

《物理学报》创刊 90 周年

# 拓扑激发驱动的热力学相变及其 张量网络研究方法

宋峰峰 张广铭<sup>†</sup>

(清华大学物理系, 北京 100084)

(2023 年 7 月 17 日收到; 2023 年 8 月 4 日收到修改稿)

对热力学相及相变的认知构成了我们理解整个物质世界的物理基础, 从朗道对称破缺相变范式到拓扑激发驱动的热力学相变, 相变理论的研究发展在物质科学进步之路上树立起了一座座丰碑. 一个著名的例子就是 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 相变, 它是在从低温到高温的演变过程中,  $U(1)$  旋转对称性没有自发破缺情形下, 成对涡旋的解耦合所致. 近期, 人们利用张量网络表示理论和数值计算方法, 将统计模型的转移矩阵对应为一维量子模型. 再根据量子模型纠缠熵的奇异性, 在热力学极限下可以精确确定系统的相图, 并准确计算各种物理量, 该研究方法为研究具有连续对称性的二维系统的拓扑相变注入了新活力.

**关键词:** 拓扑激发, 热力学相变, 张量网络**PACS:** 03.75.Lm, 74.50.+r, 64.60.Bd**DOI:** 10.7498/aps.72.20231152

## 1 引言

道生一, 一生二, 二生三, 三生万物. 大千世界, 纷繁复杂, 流转变, 永无止息. 对物质世界的感知和认识的不断深入贯穿了整个科学和哲学的发展历史. 不同的物质形态称为物相, 它是物质的宏观特性, 在一定参数区间内保持稳定. 对于一杯冰水来说, 冰块、水、水面上的水蒸气连同盛水的玻璃杯各自归属不同的物相. 从凝聚态物理和演生论思想<sup>[1,2]</sup>的角度看, 不同的物性由其内部微观组织形式所决定, 这种组织形式也叫作序. 物相之间的转变即为相变, 相变的发生伴随着组织结构的变化. 比如, 冰融化为水对应着大量分子规则排列结构的消失. 组织结构的变化是一种集体效应, 组成系统的所有个体相互关联共同参与, 强烈的涨落会造成宏观物理量出现不连续性. 相变发生时还可以观察到奇异的临界现象, 比如临界乳光效应便是因为密度涨落导致散射加强, 使得原本澄清的液体显

出浑浊的乳白色.

除了常见的固、液、气三态, 人们还发现了铁磁、反铁磁、超导、超流、等离子体、液晶等多种物态. 乱花渐欲迷人眼, 面对如此丰富的物态, 人们一直想找到一个普适性的理论来刻画不同的物相和相变. 在凝聚态物理的历史发展中, 演生论思想逐渐成为共识, 帮助人们开不二之法, 观大千之世界. 在演生论的观点下, 物性是由其组成单元的组织形式决定的, 不同的组织层级具有不同的规律, 这一规律独立于构成单个粒子的物理性质. 秉持这一思想, 20 世纪 30 年代开始, 朗道和金兹堡提出了描述相和相变的一般性理论<sup>[3,4]</sup>, 即自发对称性破缺的相变范式. 从高温到低温, 经历一系列相变, 系统的对称性逐步破缺, 相应的各种有序逐步建立. 比如水蒸气凝结成水再凝固成冰, 便伴随着平移对称性的逐步破缺和位置有序的形成. 利用对称性自发破缺的概念, 朗道的理论成功解释了相变如何在不同对称性之间发生, 以及相应的低能激发如何影响系统的性质. 朗道的相变范式对于人们

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: gmzhang@tsinghua.edu.cn

理解物质世界影响深远,成为凝聚态物理学大厦的重要基石。

然而,大自然总是比我们想象中的更加丰富奇妙。就在人们心满意足地徜徉于朗道相变范式的美妙,以为所有相变规律都已经掌握时,低维物理系统中的实验发现向对称性破缺的铁律提出了挑战。低维系统中的热涨落非常强,足以阻止连续对称性在低温下的自发破缺的出现<sup>[5]</sup>。但实验上却探测到了相变,理论和实验之间产生了明显的分歧,让人们困惑不已。20世纪70年代初,英国物理学家科斯特利茨(Kosterlitz J M)和索利斯(Thouless D)<sup>[6,7]</sup>,苏联物理学家别列津斯基(Berezinskii V)<sup>[8]</sup>分别提出在具有 $U(1)$ 旋转对称性的低维系统中存在拓扑涡旋激发。利用拓扑涡旋激发的概念,人们终于使这个问题柳暗花明。相变的产生不是因为对称性发生改变,而是由于成对的拓扑涡旋解开耦合。与从高温到低温的对称性破缺思路不同,拓扑激发得从低温往高温看,随着温度升高大量产生的拓扑激发驱使系统发生相变。这一发现犹如爱丽丝掉进兔子洞,一个由拓扑物相描绘的全新广阔世界在人们眼前展开。

回顾经典体系中相变理论的发展历史,尤其是朗道相变范式和拓扑激发驱动的相变理论。从这些朴素而深刻的精神出发,我们将看到,离散自由度和连续自由度互相影响,密不可分,对称性和拓扑激发概念相辅相成,缺一不可,经典统计模型也可以如万花筒般复杂多姿,蕴含深邃的相变之道。

## 2 朗道相变范式

朗道相变理论是朗道为描述连续(二阶)相变而提出的普适理论。其形式简单,物理图像清晰,为平均场理论之集大成者。其核心思想是,物相的序由其对称性刻画,相变的发生伴随着系统对称性的自发破缺。它可以适用于外场下的系统,也能定量描述一阶相变。这一变革性的理论,可以给不同领域的物理现象提供统一的解释,深刻影响了理论物理的发展。

相变来自于两种因素的相互竞争,组成粒子间的相互作用倾向于形成能量最低的有序结构,而粒子热运动倾向于破坏微观粒子间的秩序增大混乱度。这两种竞争可以用自由能来概括,它是各种热力学参量的函数。如此一来,相变的类型便可以通

过自由能最低阶导数的奇异性来区分。在现代相变分类方案中,相变被分为两大类:一级相变和连续相变。

一级相变指的是涉及有潜热的相变。一级相变表现为自由能本身连续,但相对于某些热力学参量的一阶导数不连续。在这样的相变过程中,系统要么吸收要么释放固定的热量,但系统的温度不随热量吸收或放出而改变。此时系统处于混合状态,系统的某些部分已经完成了相变,而其他部分还没有。常见的例子如水的沸腾,在沸腾时水不会立即全部变成蒸气,而是形成液态水和蒸气泡的混合物。

二级相变也被称为连续相变。在含有气液共存态的系统中,一级气液相变线的末端存在一种特殊的相变点,称为临界点。在这个临界点上,液态和气态之间的相变是一个二级相变。在临界点附近,液体被充分加热,液态和气态之间的区别几乎不存在了。二级相变发生时自由能的一阶导数是连续的,但二阶导数表现出不连续性。二级相变的特点是系统的热力学量表现出奇异性,临界点附近关联函数的幂律衰减。

以单轴各向异性铁磁体中的相变为例,其中每个自旋只能相对某个特定轴同向或反向排列,该体系可以用Ising模型来描述:

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} s_i s_j - h \sum_j s_j, \quad (1)$$

其中 $s_i = +1$ 或 $-1$ 代表自旋朝向; $J_{ij} = J > 0$ 是最近邻铁磁耦合; $h$ 是外磁场; $\langle i, j \rangle$ 历遍所有最近邻自旋对。图1(a)展示了一种可能的自旋构型。先考虑没有外磁场的情况。在低温下,每对自旋之间的相互作用促使它们两两同向排列以减小能量,整体会出现平行排列的倾向。如图1(b)所示,当温度低于某个阈值 $T_c$ 时,集体有序的效应占主导,系统具有不为零的净磁化强度 $M \neq 0$ ,称为铁磁相。当温度 $T > T_c$ ,自旋热涨落会破坏集体有序,推动系统进入顺磁相,净磁化强度 $M=0$ 。在临界温度 $T_c$ 处发生的顺磁-铁磁相变是二级相变,其序参量是自由能的一阶导数:

$$M = - \left( \frac{\partial G}{\partial H} \right)_{T, P}. \quad (2)$$

在相变点连续变化,但磁化率作为自由能的二阶导数会出现奇异性。

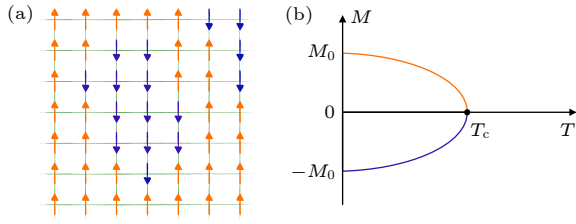


图 1 (a) 正方晶格上的 Ising 自旋模型, 所有自旋只能取上下两个方向; (b) 二维 Ising 自旋模型的序参量随温度的变化,  $T_c$  为二级相变临界点. 从图 (b) 可以看到, 实验中观测到的磁化强度方向在  $T_c$  之下只能取上下两者之一, 就像抛出一枚硬币, 尽管正反面的概率是一样的, 但是每次只是得到其中一种结果. 如果给系统施加一个外磁场  $h$ , 磁化强度方向便会完全被外场方向确定

Fig. 1. (a) Example of the classical Ising spin model on a two-dimensional (2D) square lattice, where all discrete spins can be in one of two states (+1 or -1) corresponding to the upper and lower directions; (b) temperature dependence of the order parameter (magnetization) with  $T_c$  denoting the critical temperature of the second-order phase transition. From Fig. (b), we can see that the magnetization direction observed in experiments can only take one of the upper and lower directions below  $T_c$ . Just like tossing a coin, although the probability of heads and tails are the same, we just get one of the results each time. If an external magnetic field  $h$  is applied to the system, the direction of the magnetization is then completely determined.

