



本科生毕业论文（设计）

题目：非平衡量子临界性中
的符号问题研究

姓 名 余 荫 铠

学 号 20343078

院 系 物理学院

专 业 物理学

指导教师 阴帅 (副教授)

2024 年 5 月 14 日

非平衡量子临界性中
的符号问题研究

Research on the sign problem
in non-equilibrium quantum criticality

姓 名	余 荫 铠
学 号	20343078
院 系	物理学院
专 业	物理学
指导教师	阴帅 (副教授)

2024 年 5 月 14 日

学术诚信声明

本人郑重声明：所呈交的毕业论文（设计），是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文（设计）不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本论文（设计）的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本论文（设计）的知识产权归属于培养单位。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日 期： 年 月 日

摘 要

长久以来，人们在研究费米子系统的量子临界性质时，尤其是在计算临界非平衡动力学时，一直面临着这样三大困难：（1）能够非微扰地求解强关联问题的量子蒙特卡罗方法，在具有费米子符号问题的系统中失效。（2）量子临界点存在发散的涨落模式，无穷长的关联时间使得人们难以求解基态。（3）费米子的非平衡研究缺乏比较通用的理论工具。

而在这一工作中，对于强关联量子临界问题，我们提出了一个处理费米子符号问题的普适方案：非平衡视角。该方法同时回答了上述三大难题——基于非平衡的临界标度理论，充分利用到达平衡态前的短时信息，可以在费米子符号问题出现或者变得严重之前，就把量子临界性研究清楚，并揭示更丰富的非平衡物理。

我们在两个此前已经研究清楚模型中验证了该方法是可行的、有效的、普适的。并将该方法用于求解各向异性狄拉克锥上的 $SU(3)$ Hubbard 模型，确定了它的基态相图，发现了新奇的手征 $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类，并计算了它的临界指数。在该问题的求解中，非平衡方法将计算效率提高了数百万倍。

关键词： 量子蒙特卡罗方法，费米子符号问题，量子临界性，强关联系统， $SU(3)$ Hubbard 模型

ABSTRACT

For a long time, researchers studying the quantum critical properties of fermion systems have encountered three main challenges: (1) Quantum Monte Carlo methods, which are effective for strongly correlated problems, fail in systems with fermionic sign problems. (2) The presence of divergent fluctuation modes at the quantum critical point and infinitely long correlation times prohibits finding the ground state. (3) There is a lack of general theoretical tools for analyzing non-equilibrium fermions.

In this study, we propose a universal solution to tackle the fermionic sign problem in strong-correlated quantum critical issues: a non-equilibrium approach. This method addresses the aforementioned challenges by leveraging non-equilibrium critical scaling theory and utilizing short-time information effectively before equilibrium states are reached. We can universally probe the fermionic quantum criticality via short-time dynamics before the fermion sign problem arises or becomes computationally prohibitive.

We have demonstrated that this method is feasible, efficient, and universally applicable through its successful application to two well-studied models. By employing this approach to solve the SU(3) Hubbard model on anisotropic Dirac cones, we determined its ground state phase diagram, identified a novel chiral SU(3)/[SU(2) $\times$ U(1)] universality class. Our non-equilibrium strategy significantly enhanced computational efficiency by several million times during this process.

Key words: Quantum Monte Carlo methods, Fermion sign problem, Quantum criticality, Strongly correlated systems, SU(3) Hubbard model

目录

1	绪论	1
1.1	量子蒙特卡罗中的费米子符号问题	1
1.2	量子临界行为的普适性与标度不变性	3
1.3	基于费米子非平衡量子临界性处理符号问题的思路	4
2	理论基础：费米子的非平衡量子临界性	5
2.1	虚时弛豫框架	5
2.2	普适标度理论	6
3	计算方法：基于行列式蒙特卡罗算法模拟虚时弛豫	7
3.1	虚时演化	7
3.2	行列式蒙特卡罗模拟	8
4	应用实例一：单狄拉克锥上的 Hubbard 模型	11
4.1	单狄拉克锥模型的狄拉克半金属-铁磁相变	11
4.2	弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为	12
4.3	用非平衡方法研究量子临界性	14
5	应用实例二： t - V 模型中的“不必要的”符号问题	21
5.1	t - V 模型的狄拉克半金属-电荷密度波相变	21
5.2	弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为	22
5.3	用非平衡方法研究量子临界性	24
6	应用实例三：各向异性狄拉克锥上的 $SU(3)$ Hubbard 模型	25
6.1	各向异性狄拉克锥与 $SU(3)$ Hubbard 相互作用	25
6.2	新奇的手征 $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类	26
6.3	用非平衡方法确定基态相图与临界指数	27
6.4	弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为	30

7 总结	33
参考文献	35
在读期间发表的学术论文与取得的研究成果	39
附录 A t - V 模型的符号问题特性补充	41
附录 B $SU(3)$ 群生成元的 Gell-Mann 矩阵表示	42
附录 C 计算狄拉克半金属- λ_8 反铁磁相图中临界点	43
致谢	45

插图目录

1.1	[¹]两体量子系统的世界线在 2 维实空间和 1 维虚时间中的不同构型.(a) 两个全同费米子进行奇数次交换, 构型权重为负值.(b) 两个全同费米子进行偶数次交换, 构型权重为正值.	1
2.1	狄拉克费米子的相图草图与淬火示意图. 用于淬火的三种初态为: (i) 狄拉克半金属相 (DSM), (2) 完全有序相, (3) 高温随机相. 所有初态都对应于重整化群不动点.	5
4.1	(a) 单狄拉克锥格点哈密顿量的能带. 系统能级半填满时, 无质量的狄拉克费米子激发具有线性的色散关系 $E = \pm \mathbf{k} $. (b) 导带的等能面, 在整个第一布里渊区中都是完美的同心圆.	12
4.2	平均符号随演化虚时的变化. 相互作用强度取在量子临界点 $U = U_c = 7.249$, 系统尺寸为 $L = 17$. 灰色虚线标记出 $\tau L^{-z} = 0.3$ 对应的位置.	13
4.3	不同初态出发的弛豫过程中关联长度比 R 随虚时 τ 的变化, 虚时已被重标度为 τL^{-z} . (a) 是从饱和铁磁初态出发的弛豫过程, (b) 是从狄拉克半金属初态出发的弛豫过程. 不同尺寸的数据重合表示非平衡标度关系成立. 数据重合的区域标示着非平衡标度关系成立的虚时范围.	14
4.4	用非平衡方法确定量子临界点 U_c 和关联长度指数 ν . (a) 表示初态为狄拉克半金属相, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联长度比 R 随 Hubbard 相互作用强度 U 的变化. 实线是基于标度关系对数据点的拟合线, 由拟合出的交点位置确定出临界点 $U_c = 7.249(4)$. (b) 是对 (a) 做重标度的结果, 不同尺寸的变化曲线在以 $gL^{1/\nu}$ 为横轴的坐标中重合, $1/\nu = 1.23(2)$. (c) 展示了通过重采样技术得到的 1000 个样本基于标度关系拟合得到的临界点和临界指数的分布. (d) 表示初态为饱和铁磁相, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联长度比 R 随 Hubbard 相互作用强度 U 的变化.	15

- 4.5 用非平衡方法确定玻色场反常量纲 η_ϕ 和费米场反常量纲 η_ψ .(a) 表示玻色场结构因子 $S(0)$ 和费米子关联 $G(k = \Delta k)$ 随尺寸 L 的变化. 其中相互作用强度取为临界值 U_c , 固定虚时演化时长满足 $\tau L^{-z} = 0.3$ 或 $\tau L^{-z} = 0.5$. 虚线表示双对数坐标中的线性拟合.(b) 展示通过拟合斜率得到的玻色场反常量纲 η_ϕ 和费米场反常量纲 η_ψ , 散点表示由重采样技术得到的不同样本的拟合结果. 16
- 4.6 在临界点上 ($U = 7.249$) 从饱和铁磁初态出发的虚时弛豫行为.(a) 展示了玻色场结构因子 $S(0)$ 随虚时 τ 的变化, (b) 是基于标度关系对 (a) 的重标度, $\eta_\phi = 0.395$.(c) 展示了费米子关联 $G(k = \Delta k)$ 随虚时 τ 的变化, (d) 是基于标度关系对 (c) 的重标度, $\eta_\psi = 0.129$ 17
- 4.7 在临界点上 ($U = 7.249$) 从狄拉克半金属初态出发的虚时弛豫行为.(a) 展示了玻色场结构因子 $S(0)$ 随虚时 τ 的变化, (b) 是基于标度关系对 (a) 的重标度, $\eta_\phi = 0.395$.(c) 展示了费米子关联 $G(k = \Delta k)$ 随虚时 τ 的变化, (d) 是基于标度关系对 (c) 的重标度, $\eta_\psi = 0.129$ 18
- 5.1 在临界点附近, 平均符号随相互作用强度 V 的变化.(a) 文献^[35]显示基态存在渐进无符号问题, 即 V 在一定范围内, 平均符号随着尺寸增大而增大.(b) 我们的短时方法显示在大尺寸下可以完全没有符号问题. 22
- 5.2 弛豫过程中的平均符号与非平衡标度 (从有序初态出发) .(a) 平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, 灰色虚线标记出 $\tau L^{-z} = 0.3$ 的位置, 此时平均符号为 1, 无符号问题.(b) 关联长度比随 τL^{-z} 的变化. 对于较大的尺寸, $\tau L^{-z} = 0.3$ 处的数据重合即表示非平衡标度关系成立. 23
- 5.3 用非平衡方法确定临界点 V_c 与关联长度指数 ν .(a) 和 (b) 分别展示从狄拉克半金属初态和饱和电荷密度波初态出发, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联比率随相互作用强度的变化. 曲线交点为临界点, 与灰色虚线所标示的文献结果 $V_c = 1.355$ 接近^[33].(c) 和 (d) 即是对 (a) 和 (b) 的重标度结果, 关联长度指数取为 $\nu = 0.77$ ^[33], 大尺寸下的数据重合显示非平衡标度关系成立. 23

- 6.1 正方晶格中各向异性的狄拉克锥.(a) 具有交错磁通的正方晶格, 巡游电子围绕一个元格 (plaquette) 移动将获得 $\pm\phi$ 的相位.(b) 第一布里渊区中的能带结构, 有两个不等价的狄拉克点 $K = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ 和 $K' = (\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$.(c) 导带的等能面.(b) 和 (c) 展示的是 $\phi = 0.4\pi$ 的情况. 25
- 6.2 自发对称性破缺示意图. 模型原本具有 $Z_2 \times \text{SU}(3)$ 对称性, 其中 Z_2 是 AB 子晶格的对称性, $\text{SU}(3)$ 是三种不同味道之间的对称性. 自发对称破缺后的基态具有 Gell-Mann λ_8 生成元的“反铁磁”序, 这使得三重简并的狄拉克点完全打开能隙, 不同味道的费米子交错地局域在不同子晶格上. 保留的对称性除了整体 $U(1)$ 之外, 还有在 λ_8 生成元种简并的两种味道之间的 $\text{SU}(2)$ 对称性. 27
- 6.3 用非平衡方法确定相变临界点 U_c 和临界指数 ν . 其中磁通为 $\phi = 0.075\pi$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$.(a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线.(b) 重标度后不同尺寸的数据重合.(c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. 27
- 6.4 模型的基态相图, 在 U - ϕ 平面上分为 Gell-Mann λ_8 生成元“反铁磁”相和狄拉克半金属相. 蓝色数据点是通过非平衡方法 (从有序初态出发的弛豫, 固定 $\tau L^{-z} = 0.25$) 确定的临界点, 蓝色实线为视觉辅助作用. 浅蓝色区域表示在非平衡方案下符号问题不太严重, 可以计算的区域, 它在临界点附近, 依赖于临界标度理论. 无序相有 6 个独立的狄拉克锥. 在有序相中它们全部打开能隙, 出现 4 种独立的 Goldstone 模式. 28
- 6.5 用非平衡方法确定反常量纲, 其中 $U = 1.1, \phi = 0.075\pi$.(a) 序参量平方 m^2 从有序初态出发, 在临界点的虚时弛豫行为.(b) 重标度后的 m^2 弛豫行为, 在大尺寸下数据重合.(c) 费米子关联 $G_{AB}(r = r_{\max})$ 从有序初态出发, 在临界点的虚时弛豫行为.(d) 重标度后的 $G_{AB}(r = r_{\max})$ 弛豫行为, 在大尺寸下数据重合. 29
- 6.6 符号问题的严重程度以及标度关系成立的时间范围, 其中 $U = 2.0, \phi = 0.1\pi$.(a) 平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, 在 $\tau L^{-z} = 0.25$ 时刻, 符号问题的严重程度尚可接受, 此后随着虚时增加平均符号迅速衰减, 难以计算.(b) 无量纲的关联长度比随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, $\tau L^{-z} = 0.25$ 时刻处于数据重合的范围内, 标度关系成立. 30

- 6.7 非平衡方法相较于平衡方法的效率提升倍率, 其中 $U = 2.0, \phi = 0.1\pi$. 非平衡方法取定 $\tau L^{-z} = 0.25$, 而通常平衡方法至少要取到 $\tau L^{-z} = 1.5$, 通过平均符号的比值估算效率增益. 非平衡方法可以将效率提升数十万倍, 且尺寸越大, 增益越明显. 31
- A.1 较小尺寸、较大相互作用强度, 平均符号随相互作用强度 V 的变化. 图中数据均是从有序初态出发弛豫了 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时间的结果. 41
- C.1 用非平衡方法确定相变临界点 U_c 和临界指数 ν . 其中磁通为 $\phi = 0.1\pi$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. 拟合得到 $U_c = 2.0(3), \nu^{-1} = 0.61(10)$ 43
- C.2 用非平衡方法确定相变临界点 ϕ_c 和临界指数 ν_ϕ . 其中磁通为 $U = 1$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. $\phi_c = 0.067(4)\pi, \nu_\phi^{-1} = 1.4(1)$ 43
- C.3 用非平衡方法确定相变临界点 ϕ_c 和临界指数 ν_ϕ . 其中磁通为 $U = 2$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. $\phi_c = 0.105(10)\pi, \nu_\phi^{-1} = 1.7(5)$ 44

表格目录

4.1	不同方法计算的基态相变临界点和临界指数对比. 除了我们用非平衡的方法计算了临界点和临界指数之外, 此前的平衡态的研究也给出了和我们一致 (在误差范围内) 的计算结果 ^[27,32]	17
6.1	不同 Gross-Neveu-Yukawa 普适类对于 $d = 2 + 1, N_f = 6$ 的临界指数对比. 表格中第一行 chiral $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 是我们发现的新普适类, 临界指数数值由非平衡的 PQMC 方法确定. 表格中 $4 - \epsilon, 2nd$ order 表示上临界维度展开至二阶的结果, FRG 表示泛函重整化群方法.	29

1 绪论

1.1 量子蒙特卡罗中的费米子符号问题

研究具有强关联相互作用的量子多体系统，是现代凝聚态物理、核物理、量子色动力学等领域中至关重要的课题。然而，由于量子多体系统的希尔伯特空间是随着系统尺寸增大而指数级增大，绝大多数强关联量子多体问题目前都找不到通用的、误差可控的解析求解方法。随着人们在实验上不断发现依赖于强关联物理的新奇物理现象，比如高温超导和分数化激发等，人们在理论层面迫切需要有效的、无偏的数值方法来探究其物理本质。在目前可用的各种数值方法中，量子蒙特卡罗 (QMC) 方法被认为是最重要的方法之一。由于 QMC 通常不依赖于微扰和特定的变分形式，它可以准确而高效地求解量子多体问题，而不引入系统性的偏差。QMC 模拟之所以高效，是因为它不需要对整个指数级大的多体希尔伯特空间进行采样，而是在其中自动采样最具代表性的量子构型。QMC 模拟得到误差足够小的计算结果所需的计算时间是随系统尺寸多项式级增大的，而非指数级增大^[1]。

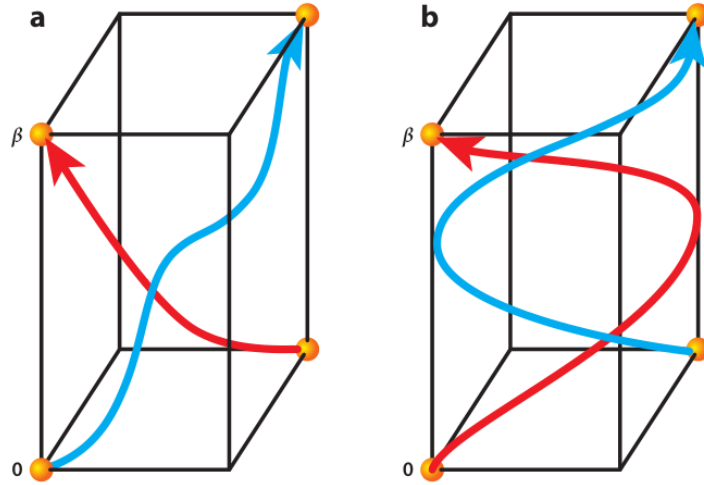


图 1.1^[1] 两体量子系统的世界线在 2 维实空间和 1 维虚时间中的不同构型。(a) 两个全同费米子进行奇数次交换，构型权重为负值。(b) 两个全同费米子进行偶数次交换，构型权重为正值。

具体地，量子蒙特卡罗方法通常可以通过路径积分表示（引入虚时间维度）把 d 维的量子系统映射到 $d + 1$ 维的经典系统，从而把量子配分函数写为经典玻尔兹曼权重的求和，即

$$Z = \text{tr} (e^{-\beta H}) = \sum_c w(c), \quad (1.1)$$

其中 $\beta \equiv \frac{1}{kT}$ 是温度的倒数, H 是量子多体系统的哈密顿量, $w(c)$ 是经典系统的玻尔兹曼权重, 用 c 标记经典构型. 比如在世界线量子蒙特卡罗方法中, c 表示所有粒子的世界线在实空间和虚时间中的构型 (如图1.1). 这样, 量子系统的求解就转化为了经典构型的采样问题. 在经典构型的采样问题中, 人们通常可以将构型权重等同于构型出现的概率, 从而使用各种经典的蒙特卡罗方法 (比如 Metropolis 算法) 对最具代表性的构型进行采样, 而不必将上述求和遍历所有的构型. 在经典系统中, 构型权重总是正的, 因此这样的做法可以自然地进行. 然而在费米子系统和有阻挫的玻色子系统中, 玻尔兹曼权重 $w(c)$ 并不总是正的, 例如图1.1中, 奇数次的费米子交换将导致负的玻尔兹曼权重 $w(c)$. 在这些量子系统中, 玻尔兹曼权重不能直接被用作采样概率, 普通的 QMC 方法就失效了. 这就是臭名昭著的费米子符号问题. 费米子符号问题严重阻碍了人们对强关联量子多体系统的研究, 其本质上来源于费米子的交换统计性质, 不仅出现在 QMC 中, 它在其他求解量子多体系统的数值方法 (比如分子动力学方法) 中也普遍存在. 如何处理符号问题, 关系到我们对量子多体理论最根本的理解^[2-5].

费米子符号问题有最简单粗暴的处理办法, 即强行把玻尔兹曼权重的绝对值 $|w(c)|$ 作为采样概率进行构型采样, 并这样计算观测量^[1,6]:

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_c w(c) O(c)}{\sum_c w(c)} = \frac{\sum_c |w(c)| \text{sign}(c) O(c) / \sum_c |w(c)|}{\sum_c |w(c)| \text{sign}(c) / \sum_c |w(c)|} = \frac{\langle O \rangle_{|w|}}{\langle \text{sign} \rangle_{|w|}}. \quad (1.2)$$

其中我们已经把玻尔兹曼权重分解为 $w(c) = |w(c)| \text{sign}(c)$, 并用

$$\langle \square \rangle_{|w|} = \frac{\sum_c \square |w(c)|}{\sum_c |w(c)|} \quad (1.3)$$

来表示直接以 $|w(c)|$ 为采样概率得到的 $\square$ 统计量, 这相当于在一个忽略了费米子的交换统计的玻色化的系统中的观测结果. 用 (1.2) 这样简单粗暴地计算观测量, 其代价是: $\langle \text{sign} \rangle_{|w|}$ 由于不同构型的权重常常正负抵消而接近零, (1.2) 表现为两个很小的数相除, 这在数值上通常是病态的, 会引入很大的数值误差. 具体的, 人们证明这个其误差的一般规律是

$$\Delta \langle O \rangle \sim \frac{1}{\langle \text{sign} \rangle_{|w|}} \sim e^{\beta N \Delta f} \quad (1.4)$$

其中 Δf 表示实际的费米子系统与其对应的玻色化的系统的自由能密度的差值. 由于误差的放大因子指数级依赖于温度的倒数 β 以及粒子数 N , 对于求解热力学极限下量子系统的基态问题, QMC 仍然需要指数级长的计算时间才能得到可控的计

算误差.

