

# 含有 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用的自旋 1 键交替海森伯模型的量子相变和拓扑序标度\*

陈爱民<sup>1)†</sup> 刘东昌<sup>1)</sup> 段佳<sup>1)</sup> 王洪雷<sup>2)</sup> 相春环<sup>3)</sup> 苏耀恒<sup>1)</sup>

1) (西安工程大学理学院, 西安 710048)

2) (重庆医科大学医学信息学院, 重庆 400016)

3) (重庆医科大学公共卫生与管理学院, 重庆 400016)

(2019 年 11 月 21 日收到; 2020 年 2 月 16 日收到修改稿)

利用张量网络表示的无限矩阵乘积态算法研究了含有 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用的键交替海森伯模型的量子相变和临界标度行为. 基于矩阵乘积态的基态波函数计算了系统的量子纠缠熵及非局域拓扑序. 数据表明, 随着键交替强度变化, 系统从拓扑有序的 Haldane 相转变为局域有序的二聚化相. 同时 DM 相互作用抑制了系统的二聚化, 并最终打破系统的完全二聚化. 另外, 通过对相变点附近二聚化序的一阶导数和长程弦序的数值拟合, 分别得到了此模型相变的特征临界指数  $\alpha$  和  $\beta$  的值. 结果表明, 随着 DM 相互作用强度的增强,  $\alpha$  逐渐减小, 同时  $\beta$  逐渐增大. DM 相互作用强度影响着此模型的临界行为. 针对此模型的临界性质的研究, 揭示了量子自旋相互作用的彼此竞争机制, 对今后研究含有 DM 相互作用的自旋多体系统中拓扑量子相变临界行为提供一定的借鉴与参考.

**关键词:** 量子相变, 量子纠缠, Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用, 拓扑序, 临界指数

**PACS:** 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Hk, 75.10.Pq

**DOI:** 10.7498/aps.69.20191773

## 1 引言

在多体系统中, 量子相变是由量子涨落占主导地位而引起的一种量子效应, 近年来一直是凝聚态物理中的研究热点<sup>[1-4]</sup>. 在量子相变中, 系统的基态会发生剧烈的变化, 其关联长度在临界点处是发散的, 且激发能谱的能隙消失. 一般情况下, 局域序的产生伴随着系统的自发性对称破缺, 被称为 Landau-Ginzburg-Wilson 范式. 对此类相变的刻画, 一般采用量子纠缠<sup>[5]</sup>、量子 concurrence<sup>[6]</sup>、保真度<sup>[7]</sup>等方法. 在相变点附近, 量子纠缠、比热及磁化强度等物理量按照特定的函数关系发散, 呈现确定的标度行为. 除此之外, 自然界中还存在着

类不能够用 Landau-Ginzburg-Wilson 范式的对称破缺描述的拓扑类量子相变, 此类相变不存在描述区分相变的局域序参量, 呈现无序或长程拓扑序, 例如自旋拓扑有序的 Haldane 相<sup>[8]</sup>.

在低维多体系统中发现的含有拓扑相变的新物质态极大地丰富了我们对于自然界的认知. 然而, 受到研究方法的限制, 长程拓扑序及其标度行为一直是低维系统中量子相变研究的难题<sup>[9]</sup>. 近年来发展的张量网络表示算法被证明对低维无限格点系统中非局域的长程序刻画是非常成功的<sup>[10]</sup>. 此方法恰好为我们研究拓扑类量子相变的标度行为提供了强有力手段.

为了探究低维自旋系统中具有非局域序的拓扑量子相变及物理效应对相变的影响, 本文选取了

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11504283) 和陕西省自然科学基金 (批准号: 2019JM-017) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chenaimin\_xa@163.com

自旋 1 的含有 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用的键交替海森伯模型, 其中 DM 相互作用是 Dzyaloshinsky<sup>[11]</sup> 和 Moriya<sup>[12]</sup> 首次提出的用来描述弱铁磁体的相互作用, 它也是导致磁阻挫的原因之一. 近年来, 研究发现 DM 相互作用可以影响许多体系的磁性和临界性质<sup>[13]</sup>. 在 Ising 和 XXZ 模型中, 考虑了 DM 相互作用后, 系统将从反铁磁的自旋 Néel 相转变为自旋液体相<sup>[14]</sup>. Thio 和 Aharony<sup>[15]</sup> 观察到含有 DM 相互作用的反铁磁  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  中反铁磁相变的三临界点. 一般情况下 DM 相互作用很弱, 但是 Zhao 等<sup>[16]</sup> 研究了 DM 相互作用对苯甲酸铜  $\text{Cu}(\text{C}_6\text{D}_5\text{COO})_2\text{D}_2\text{O}$  低能磁激发的影响, 发现 DM 相互作用对实际材料的影响确实非常重要. 另外, 许多反铁磁材料都能通过 DM 相互作用来描述的, 例如  $\text{Yb}_4\text{As}_3$ <sup>[17]</sup>,  $\text{BaCu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ <sup>[18]</sup> 和  $\text{CsCuCl}_3$ <sup>[19]</sup> 等. 由于 DM 相互作用引起材料不同寻常的物理性质, 激发了人们对含有 DM 相互作用系统研究的广泛兴趣.

