

國立政治大學理學院應用物理研究所

碩士論文

Graduate Institute of Applied Physics

College of Science

National Chengchi University

Master Thesis

三角晶格易辛反鐵磁之量子相變

Quantum phase transition in the triangular lattice Ising
antiferromagnet

張鎮宇

Chen-Yu Chang

指導教授：林瑜瑋 博士

Advisor: Yu-Cheng Lin, Dr. rer. nat.

中華民國 一零六年 七月

July, 2017

摘要

量子擾動及挫折性兩者均可破壞絕對零溫的磁序，為近代凝態物理關注的有趣現象。在外加橫場下的三角晶格易辛反鐵磁兼具量子臨界現象 (quantum criticality) 及幾何挫折性，可謂量子磁性物質之一典範理論模型。本論文利用平衡態及非平衡態量子蒙地卡羅 (quantum Monte Carlo) 方法探測三角晶格易辛反鐵磁之量子相變，其界定零溫時無磁性的順磁態及具 Z_6 對稱破缺的有序態 (所謂時鐘態)。這裡的量子蒙地卡羅方法為運用算符的零溫投射 (zero-temperature projector) 及隨機序列展開 (stochastic series expansion) 演算法。在非平衡模擬中，我們分別沿降溫過程及量子絕熱過程逼近量子相變點，藉此我們得到動力學指數，及其它相關臨界指數。

關鍵字：挫折性反鐵磁、零溫投射蒙地卡羅演算法、隨機序列展開演算法、絕熱量子模擬、模擬退火、動力學指數

Abstract

The destruction of magnetic long-range order at absolute zero temperature arising from quantum fluctuations and frustration is an interesting theme in modern condensed-matter physics. The triangular lattice Ising antiferromagnet in a transverse field provides a playground for the study of the combined effects of quantum criticality and geometrical frustration. In this thesis we use quantum Monte Carlo methods both in equilibrium and non-equilibrium setups to study the properties of the quantum critical point in the triangular lattice antiferromagnet, which separates a disordered paramagnetic state and an ordered clock state exhibiting Z_6 symmetry breaking; The methods are based on a zero-temperature projector algorithm and the stochastic series expansion algorithm. For the non-equilibrium setups, we obtain the dynamical exponent and other critical exponents at the quantum critical point approached by slowly decreasing temperature and through quantum annealing.

keywords: frustrated antiferromagnet, zero-temperature projector algorithm, stochastic series expansion, adiabatic quantum simulation, simulated annealing, dynamical exponent



目錄

摘要	i
Abstract	iii
目錄	v
1 三角量子易辛反鐵磁	1
2 零溫投射量子蒙地卡羅法	5
2.1 零溫投射法之基本概念	5
2.2 處理量子易辛模型的零溫投射法	7
2.2.1 局域組態更新法則	9
2.2.2 叢集更新法則	11
2.3 零溫標度分析	11
2.4 量子絕熱演化	15
3 隨機級數展開量子蒙地卡羅方法	23
3.1 量子易辛模型的隨機級數展開法	23
3.2 有限溫度下的平衡態模擬	26
3.3 模擬退火	30
4 總結與展望	33
參考文獻	33



1 三角量子易辛反鐵磁

磁性物質在低於臨界溫度下呈具磁序 (magnetic order) 的相態，但量子起伏 (quantum fluctuations) 可擾動絕對零度的有序而造成磁性的破壞。另一破壞 $T = 0$ 磁有序態的因子為幾何挫折性 (geometric frustration)，它使晶格上的磁矩無法排列形成反鐵磁態 (見圖 1.1)。本論文考慮的模型同時具有量子擾動項及幾何挫折性，為由以下哈密頓算符 (Hamiltonian) 所描述的在橫場下的二維易辛 (Ising) 三角晶格模型：

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x, \quad (1.1)$$

其中 $\sigma_i^{z,x}$ 為晶格點 i 上的泡立矩陣 (Pauli matrix) 之 z 或 x 分量， $J > 0$ 為自旋間的反鐵磁性交互作用強度， Γ 為垂直易辛軸的橫場之強度，加總符號下標 $\langle i,j \rangle$ 表示只考慮相鄰晶格點。如圖 1.2 所示三角晶格由共邊三角形組成，其單位晶胞 (unit cell) 由晶格向量 $\vec{e}_1 = (1, 0)$ 及 $\vec{e}_2 = (-1/2, \sqrt{3}/2)$ 構成，整體晶格可劃分成三個子晶格 (sublattices)，在圖中分別由黑、紅、藍三色標示。

在橫場為零 ($\Gamma = 0$) 的情形下，三角反鐵磁為無量子擾動的古典模型，其因

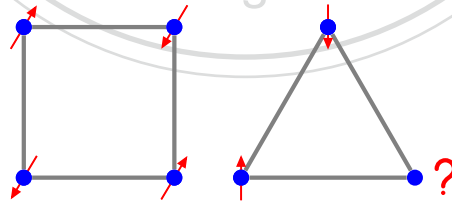


圖 1.1: 反鐵磁在不同二維晶格結構的 1/2-自旋 (或磁矩) 排列，自旋間的交互作用僅限於相鄰晶格，由藍線標出，反鐵磁性交互作用使相鄰自旋偏向平行反方向的指向。(左圖) 方晶格屬具兩子晶格的二部 (bipartite) 晶格，座落於晶格點上的自旋可滿足排列成完美的反鐵磁，其中指下的自旋位於一子晶格，指上的自旋位於另一子晶格；(右圖) 當自旋排列於三角晶格的角時，只有任意兩相鄰自旋可滿足反鐵磁性的排列，而第三個自旋無論指上或指下均將使其與其中一相鄰自旋共同違背反鐵磁性的排列，此性質稱為「挫折性」，又此挫折性源於晶格幾何結構，故為所謂的「幾何挫折」(geometric frustration)。

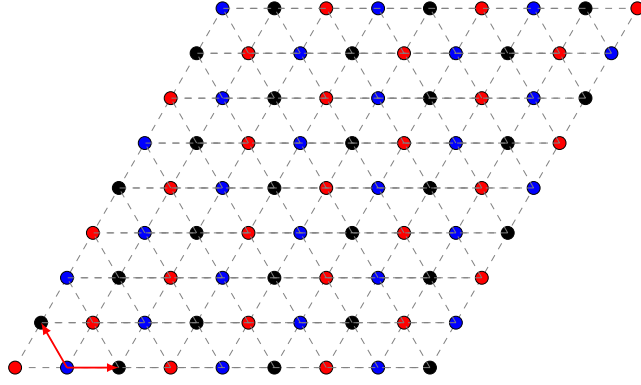


圖 1.2: 由 9×9 個共邊三角形構成的三角晶格。晶格可劃分成三個子晶格，分別由黑、紅、藍三色標示。兩紅色箭頭標出晶格向量 $\vec{e}_1 = (1, 0)$ 及 $\vec{e}_2 = (-1/2, \sqrt{3}/2)$ 。

幾何挫折性在任何有限溫度下 ($T > 0$) 均呈無磁性的無序態 [1]，而於絕對零溫時呈臨界態，基態的自旋關聯函數 $C(r) \equiv \langle \sigma_i^z \sigma_{i+r}^z \rangle$ 隨距離 r 漸進以 r^{-2} 冪次方方式遞減 [2, 3]。在弱橫場施加下， $T = 0$ 時的基態將呈現磁序 [4–7]，這個由干擾有序的量子項（橫場項）引發的有序現象，為一所謂「無序形成有序」（“order by disorder”）的現象。當橫場強度大於一臨界值 Γ_c ，零溫基態的長程磁序將被破壞而變為順磁態（paramagnetic state）。

上述 $T = 0$ 基態的有序態為一所謂時鐘相態（clock phase），呈現 Z_6 對稱破缺，偵測此相態的序參數（order parameter）可定義為 [7]

$$m e^{i\theta} \equiv \left(m_A + m_B e^{i(4\pi/3)} + m_C e^{i(-4\pi/3)} \right) / \sqrt{3}, \quad (1.2)$$

其中 m_α , $\alpha = A, B, C$ 為三子晶格（圖 1.2）分別的 z -軸磁化量，

$$m_\alpha = \langle \sigma_{i_\alpha}^z \rangle, \quad i_\alpha \text{ 為 } \alpha \in \{A, B, C\} \text{ 晶格點}. \quad (1.3)$$

式 (1.2) 所定義的序參數為一複數的 XY 序參數，由根據堆疊的（stacked）三角反鐵磁晶格以 Landau-Ginzburg-Wilson (LGW) 理論推導而出 [8]。所謂堆疊的三角反鐵磁晶格與本文探討的系統藉由 Trotter-Suzuki 展開式 [9, 10] 建立起關係，在此表示法中， D 維度的橫場易辛模型可映射成為一 $(D + 1)$ -維度的古典易辛模型，多出一個維度稱為虛數時間（imaginary time）維度，其長度為 $\beta = 1/T$ ；這個對應的古典模型由以下等效哈密頓函數所描述：

$$H_{\text{eff}} = K \sum_{\langle i, j \rangle, n} s_{i,n} s_{j,n} - K' \sum_{i,n} s_{i,n} s_{i,n+1}, \quad (1.4)$$

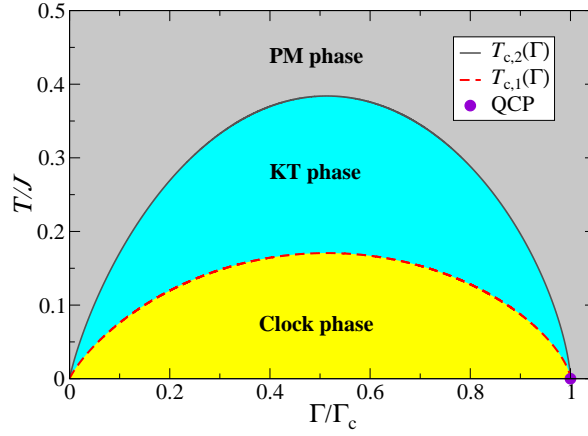


圖 1.3: 三角量子反鐵磁之相態示意圖。兩彎型的相邊界 $T_{c,1}(\Gamma)$ 及 $T_{c,2}(\Gamma)$ 標示 Kosterlitz-Thouless 相變，為根據文獻 [3] 的式 (46) 及 $T_{c,1} = 4/9 T_{c,2}$ 畫出。兩條相邊界交會於量子臨界點 $T = 0, \Gamma/\Gamma_c = 1$ ，及無量子起伏的古典 $\Gamma = 0$ 處。

其中 $n = 1, 2, \dots, \beta/\Delta\tau$ 標記虛數時間軸上相鄰間距為 $\Delta\tau$ 的晶格點，空間（以 i, j 標記）與虛數時間的各晶格點上坐落一古典易辛自旋 $s_{i,n} = \pm 1$ ；相鄰自旋間的交互作用沿空間方向為

$$K = J\Delta\tau, \quad (1.5)$$

而沿虛數時間方向為

$$K' = -\frac{1}{2} \ln(\tanh(\Delta\tau\Gamma)) \quad (> 0). \quad (1.6)$$

如此二維橫場易辛反鐵磁等效於 $L_\tau = \beta/\Delta\tau$ 個層層堆疊起來的三角晶格模型，且層與層之間的交互作用屬鐵磁性，也就是說沿虛數時間自旋傾向平行排列，不同於每層內的反鐵磁性。因為 Trotter-Suzuki 展開式的適用範圍在於 $\Delta\tau \rightarrow 0$ 極限，故在此連續虛數時間極限下式 (1.4) 的量子—古典對映才精確。絕對零溫 $T = 0$ 對應的是無窮延伸的虛數時間軸，於量子臨界點處無論在二維度空間方向上或虛數時間方向上的關聯長度均發散，此相變屬三維度 (3D) XY 普適類 (universality class) [3, 7]。所謂 XY 模型可由以下哈密頓函數描述：

$$H_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\Theta_i - \Theta_j), \quad (1.7)$$

