



自旋-1/2量子罗盘链的量子相与相变

陈西浩 夏继宏 李孟辉 翟福强 朱广宇

Quantum phases and transitions of spin-1/2 quantum compass chain

Chen Xi-Hao Xia Ji-Hong Li Meng-Hui Zhai Fu-Qiang Zhu Guang-Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 030302 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211433

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211433>

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

一维扩展量子罗盘模型的拓扑序和量子相变

Topological orders and quantum phase transitions in a one-dimensional extended quantum compass model

物理学报. 2018, 67(19): 190301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180855>

含有Dzyaloshinskii-Moriya相互作用的自旋1键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度

Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction

物理学报. 2020, 69(9): 090302 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773>

具有全局对称性的强关联拓扑物态的规范场论

Gauge theory of strongly-correlated symmetric topological Phases

物理学报. 2020, 69(7): 077102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200197>

斯格明子相关的螺旋磁有序体系的临界行为

Critical behaviors of helimagnetic ordering systems relating to skyrmion

物理学报. 2018, 67(13): 137501 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180137>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>

光腔中两组分玻色-爱因斯坦凝聚体的受激辐射特性和量子相变

Stimulated radiation characteristics and quantum phase transition for two-component Bose-Einstein condensate in optical cavity

物理学报. 2018, 67(18): 183701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180971>

自旋-1/2 量子罗盘链的量子相与相变*

陈西浩¹⁾ 夏继宏²⁾ 李孟辉³⁾ 翟福强^{1)†} 朱广宇^{2)‡}

1) (重庆文理学院新材料技术研究院, 重庆 402160)

2) (重庆文理学院电子信息与电气工程学院, 重庆 402160)

3) (重庆大学, 光电技术与系统教育部重点实验室, 重庆 400044)

(2021 年 8 月 3 日收到; 2021 年 9 月 30 日收到修改稿)

基于矩阵乘积态表述的无限时间演化块算法, 研究了具有 x, y, z 三个自旋方向的轨道自由度和轨道序竞争的量子罗盘自旋链模型. 为了刻画该模型的量子相和相变, 计算了基态能量、局域序参量、弦关联序参量、临界指数、冯诺依曼熵、有限纠缠标度和中心荷. 结果表明: 该量子基态相图由条纹反铁磁相、反铁磁相、单调奇数 Haldane 相和振荡奇数 Haldane 相构成. 从条纹反铁磁相到反铁磁相, 以及从单调奇数 Haldane 相到振荡奇数 Haldane 相发生了非连续相变; 从振荡奇数 Haldane 相到条纹反铁磁相, 以及从反铁磁相到单调奇数 Haldane 相发生了连续相变; 连续相变线和非连续相变线的交点是多临界点. 此外, 连续相变点处的临界指数 $\beta = 1/8$ 和中心荷 $c = 1/2$ 表明连续相变的普适类属于 Ising 类. 由此揭示了该模型量子基态相图的本性, 对今后研究更高自旋以及更为复杂轨道序竞争的量子罗盘链模型的量子相与相变具有一定借鉴与参考意义.

关键词: 量子相变, 弦关联, 拓扑序, 临界指数**PACS:** 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Hk**DOI:** 10.7498/aps.71.20211433

1 引言

量子相和相变一直是凝聚态强关联量子多体系统非常重要的研究内容. 因此, 研究量子相和相变就要求强关联量子多体系统具有丰富的量子相图. 强关联量子多体系统中具有强量子涨落、强几何阻挫、复杂的自旋-自旋交换作用或轨道自由度等竞争, 诱发系统发生多种多样的自发对称破缺或隐性自发对称破缺, 从而涌现出异常丰富的量子相和相变的量子自旋模型^[1-9], 成为人们研究量子相和相变普遍关注的系统. 借助于 Landau-Ginzburg-Wilson 范式的两个基本概念 (自发对称破缺和局域序参量), 人们能透彻地刻画传统的量子相和相

变^[10-17] (KT 相变能被刻画的原因在于有限空间截断维数使系统发生了假性自发对称破缺). 然而, 还存在着—类新颖量子相, 超越了朗道相变理论的范畴, 不能用 Landau-Ginzburg-Wilson 范式的两个基本概念进行刻画, 这类相具有长程非局域拓扑序, 刻画他们只能借助于长程非局域弦关联^[18-21]. 自 Haldane 发现这种新颖长程非局域拓扑相以来, 它就引起了人们极大的兴趣. 本文研究了具有 x, y, z 三个自旋方向的轨道自由度和轨道序竞争量子罗盘自旋链模型 (quantum compass chain, QCC). 它的原型——量子罗盘模型 (quantum compass model, QCM) 就包含人们广泛关注的长程非局域拓扑相^[22], 并引发了系列研究. QCM 具有丰富的量子相图, 但是人们早期把注意力集中在了它

* 重庆文理学院人才引进项目 (批准号: R2019FXCo7)、重庆市教委项目 (批准号: KJQN201901348) 和国家自然科学基金 (批准号: 11805285) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaifuqiang@cqwu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zhuguangyu@cqwu.edu.cn

是连续相变、非连续相变^[23]还是多临界点这个争议上. 为了澄清这个问题, 人们对存在横场和不存在横场的 QCM 模型进行了系列研究, 发现争议的相变点其实是多临界点^[24–26]. 人们从引入横场这个角度得到启发, 对 QCM 模型进行了扩展研究, 发现了许多令人着迷的量子相, 如在海森伯微扰的作用下, 量子相图中发现了无序相和横向 Neel 相, 非连续相变线也缺失了^[27]; 在自旋-1 的 QCM 量子相图中出现了广义的 Haldane 相^[28]; 在方块 QCM 的量子相图中发现了 Nematic 相和自发多聚化现象^[29]. 因而, 可以期待 QCC 也应具有丰富的量子相和相变. 然而, 关于 QCC 的研究目前鲜见, 因此值得进一步研究. 该模型的哈密顿量可以表述如下:

$$H = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} (J_{xx} S_{2i-1}^x S_{2i}^x + J_{yy} S_{2i-1}^y S_{2i}^y + J_{zz} S_{2i}^z S_{2i+1}^z), \quad (1)$$