本文基于张量网络态表示的无限矩阵乘积态 (iMPS) 算法, 利用无限虚时间演化块抽取方法, 数值上得到了此系统的基态波函数. 基于矩阵乘积态的基态波函数计算了系统的量子纠缠熵及非局域拓扑序. 研究发现, 在 DM 相互作用存在的情况下, 随着键交替强度由弱变强, 系统从拓扑有序的 Haldane 相转变为局域有序的二聚化相, 从系统基态的 von Neumann 熵、局域二聚化序及非局域拓扑序参量得到了较为精确的相变点  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ . 并基于 von Neumann 熵和序参量确定了系统完整的相图. 此外, 为研究此类拓扑相变的标度行为, 本文对相变点附近的二聚化序的一阶导数及非局域拓扑序做了数值标度拟合, 分别得到了不同 DM 相互作用强度下刻画相变临界性质的特征临界指数  $\alpha$  和  $\beta$ , 并且分析了 DM 相互作用在此模型中对相变临界性质的影响.

## 2 iMPS 算法

对于本文研究的自旋 1 含有 DM 相互作用的键交替海森伯模型, Jordan-Wigner 变换已不再适用. 近年来基于张量网络表示的数值方法让我们能够更深层次刻画和理解自旋系统的临界现象<sup>[20]</sup>. 在张量网络算法中, 特别是针对无限的一维自旋系统, 波函数被表示成 iMPS 的形式<sup>[11]</sup>, 即

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{s\}} \sum_{\{\alpha\}} \cdots \lambda_{\alpha_i}^{[i]} \Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]} \lambda_{\alpha_{i+1}}^{[i+1]} \Gamma_{\alpha_{i+1}, s_{i+1}, \alpha_{i+2}}^{[i+1]} \cdots |\cdots s_{i-1} s_i s_{i+1} \cdots\rangle, \quad (1)$$

其中  $|s_i\rangle$  是希尔伯特空间中  $i$  格点的基矢, 对角矩阵  $\lambda_{\alpha_i}^{[i]}$  中的元素是两半无限链的施密特分解系数,  $\Gamma_{\alpha_i, s_i, \alpha_{i+1}}^{[i]}$  是对应格点位置的一个三阶张量, 其值可以取  $1, 2, \dots, \chi$ ,  $\chi$  是 iMPS 算法中的截断维数.  $s_i$  值取为  $1, 2, \dots, d$ ,  $d$  是单个格点希尔伯特空间维度. 利用虚时间演化方法, 可以将系统的近似基态表达为

$$|\Psi(\tau)\rangle = \frac{\exp[-H\tau] |\Psi(0)\rangle}{\|\exp[-H\tau] |\Psi(0)\rangle\|}, \quad (2)$$

其中  $H$  表示系统的哈密顿量,  $\Psi(0)$  为任意给定的系统初态. 在算法的迭代更新过程中, 有效的方法是对虚时间演化算符进行 Suzuki-Trotter 分解<sup>[21]</sup>, 使之约化为一系列只作用于两个近邻点的两点演化算符的乘积. 一旦得到了无限系统的基态波函数, 就可以将之施加在相应的物理算子上, 从而计算出相应的物理量.

## 3 模型

在微扰理论中, DM 相互作用是一种由于在低对称的磁系统中自旋轨道相互耦合而自然产生的反对称各向异性相互作用. 然而在实际分析的过程中, 对于具有 DM 相互作用的模型的研究极为困难, 却也极大地丰富我们对低维磁性材料中量子现象的理解<sup>[22,23]</sup>.

为了研究 DM 相互作用对含有非局域序参量的量子相变的影响, 本文选取了一维具有 DM 相互作用的自旋 1 键交替反铁磁海森伯模型. 其哈密顿量可以表示为

$$H = J \sum_{i=1}^{\infty} \left[ 1 - (-1)^i \delta \right] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D(S_i^x S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^x), \quad (3)$$

其中  $\mathbf{S}_i$  为格点  $i$  处的自旋 1 算符.  $\delta$  是系统结构对称性破缺的键交替幅度参数,  $D$  是 DM 相互作用强度,  $J$  是反铁磁最近邻自旋相互作用系数, 本文计算中取  $J = 1$ . 标准的自旋 1 海森伯模型处于自旋固体态的 Haldane 相, 具有较小的能隙. 由于  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  的隐性对称破缺, Haldane 相没有局域序参量, 但存在非局域的长程序, 是一个拓扑有序相<sup>[24]</sup>.

当海森伯模型被施加键交替效应后, 结构上的对称性被打破, 系统历经一个 Haldane 相到二聚化的高斯相变<sup>[25]</sup>, 其相变点位于  $\delta \approx 0.260$ . 本文将主要研究存在 DM 相互作用时, 键交替的海森伯模型的量子相变和临界行为.