其中 $\Theta_i \in [0, 2\pi]$ 為連續變數，為位於晶格點 i 上的自由度。

式 (1.4) 所描述的堆疊式三角反鐵磁晶格因其豐富的相態，多年來已成為研究相變問題的一經典模型。以下我們綜合一些已知的結果。堆疊式三角反鐵磁具三

種相態 [3, 7, 8]，分別為高溫時的無序態、中溫時的 Kosterlitz-Thouless (KT) 相態，及低溫時的有序時鐘相態 (clock phase)。其中 KT 相態與高溫的無序態及低溫的有序態分別由兩條在 $\Gamma-T$ 相圖中的相邊界區分 (見示意圖 1.3 的 $T_{c,1}(\Gamma)$, $T_{c,2}(\Gamma)$)。兩相邊界交於 $(\Gamma = 0, T = 0)$ 及量子臨界點 $(\Gamma_c, T = 0)$ ，形成一半月型的 KT 區域。KT 相態為一臨界相態 (critical phase)，其自旋關聯函數 $C(r)$ 隨距離 r 以冪次方的形式遞減： $C(r) \sim r^{-\eta}$ ，而臨界指數 η 隨溫度而有所不同。在高溫的 KT-無序相邊界 $T_{c,2}(\Gamma)$ 上， $\eta = 1/4$ [11]，與二維的 XY 模型相同 [12, 13]；在低溫的 KT-有序相變 $T_{c,1}(\Gamma)$ 處， $\eta = 1/9$ [11]。在兩條相邊界於零溫交會處，臨界指數於 $\Gamma = 0$ 處跳躍至 $\eta = 1/2$ [2]，於量子臨界點處則跳躍至 3D- XY 普適類的 $\eta \approx 0.038$ [14]。根據 LGW 理論 [8]，低於 $T_{c,1}(\Gamma)$ 且 $\Gamma < \Gamma_c$ 的有序相態所呈現的子晶格磁化量比值 (m_A, m_B, m_C) 可處於兩類型： $(+1, 0, -1)$ 與 $(+1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ ，對應兩簡併態。然而近年的計算模擬結果多顯示 [7, 15]，只有 $(+1, 0, -1)$ 類型為堆疊式三角反鐵磁晶格 (及其所對應的量子反鐵磁晶格) 的低溫及絕對零溫之有序態；此狀態代表其一子晶格的自旋具同等機率「朝上」或「朝下」，而位於其它兩自晶格則呈現有序排列。

本論文將主要以平衡態及非平衡態量子蒙地卡羅 (quantum Monte Carlo) 方法探討三角量子易辛反鐵磁的量子臨界點，其界定零溫時強橫場下的無序順磁態 (paramagnetic phase) 及弱橫場時的有序時鐘態。在非平衡態模擬中，我們分別沿降溫過程及量子絕熱過程逼近量子相變點，藉此我們得到動力學指數，及其它相關臨界指數。

2 零溫投射量子蒙地卡羅法

量子相變發生於絕對零溫 $T = 0$ ，其反應系統基態 (ground state) 的改變。在理論研究及計算模擬上，我們首要關心相關物理量 O 在基態的期望值，其表示式為

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \Phi_0 | O | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle}, \quad (2.1)$$

其中 $|\Phi_0\rangle$ 為基態向量 (波函數)。關鍵問題在於，解出量子多體系統的基態向量本身即為棘手的問題，因為那牽涉到如何將一表示哈密頓算符的巨大矩陣作精確對角化找出對應的本徵向量 (eigenvector)。計算上我們可尋求藉一些方法找出問題的近似基態向量或期望值，其中量子蒙地卡羅方法應該數許多計算方法中最可靠的首選方法之一。本論文所探討的量子三角反鐵磁模型雖為一幾何挫折型系統，但在量子蒙地卡羅方法中不會產生該類系統常有的負機率問題 (所謂「符號問題」"sign problem")，故我們將採取量子蒙地卡羅計算來作為我們的研究方法。

2.1 零溫投射法之基本概念

本節先參考文獻 [16–19] 簡介投射法 (projection method) 的基本概念。首先取一任意態向量 $|\Psi_{\text{tr}}\rangle$ ，以能量本徵向量 $\{|\Phi_m\rangle, m = 0, 1, \dots\}$ 當基底向量，此試探態向量 (trial state vector) 可被展開表示為

$$|\Psi_{\text{tr}}\rangle = \sum_m c_m |\Phi_m\rangle, \quad (2.2)$$

其中 c_m 為展開係數。若將虛數時間演化算符 $e^{-\beta H}$ 配以極大溫度倒數 $\beta \gg 1$ ，並作用於向量 $|\Psi_{\text{tr}}\rangle$ 上，我們期望可將其「演化」至近似零溫時的基態。因指數算符可被展開成幕次算符之和，我們可將此方法視為以一高次方 n 的哈密頓算符 H^n 作用於試探態向量 $|\Psi_{\text{tr}}\rangle$ 上，並輔以一常數項 C ，使最低本徵值 $E_0 - C$ 之絕對值

較其它本徵值大，如此：

$$(C - \mathbf{H})^n |\Psi_{\text{tr}}\rangle = c_0(C - E_0)^n \left[|\Phi_0\rangle + \frac{c_1}{c_0} \left(\frac{C - E_1}{C - E_0} \right)^n |\Phi_1\rangle \cdots \right]. \quad (2.3)$$

在 $n \rightarrow \infty$ 極限下，因為能量比值 $|(C - E_m)/(C - E_0)| < 1$ 將趨近為零，而得

$$(C - \mathbf{H})^n |\Psi_{\text{tr}}\rangle \xrightarrow{n \rightarrow \infty} c_0(C - E_0)^n |\Phi_0\rangle, \quad \text{if } c_0 \neq 0, \quad (2.4)$$

故任意試探態向量在高次方哈密頓算符作用下可趨近於基態向量。

因多體系統的哈密頓算符常為許多算符項（包含鍵結（bond）項 \mathbf{H}_b 及單晶格位置項 \mathbf{H}_i ）相加的型式，如以具 N_b 鍵結的 N 晶格點模型為例，

$$(C - \mathbf{H})^n = \left(\sum_{b=1}^{N_b} \mathbf{H}_b + \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_i \right)^n. \quad (2.5)$$

為簡化符號我們引入一算符乘積符號 \mathbf{P} 來表示上式的展開項，

$$(C - \mathbf{H})^n = \sum_{S_n} \mathbf{P}, \quad \mathbf{P} = \prod_j^n \mathbf{H}_{t_j}, \quad (2.6)$$

其中 \mathbf{H}_{t_j} 為哈密頓算符中各類型單項（如鍵結項或位置項），而 S_n 用以標示所有可能不同的 n 算符乘積符號。針對式 (2.1) 表示的物理量 \mathbf{O} 之基態期望值，在投射方法上我們可將其改寫為

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \frac{\sum_{S_n, S_n} \langle \Psi_{\text{tr}} | \mathbf{P}^\dagger \mathbf{O} \mathbf{P} | \Psi_{\text{tr}} \rangle}{\sum_{S_n, S_n} \langle \Psi_{\text{tr}} | \mathbf{P}^\dagger \mathbf{P} | \Psi_{\text{tr}} \rangle}. \quad (2.7)$$

演算時我們應選擇一組適合的基底來計算相關的矩陣元。以本論文探討的易辛自旋系統為例， z 分量自旋算符 σ^z 的本徵向量（表示為 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$ ）為標準基向量。以下我們以 $\{|\alpha\rangle\}$ 來表示多自旋標準基向量，如 $|\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow \cdots \uparrow\rangle$ 等。我們也可選取初始態向量 $|\Psi_{\text{tr}}\rangle$ 為其中一多自旋標準基向量 $|\Psi_{\text{tr}}\rangle = |\alpha_0\rangle$ ，並於式 (2.7) 引入基底完備性構成的單位算符 $\mathbf{I} = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$ ，如此，我們期望值的計算將包含下列矩陣元的計算： $\langle\alpha'|\mathbf{H}_t|\alpha\rangle$ 及 $\langle\alpha'|\mathbf{O}|\alpha\rangle$ 。

蒙地卡羅演算法提供精確且相對簡單的方式來計算式 (2.7) 表示的期望值，其主要藉建立一長度為 N_{mc} 的馬可夫鍊（Markov chain）將待求期望值以算數平均數方式得出：

$$\mathbf{O} \equiv \langle \mathbf{O} \rangle = \frac{1}{N_{\text{mc}}} \sum_{\tau=1}^{N_{\text{mc}}} \mathbf{O}(X_\tau), \quad (2.8)$$

其中 X_τ 為馬可夫鍊中時間 τ 的狀態， $O(X_\tau)$ 為對應該狀態的觀察量。針對我們的問題，蒙地卡羅演算法中選取狀態的機率取決於式 (2.1) 或 (2.7) 的歸一化常數

$$Z \equiv \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle = \sum_X W_X \quad (2.9)$$

其中 W_X 為狀態 X 的機率分佈。

下一節我們將描述處理量子易辛模型的零溫投射蒙地卡羅演算法。

2.2 處理量子易辛模型的零溫投射法

如前節所提示，期望值的歸一化常數 $Z = \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle$ 決定蒙地卡羅計算過程選取狀態的機率。在自旋標準基底 $\{|\alpha\rangle\}$ 表象，我們可用上節定義的符號將式 (2.7) 中的 Z (該式分母) 進一步改寫為

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{S_{2n}} \prod_{j=1}^{2n} \langle \alpha' | \mathbf{H}_{t_j} | \alpha \rangle, \quad (2.10)$$

比較式 (2.9) 可看出

$$W(X) \equiv \prod_{j=1}^{2n} \langle \alpha' | \mathbf{H}_{t_j} | \alpha \rangle \quad (2.11)$$

為算符序列—自旋狀態 $X = \{S_{2n}, |\alpha\rangle\}$ 的比重。又 \mathbf{H}_{t_j} 為系統哈密頓各項算符，故各類型 \mathbf{H}_{t_j} 的「取樣機率」取決於它們在系統哈密頓所佔據的比重。若以圖像表示，我們可將一 D 維度的量子自旋模型視為 $(D+1)$ -維度的等效模擬模型，多出的維度為算符積 $\prod_{j=1}^{2n} \mathbf{H}_{t_j}$ 傳遞的方向，此維度雷同第 1 章談及的虛數時間維度。期望值矩陣元 $\langle \alpha' | \mathbf{O} | \alpha \rangle$ 的測量則在傳遞方向的中線進行 (見圖 2.1)。

觀察本文所探討的量子易辛模型之哈密頓算符 (1.1)，不難看出拆解後各項在自旋標準基底表象中的矩陣元分別為單位置項的

$$\begin{aligned} \langle \uparrow | \Gamma \sigma_i^x | \downarrow \rangle &= \langle \downarrow | \Gamma \sigma_i^x | \uparrow \rangle = \Gamma \\ \langle \uparrow | \Gamma \sigma_i^x | \uparrow \rangle &= \langle \downarrow | \Gamma \sigma_i^x | \downarrow \rangle = 0, \end{aligned} \quad (2.12)$$