费米子符号问题被证明是一个 NP-hard 问题, 目前人们没有找到能够在多项式级时间内求解该类问题的通用方法^[6-8]. 近年来, 国内外的各种研究发现, 如果系统具有某些对称性, 例如 Kramers 时间反演对称性或者 Majorana 时间反演对称性, 则可以在无符号问题的表示中进行 QMC 模拟^[9,1,10-12]. 在没有这些对称性的系统中, 人们正在尝试选用不同的基、不同的多体相互作用解耦合方式 (Hubbard–Stratonovich 变换) 来减轻符号问题, 但目前这些方法并不能容易地推广到其他的系统^[13-15].

1.2 量子临界行为的普适性与标度不变性

强关联量子多体系统的量子临界点和临界性质, 描述了各种奇特的量子相之间的是如何发生连续相变的, 是量子多体领域备受关注的、最具挑战性的问题之一. 不幸的是, 由于临界慢化的存在, 热力学极限的系统在临界点上需要经过无穷长的时间 (或者虚时间) 才能演化为基态, 而费米子符号问题的严重程度指数级依赖于演化时间, 因此人们几乎不可能在有符号问题的费米子系统中数值上准确地研究基态的相变.

而物理学是这样地耐人寻味: 临界慢化实际上是量子临界普适性和标度性的一个侧面, 而另一面, 普适性和标度性可以成为研究量子临界性的有力工具, 并已成为量子临界性研究的普遍范式. 根据 Landau-Ginzburg-Wilson 范式, 相变可以由序参量描述, 在临界点附近, 物理量的临界行为具有标度不变性, 标度量纲由几个临界指数刻画. 并且重整化群研究表明, 各个具体系统的相变根据维数、对称性等特征可以划分到不同的普适类, 而不依赖于模型的具体细节, 同一普适类中的不同模型具有相同的临界指数^[16-20]. 过去半个世纪以来, 基于这种范式, 人们对各种经典系统、量子系统, 包括一些无符号问题的费米子系统进行了广泛的研究. 甚至最近在非 Landau-Ginzburg-Wilson 范式的相变中, 人们依然发现了普适标度行为^[21-22].

非平衡物理, 是比平衡态物理更一般也更困难的方向, 因为平衡态研究中依赖的一些良好的、可以大大简化求解的、稳定的性质常常在非平衡中被破坏. 而在量子临界点, 平衡仅是特例, 而不是常态——无穷长的非平衡演化过程才是人们所能观测到的真实. 有趣的是, 过去的一系列研究在一些经典系统和量子系统中揭示了非平衡的普适标度行为, 多体系统的临界动力学在时间尺度上也具有标度不变性^[23]. 在此, 物理学的困难又将展示了它有用的另一面.

最近,我与合作者的一项研究将非平衡标度理论拓展到了费米子系统中,在蜂窝晶格 Hubbard 模型中用无符号问题的 QMC 方法揭示了狄拉克费米子系统的普适虚时临界动力学,并提出了基于短时弛豫动力学研究费米子临界性的普适理论框架,可以在非平衡态,利用短时的信息准确预测基态的量子临界点和临界行为,而这些短时信息在以往平衡态的研究中通常被忽略.这一框架大大提高了 QMC 求解量子临界问题的效率^[24].

1.3 基于费米子非平衡量子临界性处理符号问题的思路

回顾之前提到的量子蒙卡中的费米子符号问题,和量子临界行为的普适性与标度不变性,考虑到:

- 研究费米子的基态量子临界性需要演化几乎无穷长的时间.
- 费米子符号问题的严重性随着演化时间指数级增长.
- 根据费米子的非平衡标度理论可以利用短时动力学预测基态临界性质.

我们自然可以提出这样的猜测:根据费米子的非平衡标度理论,可以在费米子符号问题出现之前,或者费米子符号问题变得严重之前,就求解出基态的临界性质,从而克服费米子符号问题带来的困难,将原本几乎不可能求解的问题变为可以求解,并且这种方法是普适的.

本文将系统地、完整地、详细地介绍这种方法,并在两个具体的模型中验证这种方法的有效性和普适性.为了验证有效性,我们选取的是此前已有平衡态研究的模型,要么是存在符号问题但不太严重,要么是存在无符号问题的算法,这样我们可以将我们的结果与之前的结果比对印证.接下来的内容安排如下:第二章详细讲述本文的理论分析方法,即费米子量子临界性的非平衡标度理论.第三章详细介绍本文使用的数值方法,以及虚时弛豫动力学.第四章、第五章分别在两个具体的模型中展示如何利用非平衡方法在有符号问题的情况下研究量子临界性,以说明该方法的可行性和普适性.第六章我们使用这一方法求解此前人们无法求解的 $SU(3)$ Hubbard 模型.第七章总结非平衡方法处理符号问题的效果,展望其普适地解决强关联费米子临界性问题的潜力.

2 理论基础：费米子的非平衡量子临界性

本章我将介绍我与合作者在^[24]中揭示的狄拉克费米子的非平衡普适标度，以及介绍我们提出的费米子短时框架. 该框架可以在短时阶段就把费米子系统的量子临界点和临界指数都解出来，从而规避费米子符号问题.

2.1 虚时弛豫框架

在平衡态的研究框架中，为了研究费米子的基态临界性质，人们往往制备一个任意初态，并将参数设置在临界点，做虚时演化，把非基态的信息都投影掉. 实际上，在非基态的演化行为就暗示着基态的临界性质，这些信息总是被浪费了. 在这里，我们制备几种特定的初态，并说明这些初态淬火到临界点时，其动力学演化行为可以由基态的临界点和临界指数普适地刻画.

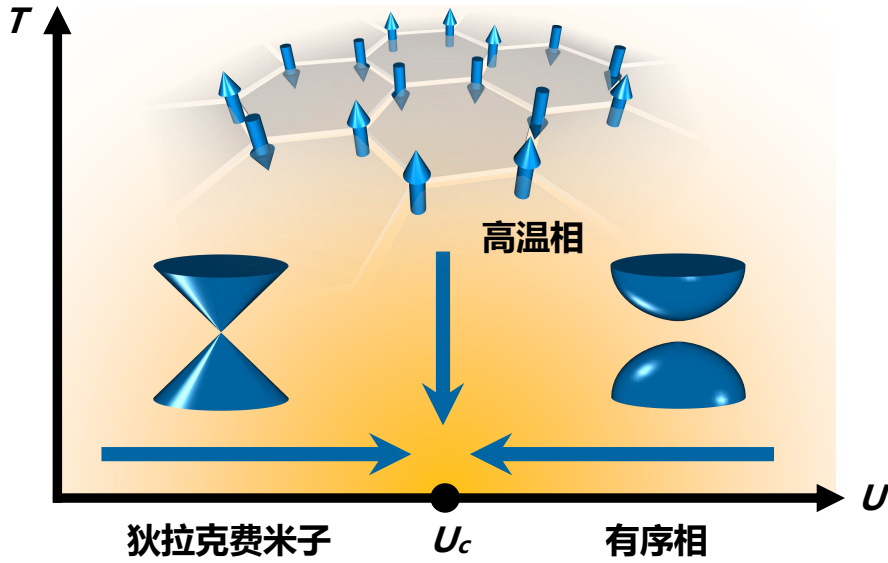


图 2.1 狄拉克费米子的相图草图与淬火示意图. 用于淬火的三种初态为: (i) 狄拉克半金属相 (DSM), (2) 完全有序相, (3) 高温随机相. 所有初态都对应于重整化群不动点.

图2.1展示了狄拉克费米子系统的相图草图，横轴 U 表示相互作用强度. $U = 0$ 为无相互作用极限，在能谱中，电子填充至能隙闭合点，此时的费米面退化为狄拉克点. 该量子多体系统存在无能隙的狄拉克费米子涨落，其激发的准粒子为狄拉克费米子，具有线性的色散关系. $U \gg 1$ 为强相互作用极限，存在有限的能隙，系统变为绝缘体，并且长程有序. 在临界点 U_c ，能隙被打开，狄拉克费米子获得质量. 高温相呈现巨大的随机涨落，比如在有自旋自由度的系统中，制备自旋随机朝上

或朝下的态来模拟高温相.

淬火是这样实现的: 我们制备一个初态 $|\psi_0\rangle$ 为上述三种状态之一, 并使用处于临界点的哈密顿量将其虚时演化. 在虚时刻 τ , 观测量 O 表现为

$$\langle O(\tau) \rangle = \frac{\langle \psi_0 | e^{-\frac{\tau}{2}H} O e^{-\frac{\tau}{2}H} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | e^{-\tau H} | \psi_0 \rangle}. \quad (2.1)$$

虚时演化的细节我们在下一章详述. 虚时 τ 足够大时, 观测量的数值变得稳定, 可视为平衡态, 到达平衡所需的演化时间成为弛豫时间. 对于有限尺寸的系统, 弛豫时间也是有限的值. 观测量的非平衡演化行为由虚时弛豫动力学描述, 也即, 经过短暂的非普适阶段, 观测量按照普适标度理论给出的临界指数呈现幂律变化.

2.2 普适标度理论

在临界点附近, 弛豫时间将在热力学极限下无限延长, 从而使初始状态的影响在宏观时间尺度上得以持续. 一般地, 对于任一可观测量 O , 其动力学标度行为应该遵循以下规律:

$$O(\tau, g, L, \{X\}) = \tau^{-\frac{\kappa}{z}} f_O \left(g \tau^{\frac{1}{\nu z}}, L^{-1} \tau^{\frac{1}{z}}, \{X \tau^{-\frac{c}{z}}\} \right), \quad (2.2)$$

其中 $g \equiv U - U_c$ 代表与临界点的偏离程度, L 是晶格大小. 指数 κ 是可观测量 O 的标度量纲, ν 是关联长度的指数. 动力学指数 z 在狄拉克量子临界点中取值为 1, 因为非相对论性修正项在此情境下是无量纲. 集合 $\{X\}$ 及其指数 c 表示与初始状态相关的各种可能变量.

关于式 (2.2) 的两点说明如下: (1) 当 $\tau \rightarrow \infty$ 时, 式 (2.2) 可转化为常规的有限尺寸标度形式, 此时 $\{X\}$ 变得不再重要. (2) 本研究涉及的三种初始状态——狄拉克半金属态 (DSM)、有序态和随机态——分别对应三个稳定的不动点. 因此, 在式 (2.2) 中不直接涉及 $\{X\}$. 对于不同的初始状态, 标度函数 f_O 会有所不同.

至于如何具体利用式 (2.2) 所示的标度理论来确定临界点和临界指数, 将在第四章和第五章的两个狄拉克费米子系统中演示.

3 计算方法：基于行列式蒙特卡罗算法模拟虚时弛豫

本文基于费米子的行列式蒙特卡罗方法模拟不同初态在临界点的弛豫过程. 虚时演化是常见的无偏差地求解量子多体系统的基态的方法, 研究表明, 与实时演化一样, 它能够展现量子多体系统真实的临界性质, 不仅在量子模拟中容易实现, 还能在量子计算机实验平台上实现. 行列式蒙特卡罗方法是最常见的费米子系统的量子模拟算法, 它引入辅助场自由度将费米子间相互作用解耦合为费米子与辅助场的相互作用, 并将费米子自由度积掉, 辅助场构型的玻尔兹曼权重由行列式表示.

3.1 虚时演化

我们对弛豫动力学的研究基于虚时演化. 考虑 Wick 转动 $t \rightarrow i\tau$, 虚时动力学的运动方程是虚时薛定谔方程^[23]

$$\frac{\partial}{\partial \tau} |\psi(\tau)\rangle = -H |\psi(\tau)\rangle. \quad (3.1)$$

这种演化不是幺正的, 因此我们使用一个归一化的形式解

$$|\psi(\tau)\rangle = Z_0^{-1} e^{-\tau H} |\psi(0)\rangle, \quad (3.2)$$

其中模长 $Z_0 = \|e^{-\tau H} |\psi(0)\rangle\|$ 被用于归一化. 虚时演化算符 $e^{-\tau H}$ 将初态 $|\psi(0)\rangle$ 投影到系统的基态 $|E_0\rangle$, 即

$$\begin{aligned} |\psi(\tau)\rangle &= Z_0^{-1} \sum_n e^{\tau E_n} |E_n\rangle \langle E_n | \psi(0) \rangle \\ &\sim |E_0\rangle + c_1 e^{\tau \Delta} |E_1\rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

其中 $|E_n\rangle$ 代表第 n 个激发态, $\Delta = E_1 - E_0$ 是第一激发态与基态之间的能量差, c_1 是一个常数. 这里我们只考虑第一激发态, 因为更高能量的激发态衰减得比第一激发态要快得多. 只要存在有限的能隙 Δ , 经过长时间的演化后, 波函数 $|\psi(\tau)\rangle$ 将完全投影到基态, 不包含任何激发态的信息. 我们感兴趣的是在达到这个基态之前的短时动力学, 其弛豫时间尺度为 $\zeta \sim \frac{1}{\Delta}$. 在能隙关闭 ($\Delta \rightarrow 0$) 的临界点, 弛豫过程变得无限缓慢, 显示出临界慢化现象.

3.2 行列式蒙特卡罗模拟

我们采用大规模行列式量子蒙特卡罗 (DQMC) 方法来研究我们模型的虚时弛豫动力学^[3,25]. 如上一章的虚时弛豫框架, 我们制备一个初态 $|\psi_0\rangle$ 并将系统参数 U/t 设定在临界点上, 以观察可观测量在短时阶段的标度行为. 可观测量的期望值由 (1.2) 描述. 虚时传播算子作将初态向基态投影. 因此, 在这种语境下的 DQMC 框架也被称为投影量子蒙特卡罗 (PQMC)^[26]. 在数值计算中, 我们使用 Trotter 分解将虚时传播算子离散化为 $M = \tau/\Delta\tau$ (M 为整数) 个时间片, 即

$$e^{-\tau H} = \prod_{m=1}^M \left[e^{-\Delta\tau H_t} e^{-\Delta\tau H_U} + O(\Delta\tau^2) \right], \quad (3.4)$$

其中 H_t 和 H_U 分别是哈密顿量中的跃迁项和相互作用项. 这里我们暂时以 Hubbard 相互作用为例. 我们选择足够小的 $\Delta\tau/t < 0.05$. 为了解耦两体费米子-费米子耦合形式的 $e^{\Delta\tau H_U}$, 我们使用离散的 Hubbard-Stratonovich 变换

$$e^{-\frac{\Delta\tau U}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})^2} = \sum_{l=\pm 1, \pm 2} \gamma(l) e^{\sqrt{\frac{\Delta\tau U}{2}} \eta(l)(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}, \quad (3.5)$$

从而转化为单体费米子-辅助场耦合. 在这里, 我们引入了一个四分量的时空局域辅助场 $\gamma(\pm 1) = 1 + \sqrt{6}/3$, $\gamma(\pm 2) = 1 - \sqrt{6}/3$, $\eta(\pm 1) = \pm\sqrt{2(3 - \sqrt{6})}$, $\eta(\pm 2) = \pm\sqrt{2(3 + \sqrt{6})}$, 并使用 DQMC 对这些时空构型进行重要性采样. 接下来, 我们将详细说明 DQMC 如何数值计算采样概率.

对于每个虚时、每个空间位置上的 Hubbard 相互作用项, 我们采用了 Hubbard-Stratonovich 变换, 如方程(3.5)所示. 这意味着我们在 $d+1$ 维中引入了辅助场. 因此, 虚时传播子可以完全用单粒子算符表示. 这允许我们将其表示为费米子算符的以下二次型:

$$e^{-\tau H} \equiv \sum_{\mathbf{c}} e^{-\tau H_{\mathbf{c}}} = \sum_{\mathbf{c}} A_{\mathbf{c}} \prod_{m=1}^M e^{\tilde{\mathbf{c}}^\dagger T \tilde{\mathbf{c}}} e^{\tilde{\mathbf{c}}^\dagger V_{\mathbf{c}(m)} \tilde{\mathbf{c}}}, \quad (3.6)$$

其中 $\sum_{\mathbf{c}}$ 表示对辅助场的所有时空构型的求和. 考虑到辅助场的每个局部分量有 4 个可能值, 求和包括多达 4^{MN} 项, 其中 N 代表空间自由度的数目. $H_{\mathbf{c}}$ 表示解耦构型的哈密顿量, 而 T 和 $V_{\mathbf{c}(m)}$ 是解耦后得到的二次系数矩阵, $A_{\mathbf{c}}$ 是系数. $V_{\mathbf{c}(m)}$ 和 $A_{\mathbf{c}}$ 都依赖于辅助场的配构型.

演化算符的完整形式已在上面呈现. 接下来, 我们考虑表达初态. 我们使用的

初态都是直积态，数值上可以写成以下的 Slater 行列式：

$$|\psi_0\rangle = \bigotimes_{n_e=1}^{N_e} \left[\left(\sum_x c_x^\dagger P_{x,n_e} \right) |0\rangle \right] = \bigotimes_{n_e=1}^{N_e} \left[(\vec{c}^\dagger P)_{n_e} |0\rangle \right], \quad (3.7)$$

其中 N_e 表示电子数. 这意味着初态是 N_e 个费米子单体波函数的直积. 指标 x 表示电子的自由度，包括空间自由度、自旋自由度等. 矩阵元 P_{x,n_e} 代表第 n_e 个电子在 x 自由度上的概率幅.

注意，虚时传播子 $e^{-\tau H_c}$ 本质上是统计力学中辅助场构型的玻尔兹曼权重因子. 根据(3.6)和(3.7)，辅助场构型的配分函数可以表示为：

$$Z = \sum_c \langle \psi_0 | e^{-\tau H_c} | \psi_0 \rangle = \sum_c A_c \det [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]. \quad (3.8)$$

这里，我们使用 B_c 来表示二次系数矩阵的系数：

$$B_c(\tau_2, \tau_1) \equiv \prod_{m=\tau_1/\Delta\tau}^{\tau_2/\Delta\tau} e^T e^{V_c(m)}. \quad (3.9)$$

方程(3.8)右侧的表达式已经积分掉了费米子算符，用一个可计算的行列式表示来替代了格拉斯曼代数和费米子统计，所有矩阵运算都可以直接在计算机上执行.

最终，我们对辅助场的时空构型进行蒙特卡罗抽样. 在数值计算中，一个时空构型的权重是 $A_c \det [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]$. 按照经典的马尔可夫重要性抽样方法，我们依次对这个 $d+1$ 维辅助场的局部分量进行尝试性翻转. 然后我们使用 Metropolis 算法来计算基于翻转前后构型权重比例的变化接受概率. 具体来说，我们需要计算以下权重比：

$$R_{c'c} \equiv \frac{A_{c'} \det [P^\dagger B_{c'}(\tau, 0) P]}{A_c \det [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]}, \quad (3.10)$$

其中 c' 表示翻转后的构型， c 表示原始构型. 实际上，我们不需要分别计算两种构型的权重. 这是因为我们执行的翻转是在时空中局域的，因此

$$B_{c'}(\tau, 0) = B_c(\tau, \zeta) (1 + \Delta_{c'c}) B_c(\zeta, 0). \quad (3.11)$$

这里， $\Delta_{c'c}$ 是一个高度稀疏的矩阵，只有与局部辅助场翻转涉及的自由度对应的矩阵元素是非零的. 因此，两个行列式的比值可以表示为：

$$\frac{\det [P^\dagger B_{c'}(\tau, 0) P]}{\det [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]} = \det \left\{ \mathbb{1} + \Delta_{c'c} B_c(\zeta, 0) P [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]^{-1} P^\dagger B_c(\tau, \zeta) \right\}. \quad (3.12)$$

由于 $\Delta_{c'c}$ 的稀疏性, 上述方程右侧的行列式只需要考虑计算中涉及的几个自由度. 对于有符号问题的情况, 这样计算出来的权重比 $R_{c'c}$ 不一定是正实数, 我们在做蒙卡抽样时, 用其模长 $|R_{c'c}|$ 来计算接收概率, 并用(1.2)来处理蒙卡观测结果.

在 DQMC 中, 为了计算物理可观测量, 我们只需要对构型可观测量 $\langle O(\tau) \rangle_c$ 进行统计.

$$\langle O(\tau) \rangle = \sum_c \text{Pr}_c \langle O(\tau) \rangle_c + O(\Delta\tau^2), \quad (3.13)$$

其中 Pr_c 表示构型概率,

$$\text{Pr}_c = \frac{1}{Z} A_c \det [P^\dagger B_c(\tau, 0) P], \quad (3.14)$$

$$\langle O(\tau) \rangle_c = \frac{\langle \psi_0 | e^{-\frac{\tau}{2} H_c} O e^{-\frac{\tau}{2} H_c} | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | e^{-\tau H_c} | \psi_0 \rangle}. \quad (3.15)$$

由于我们采用重要性抽样, 抽样频率与构型概率成正比. 最终, 在计算可观测量时, 我们只需对抽样的构型可观测量取平均. 如果可观测量是单粒子算符, 即可以费米子算符的二次型表示, 那么可以采用类似于方程(3.8)的方式积分掉费米子自由度, 并通过行列式进行数值计算. 在数值积分掉费米子自由度后, 费米子等时格林函数可以使用以下矩阵元表示:

$$\langle c_{x_1}^\dagger c_{x_2} \rangle_c = \left\{ B_c \left(\frac{\tau}{2}, 0 \right) P [P^\dagger B_c(\tau, 0) P]^{-1} P^\dagger B_c \left(\tau, \frac{\tau}{2} \right) \right\}_{x_1, x_2}. \quad (3.16)$$

对于四费米子算符或更高阶的可观测量, 我们基于 Wick 定理使用费米子等时格林函数进行计算.