## 4 数值模拟

### 4.1 量子纠缠

近年来, 基于量子信息的量子纠缠已经被应用到研究量子相变中. 量子纠缠是一种用来测量一个给定系统中量子关联的有效方法. 在量子信息学中, 人们已经提出并使用了各种不同的方式来度量系统的纠缠, 这其中包括 von Neumann 熵, concurrence, Negativity 和几何纠缠等. 大量的研究证明了量子纠缠是一个能够有效探测系统量子相变点的普适方法<sup>[26–28]</sup>. 两体 von Neumann 纠缠熵  $S$  被定义为  $S = -\text{Tr}[\rho_L \log \rho_L] = -\text{Tr}[\rho_R \log \rho_R]$ , 式中  $\rho_L$  和  $\rho_R$  分别是半无限链子系统  $L$  和  $R$  的约化密度矩阵. 在张量网络表示中, von Neumann 熵定义为

$$S = - \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha}^2 \log \lambda_{\alpha}^2, \quad (4)$$

其中  $\alpha$  表示半无限链  $L(-\infty, \dots, i)$  和  $R(i, \dots, \infty)$ ,  $\lambda$  是两个半无限链间的 Schmidt 分解系数, 可以由转移矩阵的奇异值分解得到.

在键交替效应存在的情况下 (键交替参数  $\delta$  的变化范围为  $\delta \in [0, 1]$ ), 系统结构上的对称性被打

破. 因此, 图 1 给出了  $D = 0.5$  和  $D = 1$  时系统的奇键 (第  $2i + 1$  个格点) von Neumann 熵  $S_o$  和偶键 (第  $2i$  个格点) von Neumann 熵  $S_e$ , 其中, 截断维数选取为  $\chi = 32$ . 从图 1 可以看出, 随着键交替参数  $\delta$  的变化, 奇键熵  $S_o$  和偶键熵  $S_e$  在整个参数范围内的值是不同的, 但在  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  时都出现了峰值. 此峰值位置就对应着量子纠缠发散的位置, 也意味着系统在此位置发生了相变. 实际上, 想要得到系统相变点的精确位置, 截断维数  $\chi$  需要达到无穷大. 为了保证计算数据的精确度, 计算过程中比较了  $D = 0.5$  时  $\chi = 32$  和  $\chi = 50$  两种截断维数下得到的相变点都为  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$ , 其位置没有发生明显移动, 说明截断维数为  $\chi = 32$  已足够保证数据精度.

在键交替海森伯模型中, 当键交替参数  $\delta$  逐渐增大到 1, 奇键熵  $S_o$  逐渐趋于饱和, 而偶键熵  $S_e$  逐渐降低为零, 系统在  $\delta_c \approx 0.260$  从 Haldane 相转变为二聚化相, 并最终呈现完全的奇键二聚化<sup>[25]</sup>. 但在含有 DM 相互作用的情况下, 偶键熵  $S_e$  并没有降低为零. 同时, 相变点也发生了后移, 从  $D = 0$  时的  $\delta_c^{D=0} \approx 0.260$  后移到了  $D = 0.5$  时的  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$ , 当 DM 相互作用继续加大到  $D = 1$  时, 相变点继续后移到了  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ . 这说明 DM 相互作用抑制着系统的二聚化, 并最终会打破系统的完全二聚化.

### 4.2 序参量

不同相中的序参量可以帮助人们更为深刻地理解量子系统所发生的量子相变. 在键交替效应存

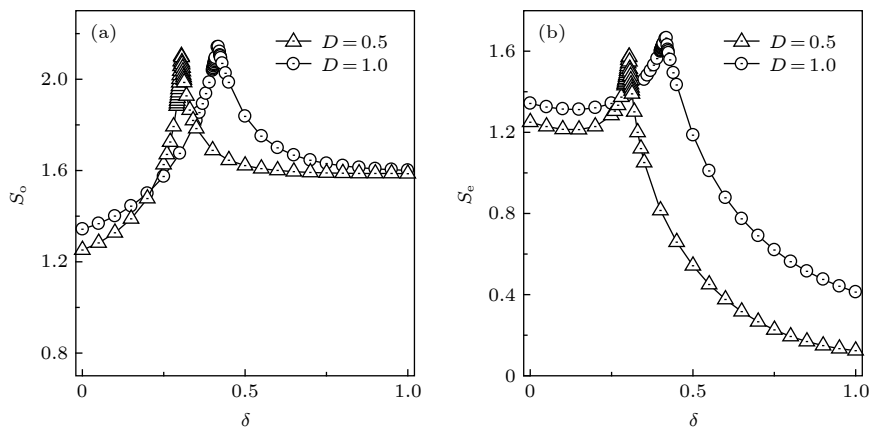


图 1  $D = 0.5$  和  $D = 1$  时 (a) 奇键 von Neumann 熵  $S_o$  和 (b) 偶键 von Neumann 熵  $S_e$  随  $\delta$  的变化

Fig. 1. (a) Odd-bond von Neumann entropy  $S_o$  and (b) even-bond von Neumann entropy  $S_e$  as a function of  $\delta$  for  $D = 0.5$  and  $D = 1$ .