20 世纪 30 年代, 人们对气液之间的一级相变已经有了一定的理解, 但是对临界点处的二级相变充满困惑. 人们无法理解, 在气液相变或晶体相变时系统的微观粒子对称性发生了变化, 而对称性不会折中, 只能是有或没有, 那相变怎么可能是连续的呢? 朗道最早注意到, 要描述晶体对称性的变化就要允许晶格原子位置发生改变, 用密度函数  $\rho(x, y, z)$  来表示晶体中原子的分布. 这个密度函数必须具有和晶格一样的对称性, 在晶格的对称群操作下不变. 对于各向同性的气体或液体,  $\rho$  为常数. 如此一来, 就可以将连续变化和离散变化联系起来, 密度函数  $\rho$  的微小变化足以引起晶格对称性的跳变,  $\rho$  的某些峰值稍有减小, 晶格平移周期立刻增大.

晶体的热力学势可以视为  $\rho$  的函数, 发生相变时  $\rho$  的对称性发生的改变会体现在热力学函数上. 反映系统在相变时发生对称性破缺的物理量, 叫作序参量. 序参量是度量对称性变化的物理量, 通常在某个临界温度以上为零 (高对称性), 在临界温度以下非零 (对称性破缺). 不同类型的相变可以选取不同的序参量, 对于气液相变, 可以用两相密度差

作为序参量. 临界点之上气液两相不可区分, 密度差为零, 低于临界温度时两相密度明显不同. 对于二维 Ising 模型所描述的顺磁-铁磁相变, 序参量可选为磁化强度, 它在临界温度以下会自发地变成非零, 标志着  $Z_2$  对称性的破缺.

在朗道理论中, 自由能函数是序参量的解析函数, 此时的序参量是粗粒化的平均场近似. 在许多具有某些对称性 (如反演对称性) 的系统中, 自由能只能是序参量的偶数次方的函数. 对于这些系统, 朗道自由能可以表示为级数展开:

$$F(T, \eta) = F_0 + a(T)\eta^2 + \frac{b(T)}{2}\eta^4 + \dots \quad (3)$$

这里的展开系数是唯象参数, 可以从实验测量中得到. 一般来说, 自由能中存在高阶项, 但只要序参量较小, 展开到四阶项就足够. 具体的阶次可以根据物理情况做调整, 比如讨论一级相变时需要添加六阶项. 为了使系统在热力学上保持稳定, 序参量的最高偶数次阶的系数必须为正. 但是, 系数  $a(T)$  在临界温度上下要变号, 以确保相变的发生, 同样可以做近似  $a(T) \approx a_0(T - T_c)$ . 在这些参数假设下, 可以通过自由能的极小值点定出序参量的值, 如图 2 所示.

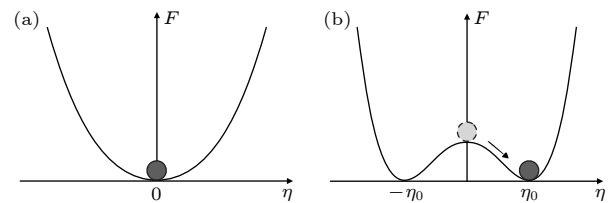


图 2 (a) 朗道自由能在临界温度之上只有一个最小值点, 出现在序参量为零的地方; (b) 朗道自由能在临界温度之下出现双井构型, 对称性发生自发破缺, 序参量选择两个极小值位置中的一点

Fig. 2. (a) The Landau free energy has only one minimum point above the critical temperature, occurring where the order parameter is zero; (b) the Landau free energy shows a double-well configuration below the critical temperature, where the symmetry is spontaneously broken and the order parameter chooses one of the two minima positions.

由于忽略了涨落和长程关联, 朗道理论得到的一些临界指数与真实值不符合, 后来的金兹堡判据指出朗道平均场论只有在空间维度大于 4 维时才有效<sup>[4]</sup>. 朗道相变理论成功地解释了二级相变的形成, 指出了气液相变和顺磁-铁磁相变属于同一普适类. 朗道提出的自发对称性破缺思想很有启发性, 临界点的非解析性行为是由于自由能的极小值



点发生分化,使得序参量的平衡值以非连续的方式变化.相变导致系统落到一个对称性小于其哈密顿量对称性的简并基态之一.自发对称性破缺不仅在凝聚态物理的发展中影响深远,它在整个物理学中都发挥了重要作用.

此后的几十年里,朗道理论的框架被不断完善.20世纪70年代初,Wilson和Kogut<sup>[9]</sup>发展了重正化群理论,进一步论证了临界现象的标度率,计算出准确的临界指数,并给出了普适性的自然解释.由于发生相变时系统关联长度无穷大,系统在标度变换下具有自相似性.重正化群方法就是抓住了系统在临界点的特性,不断进行粗粒化(实空间)或短波部分积分(动量空间)处理,得到耦合参数的重正化群变换方程.如此,便可以通过系统参数随尺度变化构成的重正化流图清晰地展示出整个相图结构.相变点对应流图上的不稳定不动点,处于同一不动点临界面的哈密顿量自然属于同一个普适类,构成了相变的一般性理论框架——朗道-金兹堡-威尔逊(Landau-Ginzburg-Wilson)理论体系,也被称为LGW范式,成为人类探索自然伟大航线上的一座灯塔,闪耀着对称性的光辉.

### 3 拓扑激发与相变

朗道范式以其深刻的物理洞察将相变纳入对称性破缺的框架中,逐渐成为放之四海而皆准的大道.然而,相变理论并没有因此画上句号,新的关于拓扑物理的篇章正在打开.人们在对一些二维物理系统进行实验研究中发现,即使对称性不发生破缺,系统也会经历相变.自发对称性破缺的范式,首先在具有连续对称性的低维系统中遇到了困境.20世纪70年代,科斯特利茨(Kosterlitz)和索利斯(Thouless)<sup>[6,7]</sup>通过对拓扑激发的研究,成功解决了二维经典XY模型中的相变问题,一举突破了朗道相变理论的框架.横看成岭侧成峰,如果说朗道范式是从高温到低温逐级破缺对称性导致各种相变的发生,那么拓扑激发则是从低温到高温不断产生从而驱动物态发生改变.拓扑激发的类型蕴含了系统对称性的信息,推动了在朗道相变范式的基础上对对称性破缺理论的超越.

前面通过朗道自由能分析离散对称性的自发破缺时,系统会自发选择其中一个低对称性的基态,从而发生相变.其实,对称性自发破缺是

受空间维度约束的.对于具有连续对称性的系统,只有在空间维度 $d > 2$ 时才能发生自发对称性破缺.

考虑一个具有连续 $O(n)$ 对称性的自旋模型,根据朗道自由能函数得知,当 $T > T_c$ 时,自由能只有一个极小值出现在序参量为零的地方,系统处于高温对称态.当 $T < T_c$ 时,系统极小值构成一个半径确定的圆,具有无穷多个简并态.这意味着,如果发生自发对称性破缺,所有自旋沿着同一方向排列,在无穷小的外场下该排列方向就能发生改变.也就是说在垂直于磁化方向存在无能量的涨落.这就是所谓的戈德斯通(Goldstone)定理<sup>[10]</sup>,对应的无能隙的长波激发叫作戈德斯通模.后来梅尔曼-瓦格纳(Mermin-Wagner)定理指出,在有限温度下,戈德斯通模式的热涨落会破坏长程有序,阻止一维和二维系统在有限温度下的自发对称性破坏,即长程有序只有在三维及以上才能建立<sup>[11]</sup>.可以把二维想象成一个鼓面,相距 $L$ 的两点会以 $\ln L$ 的幅度相对振动,而没有固定的平衡位置.如果这个振幅是二维平面转子的角度 $\theta$ ,则期待值 $\langle e^{i\theta} \rangle$ 必然为零.

可是在二维超导或超流等实验中的确观察到了热力学相变的发生,既然相变普适类由序参量和空间维度完全确定,这些系统应当和二维平面自旋模型一样不会发生相变.实验结果和朗道对称性自发破缺理论产生了巨大的矛盾.这里,可以从拓扑激发的角度再次理解空间维度与相变的关系.通过考察拓扑激发对自由能的影响,也可以推断出自发对称性破缺能否发生.

如图3(a)所示,对于一维Ising模型,从基态出发翻转一个自旋会产生两个畴壁,能量变化为 $\Delta E = 4J$ ,热力学熵为 $\Delta S = k_B \ln(N-1)$ ,其中 $N$ 是总的自旋数目.于是畴壁的激发对自由能的贡献为: $\Delta F = \Delta E - T\Delta S = 4J - k_B T \ln(N-1)$ .当 $N$ 足够大时,有限温度下的 $\Delta F$ 总是负值,意味着畴壁总是可以激发出来以减小自由能.因此,一维Ising模型在有限温度下没有相变.

