

新聞稿

即時發放

香港-北京-上海物理學家合力推動量子材料研究 有助信息行業和科技工業發掘新一代材料

2020 年 6 月 15 日

由香港大學、中國科學院物理研究所、松山湖材料實驗室、北京航空航天大學，以及上海復旦大學所組成的研究團隊，通過大規模量子多體熱力學與動力學計算，在量子材料和拓撲相變理論研究取得重要進展，首次成功「破譯」了二維阻挫量子磁性晶體 TmMgGaO_4 (TMGO) 的「材料基因」，有助科學家在量子磁性材料中實現其拓撲性質，發掘新一代的信息行業和工業工程應用材料。有關研究最近於國際權威學術期刊《自然·通訊》(*Nature Communications*) 中發表。

近半個世紀以來，集成電路可容納晶體管數量，大約每隔兩年就會遞增一倍，即所謂的摩爾定律。科技先進致使計算器件體積越來越小——個人電腦的輕巧化便是一個好例子。可是，這樣的規律也有盡頭，以目前集成電路器件的精密程度來看，已有需要從量子物理學入手去改良或發掘新材料，因此相關研究可說是現代文明社會永續發展的基石。

拓撲物態概念是凝聚體物理學中的重要理論。提出此理論的三位英國物理學先驅 David J Thouless、F Duncan M Haldane 和 J Michael Kosterlitz，就是憑其獲得 2016 年的諾貝爾物理學獎。他們利用高度抽象的拓撲學 (Topology) 數學概念打開了量子物理學和材料科學的全新研究方向，使物理學家能夠以嶄新角度去看待凝聚態物理學和材料系統，是人類對於物質分類理論的一大進步。量子材料的最新應用包括新一代信息高速公路的導線、高速便捷的磁懸浮列車、高溫超導體材料、存儲和傳輸儀器及進行量子計算的機器零件等，具有廣闊的應用前景。

拓撲物態和拓撲相變概念最先由 Kosterlitz 和 Thouless 於 1970 年提出，故理論以他們名字的字首而命名為 KT 相。兩位物理學家發現於二維的磁性模型中，從磁性有序到磁性無序的狀態之間，還可能存在一種具有扭曲 (即拓撲) 自旋排布的中間磁性狀態 (如圖 1 所示)。這些年來，人們雖在超流體和超導體等中發現了 KT 相，卻未能於最早所提出具拓撲物態的量子磁性材料中找到 KT 相。成功研究這物態有助人們在量子磁性材料中實現其拓撲性質，為未來開拓新材料而鋪路。

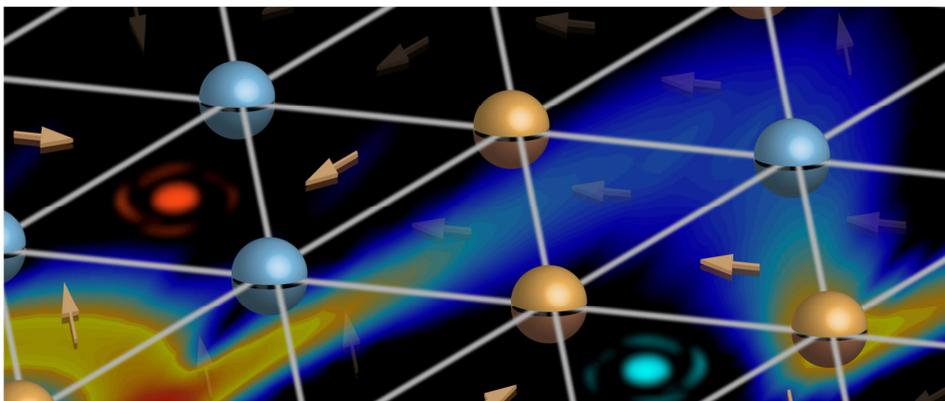


圖 1 · 在 KT 相 (拓撲物態) 中，磁性晶體 TMGO 中電子的自旋排布和與磁振子及渦旋對激發。

是次取得進展的研究，由香港大學物理學系副教授、中科院物理所研究員、松山湖實驗室雙聘研究員孟子楊、北京航空航天大學物理學院副教授李偉，以及復旦大學物理系教授戚揚共同率領。他們利用國家超級計算中心天河系列超級電腦進行了量子蒙特卡洛（針對大規模樣本數據的計算方法）、熱張量重正化群大規模平行計算，準確算出磁性晶體 TMGO 材料的微觀量子模型當中電子自旋交換相互作用的正確參數，印證了 TMGO 只有在特定溫度範圍內才會展現 KT 相的假設。目前，團隊已開展了進一步的理論和實驗量子動力學研究。

