异性参数 $\Delta = -0.5$

Fig. 4. Correlation length ξ and fluctuation F of spin $S = 1$ XXZD model as a function of the truncation dimension χ for various parameters D . Here, fixed anisotropic parameter $\Delta = -0.5$.

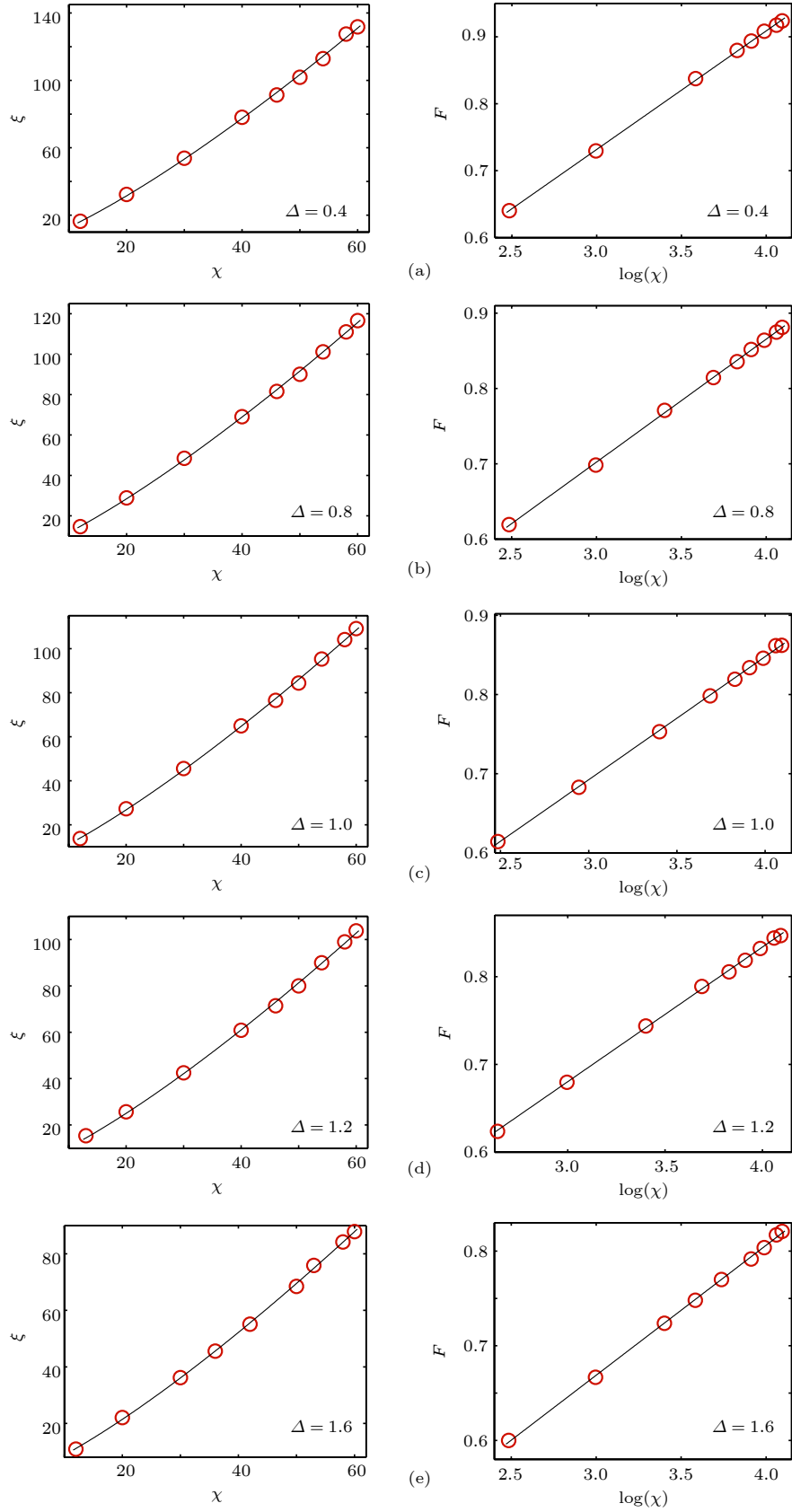


图 5 在不同控制参量条件下, 自旋 $S = 2$ 的 XXZD 模型的关联长度 ξ 和涨落 F 是截断维数 χ 的函数. 其中, 参数 $D = 1.5$
 Fig. 5. Correlation length ξ and fluctuation F of spin $S = 2$ XXZD model as a function of the truncation dimension χ for various parameters Δ . Here, fixed parameter $D = 1.5$.