在的情况下, 系统结构上的对称性被打破, 表现出结构上的二聚化行为. 对于含有局域序的二聚化相, 其序参量就是近邻自旋关联的长程交替, 也就是二聚化序, 其表达式为

$$O_D = \langle S_{2i-1} S_{2i} \rangle - \langle S_{2i} S_{2i+1} \rangle, \quad (5)$$

其中  $\langle \dots \rangle$  表示期望值.

图 2(a) 和图 2(b) 分别计算了系统在 DM 相互作用参数选取为  $D = 0.5$  和  $D = 1$  时二聚化序  $O_D$  随键交替参数  $\delta$  的变化. 从图 2 可以看出, 在  $\delta = 0$  时系统中的二聚化序  $O_D = 0$ . 一旦键交替效应存在, 二聚化程度就随着  $\delta$  的增大而增大, 二聚化序不仅存在于二聚化相中, 在拓扑有序的 Haldane 相中也存在. 也就是说二聚化序存在于整个键交替幅度参数变化范围. 但是二聚化序在相变点附近变化较为剧烈, 其一阶导数的最大值位置对应着 von Neumann 熵给出的相变点位置  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ . 因此, 只要系统结构上的对称性被打破, 局域的二聚化序就不能作为特有的二聚化相序参量来刻画二聚化序, 但其一阶导数可以用来标定相变点的位置.

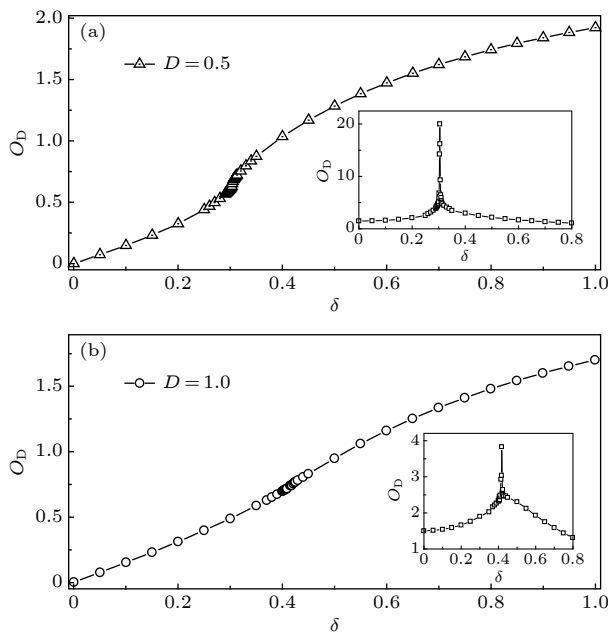


图 2 二聚化序  $O_D$  随  $\delta$  的变化 (内插图为  $O_D$  随  $\delta$  的一阶导数) (a)  $D = 0.5$ , (b)  $D = 1$

Fig. 2. Dimer order parameter  $O_D$  as a function of  $\delta$  for (a)  $D = 0.5$  and (b)  $D = 1$  (first derivation of  $O_D$  in the insert).

同时, 为探究 DM 相互作用强度对系统结构二聚化的影响, 图 3 计算了在  $\delta = 1$  时二聚化序  $O_D$

随 DM 相互作用强度  $D$  的变化. 从图 3 可以看出, 随着 DM 相互作用强度的增大, 二聚化序  $O_D$  逐渐减小. 这意味着在此模型中由于 DM 相互作用的反对称各向异性, 确实使得二聚化程度减弱, 抑制了系统的二聚化行为. 因此, 这一结论也对 von Neumann 熵给出的结论提供了支撑.

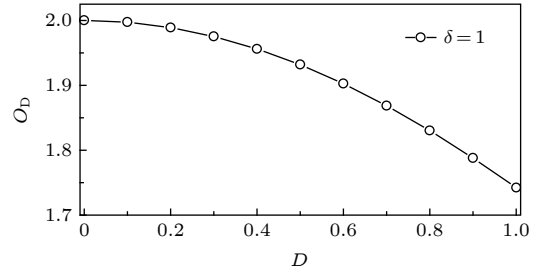


图 3 二聚化序  $O_D$  随 DM 相互作用强度  $D$  的变化, 其中键交替参数选取为  $\delta = 1$

Fig. 3. Dimer order parameter  $O_D$  as a function of DM interaction  $D$  for  $\delta = 1$ .

拓扑有序的 Haldane 相是一种无局域序参量的自旋固体相. 隐性的  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  对称破缺可使得 Haldane 相具有非局域拓扑弦序, den Nijs 和 Rommelse<sup>[29]</sup> 首先引入了非局域拓扑弦序来表征自旋 1 Heisenberg 链中的拓扑有序 Haldane 相. 弦序是远距离格点长程弦关联的饱和值, 在 iMPS 表示中可以直接计算出无限格点系统的非局域拓扑弦序值, 而不需要通过有限尺寸来进行外推<sup>[10]</sup>. 其表达式为

$$O_S = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} - \left\langle S_i \exp \left[ i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k \right] S_j \right\rangle, \quad (6)$$

其中  $i$  和  $j$  是自旋格点的位置, 则格点间的距离就是  $|i - j|$ .