及鍵結項的

$$\begin{aligned}
 \langle \uparrow\uparrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \uparrow\uparrow \rangle &= \langle \downarrow\downarrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \downarrow\downarrow \rangle = J \\
 \langle \uparrow\downarrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \uparrow\downarrow \rangle &= \langle \downarrow\uparrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \downarrow\uparrow \rangle = -J \\
 \langle \uparrow\uparrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \downarrow\downarrow \rangle &= \langle \downarrow\downarrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \uparrow\uparrow \rangle = 0 \\
 \langle \uparrow\downarrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \downarrow\uparrow | J\sigma_i^z \sigma_j^z | \uparrow\downarrow \rangle = 0.
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

因為這些矩陣元將關係到蒙地卡羅計算過程狀態的機率分佈，如此將出現負機率問題。為了避免這個符號問題，我們可以於原哈密頓算符加入常數項，此修改只會使整體能量本徵值移動一常數，而不會影響相關物理的結果。

我們可將加入常數項後的 N 自旋哈密頓算符可如下表示 [20]：

$$\mathbf{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{H}_{J,(i,j)} - \sum_i \mathbf{H}_{\Gamma,i} - \sum_i \mathbf{H}_{C,i} \tag{2.14}$$

其中各項算符分別定義為

$$\mathbf{H}_{J,(i,j)} = J - J\sigma_i^z \sigma_j^z, \tag{2.15}$$

$$\mathbf{H}_{\Gamma,i} = \Gamma\sigma_i^x, \tag{2.16}$$

$$\mathbf{H}_{C,i} = \Gamma. \tag{2.17}$$

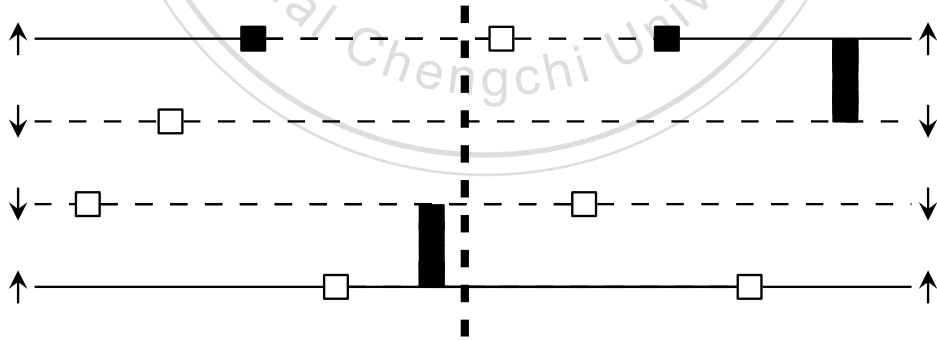


圖 2.1: 一自旋數目 $N = 4$ 及算符數 $n = 10$ 的零溫投射法模擬空間示意圖。左右兩端標出箭頭的自旋態， $|\alpha_\ell\rangle$ 及 $|\alpha_r\rangle$ ，為初始狀態。本圖橫向為算符序列及自旋狀態傳遞方向。線段表示自旋狀態，其中實線為自旋朝上狀態，而虛線為自旋朝下狀態。方塊表示算符，其中實心正方形表示橫場算符 $\mathbf{H}_{\Gamma,i}$ ，空心正方形表示常數算符 $\mathbf{H}_{C,i}$ ，而橫跨兩自旋的實心長方形為反鐵磁性鍵結算符 $\mathbf{H}_{J,(i,j)}$ 。期望值矩陣元 $\langle \alpha' | \mathbf{O} | \alpha \rangle$ 的計算將於中線（虛線標示）進行。

如此我們得到以下非零的相關矩陣元：

$$\langle \uparrow \downarrow | \mathbf{H}_{J,(i,j)} | \uparrow \downarrow \rangle = \langle \downarrow \uparrow | \mathbf{H}_{J,(i,j)} | \downarrow \uparrow \rangle = 2J, \quad (2.18)$$

及

$$\langle \uparrow | \mathbf{H}_{\Gamma,i} | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \mathbf{H}_{\Gamma,i} | \uparrow \rangle = \Gamma, \quad (2.19)$$

$$\langle \uparrow | \mathbf{H}_{C,i} | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | \mathbf{H}_{C,i} | \downarrow \rangle = \Gamma. \quad (2.20)$$

可看出，鍵結算符如式 (2.15) 加了常數項後，其矩陣元不再為負數值；又常數算符 $\mathbf{H}_{C,i}$ 的引入使單位置算符的對角矩陣元亦為非零的 Γ 值，方便建構蒙地卡羅演算法的狀態更新 (update) 程序。

以下我們參考文獻 [19, 21] 描述針對量子易辛反鐵磁模型的零溫蒙地卡羅演算程序。主要分兩大類型的更新組態方法，一為類似 Metropolis 的局域組態更新 (local update) [22]，另一為類似 Swendsen-Wang 方法 [23] 的叢集更新 (cluster update)。一個蒙地卡羅步驟 (Monte Carlo step) (或一蒙地卡羅單位時間) 包含這兩大類的狀態更新程序。

2.2.1 局域組態更新法則

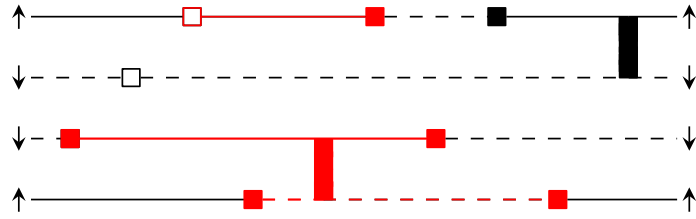
考慮一 N 自旋易辛反鐵磁，其具 N_b 個鍵結。首先隨機產生一組 S_{2n} 標示初始 $2n$ 算符的乘積，及一組初始自旋狀態 $|\alpha_0\rangle$ 。我們從頭檢視 S_{2n} 所對應的算符序列，並作以下自旋狀態或算符序列的更新：

- (1) 若出現一橫場項算符 (非對角算符, off-diagonal operator) $\mathbf{H}_{\Gamma,i}$ ，則更新作用後的自旋狀態： $\mathbf{H}_{\Gamma,i}|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha'\rangle$ ，這裡 $|\alpha\rangle$ 與 $|\alpha'\rangle$ 只差晶格點 i 上自旋的翻轉。
- (2) 若出現一對角算符 (diagonal operator) $\mathbf{H}_{J,(i,j)}$ 或 $\mathbf{H}_{C,i}$ ，我們將根據滿足細緻平衡 (detailed balance) 的轉移機率將其改變成另一種對角算符。先拿掉原有的對角算符，然後

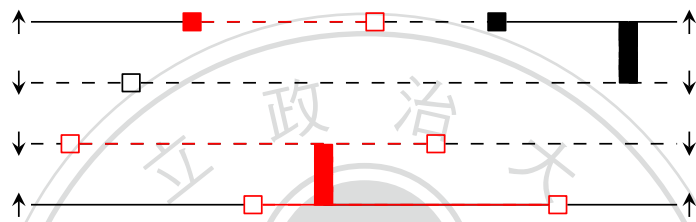
- (i) 以以下機率置入一常數算符 $\mathbf{H}_{C,i}$ ，

$$P(C) = \frac{\Gamma N}{\Gamma N + (2J)N_b}. \quad (2.21)$$

若接受此算符的置入，則隨機選擇一晶格點 i 作為 $\mathbf{H}_{C,i}$ 放置處。機率 $P(C)$ 呈現的正是 $\mathbf{H}_{C,i}$ 在系統哈密頓算符 (2.14) 中所有對角算符 (包含



(a) 叢集的建構



(b) 叢集狀態的更新

圖 2.2: 零溫投射法叢集更新程序示意圖。紅色顯示且互相連結的自旋線段及算符同屬一叢集，範例圖 (a) 中共有兩個叢集。圖 (b): 兩個叢集更新後，自旋狀態改變 (虛線變實線，實線變虛線)，且叢集邊界的算符也跟著轉換 ($H_{\Gamma,i} \leftrightarrow H_{C,i}$)，如此也更新非對角算符 ($H_{\Gamma,i}$)。

$H_{C,i}$ 與 $H_{J,(i,j)}$ 出現的比例及矩陣元素大小的比重 (見式 (2.19))。

(ii) 或以機率

$$\begin{aligned}
 P(J) &= 1 - P(C) \\
 &= \frac{(2J)N_b}{\Gamma N + (2J)N_b}
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

選擇置入鍵結算符 $H_{J,(i,j)}$ ，此時先隨機挑出一鍵結處 (i, j) ，若此兩相鄰自旋態為反平行，則接受 $H_{J,(i,j)}$ 置入該處；若兩自旋態為平行，則因對應的矩陣元為零，而須拒絕加入此鍵結算符。

上述步驟 (i)、(ii) 將重複進行至有一對角算符被置入為止。

2.2.2 叢集更新法則

上小節敘述的局域組態更新法則並沒有涉及到橫場項在 S_{2n} 算符序列中的更改，這部分的更新將藉由非局域性的所謂叢集更新法來進行。所謂叢集 (cluster) 是指在 $D + 1$ 維度的模擬空間中一群自旋自由度及一群算符的集合。我們以下列方式建構出一叢集：從一算符出發，延晶格空間方向及算符傳遞方向納入其它自旋及算符至叢集內，過程中三重要法則決定叢集的成長與終止：

- 叢集終止於單位置算符，即橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 或常數算符 $H_{C,i}$ 。
- 叢集終止於算符傳遞方向兩端邊界的自旋狀態， $|\alpha_\ell\rangle$ 及 $|\alpha_r\rangle$ 。
- 鍵結算符 $H_{J,(i,j)}$ 四端連結的自旋將被納入同一叢集內。

圖 2.2 示範 $(1 + 1)$ 維度模擬空間上叢集建構。當叢集建構完成後，我們以 $1/2$ 機率翻轉其內部所有自旋的狀態及算符的種類；此翻轉步驟包含：

- 上自旋態變下自旋態，下自旋態變上自旋態。
- 橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 變常數算符 $H_{C,i}$ ，而常數算符 $H_{C,i}$ 變橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 。

如此橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 也在算符序列中更新，這非對角算符的更新並不在上節 (2.2.1 節) 的局域更新步驟被考慮。這裡我們提醒：因為非對角橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 與對角常數算符 $H_{C,i}$ 具同值的非零矩陣元 (見式 (2.19) 及式 (2.20))，這個設計方便我們這裡不受限制地更新它們 (並連同連接算符的自旋狀態)。

