

新聞稿

即時發放

## 港大物理團隊開發解決受限量子材料模型的新算法 有助開發性能更優異的量子多體材料

2021年4月29日

現時量子材料的發展受固有的本質所限，阻礙了科技的發展。如想發展出穩定的拓撲量子電腦、高溫超導體、高容量的信息和能量儲存等等革新的高科技，必須發掘新一代的量子材料。然而，由於新一代量子材料的電子之間存有很強的關聯效應，加上內在具有極其複雜的相互作用，令研究新一代量子材料變得非常困難。

科學家正在積極研究讓新一代量子材料達致穩定的拓撲相的方法，以及如何運用拓撲相中的激發准粒子。最近，香港大學理學院物理與天文學研究部的博士後研究員嚴正博士及副教授孟子楊博士開發了一套嶄新的運算方法，可對受限量子材料的模型作出精確的計算。他們與中國礦業大學的王艷成博士、北京航空航天大學的馬女森博士以及復旦大學的戚揚教授合作，運用此算法解開了量子二聚體模型（quantum dimer model, QDM）中一個長達幾十年的難題。

通過研究，他們揭示了神秘粒子「任意子（vison）」之間的非平庸相互作用。任意子是拓撲序中的一種激發准粒子，攜帶有湧現通量（emergent flux）。是次研究揭示了這種有用粒子的真實性質，有機會推動技術創新發展。該研究結果已於著名學術期刊《npj 量子材料》（*npj Quantum Materials*）中發表。

### 背景

在日常生活中充斥着以量子材料技術製成的科技產品，比如矽基量子電腦、太陽能電板和鋰電池等。這些材料都屬於弱關聯系統，即電子自由度之間的相互作用並不主導，而我們對這些系統已經有很深入的了解。另一方面，基於強關聯電子體系（又稱量子多體系統）的新一代量子材料的冒起，對於新科技發展和應用至關重要，這些例子包括魔角石墨烯為代表的二維摩爾（moiré）材料、超越摩爾定律（Moore's law）的新一代人工智能計算芯片、無損能量傳輸的高溫超導體和用以量子阻挫磁體與量子自旋液體，以及製造量子電腦的拓撲單元等。

然而，由於量子多體問題的內在指數的複雜性，使其數以億計須遵從量子力學發生相互作用的電子甚難預測，科學家必須運用現代計算技術和先進的數值分析來揭示其微觀機制。同時，為了驗證量子材料微觀的有效模

型，以及模擬實驗的運作，科學家須要對其進行大規模的數值模擬。這大大刺激了新的理論和數值概念，為現有技術不斷刷新新的邊界，有助科學家與工程師開發出更加優秀的量子材料。

### 量子二聚體模型和掃描團簇蒙特卡洛方法

為了研究這些量子多體材料的特性，科學家首先須要建立合適的微觀模型，並通過超級電腦進行大規模數值計算，然後運用先進的物理和數學工具來分析理解計算結果，從以了解模型中包含的豐富物理（不同的物相、對溫度的反應、壓力、電磁場的相應等），再調整模型參數使其與實驗觀測相匹配，並估算其他的實驗現象。

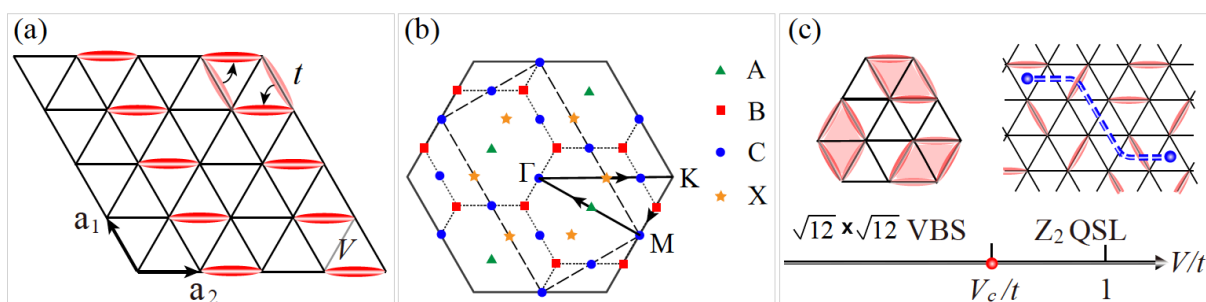


圖 1. 不同的量子多體材料微觀模型：(a) 三角晶格量子二聚體模型。(b) 實線六角形和虛線長方形分別是二聚體(dimer)和任意子(vison)的布里元區（用以表現能量與動量的關係的周期性）。(c) 三角晶格量子二聚體模型的相圖。

在這些量子多體模型中，有一大類受限模型，當中億萬量級的電子之間不但有着複雜的相互作用，與此同時，電子的行為還必須遵從某些限制規則。這些約束條件看似嚴苛、甚至有點違反常理，但實際上他們卻抓住了新一代量子材料的新奇特性。