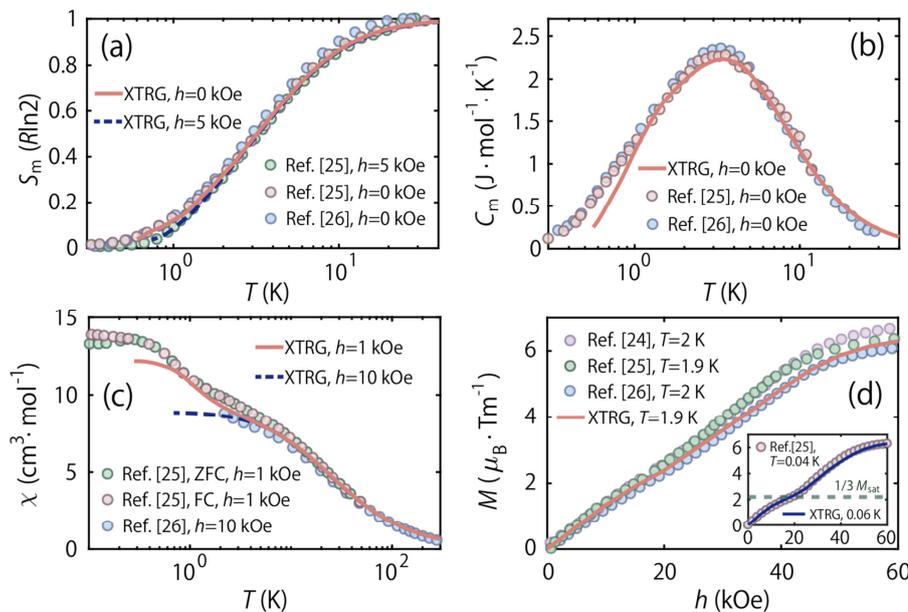


圖 2 · 熱態張量網絡多體計算精確擬合 TMGO 磁熱力學測量數據。

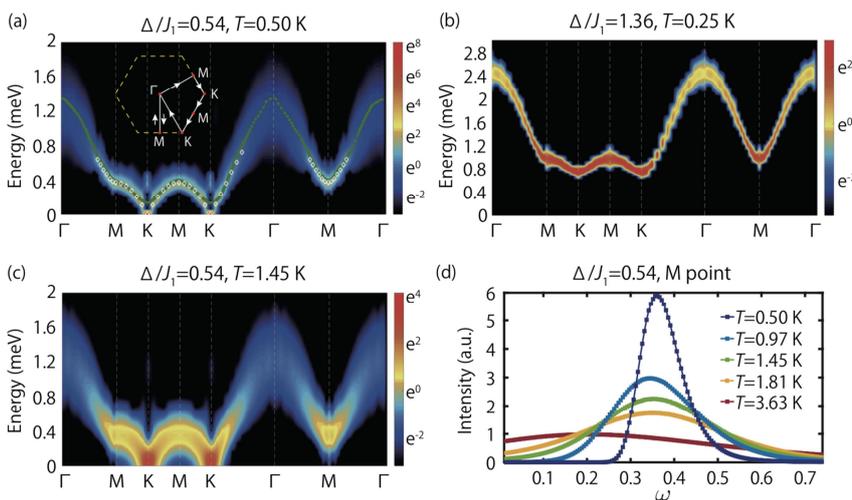


圖 3 · 二維自旋阻擊量子量子 TMGO 的量子多體蒙特卡洛動力譜學模擬結果。

「在此研究中，通過結合張量重正化群與量子蒙特卡洛方法等多體計算方法，我們成功地建立了關聯量子晶體材料的熱力學-動力學的多體研究範式，揭示磁性材料 TMGO 晶體的『材料基因』的精確模型參數，計算量子多體系統在溫度、壓力和磁場等外部環境變化時的反應，為其下一步實驗研究提供了準確的溫度和磁場等參數，從而確定其在科研和工業應用中合適的參數範圍。研究亦確認了 TMGO 是一個研究量子材料的理想實驗材料。」孟子楊博士說。