2.3 零溫標度分析

利用零溫投射法我們計算橫場下二維 (2D) 三角反鐵磁一些磁化量相關的物理量，這裡所指的磁化量定義於式 (1.2)，我們求其平方值 m^2 ；在橫場強度不大於臨界值 Γ_c 時，系統基態呈長程磁序，故 $m^2 > 0$ ；當橫場強度漸增強，磁化量平方值將漸變小，並消失於臨界點 Γ_c 與 $\Gamma > \Gamma_c$ 的無序順磁態。這個在絕對零溫由橫場引發的相態變化即為一量子相變。不同於磁化量，有些物理量在臨界點呈現無窮發散的情形，例如磁化率 (magnetic susceptibility) χ ：

$$\lim_{\Gamma \rightarrow \Gamma_c} \chi \rightarrow \infty. \quad (2.23)$$

觀察量於臨界點消失或發散的情形與至臨界點的距離呈現冪次方關係，冪次法則的指數稱為臨界指數 (critical exponents)。定義至量子臨界點的距離 δ 為

$$\delta = \Gamma - \Gamma_c. \quad (2.24)$$

我們可將上述冪次法則表示為

$$O \sim |\delta|^{\pm\kappa}, \quad (2.25)$$

定義了對應的臨界指數 κ ，而 + 或 - 號描述消失或發散於臨界點的狀況。又關聯長度 ξ 發散於臨界點，

$$\xi \sim |\delta|^{-\nu}, \quad (2.26)$$

結合式 (2.25)，我們可寫

$$O \sim \xi^{\pm\kappa/\nu}. \quad (2.27)$$

事實上，多體系統相變的發生及觀察量於臨界點發生奇異性 (singularity) 的行為均局限在熱力學極限下，也就是當系統的粒子數無窮大時 $N = \infty$ 。在計算模擬上，我們只能考慮有限尺寸的系統，此時關聯長度 ξ 最大值將受制於系統長度 L 。以在 $\xi \rightarrow \infty$ 極限下呈無窮發散的物理量 $O \rightarrow \infty$ 為例，在有限尺寸下，當 $\xi \rightarrow L$ 時， O 達其有限的最大值 O_{\max} ，且 O_{\max} 與系統長度 L ($N = L^2$) 呈以下關係：

$$O_{\max}(L) \sim L^{\kappa/\nu}. \quad (2.28)$$

最大 O_{\max} 對應的橫場值 Γ_L^* ，稱為赭臨界點 (pseudocritical point)，其位置偏離熱力學極限下的真實臨界點位置，且與系統尺寸 L 呈類似 (2.26) 的關係：

$$|\delta_L| \sim L^{-1/\nu}. \quad (2.29)$$

根據標度化理論 [13]，我們可將式 (2.28) 與式 (2.29) 更廣義地寫成以下標度形式：

$$O(\delta, L) = L^{\pm\kappa/\nu} \tilde{O}(\delta L^{1/\nu}), \quad (2.30)$$

這裡我們亦納入於真實臨界點消失的物理量 (對應指數 $+\kappa/\nu$)；上式 \tilde{O} 稱為標度函數 (scaling function)。以磁化量平方為例，其標度形式可寫為

$$m^2(\delta, L) = L^{-2\beta_m/\nu} \tilde{m}(\delta L^{1/\nu}), \quad (2.31)$$

β_m 為磁化量的臨界指數。

這裡我們亦考慮磁化率 χ ，將其視為磁化量漲落的量度，定義為

$$\chi = N \left(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \right). \quad (2.32)$$

式中兩項在臨界點均與 L 具相同關係：

$$\langle m^2 \rangle \sim \langle |m| \rangle^2 \sim L^{-\beta_m/\nu}, \quad (2.33)$$

所以其標度形式為

$$\chi(\delta, L) = L^{D-2\beta_m/\nu} \tilde{\chi}(\delta L^{1/\nu}). \quad (2.34)$$

其中 D 為系統維度，在本文 $D = 2$ 。

為減少有限尺寸分析涉及太多待定的臨界指數，計算上我們常先分析無因次量 ($\kappa = 0$) 所謂的 Binder 比值 (Binder ratio) 或 Binder 累積量 (Binder cumulant) [24]，其為磁化量 (序參數) 的二階矩 (second-order moment) 與四階矩 (fourth-order moment) 之組合；對具 d 個分量的序參數而言，廣義的 Binder 累積量可定義為 [25]：

$$g = \frac{d+2}{2} \left(1 - \frac{d}{d+2} \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right), \quad (2.35)$$

如此的定義，可使 Binder 量在有序態 $g \rightarrow 1$ ；在無序態因為磁化量呈高斯分佈，對其作 d -維度高斯積分後，可得 $g \rightarrow 0$ 。以我們問題而言，磁化量 (XY 序參數) 具 2 個分量，故我們採用以下的 Binder 累積量：

$$g = 2 \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right). \quad (2.36)$$

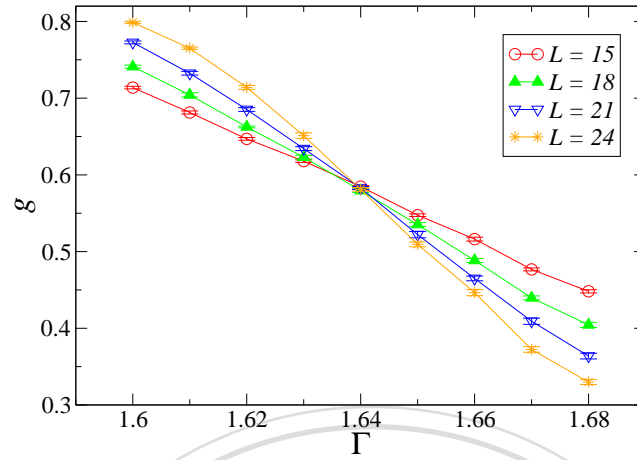
因為磁化量四次方的因次在 Binder 比值裡抵消為零，此無因次的量的標度形式具簡單的形式：

$$g = \tilde{g}(\delta L^{1/\nu}). \quad (2.37)$$

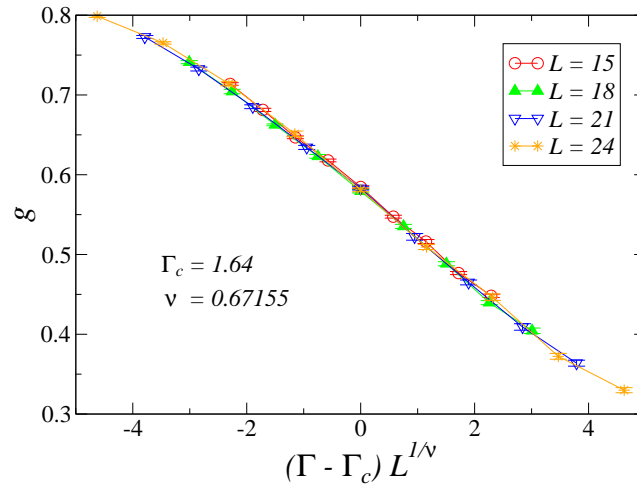
如此，對應不同尺寸 L 的 Binder 量對 δ 作圖，將會交會於臨界點處 $\delta = 0$ 。

我們這裡考慮一 $N = L^2$ 自旋系統，選擇邊長 L 為 3 的倍數使得系統內三子晶格具相同的自旋數。另外，我們固定反鐵磁性鍵結強度 $J = 1$ ，調控橫場強度 Γ 來改變相態。圖 2.3 我們先呈現零溫投射量子蒙地卡羅法計算的 Binder 比值與橫場強度的關係；因為一無因次的量，不同 L 的數值交會於一點，此交點對應的橫場值 Γ_c 即為量子臨界點所在。此量子相變屬 3DXY 普適類，根據 [14]，臨界關聯長度指數為 $\nu = 0.67155$ ；利用這個臨界指數值我們得以透過式 (2.37) 的標度形式使不同 L 的數值座落於一曲線上 (見圖 2.3(b))。

投射法計算結果的準確與否主要決定於投射長度 n ，即哈密頓算符次方，是否足夠。我們可以藉逐漸提高 n 來檢驗觀察量的值是否收斂至一定值，圖 2.4 為對 Binder 比值收斂的測試，選取的橫場值為臨界值 Γ_c 。我們以 $n = 2^p$, $p = 1, 2, \dots$ 的方式逐步提高投射長度，在我們考慮的系統大小範圍 $L \leq 24$ ，可看到當 $p \geq 17$



(a)



(b)

圖 2.3: (a): 零溫投影下不同系統大小的 Binder 比值 g 對橫場強度 Γ 作圖。可以看出，當 $\Gamma = \Gamma_c = 1.64$ ，不同數值曲線交會於一點，此橫場強度 Γ_c 為量子臨界點。此結果利用投射長度 (H^n) $n = 2^{18}$ 計算而成，且以 1,000,000 個蒙地卡羅步數為一組 (bin)，共計算 20 組作平均；圖中標示的誤差值為組平均的誤差。(b): 有限尺度標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 。

時， g 值趨向定值而不再持續上升，且因為在 Γ_c 時 Binder 比值與 L 無關，對應不同 L 的 g 收斂值相同。我們因此以 $n = 2^{18}$ 作為本節計算的投射長度。

接著我們檢驗磁化量及磁化率的結果。圖 2.5a 為磁化量平方與橫場值關係的

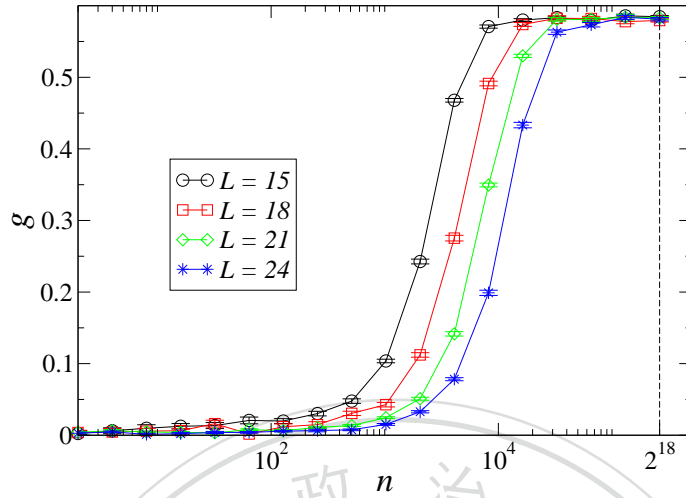


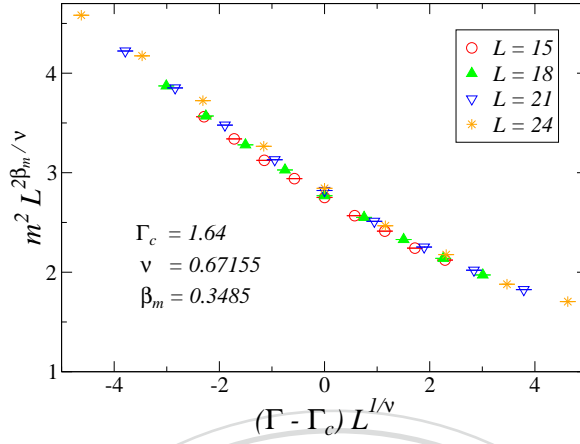
圖 2.4: 不同系統尺度的 Binder 比值與投射長度 n 的關係。可觀察到，當 $n \geq 2^{17}$ ，最大系統 $L = 24$ 的 Binder 比值漸收斂至一定值。

有限尺度標度圖，而圖 2.5b 為磁化率。使用的投射長度均為 $n = 2^{18}$ 利用 3DXY 普適類的臨界指數 $\nu = 0.67155$ 與 $\beta_m = 0.3485$ [14]，我們可以得到 m^2 不錯的擬合結果， χ 的擬合狀況則較差，可能是所考慮的系統尺度不夠大。