其中, S_i^α 是在无限长链的第 i 格点上的自旋-1/2 的算符, α 代表 x, y, z ; J_{xx} , J_{yy} 和 J_{zz} 是自旋算符之间的耦合作用 (控制参数), 本文设定 $J_{zz} = 1$ 为能量标度. 当给定 $J_{xx} = 0$ 时, 该模型约化为 QCM, 对应的量子相图包含 y 方向的振荡/单调奇数 Haldane 相和 z 方向的振荡/单调偶数 Haldane 相^[25]. 类似地, 当给定 $J_{yy} = 0$, 对应的量子相图也会包含 4 个不同的 Haldane 相. 当给定 $J_{xx} = J_{yy} = 0$, 该模型对应的量子态会变成二聚化的乘积态. 此外, QCC 模型的哈密顿量 (1) 式有 3 个不可交换项, 无法被对角化, 不能采用解析的方法求解. 因此, 本文采用了矩阵乘积态表述的无限时间演化块算法 (infinite time evolving block decimation, iTEBD)^[30] 来研究该模型. 该算法可以高精度地产生变分基态波函数. 一旦基态波函数产生后, 就可以系统地研究量子相和相变, 方法如下: 1) 确定量子相变边界; 2) 导出局域序参量; 3) 导出长程非局域弦关联序参量; 4) 计算临界指数和中心荷确定普适类^[31].

本文结构如下: 第 2 节介绍矩阵乘积态; 第 3 节介绍量子相图; 第 4 节介绍基态能量、序参量和临界指数; 第 5 节是冯诺依曼熵和中心荷; 最后是总结.

2 矩阵乘积态

一旦哈密顿量给定, 就可以应用哈密顿量对应

的虚时间演化算符 $\exp(-H\tau)$ (τ 是虚时间) 作用在一个随机初态 $|\varphi_0\rangle$ 上, 当 $\tau \rightarrow \infty$, 哈密顿量对应的波函数会收敛到基态 $|\varphi\rangle$. 遵循 iTEBD 算法更新过程中使用到的 Schmidt 分解规则^[30], 波函数可以写为

$$|\varphi\rangle = \sum_s \sum_\alpha \cdots \lambda_{\alpha_i}^{[i]} \Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]} \lambda_{\alpha_{i+1}}^{[i+1]} \times \Gamma_{\alpha_{i+1}, s_{i+1}, \alpha_{i+2}}^{[i+1]} \lambda_{\alpha_{i+2}}^{[i+2]} \cdots |\cdots s_i s_{i+1} \cdots\rangle, \quad (2)$$

其中, $|s_i\rangle$ 是在第 i 格点上的局域希尔伯特空间基矢, $\Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]}$ 是一个三指标张量, 对角矩阵 $\lambda_{\alpha_i}^{[i]}$ 是两个半无限链 $L(-\infty, \cdots, i)$ 和 $R(i+1, \cdots, +\infty)$ 间的 Schmidt 分解系数. s_i 是第 i 格点的物理指标, 它的取值范围为 $1-d$. α_i 是第 i 格点的空间指标, 它的取值范围为 $1-\chi$. 所有的张量 $\Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]}$ 和 $\lambda_{\alpha_i}^{[i]}$ 都通过最近邻的空间指标 α_i 连接. 方程 (2) 的张量网络形式叫做无限矩阵乘积态 (matrix product states, MPS). 本文研究的系统哈密顿量 (1) 式具有平移 4 个格点不变的特性, 可以将 (2) 式表示无限 MPS 的张量 $\Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]}$, $\Gamma_{\alpha_{i+1}, s_{i+1}, \alpha_{i+2}}^{[i+1]}$, $\Gamma_{\alpha_{i+2}, s_{i+2}, \alpha_{i+3}}^{[i+2]}$ 和 $\Gamma_{\alpha_{i+3}, s_{i+3}, \alpha_{i+4}}^{[i+3]}$ 替换为 Γ_A , Γ_B , Γ_C 和 Γ_D ; 相应地, $\lambda_{\alpha_i}^{[i]}$, $\lambda_{\alpha_{i+1}}^{[i+1]}$, $\lambda_{\alpha_{i+2}}^{[i+2]}$ 和 $\lambda_{\alpha_{i+3}}^{[i+3]}$ 替换为 λ_A , λ_B , λ_C 和 λ_D . 于是, 本文研究的系统对应的无限 MPS 可以改写为

$$|\varphi\rangle = \sum_s \sum_{l, r} \cdots \lambda_A \Gamma_A \lambda_B \Gamma_B \lambda_C \Gamma_C \lambda_D \Gamma_D \lambda_A \cdots \times |\cdots s_A s_B s_C s_D \cdots\rangle, \quad (3)$$

式中, l 和 r 分别是左边和右边的空间指标, 取值范围同 α_i 一致. 除特殊说明外, 本文设定 $\chi = 32$.

3 量子相图

应用 iTEBD 算法结合基态能量、序参量和冯诺依曼熵对哈密顿量 (1) 式的参数空间 J_{xx} - J_{yy} 对应的基态波函数进行计算与分析, 得到 QCC 的量子基态相图, 如图 1 所示. 该量子基态相图由条纹反铁磁相、反铁磁相、单调奇数 Haldane 相和振荡奇数 Haldane 相构成. 黑色与红色实心圆是计算得到的相变数据点. 黑色实心线代表连续相变线, 红色实心线代表非连续相变线, 两线交点是多临界点. 连续相变线上相变点的普适类属于 Ising 类. 为了更好地展现本文刻画量子相和相变的策略, 选取了 3 条代表线: 1) 竖直紫虚线 $J_{xx} = 0.5$, 穿越了

所有的量子相及对应量子相间的量子相变点; 2) 竖直黑虚线 $J_{xx} = 1$, 经过了多临界点; 3) 竖直褐虚线 $J_{xx} = 1.2$, 穿越了非连续相变线, 作为研究对象.