是次研究計算用上國家超級電腦，是因為當中涉及多種計算模式，而這些材料性能的電子行為亦需要乎合數以億計的量子力學規律。孟博士解釋道：「研究能成功地計算出這種複雜的量子磁性材料，證明了我們這個結合數值計算和解析理論的研究方式是至為有效的，這給予我們信心去研究更多富挑戰性的量子材料體系。現在智能手機的計算能力已經超越 20 年前的超級計算機，倘若採用合適的量子材料去製造新計算機，不難預見 20 年後的智能手機或有機會超越當前世界超級電腦的計算能力，而其耗電量甚至可以做到普通電池便可以應付。」

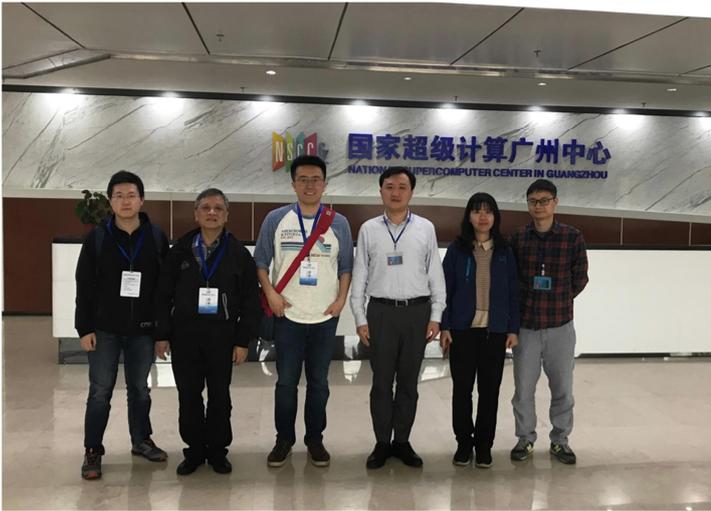


圖 4 · 港大物理學系孟子楊博士（左三）訪問國家超級計算廣州中心天河時留影。

研究團隊介紹

港大孟博士的研究專長發展和運用量子蒙特卡洛計算方法，研究凝聚態物理量子多體問題中的相變和臨界現象，最近剛剛在量子金屬研究方面取得進展（詳情見 <https://www.hku.hk/research/stories/20645/>）；北京航空航天大學李偉博士專注於量子多體物理與張量網路方法，提出了熱張量重正化群方法，做出高水準原創性成果；復旦大學戚揚博士擅長研究電子系統在數值計算和理論分析上的優勢互補。是次研究結合蒙特卡洛（孟子楊）、張量網絡（李偉）和場論解析（戚揚）多個方式，成功展示了量子材料科學研究的新方向。

有關天河系列超級計算機

超級計算機天河 1 號和 2 號曾分別於 2010 和 2014 年為世界排名第一的超級計算機，而最新的天河 3 號預計 2021 年全面投入服務，屆時將與歐美新一代的超算平台競較。是次研究團隊運用這些世界上最先進的規模計算平台，完成了上千個 CPU 及上千小時的計算。相似的計算規模，如果使用個人電腦去進行，需要上百萬個小時（約等於 20 年）的計算時間才能完成。而團隊使用的量子多體計算方法，也是目前世界上最先進的研究量子材料的方法。

本工作獲得香港特別行政區研究資助局、科技部重點研發計劃和國家自然科學基金委等機構資助，並獲港大理學院計算研究啟動計劃和信息技術服務中心支持。

論文連結：<https://www.nature.com/articles/s41467-020-14907-8>

傳媒查詢請聯絡港大理學院助理傳訊總監陳詩迪（電話: 3917 5286; 電郵: cindycst@hku.hk）。

圖片下載：<https://www.scifac.hku.hk/press>