4 应用实例一：单狄拉克锥上的 Hubbard 模型

这一节讨论二维正方晶格上的单狄拉克锥模型加 Hubbard 相互作用发生的铁磁相变，该相变属于 $N = 2$ 手征 Ising 普适类。该模型目前没有无符号问题的求解办法，但是符号问题不太严重，以至于平衡态的研究也勉强可以进行。之前的一项研究使用 Gutzwiller 投影量子蒙卡研究了该相变平衡的基态性质，这一方法在一定程度上减轻了符号问题，但严重依赖于经验参数，并非普适的方法^[27]。这里，我们使用短时方法研究了该模型的量子临界性，能够准确的求解临界点和临界指数，与之前的研究结果^[27]吻合，验证了该方法的有效性。

4.1 单狄拉克锥模型的狄拉克半金属-铁磁相变

在动量空间中，单狄拉克锥的哈密顿量为

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger v_f (k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \psi_{\mathbf{k}}, \quad (4.1)$$

其中 $\psi_{\mathbf{k}} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{\mathbf{k}\downarrow})^T$ 表示在动量空间中的费米子的湮灭算符， v_f 是费米速度（这里取 $v_f = 1$ ）， σ_x 和 σ_y 是泡利矩阵。对其做离散的傅里叶变换可以得到晶格哈密顿量

$$H_0 = \sum_i \sum_{\mathbf{R}} \left(t_{\mathbf{R}} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i+\mathbf{R},\downarrow} + \text{h.c.} \right). \quad (4.2)$$

$c_{i,\uparrow}^\dagger$ 和 $c_{i+\mathbf{R},\downarrow}$ 是相应格点上自旋向上和向下的电子的产生和湮灭算符，长程的跃迁振幅 $t_{\mathbf{R}}$ 是距离 $\mathbf{R}$ 的函数

$$t_{\mathbf{R}} = \frac{i(-1)^{R_x}}{\frac{L}{\pi} \sin(\pi \frac{\pi R_x}{L})} \delta_{R_y,0} + \frac{(-1)^{R_y}}{\frac{L}{\pi} \sin(\pi \frac{\pi R_y}{L})} \delta_{R_x,0}, \quad (4.3)$$

其中 L 是晶格的线性尺寸，该模型只在 L 为奇数的情况下有良好定义。(4.2)式所示格点哈密顿量的能带结构如图4.1所示，为单狄拉克锥^[28]。

在单狄拉克锥模型的基础上，考虑局域的 Hubbard 排斥 ($U > 0$) 相互作用

$$H = H_0 + U \sum_i (n_{i,\uparrow} - 1/2) (n_{i,\downarrow} - 1/2) \quad (4.4)$$

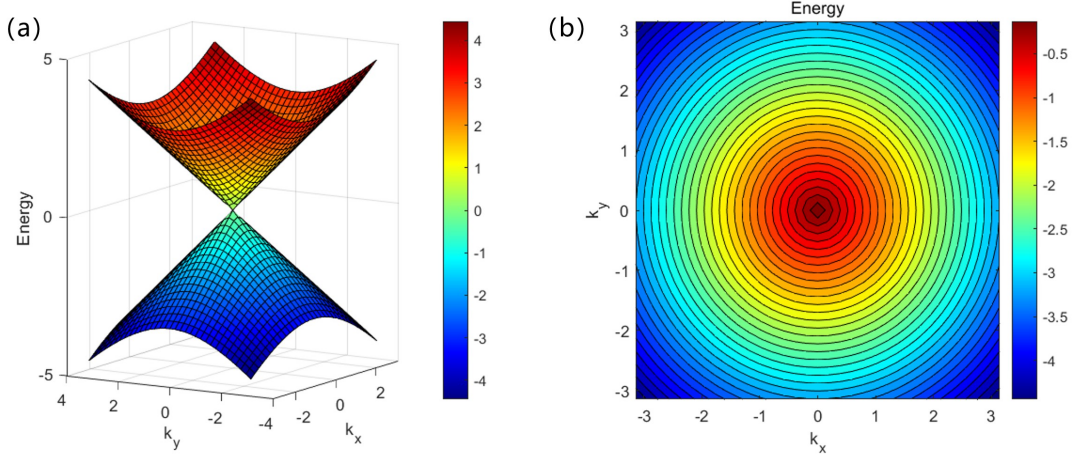


图 4.1 (a) 单狄拉克锥格点哈密顿量的能带. 系统能级半填满时, 无质量的狄拉克费米子激发具有线性的色散关系 $E = \pm |\mathbf{k}|$. (b) 导带的等能面, 在整个第一布里渊区中都是完美的同心圆.

其中 $n_i = c_i^\dagger c_i$ 表示 i 位置的粒子数算符. 在相互作用强度 U 较小时, 系统处于狄拉克半金属相. 在 U 较大时, 系统处于铁磁相. 在临界点 U_c 存在连续相变, 由铁磁序参量描述. 模型哈密顿量具有自旋的 Z_2 对称性, 自发对称性破缺变成反铁磁相后, Z_2 对称性被破坏, 该相变属于手征 Ising 普适类^[29].

4.2 弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为

我们首先最关心的问题自然是在临界点上符号问题有多严重, 以及它在虚时演化中的行为. 考虑到费米子符号问题带来的误差放大因子反比于平均符号, 我们用平均符号来衡量符号问题的严重程度, 平均符号越小, 符号问题越严重, 平均符号越大, 符号问题越轻. 图4.2显示, 平均符号随着虚时演化迅速衰减, 演化的时间越长, 符号问题越严重. 在通常的平衡态的研究中, 人们需要演化足够长的虚时, 使得系统达到平衡, 才能看出基态的性质. 在我们的短时方法中, 只需要将标度不变虚时 τL^{-z} 取到很小的值 ($z = 1$), 比如 $\tau L^{-z} = 0.3$. 此时, 平均符号大概在 10^{-1} 数量级, 是计算上可以接受的. 此外, 我们从图4.2中还能观察到, 符号问题的严重程度还与初态有关, 选用有序初态 (FM), 相比于无序初态 (DSM) 具有更严重的符号问题.

理论上讲, 标度不变虚时 τL^{-z} 取得越小, 符号问题就越轻. 但 τL^{-z} 不能取得无限小. 我们能使用短时方法确定临界性质, 依赖于普适临界标度关系(2.2). 而普适临界标度关系(2.2)的成立依赖于系统处于临界状态体现的标度不变性, 因此又需要 τL^{-z} 不能太小, 要接近临界状态, 才能比较好得符合标度关系(2.2). 因此, 我们需要数值上确定标度关系(2.2)能够成立的参数范围, 也即, τL^{-z} 最小能取到多小, $\tau L^{-z} = 0.3$ 是否在该范围内?

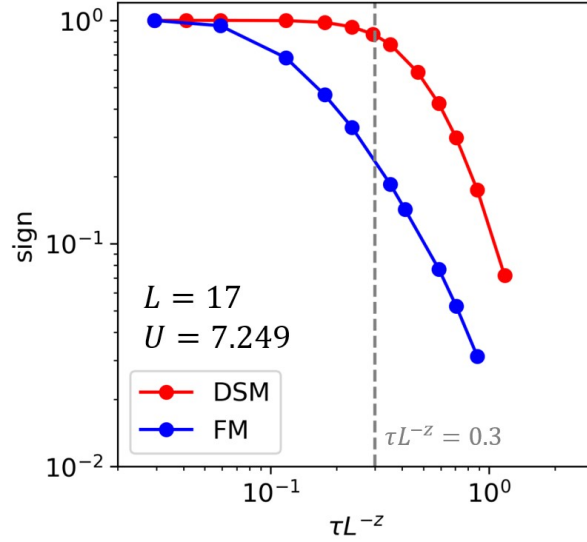


图 4.2 平均符号随演化虚时的变化. 相互作用强度取在量子临界点 $U = U_c = 7.249$, 系统尺寸为 $L = 17$. 灰色虚线标记出 $\tau L^{-z} = 0.3$ 对应的位置.

为了观察量子临界点的标度性, 我们定义几个可观测量. 定义铁磁结构因子为

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle S_i^z S_j^z \rangle, \quad (4.5)$$

其中局域序参量为 $S_i^z \equiv \vec{c}_i^\dagger \sigma^z \vec{c}_i$, $\vec{c}^\dagger \equiv (c_\uparrow^\dagger, c_\downarrow^\dagger)$. 关联长度比定义为

$$R = 1 - \frac{S(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k})}{S(\mathbf{k} = 0)} \sim \frac{\xi}{L}, \quad (4.6)$$

其中 $\Delta\mathbf{k} = \frac{1}{L}\mathbf{b}_1 + \frac{1}{L}\mathbf{b}_2$ 为具有周期性边界的晶格背景下的电子最小动量, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ 为倒格矢的基. 关联长度比率 R 是一个无量纲量, 根据(2.2), 关联长度比率 R 满足如下标度关系:

$$R(g, \tau, L) = f_R(gL^{1/\nu}, \tau L^{-z}), \quad (4.7)$$

其中 $g = U - U_c$.

如果我们将参数取在临界点上即 $g = 0$, 则关联长度比 R 仅是重标度虚时 τL^{-z} 的函数, 即

$$R(\tau L^{-z}) = f_R^{(g=0)}(\tau L^{-z}). \quad (4.8)$$

不同尺寸观察到的 R 的虚时演化行为都服从这一普适关系. 由此, 我们可以根据不同尺寸的数据重合来衡量标度关系是否成立, 以及找到使得标度关系成立的 τL^{-z} 时间范围. 如图4.3b 所示, 对于无序初态 (DSM) 出发的弛豫过程, 对于较大的尺寸 (比如 $L \geq 11$), $\tau L^{-z} = 0.3$ 就足以体现很好的数据重合. 而对于有序初态 (FM)

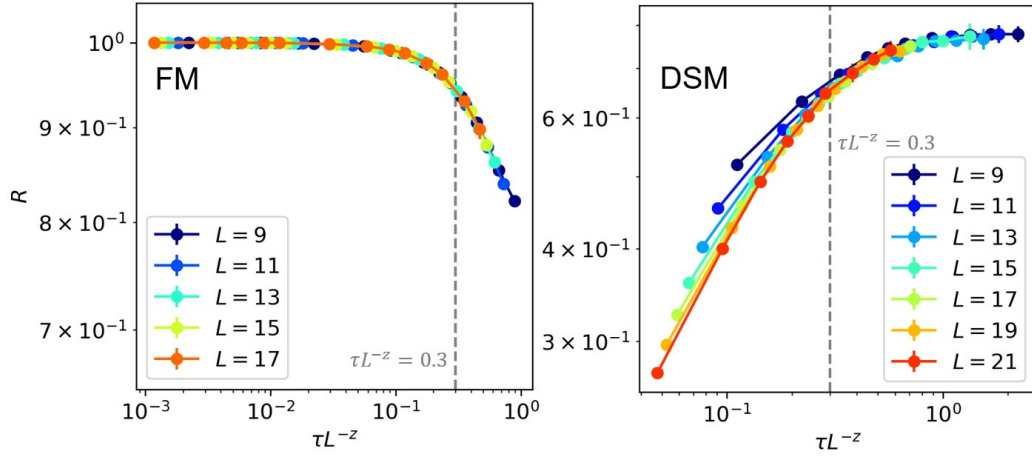


图 4.3 不同初态出发的弛豫过程中关联长度比 R 随虚时 τ 的变化，虚时已被重标度为 τL^{-z} 。(a) 是从饱和铁磁初态出发的弛豫过程，(b) 是从狄拉克半金属初态出发的弛豫过程。不同尺寸的数据重合表示非平衡标度关系成立。数据重合的区域标示着非平衡标度关系成立的虚时范围。

出发的弛豫过程，不论 τL^{-z} 取得多小，都有很好的数据重合，也即关联长度比 R 的弛豫标度关系(4.8)不论 τL^{-z} 取多小都成立。这是因为在初态 (FM)， R 本身就是一个标度不变量。不过，即使对于有序初态 (FM)，我们也不考虑将 τL^{-z} 取得太小，因为那会使得标度关系(4.7)几乎与 $g L^{1/\nu}$ 无关，这就难以通过(4.7)来确定量子临界点了。总之，不论选用有序初态还是无序初态研究弛豫过程， $\tau L^{-z} = 0.3$ 是一个合理的取值，它既能使得短时标度成立，又能获得足够良好的平均符号，允许我们使用短时方法研究量子临界性质了。

4.3 用非平衡方法研究量子临界性

在平衡态的研究中，通常演化足够长的时间， $1/\tau \rightarrow 0$ ，根据非平衡标度关系(2.2)，与有限时间效应有关的因子均不体现在标度关系中。在非平衡方法中，我们固定 τL^{-z} 为常数，具体的，这里我们固定 $\tau L^{-z} = 0.3$ ，这样 R 仅是 $g L^{1/\nu}$ 的函数，也即

$$R(\tau L^{-z}) = f_R^{(\tau L^{-z}=0.3)}(g L^{1/\nu}). \quad (4.9)$$

这和平衡态的标度形式完全一致，因此，在平衡态的研究中所用到的方法^[30-31]，可以直接用在非平衡态的研究中。考虑到更广泛领域的研究者可能对量子临界性的研究并不熟悉，我们在本章仍较为详细地介绍如何利用标度理论确定量子临界点和临界指数。

根据(4.9)可以确定量子临界点。调节 Hubbard 相互作用强度 U ，当其处于临界点时 $g = 0$ ，关联长度比 R 成为标度不变量，与尺寸无关。在图4.4a 中，不同尺寸的 R 随 U 变化的相交，在交点处， R 与尺寸无关，也即临界点。我们使用标度关

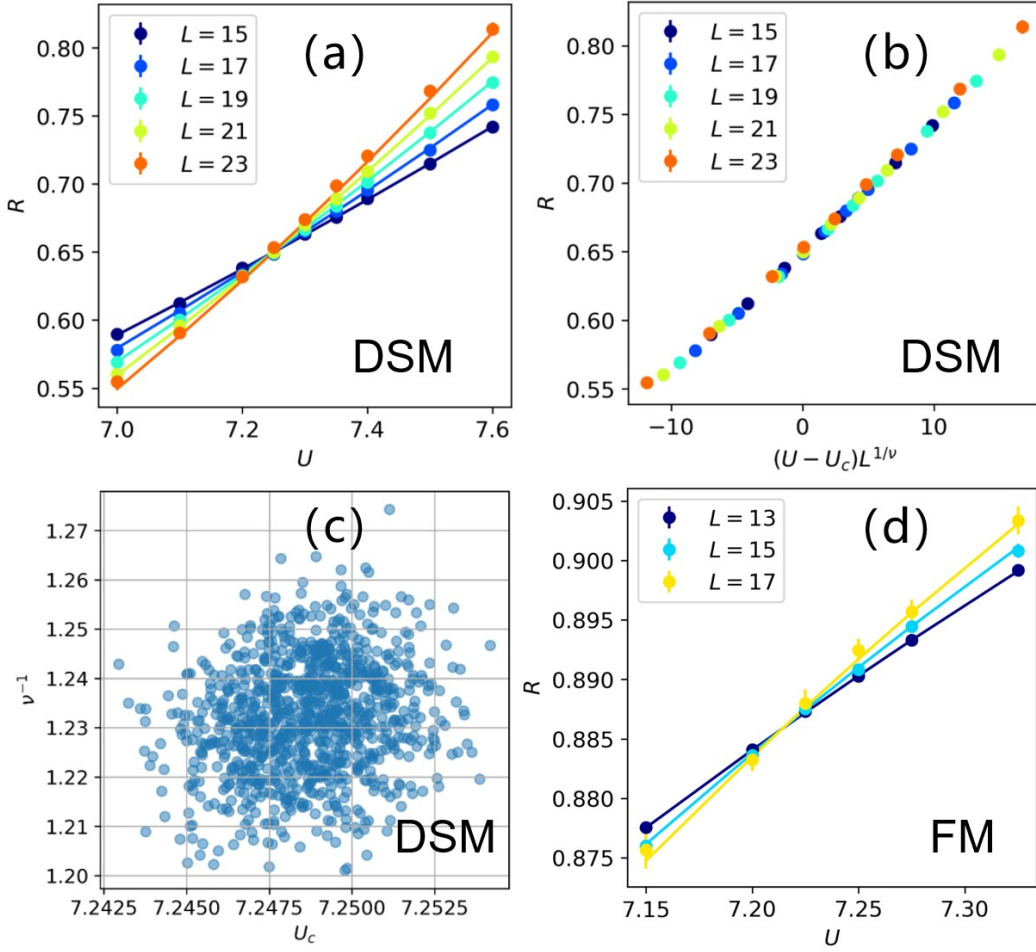


图 4.4 用非平衡方法确定量子临界点 U_c 和关联长度指数 ν . (a) 表示初态为狄拉克半金属相, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联长度比 R 随 Hubbard 相互作用强度 U 的变化. 实线是基于标度关系对数据点的拟合线, 由拟合出的交点位置确定出临界点 $U_c = 7.249(4)$. (b) 是对 (a) 做重标度的结果, 不同尺寸的变化曲线在以 $gL^{1/\nu}$ 为横轴的坐标中重合, $1/\nu = 1.23(2)$. (c) 展示了通过重采样技术得到的 1000 个样本基于标度关系拟合得到的临界点和临界指数的分布. (d) 表示初态为饱和铁磁相, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联长度比 R 随 Hubbard 相互作用强度 U 的变化.

系(4.9)对图4.4a的数据点拟合 (拟合参数为 U_c 和 ν), 通过重采样技术计算 U_c 和 ν 的分布, 如图4.4c 所示. 最终计算出 $U_c = 7.249(4)$, $\nu^{-1} = 1.23(2)$. 图4.4b 则是用拟合出来的临界点和临界指数对图4.4a 的横轴进行重新标度, 得到不同尺寸的数据重合, 这体现了标度关系(4.9), 即对于不同的尺寸, R 都以相同的函数形式依赖于 $gL^{1/\nu}$.

在确定临界点时, 我们使用的是初态为无序相的弛豫数据. 在图4.4d 中, 可以看到从有序初态出发的弛豫数据再次在临界点处相交, 可见短时方法可以用多种方法自洽地确定和检验临界点.

玻色场的反常量纲 η_ϕ 和费米场的反常量纲 η_ψ 可以由下面的标度关系确定:

$$S(\mathbf{k} = 0) = L^{-(1+\eta_\phi)} f_S \left(gL^{1/\nu}, \tau L^{-z} \right), \quad (4.10)$$

$$G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k}) = L^{-\eta_\psi} f_G \left(gL^{1/\nu}, \tau L^{-z} \right). \quad (4.11)$$

其中 $G(\mathbf{k}) = \frac{1}{L^2} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(r_i - r_j)} \langle c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} \rangle$ 是动量空间的费米子关联, $S(\mathbf{k})$ 是铁磁结构因子. 动量为零的铁磁结构因子即序参量的平方 $S(\mathbf{k} = 0) = m^2$.