表 2 自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型在临界区的 Luttinger 液体参数 K , 固定参数 $\Delta = -0.5$

Table 2. Estimates for Luttinger liquid parameter K in the critical phase of spin $S = 1$ XXZD model with the parameter $\Delta = -0.5$.

D	-0.3	0	0.3	0.5	0.6
K [数值]	3.3679	3.1275	2.6834	2.4126	2.2745

表 2 给出的结果是在参数 $D > -2$ 的区域, 这个区域内的参数点不能够被映射到自旋 $1/2$ 的 XXZ 模型, 其对应的 Luttinger 液体参数 K 也就没有精确解. 文献 [18] 中, DMRG 给出的 Luttinger 液体参数 $K = 3.086 \pm 0.002$ 在参数点 ($\Delta = -0.5$, $D = 0$) 处, 其中 DMRG 方法保存了 400 个态. 在这个参数点上, 表 2 给出的 Luttinger 液体参数 K 的结果与 DMRG 数值结果的相对误差小于 2%. 通过对参数点 ($\Delta = -0.05$, $D = -5$) 和 ($\Delta = -0.5$, $D = 0$), 得到的数值结果分别与精确解和 DMRG 数值结果进行对比, 相对误差均小于 2%. 从而表明利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法提取自旋 $S = 1$ 的 XXZD 模型在其他参数点处的 Luttinger 液体参数 K 的结果也是可靠的. 此外, 由表 2 也可以看出在此临界区内随着参数 D 的增加, Luttinger 液体参数 K 是逐渐减小的.

3.3 自旋 $S=2$ 的 XXZD 模型

此外, 我们还研究了 $S = 2$ 的量子 XXZD 自旋链. 对于自旋 $S = 2$ 的量子 XXZD 模型, 目前还很少被研究, 整个参数下的基态相图还不是很清楚. 文献 [23] 基于 DMRG 的算法给出了 $\Delta \geq 0$ 和 $D \geq 0$ 参数下的基态相图. 其基态相图包括: XY 相、even-Haldane 相和反铁磁相. 图 5 分别给出了不同控制参量下自旋为 2 的 XXZD 模型的关联长度和二分之一涨落, 它们是截断维数 χ 的函数. 其中固定参数 $D = 1.5$, 在 XY 相中改变参数 Δ . 图 5(左) 给出了关联长度与截断维数 χ 之间的关系. 根据关联函数的拟合方程 $\xi \sim a\chi^\kappa$, 得到不同参数 Δ 对应的有限纠缠标度指数 κ 的数值结果分别是: (a) $a = 0.6438$, $\kappa = 1.298$, 参数 $\Delta = 0.4$; (b) $a = 0.6199$, $\kappa = 1.277$, 参数 $\Delta = 0.8$; (c) $a = 0.5916$, $\kappa = 1.273$, 参数 $\Delta = 1$; (d) $a = 0.5316$, $\kappa = 1.286$, 参数 $\Delta = 1.2$; (e) $a = 0.458$, $\kappa = 1.284$, 参数 $\Delta = 1.6$. 图 5(右) 分别给出不同控制参量 Δ 对应的二分之一涨落与截断

维数之间的关系. 二分之一涨落类似于纠缠熵在临界处与截断维数有一个对数函数的标度关系 $F \sim \frac{K\kappa}{2\pi^2} \log(\chi) + b$. 通过这个标度关系得到数值拟合结果是: (a) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1771$, $b = 0.2$, 参数 $\Delta = 0.4$; (b) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1632$, $b = 0.2126$, 参数 $\Delta = 0.8$; (c) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1554$, $b = 0.2261$, 参数 $\Delta = 1$; (d) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1534$, $b = 0.2202$, 参数 $\Delta = 1.2$; (e) $K\kappa/(2\pi^2) = 0.1373$, $b = 0.2571$, 参数 $\Delta = 1.6$. 由此, 得到自旋 $S = 2$ 的 XXZD 模型在 XY 相中的 Luttinger 液体参数 K , 如表 3 所示.

