

新聞稿

即時發放

量子材料研究的新範式 以精確模型計算及實驗揭示拓撲物質特性

2020 年 11 月 17 日

香港大學理學院物理及天文學研究部的孟子楊博士，向來致力探索將理論、計算和實驗相結合的新量子材料研究範式。最近，他與北京航空航天大學的李偉博士、復旦大學的戚揚教授、中國人民大學的于偉強教授和南京大學的溫錦生教授合作，解開了 2016 年諾貝爾物理學獎得獎論說「拓撲相」之謎。拓撲相是以拓撲學原理研究物質分類和相變現象的新興學科，在凝聚態物理學中發展迅速，其中的 Kosterlitz-Thouless (KT) 相，自 1970 年代提出以來，一直未有在磁性晶體材料中被發現，直到是次研究工作，終於在稀土磁體 TmMgGaO_4 (TMGO) 材料中找到其存在的證據。

不久之前，孟博士、李博士和戚教授通過天河 1 號和天河 2 號超級計算機，算出了 TMGO 中 KT 相的精確模型計算（見補充資料）；這一次，團隊克服了幾個概念上和實驗上的困難，通過高靈敏度的核磁共振 (NMR) 和磁化率測量（檢測材料磁響應的方法），成功地發現了該稀土磁體中的 KT 相及其相變。團隊以 NMR 技術進行實驗，是因為其對於微弱磁信號的檢測比較靈敏，而磁化率測量亦較易用於實驗之中。

拓撲相與拓撲相變的研究雖然在 2016 年獲得諾貝爾物理學獎，但在磁性晶體材料中，科學界卻一直找不著 KT 相的存在。是次研究實驗結果與該團隊的量子蒙特卡洛 (Monte Carlo computations) 計算完美地融合，肯定了物理學家對量子磁性材料中 KT 相追求了長達半個世紀的答案。研究成果最近在著名學術期刊《自然通訊》 (*Nature Communications*) 中發表。

首次於稀土磁體中測到拓撲相

量子材料正逐漸成為人類社會持續發展的基石，其中包括超越摩爾定律 (Moore's law) 的新一代 AI 計算芯片、高速磁懸浮列車和量子計算機的拓撲元件等。可是，這些複雜系統的研究，往往需要現代計算技術和先進的分析來揭示其微觀機理。受惠於全球超級計算平台的急速發展，科學家和工程

師現在可以充分利用這些設施來發現可以造福社會的更好材料。然而，單靠計算是不夠的，他們須要結合實驗才能印證研究結果。

在本研究中，須要用到能處理低溫、高靈敏度和強磁場等極端條件的實驗技術，以驗證理論計算和發現結果。研究團隊成員開發和掌握了這些先進的設備和技術，為日後同類研究立下了新範式。

這項研究的靈感源自 V Berezinskii、J Michael Kosterlitz 和 David J Thouless 所發現的 KT 相理論，後兩位是 2016 年諾貝爾物理學獎的獲獎者（共同得獎人還有 F Duncan M Haldane），褒獎他們對拓撲物質相和相變的理論發現。拓撲是一種對材料的特性進行分類和歸納的新方式，現已成為量子材料研究和工業的主流；而在量子計算機中，信息技術的無損信號傳輸等方面具有廣泛的潛在應用。回溯 1970 年代，Kosterlitz 和 Thouless 預言了量子磁性材料中拓撲相的存在，故此理論以他們的姓氏字首而命名（即 KT 相）。然而，儘管在超流體和超導體中已發現了這種現象，卻未能在理論最初提出的磁性晶體材料中找到 KT 相。本項研究中，聯合團隊結合理論、計算和實驗，終於在 TMGO 材料中找到其存在的證據。

在磁性晶體材料中檢測這種有趣的 KT 相並不容易，因為通常晶體中的 3 維結合會使磁性材料在低溫下呈現出有序相，而不是拓撲相（波動模式）。所以首先需要合適的材料，其次要使用靈敏的測量技術來獲取拓撲相的獨特波動模式，這就是為甚麼人們雖然熱衷於研究 KT 相，但屢屢經歷實驗失敗的原因。研究小組成員發現，層狀材料稀土磁體能滿足到這樣的條件，同時又因為其面內磁矩是多極的，只有在平面磁場下的 NMR 方法才不會干擾低能電子態，因此可以靈敏地檢測到複雜 KT 相的高低。