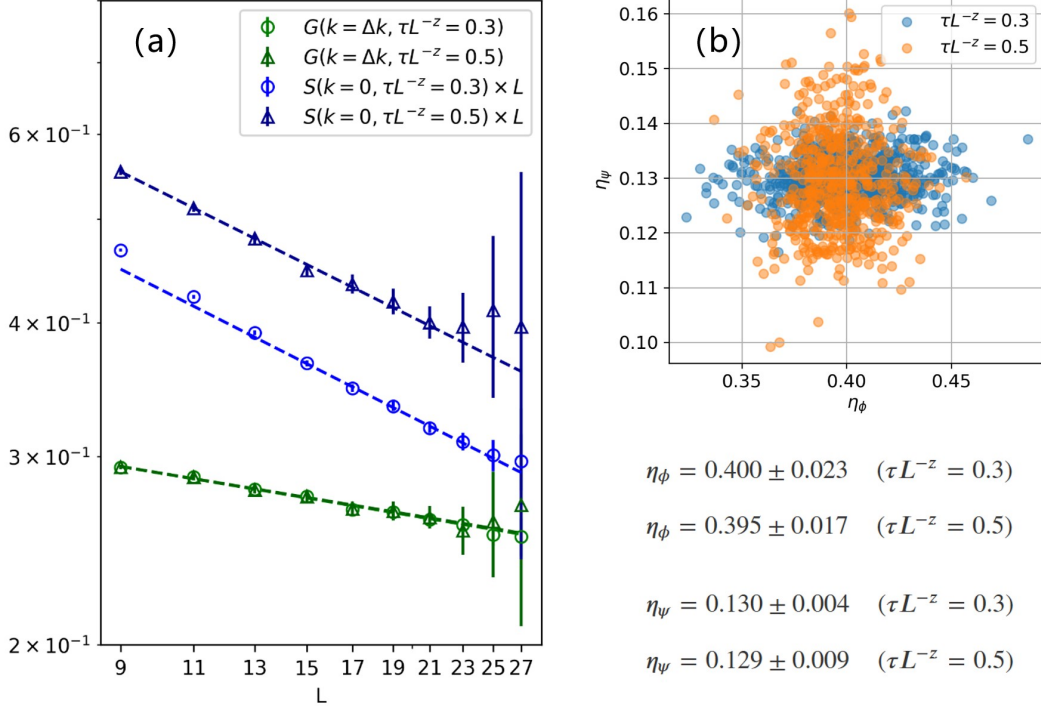


图 4.5 用非平衡方法确定玻色场反常量纲 η_ϕ 和费米场反常量纲 η_ψ . (a) 表示玻色场结构因子 $S(0)$ 和费米子关联 $G(k = \Delta k)$ 随尺寸 L 的变化. 其中相互作用强度取为临界值 U_c , 固定虚时演化时长满足 $\tau L^{-z} = 0.3$ 或 $\tau L^{-z} = 0.5$. 虚线表示双对数坐标中的线性拟合. (b) 展示通过拟合斜率得到的玻色场反常量纲 η_ϕ 和费米场反常量纲 η_ψ , 散点表示由重采样技术得到的不同样本的拟合结果.

我们固定 $\tau L^{-z} = 0.3$ 或 $\tau L^{-z} = 0.5$, 同时相互作用强度取在临界点 $U = 7.249$, 那么 $S(\mathbf{k} = 0) \sim L^{1+\eta_\phi}$ 和 $G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k}) \sim L^{\eta_\psi}$ 与尺寸 L 成幂律关系. 我们计算了无序初态的数据, 如图 4.5a 所示. 在双对数坐标中作线性拟合, 可以从拟合斜率读取玻色场的反常量纲 η_ϕ 和费米场的反常量纲 η_ψ , 由重采样得到它们的分布如图 4.5b, 在下方我们标出了拟合结果. τL^{-z} 取不同的值, 拟合得到的临界指数在误差范围内是一致的, 这再次体现了短时方法可以自洽地检验所确定的临界指数的准确性和普适性. 并且从图 4.5a 中可以看出 $\tau L^{-z} = 0.5$ 具有更小的有限尺寸效应, 我们以 $\tau L^{-z} = 0.5$ 的结果 $\eta_\phi = 0.395(17)$, $\eta_\psi = 0.129(9)$ 用于后文.

以上我们讨论了在非平衡态固定 τL^{-z} 可以得到与平衡态一致的标度形式. 在表 4.1 中, 我们展示了我们在非平衡过程中算出的临界点、临界指数, 以及此前的平衡态研究用平衡态的量子蒙卡、泛函重整化群理论算出的结果. 可见, 我们用非平衡方法可以非常准确地定出基态相变临界点和临界指数. 而且, 非平衡方法消耗更少的计算资源.

表 4.1 不同方法计算的基态相变临界点和临界指数对比. 除了我们用非平衡的方法计算了临界点和临界指数之外, 此前的平衡态的研究也给出了和我们一致 (在误差范围内) 的计算结果^[27,32].

method	U_c	ν^{-1}	η_ϕ	η_ψ
This work	7.249(4)	1.23(2)	0.395(17)	0.129(9)
Gutzwiller-PQMC (equilibrium) ^[27]	7.275(25)	1.19(3)	0.31(1)	0.136(5)
FRG ^[32]	-	1.229	0.372	0.131

接下来我们关注系统在弛豫过程中体现的非平衡临界性质, 由此可以更好地理解非平衡方法的高效性来源于何处. 非平衡标度关系 (4.10) 和 (4.11) 相比于平衡态的标度关系, 额外考虑了有限时间带来的参数 τL^{-z} , 以刻画非平衡的临界动力学. 图4.6和图4.7分别展示了在临界点上从有序初态 (FM) 出发的弛豫行为和从无序初态 (DSM) 出发的弛豫行为.

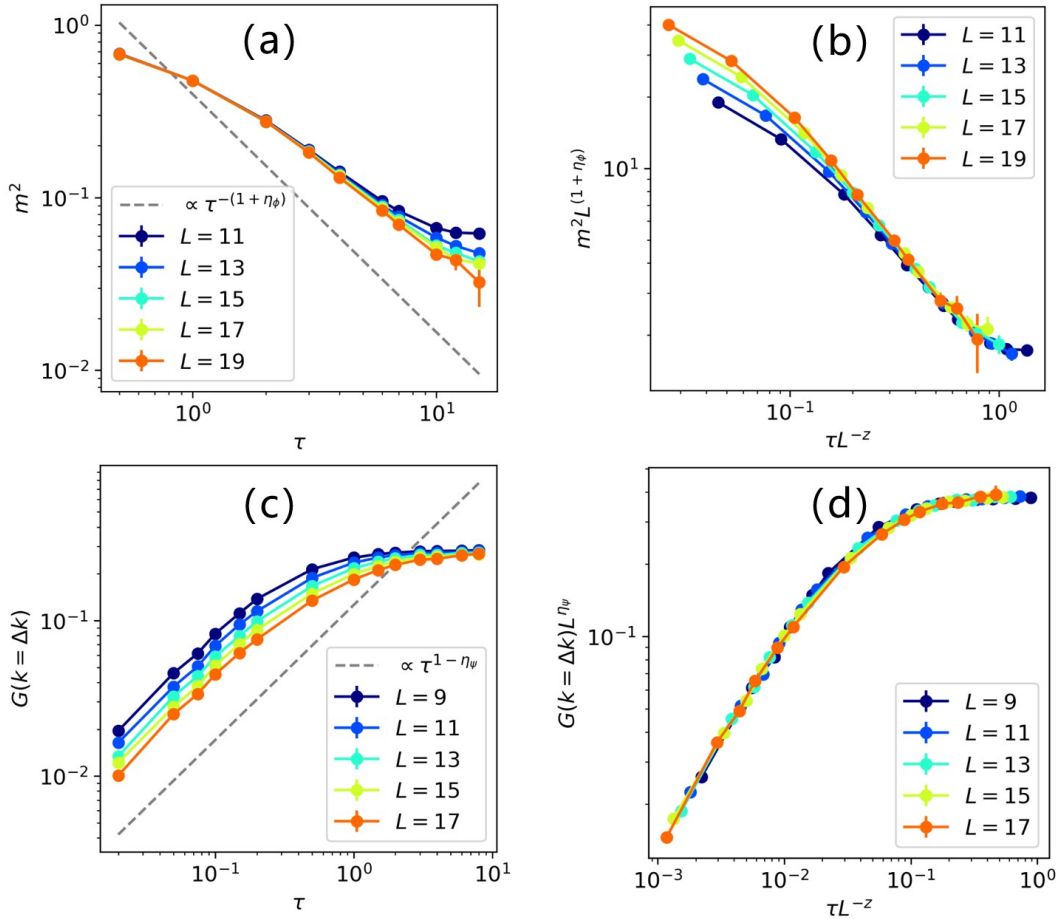


图 4.6 在临界点上 ($U = 7.249$) 从饱和铁磁初态出发的虚时弛豫行为.(a) 展示了玻色场结构因子 $S(0)$ 随虚时 τ 的变化, (b) 是基于标度关系对 (a) 的重标度, $\eta_\phi = 0.395$.(c) 展示了费米子关联 $G(k = \Delta k)$ 随虚时 τ 的变化, (d) 是基于标度关系对 (c) 的重标度, $\eta_\psi = 0.129$.

图4.6a 显示, 从铁磁态出发的弛豫过程中, 序参量的平方 m^2 从饱和值开始随虚时 τ 衰减, 最后达到平衡. 尺寸 L 越大, 达到平衡所需的时间 (弛豫时间) 越长,

在热力学极限下弛豫时间随着尺寸发散. 在 τ 较小时, 标度关系可以近似展开到零阶

$$m^2 = \tau^{-(1+\eta_\phi)/z} f_{m^2}(\tau L^{-z}) \sim \tau^{-(1+\eta_\phi)/z}, \quad (4.12)$$

即如图4.6a 中的灰色虚线那样, m^2 衰减的幂律由反常量纲 η_ϕ 控制. 在图4.6b 中, 我们按照 (4.12) 的形式对图4.6a 重新标度, 数据重合印证了非平衡标度关系 (4.12). 图4.6c 显示, 从铁磁态出发的弛豫过程中, 费米子关联 $G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k})$ 从 0 开始增长到平衡. 满足标度

$$G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k}) = \tau^{-\eta_\psi/z} f_G(\tau L^{-z}) \sim \tau^{-\eta_\psi/z} \tau L^{-z} = \tau^{1-\eta_\psi/z} L^{-z}, \quad (4.13)$$

其中由于 $\tau = 0$ 时是完全有序相, 费米子关联 $G(\tau = 0) = 0$, 所以 $f(\tau L^{-z})$ 领头阶至少是一阶 (否则 $\tau = 0$ 时 G 发散). 图4.6c 中的虚线表示 τ 较小情况满足的幂律形式. 而按照(4.13)的形式对图4.6c 的数据做重标度, 可以得到图4.6d 所示的数据重合, 这显示了标度关系(4.13)的普适性.

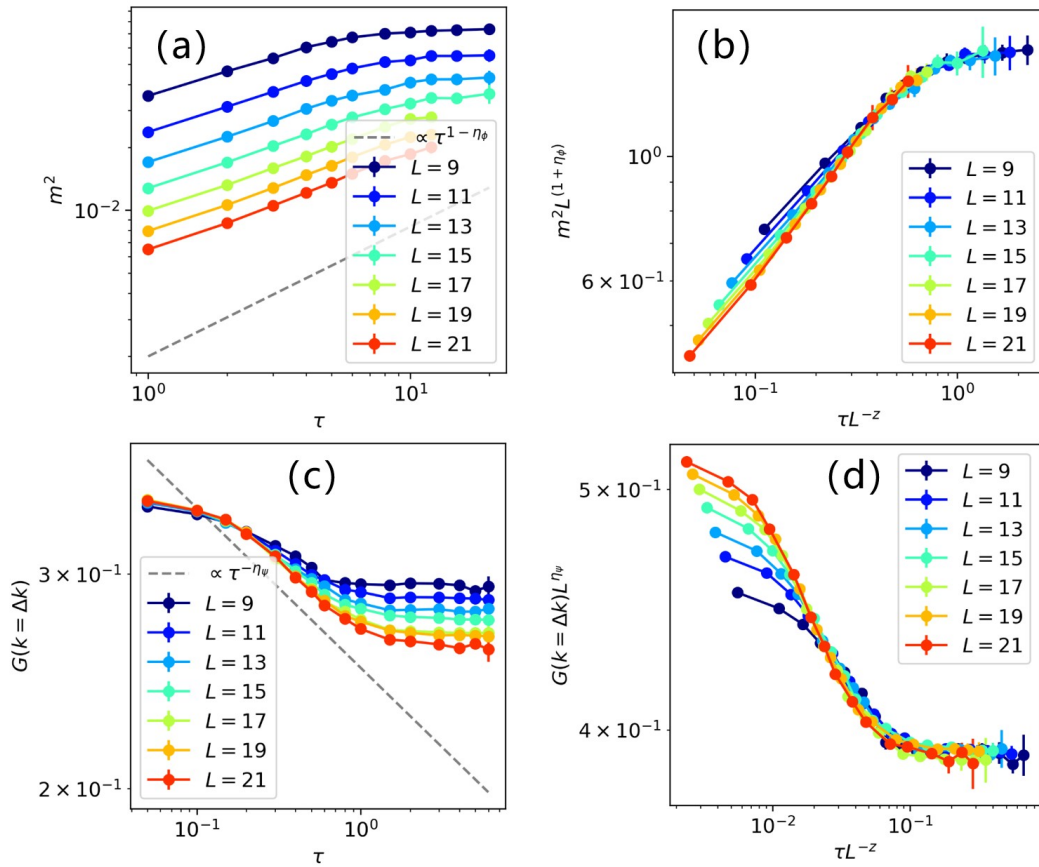


图 4.7 在临界点上 ($U = 7.249$) 从狄拉克半金属初态出发的虚时弛豫行为.(a) 展示了玻色场结构因子 $S(0)$ 随虚时 τ 的变化, (b) 是基于标度关系对 (a) 的重标度, $\eta_\phi = 0.395$.(c) 展示了费米子关联 $G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k})$ 随虚时 τ 的变化, (d) 是基于标度关系对 (c) 的重标度, $\eta_\psi = 0.129$.

序参量从无序初态 (DSM) 出发的弛豫行为可以进一步写为

$$m^2 = (L\tau^{-1/z})^{-d} \tau^{-(1+\eta_\phi)/z} f_{m^2}(\tau L^{-z}) \sim \tau^{d/z-(1+\eta_\phi)/z}. \quad (4.14)$$

这是由于在 τ 很小的极限下, 系统处于狄拉克半金属相, 反铁磁结构因子应当满足幂律关系 $m^2 \sim L^{-d}$. 而费米子关联 $G(\mathbf{k} = \Delta\mathbf{k})$ 的标度形式仍是(4.13). 在图 4.7a 和图 4.7c 中, 我们展示了这两个观测量随演化虚时的变化, 并用虚线标示了它们在短时阶段体现的幂律行为. 图 4.7b 和图 4.7d 展示了重标度后的弛豫行为, 经过一小段与初态有关的非普适区后, 数据重合再次体现了普适的非平衡临界标度行为.

关于以上展现的费米子系统的非平衡量子临界性, 有两点需要补充说明: (1) 从4.6和图 4.7中可以看出, 不论从何种初态出发做弛豫, 费米子关联的弛豫时间要远远短于玻色子关联 (或者玻色子关联长度比), 费米子关联大概在 $\tau L^{-z} \sim 10^{-1}$ 数量级就达到平衡了, 而玻色结构因子的弛豫时间是在 $\tau L^{-z} \sim 10^0$ 数量级. 在图4.5中也可以看出, $\tau L^{-z} = 0.3$ 和 $\tau L^{-z} = 0.5$ 的费米子关联数据是重合的, 说明此时费米子场早已达到平衡. 这一现象反应出: 在量子临界淬火的弛豫中, 相比于玻色子, 费米子会更快地丢失对初态的记忆! 这一性质可以解释我在过去的一项工作中观察到的费米子系统的独特的临界初始滑移行为 (critical initial slip), 费米子系统的临界初始滑移指数为负数^[24]——在量子临界淬火中费米子更快地感受到了临界性, 从而抑制了初始阶段的局域有序磁畴的延展. 进一步, 我们还可以看出, 玻色关联的非平衡弛豫行为总是在费米关联达到平衡之后才进入普适临界标度区域. 这意味着在量子临界淬火中, 费米子系统的响应以这样的顺序发生: 费米子场先感受到量子临界性, 以非平衡临界动力学的形式 (由基态的临界指数控制) 趋于平衡, 并凝聚出临界的玻色涨落, 然后这样的玻色涨落再以非平衡临界动力学的形式趋于平衡. (2) 对比4.6和图 4.7中费米子关联的弛豫行为, 可以看出, 对于狄拉克半金属初态的弛豫过程, 需要比较大的尺寸才会得到比较好的标度行为, 而对于铁磁初态的弛豫过程, 有限尺寸效应不会影响短时标度. 这是因为对于铁磁初态, 随着临界区域从小块开始长大, 关联长度是从零开始增加的, 直到关联长度超过系统尺寸时, 系统才会感受到有限尺寸效应. 而狄拉克半金属态本身就是一种临界状态, 在演化的早期就会体现出有限尺寸效应.

5 应用实例二： t - V 模型中的“不必要的”符号问题

我们认为，基于非平衡标度理论的短时方法可以普适地减轻费米子符号问题。为了检验普适性，我们在另一个模型中再次使用短时方法分析量子临界性和符号问题。在这一章中我们将更多的注意力放在费米子符号问题的讨论上，不再像上一章那样花费大量篇幅介绍非平衡量子临界性的研究方法。而且，这一章所讨论的模型本身可以被无符号问题的量子蒙特卡罗方法求解^[33-34]，因此在该模型中制造“不必要的”符号问题，可以作为用来研究符号问题的一个很好的理论玩具，我们顶着符号问题计算出来的数值结果可以和此前非常令人信服的那些结果做比对，从而展现我们的新方法的计算结果也是可靠的。

5.1 t - V 模型的狄拉克半金属-电荷密度波相变

我们在蜂窝格子上研究以下简单的无自旋相互作用费米子模型：

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.} + \sum_{\langle ij \rangle} V \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_j - \frac{1}{2} \right), \quad (5.1)$$

其中 $c_i^\dagger$ 在格点 i 上产生费米子， $t_{ij} \equiv t$ 是最近邻格点间费米子的跃迁， V 是最近邻格点间费米子的密度相互作用。此处跃迁和相互作用部分分别用 H_0 和 H_{int} 标记。在此之后我们设 $t = 1$ 作为能量的单位。

在蜂窝格子上的无相互作用费米子展现出两个不等价狄拉克点 $\pm K$ 周围的无质量狄拉克色散。由于费米面（狄拉克点）上的态密度为零，狄拉克费米子对任何保持模型对称性的较弱的相互作用都是稳定的，但当相互作用足够强时可以打开能隙。在本文中，我们将聚焦于由相对较强的最近邻排斥力诱导的电荷密度波转变，这属于 $N = 4$ 手性 Ising 普适类。在相变中，子晶格的 Z_2 对称性自发破缺。

该模型可以使用 Majorana 量子蒙特卡罗方法进行无符号问题的量子模拟，此前可靠的研究结果显示，该模型的量子临界点为 $V_c = 1.355$ ^[33]。如果 H-S 变换将费米子间相互作用解耦合到密度通道，则该模型会出现符号问题^[35]。在这里，我们将短时方法应用于这个有符号问题的情形。

Z.-X. Li, Z.-Q. Wan, H. Yao, arXiv:2211.00663

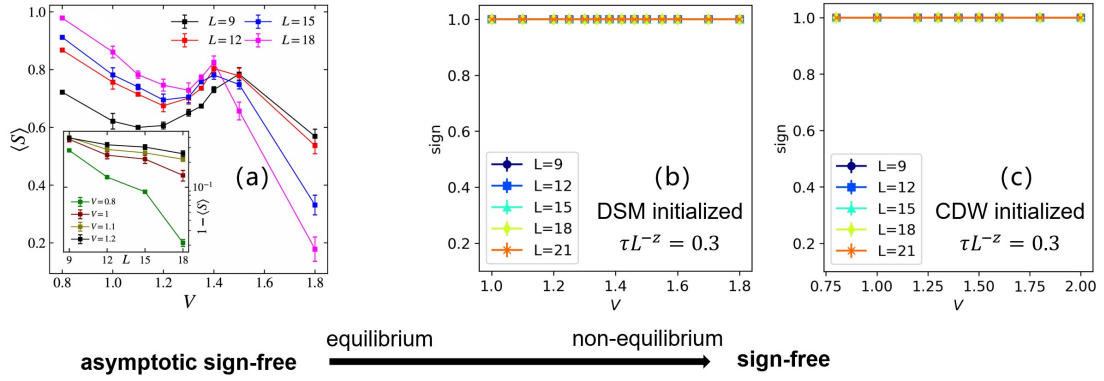


图 5.1 在临界点附近, 平均符号随相互作用强度 V 的变化.(a) 文献^[35]显示基态存在渐进无符号问题, 即 V 在一定范围内, 平均符号随着尺寸增大而增大.(b) 我们的短时方法显示在大尺寸下可以完全没有符号问题.

5.2 弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为

对于解耦合到密度通道的蒙卡模拟, 文献^[35]揭示了该模型的渐进无符号问题特性, 如图5.1a 所示, 在 V 较小时, 尺寸越大, 符号问题越轻, 此区域渐进无符号问题. 在 V 较大时, 尺寸越大, 符号问题越严重, 此区域是出现常规的符号问题. 有趣的是, 这两个区域之间, 似乎存在一个“符号临界点”, 不同尺寸的曲线在此相交. 似乎是巧合, 这个交点在量子临界点 $V_c = 1.355$ 附近.