表 3 自旋 $S = 2$ 的 XXZD 模型在临界区的 Luttinger 液体参数 K , 固定参数 $D = 1.5$

Table 3. Estimates for Luttinger liquid parameter K in the critical phase of spin $S = 2$ XXZD model with the parameter $D = 1.5$.

Δ	0.4	0.8	1	1.2	1.6
K [数值]	1.652	2.5227	2.4096	2.3546	2.1107

前面已利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法提取了自旋 $S = 1/2$ 和 $S = 1$ 的 XXZD 模型的 Luttinger 液体参数 K , 并且将所得结果分别与精确结果和现有 DMRG 结果进行了比较, 其相对误差均小于 4%. 这充分说明了利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法提取 Luttinger 液体参数 K 是可行的. 因此, 利用此方法提取出的 Luttinger 液体参数 K 如表 3 所示的结果是可靠的.

本文对各向异性量子 XXZD 模型的研究表明: 当系统具有 $U(1)$ 对称性时, 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法可以准确提取出无能隙相中的 Luttinger 液体参数 K .

4 总 结

本文将 $U(1)$ 对称性应用到 iMPS 的算法中, 优化了之前的张量网络算法, 提高了计算效率, 并根据粒子数守恒定义了二分量量子涨落. 二分量量子涨落在临界点处有类似于纠缠熵的标度行为, 与系统尺寸有对数函数的标度关系, 其拟合系数是 Luttinger 液体参数 K 与有限纠缠标度指数 κ 的乘积. 为了提取 Luttinger 液体参数 K 我们分别研究

了 $S = 1/2, 1, 2$ 的量子 XXZD 自旋链. 首先, 利用 $U(1)$ 对称的无限矩阵乘积态算法 (iMPS) 得到在 Luttinger 液体相中的基态波函数. 其次, 利用关联长度与截断维数的关系以及二分涨落与截断维数的关系提取出了各向异性 XXZD 自旋链在临界区域内的 Luttinger 液体参数 K . 对于自旋 $S = 1/2$ 的情况, 固定参数 $D = 0$, 此时考虑的系统对应着 XXZ 模型. 在 XY 相中 Luttinger 液体参数是精确可解的, 提取出的数值结果与精确解符合得很好, 相对误差小于 4%. 对于自旋 $S = 1$ 的情况, 量子 XXZD 模型具有一个丰富的基态相图. XY 相包含 XY1 和 XY2 相, 在 XY2 相中, 当 $D \leq -2$ 时, 这个模型可以被映射到一个自旋 $1/2$ 的 XXZ 自旋链. 本文计算了参数点 ($\Delta = -0.05, D = -5$) 处的 Luttinger 液体参数 $K = 0.991$. 把这个点映射到自旋 $1/2$ 的 XXZ 模型其对应的精确 Luttinger 液体参数 $K = 1$, 而 DMRG 方法给出的结果是 $K = 0.9976 \pm 0.0004$. 在这个参数点上计算的结果分别与精确解和 DMRG 的结果进行了比较, 相对误差均小于 1%. 在参数点 ($\Delta = -0.5, D = 0$) 处, 得到的结果和 DMRG 的结果相比相对误差小于 2%. 此外, 固定参数 $\Delta = -0.5$, 改变参数 D , 计算了在 XY 相中的其他一些点的 Luttinger 液体参数 K . 最后, 还计算了自旋为 $S = 2$ 的量子 XXZD 模型在一定参数下对应的 Luttinger 液体参数 K . 研究表明: 当系统具有 $U(1)$ 对称性时, 利用 $U(1)$ 对称的 iMPS 的方法可以提取无能隙相中的 Luttinger 液体参数 K , 这为提取 Luttinger 液体参数 K 提供一种新的思路和研究方法.