在普通模型中，因受高能干擾而將量子材料的脆弱機制掩蓋，約束條件正正可過濾高能模型中的激發反應 (excitations)，從以得到低能的有效模型；因為在低能環境中，可幫助我們更好地研究和抓住低能物理的特性，能真正地實現科學家渴求的量子長程糾纏和量子激發，比如三角晶格的量子二聚模型，可以幫助科學家更好地研究拓撲相及其准粒子激發。

不過，這些受限體系依舊缺乏現代數值方法來計算模擬。困難的是，所有模擬必須在受限的規則下進行，這就好像迫使一輛大貨車在一條蜿蜒曲折的小道中高速行駛一樣危險。港大研究團隊決意改變這種現狀，他們開發了一種新算法 — 掃描團簇量子蒙特卡洛算法 — 來全面破解三角晶格量子二聚體模型之謎。

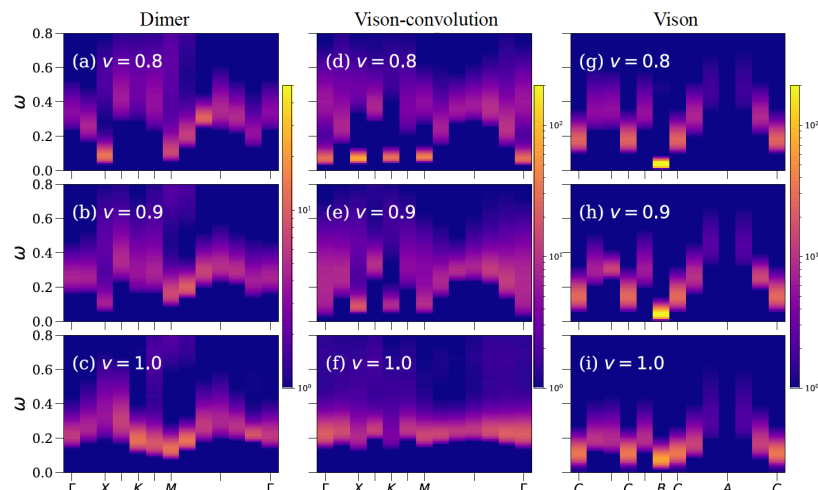


圖 2. 從共振價減態到量子自旋液體（拓撲序）過程中，任意子、二聚體（模型中一對耦合的任意子）和任意子捲積（基於弱相互作用的任意子對）的能譜。這是因為有了新的算法，才有可能得到如此清晰的激發能譜。

### 揭示帶有長程量子糾纏的拓撲激發

通過新的算法，以及在天河 2 號超級電腦上進行大規模並行計算，港大團隊在沒有高能激發的干擾下，清晰觀測並發現了任意子和二聚體的激發。任意子是一種很神秘的粒子，他們總是成對出現，是一種拓撲序中的准粒子激發，攜帶了 $\pi$ 的磁通。在一般的模型中，不可能捕捉到單個任意子的信息；然而在受限體系中，團隊終於將之成功撲捉。通過新算法和隨機解析延拓技術，他們得到了單任意子、二聚體（模型中一對耦合的任意子）和任意子捲積（基於弱相互作用的任意子對）的能譜，如圖 2 所示。通過各種能譜之間的比較，能夠剖析出拓撲序中任意子耦合的密碼。團隊發現任意子並不如科學家猜想般以弱相互作用耦合，而是存在一些明顯的相互作用。