然而,二维Ising模型在有限温度下存在相变,因为拓扑激发的性质不同.如图3(b)所示,当系统中激发出一条长度为 $L$ 的畴壁时,带来的能量变化为 $\Delta E \sim L$ .粗略来看,畴壁上的每一个点都有4个方向可能性,长度为 $L$ 的畴壁状态数约等于 $L^4$ .由于每段畴壁之间还有约束,这里实际上高估了

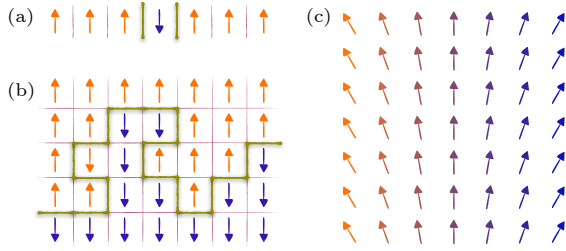


图3 (a) 一维 Ising 模型中翻转自旋会产生两个畴壁; (b) 二维 Ising 模型中一种可能的局部畴壁构型, 在周期性边界条件下畴壁闭合形成环路; (c) 不考虑涡旋类的点状激发时,  $d$  维连续自旋模型中线度为  $L$  的畴壁切面, 相邻自旋角度缓慢变化

Fig. 3. (a) Two domain walls are created by flipping the spin in the one-dimensional (1D) classical Ising model; (b) a possible local domain wall configuration in the two-dimensional Ising model. The domain walls should close into loops under periodic boundary conditions; (c) a domain wall cross-section of size  $L$  in the  $d$ -dimensional continuous spin model with slowly varying angles between neighboring spins when vortex-like excitations are not taken into consideration.

状态数, 但是不影响结论. 这样畴壁的热力学熵为  $\Delta S \sim k_B L$ , 对自由能总的贡献为

$$\Delta F \propto (J - \alpha k_B T) L, \quad (4)$$

其中  $\alpha$  是个比例系数. 可见低温下  $\Delta F > 0$  会抑制畴壁激发, 使得大部分自旋取向一致, 从而有非零的磁化强度, 即对称性发生自发破缺. 这也是皮尔斯 (Peierls R)<sup>[12]</sup> 当年对二维 Ising 模型存在相变的证明方式.

对于连续自旋模型, 其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad (5)$$

其中  $J > 0$ ,  $\langle i, j \rangle$  表示对  $d$  维晶格中所有近邻格点对的求和. 考虑其中的低能激发, 与 Ising 模型不同, 相邻自旋之间的夹角可以缓慢变化, 形成一定

厚度的畴壁. 图 3(c) 展示了一个线度为  $L$  的畴壁截面, 每层之间错开一个很小的夹角  $\theta/L$ , 则总共的内能增量为

$$\Delta E \propto J \left(1 - \cos \frac{\theta}{L}\right) L \cdot L^{d-1} \propto J L^{d-2}. \quad (6)$$

当  $d \leq 2$  时, 能量不会随着  $L$  发散, 但热力学熵却会随  $L$  而增加, 总的自由能会随  $L$  而减小, 因此自旋波的激发不足以导致具有连续对称性的二维系统发生相变.

拓扑激发的类型与系统哈密顿量的对称性、相应的参数空间的拓扑结构密切相关, 也是预测和理解系统的行为的基础. 如图 4 所示, 当系统出现拓扑激发, 如畴壁、漩涡、或单极子时, 由其引发的相变被称为拓扑激发驱动的相变. 在这种情况下, 系统的宏观性质会发生变化, 例如能量密度或磁化强度.

在单轴各向异性铁磁体中, 序参量是磁化强度, 系统的  $Z_2$  对称性只允许畴壁一种拓扑激发. 畴壁是磁化方向不同的区域之间的界面, 如图 4(a) 所示. 畴壁的激发会影响材料的磁性, 如其矫顽力场或磁感应强度. 这种拓扑激发引起的相变属于二维 Ising 普适类, 对二维 Ising 的严格解是相变理论发展的一个里程碑<sup>[13]</sup>.

在复函数作为序参量的超导体中, 序参量是库珀对的波函数可以用具有  $U(1)$  对称性的二维 XY 模型描述. 除了自旋波, 其空间拓扑结构还允许漩涡的形成. 如图 4(b) 所示, 漩涡是一种拓扑缺陷, 由于哈密顿量在局域变换  $\theta_i \rightarrow \theta_i + 2\pi$  下保持不变, 其局部序参量绕着一个点旋转会有  $2\pi$  整数倍的变化:

$$\oint_C d\mathbf{r} \nabla \theta(\mathbf{r}) = 2n_C \pi. \quad (7)$$

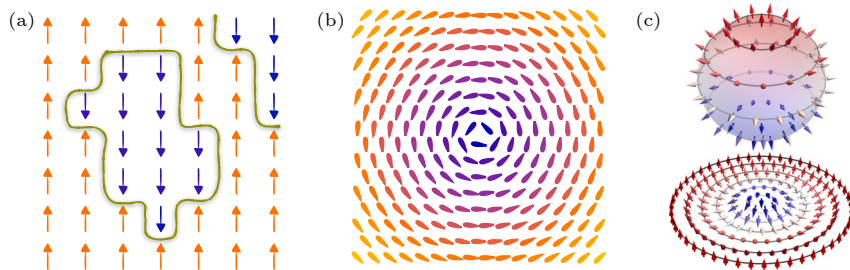


图4 不同系统中可能存在的拓扑激发 (a) 二维 Ising 模型中的畴壁激发; (b) 二维 XY 模型中涡旋的激发; (c) 二维磁性材料中 Néel 型斯格明子的激发可以投影到三维刺球上, 南北极分别与中心和边缘对应

Fig. 4. Possible topological excitations in different systems: (a) Excitations of domain walls in the 2D Ising model; (b) excitations of vortices in the 2D XY model; (c) excitations of Néel-type skyrmions in 2D magnetic materials can be projected onto a 3D hairy sphere, with the south and north poles corresponding to the center and edge, respectively.

当温度达到临界温度时, 漩涡对的打开导致超导相向正常相转变, 后者的导电性远低于前者. 漩涡携带磁通量, 涡旋对的解耦合会破坏相位相干性, 导致超导性的丧失<sup>[6-8]</sup>.

磁性系统中系统可以产生类似单极子的拓扑激发, 如图 4(c) 所示, 例如斯格明子的产生就和其参数空间的非平凡拓扑有关<sup>[14]</sup>. 当序参量空间有一个非平凡的第二同伦群时, 就会出现斯格明子. 比如磁性材料中的斯格明子的拓扑数可以用缠绕数来刻画. 这个缠绕数描述磁单极子的行为, 表现为磁通的源或汇:

$$n = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{M} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (8)$$

其中  $\mathbf{M}$  为二维磁性薄膜局域磁感应强度的方向矢量.

在 20 世纪 70 年代初, 人们还深陷朗道范式无法解决 XY 模型中的相变问题这一困境, 但拓扑激发的概念已经开始进入凝聚态物理学的领域. 这既是妙手偶得, 也是必然, 因为索利斯当时已经认识到以  $1/r^2$  相互作用的一维 Ising 自旋链中的拓扑激发——畴壁之间以  $\ln r$  的形式相互作用, 会导致相变的发生. 科斯特利兹和索利斯<sup>[6]</sup>意识到, 低能自旋波激发仅仅能摧毁长程序, 却不足以导致相变. 要产生相变必须引入更加高能量的激发, 以产生类似二维电子气的相互作用, 于是拓扑激发 (涡旋) 的概念应运而生. 当时他们所考虑的拓扑是由几何结构及相应的能量决定的, 相变被认为是在不同拓扑不变量所表示的拓扑区之间的变化. 这里的拓扑不变量类似于甜甜圈和橘子的表面, 对应的拓扑不变量 (孔洞的数量) 是 1 和 0. 拓扑不变量具有稳定性, 改变它需要付出巨大的能量代价.

新的开创性思想超越了传统朗道对称性破缺理论框架, 拓扑激发可以在没有自发破缺对称性的情况下推动热力学相变的发生, 顺利解决了实验与严格的数学定理的标准解释之间的严重矛盾. 在超流体、超导体和液晶等二维薄膜中, 拓扑缺陷驱动的相变使得人们深刻地认识到这些物理系统中拓扑相存在的机制, 这种全新的由拓扑激发驱动的 BKT (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless) 相变理论为拓扑物态研究之滥觞<sup>[15,16]</sup>.

由此发端, 从拓扑角度分类各种新奇物态的精神蔚然成风, 理论和实验的发展日新月异. 在过去五十年里, 拓扑相的发现不仅推动了凝聚态物理学

的发展, 也促进了量子信息、量子材料、甚至高能物理和弦理论研究. 由拓扑缺陷的涨落驱动的相变产生的无序态没有拓扑序, 对应于非拓扑相变. 相反, 往往是没有拓扑缺陷的涨落驱动的相变会产生具有非平庸拓扑序的无序态, 对应于通常意义上的拓扑相变.