如圖 1 所示，NMR 自旋晶格弛豫速率測量到夾在溫度 $T > T_u$ 的順磁相和溫度 $T < T_1$ 的反鐵磁相之間的 KT 相（即圖中高起的平台）。同時，團隊成員對具有精確參數的晶格模型（圖 2）進行了大規模量子蒙特卡洛計算，進一步印證了 KT 相的存在。這表明在特定的溫度和壓力範圍內，KT 相可以在一定的參數區間內穩定存在。

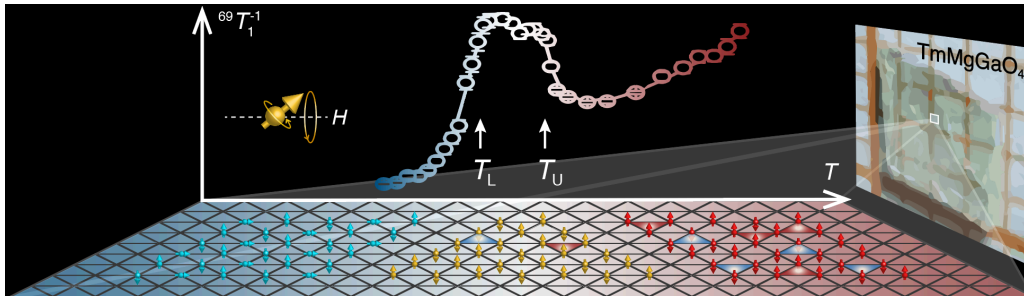


圖 1. 量子磁體 TMGO 的 NMR 自旋晶格弛豫速率測量結果， T_L 和 T_U 之間高起的平台就是拓撲 KT 相。

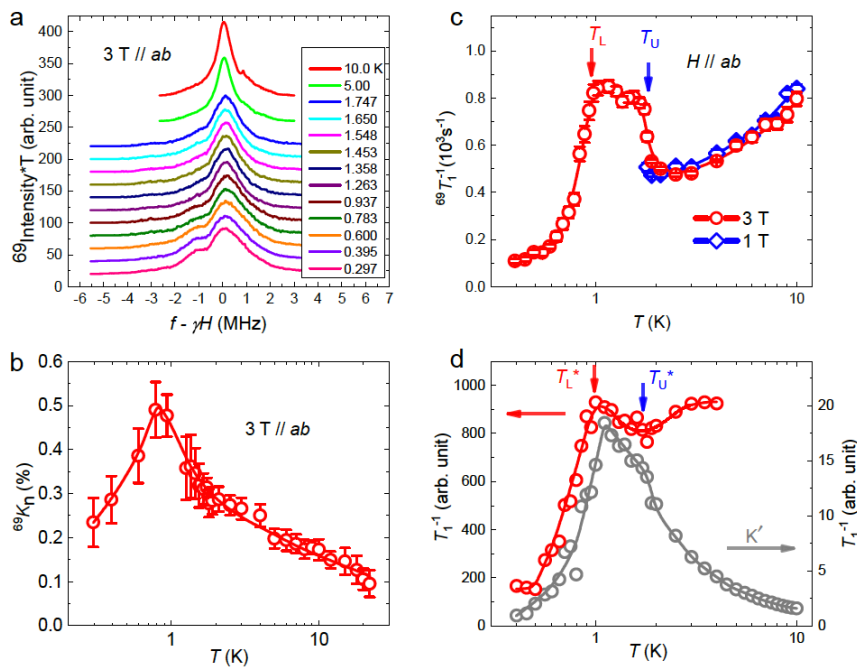


圖 2. (a), (b)和(c)是 TMGO 中的 NMR 譜和自旋晶格弛豫速率。(d)是大規模 QMC 模擬的結果。

進一步啓發潛在應用

該發現表明 TMGO 中存在穩定的 KT 相，這是首次在磁性晶體材料中找到 KT 相存在的確定性證據。憑藉其獨特的拓撲激發和起落特性，進一步可以啓發許多有趣的研究以及在拓撲量子材料的潛在應用。

孟博士補充說：「對於量子材料的研究，包括是次發現的 KT 相，長遠來看將給社會帶來更多福祉，例如幫助實現量子計算機，無損傳輸信息技術，更快更節能的高速列車，通過量子材料的研究，這些夢想都將可能逐步實現。」