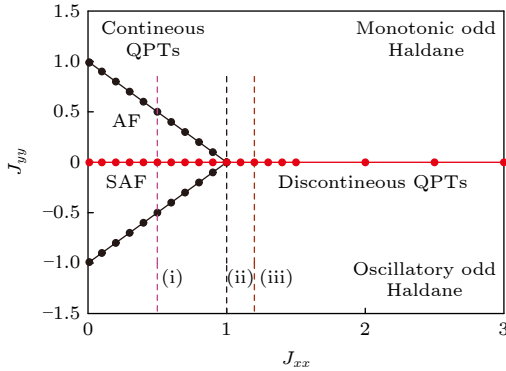


图 1 量子罗盘自旋链模型基态相图. AF, SAF, Monotonic odd Haldane 和 Oscillatory odd Haldane 分别是反铁磁相、条纹反铁磁相、单调奇数 Haldane 相和振荡奇数 Haldane 相. 黑实线和红实线分别表示连续相变线和非连续相变线. 标记为 (i)–(iii) 的 3 条虚线是展示刻画量子相和相变策略的代表线

Fig. 1. Quantum phase diagram for the QCC with orbital degrees of freedom in x , y and z components, which including antiferromagnetic phase (AF), striped antiferromagnetic phase (SAF), monotonic odd Haldane phase and oscillatory odd Haldane phase. The solid black line and solid red line represent continuous quantum phase transition line and discontinuous quantum phase transition line, respectively. The dashed paths labeled by (i)–(iii) are sample lines discussed in the text to show how to characterize quantum phases and quantum phase transitions.

4 基态能量、序参量与临界指数

4.1 基态能量

传统研究量子相变的方式是对能谱进行研究. 与之密切相关的单点基态能量表达式可以写为含有哈密顿量 H 的基态波函数的交叠, 也就是 $E_i = \langle \varphi | H | \varphi \rangle / N$, N 是哈密顿量 H 作用在基态波函数的原胞个数. 当系统发生相变时, 能级或能级导数会展现出奇异性. 因此, 可以通过能级或能级导数的奇异性来确定量子相变的发生. 而对于相变连续性的确定, 热力学上是通过相变发生的过程是否存在潜热 (临界温度时, 系统继续吸收和释放能量, 物态保持不变, 过程中吸收和释放的能量就是潜热) 来确定. 然而, 量子相变发生在零温, 潜热这一概念并不适用. 一般人们根据 Bowley 和 Sanchez^[32] 引入的能量导数来确定量子相变的连续性. 若一阶导数不连续, 则发生的相变为非连续相变, 若二阶

以上导数不连续, 则发生的相变为连续相变. 此外, 对相变点两侧的量子态进行绝热演化, 绝热演化态的能级交叉也可作为非连续相变的判据^[26]. 图 2 给出了单点基态能量 E_{2i-1} , E_{2i+1} , E_{2i} , E_{2i+2} 和 E 随控制参数 J_{yy} 的变化关系. 这里的 E_{2i-1} , E_{2i+1} , E_{2i} 和 E_{2i+2} 分别是在奇数键和偶数键的单点基态能量, $E = \frac{1}{4}(E_{2i-1} + E_{2i} + E_{2i+1} + E_{2i+2})$ 是单点平均基态能量. 图 2(a) 表明 $J_{xx} = 0.5$ 时, 随着控制参数 J_{yy} 的增加, 能量二阶导数 d^2E/dJ_{yy}^2 在 $J_{yy}^{c1} = -0.5$ 和 $J_{yy}^{c3} = 0.5$ 处表现出了奇异性, 表明这两处发生了连续相变; 而在 $J_{yy}^{c2} = 0$ 处, 能量一阶导数不连续, 表明该处发生了非连续相变. 发生连续相变的原因在于系统的能隙关闭了, 使得一个量子相到另一个量子相可以连续地过渡; 而发生非连续相变是由一阶导数不连续和能级交叉共同确定的. 类似地, 图 2(b) 和图 2(c) 表明当 $J_{xx} = 1$ ($J_{xx} = 1.2$) 时, 在 $J_{yy}^{c4} = 0$ ($J_{yy}^{c5} = 0$) 处, 能量一阶导数不连续, 表明该处发生了非连续相变.

4.2 序参量

局域序参量是用于刻画系统发生自发对称破缺而拥有局域序相的观测量. 如果一个系统发生了自发对称破缺, 系统中就会存在一个局域序, 这个局域序可以用局域序参量来刻画. 作为局域序参量需要满足以下条件: 1) 在发生自发对称破缺区域, 局域序参量具有非零值; 2) 离开对应自发对称破缺区域, 局域序参量的值变为零; 3) 在邻近相变点区域, 局域序参量和控制参数的关系应具有标度不变的特征. 此外, 还存在着超越朗道相变理论的新颖相, 这类相是由隐性自发对称破缺, 而非自发对称破缺引发的. 因此, 这种相不能通过局域序参量来刻画, 只有通过拓扑非局域弦关联序参量来刻画. 所谓拓扑非局域弦关联指的是 den Nijs 和 Rommelse^[33] 以及 Tasaki^[34] 为了刻画自旋-1 海森伯模型中的 Haldane 相而引入的奇数和偶数弦关联函数, 定义如下^[35]:

$$O_{\text{odd}}^{\alpha}(2i-1, 2j) = \left\langle S_{2i-1}^{\alpha} \exp \left(i\pi \sum_{k=2i}^{2j-1} S_k^{\alpha} \right) S_{2j}^{\alpha} \right\rangle,$$

$$O_{\text{even}}^{\alpha}(2i, 2j+1) = \left\langle S_{2i}^{\alpha} \exp \left(i\pi \sum_{k=2i+1}^{2j} S_k^{\alpha} \right) S_{2j+1}^{\alpha} \right\rangle. \quad (4)$$