图 4 计算出了非局域拓扑弦序  $O_S$  在 DM 相互作用参数选取为  $D = 0.5$  和  $D = 1$  时随键交替参数  $\delta$  的变化. 由图 4 可知, 在  $D = 0.5$  时  $\delta \leq 0.305$  和  $D = 1$  时  $\delta \leq 0.418$  区域内, 非局域拓扑弦序  $O_S$  都是有限值. 而当在  $D = 0.5$  时  $\delta > 0.305$  和  $D = 1$  时  $\delta > 0.418$  区域内, 非局域拓扑弦序  $O_S$  的值都为零. 图 4 结果表明, 当键交替参数  $\delta$  增大到  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  时, 系统从拓扑有序的 Haldane 相过渡到了局域有序的二聚化相. 弦序给出的相变点的位置和 von Neumann 熵以及二聚化序参量  $O_D$  一阶导数给出的相变点是符合的.



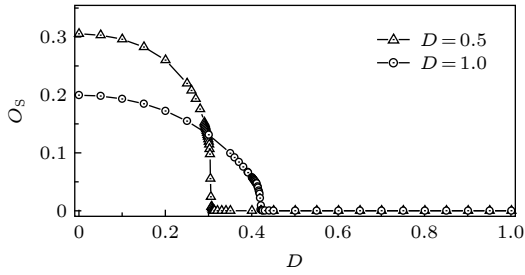


图 4 非局域拓扑弦序  $O_S$  随  $\delta$  的变化

Fig. 4. Non-local topological string order parameter as a function of  $\delta$ .

### 4.3 相图

为了反映系统结构对称性破缺的键交替幅度参数  $\delta$  和 DM 相互作用强度  $D$  共同作用下系统相变的性质, 基于 iMPS 算法的 von Neumann 熵和序参量确定的相变点, 图 5 为一维含有 DM 相互作用的自旋 1 键交替反铁磁海森伯模型的相图. 可以看出, 一条临界线将二聚化相和 Haldane 相分开. 当  $D = 0$  时, 系统历经一个 Haldane 相到二聚化相的高斯相变, 中心荷为  $c = 1$ , 其相变点位于  $\delta_c \approx 0.260$  [25]. 随着 DM 相互作用强度  $D$  的增大, Haldane 相的区域逐渐由窄变宽. 这也印证了 DM 相互作用确实抑制了系统的二聚化. 并且在相变过程中二聚化相和 Haldane 相始终是沿着同一条临界线, 说明文中所选取的参数  $D = 0, D = 0.5$  和  $D = 1$  都处于同一条临界线上.

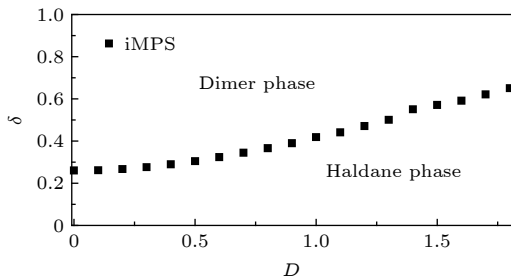


图 5 含有 DM 相互作用的自旋 1 键交替反铁磁海森伯模型相图

Fig. 5. Phase diagram of spin-1 bond-alternating Heisenberg model with DM interaction.

### 4.4 特征临界指数

与量子相变相关的临界指数规定了量子相变的普适类, 而这些临界指数描述了一个量子多体系统在绝对零度时的关联长度、磁化强度等物理量的发散特性. 因此, 临界指数是刻画量子多体系统临界行为的重要参数 [30–32]. 然而系统基态所拥有的

非局域拓扑序是无法用局域的序参量来刻画的, 此类相变的某些临界指数是与非局域序紧密相连的, 也使得拓扑类相变超脱出 Landau-Ginzburg-Wilson 范式关于二级相变的范畴. 对于拓扑类相变只有通过非局域关联及非局域序来刻画其标度行为.

