

应用约化密度保真度确定自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型的基态相图*

赵建辉†

(重庆大学科学与工程博士后流动站, 重庆 400030)

(2012 年 3 月 30 日收到; 2012 年 5 月 26 日收到修改稿)

约化密度保真度 (reduce density fidelity) 可以用来描述量子多体系统的量子相变, 其是两个约化密度矩阵距离的度量. 本文应用 MERA (multi-scale entanglement reorganization ansatz) 算法, 模拟自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型, 并通过对约化密度保真度的计算, 确定出其基态相图. 单点和两点约化密度矩阵所包含的至关重要的信息的量是不同的, 其会体现在约化密度保真度上. 另外, 本文还从局域序参量和系统能隙的角度, 来探讨量子多体系统的相变.

关键词: 量子相变, MERA, 约化密度矩阵, 保真度

PACS: 05.30.Rt, 02.70.-c

1 引言

量子相变^[1]是当代凝聚态物理研究的热点之一, 它是在绝对零度下, 量子系统随着一些确定的非热变量 (如压强、磁场和化学势等) 的变化而发生相变. 传统的热力学相变是由热力学涨落引起的, 而量子相变的驱动力是量子涨落. 最近, 人们从纠缠和保真度, 这些来自于量子信息与量子计算领域的基本概念, 来研究量子多体系统的量子相变^[2-6]. 在数值模拟领域, 近年来基于基态波函数的矩阵乘积态 (matrix product states) 表示提出了张量网络 (tensor network) 算法. 张量网络算法包括一维的 iMPS (infinite matrix product states) 算法^[7], 二维的 PEPS (projected entangled-pair states) 算法^[8,9] 和原则上可以任意维数的 MERA (multi-scale entanglement reorganization ansatz) 算法^[10-12]. 这些算法的提出, 为人们研究量子多体系统的相变, 提供了强有力的数值模拟工具.

Blume-Capel 自旋模型^[13,14]是 BEG^[15,16] (Blume-Emery-Griffiths) 自旋模型的简化. BEG 自旋模型可以用来描述 He³-He⁴ 混合物质的三相点^[16-18]. Blume-Capel 自旋模型具有 BEG 自旋模型大部分的性质, 其基态相图先前已经被很多种方法研究过, 例如 MFA^[19] (mean field approximation), FSS^[16,20] (finite-size scaling) 和 RG^[19,21] (renormalization group) 等方法. 最近在文献 [22] 提出了应用保真度理论研究量子多体系统的相变. 并在文献 [23] 证明了对于 D 维量子格子系统, 其基态保真度等价于同一格子上的 D 维经典统计力学系统的配分函数, 这就建立了量子信息与量子多体系统之间的联系. 单位格点的基态保真度 (ground-state fidelity per lattice site) 是量化两个基态之间的至关重要的信息, 约化密度保真度是两个量子状态之间的最大的距离度量^[24]. 在文献 [25, 26] 中, 应用 iMPS 算法模拟一维无限格点系统的量子 Ising 模型和在外磁场中的自旋 1/2 量子 XYX 模型, 分别从单位格点的基态保真度的分岔和约化密度保真度的分岔, 这两个方面来研究量子自旋链的量子

* 重庆市博士后科研项目 (批准号: CQXM201103019) 资助的课题.

† E-mail: jhzhaoqu@126.com

相变, 详细说明了保真度的分岔来源于系统的自发性对称破缺, 其应用并不局限于量子多体系统的具体模型.

本文应用 MERA 数值算法, 模拟自旋为 1 的一维有限格点的量子 Blume - Capel 模型. 主要目的是通过模拟这个具有一级量子相变和连续量子相变的物理模型, 来说明约化密度保真度可以不通过分岔, 直接用来确定量子相变的临界点, 并且其同样不依赖于具体的物理模型. 单点和两点约化密度矩阵计算获得的约化密度保真度, 其在数值上存在一点差别, 这体现了单点和两点约化密度矩阵在描述系统状态时, 所包含的至关重要信息量的不同. 另外本文还从系统的局域序参量和能隙的角度来讨论了量子多体系统的相变.