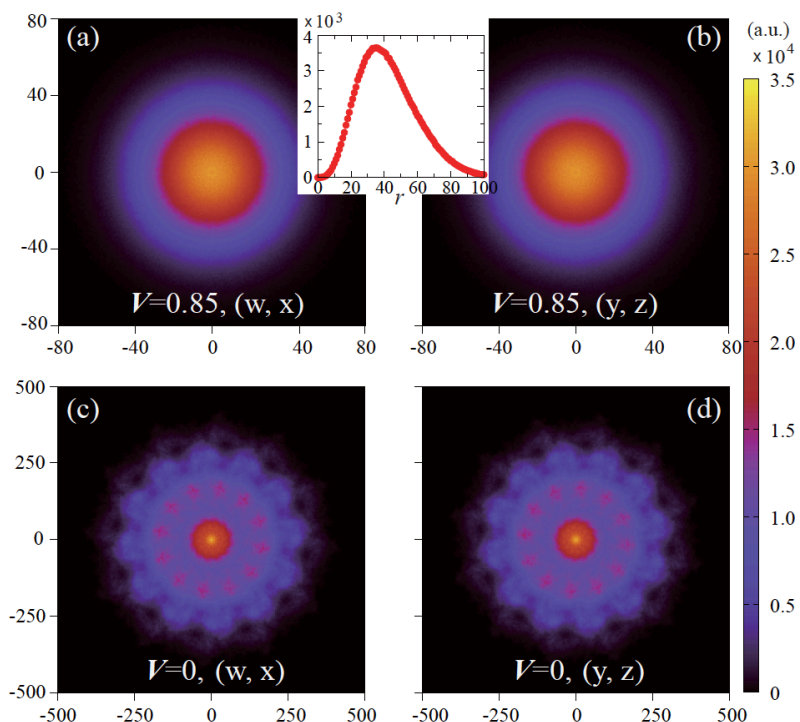


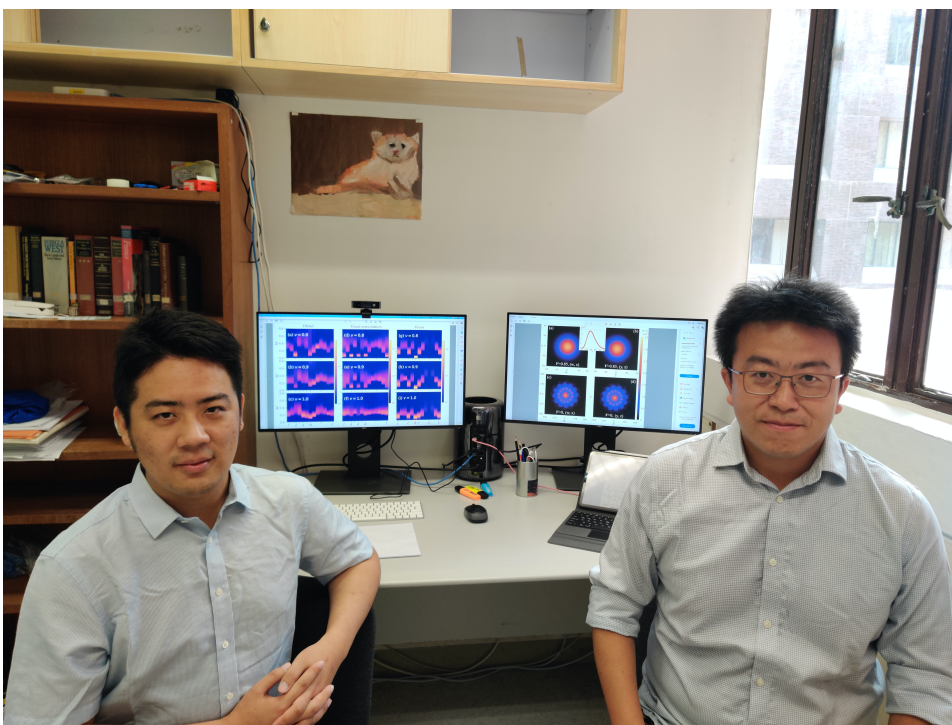
圖 3. (a), (b), (c) 和 (d) 是四維 vison 序參量的二維投影。插圖是四維序參量的半徑分佈。(a)(b) 表示在相變點附近，四維序參量是一個球面分佈。而(c)(d) 則表示進入共振價鍵態後，序參量凝聚到四維球面的某些點上。

研究團隊再進一步發現了從拓撲序（量子自旋液體）到共振價鍵態相變點上會湧現出  $O(4)$  高對稱性，如圖 3 所示。從(a)(b)和插圖可以看到，這是一個清晰的四維球面分佈並且它的半徑守恆。通過進一步地分析，研究員發現任意子會在四維球面上某些點上凝聚，如圖(c)(d)所示，這和理論預言基本符合。這些揭示了任意子凝聚和臨界點的性質。

## 新的算法意味着新的可能性

港大團隊通過本項研究清晰地剖析了拓撲序中任意子的相互作用和行為。基於這些特性，可進一步幫助科學家發展下一代的量子信息科技產品。孟博士說：「對於量子多體材料和模型，人們都意識到其對於社會發展的重要性，但是由於研究本身的困難程度，每一步的突破都極具意義。這次港大團隊在算法上的成功，一下子打開了研究受限量子材料模型的大門，可預期會為發展新一代量子材料帶來更多具影響力的成果。」

## 關於嚴正博士（左）和孟子楊博士



嚴正博士為孟子楊博士的量子模擬研究團隊中任職博士後研究員。他在復旦大學就讀博士期間，發明了初版的掃描團簇量子蒙特卡洛算法。

孟子楊博士是量子多體系統的蒙特卡洛模擬研究方面的專家。近期在量子材料方面剛剛做了一些突破工作，因其在天河超級電腦上的傑出研究成果榮獲中國超算中心頒發的「[2020 天河之星](#)」獎。

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：Topological phase transition and single/multi anyon dynamics of  $Z_2$  spin liquid | npj Quantum Materials (nature.com) : <https://www.nature.com/articles/s41535-021-00338-1>

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>