

港大物理學家創新方法計算量子糾纏 探索量子材料更進一步

2022 年 2 月 14 日

即使發佈

香港大學（港大）物理學系的團隊近日研究出一種測量量子糾纏熵的新算法，有助於探索量子世界的運行規律，並使量子材料的實際應用更進一步。這項關鍵性的研究剛於著名學術期刊《物理評論快報》（*Physical Review Letters*）中發表。

量子材料研究對推動人類科技進步有着深遠的影響。二維的莫瑞（Moire）材料，比如雙層轉角石墨烯，有助我們理解超導體的本質，從而幫我們找到適合工業應用的常溫超導體。它也被視為可用作建造性能遠超經典計算機的量子計算機基礎器件材料。因此，對於量子材料本質的研究和探索將會促進科研技術的進步，從而提高人類的生產和生活水平。

量子材料的實現需要超低溫和高壓的環境，此時周圍環境的熱效應會變得很弱，而量子效應成為決定物質狀態的主要因素。量子漲落會誘發物質在不同量子態之間的相變，包括非超導態到超導體的相變，這種由量子效應而非熱效應主導的相變點被稱為量子相變點（Quantum Critical Points, QCPs）。對於量子相變的研究有助於我們尋找和製造更適合實際應用的量子材料（比如超導體和石墨烯）。因為需要超高壓和低溫的環境，目前實驗室對於量子材料的研究十分困難並且花費高昂，大大的限制了我們對於量子材料的探索和認識。

科學界過去一直利用 LGW（Landau, Ginzburg, Wilson）相變理論作為量子相變研究的基礎。然而研究人員發現，一種新型的去禁閉量子相變點（Deconfined Quantum Critical Points, DQCPs）無法用現有的 LGW 框架來解釋。在過去十幾年間，就是否可以找到能兼容去禁閉量子臨界點和普通的量子臨界點的格點模型，科學家一直在尋找答案，他們提出了大量的理論和數值研究，但問題仍然未徹底解決。

在這背景下，港大物理學系博士研究生趙家瑞、嚴正博士及孟子楊博士通過對物質量子糾纏的研究，成功找到了一種可能的解決方案。研究團隊發展了一種新型和更高效的測量量子糾纏熵的量子蒙特卡洛算法，通過這個強而有力的算法，他們成功的精確測量了 DQCP 的量子糾纏熵，並發現數據與利用傳統 LGW 框架來解釋，存在顯着差異，為科學家對量子相變本質的理解帶來重要突破。

「我們的發現，開啟了對量子相變一種新的突破性的理解，那就是 DQCP 不是一種典型的么正共形場論，亦不能用 LGW 單一理論框架來解釋。我們的研究所提出的問題，將會促進學術科研領域的進一步突破。」嚴正博士說。

「通過新型的蒙特卡洛算法，我們得以更有效地測量量子糾纏熵，改變了研究人員對傳統量子相變理論的理解，在這個問題的研究邁進了一大步，也引發了禁閉量子相變這領域不少深層次的問題。這個新工具將幫助我們解開已經困擾了科學界二十年的關於量子相變的謎題。」博士生趙家瑞道。

「這個發現將會促進對於量子材料的臨界行為的理解，幫助我們尋找更適宜工業應用的量子材料，從而促進人類技術和生產力的進步。」孟子楊博士補充說。

量子糾纏熵和量子材料

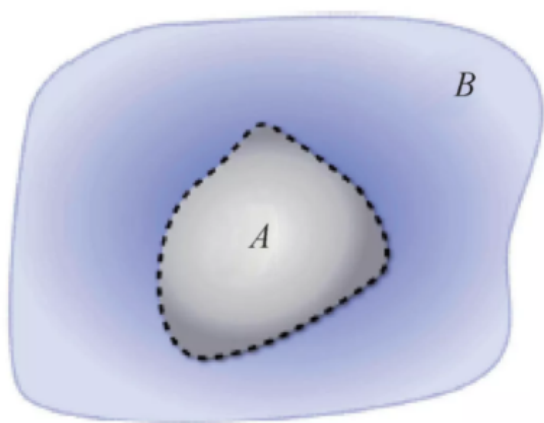


圖 1：量子體系示意圖，其中 A 為子系統，B 為子系統 A 的補集

對於一個有糾纏的量子物態，體系中每個粒子和其他粒子通過量子糾纏關聯在一起。量子糾纏熵則可以測量 A 系統中的粒子和系統中其他的粒子的糾纏的強度，糾纏熵越大，A 和 B 的糾纏就越強。因為不同的量子材料體系內的糾纏程度不同，量子糾纏熵可以被用來表徵不同的量子態。

模型

為了測試算法的效果，並且展示 QCP 和 DQCP 的本質不同，研究團隊測量了含有正常 QCP 的 J_1 - J_2 模型和含有 DQCP 的 J - Q_3 模型的糾纏熵。如圖 2 所示，當調節 Q 項和 J 項的比例時， J - Q_3 模型會出現一個 DQCP，而當調節 J_1 和 J_2 的比例時，會產生一個 QCP。