## 4 BKT 相变及其张量网络研究方法

### 4.1 二维经典 XY 模型

二维经典 XY 模型由单位长度的平面转子  $\mathbf{s} = (\cos\theta_i, \sin\theta_i)$  组成, 排列在如图 5(a) 所示的一个二维的正方格子上, 该系统的哈密顿量由以下公式给出:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (9)$$

其中  $J > 0$ ,  $\langle i, j \rangle$  表示对晶格中所有近邻格点对的求和;  $\theta_i$  表示  $i$  点上的转子相对于二维矢量空间中某个参考轴的转角. 当温度比较低的时候, 相邻自旋倾向于平行排列, 可以假定平面转子的方向在相邻格点之间平滑变化. 通过将相邻格点之间的角度差表示为偏导, 得到连续哈密顿量:

$$H = E_0 + \frac{J}{2} \int d\mathbf{r} (\nabla\theta)^2, \quad (10)$$

$E_0 = -2JN$  是  $N$  个自旋平行排列时的基态能量.

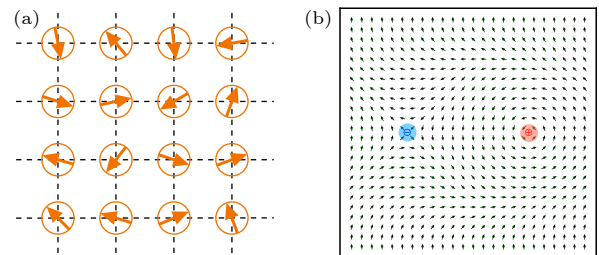


图 5 (a) 正方格子上经典二维 XY 模型的示意, 每个 XY 自旋都是单位长度的平面转子; (b) 正负涡旋配对, 绕单个正负涡旋一周自旋相角改变  $2\pi$ . 红色表示正涡旋, 蓝色表示反涡旋

Fig. 5. (a) Schematic representation of the classical 2D XY model on a square lattice, where each XY spin is denoted as a planar rotor of unit length; (b) a rough plot of a vortex-antivortex pair embedded in a quasi-long-range ordered system, where the nearby spins were originally pointing upwards. The vortices are point-like singularities around which spin directions rotate through an angle  $\pi$  on a circumnavigation. The red and blue circles denote the vortex and antivortex respectively.



把对  $\theta(r)$  的积分拆成两部分<sup>[6]</sup>: 对局部极小值点  $\theta_{\text{vor}}$  的求和, 以及在极小值附近的扰动项  $\theta_{\text{sw}}$ ,

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_{\theta_{\text{vor}}} \int D[\theta_{\text{vor}}] \exp \left\{ H[\theta_{\text{vor}}] + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 \times \int d\mathbf{r}_2 \theta_{\text{sw}}(\mathbf{r}_1) \frac{\partial^2 H}{\partial \theta(\mathbf{r}_1) \partial \theta(\mathbf{r}_2)} \theta_{\text{sw}}(\mathbf{r}_2) \right\}, \quad (11)$$

其中极小值点是根据

$$\nabla^2 \theta(\mathbf{r}) = 0$$

所确定. 该方程除了常数解之外, 还有一个涡旋构型的解. 在周期性条件

$$\theta(\mathbf{r}) \rightarrow \theta(\mathbf{r}) + 2\pi$$

的要求下, 此解需满足:

$$\oint_C d\mathbf{l} \cdot \nabla \theta(\mathbf{r}) = 2\pi n, \quad (12)$$

其中  $n$  是闭合路径  $C$  所包含的涡旋数. 得到的有涡旋存在时相位的表达式为

$$\begin{aligned} \theta(\mathbf{r}) &= \theta_{\text{sw}}(\mathbf{r}) + \theta_{\text{vor}}(\mathbf{r}) \\ &= \theta_{\text{sw}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{R}} n(\mathbf{R}) \Theta(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \end{aligned} \quad (13)$$

这里

$$\begin{aligned} \Theta(\mathbf{r}, \mathbf{R}) &= \tan^{-1} \frac{Y - y}{X - x}, \\ n(\mathbf{R}) &= \sum_i n_i \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_i). \end{aligned} \quad (14)$$

涡旋位于对偶晶格上  $\mathbf{R} = (X, Y)$  处. 从而, 系统配分函数可以写成自旋波部分和库仑气体的乘积, 而库仑气体部分是

$$Z_{\text{cg}}(K, y) = \sum_n \frac{y^{2n}}{n!^2} \int_{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} \prod_{i=1}^{2n} \frac{d\mathbf{R}_i}{a^2} \times \exp \left[ + \pi K \sum_{i \neq j} q_i q_j \ln \left( \frac{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|}{a} \right) \right], \quad (15)$$

其中包含了  $q = +1$  和  $q = -1$  的拓扑荷各有  $n$  个, 涡旋被视为尺度为  $a$  的硬核, 即彼此之间的最小距离是  $a$ .

利用重正化的标准做法是对短波部分进行积分, 研究系统在更大的尺度上的表现. 在威尔逊 (Wilson) 重正化的方案中, 人们直接在傅里叶空间中重正化哈密顿量, 过滤掉对应于大动量或短波长的模式. 在卡丹诺夫 (Kadanoff) 的实空间方法中, 人们通过连续消除团块中的自旋来不断扩大尺寸. 而科斯特利茨 (Kosterlitz) 的做法是<sup>[7]</sup>, 逐渐增加积分下限  $a \rightarrow e^l a$ , 研究自旋刚度如何变化. 增加  $a$  对应于消除短距离的涨落, 因为随着最小间隔的不断增大, 间隔小的涡旋构型便不断被排除, 从而得到与尺度  $l$  依赖的有效相互作用  $K(l)$  和有效涡旋逸度  $y(l)$  满足重正化方程:

$$\frac{dK^{-1}}{dl} = 4\pi^3 y^2 + \vartheta(y^4), \quad (16)$$

$$\frac{dy}{dl} = (2 - \pi K)y + \vartheta(y^3). \quad (17)$$

重正化流图见图 6. 由图 6 可见, 相区 I 对应低温准长程序相, 而区域 II 和 III 是无序相,  $y = 0$  是一条不动点构成的线.

继 Kosterlitz-Thouless 在 20 世纪 70 年代开创性的工作之后<sup>[6,7]</sup>, 经典 XY 模型中的新奇物理受到广泛关注. 但是, 由于系统在相变附近有指数

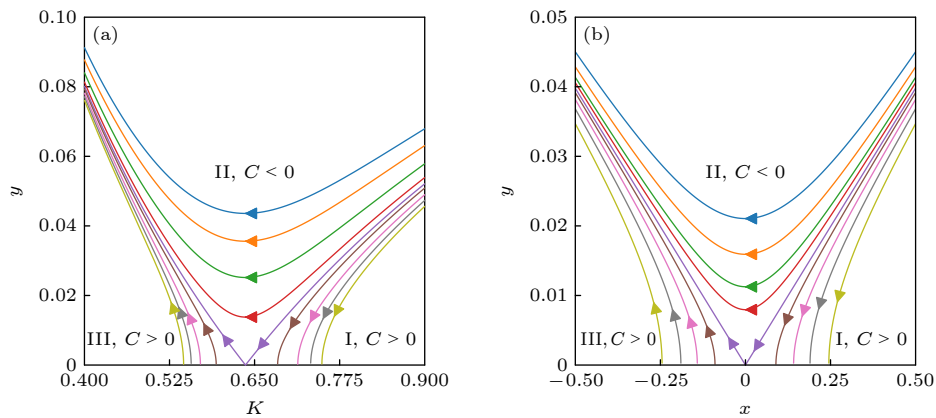


图 6 (a) 二维 XY 模型的整体流图; (b) 在临界点附近的流图. 箭头代表随着  $l$  增大时重正化流的方向

Fig. 6. (a) The renormalization group (RG) flow diagrams of the 2D XY model, where the flow is indicated as  $l$  is increased to infinity; (b) flows from the linearized RG equations in the vicinity of the critical point.

发散的关联长度和对数形式的有限尺寸修正, 精准确定相变温度和临界指数一直是研究中的难点. 在 BKT 的理论工作之后不久, 蒙特卡罗模拟为理论的正确性提供了很多证据<sup>[17,18]</sup>, 并对相变温度进行了粗略估计. 这些估计值随后得到了较大的改善<sup>[19-21]</sup>, 得到的数值  $T_{\text{BKT}} \sim 0.8929$  J, 与高温展开的结果<sup>[22]</sup>一致. 然而, 这些结果在很大程度上依赖有限尺寸对数修正, 不同的外推法得到的相变温度估值会有所不同<sup>[23]</sup>. 经典蒙特卡罗模拟的优点是易于实现和理解, 能够处理包括多体相互作用的复杂系统, 其计算复杂度主要取决于采样数目和计算的精度. 一般情况下, 随着采样数目的增加, 其计算精度和计算时间都会增加.

## 4.2 配分函数的张量网络表示

有别于传统的基于抽样的蒙特卡罗方法, 近年发展起来的张量网络方法<sup>[24,25]</sup>为从理论和数值方面研究经典 XY 模型提供了一个新框架. 张量网络可以将一个给定系统的所有物理特性编码为局部

张量, 帮助人们更加清晰地了解局部自由度的物理对称性和系统的整体特性之间的关系. 尽管张量网络最初是为捕捉强关联量子晶格系统中的纠缠而提出的, 它正被越来越多地应用于统计力学问题的研究中. 最近, 人们基于张量重正化群<sup>[26]</sup>和变分优化方法<sup>[27]</sup>对 XY 模型有所研究, 分别从磁化率和自旋刚度等热力学量确定相变温度. 这里也从张量网络出发, 从转移矩阵的最大本征矢中解码热力学相变信息<sup>[28-30]</sup>. 这是因为转移矩阵的对数可以被视为一个一维量子系统的哈密顿量, 其最大本征矢可以看作量子系统的基态波函数, 从波函数中可以找到刻画量子相变的一个普适判据——纠缠熵, 从而有效地确定对应经典模型的相变温度.