前面已经指出此模型中的二聚化序  $O_D$  并不能作为特有的二聚化相序参量来刻画二聚化相. 实际上这里的二聚化序  $O_D$  已经是一个能量物理量, 其一阶导数  $\partial O_D / \partial \delta$  就类似于经典相变里的比热  $C_V$ . 因此, 相变点附近局域二聚化序的一阶导数  $\partial O_D / \partial \delta$  就可以拟合出与比热相关的相变特征临界指数. 在图 6 中, 基于张量网络表示的 iMPS 方法计算出了对于 DM 相互作用参数为  $D = 0, D = 0.5$  和  $D = 1$  时在对应相变点  $\delta_c^{D=0} \approx 0.260, \delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  附近局域二聚化序的一阶导数  $\partial O_D / \partial \delta$  随着  $|\delta - \delta_c|$  的变化. 二聚化序的一阶导数  $\partial O_D / \partial \delta$  与  $|\delta - \delta_c|$  是存在着特定的幂律关系, 即  $\partial O_D / \partial \delta \propto |\delta - \delta_c|^{-\alpha}$ , 其中,  $\alpha$  是相变中与比热  $C_V$  相关的特征临界指数. 这里选取拟合函数为  $\partial O_D / \partial \delta = a|\delta - \delta_c|^{-\alpha} + \alpha_0$ , 通过数值拟合可得到,  $D = 0$  时,  $\alpha^{D=0} = 0.670, a^{D=0} = 0.041$  和  $\alpha_0^{D=0} = 4.868$ ;  $D = 0.5$  时,  $\alpha^{D=0.5} = 0.338, a^{D=0.5} = 0.342$  和  $\alpha_0^{D=0.5} = 2.299$ ; 以及  $D = 1$  时,  $\alpha^{D=1} = 0.091, a^{D=1} = 3.819$  和  $\alpha_0^{D=1} = -3.405$ . 从而得到特征临界指数  $\alpha^{D=0} = 0.670, \alpha^{D=0.5} = 0.338$  和  $\alpha^{D=1} = 0.091$ . 特别地, 对于  $D = 0$  时, 此相变的特征临界

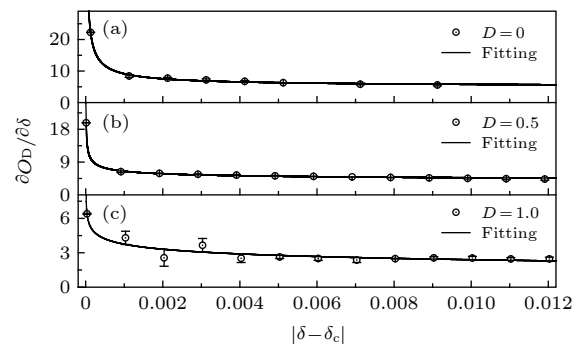


图 6 相互作用参数 (a)  $D = 0$ , (b)  $D = 0.5$  和 (c)  $D = 1$  时在对应相变点  $\delta_c^{D=0} \approx 0.260, \delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  附近二聚化序的一阶导数  $\partial O_D / \partial \delta$  的特征临界指数  $\alpha$  拟合

Fig. 6. Characteristic critical exponent  $\alpha$  from the first derivative of the dimer order  $\partial O_D / \partial \delta$  for (a)  $D = 0$ , (b)  $D = 0.5$ , and (c)  $D = 1$  in the vicinity of the critical points  $\delta_c^{D=0} \approx 0.260, \delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$ , and  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ , respectively.

指数为  $\alpha^{D=0} = 0.670$ , 其值近似等于  $2/3$ . 同时可以看出, 随着 DM 相互作用强度增强临界指数  $\alpha$  逐渐减小.

图 7 展示了对于  $D = 0.5$  和  $D = 1$  时在对应相变点  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  附近非局域拓扑弦序  $O_S$  随着  $|\delta - \delta_c|$  的变化. 从图 7 可以看出, 非局域拓扑弦序  $O_S$  与  $|\delta - \delta_c|$  服从于  $O_S \propto |\delta - \delta_c|^{2\beta}$ , 其中  $\beta$  是相变中与磁性相关的特征临界指数. 选取拟合函数  $\log O_S = 2\beta \log |\delta - \delta_c| + \beta_0$ , 通过数值拟合可得到  $\beta^{D=0.5} = 0.101$  和  $\beta^{D=1} = 0.121$ , 以及  $\beta_0^{D=0.5} = -0.406$  和  $\beta_0^{D=1} = -0.854$ . 从而得到特征临界指数  $\beta^{D=0.5} = 0.101$  和  $\beta^{D=1} = 0.121$ .

为了更为清楚地刻画 DM 相互作用在此拓扑相变中对临界性质的影响, 表 1 列出了不同 DM 相互作用强度下临界指数  $\beta$  的拟合值, 可以看

出特征临界指数  $\beta$  随着 DM 相互作用强度的增强在参数范围内近似于线性增大. 此模型在  $D = 0$  时得到的特征临界指数为  $\beta^{D=0} = 0.082$ , 其值近似等于  $1/12$ <sup>[25]</sup>, 而在  $D = 1$  时得到的特征临界指数为  $\beta^{D=1} = 0.121$ , 其值近似等于  $1/8$ . 在  $D = 1$  的情况下, 临界指数  $\alpha^{D=1} = 0.091$  和  $\beta^{D=1} = 0.121$  较为接近于二维 Potts 模型中  $q = 2$  情形下的临界指数值  $\alpha = 0$  和  $\beta = 1/8$ <sup>[30]</sup>. 由此可见, 量子相变中的不同量子自旋相互作用之间存在着彼此间的相互竞争. 在这种相互作用竞争下, 由自旋轨道相互耦合产生的反对称各向异性 DM 相互作用在此模型中影响着系统相变的临界性质. 这对于今后多量子自旋相互作用竞争下拓扑量子相变临界性质的研究具有一定指导意义.