2 理论模型、约化密度保真度和数值模拟方法

2.1 理论模型

自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型^[16,27]可以用下面的哈密顿量来描述:

$$H = - \sum_{ij} S_i^z S_j^z + \sum_i (\gamma S_i^x + \delta (S_i^z)^2), \quad (1)$$

这里的 S^x 和 S^z 分别为在 x 和 z 分量的自旋为 1 的自旋算符

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

这个模型是不能精确求解的, 它有两个控制参量 γ 和 δ . 这里存在一个从一级相变到二级相变的三临界点 (tricritical point): $(\gamma_{tr}, \delta_{tr})$ ^[16,27,28]. 对于 $\gamma > \gamma_{tr}$ 的系统由 CFT (conformal field theory) 可以知: 系统经历的量子相变属于 central charge $c = 1/2$ 的量子 Ising 普适类; 在三临界点 $(\gamma_{tr}, \delta_{tr})$ 上其 central charge $c = 7/10$; 当 $\gamma < \gamma_{tr}$ 时, 系统经历一级相变^[16,28].

2.2 约化密度保真度

保真度是量子计算和量子信息里的概念, 它度量的是物理学信息在系统演化过程中对原

有信息的忠诚度. 保真度也可以理解为现有信息与原有信息的相差在距离上的一个度量^[24]. 从约化密度矩阵的角度出发, 保真度可以定义为 $F(\rho', \rho) \equiv \sqrt{\rho^{1/2} \rho' \rho^{1/2}} = \max |\langle \psi | \varphi \rangle|$ ^[24,26], 其中 ρ 和 ρ' 表示两个不同的系统状态的约化密度矩阵, $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是相应的两个不同的系统状态. 可以证明 $F(\rho', \rho)$ 是两个量子状态之间最大距离的度量^[24]. 对于同一相中不同控制参量的约化密度矩阵的距离主要来源于无关紧要的信息, 而不同相中的约化密度矩阵的距离则来源于至关重要的信息^[22,26]. 约化密度矩阵所蕴含的至关重要的信息, 决定了两个系统的状态是否处于同一相. 这里的约化密度矩阵可以是一点、两点、三点以及半链长的约化密度算子. 约化密度保真度和局域序参量有着不同的含义, 约化密度保真度只表示两个不同量子态的距离, 而局域序参量则表示量子状态处在什么样的量子序^[1].

对于约化密度保真度的计算, 首先选定一个量子状态为参考态, 如 ρ' , 另一个密度算子 ρ 随着某一个控制参量从某一相变化到另一相, 等到所有量子状态都为作过参考态后, 这时约化密度保真度会在量子临界点处呈现一个挤点 (pinch point), 这个挤点就是量子相变点^[22,25,26]. 约化密度保真度具有以下性质^[22,25,26]: 1) 归一性: $F(\rho, \rho) = 1$; 2) 变量交换不变性: $F(\rho, \rho') = F(\rho', \rho)$; 3) 取值范围: $0 \leq F(\rho', \rho) \leq 1$. 在本文的第三部分采用一点、两点的约化密度矩阵计算约化密度保真度来确定量子相变的临界点, 并得到系统的基态相图.

2.3 数值模拟方法

MERA 算法是一种辩分的数值模拟算法, 其算法的基本思想是基于实空间重整化群理论^[10-12]. 在 MERA 算法中, 系统波函数的精度取决于表示波函数的张量的最大维数 χ 的大小, 其一般称为截断维数. 截断维数 χ 越大, 表示波函数的张量的元素个数就越多, 其表示的基态波函数也就越精确, 计算资源 (内存与计算时间) 的消耗与截断维数的关系为 $O(\chi^8)$ ^[10-12]. 这里应用有限格点的 MERA 算法, 模拟自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型. 为了去掉边界对量子系统的影响, 这里采用的是周期性边界条件.

3 数值模拟的结果

这里应用 MERA 算法模拟自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型, 采用周期性边界条件, 链长为 $N = 54$, 表示波函数的张量的最大截断维数 $\chi = 8$. 下面将从系统的局域序参量、约化密度保真度和系统的能隙三个方面来讨论自旋为 1 一维量子 Blume-Capel 模型的量子相变.

根据朗道 - 金兹堡 - 威尔逊 (Landau-Ginzburg-Wilson) 范式, 系统的相变可以通过局域序参量 (local order parameters) 来刻画^[1,29]. 序参量的一般定义是: 在有序相其序参量不为零, 在无序相其序参量为零. 如果系统经历一级相变, 那么在量子临界点处其序参量是不连续的, 反之系统经历连续性 (二级相变) 相变, 其序参量是连续的^[1,29].