从经典 XY 模型的哈密顿量出发, 其配分函数为

$$Z = \prod_i \int \frac{d\theta_i}{2\pi} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta \cos(\theta_i - \theta_j)}. \quad (18)$$

这里  $\beta = 1/T$ , 为简化起见, 将其单位定为  $J/k_B$ . 如

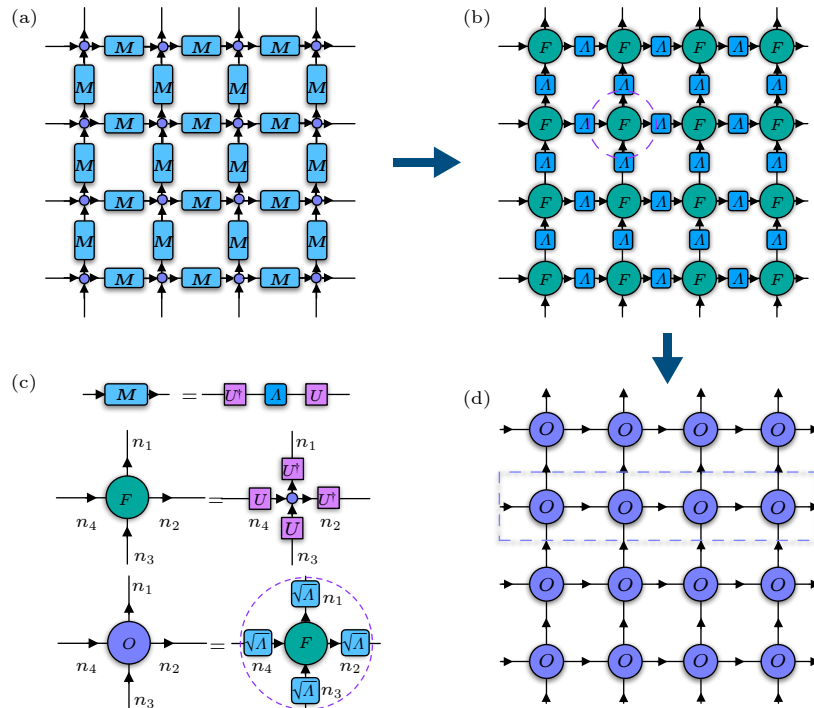


图 7 (a) 配分函数的玻尔兹曼因子被表示成相互作用矩阵的张量网络乘积; (b) 通过对偶变换将连续自由度积掉之后的张量网络表示; (c) 相互作用矩阵的分解, 对连续角度变量的积分以及均匀局域张量的构造; (d) 通过局域张量  $O$  表示的均匀二维张量网络, 其行转移矩阵  $T(\beta)$  由虚线框出

Fig. 7. (a) The Boltzmann weights of the partition function are represented as a tensor network product of the interaction matrices  $M$ ; (b) the tensor network representation of the partition function after the continuous degrees of freedom are integrated out through a duality transformation; (c) the decompositions of the interaction matrix, the integration over continuous variables, and the construction of a uniform local tensor; (d) the 2D uniform tensor network representation composed of local  $O$  tensors, where the row-to-row transfer matrix  $T(\beta)$  is circled by dashed lines.



图 7(a) 所示, 玻尔兹曼因子被表示成  $M(\theta_i, \theta_j)$  的乘积, 其指标为连续的  $\theta$  变量.

为了能够将连续自由度转换到离散指标, 将位于晶格连线上的矩阵  $M$  做展开:

$$M(\theta_i, \theta_j) = e^{x \cos(\theta_i - \theta_j)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(x) e^{in(\theta_i - \theta_j)}. \quad (19)$$

这里  $I_n(\theta)$  是第一类修正贝塞尔函数. 如图 7 所示, 用箭头规定了角度差, 保证 (19) 式中指数中最近邻的一对自旋角总是上面的相位角减去下面的, 右边的减去左边的, 相应的矩阵为:

$$U_{n,\theta} = e^{-in\theta}, \quad (20)$$

$$A_{m,n} = I_n(\beta) \delta_{m,n}. \quad (21)$$

通过积掉格点上的角度自由度就可以得到局域的  $F$  张量:

$$F_{n_1, n_2}^{n_3, n_4} = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{i(n_1 + n_2 - n_3 - n_4)\theta} = \delta_{n_1 + n_2}^{n_3 + n_4}. \quad (22)$$

新的网络形态如图 7(b) 所示, 只要将对角的矩阵  $A$  开根号平分到  $F$  张量上就可以得到图 7(d) 所示的均匀张量网络:

$$Z = \text{tTr} \prod_i O_{n_1, n_2}^{n_3, n_4}(i). \quad (23)$$

这里“tTr”表示对指标的收缩, 其中每个局部张量

$$O_{n_1, n_2}^{n_3, n_4} = \sqrt{I_{n_1}(\beta) I_{n_2}(\beta) I_{n_3}(\beta) I_{n_4}(\beta)} \delta_{n_1, n_2}^{n_3, n_4}. \quad (24)$$

从图 7(d) 可以看到, 行转移矩阵保留了系统的  $U(1)$  不变性. 作为  $U(1)$  对称性的生成元, 它可以数出张量指标对应的电荷数. 可以把转移矩阵看成一个映射, 电荷数守恒相当于要求输入的态 (连接进去的箭头) 和输出的态 (连接出去的箭头) 有同样的电荷数 (进出箭头的指标数加起来一样). 利用  $U(1)$  对称性, 可以把矩阵乘积态的空间分成电荷数不同的子空间讨论, 从而减少数据存储量.

尽管局域张量  $O$  的指标  $n$  应当取遍所有整数, 但在实际计算中可以进行有效的截断. 这是因为贝塞尔函数  $I_n(\beta)$  随着  $n$  增大会快速衰减, 如图 8 所示, 发现张量  $O$  的每条腿的维度达到 25 便已经足够精确.

### 4.3 物理量的计算

在热力学极限下, 配分函数的值取决于转移矩阵最大本征值:

$$T[\Psi(A)] = \Lambda_{\max} |\Psi(A)\rangle. \quad (25)$$

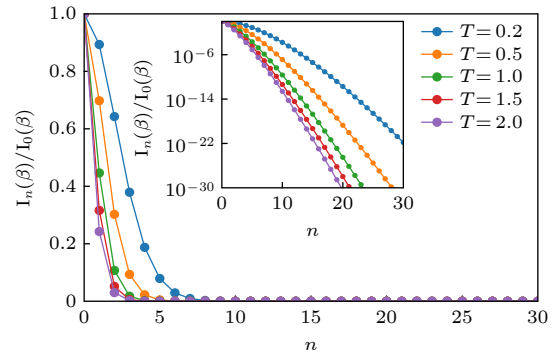


图 8 第一类修正贝塞尔函数  $I_n(\beta)$  在不同温度下随着  $n$  增大的衰减行为, 插图中展示了其指数级的衰减速度

Fig. 8. Decay of the modified Bessel function of the first kind dependent on  $n$  at different temperatures on the linear and logarithmic (the inset) scales.

此方程可以用标准的变分均匀矩阵乘积态 (VUMPS) 算法求解<sup>[31]</sup>. 如图 9(a) 所示,  $|\Psi(A)\rangle$  是由同一种张量  $A$  构成的均匀 MPS, 用以近似最大本征值对应的本征矢. 单位格点上的最大本征值  $\lambda = \Lambda_{\max}^{1/L}$ , 其中  $L \rightarrow \infty$  表示行转移矩阵的格点数. 这符合对平移不变的无限大系统的假设, 此近似的精确程度由局域张量  $A$  的虚拟维度  $D$  来控制.

借助 VUMPS 算法, 精确求得最大本征矢  $|\Psi(A)\rangle$ , 随后各种物理量可以基于 MPS 准确计算. 通过将转移矩阵对应到一维量子系统可以得到纠缠信息, 它可以帮助我们确定系统中的相变性质. 纠缠熵作为相应量子多体问题中纠缠的测度<sup>[32]</sup>, 可通过对最大本征矢做施密特分解得到. 如图 9(b) 所示, 在正则形式下将系统分成左右两部分, 然后利用右正则形式对右半边求迹, 得到约化密度矩阵, 其本征谱只依赖于中心矩阵:

$$\begin{aligned} \rho_L &= \text{Tr}_R |\Psi\rangle \langle \Psi| \\ &= |\Psi^{[-\infty, i_n]}\rangle C C^\dagger \langle \Psi^{[-\infty, i_n]}| \sim C C^\dagger. \end{aligned} \quad (26)$$

由此可以得到纠缠熵<sup>[33,34]</sup>:

$$S_E = -\text{Tr}(\rho_L \ln \rho_L) = -\sum_{\alpha=1}^D S_\alpha^2 \ln S_\alpha^2, \quad (27)$$

其中  $S_\alpha$  是张量  $C$  的奇异值.