在我们的短时研究中, 取 $\tau L^{-z} = 0.3$, 我们也计算了在临界点附近, 平均符号随相互作用强度 V 的变化, 如图5.1b 和 c 所示, 分别是无序 (DSM) 初态出发的弛豫结果和有序 (CDW) 初态出发的弛豫结果. 这里亦有两点值得注意: 一是在大尺寸中, 短时方法真的将“渐进无符号问题”推至“完全无符号问题”(包含小尺寸的结果, 见附录A), 对于 $L \geq 9$, 平均符号精确为 1. 二是在量子临界点附近并没有观察到“符号临界点”, 即使在 V 超过临界点处, 仍然显示渐进无符号问题的特性, 也就是说, 短时方法可能将这个非平庸的区域拉大了. 这里我们我们为了和平衡的情况对比, 在非平衡的图5.1b 和 c 中只展示了与图5.1a 一致的尺寸和相互作用强度范围. 在附录A中, 我们可以看到“符号临界点”在非常强的相互作用情况才会出现.

在图5.2中我们可以看出为什么这里会出现完全无符号问题的结果. 图5.2a 展示了平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化——并非在虚时演化的初期, 符号问题就开始出现, 而是经过了一定时间后, 平均符号才开始衰减. 对应到世界线的图像中, 也即如果只经过非常短的演化, 费米子的世界线可能都还没来得及发生交叉. 而我们所固定的虚时时刻 $\tau L^{-z} = 0.3$, 正是处在符号问题还没有来得及出现的时期. 图5.2b 用关联长度比的数据重合标示标度关系成立短时间范围. 可以看出,

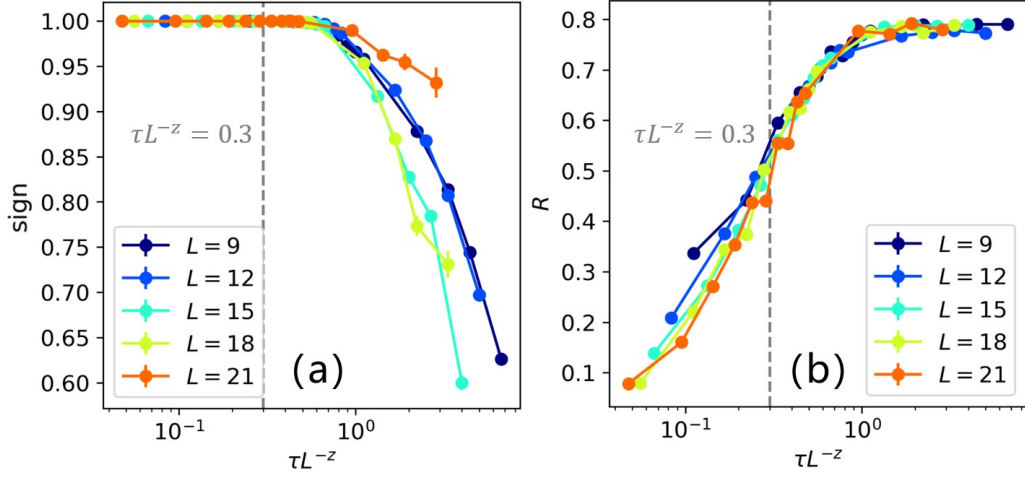


图 5.2 弛豫过程中的平均符号与非平衡标度 (从有序初态出发). (a) 平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, 灰色虚线标记出 $\tau L^{-z} = 0.3$ 的位置, 此时平均符号为 1, 无符号问题. (b) 关联长度比随 τL^{-z} 的变化. 对于较大的尺寸, $\tau L^{-z} = 0.3$ 处的数据重合即表示非平衡标度关系成立.

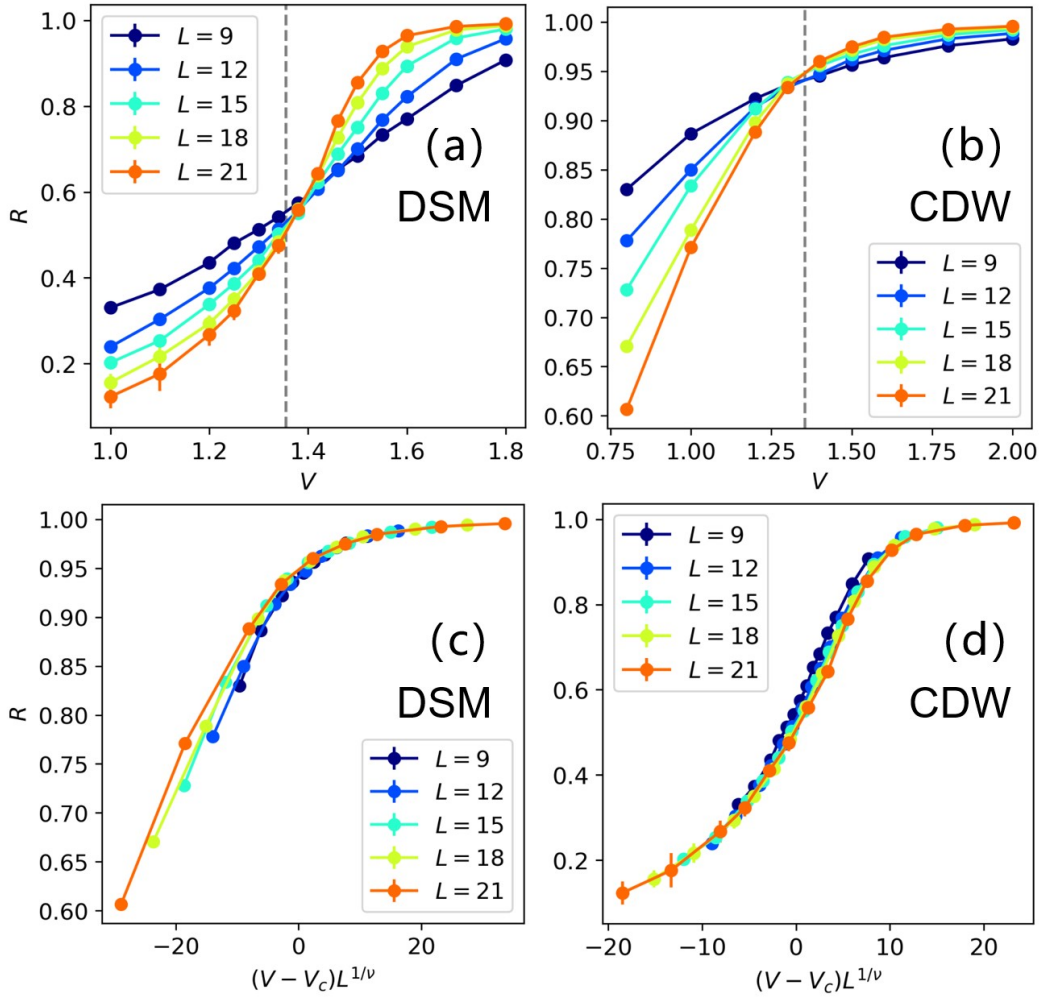


图 5.3 用非平衡方法确定临界点 V_c 与关联长度指数 ν . (a) 和 (b) 分别展示从狄拉克半金属初态和饱和电荷密度波初态出发, 弛豫到 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时, 关联比率随相互作用强度的变化. 曲线交点为临界点, 与灰色虚线所标示的文献结果 $V_c = 1.355$ 接近^[33]. (c) 和 (d) 即是对 (a) 和 (b) 的重标度结果, 关联长度指数取为 $\nu = 0.77$ ^[33], 大尺寸下的数据重合显示非平衡标度关系成立.

$\tau L^{-z} = 0.3$ 也已经足以体现临界标度性. 也就是说, 通过非平衡临界标度, 我们可以在符号问题还没出现之前, 就算清楚量子临界性质.

5.3 用非平衡方法研究量子临界性

与上一章的思路一致, 接下来我们说明, 即使在短时阶段, 虽然系统还没演化到基态, 但也能准确地体现基态的量子临界性质. 图5.3a 和图5.3b 分别展示了从无序态和有序态出发, 在量子临界点附近弛豫 τL^{-z} 时间, 关联长度比 R 随相互作用强度 V 的变化. 标度关系(4.9)意味着不同尺寸的曲线会在临界点处相交. 图5.3a 和图5.3b 中的灰色虚线标记出无符号问题的 Majorana 量子蒙特卡罗方法计算出的临界点 $V_c = 1.355^{[33]}$, 而我们所计算出的交点也与之接近. 我们还使用^[33]算出的临界指数 $\nu = 0.77$ 来做重标度, 如图5.3c 和图5.3d 所示. 对于较大的尺寸 ($L \geq 12$), 临界点附近呈现数据重合. 这也说明基态的临界点和临界指数确实控制着非平衡态的行为.

6 应用实例三：各向异性狄拉克锥上的 SU(3) Hubbard 模型

经过前两章的计算实例，我们验证了非平衡方法在克服符号问题并计算量子临界问题时的有效性，这使我们可以有把握地将该方法应用到此前人们无法研究清楚的问题中。

Hubbard 模型作为最基础的强关联模型，受到非常广泛的关注。由于费米子符号问题的存在，人们只能研究费米子味道数为偶数的 Hubbard 模型，比如具有 SU(2)、SU(4)、SU(6) 对称性的 Hubbard 模型^[36-41]。然而，自然界中广泛存在着味道数为基数的费米子系统，比如具有三种味道的中微子模型，具有 SU(3) 对称性的夸克模型。如何使用无偏差的量子蒙特卡罗方法求解这些模型的强关联行为，是一个亟待解决的问题^[42-50]。

在这一章，我们构造了一个具有 SU(3) 对称性的 Hubbard 模型，它具有非常严重的符号问题，但是可以使用非平衡方法研究它的基态相图、量子临界性质。

6.1 各向异性狄拉克锥与 SU(3) Hubbard 相互作用

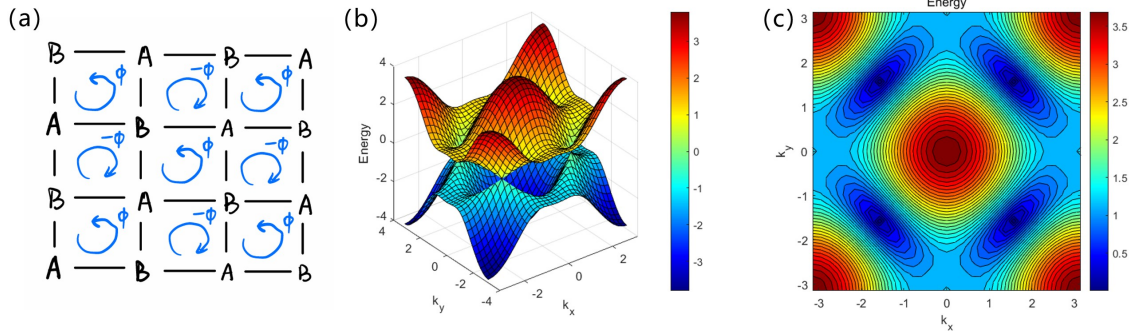


图 6.1 正方晶格中各向异性的狄拉克锥。(a) 具有交错磁通的正方晶格，巡游电子围绕一个元格 (plaquette) 移动会获得 $\pm\phi$ 的相位。(b) 第一布里渊区中的能带结构，有两个不等价的狄拉克点 $K = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ 和 $K' = (\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ 。(c) 导带的等能面。(b) 和 (c) 展示的是 $\phi = 0.4\pi$ 的情况。

在正方晶格中，考虑如下哈密顿量：

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \alpha} t_{ij} c_{i\alpha}^\dagger c_{j\alpha} + U \sum_i \sum_{\alpha > \beta} \left(n_{i\alpha} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\beta} - \frac{1}{2} \right), \quad (6.1)$$

其中 $\langle ij \rangle$ 标示对最近邻的格点求和，也即第一项最近邻的跃迁， $\alpha = 1, 2, 3$ 和 $\beta = 1, 2, 3$ 为费米子味道指标。第二项是局域的 Hubbard 相互作用，不同味道的费米子

按照 Hubbard 相互作用的形式耦合, $U > 0$ 表示 Hubbard 排斥相互作用的强度. 跃迁振幅 $t_{ij} = te^{i\theta_{ij}}, t = 1, \theta_{ij} = (-)^{i_x+i_y} \frac{\phi}{4}$ 表示在元格中所加的交错磁通带来的跃迁相位.

如图6.1a 所示, 正方晶格的每个元格中, 存在交错的 $\pm\phi$ 的磁通. 磁场破坏了时间反演对称性, 使得费米子符号问题无法回避. 其中 $\phi = 0$ 就是普通的正方晶格上的 Hubbard 模型, 没有狄拉克点, 半填充时, 费米面测度非零. $\phi = \pi$ 也是人们熟知的 π -flux 正方晶格, 其狄拉克点是各项同性的. 而在这二者之间, 存在各向异性的狄拉克点, 半填充时, 费米面上的狄拉克激发具有各向异性的费米速度, 能带结构如图6.1b 和图6.1c 所示^[41,51].

6.2 新奇的手征 $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类

在 Hubbard 相互作用较强时, 低能有效场论中的玻色序参量涨落与费米场发生 Yukawa 耦合. 我们的数值结果表明, 这里存在一个 Gross-Neveu-Yukawa 理论描述的连续相变, 但不属此前人们所熟知的手征 Heisenberg 普适类、手征 Ising 普适类、手征 XY 普适类之一^[52-53], 而是一个新的普适类.

从平均场的物理图像来看, 考虑到 $SU(3)$ Hubbard 相互作用可以写成 $SU(3)$ 生成元的平方, 故 $SU(3)$ 生成元形式的平均场序参量比较容易和狄拉克费米子耦合. $SU(3)$ 群有 8 个生成元, 由 8 个 3×3 的 Gell-Mann 矩阵 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_8$ 描述, 它们的详细表述见附录B. 其中只有对角的生成元 λ_8 是满秩的, 其对应的 λ_8 序参量 m 可以给所有味道的狄拉克费米子赋予非零的手征质量:

$$m = \frac{1}{L^2} \sum_i (-1)^{i_x+i_y} \langle \vec{c}_i^\dagger \lambda_8 \vec{c}_i \rangle, \quad (6.2)$$

其中 $\vec{c}_i^\dagger = (c_{i1}^\dagger, c_{i2}^\dagger, c_{i3}^\dagger)$, 而 $(-1)^{i_x+i_y}$ 表示相邻的格点上, 生成元极化的方向相反, 我们把这一序参量称为 λ_8 “反铁磁” 序参量. 我们通过大规模的量子蒙特卡罗计算发现, 对于较大的 U , 系统的基态为 λ_8 “反铁磁” 相.

图6.2示意了狄拉克半金属- λ_8 反铁磁 (DSM- λ_8 AFM) 的自发对称性破缺. 对于饱和 λ_8 反铁磁相, 两种味道的费米子 (记为味道 1,2, 在图6.2中用蓝色和红色表示) 局域在一套子晶格 (记为 A 格子) 中, 剩下一味道费米子 (记为味道 3, 在图6.2中用绿色表示) 局域在另一套子晶格 (记为 B 格子) 中. 显然, AB 子晶格之间的 Z_2 被明显地破坏 (对应到低能有效场论中, 也即狄拉克费米子的手征对称性被破坏). 对角的 λ_8 生成元生成全局的 $U(1)$ 变换, 只作用在味道 1,2 子空间的

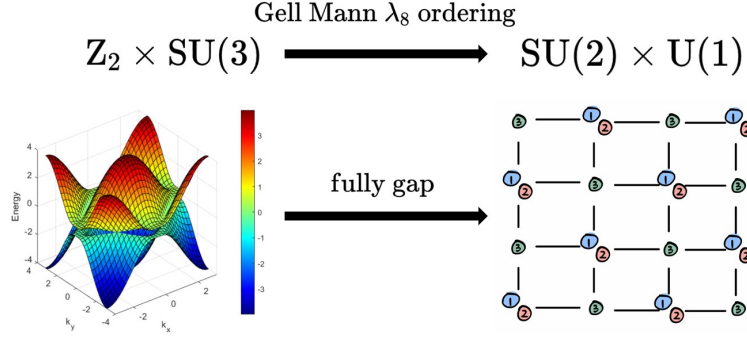


图 6.2 自发对称性破缺示意图. 模型原本具有 $Z_2 \times SU(3)$ 对称性, 其中 Z_2 是 AB 子晶格的对称性, $SU(3)$ 是三种不同味道之间的对称性. 自发对称破缺后的基态具有 Gell-Mann λ_8 生成元的“反铁磁”序, 这使得三重简并的狄拉克点完全打开能隙, 不同味道的费米子交错地局域在不同子晶格上. 保留的对称性除了整体 $U(1)$ 之外, 还有在 λ_8 生成元简并的两种味道之间的 $SU(2)$ 对称性.

生成元 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 生成封闭的 $SU(2)$ 变换, 只混杂味道 1,2 两种费米子. 由于这四个生成元都和序参量算符对易, 这里的 $SU(2) \times U(1)$ 是保持 λ_8 反铁磁序参量 m 不变的, 这是自发对称性破缺后保留的最大对称群. 而 $SU(3)$ 群的其余四个生成元 $\lambda_4, \lambda_5, \lambda_6, \lambda_7$ 生成的变换会改变反铁磁序参量 m 在味道空间的方向, 得到其余的 λ_8 反铁磁简并基态, 也即四种独立的 Goldstone 模式. 所有的简并基态张成一个 4 维的基态简并空间, 这些基态可以一一映射到流形 $[Z_2 \times SU(3)]/[SU(2) \times U(1)]$ 上的点^[54-55]. 因此, 我们把这个新奇的普适类称为手征 $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类.

6.3 用非平衡方法确定基态相图与临界指数

让我们把前两章所讲的非平衡方法应用到真正的实战中, 探索该模型的基态相图和临界指数.

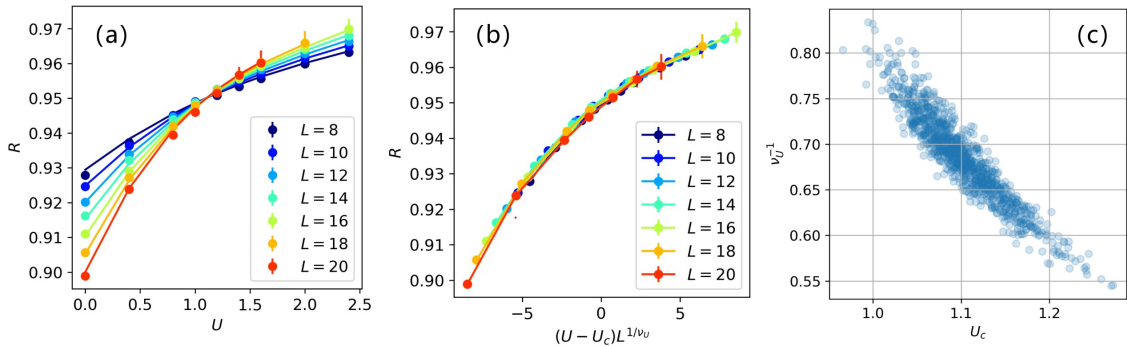


图 6.3 用非平衡方法确定相变临界点 U_c 和临界指数 ν . 其中磁通为 $\phi = 0.075\pi$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布.