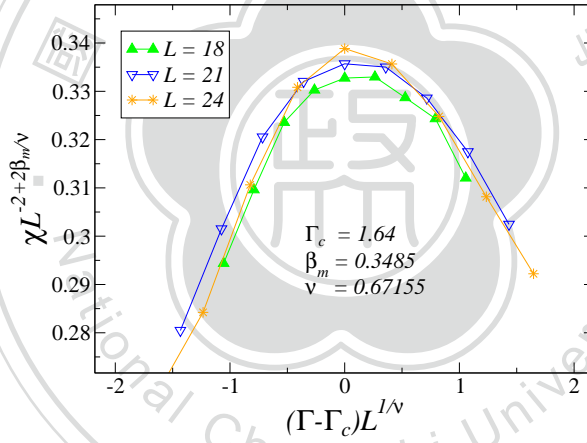
2.4 量子絕熱演化

上兩節所描述的零溫投射法並沒有運用任何近似 (approximation) 處理方法，可視為一無偏差 (unbiased)、無系統誤差 (systematic errors) 的量子蒙地卡羅演算法，也就是說，利用足夠大的哈密頓算符次方 n 及足夠多的蒙地卡羅步驟 N_{mc} ，我們能獲得可靠且精確的平衡態期望值。有趣的是，零溫投射法亦可應用於所謂的量子絕熱計算 [26–28]，此類演算法的原始設計在於利用量子力學原理尋求最佳解，也是當今商用量子計算機 D-Wave 系統試圖模擬的演算法 [29]。

量子絕熱計算的概念乃基於絕熱定理 (adiabatic theorem) [30]，指的是在足夠緩慢的微擾影響下，該物理系統可隨時間演化持續保持在一能量本徵態，若該狀態的能量值與其它能階間有一能隙 (energy gap)。根據文獻 [26]，我們可將量子絕熱計算原理於最佳化計算的應用如下表達：欲求一複雜的哈密頓算符 H_p 的基態 (問題的最佳解)，我們可以從一已知 (或可簡單取得) 基態解的哈密頓算符 $H(t=0) = H_0$ 為起點，藉緩慢調控哈密頓算符的參數，使哈密頓算符經過一長



(a) 磁化量平方



(b) 磁化量

圖 2.5: 磁化量平方與磁化率的有限尺度標度化處理結果。根據臨界指數 $\nu = 0.67155$ 與 $\beta_m = 0.3485$ [14]。

時間 τ 後緩漸轉化成 \mathbf{H}_p ，此過程可表示為：

$$\mathbf{H}(t) = \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) \mathbf{H}_0 + \frac{t}{\tau} \mathbf{H}_p. \quad (2.38)$$

若將系統於起始時間 $t = 0$ 時準備於 \mathbf{H}_0 的基態，則根據量子絕熱定理，系統最終於 $t = \tau$ 時可望到達（或接近） \mathbf{H}_p 的基態，亦即所求問題的最佳解。事實上，多年來凝態物理等領域科學家已嘗試運用「量子絕熱計算」（又稱量子退火

(quantum annealing) 演算法) 來探討複雜系統的基態相關問題 [31–33]，近年更因為量子計算器之可行性及其原理的討論，以及建構量子電腦的計畫等風潮，而帶動更多領域的計算科學家以量子蒙地卡羅演算法執行量子退火，甚至以其企圖探究 D-Wave 系統的原理或計算效能 [34]。

本節主要描述如何藉量子蒙地卡羅演算法循量子絕熱過程獲取量子臨界指數，尤其是動力學指數。參考的方法主要根據文獻 [27, 28]，本文使用的零溫投射法提供一個確實可反應量子動力的工具，因為此建立在算符的蒙地卡羅演算法可使量子系統隨虛數時間演化，而在緩慢改變哈密頓算符參數的絕熱過程，虛數時間演化與實時間演化可得到許多相同的動力學結果 [35]；如此的時間演化絕不同於藉量子蒙地卡羅演算法隨蒙地卡羅時間（模擬時間）執行量子退火的方式 [32–34]，事實也已驗證循蒙地卡羅時間執行量子退火不會得到正確的動力學標度不變行為 (scaling behavior) [28, 36]。

以式 (2.38) 的型式表達，我們所探討的橫場易辛模型（在考慮演算法中所需的常數項後）可拆解成

$$H_p = - \sum_{\langle i,j \rangle} J(\mathbf{I} - \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad (2.39)$$

及

$$H_0 = - \sum_i \Gamma(\sigma_i^x - \mathbf{I}), \quad (2.40)$$

也就是將具強挫折性的古典三角易辛反鐵磁視為待求問題，而橫場項則為「量子驅動項」，用以啟動量子穿隧效應來探索問題模型的組態空間 (configuration space)。我們同時將式 (2.38) 簡化為

$$H(s) = (1 - s)H_0 + sH_p, \quad (2.41)$$

以 $s \equiv t/\tau \in [0, 1]$ 作為調控量子效應的時程。投射法中我們將虛數演化算符 $e^{-\beta H}$ 以高幕次的哈密頓算符 H^n 取代，相似地，這裡我們以多項 n 哈密頓算符乘積 $P_{n,1}$ 來演化給定的初始態向量 $|\Psi(s_0)\rangle$

$$|\Psi(s_n)\rangle \equiv P_{n,1}|\Psi(s_0)\rangle \quad (2.42)$$

$$= H(s_n) \cdots H(s_2)H(s_1)|\Psi(s_0)\rangle, \quad (2.43)$$

其中 $s_1 < s_2 < \cdots < s_n$ 為時間 $[0, 1]$ 區間某個時間點。若終極目標系統為由 H_p 所描述的古典三角易辛反鐵磁，則 $s_n = 1$ 。注意，這裡演化時間 s 亦為哈密頓算符的參數，所以可反應真實的量子動力學問題。這個以 $P_{n,1}$ 來進行量子退火的蒙地卡羅演算法被稱為「準絕熱量子蒙地卡羅法」(quasi-adiabatic quantum Monte Carlo algorithm) [27]。一般來說，演化時間點 s_k 可以從起點 s_1 到終點 s_n 以不

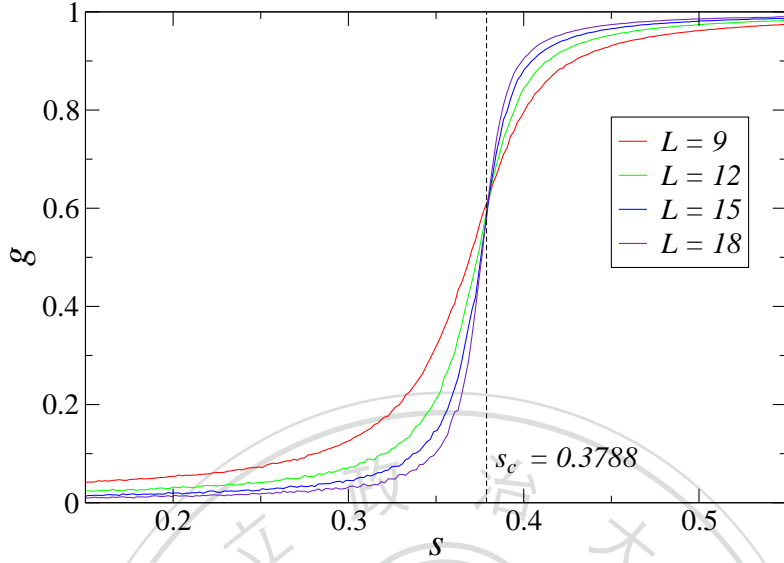


圖 2.6: Binder 比值在準絕熱量子蒙地卡羅法計算中隨虛數時間 s 演化的結果。不同系統尺度 L 的數據曲線交會於 $s_c \approx 2.64^{-1}$ (虛線標出)，此對應平衡態量子臨界點 $\Gamma_c = 1.64 (J = 1)$ 。計算上我們在 $s \in [0, 1]$ 區間以算符數目 $n = 2,560,000$ 作虛數時間演化，並重複 2,000,000 個蒙地卡羅步驟，以求平均。本圖儘截取模擬的部份 s 區間。

同函數形式變化 [27]，這裡我們只考慮最簡單的線性形式，也就是，單位時間為 $\Delta_s = s_n/n$ ，則時間點 $s_k = k\Delta_s$ 。

在物理量期望值的計算上，雷同上節討論的平衡量子蒙地卡羅方法，某觀察量 O 在時間點 s_n 時之期望值可表示為

$$\langle O \rangle_n = \frac{\langle \Psi(s_0) | P_{1,n} O P_{n,1} | \Psi(s_0) \rangle}{\langle \Psi(s_0) | P_{1,n} P_{n,1} | \Psi(s_0) \rangle}. \quad (2.44)$$

或我們考慮一廣義的形式，包含「不對稱期望值」，其左右兩態向量為不對稱的，

$$\langle O \rangle_t = \frac{\langle \Psi(s_0) | P_{1,n} P_{n,t+1} O P_{t,1} | \Psi(s_0) \rangle}{\langle \Psi(s_0) | P_{1,n} P_{n,1} | \Psi(s_0) \rangle}, \quad (2.45)$$

當 $t = n$ 時，即相當於式 (2.44) 的對稱期望值。這裡討論的準絕熱量子蒙地卡羅法具許多計算上的優勢；例如我們可在單一的模擬演化中計算過程中每一時間點 s_k 的（不對稱）期望值 $\langle O \rangle$ ，若此觀察量 O 在所選擇的基底上為對角的；針對我們的模型，我們可如此計算磁化量 m 相關的物理量。

圖 2.6 呈現準絕熱量子蒙地卡羅計算所得的 Binder 量；我們可看到對不同系

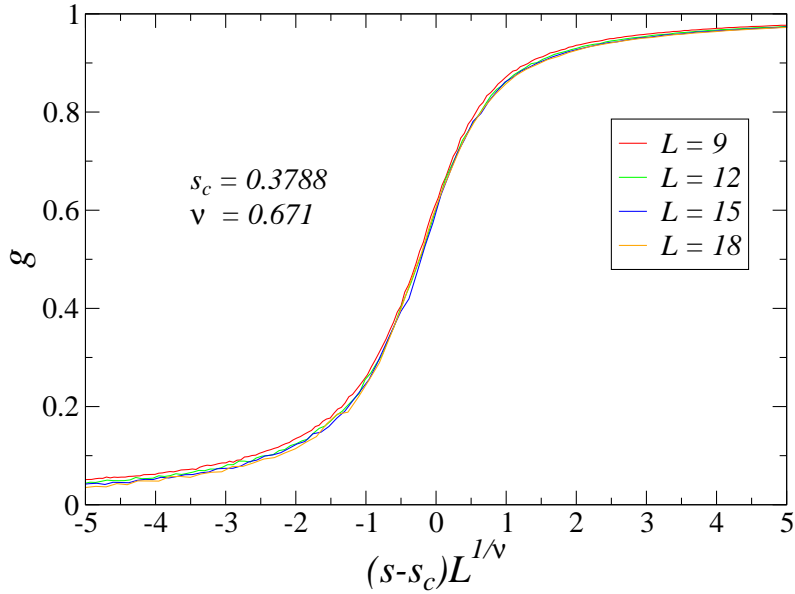


圖 2.7: 圖 2.6 的有限尺度標度化結果。

統尺寸 L 的數值曲線交會於某 $s_c \approx 0.3788$ 值，此處恰為 $(1 - s_c)/s_c \approx 1.64$ ，對照式 (2.41) 與比值 Γ/J ，可看出 s_c 正對應我們前面章節所得到的平衡量子臨界點 $\Gamma_c/J = 1.64$ 。我們也可以對圖 2.6 的數據作有限尺度標度分析。如圖 2.7 所展示，配合 g 的標度形式 (2.37) 與臨界關聯長度指數 $\nu = 0.671$ ，我們得以使對應不同 L 的數值坐落於一曲線上。

