

希望中国科学院不断出创新成果、出创新人才、出创新思想，率先实现科学技术跨越发展，率先建成国家创新人才高地，率先建成国家高水平科技智库，率先建设国际一流科研机构。

——习近平总书记2013年7月17日在中国科学院考察工作时的讲话

[首页](#) [新闻](#) [机构](#) [科研](#) [院士](#) [人才](#) [教育](#) [合作交流](#) [科学普及](#) [出版](#) [信息公开](#) [专题](#) [访谈](#) [视频](#) [会议](#) [党建](#) [文化](#)

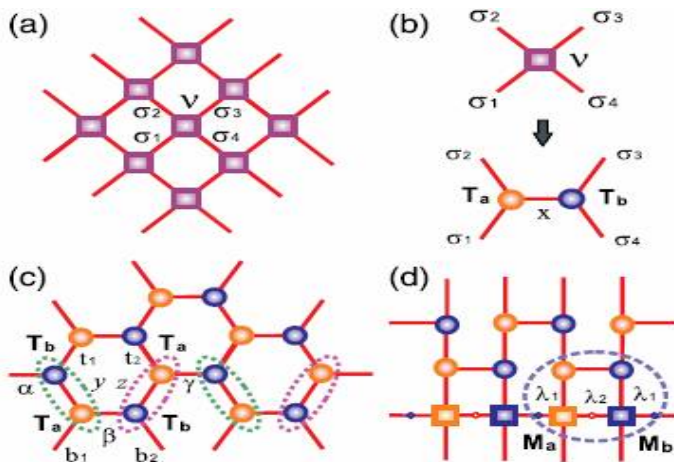
您现在的位置： 首页 > 科研 > 科研进展

研究生院提出量子关联系统热力学性质研究新方法

文章来源：研究生院

发布时间：2011-03-25

【字号： 小 中 大】



量子关联系统热力学性质研究新方法

最近，中国科学院研究生院苏刚教授及其博士生李伟等人提出了一个用于研究量子多体关联系统热力学性质的新方法，被命名为线性张量重整化群（LTRG）方法。该研究结果已于近日发表在国际期刊《物理评论快报》上 [Physical Review Letters 106, 127202 (2011)]。

强关联量子多体问题在过去几十年间一直是凝聚态物理研究的中心问题之一，到目前为止人们对这些复杂的系统依然所知有限。由于处理量子多体问题的可靠解析方法很少，数值模拟方法遂成为研究这类问题的重要手段，并且后者在许多方面已经取得了很大的成功。其中，应用最为广泛的算法之一量子蒙特卡罗方法，不仅在处理相互作用玻色子系统中取得了成功，而且在许多自旋和费米子模型中也获得了很好的结果。这些结果使我们加深了对量子多体系统物性的理解和认识。尽管如此，量子蒙特卡罗方法仍然存在不足，如受计算机能力所限其研究的系统尺寸不能太大，同时在计算强关联电子和具有阻挫的自旋系统时也会遇到负符号问题等。

近年来，人们陆续提出了一些基于数值重整化群技术的方法。其中包括密度矩阵重整化群（DMRG）方法，其重要算法是迄今为止计算一维和准一维体系最为准确的数值方法，还有由DMRG方法派生出的转移矩阵重整化群方法，结合了量子信息中的纯化概念和含时DMRG技术发展出的有限温度DMRG方法等。这些方法都基于DMRG算法，计算时要把整个格点分成系统和环境两块，故而推广到更高维的情形时遇到了棘手的瓶颈。人们因此尝试探索另外途径，提出了张量网络重整化群方法。在过去的几年中，研究人员提出了一些有效的张量网络算法，其中包含粗粒化的张量重整化群，基于纠缠对投影态的张量网络算法，纠缠重整化，无穷时间演化块消减算法，以及纠缠过滤重整化群方法等。几乎所有这些算法都用来计算两维量子格点模型的基态特性，无法直接用于研究两维量子体系有限温度下的热力学性质。由于实验数据都是在有限温度下获得的，为了直接与实验进行比较，发展有限温度下的高效理论计算方法就变得十分必要。

苏刚教授及其博士生李伟等人提出的LTRG新方法的主要思想是：首先，通过Trotter-Suzuki分解将一个D维的量子格点模型的配分函数变换为D+1维的经典张量网络；然后，采用无穷时间演化块消减算法技术来逐层线性地收缩该张量网络，进而计算出系统的自由能和各热力学量。为了验证该算法的计算精度，作者们利用LTRG方法计算了严格可解的自旋1/2的量子XY磁性链的热力学性质，并将数值结果与严格解进行了比较，发现LTRG给出的结果非常精确，其精度与广泛应用的转移矩阵重整化群的方法相当。另一方面，LTRG能够直接处理转移矩阵张量网络，比基于DMRG技术的算法具有更高的灵活性和可扩展性，而且易于编程，计算量相对较小。LTRG算法已经能够用于计算两维六角晶格上海森堡模型的热力学性质，并获得了很好的结果。特别是LTRG方法没有量子蒙特卡罗算法遇到的“负符号”问题。因此，这一新方法为研究量子多体关联系统的热力学性质提供了一种新的途径，并有望在研究一些至今尚未深入了解的强关联量子多体系统的物理性质方面发挥重要作用。


说明

中国科学院新版网站已于2014年11月21日正式上线，地址为 www.cas.cn。此网站为中国科学院旧版网站，内容更新截至新版网站上线时，目前不再继续更新。特此说明。

该项研究得到了国家自然科学基金委和中国科学院的支持。

[打印本页](#)

[关闭本页](#)

© 1996 - 2021 中国科学院 版权所有 [京ICP备05002857号](#) 京公网安备110402500047号  [可信网站身份验证](#) [联系我们](#)
地址：北京市三里河路52号 邮编：100864