此外, 自由能密度可以通过最大本征值直接获得

$$f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( -\frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \ln Z \right) = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda. \quad (28)$$

局域可观测量的期待值可以通过在张量网络中插入相应的杂质张量得到. 如图 9(c) 所示, 借助不动

点 MPS, 二维网络被压缩成一条含杂质张量的长链, 然后进一步从两头压缩. 类似地, 如图 9(d) 所示, 借助 MPS 的正则形式, 两点关联函数  $G(r)$  可以表示为收缩带有两个杂质张量的长链. 以单位格点的内能为例, 它可以表示为近邻两点函数的期待值:

$$u = -2 \langle \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \rangle. \quad (29)$$

而比热可以从内能得到:

$$C_V = \frac{du}{dT}. \quad (30)$$

由于张量网络方法是在热力学极限下计算的, 因此可以得到不受有限尺寸效应干扰的热力学量. 图 10(a) 和图 10(b) 展示了系统内能和比热随温度的变化. 随着温度的增加, 内能和比热都是平滑地

变化, 并且在有限温度下没有显示任何奇异点, 这说明系统中的相变是高阶的. 但内能在  $T$  约 1.0 附近有较大的增量, 对应的比热在那里产生了一个圆滑的鼓包. 这些热力学特征都和 BKT 相变的特点相符合.

虽然通过内能和比热等热力学量无法准确判断相变点的位置, 但张量网络方法通过将二维经典统计模型和一维量子模型对应, 提供了刻画相变的量子判据——纠缠熵. 从图 11(a) 可以看到, 等效一维量子系统的纠缠熵在有限温下出现奇异值点, 且随着 MPS 键维度的增长, 逐渐向左移动. 通过对不同键维度下的相变温度做外插同样可以得到非常准确的相变温度.

因为系统的  $U(1)$  对称性不会在有限温发生破缺, 局域序参量无法刻画相变的发生, 但自旋刚度

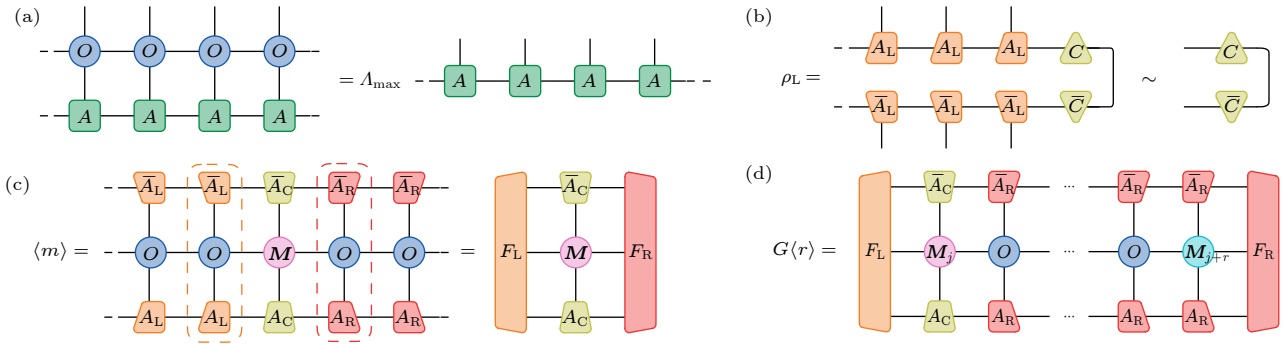


图 9 (a) VUMPS 算法的核心思想是通过均匀 MPS 近似转移矩阵最大本征矢; (b) 通过对 MPS 的右半边求迹得到的约化密度矩阵, 其中  $A_L$ ,  $A_R$  和  $C$  分别是 MPS 所对应的左正则、右正则和中心张量; (c) 局域可观测量的期待值被化简为收缩单个杂质张量  $M$ . 虚线框出了通道算符,  $F_L$  和  $F_R$  为其左右不动点; (d) 两点关联函数被表示为收缩一串通道算符

Fig. 9. (a) The key point of the VUMPS algorithm is to approximate the maximum eigenvector of the transfer matrix by a uniform MPS; (b) the reduced density matrix is obtained by tracing out the right half of the MPS, where  $A_L$ ,  $A_R$ , and  $C$  are the left canonical, right canonical, and center tensors, respectively; (c) the calculation of the expectation value of a local observable  $M$  is reduced to the contraction of a single impurity tensor  $M$  sandwiched by the leading eigenvectors of the channel operators. The dashed line circles the channel operator, with  $F_L$  and  $F_R$  as its left and right fixed points; (d) the two-point correlation function is represented as a contraction of a train of channel operators.

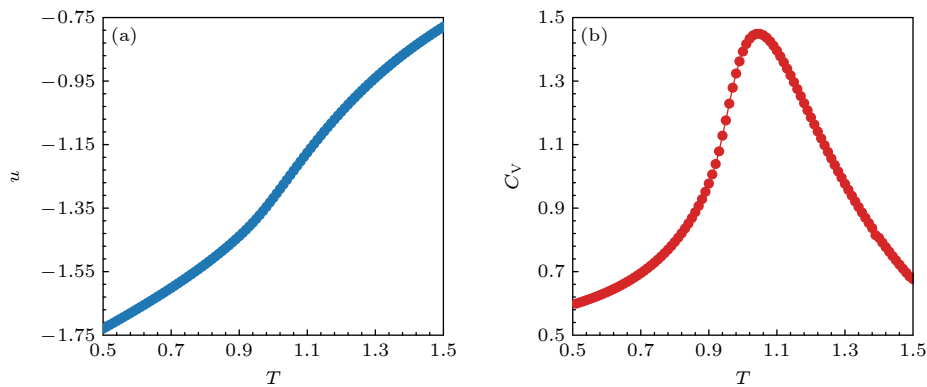


图 10 (a) 内能随温度的变化; (b) 比热随温度的变化

Fig. 10. (a) The internal energy as a function of temperature; (b) the specific heat as a function of temperature.

的跃变可以反映系统中相变. 自旋刚度刻画了系统自由能对一个微弱扭转场的响应:

$$\rho_s = \left. \frac{\partial^2 f_v}{\partial v^2} \right|_{v=0}, \quad (31)$$

其中  $f_v$  是单位格点上的自由能, 而扭转场  $v$  的作用是增大相邻自旋之间的夹角. 图 10(b) 展示了不同 MPS 键维度下自旋刚度随温度的变化, 可以看到自旋刚度在相变温度  $T_{\text{BKT}}$  之上会跳降到 0, 而且跳变点符合理论预期 [35]:

$$\lim_{T \rightarrow T_{\text{BKT}}^-} \rho(T) = \frac{2T_{\text{BKT}}}{\pi}. \quad (32)$$

虚线拟合了重正化理论预言的自旋刚度表现行为,

$$\rho_s = \rho_s(T_{\text{BKT}}^-) [1 + \text{Const.}(T_{\text{BKT}} - T)^{1/2}]. \quad (33)$$

也符合得很好, 这充分表明我们研究方法的可靠性. 还可以从自旋-自旋关联函数

$$G(r) = \langle \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \rangle \quad (34)$$

在相变点两侧的不同表现行为看出涡旋配对情况. 如图 12(a) 所示, 自旋-自旋关联函数  $G_1(r)$  在  $T_{\text{BKT}}$  之下的  $T = 0.8$  处随距离呈幂律衰减. 而在  $T_{\text{BKT}}$  之上的  $T = 1.0$  处, 关联函数  $G_2(r)$  随距离指数衰减, 如图 12(b) 所示. 这一结果清晰地反映了涡旋-反涡旋在相变温度之下是束缚在一起的, 整个相位场具有准长程序. 在相变温度之上束缚对打开,

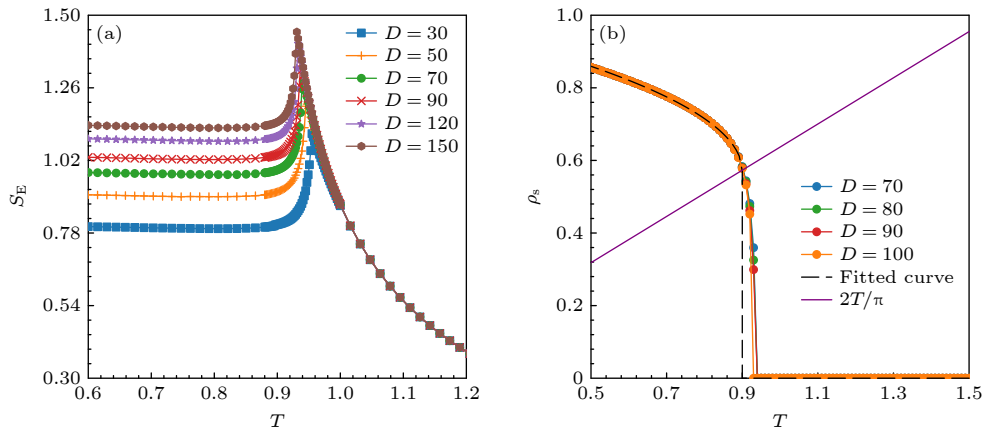


图 11 (a) 不同 MPS 键维度下等效一维量子系统的纠缠熵随温度的变化, 奇异值点反映了系统中的 BKT 相变的发生; (b) 不同 MPS 键维度下自旋刚度随温度的变化. 与紫线的交叉处是理论给出的普适跃变点, 而虚线是相变附近自旋刚度行为的拟合

Fig. 11. (a) The entanglement entropy of the 1D quantum correspondence as a function of temperature under different MPS bond dimensions where the singularities indicate the occurrence of the BKT transition; (b) the spin stiffness as a function of temperature for a set of different MPS bond dimensions. The straight line  $2T/\pi$  is known to intersect the curve for the critical temperature and the dashed line is a fit to the behavior of the spin stiffness near the BKT transition.