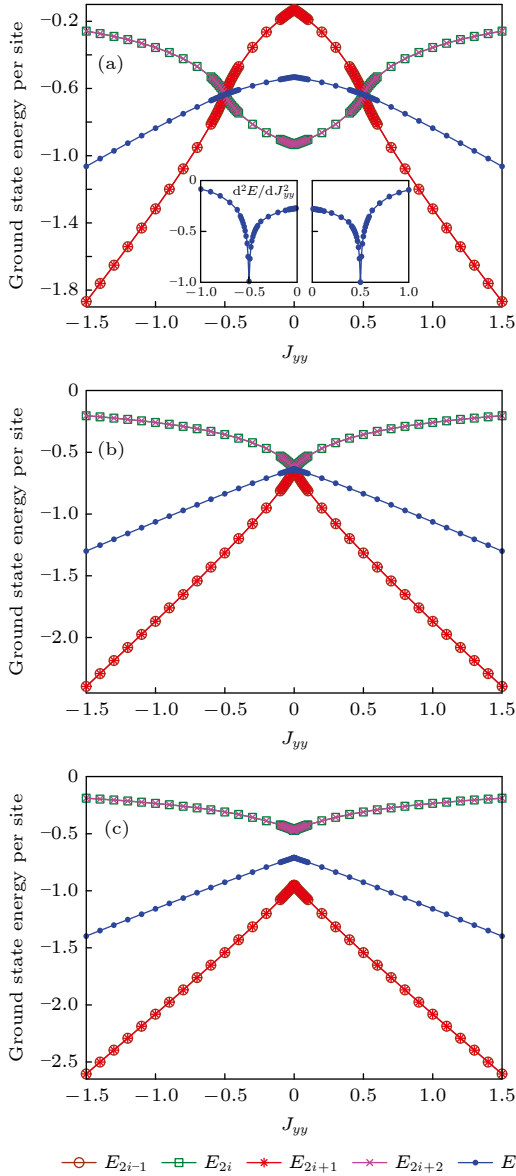


图2 单位格点基态能量随控制参数 J_{yy} 的变化行为. E_{2i-1} , E_{2i+1} , E_{2i} 和 E_{2i+2} 分别是奇/偶数键的单位格点基态能量. $E = \frac{1}{4}(E_{2i-1} + E_{2i} + E_{2i+1} + E_{2i+2})$ 为平均单位格点基态能量. (a) 相变点发生在 $J_{yy}^{c1} = -0.5$, $J_{yy}^{c2} = 0$ 和 $J_{yy}^{c3} = 0.5$, 内插图为单位格点基态能量的二阶导数 d^2E/dJ_{yy}^2 ; (b), (c) 相变点分别发生在 $J_{yy}^{c4} = 0$ 和 $J_{yy}^{c5} = 0$.

Fig. 2. Ground state energy per site as a function of controlling parameter J_{yy} . E_{2i-1} , E_{2i+1} , E_{2i} and E_{2i+2} are ground state energies per site on odd and even bonds, respectively. $E = \frac{1}{4}(E_{2i-1} + E_{2i} + E_{2i+1} + E_{2i+2})$ is average ground state energy per site: (a) QPTs at $J_{yy}^{c1} = -0.5$, $J_{yy}^{c2} = 0$ and $J_{yy}^{c3} = 0.5$. The inset shows the second-order derivation of average ground state energy per site d^2E/dJ_{yy}^2 . (b), (c) QPTs at $J_{yy}^{c4} = 0$ and $J_{yy}^{c5} = 0$, respectively.

随后, 为进一步阐明自旋-1 海森伯模型, Hida 等 [36,37] 引入了轮换的自旋-1/2 的顺铁磁海森伯模

型, 弦关联也自然扩充到了自旋-1/2 的情况. 在此基础上, Chen 和 Wang [19] 以及 Wang 和 Cho [25] 为了刻画各种类型的 Haldane 相引入了单调/振荡奇数弦关联和单调/振荡偶数弦关联. 利用文献 [19, 25] 的方法分析 QCC 的基态波函数的弦关联行为, 发现振荡/单调奇数弦关联线性组合可以作为刻画 QCC 中 Haldane 相的奇数弦关联序参量, 它的定义可以写为如下形式:

$$O_{s, \text{odd}}^{\pm, y} = \frac{1}{2} \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} [O_{\text{odd}}^y(2i-1, 2j+2) \pm O_{\text{odd}}^y(2i-1, 2j)]. \quad (5)$$

定义式 (5) 可以应用矩阵乘积态的表示形式, 直接计算热力学极限下的奇数弦关联序参量. 图 3(a)—图 3(c) 给出了局域磁化强度 $\langle \sigma_i^z \rangle$ 和奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ 随控制参数 J_{yy} 的变化关系. 图 3(a) 表明系统发生了 3 次相变, 相变点分别为 $J_{yy}^{c1} = -0.5$, $J_{yy}^{c2} = 0$ 和 $J_{yy}^{c3} = 0.5$. 振荡奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{-, y}$ 仅在 $J_{yy} < -0.5$ 区域具有非零值, 表明该区域发生了 $Z_2 \times Z_2$ 隐性自发对称破缺, 处于振荡奇数 Haldane 相. 振荡 (单调) 偶数弦关联序参量是 Hida 等 [36,37] 为了研究轮换交替作用的海森伯模型中的偶弦关联 Haldane 相和二聚相共存的情形而引入的. QCC 模型哈密顿量 (1) 式的控制参数也是轮换交替的, 遵循 Hida 等的定义方式, QCC 模型中的两种 Haldane 相可以用振荡 (单调) 奇数弦关联序参量刻画. 振荡奇数 Haldane 相振荡的原因在于: 波函数的结构分别由哈密顿量 (1) 式的奇数键上的控制参数 $J_{yy} < 0$ 和偶数键上的控制参数 $J_{zz} > 0$ 占主导地位. 当 $-0.5 < J_{yy} < 0$, 局域磁化强度 $\langle \sigma_i^z \rangle$ 值非零, 表明该区域发生了自发对称破缺, 其符号表现为 $\cdots + + - \cdots$, 量子基态波函数具有平移 4 个格点不变的特性, 这样的特征可用条纹反铁磁序参量 $O_{\text{SAF}} = \frac{1}{2} |\langle \sigma_{4i-3} - \sigma_{4i-1} \rangle|$ 来刻画, 系统此时处于条纹反铁磁状态. 当 $0 < J_{yy} < 0.5$, 局域磁化强度 $\langle \sigma_i^z \rangle$ 值非 0, 表明发生了自发对称破缺, 符号分布为 $\cdots + - + - \cdots$, 量子基态波函数具有平移两个格点不变的特性, 此特征可以用反铁磁序参量 $O_{\text{AF}} = \frac{1}{2} |\langle \sigma_{2i} - \sigma_{2i-1} \rangle|$ 来刻画, 系统此时处于反铁磁状态. 单调奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{+, y}$ 仅在 $J_{yy} > 0.5$ 区域具有非零值, 表明此区域发生了 $Z_2 \times Z_2$ 隐性自发对称破缺, 系统处于单调奇数 Haldane 相. 单调的原因在于: 波函数的