图 1 是固定外参量 δ 不变, 局域算符 s^z 和 s^x 的平均值随外参量 γ 从有序相到无序相的变化. 图 1(a) 是局域算符 s^z 的平均值, 在有序相 $\langle s^z \rangle \neq 0$, 而在无序相 $\langle s^z \rangle = 0$. 根据朗道的序参量理论^[29], 局域算符 s^z 是 Blume-Capel 模型的局域序参量. 随着 δ 的从小到大的变化, 局域序参量 s^z 的平均

值 $\langle s^z \rangle$ 从连续逐渐过渡到不连续, 这表明相变类型从连续相变过渡到一级相变. 根据 MERA 模拟的数据可知, 这个从连续相变到一级相变的三临界点为 $(\gamma_{tr} \approx 0.911, \delta_{tr} \approx 0.414)$, 此数值和文献 [16,28] 中确定的三临界点 $(\gamma_{tr} \approx 0.9102, \delta_{tr} \approx 0.4156)$ 相接近. 图 1(b) 是局域算符 s^x 的平均值, 无论在有序相还是在无序相, 局域算符 s^x 的平均值 $\langle s^x \rangle$ 都不为零, 所以其不是局域序参量. 从图 1(b) 可以看出局域算符 s^x 的平均值 $\langle s^x \rangle$ 随着 δ 的变化也会从连续逐渐过渡到不连续. 从局域算符 s^z 和 s^x 的平均值可以得出, 描述一维量子 Blume-Capel 模型的相变所需要的物理信息, 完全可以由单点约化密度矩阵来提供, 即通过单点约化密度矩阵就可以刻画系统的相变.

图 2 是用单点约化密度矩阵计算得到的约化密度保真度 $F_1(\gamma', \gamma)$. 图 2(a)—(d) 是对于固定不同的外参量 δ , $F_1(\gamma', \gamma)$ 在量子临界点处呈现挤点, 并且随着外参量 δ 的数值从小到大的变化, $F_1(\gamma', \gamma)$ 由连续到不连续的变化, 这表明量子相变的类型从连续相变到一级相变的过渡.

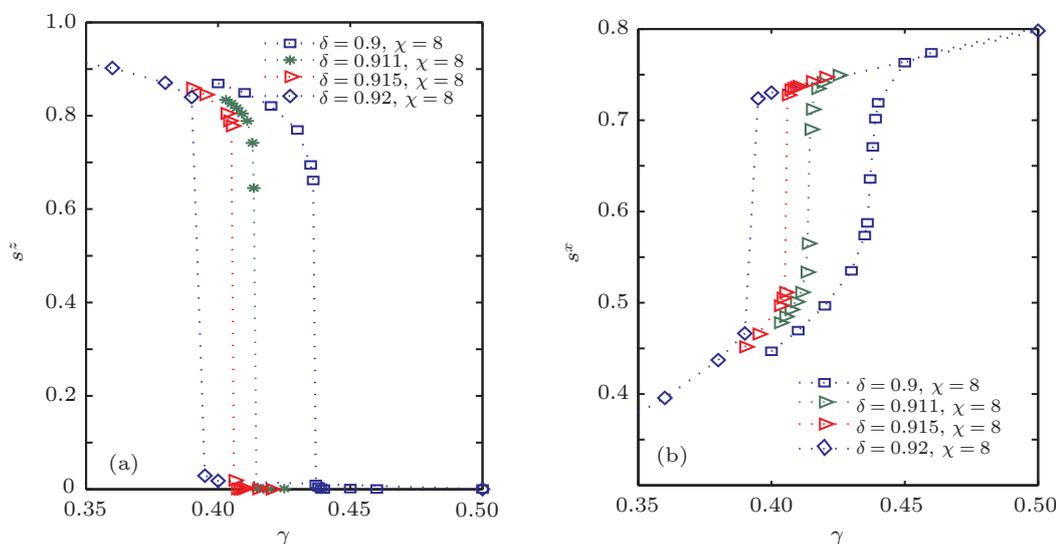


图 1 局域算符 s^z 和 s^x 的平均值 (a) 局域算符 s^z 的平均值; (b) 局域算符 s^x 的平均值

为了更清楚的显示约化密度保真度在量子临界点附近的变化行为, 在图 3 画出了约化保真度的二维图, 在图 3 中固定外参量 δ 不变, 在有序相任意选取一个量子状态作为参考态 (同样这个参考态也可以在无序相选取), 随着外参量 γ 从有序相过渡到无序相, 约化密度保真度逐渐从连续过渡到不连续. 图 3(a) 和 (b) 是选取相同的参考态, 分别用单点和两点约化密度矩阵计算约化密度保真度的