为了寻找相变临界点，我们制备 λ_8 反铁磁初态，并设置模型参数 U, ϕ 为不同的值，取 $\tau L^{-z} = 0.25$ ，我们观察无量纲的关联长度比 R 是否会出现标度不变性。以图6.3a 为例，固定 $\phi = 0.075\pi$ ，对 U 进行扫描。我们发现在 $U = 1.10(5)$ 处，关联长度比 R 与系统尺寸 L 无关。当 $U > 1.10$ 时，尺寸 L 越大则 R 越大；当 $U < 1.10$ 时，尺寸 L 越小则 R 越小。这意味着固定 $\phi = 0.075\pi$ 时， $U > 1.10$ 为 λ_8 反铁磁相， $U < 1.10$ 为狄拉克半金属相。固定 ϕ 为不同值扫描 U ，或者固定 U 为不同值扫描 ϕ ，可以在 ϕ - U 平面上找到一条临界的曲线，一侧为 λ_8 反铁磁相，一侧为狄拉克半金属相，如图6.4所示。图6.3展示的是相边界上的一个点，计算其他的临界点的方法与此一致，数据展示在附录中。根据标度关系(4.9)拟合图6.3a 中的点，可以拟合出临界点和关联长度指数 $\nu^{-1} = 0.68(5)$ ，结果如图6.3c 所示。图6.3b 显示的重标度后的数据重合展示了关联长度比 R 在临界点附近的非平衡有限尺寸标度行为。

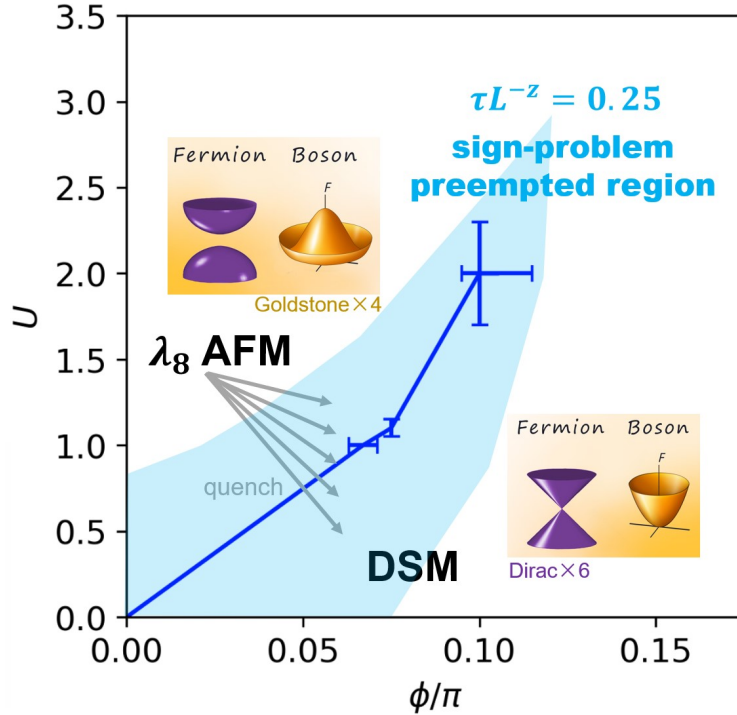


图 6.4 模型的基态相图，在 U - ϕ 平面上分为 Gell-Mann λ_8 生成元“反铁磁”相和狄拉克半金属相。蓝色数据点是通过非平衡方法（从有序初态出发的弛豫，固定 $\tau L^{-z} = 0.25$ ）确定的临界点，蓝色实线为视觉辅助作用。浅蓝色区域表示在非平衡方案下符号问题不太严重，可以计算的区域，它在临界点附近，依赖于临界标度理论。无序相有 6 个独立的狄拉克锥。在有序相中它们全部打开能隙，出现 4 种独立的 Goldstone 模式。

在相图6.4中，除了相的边界，我们用浅蓝色高亮大致示意了可以用非平衡方法克服符号问题准确求解的区域。相互作用强度 U 越大，符号问题越严重，计算量可以接受的区域也就越窄。而非平衡临界标度在临界点附近才能比较好地成立，因此如果离临界点太远，非平衡的数据就不足以反应基态的性质。

根据序参量的非平衡标度关系(4.10)可以确定玻色子的反常量纲 η_ϕ 和费米子

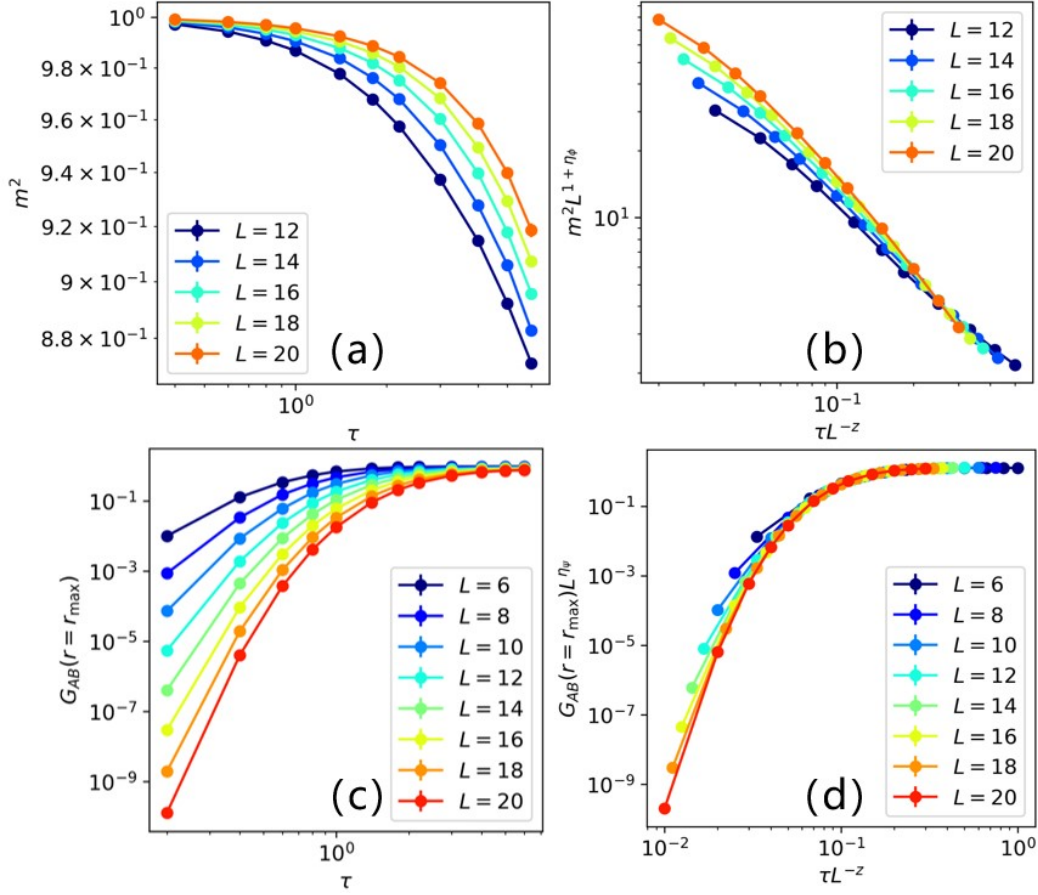


图 6.5 用非平衡方法确定反常量纲，其中 $U = 1.1, \phi = 0.075\pi$. (a) 序参量平方 m^2 从有序初态出发，在临界点的虚时弛豫行为. (b) 重标度后的 m^2 弛豫行为，在大尺寸下数据重合. (c) 费米子关联 $G_{AB}(r = r_{\max})$ 从有序初态出发，在临界点的虚时弛豫行为. (d) 重标度后的 $G_{AB}(r = r_{\max})$ 弛豫行为，在大尺寸下数据重合.

表 6.1 不同 Gross-Neveu-Yukawa 普适类对于 $d = 2 + 1, N_f = 6$ 的临界指数对比. 表格中第一行 chiral $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 是我们发现的新普适类，临界指数数值由非平衡的 PQMC 方法确定. 表格中 $4 - \epsilon$, 2nd order 表示上临界维度展开至二阶的结果，FRG 表示泛函重整化群方法.

universality class	ν^{-1}	η_ϕ	η_ψ
chiral $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ (this work)	0.68(5)	0.55(5)	0.15(3)
chiral Heisenberg ($4 - \epsilon$, 2nd order) ^[56]	1.478	1.023	0.058
chiral XY ($4 - \epsilon$, 2nd order) ^[56]	1.809	0.698	0.082
chiral Ising ($4 - \epsilon$, 2nd order) ^[56]	0.750	0.865	0.011
chiral Ising (FRG) ^[57]	0.993	0.912	0.013

的反常量纲 η_ψ . 如图6.5所示, 将虚时重标度为 τL^{-z} 后, 对于较大的 τL^{-z} , 可以找到 $\eta_\phi = 0.55(5)$ 使得 m^2 随 τL^{-z} 的变化不依赖系统尺寸 (对于较大的尺寸而言), 对于费米子关联 $G_{AB}(r = r_{\max})$ 同理可得 $\eta_\psi = 0.15(3)$. 图6.5的结果再次体现了费米子比玻色子更“健忘”: 它的弛豫时间远远小于玻色子的弛豫时间, 而且在费米子观测量已经平衡后, 玻色观测量才开始进入临界标度区域. 我们将以上确定的临界指数整理在表6.1中, 并与其他 Gross-Neveu-Yukawa 普适类对比, 可见我们发现的新普适类与此前的几类都不相同.

6.4 弛豫过程中的费米子符号问题与非平衡标度行为

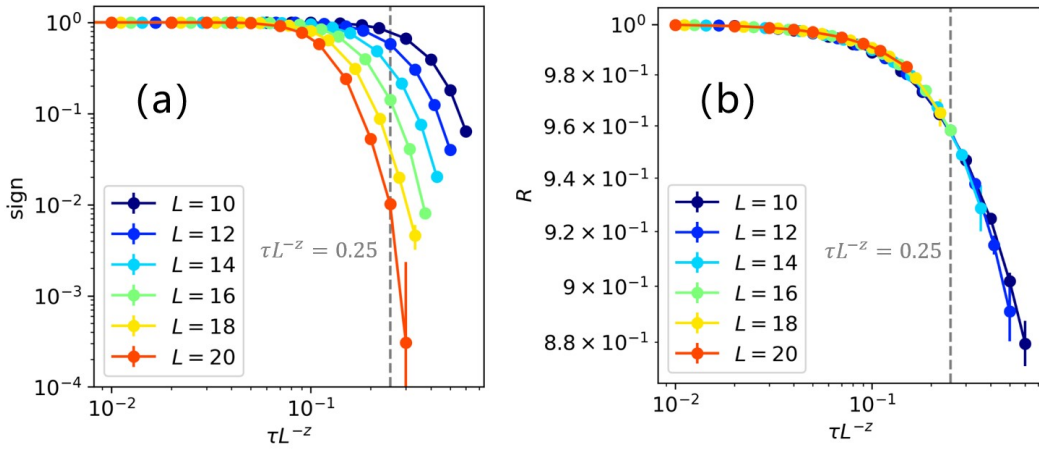


图 6.6 符号问题的严重程度以及标度关系成立的时间范围, 其中 $U = 2.0, \phi = 0.1\pi$. (a) 平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, 在 $\tau L^{-z} = 0.25$ 时刻, 符号问题的严重程度尚可接受, 此后随着虚时增加平均符号迅速衰减, 难以计算. (b) 无量纲的关联长度比随重标度虚时 τL^{-z} 的变化, $\tau L^{-z} = 0.25$ 时刻处于数据重合的范围内, 标度关系成立.

最后, 我们讨论在这个应用实例中短时方法是否减轻了符号问题, 在多大程度上减轻了符号问题? 短时 $\tau L^{-z} = 0.25$ 的结果是否足以反应基态的临界性质?

对于该模型, 我们将参数取在临界点 $U = 2.0, \phi = 0.1\pi$, 平均符号随重标度虚时 τL^{-z} 的变化如图6.6a 所示. 与之前几章对比可以看出, 该模型的符号问题比前两个模型要严重得多, 即使在非平衡阶段. 对于 $\tau L^{-z} = 0.25$, 平均符号大致在 $10^{-1} \sim 10^{-2}$ 数量级, 这意味着相比于无符号问题的情形, 需要 $10 \sim 100$ 倍的计算资源才能将算出可靠的结果, 这几乎是人们能够接受的最大限度. 从图6.6b 也可以看出 $\tau L^{-z} = 0.25$ 是处于标度成立的参数范围内的, 即使没有达到基态, 其非平衡标度也足以体现基态的临界性. 而对于平衡态的量子蒙特卡罗研究范式, 通常需要将虚时 τ 取到尺寸 L 的 1.5 倍以上 (也即 $\tau L^{-z} > 1.5$) 才能到达基态, 这一点也可以在我们展示的几个模型的观测量的虚时演化结果中看出, 至少要 $\tau L^{-z} > 1.5$ 才能到达平衡态. 而演化这么长的时间, 平均符号会衰减到 $10^{-5} \sim 10^{-6}$ 数量级. 我们

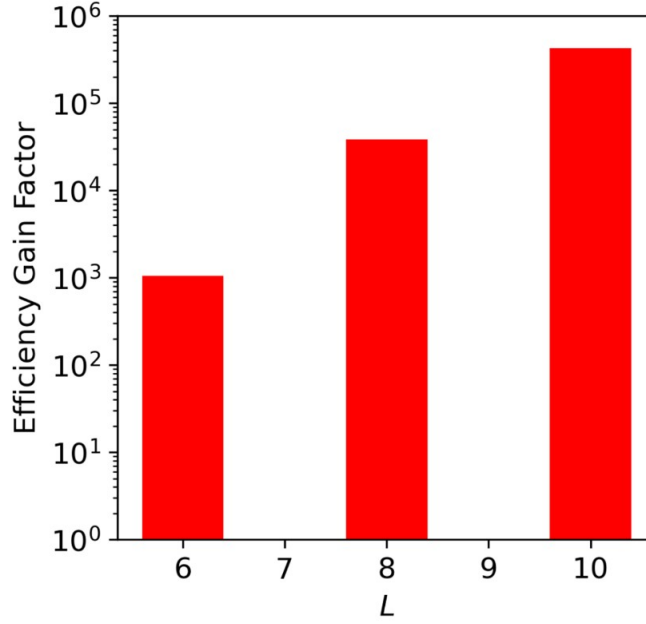


图 6.7 非平衡方法相较于平衡方法的效率提升倍率，其中 $U = 2.0, \phi = 0.1\pi$. 非平衡方法取定 $\tau L^{-z} = 0.25$ ，而通常平衡方法至少要取到 $\tau L^{-z} = 1.5$ ，通过平均符号的比值估算效率增益. 非平衡方法可以将效率提升数十万倍，且尺寸越大，增益越明显.

可以通过平均符号的比值乘虚时演化的长度来衡量计算效率的差异，即

$$\text{Efficiency gain factor} = \frac{\langle \text{sign} \rangle_{\text{neq.}}}{\langle \text{sign} \rangle_{\text{eq.}}} \times \frac{\tau_{\text{eq.}}}{\tau_{\text{neq.}}}. \quad (6.3)$$

我们具体比较了几个尺寸的计算效率的差异，如图6.6所示，非平衡方法所需的计算资源仅是平衡态方法的数百万分之一，而且这一效率倍率提升大致随系统尺寸指数级增长. 举个具体的例子，我们计算 $L = 10$ 的结果所用的非平衡程序在高性能计算集群上跑了大概一个星期的时间——而如果想要用平衡态的方法同样靠谱地计算出 SU(3) Hubbard 模型是否有相变、属于什么普适类、相图和临界指数是多少，那程序大致要从新石器时代开始运行——直到今天.

7 总结

对于长久困扰强关联量子多体模拟的费米子符号问题，我们提出了一套基于非平衡标度理论的短时方法。该方法充分利用了短时信息中体现的基态相变临界性，可以在费米子符号问题出现或者变得严重之前，就把基态相图、临界指数算清楚。同时，还能在非平衡过程中揭示丰富的非平衡动力学临界行为。

该方法的使用范围依赖于量子临界标度，因此它具有非常强的普适性，可以直接应用到各种费米子系统临界问题的研究中。并且该方法不依赖于任何特殊的数值经验和技巧，能直接与绝大多数改善符号问题的方法兼容协同。

具体地，我们先在两个前人已经研究清楚的模型中验证了该短时方法的可行性和高效性。然后我们研究了一个描述 $SU(3)$ Hubbard 相互作用的格点模型，具有各向异性的狄拉克费米子激发。该模型具有严重的符号问题，以至于此前人们无法准确计算它的任何基态性质。我们使用非平衡的方法，确定了它的基态相图，发现了新奇的手征 $SU(3)/[SU(2) \times U(1)]$ 普适类，并计算了它的临界指数。在该问题的求解中，非平衡方法将计算效率提高了数百万倍。

使用我们提出的非平衡方法，能够准确回答一系列原本不可以求解的强关联问题，极大拓宽人类探究强关联量子多体物理的视野，可谓“Faster is different”。

参考文献

- [1] LI Z X, YAO H. Sign-problem-free fermionic quantum monte carlo: developments and applications[J/OL]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2019, 10(1): 337-356. DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-033117-054307.
- [2] BLANKENBECLER R, SCALAPINO D J, SUGAR R L. Monte carlo calculations of coupled boson-fermion systems.[J/OL]. Phys. Rev. D, 1981, 24: 2278-2286. DOI: 10.1103/PhysRevD.24.2278.
- [3] ASSAAD F, EVERTZ H. World-line and determinantal quantum monte carlo methods for spins, phonons and electrons[M/OL]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008: 277-356. DOI: 10.1007/978-3-540-74686-7_10.
- [4] BERG E, METLITSKI M A, SACHDEV S. Sign-problem-free quantum Monte Carlo of the onset of antiferromagnetism in metals[J/OL]. Science, 2012, 338(6114): 1606-1609. DOI: 10.1126/science.1227769.
- [5] MONDAINI R, TARAT S, SCALETTAR R T. Quantum critical points and the sign problem [J/OL]. Science, 2022, 375(6579): 418-424. DOI: 10.1126/science.abg9299.
- [6] TROYER M, WIESE U J. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum monte carlo simulations[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 170201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.170201.
- [7] PAN G, MENG Z Y. Sign problem in quantum Monte Carlo simulation[M/OL]//2024: 879-893. DOI: 10.1016/B978-0-323-90800-9.00095-0.
- [8] MONDAINI R, TARAT S, SCALETTAR R T. Universality and critical exponents of the fermion sign problem[J/OL]. Physical Review B, 2023, 107(24): 245144. DOI: 10.1103/PhysRevB.107.245144.
- [9] WU C, ZHANG S C. Sufficient condition for absence of the sign problem in the fermionic quantum monte carlo algorithm[J/OL]. Phys. Rev. B, 2005, 71: 155115. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.155115.
- [10] LI Z X, JIANG Y F, YAO H. Solving the fermion sign problem in quantum Monte Carlo simulations by Majorana representation[J/OL]. Physical Review B, 2015, 91(24): 241117. DOI: 10.1103/PhysRevB.91.241117.
- [11] LI B H, LI Z X, YAO H. Fermion-induced quantum critical point in Dirac semimetals: a sign-problem-free quantum Monte Carlo study[J/OL]. Physical Review B, 2020, 101(8): 085105. DOI: 10.1103/PhysRevB.101.085105.
- [12] LI Z X, JIANG Y F, YAO H. Majorana-time-reversal symmetries: A fundamental principle for sign-problem-free quantum Monte Carlo simulations[J/OL]. Physical Review Letters, 2016, 117(26): 267002. DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.267002.