「我們的方法將最新的實驗技術與無偏量子多體計算方案相結合，使我們能夠直接將實驗數據、準確的數值結果與關鍵的理論預測進行定量比較，從而為連接理論、數值和實驗研究搭建橋樑，研究小組建立的新範式必將導致量子材料方面更深刻和更具影響力的發現。」孟博士道。

關於天河超級計算機

天河 1 號和天河 2 號是中國的大型超級計算機，它們是世界上最快的超級計算機之一，並且分別在 2010 年和 2014 年 TOP500 超級計算機排行榜中排名第一 (<https://www.top500.org>)。天河 3 號超級計算機有望在 2021 年投入使用，並將成為世界上第一個百億億規模的超級計算機。聯合團隊進行的量子蒙特卡洛和張量網絡模擬都用了天河超級計算機，並且需要在數千個中央處理器進行數千小時的並行計算，如果在普通計算機上進行，則需要 20 多年才能完成。

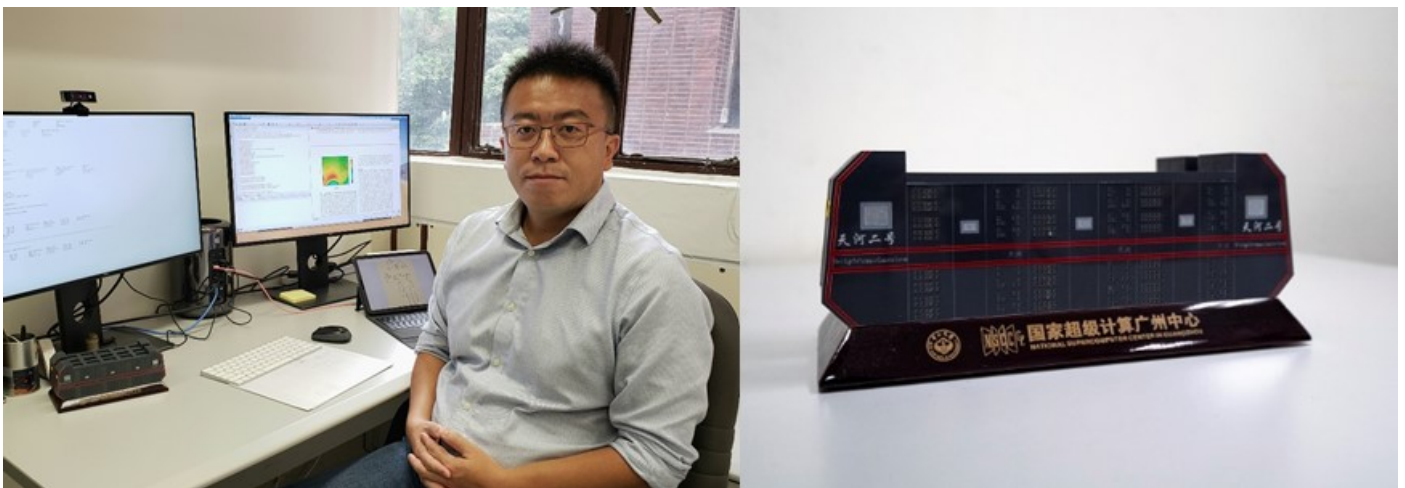


圖 3. 孟子楊博士運用天河超級計算機算出了 TMGO 中 KT 相的精確模型計算。圖中為天河 2 超級計算機模型。

關於孟子楊博士和其研究團隊

孟子楊博士是量子多體系統的蒙特卡羅模擬專家，最近在量子材料和非費米液體金屬研究方面取得了突破（詳見較早前新聞稿：<https://www.hku.hk/press/press-releases/detail/21179.html>）。

北京航空航天大學的李偉博士是先進張量網絡方法的研究專家，他發明的方法可以計算量子多體系統的溫度和磁場響應。

復旦大學的戚揚教授對數值結果進行了量子場論分析，並給與理論理解。

中國人民大學于偉強教授開發和搭建了低溫高靈敏的核磁共振實驗平台，他在高溫超導體和量子人造材料方面的研究工作廣為人知。

南京大學的溫錦生教授擅長於單晶生長、表徵和中子散射技術，從而對量子材料進行前沿研究。

是項研究獲香港特別行政區研究資助局、中國科學技術部和中國國家科學基金會的支持。

論文連結：<https://www.nature.com/articles/s41467-020-19380-x>

傳媒如有查詢，請聯絡港大理學院外務主任杜之樺（電話：3917 4948；電郵：caseyto@hku.hk）或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>