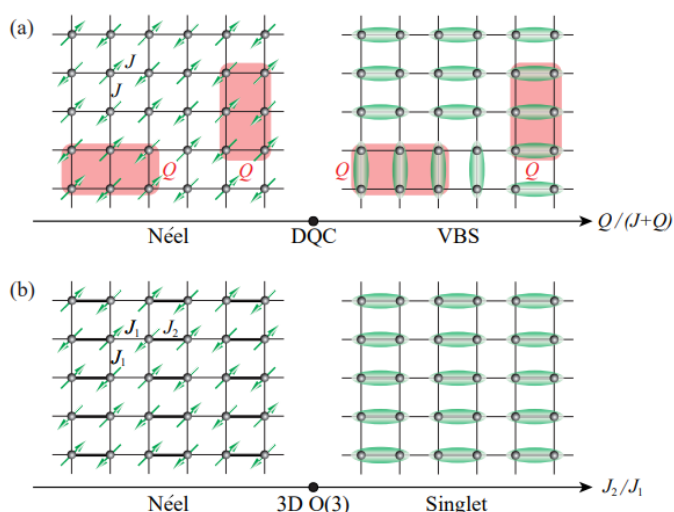


圖 2. 兩種格點模型: (a) 含有 DQCP 的 J - Q_3 模型, (b) 含有 QCP 的 J_1 - J_2 模型。對於 J - Q_3 模型， Q 項刻畫了六格點算符(粉紅色區域)的強度， J 項刻畫了最近鄰反鐵磁相互作用的強度。而對於 J_1 - J_2 模型， J_1 和 J_2 分別表示兩類最近鄰相互作用算符的強度。

非平衡累加算法

基於最新發展的非平衡方法，博士生趙家瑞提出了一種高度並行的非平衡累加算法。如圖 3 所示，該方法利用非平衡過程的可分性，將整個模擬任務分解為許多較小的任務，並使用大量的 CPU 並行執行這些較小的任務，從而大大減少了計算時間，提高了算法效率。這種改進的方法幫助團隊以更快的速度和更好的數據質量模擬了前面提到的兩個模型。

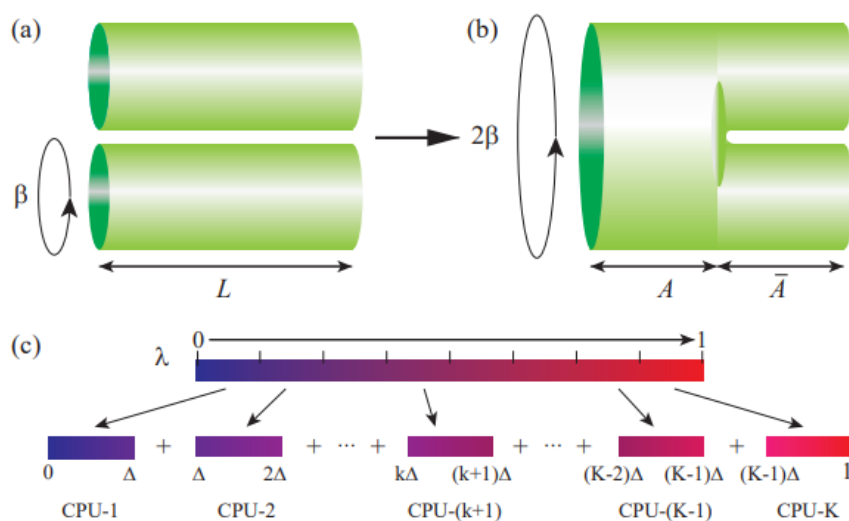


圖 3. 量子蒙特卡洛模擬和非平衡累加算法的示意圖。

研究發現

利用非平衡增累加算法，研究團隊成功地獲得了不同系統尺寸下 QCP 和 DQCP 上的二階 Rényi 糾纏熵。所得結果如圖 4 所示，對於兩種不同的相變點，在減去一階的線性項之後，二階的對數項的系數的符號相反。這一發現排除了對 DQC 是由一個么正共形場論描述的可能性，並進一步提出了關於 DQC 理論的更多有趣的問題，這一發現將會導致對新量子材料的臨界行為的更一般的表徵和理解。