结构由哈密顿量 (1) 式的奇数键上的控制参数 $J_{yy} > 0$ 和偶数键上的控制参数 $J_{zz} > 0$ 占主导地位. 类似地, 图 3(b) 和图 3(c) 分别显示 $J_{yy}^c = 0.0$ 和 $J_{yy}^c = 0$, 奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{+, y}$ 仅在 $J_{yy} > 0$

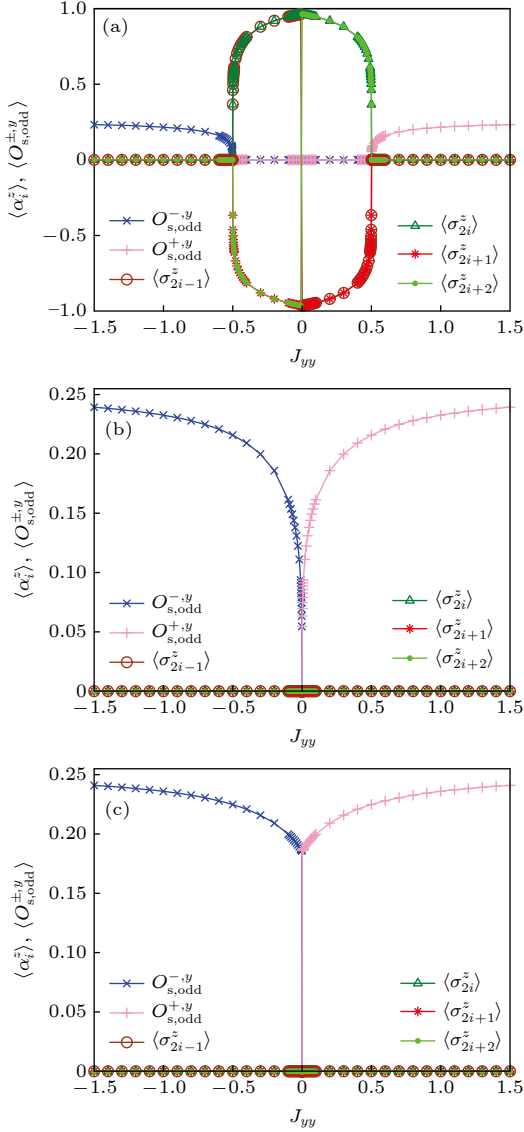


图 3 局域磁化强度 $\langle \sigma_i^z \rangle$ 奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ 随控制参数 J_{yy} 变化 (a) $J_{yy} < -0.5$ 属于振荡奇数 Haldane 相, $-0.5 < J_{yy} < 0$ 属于条纹反铁磁相, $0 < J_{yy} < 0.5$ 属于反铁磁相, $J_{yy} > 0.5$ 属于单调奇数 Haldane 相; (b), (c) $J_{yy} < 0$ 属于振荡奇数 Haldane 相, $J_{yy} > 0$ 属于单调奇数 Haldane 相 Fig. 3. Local magnetization $\langle \sigma_i^z \rangle$ and odd string correlation order parameter $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ as a function of controlling parameter J_{yy} : (a) The system clearly shows the oscillatory odd Haldane phase for $J_{yy} < -0.5$, SAF phase for $-0.5 < J_{yy} < 0$, AF phase for $0 < J_{yy} < 0.5$ and the monotonic odd Haldane phase for $J_{yy} > 0.5$ with fixed $J_{xx} = 0.5$; (b), (c) the system clear shows the oscillatory odd Haldane phase for $J_{yy} < 0$ and the monotonic odd Haldane phase for $J_{yy} > 0$ with fixed $J_{xx} = 1$ and $J_{xx} = 1.2$, respectively.

区域具有非零值以及 $O_{s, \text{odd}}^{+, y}$ 仅在 $J_{yy} < 0$ 区域具有非零值, 这表明在 y 方向发生了隐性自发对称破缺, 分别处于单调奇数 Haldane 相和振荡奇数 Haldane 相.

4.3 临界指数

在靠近相变点的过程中, 序参量和控制参数之间存在着某类不依赖于具体量子系统的普适发散关系, 该发散关系可以通过一个幂次标度关系式来表示, 关系式中的幂次律指数就是临界指数. 临界指数可以确定量子相变普适类所属类型, 从本质上反应相变的性质. 图 4 给出了 $J_{xx} = 0.5$ 时, 局域磁化强度 $|\langle \sigma_i^z \rangle|$ 和奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ 随控制参数 $|J_{yy} - J_{yy}^c|$ 在相变点 $J_{yy}^c = -0.5$ 和 $J_{yy}^c = 0.5$ 附近的标度关系, 即 $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y} \propto |J_{yy} - J_{yy}^c|^{2\beta}$ 和 $|\langle \sigma_i^z \rangle| \propto |J_{yy} - J_{yy}^c|^\beta$. 应用以上标度关系, 从 Fitting 1 到 Fitting 4 拟合得到了临界指数 $\beta_1 = 0.122$, $\beta_2 = 0.124$, $\beta_3 = 0.124$ 和 $\beta_4 = 0.124$. 所有的临界指数 $\beta \approx 1/8$ 表明系统相变的普适类属于 Ising 类.