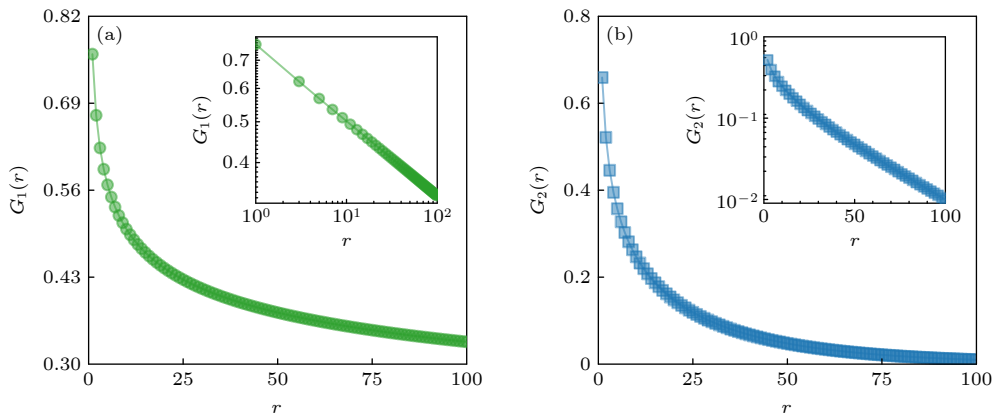


图 12 (a) 关联函数在  $T = 0.8$  处随距离的衰减行为, 插图采用双对数坐标, 线性体现幂律衰减, 对应准长程有序态; (b) 关联函数在  $T = 1.0$  处随距离的衰减行为, 插图纵轴采用对数坐标, 线性体现指数衰减, 对应无序态

Fig. 12. (a) The spin-spin correlation function displays power-law behavior at  $T = 0.8$  below  $T_c$  corresponding to the quasi-long-range ordered phase; (b) the spin-spin correlation function decays exponentially at  $T = 1.0$  above  $T_c$  corresponding to the disordered phase. The  $y$ -axes of the insets are plotted in logarithmic scales.



大量独立涡旋的存在扰乱了相位场, 使得系统进入无序状态.

BKT 相变的标志之一是从高温侧接近临界点时关联长度的指数发散. 由于高温侧对应的转移矩阵是有带隙的, 原则上可以通过提高 MPS 的键维度将精度不断提高, 相应的关联长度也会随之增大. 因为理论上带隙会随着 MPS 键维度增大而减小, 可以利用这一特性外插出无穷大 MPS 键维度下的关联长度<sup>[36,37]</sup>. 这里利用转移矩阵的次级带隙

$$\delta = -\ln \lambda_1 + \ln \lambda_2, \quad (35)$$

其中  $\lambda_1, \lambda_2$  分别是转移矩阵的最大和次大本征值, 而

$$\varepsilon = -\ln \lambda_1 \quad (36)$$

是关联长度的倒数. 利用线性外插假设<sup>[36]</sup>, 可以得到外插后的关联长度.

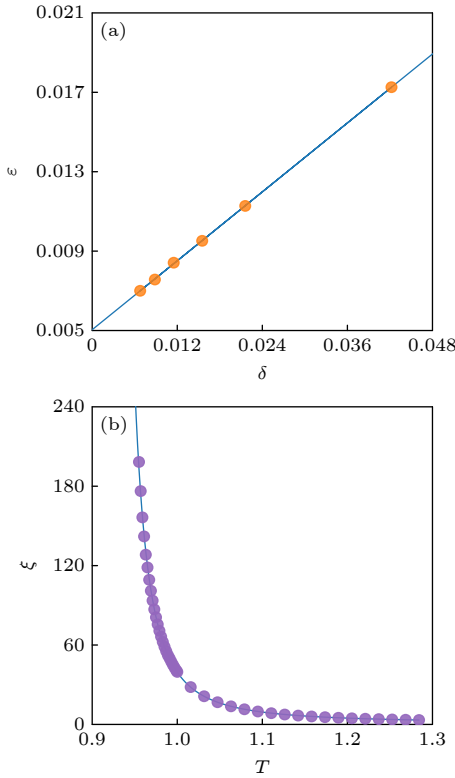


图 13 (a) 在  $T = 0.955$  处对关联长度的外插拟合, 这里的数据点对应 MPS 键维  $D = 30, 50, 70, 90, 120, 150$ ; (b) 外插后的相变温度之上的关联函数随温度的变化, 蓝线是利用理论公式对相变温度的拟合

Fig. 13. (a) The extrapolation procedure of the correlation length at  $T = 0.955$ , where the data points correspond to the MPS bond dimensions  $D = 30, 50, 70, 90, 120, 150$ ; (b) the extrapolated correlation length as a function of temperature yields a value for the critical temperature  $T_{\text{BKT}} \sim 0.8930$  when fitted to the BKT form (blue line).

图 13(a) 展示了  $T = 0.955$  处对  $\varepsilon$  的外插结果, 呈很好的线性行为. 外插后的关联长度画在图 13(b) 中, 发现其对 BKT 拟合公式

$$\log \xi_+(T) = \frac{b}{\sqrt{T - T_{\text{BKT}}}} + c + d\sqrt{T - T_{\text{BKT}}} \quad (37)$$

符合得很好, 这里的  $T_{\text{BKT}} \sim 0.8930$ , 与此前的研究结果相符合<sup>[27]</sup>. 通过对不同 MPS 键维度下纠缠熵和关联长度的拟合, 还可以提取出系统对应共形场论的中心荷:

$$S_D \propto \frac{c}{6} \ln \xi_D. \quad (38)$$

图 14 展示了在  $T = 0.865$  处对中心荷的拟合, 拟合值  $c = 1.0004$  完全符合超流相共形场理论预言.

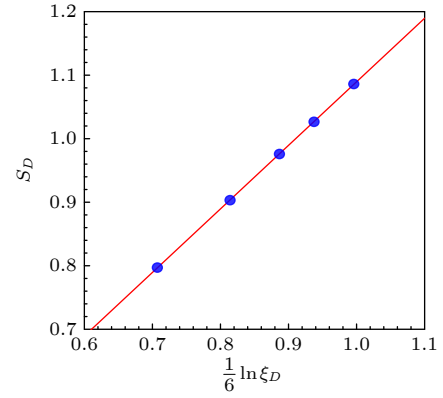


图 14 在  $T = 0.865$  处通过关联长度与纠缠熵的线性关系拟合出中心荷  $c = 1.0004$ . 数据点对应 MPS 键的尺寸为  $D = 30, 50, 70, 90, 120, 150$

Fig. 14. Center charge  $c = 1.0004$  extracted from the linear relationship between the correlation length and the entanglement entropy at  $T = 0.865$  under MPS bond dimensions  $D = 30, 50, 70, 90, 120, 150$ .

由此, 通过各方面的计算结果表明, 张量网络方法是描述经典 XY 模型及其相变的理想框架. 除了准确计算各种热力学量, 还能从纠缠和关联方面之间反映不同物相及相变特征.

## 5 展 望

路漫漫其修远兮, 数百年来人们对物理学中的大统之道孜孜以求. 从二维 Ising 模型的严格解到二维 XY 模型中的 BKT 相变理论, 从朗道范式到拓扑激发, 每一次的认知提高都来自对基本物理模型的理解. 如果说朗道对称性自发破缺理论描述了粒子组织结构的静态模式, 那么拓扑激发则是由静生动, 描述了组成粒子集体的舞动模式. 在集体涨

落中看到千姿百态的元激发和光怪陆离的相变, 下至费米弧上至宇宙弦都可以由类似的拓扑缺陷来描述, 演生论思想提供了人们对物质世界的一种统一认知. 参差多态构成世界, 不同类型拓扑激发行为各异, 它们之间的相互作用会变得非常复杂. 这种复杂性既能带来丰富的物理, 也给研究带来很大的挑战. 大道至简, 从最基本的离散  $Z_n$  自由度和连续  $U(1)$  自由度出发, 由于很强的涨落效应, 在连续对称性二维系统中拓扑激发交织出新奇热力学相变.

从最简单的思路就是基于  $XY$  模型进行拓展, 还可以加入与  $2\pi$  周期相竞争的作用量, 对应拓展的  $XY$  模型. 不同自由度的竞争会产生自旋波、整数涡旋、拓扑弦和半整数涡旋等各种激发. 此拓展的  $XY$  系统中不仅会经历拓扑激发解耦导致的 BKT 相变, 还会演生出拓扑弦激发导致的 Ising 相变. 针对整数涡旋和半整数涡旋这两种拓扑激发之间的相互作用, 对相变进行了精确测定和临界点的性质的澄清<sup>[38]</sup>. 我们的研究可以回答了如下问题: 整数涡旋配对相和半整数涡旋配对相之间的相变的性质是什么? 相变线的结构是如何变化的? 在高温相中是否存在一个解束缚相变?