图示. 从图中可以清晰的看到 $F_1(\gamma', \gamma)$ 和 $F_2(\gamma', \gamma)$ 主要区别是 $F_2(\gamma', \gamma)$ 的数值在非参考态的相中比 $F_1(\gamma', \gamma)$ 的数值小, 这说明两点约化密度矩阵比单点约化密度矩阵包含更多的至关重要的信息. 这也从侧面说明单点约化密度矩阵, 其虽然能够描述一维量子 Blume-Capel 模型的量子相变, 但是还是丢失了一些至关重要的信息, 不过这里只是量的丢失, 其并不影响对系统状态的描述.

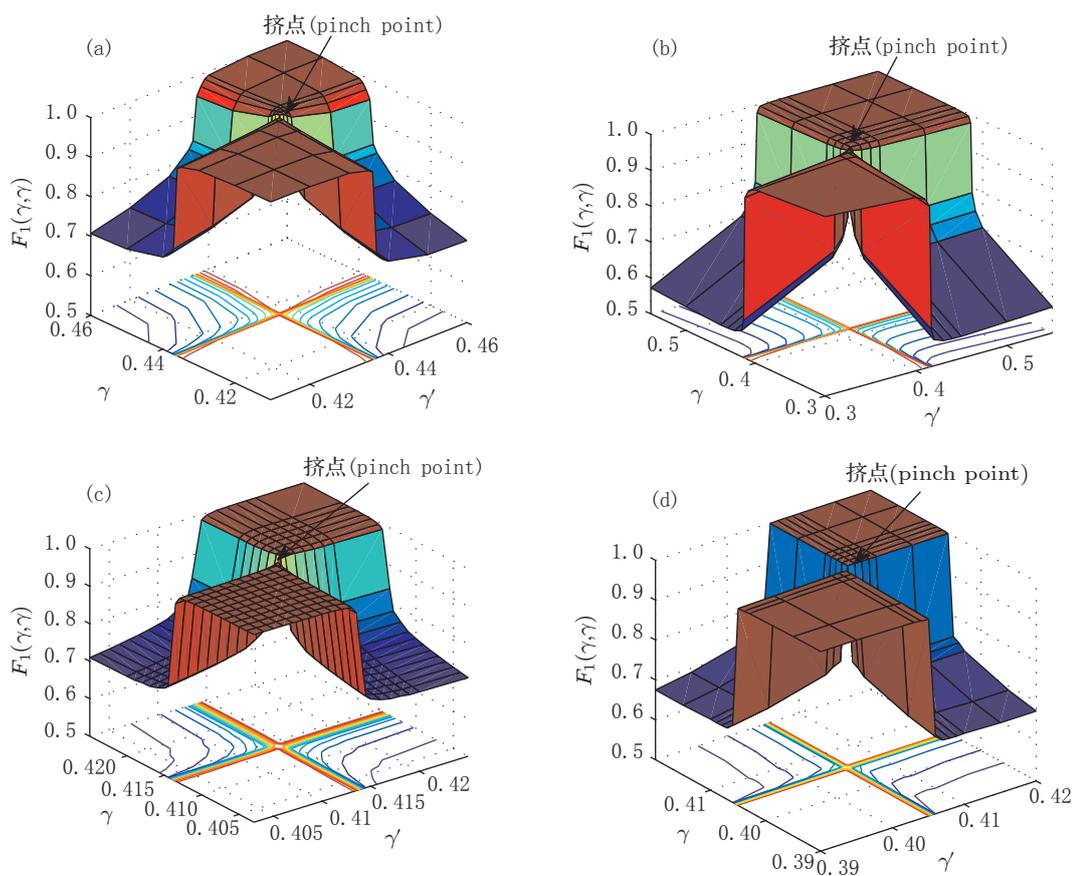


图2 由单点约化密度矩阵计算得到的约化密度保真度 $F_1(\gamma', \gamma)$ (a) 当控制参量 $\delta = 0.9$ 时, 约化密度保真度, $F_1(\gamma', \gamma)$ 随着控制参量 γ 呈连续变化, 其在 $(\delta = 0.9, \gamma = 0.437)$ 点处出现挤点, 即量子相变点; (b) 当控制参量 $\delta = 0.91$ 时, 约化密度保真度 $F_1(\gamma', \gamma)$ 在相变点 $(\delta = 0.91, \gamma = 0.42)$ 处呈现挤点, 且随着控制参量 γ 是连续变化; (c) 当控制参量 $\delta = 0.911$ 时, 约化密度保真度 $F_1(\gamma', \gamma)$ 在相变点 $(\delta = 0.911, \gamma = 0.414)$ 处呈现挤点, 这时, $F_1(\gamma', \gamma)$ 是不连续的, 这表明系统从连续相变过渡到一级相变; (d) 控制参量 $\delta = 0.915$ 单点约化密度保真度 $F_1(\gamma', \gamma)$ 是不连续的, 且在相变点处 $(\delta = 0.915, \gamma = 0.407)$ 呈现挤点

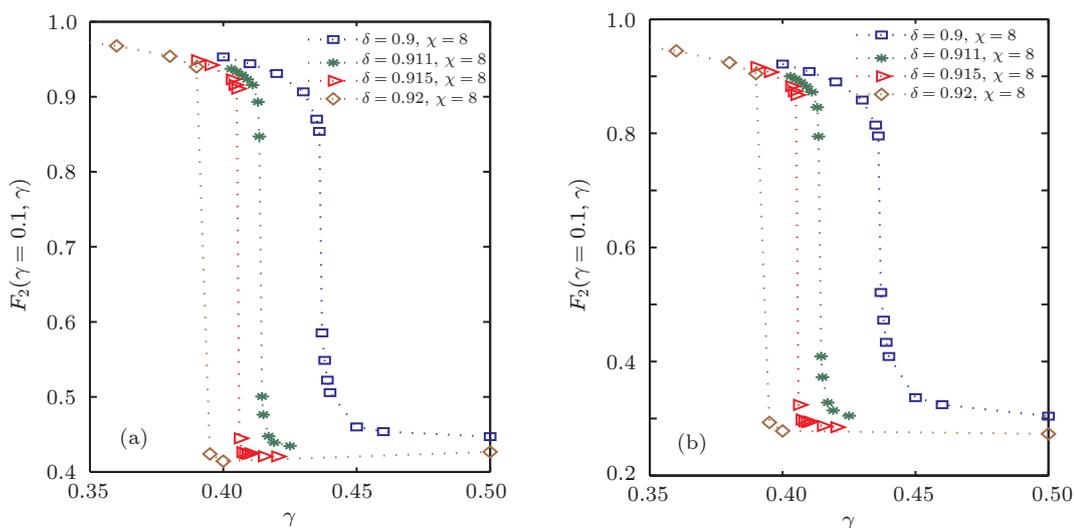


图3 约化密度保真度 (a) 单点约化密度保真度 $F_1(\gamma' = 0.1, \gamma)$, 参考态选取的是单点约化密度矩阵 $\rho_1(\gamma = 0.1)$; (b) 两点约化密度保真度 $F_2(\gamma' = 0.1, \gamma)$, 参考态选取的是两点约化密度矩阵 $\rho_2(\gamma = 0.1)$

根据上面的约化密度保真度, 可以确定出自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型的基态相图, 见图 4. 在图 4 中给出了, 应用 MERA, RG 和 FSS 方法确定的基态相图 [16,27]. 通过对比发现, MERA 算法确定的基态相图和 FSS 方法确定的基态相图基本相同, 这说明了 MERA 数值模拟算法的正确性.