- [13] WAN Z Q, ZHANG S X, YAO H. Mitigating the fermion sign problem by automatic differentiation[J/OL]. Phys. Rev. B, 2022, 106: L241109. DOI: 10.1103/PhysRevB.106.L241109.
- [14] LEVY R, CLARK B K. Mitigating the sign problem through basis rotations[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2021, 126: 216401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.216401.
- [15] VAEZI M S, NEGARI A R, MOHARRAMIPOUR A, et al. An amelioration for the sign problem: adiabatic quantum Monte Carlo[J/OL]. Physical Review Letters, 2021, 127(21): 217003. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.217003.
- [16] FISHER M E. The renormalization group in the theory of critical behavior[J/OL]. Rev. Mod. Phys., 1974, 46: 597-616. DOI: 10.1103/RevModPhys.46.597.
- [17] CAI J Q, SHU Y R, RAO X Q, et al. Imaginary-time relaxation quantum critical dynamics in two-dimensional dimerized Heisenberg model[M/OL]. arXiv, 2024. <http://arxiv.org/abs/2403.09084>.
- [18] POLKOVNIKOV A, GRITSEV V. Breakdown of the adiabatic limit in low-dimensional gapless systems[J/OL]. Nature Physics, 2008, 4(6): 477-481. DOI: 10.1038/nphys963.
- [19] ASSAAD F F. Depleted Kondo lattices: Quantum Monte Carlo and mean-field calculations [J/OL]. Physical Review B, 2002, 65(11): 115104. DOI: 10.1103/PhysRevB.65.115104.
- [20] MA N, WEINBERG P, SHAO H, et al. Anomalous quantum-critical scaling corrections in two-dimensional antiferromagnets[J/OL]. Physical Review Letters, 2018, 121(11): 117202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.117202.
- [21] BORLA U, GAZIT S, MOROZ S. In pursuit of deconfined quantum criticality in Ising gauge theory entangled with single-component fermions[M/OL]. arXiv, 2024. <http://arxiv.org/abs/2402.00933>.
- [22] RAY S, IHRIG B, KRUTI D, et al. Fractionalized quantum criticality in spin-orbital liquids from field theory beyond the leading order[J/OL]. Physical Review B, 2021, 103(15): 155160. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.155160.
- [23] YIN S, MAI P, ZHONG F. Universal short-time quantum critical dynamics in imaginary time [J/OL]. Phys. Rev. B, 2014, 89: 144115. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.144115.
- [24] YU Y K, ZENG Z, SHU Y R, et al. Nonequilibrium dynamics in dirac quantum criticality[A]. 2023. arXiv: 2310.10601.
- [25] HIRSCH J E, SUGAR R L, SCALAPINO D J, et al. Monte Carlo simulations of one-dimensional fermion systems[J/OL]. Physical Review B, 1982, 26(9): 5033-5055. DOI: 10.1103/PhysRevB.26.5033.
- [26] COLLABORATION A, ASSAAD F F, BERCX M, et al. The ALF (Algorithms for lattice fermions) project release 2.4. documentation for the auxiliary-field quantum Monte Carlo code [J/OL]. SciPost Physics Codebases, 2022: 1. DOI: 10.21468/SciPostPhysCodeb.1.
- [27] TABATABAEI S M, NEGARI A R, MACIEJKO J, et al. Chiral ising gross-neveu criticality of a single dirac cone: A quantum monte carlo study[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2022, 128: 225701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.225701.
- [28] LI Z X, VAEZI A, MENDL C B, et al. Numerical observation of emergent spacetime su-

- persymmetry at quantum criticality[J/OL]. Science Advances, 2018, 4(11): eaau1463. DOI: 10.1126/sciadv.aau1463.
- [29] LANG T C, LÄUCHLI A M. Quantum Monte Carlo simulation of the chiral Heisenberg Gross-Neveu-Yukawa phase Transition with a single Dirac cone[J/OL]. Physical Review Letters, 2019, 123(13): 137602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.137602.
- [30] CAMPOSTRINI M, PELISSETTO A, VICARI E. Finite-size scaling at quantum transitions [J/OL]. Physical Review B, 2014, 89(9): 094516. DOI: 10.1103/PhysRevB.89.094516.
- [31] HARADA K. Bayesian inference in the scaling analysis of critical phenomena[J/OL]. Physical Review E, 2011, 84(5): 056704. DOI: 10.1103/PhysRevE.84.056704.
- [32] VACCA G P, ZAMBELLI L. Multimeson yukawa interactions at criticality[J/OL]. Phys. Rev. D, 2015, 91: 125003. DOI: 10.1103/PhysRevD.91.125003.
- [33] LI Z X, JIANG Y F, YAO H. Fermion-sign-free Majorana-quantum-Monte-Carlo studies of quantum critical phenomena of Dirac fermions in two dimensions[J/OL]. New Journal of Physics, 2015, 17(8): 085003. DOI: 10.1088/1367-2630/17/8/085003.
- [34] LI Z X, JIANG Y F, JIAN S K, et al. Fermion-induced quantum critical points[J/OL]. Nature Communications, 2017, 8(1): 314. DOI: 10.1038/s41467-017-00167-6.
- [35] LI Z X, WAN Z Q, YAO H. Asymptotic sign free in interacting fermion models[A]. 2022. arXiv: 2211.00663.
- [36] ZHOU Z, WANG D, MENG Z Y, et al. Mott insulating states and quantum phase transitions of correlated SU(2N) Dirac fermions[J/OL]. Physical Review B, 2016, 93(24): 245157. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.245157.
- [37] ASSAAD F F. Phase diagram of the half-filled two-dimensional SU(N) Hubbard-Heisenberg model: a quantum Monte Carlo study[J/OL]. Physical Review B, 2005, 71(7): 075103. <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0406074>. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.075103.
- [38] KIM F H, ASSAAD F F, PENC K, et al. Dimensional crossover in the SU(4) Heisenberg model in the six-dimensional antisymmetric self-conjugate representation revealed by quantum Monte Carlo and linear flavor-wave theory[J/OL]. Physical Review B, 2019, 100(8): 085103. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.085103.
- [39] PASQUALETTI G, BETTERMANN O, DARKWAH OPPONG N, et al. Equation of state and thermometry of the 2D SU (N) fermi-Hubbard model[J/OL]. Physical Review Letters, 2024, 132(8): 083401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.083401.
- [40] WANG D, WANG L, WU C. Slater and Mott insulating states in the SU(6) Hubbard model [J/OL]. Physical Review B, 2019, 100(11): 115155. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.115155.
- [41] XU H, WANG Y, ZHOU Z, et al. Mott insulating states of the anisotropic SU(4) Dirac fermions [J/OL]. Physical Review B, 2024, 109(12): 125136. DOI: 10.1103/PhysRevB.109.125136.
- [42] SEIFERT U F P, DONG X Y, CHULLIPARAMBIL S, et al. Fractionalized fermionic quantum criticality in spin-orbital Mott insulators[J/OL]. Physical Review Letters, 2020, 125(25): 257202. DOI: 10.1103/PhysRevLett.125.257202.

- [43] LIU Z H, VOJTA M, ASSAAD F F, et al. Metallic and deconfined quantum criticality in Dirac systems[J/OL]. Physical Review Letters, 2022, 128(8): 087201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.087201.
- [44] FENG C, IBARRA-GARCÍA-PADILLA E, HAZZARD K R A, et al. Metal-insulator transition and quantum magnetism in the SU(3) fermi-Hubbard model[J/OL]. Physical Review Research, 2023, 5(4): 043267. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.5.043267.
- [45] RAY S. Unconventional Gross-Neveu quantum criticality: SO(3)-biadjoint Mott insulator and emergent SU(3) symmetry[M/OL]. arXiv, 2023. <http://arxiv.org/abs/2303.06162>.
- [46] KITAEV A. Anyons in an exactly solved model and beyond[J/OL]. Annals of Physics, 2006, 321(1): 2-111. DOI: 10.1016/j.aop.2005.10.005.
- [47] CHUNG S S, CORBOZ P. SU(3) fermions on the honeycomb lattice at $1/3$ filling[J/OL]. Physical Review B, 2019, 100(3): 035134. DOI: 10.1103/PhysRevB.100.035134.
- [48] CHULLIPARAMBIL S, SEIFERT U F P, VOJTA M, et al. Microscopic models for Kitaev's sixteenfold way of anyon theories[J/OL]. Physical Review B, 2020, 102(20): 201111. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.201111.
- [49] WEN X G. Quantum order from string-net condensations and the origin of light and massless fermions[J/OL]. Physical Review D, 2003, 68(6): 065003. DOI: 10.1103/PhysRevD.68.065003.
- [50] XU H, LI X, ZHOU Z, et al. Trion states and quantum criticality of attractive SU(3) Dirac fermions[J/OL]. Physical Review Research, 2023, 5(2): 023180. DOI: 10.1103/PhysRevResearch.5.023180.
- [51] BRUNNER M, ASSAAD F F, MURAMATSU A. Single-hole dynamics in the $t - J$ model on a square lattice[J/OL]. Physical Review B, 2000, 62(23): 15480-15492. DOI: 10.1103/PhysRevB.62.15480.
- [52] OTSUKA Y, SEKI K, SORELLA S, et al. Dirac electrons in the square-lattice Hubbard model with a d -wave pairing field: The chiral Heisenberg universality class revisited[J/OL]. Physical Review B, 2020, 102(23): 235105. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.235105.
- [53] CASSELLA G, D'ORNELLAS P, HODSON T, et al. An exact chiral amorphous spin liquid [J/OL]. Nature Communications, 2023, 14(1): 6663. DOI: 10.1038/s41467-023-42105-9.
- [54] BURLANKOV D E. The SU_3 space and its quotient spaces[J/OL]. Theoretical and Mathematical Physics, 2004, 138(1): 78-87. DOI: 10.1023/B:TAMP.0000010635.52704.c8.
- [55] GILMORE R. Relations among low-dimensional simple Lie groups[R/OL]. Journal of Geometry and Symmetry in Physics, 2012. DOI: 10.7546/jgsp-28-2012-1-45.
- [56] ROSENSTEIN B, Hoi-Lai Yu, KOVNER A. Critical exponents of new universality classes [J/OL]. Phys. Lett. B, 1993, 314(3): 381-386. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037026939391253J>. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(93\)91253-J](https://doi.org/10.1016/0370-2693(93)91253-J).
- [57] JANSSEN L, HERBUT I F. Antiferromagnetic critical point on graphene's honeycomb lattice: A functional renormalization group approach[J/OL]. Phys. Rev. B, 2014, 89: 205403. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.205403>.

在读期间发表的学术论文与取得的研究成果

待发表论文

1. **Yin-Kai Yu**, Zhi Zeng, Yu-Rong Shu, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Nonequilibrium dynamics in Dirac quantum criticality. 2023. arXiv: 2310.10601.
2. Zhi Zeng, **Yin-Kai Yu**, Zhi-Xuan Li, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Finite-time scaling beyond the Kibble-Zurek prerequisite: Driven critical dynamics in strongly interacting Dirac systems. 2024. arXiv: 2403.19258.
3. **Yin-Kai Yu**, Zhi-Xuan Li, Zi-Xiang Li, Shuai Yin. Preempting fermion sign problem: Unveiling quantum criticality through non-equilibrium dynamics. 2024, in preparation.

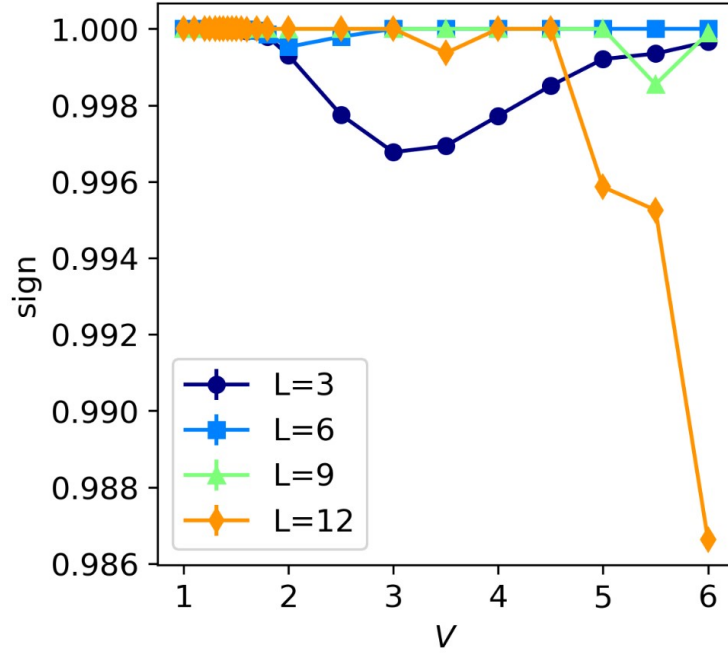
附录 A t - V 模型的符号问题特性补充

图 A.1 较小尺寸、较大相互作用强度，平均符号随相互作用强度 V 的变化. 图中数据均是从有序初态出发弛豫了 $\tau L^{-z} = 0.3$ 时间的结果.

在平衡态，符号问题的“临界点”大概在 $V = 1.3^{[35]}$ ，而在非平衡阶段 ($\tau L^{-z} = 0.3$)，这个“临界点”在 $V = 5$ 左右. 从图中可以看出，当 $V < 5$ 时，系统的尺寸越大，符号问题越严重，而当 $V > 5$ 时，系统的尺寸越大，符号问题越轻.

附录 B SU(3) 群生成元的 Gell-Mann 矩阵表示

SU(3) 群的生成元是著名的 Gell-Mann 矩阵, 用于描述粒子物理学中的对称性. 这些矩阵定义了 SU(3) 群, 并在各种领域中被广泛使用, 包括强相互作用、夸克模型等.

下面是 8 个 Gell-Mann 矩阵的具体形式, 每个矩阵对应于 SU(3) 中的一个生成元:

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

$$\lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

$$\lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_8 = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & -2/\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

它们对应于粒子物理学中的对称性, 并且在强相互作用等领域中应用广泛. 每个矩阵生成了群中的一种对称性 (单参子群), 整个矩阵集合形成了 SU(3) 的封闭代数结构. 这些矩阵在描述夸克、胶子等强相互作用现象时非常重要.

SU(3) 群的李代数结构由生成元的对易关系决定. SU(3) 群的生成元之间的对易关系如下:

$$[\lambda_a, \lambda_b] = 2i \sum_c f_{abc} \lambda_c, \quad (\text{B.4})$$

其中 f_{abc} 是结构常数, 具体为:

$$f_{123} = 1, \quad (\text{B.5})$$

$$f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = \frac{1}{2}, \quad (\text{B.6})$$

$$f_{156} = f_{367} = -\frac{1}{2}, \quad (\text{B.7})$$

$$f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (\text{B.8})$$

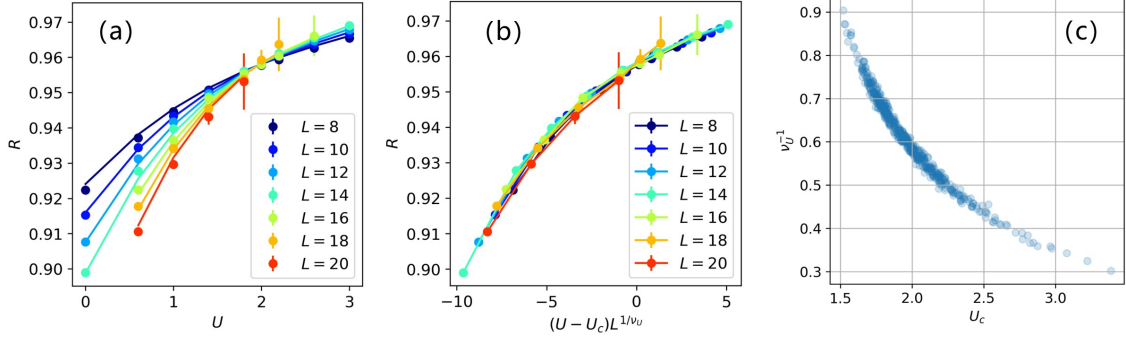
附录 C 计算狄拉克半金属- λ_8 反铁磁相图中临界点


图 C.1 用非平衡方法确定相变临界点 U_c 和临界指数 ν . 其中磁通为 $\phi = 0.1\pi$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. 拟合得到 $U_c = 2.0(3)$, $\nu^{-1} = 0.61(10)$

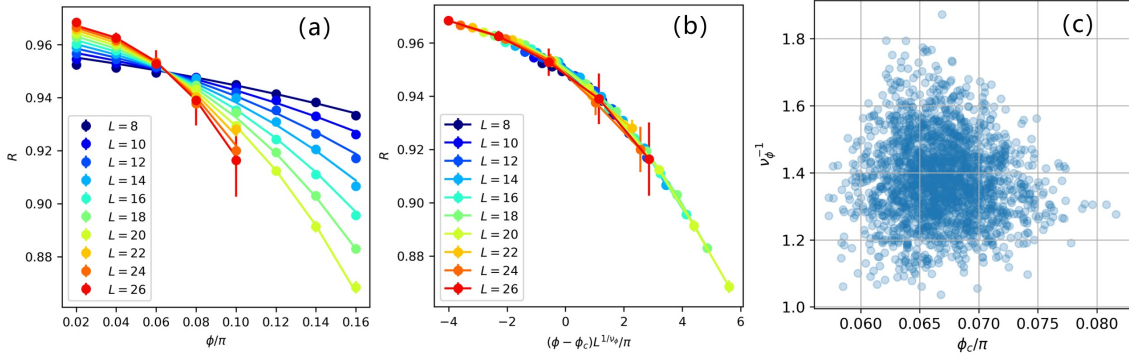


图 C.2 用非平衡方法确定相变临界点 ϕ_c 和临界指数 ν_ϕ . 其中磁通为 $U = 1$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. $\phi_c = 0.067(4)\pi$, $\nu_\phi^{-1} = 1.4(1)$

图6.4中的相边界由这些数据计算. 注意到对于关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 做重标度使得数据重合所需的指数 ν_ϕ 和关联长度指数 ν 并不一致, 大致有 $1/\nu_\phi = 3/\nu$. 这表示在临界点附近, 标度关系

$$R = f_R \left[\left(\frac{U}{\phi} - \frac{U}{\phi_c} \right) L^{1/\nu} \right], \quad (C.1)$$

对 $\phi - \phi_c$ 的三阶展开 $R \sim (\phi - \phi_c)L^{3/\nu}$ 成为领头阶.

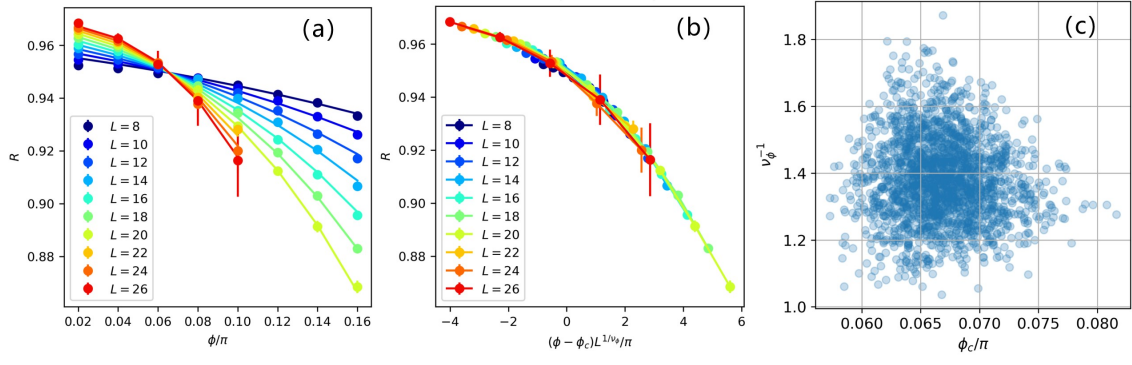


图 C.3 用非平衡方法确定相变临界点 ϕ_c 和临界指数 ν_ϕ . 其中磁通为 $U = 2$, 弛豫初态为完全有序相, 虚时演化时间满足 $\tau L^{-z} = 0.25$. (a) 关联长度比 R 随相互作用强度 U 的变化, 实线表示基于标度关系的拟合线. (b) 重标度后不同尺寸的数据重合. (c) 重采样得到的 1000 个样本的拟合结果的分布. $\phi_c = 0.105(10)\pi$, $\nu_\phi^{-1} = 1.7(5)$

致谢

在这一工作中，阴帅老师和李自翔老师提供了至关重要的支持，他们为这个工作的研究思路、研究方法提供了指引，以及提供了充足的研究资金（来源于科研项目经费）。与我合作的黎智轩同学也为该工作提供了部分计算结果。非常感谢以上合作者的帮助。也非常感谢潘逸文老师为我们的工作提供了非常有帮助的讨论。

我还要再次感谢阴帅老师在本科期间对我的培养。我从大一认识阴帅老师开始，就在日日不断的与他的交流中得到的宝贵的学识、经验、视野、心态，以及为我提供了无价的学术资源，让我得以在较高的起点开始我的学术生涯。同时，再次感谢李自翔老师，我非常崇拜他。李自翔老师对我的科研工作提供了很多关键的指导，每次和他对话都感受视野更开阔了。他的身体力行和耐心指导让我对未来几年的博士生涯充满信心和干劲。两位老师带着我做了很多有趣的科研工作，让我一边努力奋斗一边感受到成就感和快乐。

长久以来，我要感谢我的家人、还有我的女朋友和她的家人，他们为我的学习和工作提供了精神上和物质上的有力支持，让我可以自由而快乐地进行我的学业。我的女朋友，深圳大学外国语学院英语系的肖瑶同学，以她的专业知识为我的论文写作提供了重要的帮助，并且她在生活和学习中体现的创造力以及对完美的追求也经常给我提供灵感和激励。我希望未来也可以和她一起好好奋斗、好好生活。

这四年来，我在中山大学物理学院遇到了无数的贵人，这里有很多在教学上花了很多心思的老师，以及非常良好的学术气氛。物理学院的同学们对我的帮助很大，尤其是王誉晨同学，几乎每天都跟我讨论课程中的物理问题，让我不用花太多心思就把课内知识掌握得很好。还有课题组的曾植同学一直以来在学术研究上的陪伴，很多琐碎的技术问题我们是背靠背解决的。感谢我的舍友华健钧、林凡程一直容许我任性的作息，并且陪我吃吃喝喝。感谢莫梁虹、罗俊平、李小康、赖睿然、林伊婷、苏树云同学对我在学业上的帮助。神奇的物理学院让我感慨，世界上的好人实在太多，恕不能一一列举，一并表示感谢。

本科的最后半年，我几乎在物理所度过，这里提供了良好的环境让我好好推进手头的各项工作。研究理论物理的日子是自由而纯粹的，每天都像周末，而且每个“周末”都让人情不自禁地好好工作。