在絕熱量子計算過程中，調降控制參數（統稱「退火」）的速率及基態—激發態間的能隙決定系統是否能保持於瞬間基態 [30, 37]。在量子臨界點能隙消失，此處必造成絕熱量子計算過程的瓶頸。這個情形與 Thomas Kibble 與 Wojciech Zurek 提出的 Kibble-Zurek (KZ) 機制雷同，其討論早期宇宙與凝態系統淬煉通過一臨界點時缺陷形成與退火速度之關係 [38–41]。KZ 機制亦被擴展至量子系統 [42–44]。以量子易辛系統為例，隨著量子臨界點 $\lambda_c \equiv (\Gamma/J)_c$ 的逼近，能隙 Δ 呈幕次型的消失：

$$\Delta \sim |\lambda - \lambda_c|^{z\nu} \quad (2.46)$$

定義臨界動力學指數（dynamic exponent） z 。因為在量子系統特徵時間與特徵能量尺度互為倒數的關係，時間上的關聯長度或弛豫時間（relaxation time）隨至量子臨界點的關係則為

$$\tau_{\text{rel}} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-z\nu}. \quad (2.47)$$

在退火過程，當參數 λ 以速率 u 以線性方式隨時間 s 變化時

$$\lambda(s) = \lambda(0) - us, \quad (2.48)$$

根據 KZ 理論，至臨界點之尚剩餘時間 $\tau = |\lambda - \lambda_c|/u$ 須至少與弛豫時間 τ_{rel} 相當，系統才得以保持於基態。由此我們定義一臨界速率 u_c ，稱為 Kibble-Zurek(KZ) 速率，來界定退火的快 ($u < u_c$) 慢 ($u > u_c$)。由

$$\frac{|\lambda - \lambda_c|}{u_c} \sim \tau_{\text{rel}} \sim |\lambda - \lambda_c|^{-z\nu} \quad (2.49)$$

我們得出

$$u_c \sim |\lambda - \lambda_c|^{1+z\nu}. \quad (2.50)$$

或與關聯長度 ξ 的關係

$$u_c \sim \xi^{-(z+1/\nu)}. \quad (2.51)$$

上述討論基於熱力學極限 $L \rightarrow \infty$ 。對於有限系統，由式 (2.51) 可得 KZ 速率與系統長度 L 的關係：

$$u_c \sim L^{-(z+1/\nu)}. \quad (2.52)$$

我們也可擴充式 (2.30) 的物理量有限尺度標度形式至非平橫情形 [27]

$$O(\delta, L, u) = L^{\kappa/\nu} \tilde{O}((s - s_c)L^{1/\nu}, uL^{z+1/\nu}). \quad (2.53)$$

其中 κ 為與 O 相關的臨界指數。若退火速率慢於臨界速率，或 $u \sim L^{-\alpha}$, $\alpha \geq z + 1/\nu$ ，式 (2.53) 標度函數 \tilde{O} 的第二個變數將消失或趨近一常數，此時標度形式將如同平橫態情形 (2.30)；這正是圖 2.7 的情況。

為檢驗退火速率標度分析，模擬上我們以不同速率將 s 從 0 緩調至臨界值 s_c ，觀察量的測量待至退火終點時進行。這裡速率取決於演化的算符數目 n 及系統的晶格點數 $N = L^2$ ，因為系統哈密頓所包含的算符項數目隨 N 成長，故

$$u = s_c \frac{N}{n}. \quad (2.54)$$

在圖 2.8，圖 2.9 及圖 2.10 我們分別呈現 Binder 比值、磁化量平方、及磁化量對不同退火速率的情形，及其根據式 (2.53) 的標度作圖，因為在臨界點測量，故式 (2.53) 中標度函數的第一個變數不考慮。

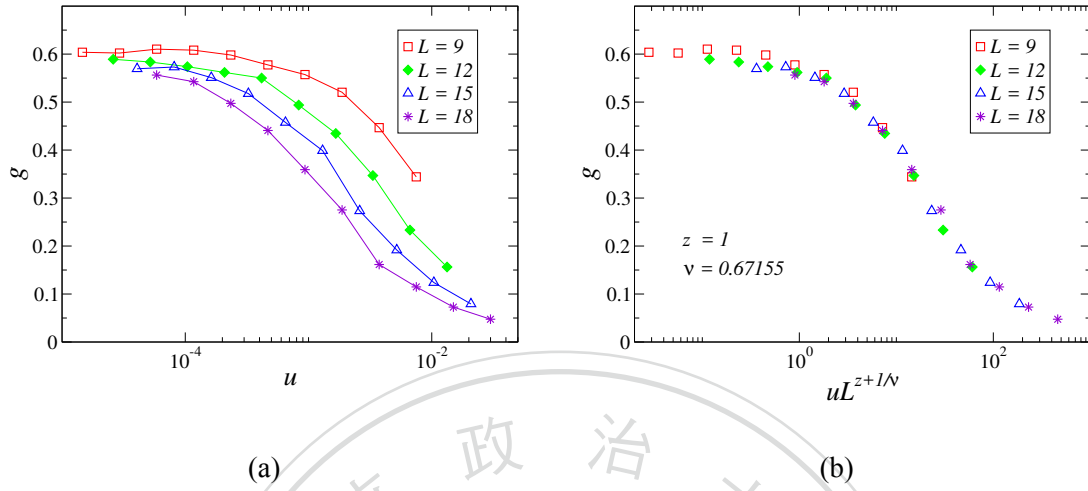


圖 2.8: (a)：不同退火速率的 Binder 比值 g 。(b)：標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 及 $z = 1$ 。

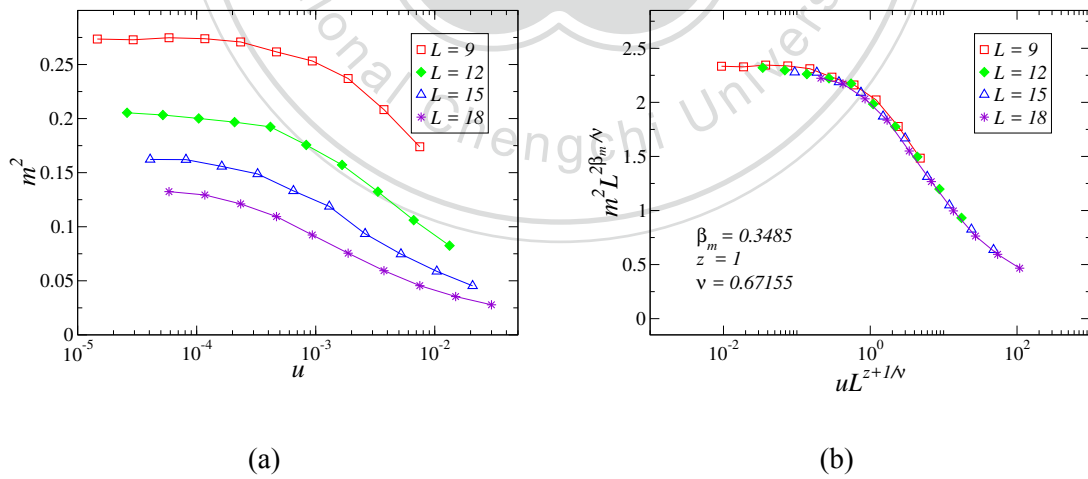


圖 2.9: (a)：不同退火速率下的磁化量平方。(b)：標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 及 $\beta_m = 0.3485$ 。

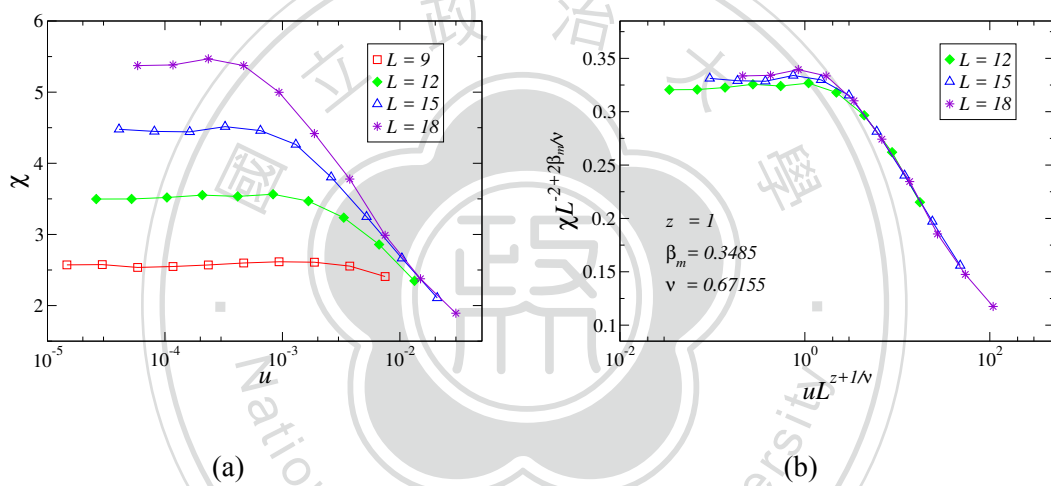


圖 2.10: (a): 不同退火速率下的磁化量平方。(b): 標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 及 $\beta_m = 0.3485$ 。

3 隨機級數展開量子蒙地卡羅方法

繼考慮零溫演算法，本章將討論處理有限溫度系統的量子蒙地卡羅方法，並以逼近零溫的方式探討量子臨界點。一個被廣泛應用的有限溫度量子蒙地卡羅演算法為隨機級數展開量子蒙地卡羅法（Stochastic Series Expansion quantum Monte Carlo method）[45, 46]，簡稱 SSE。這個方法的基礎在於 1960 年代針對海森堡鐵磁模型的 Handscomb 方法 [47, 48]。主要由 Anders Sandvik 將之改良及發展至目前通用的形式 [25, 45, 46, 49]，包含本論文使用的適用易辛模型的方法 [20]。

以下我們首先簡介 SSE 的方法及其在易辛模型的版本。接著展示模擬平衡態及非平衡態的結果。

3.1 量子易辛模型的隨機級數展開法

從有限溫度 $\beta = T^{-1}$ 下量子力學期望值出發：

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ O e^{-\beta H} \}, \quad (3.1)$$

這裡歸一化常數

$$Z = \text{Tr} (e^{-\beta H}), \quad (3.2)$$

稱為配分函數（partition function）。在一基底 $|\alpha\rangle$ 表象，配分函數可被展開表示為

$$Z = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} (-H)^n | \alpha \rangle. \quad (3.3)$$

再利用基底 $\{|\alpha\rangle\}$ 的完備性，上式可被插入 $n-1$ 個單位算符

$$\mathbf{I} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (3.4)$$

並被改寫為

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \langle \alpha | -\mathbf{H} | \alpha' \rangle \langle \alpha' | -\mathbf{H} | \alpha'' \rangle \cdots \langle \alpha^{(n-1)} | -\mathbf{H} | \alpha \rangle. \quad (3.5)$$

注意，為了滿足矩陣跡數的型式， $(\mathbf{H})^n$ 兩端狀態 ($\langle \alpha |$ 和 $|\alpha \rangle$) 必須相同。若將系統哈密頓拆解成

$$\mathbf{H} = - \sum_t \mathbf{H}_t, \quad (3.6)$$

我們可進一步將 Z 表示為

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{S_n\}} \prod_{j=1}^n \langle \alpha' | \mathbf{H}_{t_j} | \alpha \rangle, \quad (3.7)$$