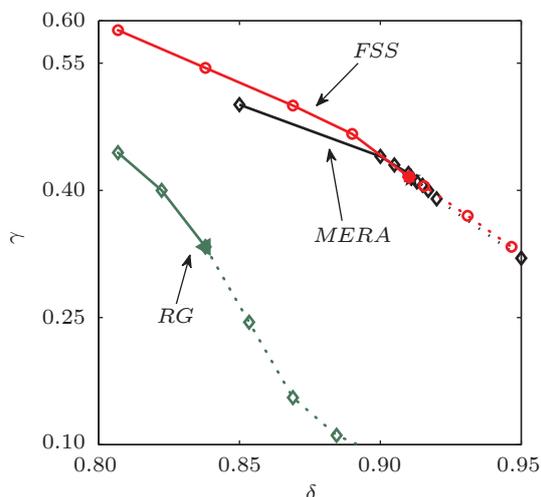


图 4 自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型在参数空间 $\gamma - \delta$ 基态相图 (实心三角形、交叉和四方形分别是应用 RG, FSS 和 MERA 方法确定的三相点)

在量子临界点处, 系统的关联长度是发散的即系统的能隙是闭合的. 从图 5 中可以看出随着外控制参量向量子临界点靠近, 系统的能隙在量子临界

点处消失. 特别在图 5(b) 中, 能隙在量子临界点处闭合行为表现的更加清楚.

4 结论

本文通过应用 MERA 算法模拟自旋为 1 的一维量子 Blume-Capel 模型, 并计算约化密度保真度得到了系统的基态相图. 约化密度保真度是两个约化密度矩阵之间最大的距离度量 [24], 其可以用来探测量子相变点, 并且可以通过判断其连续和不连续性, 来确定从连续相变到一级相变的三临界点. 从单点约化密度矩阵和两点约化密度矩阵计算得到的约化密度保真度存在差异, 其说明包含格点数越多的约化密度矩阵, 包涵系统状态的至关重要的信息越多, 越有利于辨别系统所处的不同的相. 应用约化密度保真度来确定量子相变的临界点优越性在于: 对于不同的量子模型不必考虑与模型有关的局域序参量, 其量子临界点可以直接通过约化密度矩阵计算得到. 因此在完全不知道系统序参量的情况下, 可以通过计算约化密度保真度来确定量子系统的临界点. 在得到关于量子临界点有关信息后, 就可以根据模型具体的物理性质来寻找和模型相关的序参量. 另外本文也从局域序参量和系统的能隙的角度来探讨量子系统的相变.

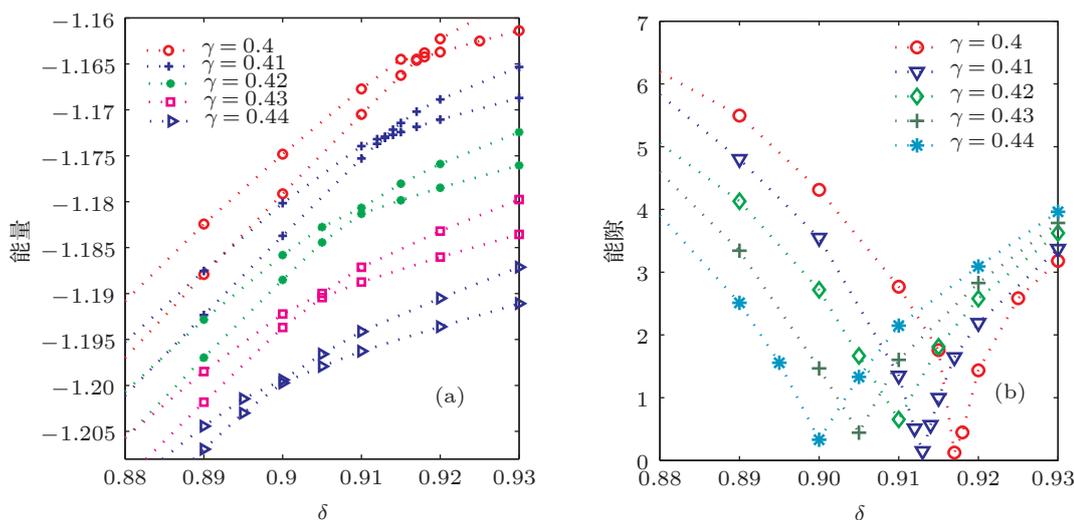


图 5 (a) 在量子临界点附近, 系统的基态能量和第一激发态能量随控制参量 δ 的穿过量子临界点; (b) 在量子临界点附近, 系统的能隙 (基态和第一激发态的能量之差) 随控制参量 δ 的穿过量子临界点