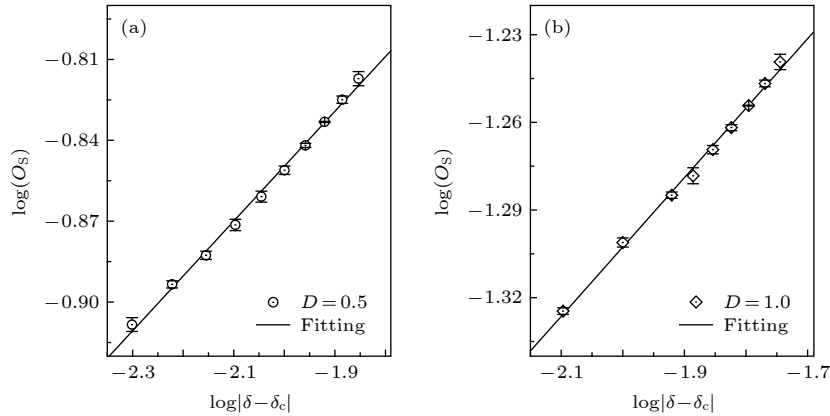


图 7 相互作用参数 (a)  $D = 0.5$  和 (b)  $D = 1$  时在对应相变点  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$  附近非局域拓扑弦序  $O_S$  的特征临界指数  $\beta$  拟合

Fig. 7. Characteristic critical exponent  $\beta$  from the nonlocal topological string order  $O_S$  for (a)  $D = 0.5$  and (b)  $D = 1$  in the vicinity of the critical points  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  and  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ , respectively.

表 1 不同 DM 相互作用强度下的临界指数  $\beta$

Table 1. Characteristic critical exponent  $\beta$  for different DM interactions.

	$D$										
	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$\beta$	0.082	0.087	0.092	0.098	0.099	0.101	0.106	0.109	0.115	0.117	0.121

## 5 结 论

利用张量网络表示的无限矩阵乘积态算法研究了一维具有 DM 相互作用的自旋 1 键交替反铁磁海森伯模型的量子相变及拓扑序标度行为. 基于矩阵乘积态的基态波函数计算了系统的量子纠缠熵. 量子纠缠熵随着键交替强度变化得到相变点位

置  $\delta_c^{D=0.5} \approx 0.305$  和  $\delta_c^{D=1} \approx 0.418$ , 可以看出 DM 相互作用抑制了系统的二聚化, 并最终打破系统的完全二聚化行为. 本文进而计算了此系统中的局域二聚化序和非局域拓扑弦序, 确定了完整的系统相图. 结果表明, 系统从拓扑有序的 Haldane 相转变为局域有序的二聚化相. 同时, 只要系统结构上的对称性被打破, 局域的二聚化序参量就不能作为特有的二聚化相序参量来刻画二聚化序, 但其一阶导

数可以用来标定相变点的位置. 此外, 通过对相变点附近二聚化序的一阶导数和长程弦序的数值拟合, 分别得到了此相变的特征临界指数 $\alpha$ 和 $\beta$ 值, 可以看出特征临界指数 $\alpha$ 随着 DM 相互作用强度的增强而逐渐减小, 同时特征临界指数 $\beta$ 随着 DM 相互作用强度的增强而逐渐增大. 对于此模型的研究揭示了不同量子自旋相互作用之间的彼此竞争, 对今后含有 DM 相互作用的拓扑量子相变中临界行为研究提供了一定的借鉴与参考.