這裡 S_n 標示一串 n 算符乘積的組合。為了截斷無窮的展開式，我們選擇一高冪次 M ，同時我們引入 $M - n$ 個單位算符 $\mathbf{H}_0 = \mathbf{I}$ 於算符序列中。如此我們可使算符序列長度固定為 $M (> n)$ ，其中 n 為非單位算符的系統哈密頓項。因為單位算符的引入不應影響配分函數 Z 的值，所以此時 Z 的表示式需除以 $M - n$ 個單位算符置放的組合數量，此數量為

$$\binom{M}{n} = \frac{M!}{(M-n)!n!}. \quad (3.8)$$

故

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} \sum_{\{S_M\}} \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \prod_j^M \langle \alpha' | \mathbf{H}_{t_j} | \alpha \rangle, \quad (3.9)$$

其中 S_M 標出長度為 M 的算符序列且包含單位算符。如此觀察量 \mathbf{O} 期望值在 SSE 法中可表示為，

$$\langle \mathbf{O} \rangle = \frac{\sum_X \mathbf{O}(X) W(X)}{\sum_X W(X)}, \quad W(X) = \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \prod_j^M \langle \alpha' | \mathbf{H}_{t_j} | \alpha \rangle \quad (3.10)$$

而 $X = \{S_M, |\alpha\}\}$ 為算符－狀態向量的組態。

為了避免負機率問題及考量叢集式更新組態方法上的設計，我們在量子易辛反鐵磁系統的哈密頓加了常數項，且其形式與零溫投射法相同（見 (2.14) – (2.17)）。與零溫投射法不同處主要在於 SSE 法 $M - n$ 個單位算符的引入。蒙地卡羅計算中哈密頓各項 \mathbf{H}_t 及單位算符的抽樣及更新（及 S_M 的抽樣更新）同樣得滿足「細緻平衡條件」；同樣地，這裡我們分「局域更新」及「叢集更新」兩大類。以下我們整理蒙地卡羅演算步驟：

局域更新

檢驗 S_M 內每個算符。如零溫投射法，局域更新步驟裡只改變 S_M 內的對角算符，但非對角算符作用後的自旋態將翻轉。具體步驟如下：逐一檢驗 S_M 內每個算符，

- (1) 若出現一橫場項算符（非對角算符） $H_{\Gamma,i}$ ，則翻轉作用後的自旋態。
- (2) 若出現一對角算符 $H_{J,(i,j)}$ 或 $H_{C,i}$ ，則以下列機率移除它：

$$P = \min \left(\frac{M - n + 1}{\beta [\Gamma N + (2J)N_b]}, 1 \right), \quad (3.11)$$

這裡我們一樣以 N 代表自旋數目，以 N_b 代表鍵結數目。無論是否接受了這個移除動作，我們繼續檢驗 S_M 表中的下一個算符。

- (3) 若出現一單位算符 I ，嘗試插入一對角算符。

- (i) 以以下機率置入一常數算符 $H_{C,i}$ ：

$$P(C) = \frac{\Gamma N}{\Gamma N + (2J)N_b}. \quad (3.12)$$

或以以下機率置入一鍵結算符 $H_{J,(i,j)}$ ：

$$P(J) = 1 - P(C). \quad (3.13)$$

- (ii) 選擇欲加入的算符種類後，以機率

$$P = \min \left(\frac{\beta [\Gamma N + (2J)N_b]}{M - n}, 1 \right), \quad (3.14)$$

考慮接受加入這個算符，並隨機選擇置入的晶格位置；若是鍵結算符 $H_{J,(i,j)}$ 被選擇，則 (i,j) 兩相鄰自旋必須呈反平行狀態，否則拒絕加入。

上述步驟必須重複進行至有一對角算符被置入為止。

叢集更新

與零溫投射法的叢集更新法則雷同，唯一的差別在於模擬空間算符傳遞方向兩端的邊界條件：零溫投射法的算符傳遞方向兩端為「開放邊界」條件，因為一端

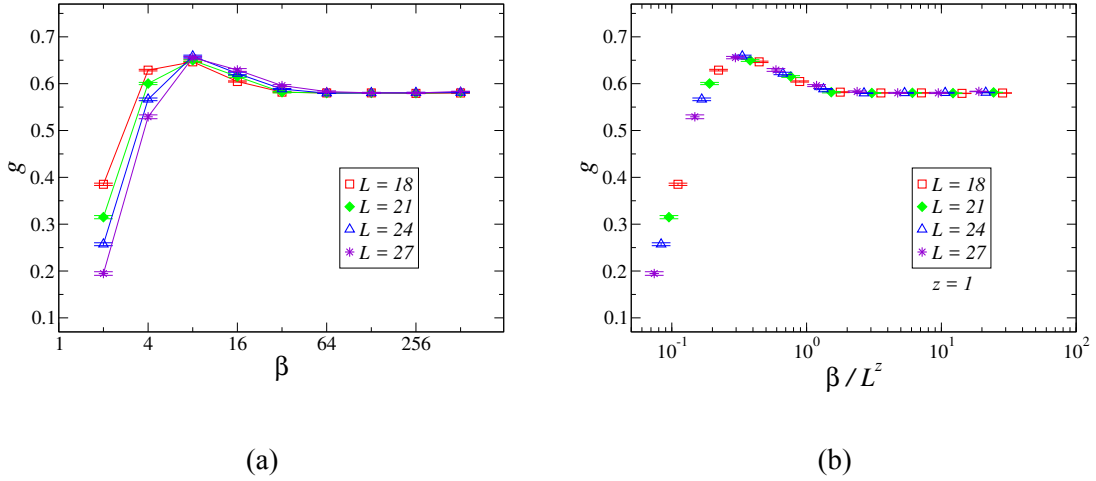


圖 3.1: (a): $\Gamma_c = 1.64$ 時，不同溫度下的 Binder 比值。當 $\beta \gtrsim 128$ ， g 漸趨一定值。
(b): 利用 $\beta \sim L^z$ 的關係，我們可使對應不同 L 的數據坐落於一曲線。

狀態 $|\alpha_r\rangle$ 被 $2n$ 個算符傳遞至另一端狀態 $\langle\alpha_\ell|$ ；而 SSE 方法中的相關邊界條件則必須為週期性的，也就是說，兩端狀態 $|\alpha_r\rangle = |\alpha_\ell\rangle = |\alpha\rangle$ （見式 3.5）。這裡二法則決定叢集的成長與終止：

- 叢集終止於單位置算符，即橫場算符 $H_{\Gamma,i}$ 或常數算符 $H_{C,i}$ 。
- 鍵結算符 $H_{J,(i,j)}$ 四端連結的自旋將被納入同一叢集內。

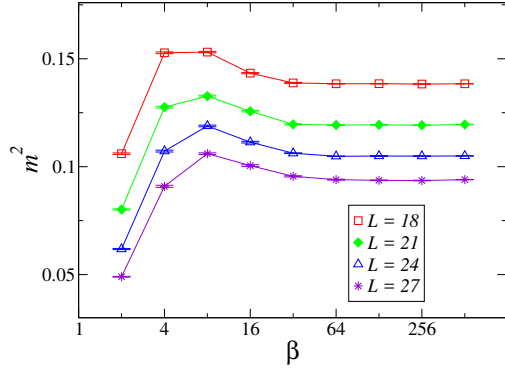
3.2 有限溫度下的平衡態模擬

為了以有限溫度 SSE 方法探測絕對零溫的量子相變，我們首先逐步提高 β 值（也就是降低溫度）來檢驗期望值的收斂情形。當期望值於 $\beta > \beta_c$ 收斂至定值，我們可將 β_c 視為模擬上的等效零溫。如此的過程雷同零溫投射法中投射長度 n 的檢驗。

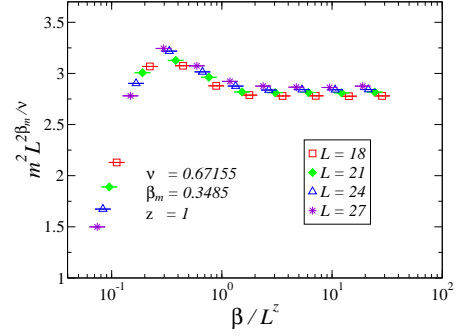
圖 3.1 與圖 3.2 分別展示 Binder 比值、磁化量平方與磁化率在橫場強度下 $\Gamma = 1.64$ 對不同溫度的關係。可觀察到，對不同系統尺度的數據曲線在溫度夠低（這裡 $\beta \geq 128$ ）時漸收斂至一定值。另外，我們可將溫度倒數視為虛數時間，利用 $\beta \sim L^z$ 的關係（這裡 $z = 1$ ）及臨界標度關係，我們可擬合對應不同 L 的曲線，這裡我們取臨界指數 $\nu = 0.67155$, $\beta_m = 0.3485$ [14]。

關於磁化率的計算我們考慮在系統哈密頓加一外加場 $h \sum_i \sigma_i^z \equiv hM$ 並利用線性響應函數（linear response function）

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \right|_{h=0}. \quad (3.15)$$

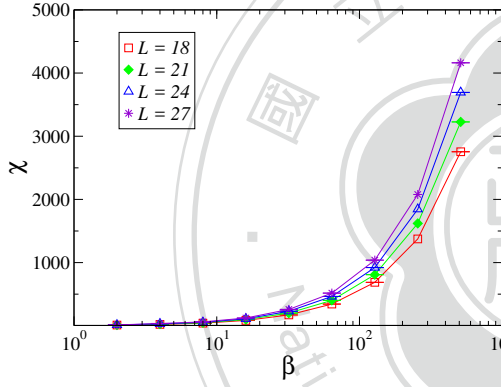


(a)

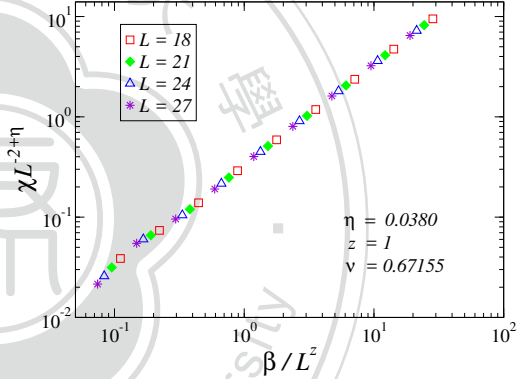


(b)

圖 3.2: (a) : $\Gamma_c = 1.64$ 時，不同溫度下的磁化量平方。當 $\beta \gtrsim 128$ ，各數據曲線漸趨一定值。(b) : 利用 $\beta \sim L^z$ 的關係及 m^2 的有限尺度標度形式，我們可使對應不同 L 的數據坐落於一曲線。



(a)



(b)

圖 3.3: (a) : $\Gamma_c = 1.64$ 時，不同溫度下的磁化率 χ 。(b) : 利用 $\beta \sim L^z$ 的關係及 χ 的有限尺度標度形式： $\chi \sim L^{2-\eta}$ ；這裡臨界指數採用 $\eta = 0.038$ [14]。

由

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial h} \text{Tr} \left\{ \mathbf{M} e^{-\beta(\mathbf{H}-h\mathbf{M})} \right\} \Big|_{h=0} - \langle \mathbf{M} \rangle \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \Big|_{h=0} \\ &= \frac{\beta}{M} \left(\langle \mathbf{M}^2 \rangle - \langle \mathbf{M} \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

我們可得 χ 在以 σ^z - 基底 ($\{|\alpha\rangle\}$) 於蒙地卡羅模擬中的計算公式 [45, 46] :

$$\chi = \left\langle \frac{\beta}{n(n+1)} \left(\sum_{k=0}^{n-1} M(k) \right)^2 + \frac{\beta}{(n+1)^2} \left(\sum_{k=0}^n M^2(k) \right) \right\rangle_W - \left\langle \frac{\beta}{n} \left(\sum_{k=0}^{n-1} M(k) \right) \right\rangle_W^2 \quad (3.17)$$