余荫铠

2024年5月14日

本科生毕业论文（设计）开题报告

学生姓名	余荫铠	学号	20343078
所在院系	物理学院		
专 业	物理学（物理学院）		
指导教师姓名	阴帅	指导教师职称	副教授
指导教师单位	物理学院		
毕业论文（设计）题目:非平衡量子临界性中的符号问题研究			
国内外关于本选题的研究现状、水平和发展趋势，选题研究的目的和意义等 一、量子蒙特卡罗中的费米子符号问题 研究具有强关联相互作用的量子多体系统，是现代凝聚态物理、核物理、量子色动力学等领域中至关重要的课题。然而，由于量子多体系统的希尔伯特空间是随着系统尺寸增大而指数级增大，绝大多数强关联量子多体问题目前都找不到通用的、误差可控的解析求解方法。随着人们在实验上不断发现依赖于强关联物理的新奇物理现象，比如高温超导和分数化激发等，人们在理论层面迫切需要有有效的、无偏的数值方法来探究其物理本质。在目前可用的各种数值方法中，量子蒙特卡罗（QMC）方法被认为是最重要的方法之一。由于 QMC 通常不依赖于微扰和特定的变分形式，它可以准确而高效地求解量子多体问题，而不引入系统性的偏差。QMC 模拟之所以高效，是因为它不需要对整个指数级大的多体希尔伯特空间进行采样，而是在其中自动采样最具代表性的量子构型。QMC 模拟得到误差足够小的计算结果所需的计算时间是随系统尺寸多项式级增大的，而非指数级增大[1]。具体地，量子蒙特卡罗方法通常可以通过路径积分表示（引入虚时间维度）把 d 维的量子系统映射到 $d+1$ 维的经典系统，从而把量子配分函数写为经典玻尔兹曼权重的求和。这样，量子系统的求解就转化为了经典构型的采样问题。在经典构型的采样问题中，人们通常可以将构型权重等同于构型出现的概率，从而使用各种经典的蒙特卡罗方法（比如 Metropolis 算法）对最具代表性的构型进行采样，而不必将上述求和遍历所有的构型。在经典系统中，构型权重总是正的，因此这样的做法可以自然地进行。 然而，在费米子系统和有阻挫的玻色子系统中，玻尔兹曼权重并不总是正的。例如在世界线算法中，奇数次的费米子交换将导致负的玻尔兹曼权重。在这些量子系统中，玻尔兹曼权重不能被直接用作采样概率，普通的 QMC 方法就失效了。这就是臭名昭著的费米子符号问题。费米子符号问题严重阻碍了人们对强关联量子多体系统的研究，其本质来源于费米子的交换统计性质，不			

仅出现在 QMC 中，它在其他求解量子多体系统的数值方法（比如分子动力学方法）中也普遍存在。如何处理符号问题，关系到我们对量子多体理论最根本的理解[2-3]。

费米子符号问题有最简单粗暴的处理办法，即强行把玻尔兹曼权重的绝对值作为采样概率进行构型采样，这相当于在一个忽略了费米子的交换统计的玻色化的系统中的观测结果，将其除以玻尔兹曼权重的平均符号就可以计算费米子系统的观测量。这样简单粗暴地计算观测量，其代价是平均符号由于不同构型的权重常常正负抵消而接近零，观测量表现为两个很小的数相除，这在数值上通常是病态的，会引入很大的数值误差。具体的，人们证明这个其误差的放大因子指数级依赖于温度的倒数以及粒子数，对于求解热力学极限下量子系统的基态问题，QMC 仍然需要指数级长的计算时间才能得到可控的计算误差[4]。

费米子符号问题被证明是一个 NP-hard 问题，目前人们没有找到能够在多项式级时间内求解该类问题的通用方法[4]。近年来，国内外的各种研究发现，如果系统具有某些对称性，例如 Kramers 时间反演对称性或者 Majorana 时间反演对称性，则可以在无符号问题的表示中进行 QMC 模拟[1,5]。在没有这些对称性的系统中，人们正在尝试选用不同的基、不同的多体相互作用解耦方式（Hubbard - Stratonovich 变换）来减轻符号问题，但目前这些方法并不能容易地推广到其他的系统[6-7]。

二、量子临界行为的普适性与标度不变性

强关联量子多体系统的量子临界点和临界性质，描述了各种奇特的量子相之间的是如何发生连续相变的，是量子多体领域备受关注的、最具挑战性的问题之一。不幸的是，由于临界慢化的存在，热力学极限的系统在临界点上需要经过无穷长的时间（或者虚时间）才能演化为基态，而费米子符号问题的严重程度指数级依赖于演化时间，因此人们几乎不可能在有符号问题的费米子系统中数值上准确地研究基态的相变。

而物理学是这样地耐人寻味：临界慢化实际上是量子临界普适性和标度性的一个侧面，而另一面，普适性和标度性可以成为研究量子临界性的有力工具，并已成为量子临界性研究的普遍范式。根据 Landau-Ginzburg-Wilson 范式，相变可以由序参量描述，在临界点附近，物理量的临界行为具有标度不变性，标度量纲由几个临界指数刻画。并且重整化群研究表明，各个具体系统的相变根据维数、对称性等特征可以划分到不同的普适类，而不依赖于模型的具体细节，同一普适类中的不同模型具有相同的临界指数[8]。过去半个世纪以来，基于这种范式，人们对各种经典系统、量子系统，包括一些无符号问题的费米子系统进行了广泛的研究。甚至最近在非 Landau-Ginzburg-Wilson 范式的相变中，

人们依然发现了普适标度行为。

非平衡物理，是比平衡态物理更一般也更困难的方向，因为平衡态研究中依赖的一些良好的、可以大大简化求解的、稳定的性质常常在非平衡中被破坏。而在量子临界点，平衡仅是特例，而不是常态——无穷长的非平衡演化过程才是人们所能观测到的真实。有趣的是，过去的一系列研究在一些经典系统和量子系统中揭示了非平衡的普适标度行为，多体系统的临界动力学在时间尺度上也具有标度不变性[9]。在此，物理学的困难又将展示了它有用的另一面。

最近，我与合作者的一项研究将非平衡标度理论拓展到了费米子系统中，在蜂窝晶格 Hubbard 模型中用无符号问题的 QMC 方法揭示了狄拉克费米子系统的普适虚时临界动力学，并提出了基于短时弛豫动力学研究费米子临界性的普适理论框架，可以在非平衡态，利用短时的信息准确预测基态的量子临界点和临界行为，而这些短时信息在以往平衡态的研究中通常被忽略。这一框架大大提高了 QMC 求解量子临界问题的效率[10]。

三、本选题基于费米子非平衡量子临界性处理符号问题的思路

回顾之前提到的量子蒙卡中的费米子符号问题，和量子临界行为的普适性与标度不变性，考虑到：

- 1.研究费米子的基态量子临界性需要演化几乎无穷长的时间。
- 2.费米子符号问题的严重性随着演化时间指数级增长。
- 3.根据费米子的非平衡标度理论可以利用短时动力学预测基态临界性质。

我们自然可以提出这样的猜测：根据费米子的非平衡标度理论，可以在费米子符号问题出现之前，或者费米子符号问题变得严重之前，就求解出基态的临界性质，从而克服费米子符号问题带来的困难，将原本几乎不可能求解的问题变为可以求解。

综上，在本选题中，对于长久困扰强关联量子多体模拟的费米子符号问题，我们期望提出一套基于非平衡标度理论的短时方法该方法利用短时信息确定临界性质，可以大大减轻符号问题。同时该方法是普适的，可以很容易地应用到各种费米子系统临界问题的研究中，并且能与绝大多数改善符号问题的方法兼容协同。本选题将系统地、完整地探索这种方法的有效性和可行性，并尝试用这种方法研究人们此前受限于符号问题而无法计算的一系列物理问题，比如自发破缺 $SO(3)$ 的分数化临界动力学等。

本选题有望克服费米子符号问题，将一系列原本不可求解的问题算清楚，极大拓宽人类探究强关联量子多体物理的视野，更新人们对量子多体理论最根本的理解。

选题研究的计划进度及可行性论述等

在正式开题之前，我已经完成了文献调研、程序编写与调试工作，并在两个模型中验证了本选题方法的有效性和可行性。为了验证有效性，我选取的是此前已有平衡态的研究的模型，要么是存在符号问题但不太严重，要么是存在无符号问题的算法，这样我们可以将我们的结果与之前的结果比对印证。详实的计算结果表明，在保证可靠地计算精度的前提下，非平衡方法相较于平衡的方法可以将计算效率提升 400 倍以上，同时还能和其他方法协同减轻符号问题。因此，本选题具有十分充分的可行性。

开题后我将研究单层蜂窝晶格上破缺 $SO(3)$ 的相变，接下来的计划进度这样安排：

- 1 月 21 日前，用平均场、量子蒙卡等方法做粗略的计算，大致确定符号问题的性质，以及相图、临界点。
 - 2 月 4 日前，把之前两个模型的计算结果都整理好。
 - 2 月 10 日前，确定 $SO(3)$ 的相变的临界点。
 - 3 月 11 日前，完成弛豫动力学的计算，并确定临界指数。
- 后续的时间用于整理结果，撰写毕业论文。

毕业论文（设计）撰写提纲

第一章为绪论，介绍量子蒙特卡罗中的费米子符号问题、量子临界行为的普适性与标度不变性、基于费米子非平衡量子临界性处理符号问题的思路。

第二章详细讲述本文的理论分析方法，即费米子量子临界性的非平衡标度理论。

第三章详细介绍本文使用的数值方法，以及虚时弛豫动力学。

第四章、第五章分别在两个具体的模型（正方晶格上的单狄拉克锥模型、蜂窝晶格上的 $t-V$ 模型）中展示如何利用非平衡方法在有符号问题的情况下研究量子临界性。并将我们的结果与之前的结果对比，论证我们新方法的有效性和高效性。

第六章展示利用非平衡方法克服符号问题所计算的 Gross-Neveu- $SO(3)$ 普适理论结果。

第七章总结非平衡方法处理符号问题的效果，展望其更广泛的应用。

参考文献

- [1] LI Z X, YAO H. Sign-problem-free fermionic quantum monte carlo: Developments and applications[J/OL]. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2019, 10(1): 337-356. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-033117-054307>.
- [2] BLANKENBECLER R, SCALAPINO D J, SUGAR R L. Monte carlo calculations of coupled boson-fermion systems. [J/OL]. Phys. Rev. D, 1981, 24: 2278-2286. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.24.2278>.
- [3] ASSAAD F, EVERTZ H. World-line and determinantal quantum monte carlo methods for spins, phonons and electrons[M/OL]. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008: 277-356. https://doi.org/10.1007/978-3-540-74686-7_10.
- [4] TROYER M, WIESE U J. Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum monte carlo simulations[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2005, 94: 170201. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.94.170201>.
- [5] WU C, ZHANG S C. Sufficient condition for absence of the sign problem in the fermionic quantum monte carlo algorithm[J/OL]. Phys. Rev. B, 2005, 71: 155115. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.155115>.
- [6] WAN Z Q, ZHANG S X, YAO H. Mitigating the fermion sign problem by automatic differentiation[J/OL]. Phys. Rev. B, 2022, 106: L241109. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.106.L241109>.
- [7] LEVY R, CLARK B K. Mitigating the sign problem through basis rotations[J/OL]. Phys. Rev. Lett., 2021, 126: 216401. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.216401>.
- [8] FISHER M E. The renormalization group in the theory of critical behavior[J/OL]. Rev. Mod. Phys., 1974, 46: 597-616. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.46.597>.
- [9] YIN S, MAI P, ZHONG F. Universal short-time quantum critical dynamics in imaginary time[J/OL]. Phys. Rev. B, 2014, 89: 144115. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.144115>.
- [10] YU Y K, ZENG Z, SHU Y R, et al. Nonequilibrium dynamics in dirac quantum criticality[A]. 2023. arXiv: 2310.10601.

本课题是否选自教师科研课题

☒是 ☐否

教师科研课题的名称（选题来自教师科研课题的，本列须填写,如不是来自教师科研课题的，请填写“无”）

狄拉克系统的普适预热化动力学，量子相变的非平衡动力学

指导教师意见

同意开题

专项意见

☒经审核，该毕业论文开题报告无违反意识形态工作内容 ☐退回修改

指导教师签名：

阴帅

主管教学领导审核意见

同意开题

专项意见

经审核，该毕业论文开题报告无违反意识形态工作内容。

审核人：

书记审核意见

同意开题

专项意见

经审核，该毕业论文开题报告无违反意识形态工作内容。

审核人：

审核时间:2024 年 1 月 15 日

本科生毕业论文（设计）中期检查报告

学生姓名	余荫铠	学号	20343078
专 业	物理学（物理学院）		
所在院系	物理学院		
指导教师姓名	阴帅	指导教师职称	副教授
指导教师单位	物理学院		
毕业论文（设计）题目：非平衡量子临界性中的符号问题研究			
目前已完成的研究工作、取得的主要进展等 目前已完成的研究工作、取得的主要进展等 已经用我们所提出的非平衡方法计算了两个模型的临界点和临界性质：单狄拉克锥的铁磁相变、t-V 模型的电荷密度波相变。由于符号问题不太严重或者恰好存在无符号问题的计算方法，它们的平衡态相图和平衡态临界性质也可以被很好地计算。通过对比我们的非平衡计算结果和平衡态的结果，我们发现非平衡方法可以准确、普适地计算费米子系统的量子临界性，而且可以普适地大幅提高计算效率。 进一步，我们还构造了具有交错磁通方格子上的 SU(3) Hubbard 模型，该模型不存在无符号问题的求解方法，其相图、相变普适类、临界性质均是未知的。我们利用非平衡标度理论，通过有序初态在临界点附近的弛豫行为确定了该模型的相图、临界点和临界指数，发现了新的普适类。			
后期拟完成的研究工作及进度安排 后期拟进一步计算 SU(3) Hubbard 模型的临界指数，包括费米子反常量纲等。 进度安排： 4 月 4 日，确定一个比较精确的临界点，以及拟合出比较精确的关联长度指数、玻色子反常量纲。 4 月 10 日，计算出比较准确的费米子反常量纲，以及展示出有序初态在临界点符合标度理论的弛豫行为。 4 月 20 日，开始写毕业论文初稿。 4 月 30 日，完成毕业论文初稿。			

存在的具体问题及拟采取的措施等

可能存在的问题：由于 $SU(3)$ Hubbard 模型的符号问题比较严重，我们只能在非常远离平衡的状态下确定临界点，这可能由于有限时间效应引起很大的偏差，使得算出的临界点偏离基态相变的临界点较远。

拟采取的措施：尝试使用普适的非平衡修正标度关系来更准确地确定临界点。

指导教师审查意见

余荫铠的项目进展顺利，可以按照目前进度继续进行。

指导教师签名： 阴帅

日期：2024 年 4 月 1 日

本科生毕业论文（设计）过程指导记录

学生姓名	余荫铠	学号	20343078
专 业	物理学（物理学院）		
所在院系	物理学院		
指导教师姓名	阴帅	指导教师职称	
指导教师单位	物理学院		
毕业论文（设计）题目：非平衡量子临界性中的符号问题研究			
第 1 次			
指导时间：2024 年 1 月 23 日			
毕业论文（设计）工作阶段小结及下一步计划：			
阶段小结：尝试了蜂窝晶格上的单层 SO（3）相互作用、最近邻 SO（3）相互作用、单狄拉克锥的 SO（3）相互作用，都有太严重的符号问题，即使用短时方法也很难算清楚。			
下一步工作计划：在加磁通的方格子上尝试 SU（3）Hubbard 模型，该模型的磁通可调，会控制狄拉克锥的各向异性，有可能获得可控的符号问题。			
指导情况：			
在我们前期工作基础上，尝试新的模型计算。			
第 2 次			
指导时间：2024 年 2 月 27 日			
毕业论文（设计）工作阶段小结及下一步计划：			
阶段小结：尝试了 SU（3）Hubbard 模型，大致确定了相图，以及序参量的形式。			
下一步工作计划：分析一下 SU（3）Hubbard 模型的相变破缺了什么对称性，分析是什么普适类。			
指导情况：			
SU(3)模型可以开展，有符号问题，但是可控。我们对此模型开展大规模计算。			
第 3 次			
指导时间：2024 年 3 月 26 日			

毕业论文（设计）工作阶段小结及下一步计划：

阶段小结：大规模计算了 SU(3) Hubbard 模型的相图和部分临界指数。确定了自发破缺了什么对称性。

下一步工作计划：继续计算其余的临界指数。整理结果。

指导情况：

计算出来的指数和标度效果都很好，准备写毕业论文。

第 4 次（非必填）

指导时间：

毕业论文（设计）工作阶段小结及下一步计划：

年 月 日

指导情况：

中山大学本科生毕业论文（设计）
指导教师评阅及答辩资格审核表

学生姓名	余荫铠	学 号	20343078
专 业	物理学（物理学院）	所在院系	物理学院
指导教师姓名	阴帅	指导成绩	99.0
毕业论文（设计）题目 非平衡量子临界性中的符号问题研究			
指导教师审核情况 指导教师意见： 本文利用虚时弛豫动力学，研究有符号问题的费米子模型的量子临界性。这是非常具有创新性的题目。 余荫铠同学非常刻苦认真，不怕困难，论文中好多问题都是他独立解决的，体现了他初步具有了较强的独立研究能力。 论文内容丰富，书写规范。 专项意见： 经审核，该毕业论文无违反意识形态工作内容 审核意见： ☒同意答辩 ☐退回修改 审核人：阴帅 主管教学领导审核情况 专项意见： ☒经审核，该毕业论文无违反意识形态工作内容 ☐退回修改 审核意见： ☒同意答辩 ☐退回修改 审核人：王猛 书记审核情况 专项意见： ☒经审核，该毕业论文无违反意识形态工作内容 ☐退回修改 审核意见： ☒同意答辩 ☐退回修改 审核人：赵福利			

审核时间：2024 年 4 月 30 日

中山大学本科毕业论文（设计）
答辩情况登记表

学生姓名	余荫铠	学 号	20343078
专 业	物理学	所在院系	物理学院物理系
答辩时间	2024 年 5 月 12 日	答辩地点	冼为坚堂 111 会议室
指导教师姓名	阴帅	指导教师职称	副教授
毕业论文（设计）题目：非平衡量子临界性中的符号问题研究			
答辩记录： 1. 其实最终没有解决符号问题？ 回答：是的，不是完全解决了符号问题。而是在“Faster is different”的意义下克服了符号问题。符号问题是解决不了的，只能把误差降低。 2. 平均符号迅速衰减之后，那一片区域有没有丰富的物理呢？如果没有的话我们是否可以完全不管它，我们关心的物理是藏在符号问题变严重之前多一点呢，还是藏在变严重之后多一点呢？ 回答：看我们要研究什么。比如说我们要研究临界性质，那在符号问题变严重之前就可以算出来；但比如要研究的不是临界性质，要研究态的性质而不是相变的性质，本身要研究基态波函数的话，那确实不行。我们这个理论是研究相变的。 3. 前面有个哈密顿量，你为什么写动量空间的哈密顿量？ 回答：这里是为了表述简洁。论文中是格点形式的。 4. 如果不用 π-flux 实现狄拉克锥，就要引入 non-local 的模型了。用 π-flux 可以实现局域模型。 5. 后面方格子加交错磁通的是不是就是 π-flux？ 回答：后面其实不是 π-flux，我们这个磁通没有加到 π。原因是我们发现加到 π 的话，符号问题会严重到即使这个方法也难以计算。 6. 所以说后面那一段，用这个方法也算不了临界性质吗？ 回答：是的。但是我们这个方法可以很方便地和其他减轻符号问题的方法协同使用，因为它仅仅只需要缩短虚时。所以以后有可能和别的方法结合起来研究研究这个问题。 7. 你怎么保证这个方法算出来的是正确的呢？ 回答：我前面介绍两个人们已经知道的模型，保证方法的可信度；其次，我们这里的新结果也可以体现标度重合的性质，也可以互相验证。			

答辩委员会综合评价意见:

该生的论文工作具有创新性,吸引了广泛的兴趣和讨论,论文工作内容丰富,考虑了研究方法的可靠性,表现出了该生扎实的基礎理论和系统的专业知识。答辩过程中对提问做出了流利且充分的表述,回答清晰具有条理。该生具有较好的科学研究、独立分析、解决问题的能力。整体表现及论文工作都比较优秀。

答辩成绩			92.3	
答辩委员会成员	姓名	职称	所在单位	签名
	黄海平	教授	中山大学物理学院	黄海平
	叶鹏	教授	中山大学物理学院	叶鹏
	陈继尧	副教授	中山大学物理学院	陈继尧
	侯玉升	副教授	中山大学物理学院	侯玉升
	邬汉青	副教授	中山大学物理学院	邬汉青
	张勇	副教授	中山大学物理学院	张勇
记录人签名:			张丽茹	

注: 1.本记录表如实记录本科生毕业论文答辩会情况,由答辩委员会成员及记录人签名后存档; 2.记录表纸质版交学院(系)存档,扫描版 PDF 及时上传学校毕设系统。

中山大学本科生毕业论文（设计） 成绩评定表

学生姓名	余荫铠	学号	20343078
专 业	物理学（物理学院）	所在院系	物理学院
指导教师姓名	阴帅	指导成绩及权重	99.0； 20.00%
答辩成绩及权重	92.3； 80.00%	总评成绩	93.6
毕业论文（设计）题目 非平衡量子临界性中的符号问题研究			
毕业论文最终版指导教师审核情况			
指导教师意见： 此论文利用非平衡方法研究有符号问题的量子临界系统，研究内容非常有创新性，且在此领域有重要的潜在应用。论文作者对研究课题具有很强的探索精神和创新动力。论文写作规范，是一篇非常优秀的论文。			
专项意见：			
●经审核，该毕业论文开题报告无违反意识形态工作内容 ○退回修改			
审核状态：			
●审核通过 ○退回修改			
审核人： 阴帅		审核时间：2024 年 5 月 14 日	