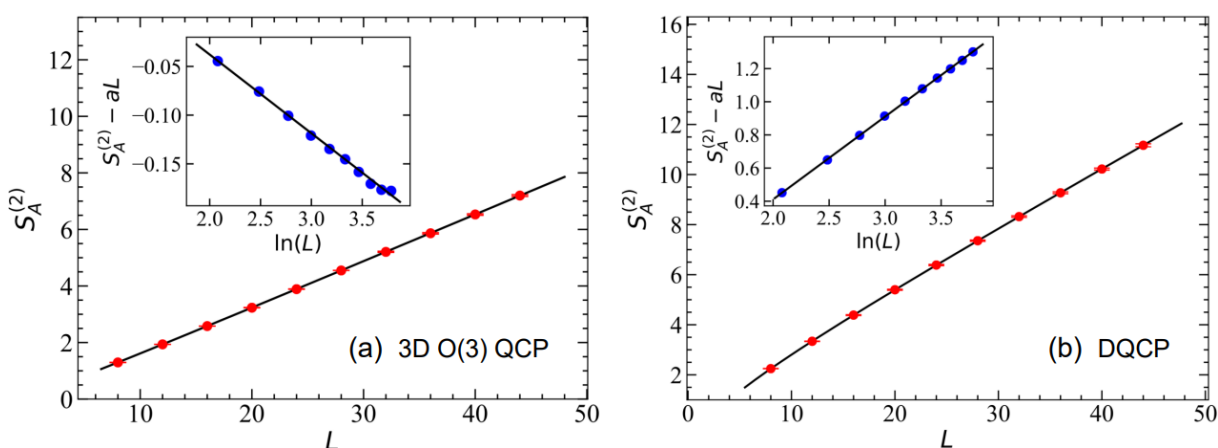


圖 4. 兩種模型的二階 Rényi 糾纏熵的測量結果。圖 (a) 為 J_1 - J_2 模型在 QCP 處的糾纏熵對於尺寸的依賴關係，圖 (b) 為 J - Q_3 模型在 DQCP 處的糾纏熵對於尺寸的依賴關係。插圖是減去一階項之後的結果，可以看出 QCP 和 DQCP 的二階項系數相反。

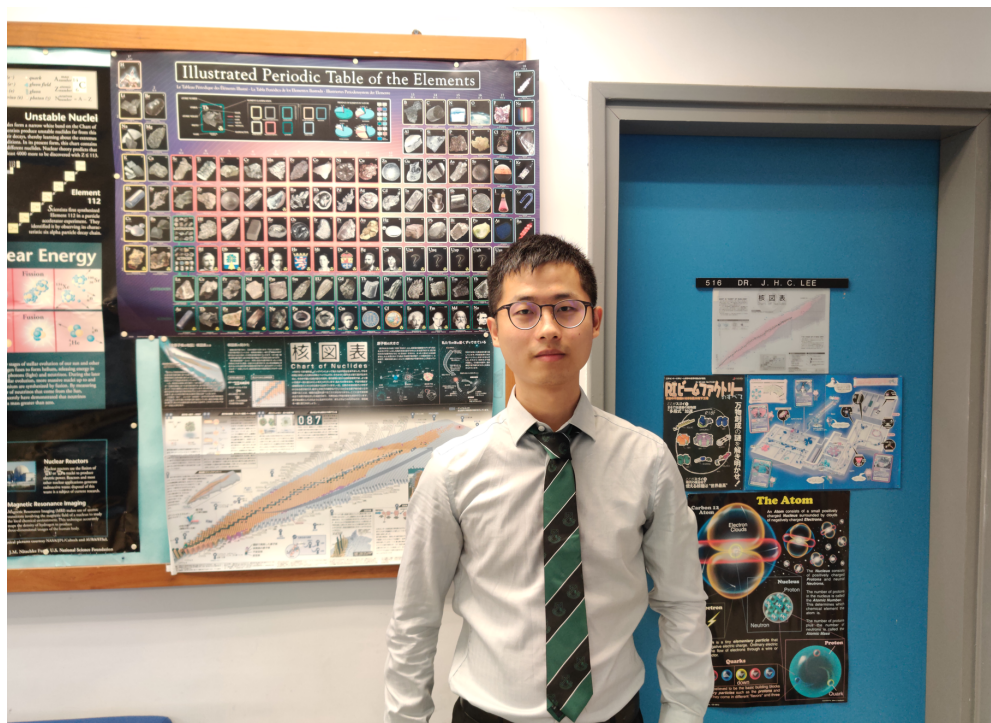


圖 5. 論文的第一作者為港大物理學系博士研究生趙家瑞。他在某次乘搭地鐵時想到了這個新算法。

有關這個研究項目

趙家瑞是港大物理學系博士研究生，師從孟子楊博士。

這項研究獲香港研資局、卓越學科領域計劃「二維材料研究：面向新興技術的基礎」項目和中國自然科學基金委員會資助，香港大學-TCL 人工智能聯合研究中心的種子基金「量子啟發可解釋人工智能」資助。我們感謝理學院及港大資訊科技服務處的計算計劃，以及中國國家超級計算機中心提供的技術支持和大量的高性能計算資源，為本文的研究成果作出貢獻。

研究論文可參看以下網址:

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.128.010601>

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）/助理傳訊總監陳詩迪（電話: 3917 5286；電郵：cindycst@hku.hk）。

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