耦合系统也是一个研究不同拓扑激发相互作用的重要平台. 前面已经看到离散系统的耦合会带来丰富的物理, 连续系统亦然. 还重点研究了耦合  $XY$  系统<sup>[39]</sup>, 它可以描述超流体、超导体、冷原子凝聚体和二维晶格的融化等很多物理现象. 以超导体为例, 其中库珀对可以用宏观波函数描述, 发生耦合的时候会演生出新的相位差表示的自由度, 体现为约瑟夫森效应. 很多新奇的超导现象来自于特殊的层间耦合形式, 但是耦合也带来新的复杂度, 因为不同的拓扑激发会同时产生<sup>[40]</sup>. 虽然经历了一系列理论发展, 但仍旧不能完全解释实验现象, 其中的难点也是源于多自由度耦合带来的拓扑激发间复杂的相互作用.

除了引入耦合, 阻挫也可以自然诱发拓扑激发的产生, 因为阻挫倾向于破坏局部稳定性, 加剧系统中的涨落. 在强阻挫的离散模型中, 即使在零温系统也会完全混乱无序. 在连续模型中引入阻挫, 会导致分数化的涡旋激发, 因其与磁性材料和超导体密切相关被大量研究. 但由于拓扑激发之间联系紧密, 激发次序难以区分, 使相变细节一直充满争议. 相比正方晶格和三角晶格<sup>[41]</sup>, 笼目晶格中的

阻挫效应更强<sup>[42]</sup>, 也是当前研究的热点材料. 人们对笼目晶格上的反铁磁  $XY$  模型提出了种种猜想, 有人认为无序会带来有序, 亦或产生多步相变. 也有人认为阻挫会完全破坏整数涡旋配对, 莫衷一是. 由于极高的简并度和复杂的演生相互作用, 阻挫系统在理论和数值研究中一直困难重重.

我们的研究工作, 步步为营, 逐渐深入, 借助一套高效的张量网络方法, 对  $XY$  模型相关的物理展开了系统深入的研究, 从拓扑激发的角度解释了一系列新奇的物相和相变. 通过对偶变换技巧, 找到了耦合和阻挫  $XY$  系统的恰当张量网络表示. 将配分函数的转移矩阵与一维量子模型对应, 得以从纠缠角度解码不同类型的拓扑激发. 我们的工作不仅给出在热力学极限下研究经典模型中拓扑激发的一套有效方案<sup>[38-42]</sup>, 也为今后对各种演生现象的研究指出了一条可行的路线.

## 参考文献

- [1] Anderson P W 1972 *Science* **177** 393
- [2] Zhang G M, Yu L 2010 *Physics* **39** 543 (in Chinese) [张广铭, 于禄 2010 *物理* **39** 543]
- [3] Landau L D 1937 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **7** 19
- [4] Ginzburg V L, Landau L D 1950 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20** 1064
- [5] Wegner F 1967 *Z. Phys.* **206** 465
- [6] Kosterlitz J M, Thouless D J 1973 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **6** 1181
- [7] Kosterlitz J M 1974 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **7** 1046
- [8] Berezinskii V 1971 *Sov. Phys. JETP* **32** 493
- [9] Wilson K G, Kogut J 1974 *Phys. Rep.* **12** 75
- [10] Goldstone J 1961 *Nuovo Cimento* **19** 154
- [11] Mermin N D, Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133
- [12] Peierls R 1936 *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **32** 477
- [13] Onsager L 1944 *Phys. Rev.* **65** 117
- [14] Skyrme T H R, Schonland B F J 1961 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **260** 127
- [15] Kosterlitz J M 2016 *Rep. Prog. Phys.* **79** 026001
- [16] Kosterlitz J M 2018 *Int. J. Mod. Phys. B* **32** 1830005
- [17] Miyashita S, Nishimori H, Kuroda A, Suzuki M 1978 *Prog. Theor. Phys.* **60** 1669
- [18] Tobochnik J, Chester G V 1979 *Phys. Rev. B* **20** 3761
- [19] Hasenbusch M, Pinn K 1997 *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** 63
- [20] Hasenbusch M 2005 *J. Phys. A: Math. Gen.* **38** 5869
- [21] Komura Y, Okabe Y 2012 *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** 113001
- [22] Arisue H 2009 *Phys. Rev. E* **79** 011107
- [23] Hsieh Y D, Kao Y J, Sandvik A W 2013 *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2013** P09001
- [24] Verstraete F, Murg V, Cirac J 2008 *Adv. Phys.* **57** 143
- [25] Orús R 2014 *Ann. Phys.* **349** 117
- [26] Yu J F, Xie Z Y, Meurice Y, Liu Y, Denbleyker A, Zou H, Qin M P, Chen J, Xiang T 2014 *Phys. Rev. E* **89** 013308
- [27] Vanderstraeten L, Vanhecke B, Läuchli A M, Verstraete F 2019 *Phys. Rev. E* **100** 062136
- [28] Fishman M T, Vanderstraeten L, Zauner-Stauber V,

- Haegeman J, Verstraete F 2018 *Phys. Rev. B* **98** 235148
- [29] Vanderstraeten L, Haegeman J, Verstraete F 2019 *SciPost Phys. Lect. Notes* **7** 1
- [30] Haegeman J, Verstraete F 2017 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **8** 355
- [31] Zauner-Stauber V, Vanderstraeten L, Fishman M T, Verstraete F, Haegeman J 2018 *Phys. Rev. B* **97** 045145
- [32] Vidal G, Latorre J I, Rico E, Kitaev A 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 227902
- [33] Li H, Haldane F D M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 010504
- [34] Pollmann F, Turner A M, Berg E, Oshikawa M 2010 *Phys. Rev. B* **81** 064439
- [35] Nelson D R, Kosterlitz J M 1977 *Phys. Rev. Lett.* **39** 1201
- [36] Rams M M, Czarnik P, Cincio L 2018 *Phys. Rev. X* **8** 041033
- [37] Vanhecke B, Haegeman J, Van Acoleyen K, Vanderstraeten L, Verstraete F 2019 *Phys. Rev. Lett.* **123** 250604
- [38] Song F F, Zhang G M 2021 *Phys. Rev. B* **103** 024518
- [39] Song F F, Zhang G M 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 195301
- [40] Song F F, Zhang G M 2023 *Phys. Rev. B* **107** 165129
- [41] Song F F, Zhang G M 2022 *Phys. Rev. B* **105** 134516
- [42] Song F F, Zhang G M 2023 *Phys. Rev. B* **108** 014424

The 90th Anniversary of *Acta Physica Sinica*

# Phase transitions driven by topological excitations and their tensor network approach

Song Feng-Feng      Zhang Guang-Ming<sup>†</sup>

(Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 17 July 2023; revised manuscript received 4 August 2023)

## Abstract

The fundamental concepts of phases of matter and thermal phase transitions constitute the cornerstone of our understanding of the physical universe. The historical development of the phase transition theory from Landau's spontaneous symmetry breaking paradigm to modern topological phase transition theories represents a major milestone in the evolution of numerous scientific disciplines. From the perspective of emergent philosophy, the interplay of topological excitations leads to enriched physical phenomena. One prominent prototype is the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase transition, where unbinding of integer vortices occurs in the absence of spontaneous breaking of continuous  $U(1)$  symmetry. Using the state-of-the-art tensor network methods, we express the partition function of the two-dimensional XY-related system in terms of a product of one-dimensional transfer operators. From the singularities of the entanglement entropy of the one-dimensional transfer operator, we accurately determine the complete phase diagram of the partition function. This method provides new insights into the emergent phenomenon driven by topological excitations, and sheds new light on future studies of 2D systems with continuous symmetries.

**Keywords:** topological excitations, thermodynamic phase transitions, tensor network method

**PACS:** 03.75.Lm, 74.50.+r, 64.60.Bd

**DOI:** 10.7498/aps.72.20231152

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: gmzhang@tsinghua.edu.cn





## 拓扑激发驱动的热力学相变及其张量网络研究方法

宋峰峰 张广铭

## Phase transitions driven by topological excitations and their tensor network approach

Song Feng-Feng Zhang Guang-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 230301 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231152

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231152>

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

有限温度下腔光机械系统中 $N$ 个二能级原子的相变和热力学性质

Phase transition and thermodynamic properties of  $N$  two-level atoms in an optomechanical cavity at finite temperature

物理学报. 2019, 68(19): 193701 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190347>

环面黑洞的热力学函数

Thermodynamic functions of toroidal black holes

物理学报. 2022, 71(11): 110401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20212370>

周期驱动系统的非平衡热输运与热力学几何

Nonequilibrium thermal transport and thermodynamic geometry in periodically driven systems

物理学报. 2021, 70(23): 230503 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211723>

颗粒-颗粒接触力的热力学模型

A thermodynamic model of grain-grain contact force

物理学报. 2018, 67(4): 044502 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171441>

NO分子宏观气体热力学性质的理论研究

Theoretical study on thermodynamic properties of NO gas

物理学报. 2020, 69(5): 053301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191723>

一维超导传输线腔晶格中的拓扑相变和拓扑量子态的调制

Modulation of topological phase transitions and topological quantum states in one-dimensional superconducting transmission line cavities lattice

物理学报. 2022, 71(19): 194203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220675>