参考文献

- [1] Sachdev S 1999 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge: Cambridge University)pp3—5
- [2] White S R 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2863
- [3] Landau D P, Binder K 2011 *A Guide to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge: Cambridge University)pp70-73
- [4] Evenbly G, Vidal G 2009 *Phys. Rev. B* **79** 144108.
- [5] Jordan J, Orus R, Vidal G, Verstraete F, Cirac J I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 250602
- [6] Singh S, Zhou H Q, Vidal G 2010 *New J. Phys.* **12** 033029
- [7] Jiang H C, Weng Z Y, Xiang T 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 090603
- [8] Czarnik P, Dziarmaga J 2015 *Phys. Rev. B* **92** 035120.
- [9] Li W, Ran S J, Gong S S, Zhao Y, Xi B, Ye F, Su G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 127202
- [10] Chen B B, Chen L, Chen Z Y, Li W, Weichselbaum A 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031082
- [11] Corboz P, Czarnik P, Kapteijns G, Tagliacozzo L 2018 *Phys. Rev. X* **8** 031031
- [12] Singh S, Pfeifer R N C, Vidal G 2010 *Phys. Rev. A* **82** 050301
- [13] Haghshenas R, Sheng D N 2017 arXiv: 1711.07584v1 [cond-mat.str-el]
- [14] Singh S, Pfeifer R N C, Vidal G 2011 *Phys. Rev. B* **83** 115125
- [15] Song H F, Rachel S, Hur K Le 2010 *Phys. Rev. B* **82** 012405
- [16] Song H F, Rachel S, Flindt C, Klich I, Laflorencie N, Hur K Le 2012 *Phys. Rev. B* **85** 035409
- [17] Yang M F 2007 *Phys. Rev. B* **76** 180403(R).
- [18] Boschi C D E, Ercolelli E, Ortolani F, Roncaglia M 2003 *Eur. Phys. J. B* **35** 465
- [19] Pollmann F, Mukerjee S, Turner A, Moore J E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 255701
- [20] Su Y H, Chen A M, Wang H L, Xiang C H 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 120301 (in Chinese) [苏耀恒, 陈爱民, 王洪雷, 相春环 2017 物理学报 **66** 120301]
- [21] Yang C N, Yang C P 1966 *Phys. Rev.* **150** 321
- [22] Chen W, Hida K, Sanctuary B C 2003 *Phys. Rev. B* **67** 104401
- [23] Kjall J A, Zaletel M P, Mong R S K, Bardarson J H, Pollmann F 2013 *Phys. Rev. B* **87** 235106

Extracting Luttinger liquid parameter K based on $U(1)$ symmetric infinite matrix product states*

Wang Xiu-Juan¹⁾ Li Sheng-Hao^{2)3)†}

1) (*State Key Laboratory of Power Transmission Equipment and System Security and New Technology, Chongqing University, Chongqing 400044, China*)

2) (*Chongqing Vocational Institute of Engineering, Chongqing 400037, China*)

3) (*Centre for Modern Physics and Department of Physics, Chongqing University, Chongqing 400044, China*)

(Received 17 March 2019; revised manuscript received 31 May 2019)

Abstract

We numerically calculate Luttinger liquid parameter K in the anisotropic spin XXZD models with spin $s = 1/2, 1, \text{ and } 2$. In order to obtain groundstate wavefunctions in Luttinger liquid phases, we employ the $U(1)$ symmetric infinite matrix product states algorithm (iMPS). By using relation between the bipartite quantum fluctuations F and the so-called finite-entanglement scaling exponents κ , the Luttinger liquid parameter K can be extracted. For $s = 1/2$ and $D = 0$, the numerically extracted Luttinger liquid parameter K is shown to be good agreement with the exact value. On using the fact that the spin-1 XXZD Hamiltonian with $D \leq -2$ can be mapped to an effective spin-1/2 XXZ model, we calculate the Luttinger liquid parameter for the region of $D \leq -2$. It is shown that our numerical value of the Luttinger liquid parameter agree well with the exact values, here, the relative error less than 1%. Also, our Luttinger liquid parameter at $\Delta = -0.5$ and $D = 0$ is shown to be consistent with the result form the density matrix renormalization group (DMRG) method. These results suggest that the $U(1)$ symmetric iMPS method can be applicable to calculate Luttinger liquid parameters if any system has a $U(1)$ symmetry for gapless phases. For instance, we present our Luttinger liquid parameters for the first time for the spin-1 XXZD model under the other parameters and the spin-2 XXZD model with $D = 1.5$.

Keywords: infinite matrix product state, Luttinger liquid parameter, bipartite quantum fluctuations

PACS: 02.10.Yn, 71.10.Pm, 42.50.Lc

DOI: 10.7498/aps.68.20190379

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11104362), the Research Program of Basic Research and Frontier Technology of Chongqing, China (Grant No. cstc2018jcyjAX0812), the Science and Technology Research Program of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant No. KJQN201801212), and the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 2019JM-017).

† Corresponding author. E-mail: shanshui510@163.com