- [1] Sachdev S 1999 *Quantum Phase Transitions* (Cambridge: Cambridge University Press) p3
- [2] Wootters W K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 2245
- [3] Amico L, Andreas Osterloh, Francesco Plastina, Rosario Fazio, Massimo Palma G 2004 *Phys. Rev. A* **69** 022304
- [4] Tommaso Roscilde, Paola Verrucchi, Andrea Fubini, Stephan Haas, Valerio Tognetti 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 167203
- [5] Valerie Coffman, Joydip Kundu, Wootters W K 2000 *Phys. Rev. A* **61**, 052306
- [6] Cai Z, Lu W B, Liu Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7267 (in Chinese) [蔡卓, 陆文彬, 刘拥军 2008 物理学报 **57** 7267]
- [7] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070201
- [8] Jordan J, Orus R, Vidal G, Verstraete F, Cirac J I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 250602
- [9] Li B, Li S H, Zhou H Q 2009 *Phys. Rev. B* **79** 060101(R)
- [10] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 220405
- [11] Evenbly G, Vidal G 2009 *Phys. Rev. B* **79** 144108
- [12] Glen Evenbly, Guifre Vidal 2011 arXiv:1109.5334
- [13] Nightingale M P 1976 *Physica A* **83** 561
- [14] Hu B, 1980 *Phys. Rev. Lett.* **75** A 372
- [15] Blume M, Emery V J, Griffiths R B 1971 *Phys. Rev. A* **4** 1071
- [16] Alcaraz F C, Drugowich de Felicio J R, Stilck J F 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7469
- [17] Griffiths R B 1970 *Phys. Rev. Lett.* **24** 715
- [18] Peliti L, Leiblen S 1984 *Phys. Rev. B* **29** 1253
- [19] Hamber H 1980 *Phys. Rev. B* **21** 3999
- [20] Blume M 1966 *Phys. Rev.* **141** 517
- [21] Capel H W 1967 *Physica* **37** 423
- [22] Zhou H Q, Barjaktarevic J P 2008 *J. Phys. A: Math. Theor.* **41** 412001
- [23] Zhou H Q, Roman Orus, Guifre Vidal 2008 *Physical Review Letters* **100** 080601
- [24] Nielsen M A, Chuang I L 2000 *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge) p409
- [25] Zhao J H, Wang H L, Li B, Zhou H Q 2010 *Physical Review E* **82** 061127
- [26] Liu J H, Shi Q Q, Zhao J H, Zhou H Q 2011 *J. Phys. A: Math. Theor.* **44** 495302
- [27] Arizmendi C M, Epele L N, Fanchiotti, Garcia Canal C A 1986 *Z. Phys. B Condensed Matter* **64** 231 235
- [28] Xavier J C, Alcaraz F C 2011 *Phys. Rev. B* **84** 094410
- [29] Feng D, Jin G J 2003 *Condensed Matter Physics* (Vol. 1) (Beijing: Higher Education Press) p601 (in Chinese) [冯端, 金国钧 2003 凝聚态物理学 (上卷) (北京: 高等教育出版社) 第 601 页]

Ground state phase diagram of the quantum spin 1 Blume-Capel model: reduced density fidelity study*

Zhao Jian-Hui[†]

(Postdoctoral Research Station of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

(Received 30 March 2012; revised manuscript received 26 May 2012)

Abstract

The reduced density fidelity is a measure of distance between two reduced density matrix, which can be used to characterize quantum phase transitions in quantum many-body systems. In this paper, we use the multi-scale entanglement reorganization ansatz (MERA) algorithm to simulate the spin 1 quantum Blume-Capel model and determine its ground-state phase diagram through calculating the reduced density fidelity. The qualitative relevant information contained in one site reduced density matrix is different from that contained two-site reduced density matrix, which can be detected by using the reduced density fidelity. In addition, we also characterize quantum phase transitions in quantum many-body systems by using the local parameters and energy gaps.

Keywords: quantum phase transition, MERA, reduced density matrix, fidelity

PACS: 05.30.Rt, 02.70.-c

* Project supported by the Chongqing Postdoctoral Sustentation Fund (Grant No. CQXM201103019).

[†] E-mail: jhzhao@cqu@126.com