## 参考文献

- [1] Sachdev S 2011 *Quantum Phase Transitions* (2nd Ed.) (Cambridge: Cambridge University Press) pp1–501
- [2] Rizzi M, Rossini D, Chiara G D, Montangero S, Fazio R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 240404
- [3] Hu S, Normand B, Wang X, Yu L 2011 *Phys. Rev. B* **84** 220402(R)
- [4] Adelhardt P, Gritsch J, Hille M, Reiss D A, Schmidt K P 2017 *Phys. Rev. B* **96** 235123
- [5] Amico L, Fazio R, Osterloh A, Vedral V 2008 *Rev. Mod. Phys.* **80** 517
- [6] Nehra R, Bhakuni D S, Gangadharaiiah S, Sharma A 2018 *Phys. Rev. B* **98** 045120
- [7] Zanardi P, Paunković N 2006 *Phys. Rev. E* **74** 031123
- [8] Haldane F D M 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1153
- [9] Ueda H, Nakano H, Kusakabe K 2008 *Phys. Rev. B* **78** 224402
- [10] Su Y H, Cho S Y, Li B, Wang H, Zhou H 2012 *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** 074003
- [11] Dzyaloshinsky I 1958 *J. Phys. Chem. Solids* **4** 241
- [12] Moriya T 1960 *Phys. Rev. Lett.* **4** 228
- [13] Dmitrienko V E, Chizhikov V A 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 187203
- [14] Kargarian M, Jafari R, and Langari A 2009 *Phys. Rev. A* **79** 042319
- [15] Thio T, Aharony A 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 894
- [16] Zhao J, Wang X, Xiang T, Su Z, Yu L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 207204
- [17] Kohgi M, Iwasa K, Mignot J M, Fak B, Gegenwart P, Lang M, Ochiai A, Aoki H, Suzuki T 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2439
- [18] Tsukada I, Takeya J T, Masuda T, Uchinokura K 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 127203
- [19] Stüßer N, Schotte U, Hoser A, Meschke M, Meißner M, Wosnitza J 2002 *J. Phys. Condens. Matter* **14** 5161
- [20] Vidal G 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 070201
- [21] Suzuki M 1990 *Phys. Lett. A* **146** 319
- [22] Kim J, Stamps R L, Camley R E 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 197204
- [23] Rózsa L, Atxitia U, Nowak U 2017 *Phys. Rev. B* **96** 094436
- [24] Kennedy T, Tasaki H 1992 *Commun. Math. Phys.* **147** 431
- [25] Su Y H, Chen A M, Xiang C, Wang H, Xia C, Wang J 2016 *J. Stat. Mech.* **2016** 123102
- [26] Osterloh A, Amico L, Falci G, Fazio R 2002 *Nature* **416** 608
- [27] Korepin V E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 096402
- [28] Chung M, Landau D P 2011 *Phys. Rev. B* **83** 113104
- [29] den Nijs M, Rommelse K 1989 *Phys. Rev. B* **40** 4709
- [30] Wu F Y 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 235
- [31] Wiseman S, Domany E 1993 *Phys. Rev. E* **48** 4080
- [32] Ding C, Wang Y, Zhang W, Guo W 2013 *Phys. Rev. E* **88** 042117

# Quantum phase transition and topological order scaling in spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction\*

Chen Ai-Min<sup>1)†</sup> Liu Dong-Chang<sup>1)</sup> Duan Jia<sup>1)</sup> Wang Hong-Lei<sup>2)</sup>  
Xiang Chun-Huan<sup>3)</sup> Su Yao-Heng<sup>1)</sup>

1) (*School of Science, Xi'an Polytechnic University, Xi'an 710048, China*)

2) (*College of Medical Informatics, Chongqing Medical University, Chongqing 400016, China*)

3) (*School of Public Health and Management, Chongqing Medical University, Chongqing 400016, China*)

( Received 21 November 2019; revised manuscript received 16 February 2020 )

## Abstract

Quantum phase transitions are driven by quantum fluctuations due to the uncertainty principle in many-body physics. In quantum phase transitions, the ground-state changes dramatically. The quantum entanglement, specific heat, magnetization and other physical quantities diverge according to certain functions, and show specific scaling behaviors. In addition, there is a topological quantum phase transition beyond the conventional Landau-Ginzburg-Wilson paradigm, which is relevant to emergent phenomena in strongly correlated electron systems, with topological nonlocal order parameters as a salient feature. Thus, topological order is a new paradigm in the study of topological quantum phase transitions.

To investigate competition mechanism of the different quantum spin interactions, in this paper, the one-dimensional spin-1 bond-alternating Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interaction is considered. The DM interaction drives the quantum fluctuations resulting in a phase transition. By using the one-dimensional infinite matrix product state algorithm in tensor network representation, the quantum entanglement entropy and order parameters are calculated from the ground-state function. The numerical result shows that with the change of bond alternating strength, there is a quantum phase transition from the topological ordered Haldane phase to the local ordered dimer phase. Based on the von Neumann entropy and order parameter, the phase diagram of this model is obtained. There is a critical line that separates the Haldane and the dimer phase. The DM interaction inhibits the dimerization of the quantum spin system and finally breaks the fully dimerization. Due to the fact that the structural symmetry of system is broken, the local dimer order exists in the whole parameter range when the bond-alternative strength parameter changes. The first derivative of the local dimer order behaves as a peak corresponding to the critical point. Furthermore, from the numerical scaling of the first derivative of dimer order and the non-local string order near the phase transition point, the characteristic critical exponents  $\alpha$  and  $\beta$  are obtained, respectively. It shows that the characteristic critical exponent  $\alpha$  decreases, and  $\beta$  increases gradually with the interaction strength of DM increasing. The resulting state i.e. the anti-symmetric anisotropic DM interaction produced by spin-orbit coupling, affects the critical properties of the system in the phase transition. This reveals that the competition mechanism of the quantum spin interaction, also provides some guidance for the future study of the critical behavior in topological quantum phase transition with the DM interaction.

**Keywords:** quantum phase transition, quantum entanglement, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, topological order, critical exponent

**PACS:** 03.67.-a, 03.65.Ud, 03.67.Hk, 75.10.Pq

**DOI:** [10.7498/aps.69.20191773](https://doi.org/10.7498/aps.69.20191773)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11504283) and the Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2019JM-017).

† Corresponding author. E-mail: [chenaimin\\_xa@163.com](mailto:chenaimin_xa@163.com)