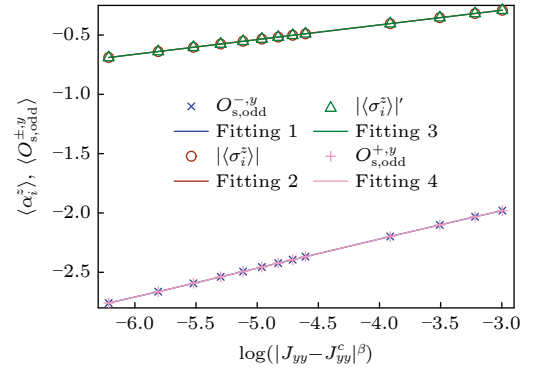


图 4 局域磁化强度 $|\langle \sigma_i^z \rangle|$ 和奇数弦关联序参量 $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ 与控制参数 $|J_{yy} - J_{yy}^c|$ 标度关系

Fig. 4. Local magnetization $|\langle \sigma_i^z \rangle|$ and odd string correlation order parameter $O_{s, \text{odd}}^{\pm, y}$ as a function of the distance of controlling parameter $|J_{yy} - J_{yy}^c|$.

5 冯诺依曼熵和中心荷

冯诺依曼熵是来源于量子信息的一个概念, 它可以测量系统的二分纠缠, 并通过二分纠缠的反常行为来反映系统量子相变的发生, 有效性已得到广泛证实^[38–42]. 为了探测 QCC 的量子相变, 首先对它进行定义. 考虑第 2 节介绍的 MPS 表示的量子基态 $|\varphi\rangle$, 它由 Schmidt 分解系数 λ_α 连接的左右两个半无限链 $L(-\infty, \dots, i)$ 和 $R(i+1, \dots, +\infty)$

构成. 因此, 量子基态 $|\varphi\rangle$ 可以重新改写为 $|\varphi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha} |\varphi_{\alpha}^L\rangle |\varphi_{\alpha}^R\rangle$. 此处 $|\varphi_{\alpha}^L\rangle$ 和 $|\varphi_{\alpha}^R\rangle$ 分别是左右两个半无限链的 Schmidt 基矢. 通常地, 冯诺依曼熵可以被定义为 $S = -\text{tr} \rho_L \log \rho_L = -\text{tr} \rho_R \log \rho_R$. 这里的 $\rho_L = \text{tr}_R \rho$ 和 $\rho_R = \text{tr}_L \rho$ 分别是左右两个半无限链 L 和 R 的约化密度矩阵, $\rho = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ 是整条链的约化密度矩阵. 利用 Schmidt 正规化的特性^[18], 冯诺依曼熵 S 可以进一步简化为^[38–42]

$$S = - \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 \log \lambda_{\alpha}^2. \quad (6)$$

由于 QCC 的哈密顿量 (1) 式具有平移 4 个格点不变的特性, (6) 式中的 α 可以取 A, B, C 和 D , 所以对应的冯诺依曼熵应该有 S_A, S_B, S_C 和 S_D . 注意到冯诺依曼熵在奇数格点和偶数格点上的值相等, 即 $S_{\text{odd}} = S_A = S_C$ 与 $S_{\text{even}} = S_B = S_D$. 在此基础上, 可以进一步提取在临界点处的中心荷 c . 在一维 (1D) 临界系统中, 冯诺依曼熵和空间键维度 χ 的半对数标度保持了共形不变的特性, 而这个标度的核心作用就是可以从中提取出一个和共形场论相关的一个普适因子, 这个普适因子就是中心荷 c . 此外, 临界系统的关联长度 ξ 和空间键维度 χ 也存在着对数标度关系. 这两个标度关系可以写为^[38–42]

$$S_{\chi} \propto \frac{c\kappa}{6} \log \chi, \quad \xi_{(\chi)} \propto \xi_0 \chi^{\kappa}, \quad (7)$$

这里的 ξ_0 是一个常数, κ 是有限纠缠标度指数. 对于确定的 χ , 关联长度 ξ 可以通过转移矩阵的第一大本征值 $D_0(\chi)$ 和第二大本征值的比值得到, 即 $\xi_{(\chi)} = 1 / \log |D_0(\chi) / D_1(\chi)|$. 图 5(a) 给出了空间键维度 $\chi = 32$, $J_{xx} = 0.5$ 时, 冯诺依曼熵 S_{odd} 和 S_{even} 随控制参数 J_{yy} 的变化情况. 当 $J_{yy} = -0.5$ 和 0.5 时, S_{odd} 和 S_{even} 表现出了反常行为, 表明在 $J_{yy}^{c1} = -0.5$ 和 $J_{yy}^{c3} = 0.5$ 处系统发生了量子相变, 这与 4.1 节和 4.2 节得到的结果一致. 同时可以注意到, 相变点 $J_{yy}^{c1} = -0.5$ 与 $J_{yy}^{c3} = 0.5$ 对应的冯诺依曼熵和关联长度的值都相等, 意味着它们提取出的中心荷 c 应该相等, 进而两处的普适类应该一致. 为了简洁, 以相变点 $J_{yy}^{c3} = 0.5$ 为例. 应用方程 (6) 和方程 (7), 就可以得到中心荷 c . 图 5(b) 和图 5(c) 给出了冯诺依曼熵 S_{odd} 和 S_{even} 与关联长度 ξ 随空间键维度 χ 的标度关系, χ 的取值范围为 4–60. 当空间键维度 χ 增大时, 冯诺依曼熵 S_{odd} 和 S_{even} 与关联长

度 ξ 都表现出了发散行为. 为了方便提取中心荷, 采取方程 (7) 的半对数和对数形式, 即 $\log \xi_{(\chi)} = \kappa \log \chi + a$ 和 $S_{\chi} = \frac{c\kappa}{6} \log \chi + b$ 来拟合数据. 拟合数据如下: 1) 对 Fitting 1, $\kappa_1 = 2.0519$, $a_1 = -0.6169$, $c_1 = 0.4907$ 和 $b_1 = 0.8359$; 2) 对 Fitting 2, $\kappa_2 = 2.0519$, $a_2 = -0.6169$, $c_2 = 0.5015$ 和 $b_2 = 0.3162$. 在误差范围内, 两个中心荷的值都支持 $c = 1/2$. 因此, 在反铁磁相/条纹反铁磁相与单调奇数 Haldane 相/振荡奇数 Haldane 相之间发生的相变普适类属于 Ising 类型. 这与临界指数 $\beta = 1/8$ 的结论一致.

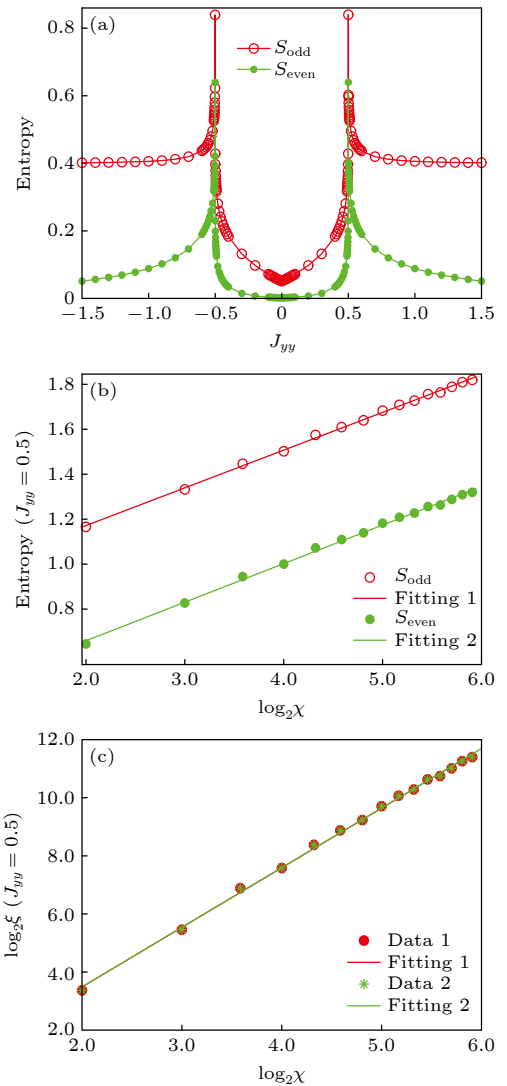


图 5 (a) 冯诺依曼熵 S_{odd} 和 S_{even} 随控制参数 J_{yy} 增加的变化行为; (b), (c) 冯诺依曼熵 S_{odd} , S_{even} 和关联长度 ξ 随控制参数 χ 的标度关系

Fig. 5. (a) Behaviors of von Neumann entropy S_{odd} and S_{even} with the increase of controlling parameter J_{yy} ; (b), (c) von Neumann entropy S_{odd} , S_{even} and the correlation length ξ as a function of the truncation dimension.

6 总 结

利用矩阵乘积态表述的无限时间演化块算法,研究了具有 x, y, z 三个自旋方向的轨道自由度和轨道序竞争的 QCC 模型. 计算了基态能量、局域序参量、弦关联序参量、临界指数、冯诺依曼熵、有限纠缠标度和中心荷. 结果表明: 该量子基态相图由发生自发破缺产生的条纹反铁磁相和反铁磁相以及由发生隐性自发对称破缺产生的单调奇数 Haldane 相和振荡奇数 Haldane 相构成. 从条纹反铁磁相到反铁磁相, 以及从单调奇数 Haldane 相到振荡奇数 Haldane 相发生了非连续相变; 从振荡奇数 Haldane 相到条纹反铁磁相, 以及从反铁磁相到单调奇数 Haldane 相发生了连续相变; 连续相变线和非连续相变线的交点是多临界点. 此外, 连续相变点处的临界指数 $\beta = 1/8$ 和中心荷 $c = 1/2$ 表明连续相变的普适类属于 Ising 类. 揭示了该模型量子基态相图的本性, 对今后研究更高自旋以及更为复杂轨道序竞争的量子罗盘自旋链模型的量子相与相变具有一定借鉴与参考意义.

参考文献

- [1] Pollmann F, Fuji Y, Oshikawa M 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 177204
- [2] Affleck I, Kennedy T, Lieb E H, Tasaki H 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 799
- [3] Kennedy T 1990 *J. Phys. Condens. Matter* **2** 5737
- [4] Gu Z C, Wen X G 2009 *Phys. Rev. B* **80** 155131
- [5] Pollmann F, Berg E, Turner A M, Oshikawa M 2012 *Phys. Rev. B* **85** 075125
- [6] Takashi T, Kiyomi O, Hiroki N, Toru S, Kiyohide N, Makoto K 2011 *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 043001
- [7] Feng X Y, Zhang G M, Xiang T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 087204
- [8] Wang Z, Li Q, Li W, Cai Z 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 237201
- [9] Yang Y, Ran S J, Chen X, Sun Z Z, Gong S S, Wang Z, Su G 2020 *Phys. Rev. B* **101** 045133
- [10] Anderson P W 1997 *Basic Notions of Condensed Matter Physics* (New Jersey: Addison-Wesley) pp69–129
- [11] Coleman S 1975 *An Introduction to Spontaneous Symmetry Breakdown and Gauge Fields: Laws of Hadronic Matter* (New York: Academic Press) pp138–215
- [12] Kosterlitz J M, Thouless D J 1974 *J. Phys. C* **6** 1181
- [13] Gu S J, Lin H Q 2009 *EPL* **87** 10003
- [14] He Y Y, Xu X Y, Sun K, Assaad F, Meng Z Y, Lu Z Y 2018 *Phys. Rev. B* **97** 08110(R)
- [15] Wang X Q, Zhu N, Chen C 2002 *Phys. Rev. B* **66** 172405
- [16] Lu L, Shao S, Lin Y C, Guo W A, Sandvik A W 2018 *Phys. Rev. X* **8** 041040
- [17] Kotov V N, Yao D X, Neto A H C, Campbell D K 2009 *Phys. Rev. B* **80** 174403
- [18] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153
- [19] Chen X H, Wang X J 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 190301 (in Chinese) [陈西浩, 王秀娟 2018 物理学报 **67** 190301]
- [20] Chen X H, McCulloch I, Batchelor M T, Zhou H Q 2020 *Phys. Rev. B* **102** 085146
- [21] Quella T 2021 *Phys. Rev. B* **103** 054404
- [22] Kugel K I, Khomskii D I 1973 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **64** 1429
- [23] Chen H D, Fang C, Hu J, Yao H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 144401
- [24] Eriksson E, Johannesson H 2009 *Phys. Rev. B* **79** 224424
- [25] Wang H T, Cho S Y 2015 *J. Phys. Condens. Matter* **27** 015603
- [26] Liu G H, Li W, You W L, Tian G S, Su G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 184422
- [27] Liu G H, Kong L J, Deng X Y, You W L 2015 *Solid State Commun.* **209** 210
- [28] Liu G H, Kong L J, Deng X Y, You W L 2015 *Eur. Phys. J. B* **88** 284
- [29] Brzezicki W, Oles A M 2016 *Phys. Rev. B* **93** 214402
- [30] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070201
- [31] Zhou H Q 2008 arXiv: 0803.0585 v1 [cond-mat.stat-mech]
- [32] Bowley R, Sanchez M 2000 *Introductory Statistical Mechanics* (Oxford: Oxford University Press) pp236–239
- [33] den Nijs M, Rommelse K 1989 *Phys. Rev. B* **40** 4709
- [34] Tasaki H 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 798
- [35] Hida K 1992 *Phys. Rev. B* **45** 2207
- [36] Hida K 1992 *Phys. Rev. B* **46** 8268
- [37] Hida K, Takada K, Suzuki H 2013 *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 064703
- [38] Pollmann F, Mukerjee S, Turner A M, Moore J E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 255701
- [39] Tagliacozzo L, Oliveira T R, de Iblisdir S, Latorre J I 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024410
- [40] Korepin V E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 096402
- [41] Calabrese P, Cardy J J 2004 *Stat. Mech.* **0406** P06002
- [42] Bennett C H, Bernstein H J, Popescu S, Schumacher B 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2046

Quantum phases and transitions of spin-1/2 quantum compass chain*

Chen Xi-Hao¹⁾ Xia Ji-Hong²⁾ Li Meng-Hui³⁾

Zhai Fu-Qiang^{1)†} Zhu Guang-Yu^{2)‡}

1) (*Research Institute for New Materials and Technology, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China*)

2) (*School of Electronic Information and Electrical Engineering, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China*)

3) (*Key Laboratory of Optoelectronic Technology & Systems, Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400044, China*)

(Received 3 August 2021; revised manuscript received 30 September 2021)

Abstract

Quantum phases (QPs) and quantum phase transitions (QPTs) are very important parts of the strongly correlated quantum many-body systems in condensed matter. To study the QPs and QPTs, the systems should include rich quantum phase diagram. In this sense, the corresponding quantum spin models should have strong quantum fluctuation, strong geometric frustration, complicated spin-spin exchange or orbital degrees of freedom, which induces a variety of spontaneous symmetry breaking (SSB) or hidden spontaneous symmetry breaking. The QPs induced by the SSB can be characterized by local order parameters, a concept that originates from Landau-Ginzburg-Wilson paradigm (LGW). However, there is also a novel class of topological QPs beyond LGW, which has aroused one's great interest since the Haldane phase was found. Such QPs can be characterized only by topological long-range nonlocal string correlation order parameters instead of local order parameters. In this paper, we investigate a spin-1/2 quantum compass chain model (QCC) with orbital degrees of freedom in x , y and z components. The prototype of QCC is the quantum compass model including novel topological QPs beyond LGW, and consequently one can also anticipate the existence of novel topological QPs in QCC. However, very little attention has been paid to the QPs and QPTs for QCC, which deserves to be further investigated. By using the infinite time evolving block decimation in the presentation of matrix product states, we study the QPs and QPTs of QCC. To characterize QPs and QPTs of QCC, the ground state energy, local order parameter, topological long-range nonlocal string correlation order parameters, critical exponent, correlation length and central charge are calculated. The results show the phase diagram of QCC including local antiferromagnetic phase, local stripe antiferromagnetic phase, oscillatory odd Haldane phase and monotonic odd Haldane phase. The QPTs from oscillatory odd Haldane phase to local stripe antiferromagnetic phase and from local antiferromagnetic phase to monotonic odd Haldane phase are continuous; on the contrary, QPTs from local stripe antiferromagnetic phase to local antiferromagnetic phase and from oscillatory odd Haldane phase to monotonic odd Haldane phase are discontinuous. The crossing point where the line of continuous QPTs meets with the line of discontinuous QPTs is the multiple critical point. The critical exponents β of local antiferromagnetic order parameter, local stripe antiferromagnetic order parameter, topological long-range nonlocal oscillatory odd string correlation order parameter, and topological long-range nonlocal monotonic odd string correlation order parameter are all equal to $1/8$. Moreover, $\beta = 1/8$ and the central charges $c = 1/2$ at the critical points show that the QPTs from local phases to nonlocal phases belong to the Ising-type universality class.

Keywords: quantum phase transition, string correlation, topological order, critical exponent

PACS: 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Hk

DOI: 10.7498/aps.71.20211433

* Project supported by the Talent Introduction Research Funds of Chongqing University of Arts and Sciences, China (Grant No. R2019FXCo7), the Research Program of Chongqing Municipal Education Commission, China (Grant No. KJQN201901348), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11805285).

† Corresponding author. E-mail: zhaifuqiang@cqwu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zhuguangyu@cqwu.edu.cn