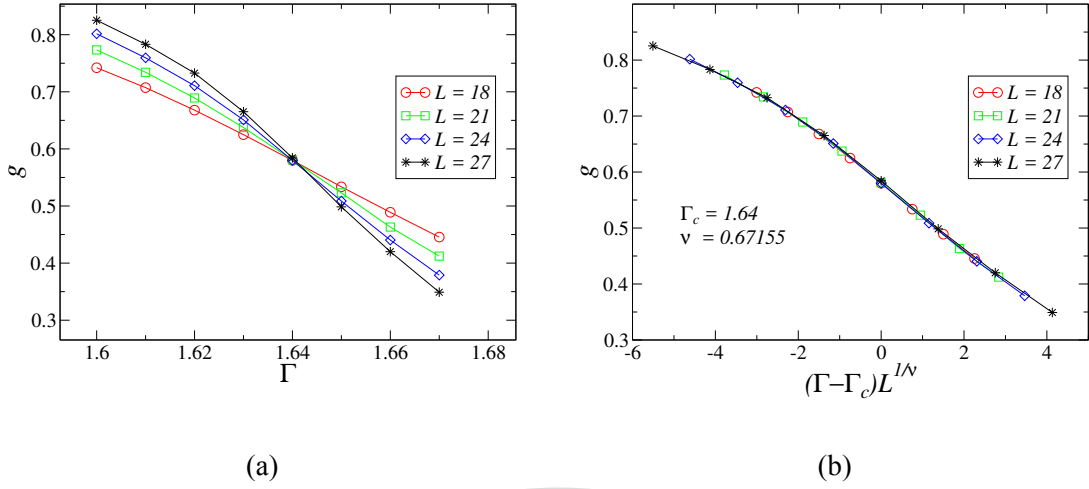


圖 3.4: (a): $\beta = 512$ 時, Binder 比值對橫場強度作圖。當 $\Gamma = 1.64$ 時, 對應不同 L 的曲線交會一起, 而 $\Gamma_c = 1.64$ 也正是零溫量子相變點。(b): 利用標度形式 (2.37) 及臨界指數 $\nu = 0.67155$, 我們可使對應不同 L 的數據坐落於一曲線。

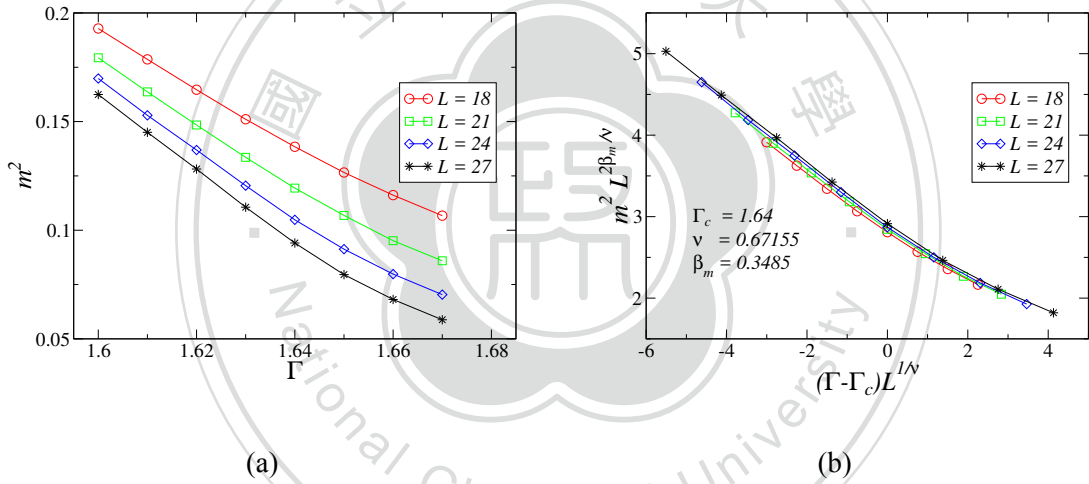


圖 3.5: (a): $\beta = 512$ 時, 磁化量平方對橫場強度作圖。(b): 標度化作圖。這裡使用臨界指數 $\nu = 0.67155$ 與 $\beta_m = 0.3485$ 。

這裡 $M(k) = \langle \alpha_k | \mathbf{M} | \alpha_k \rangle$ 為在第 k 個傳遞狀態 ($|\alpha_k\rangle = \prod_j^k \mathbf{H}_{t_j} |\alpha\rangle$) 的磁化量矩陣元, $\langle \dots \rangle_W$ 代表機率分佈 W 的蒙地卡羅平均。固定橫場強度於零溫臨界值 $\Gamma = 1.64$, 磁化率與溫度的關係展示於圖 3.3(a), 我們可將對應不同尺度的數據擬合於一曲線, 這裡臨界磁化率與系統尺寸的關係呈 [7]:

$$\chi(L) \sim L^{2-\eta}, \quad (3.18)$$

臨界指數為 $\eta = 0.038$ [14]; 標度化圖展示於圖 3.3(b)。

在有限溫度模擬上, 若欲定位量子臨界點, 我們可選擇固定於某低溫 $\beta > \beta_c$ (β_c 為觀測量開始收斂的溫度), 藉改變橫場來偵測量子相變點。例如我們選擇

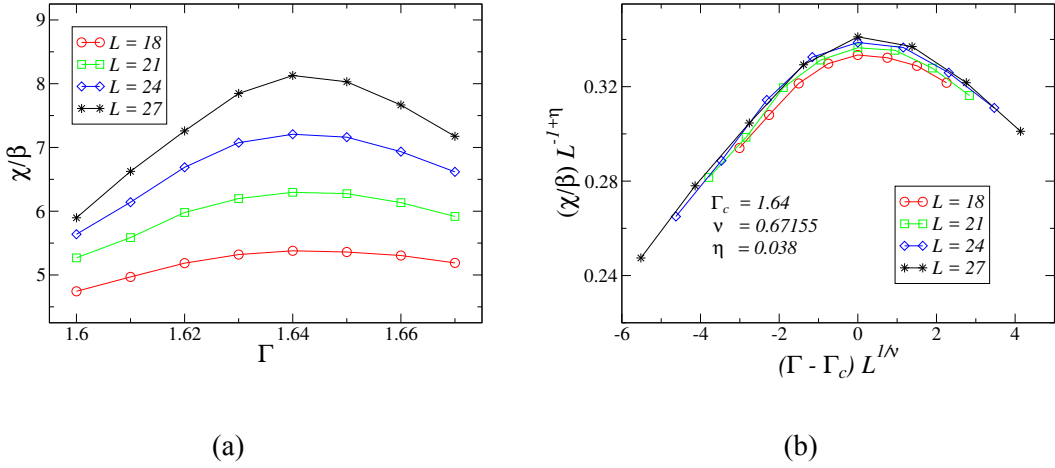


圖 3.6: (a): $\beta = 512$ 時，磁化量平方對橫場強度作圖。(b): 標度化作圖。這裡使用臨界指數 $\nu = 0.67155$ 與 $\eta = 0.038$ 。

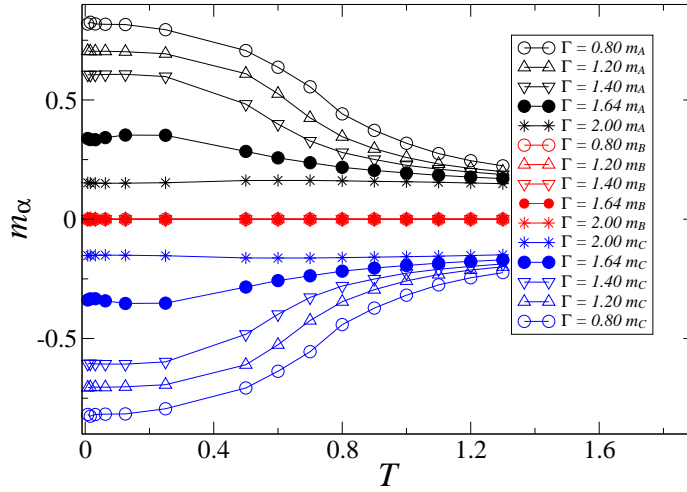


圖 3.7: 三子晶格磁化量 (m_A, m_B, m_C) 分別對溫度 T 作圖。可觀察到，在 $T \rightarrow 0$ 且 $\Gamma < \Gamma_c = 1.64$ 時，三子晶格磁化量呈 $(+, 0, -)$ 狀態。這裡考慮的系統大小為 $L = 18$ 。

$\beta = 512$ ，圖 3.4 顯示此低溫時 Binder 比值與橫場強度的關係，可觀察到對應不同 L 的曲線確交會於 $\Gamma = 1.64$ ，此點正也是我們透過投射法獲得的零溫臨界橫場值。Binder 比值與磁化量的有限尺度標度分析 (圖 3.4(b) 與圖 3.5(b)) 亦顯示在此低溫下確等同為零溫。在磁化率 χ 方面，為了與我們於零溫投射法所定義的磁化率 (式 (2.32)) 比較，我們將由式 (3.17) 所得的磁化量除以溫度倒數 β (圖 3.6) 在 $\beta = 512$ 的結果也吻合零溫投射法的結果 (圖 2.5b)。

另外，我們也測量不同子晶格的磁化量分量 (m_A, m_B, m_C) 在不同溫度下的

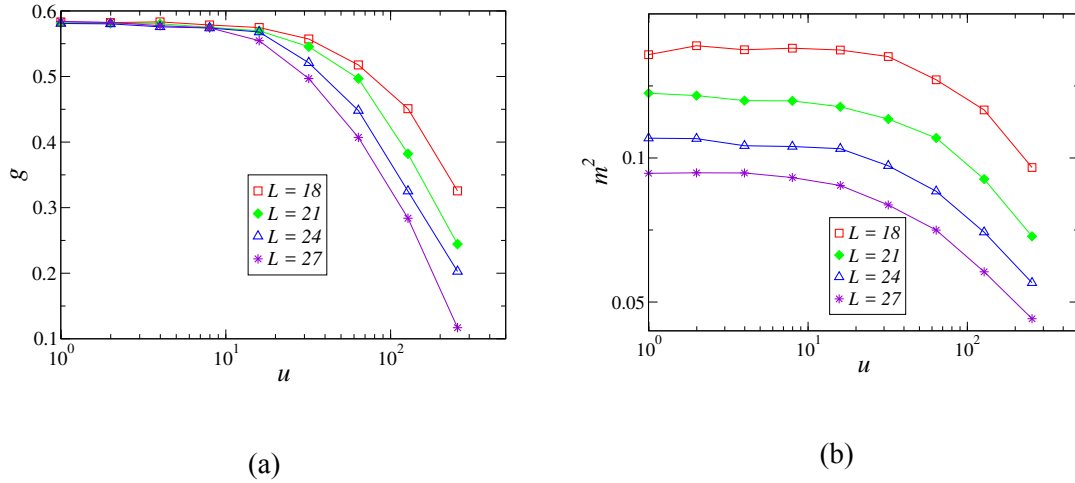


圖 3.8: 不同降溫速率下的 (a) Binder 比值及 (b) 磁化量平方。

情形。圖 3.7 顯示，在 $T \rightarrow 0$ 且 $\Gamma < \Gamma_c = 1.64$ 時，三子晶格磁化量明顯呈 $(+1, 0, -1)$ 狀態，而非另一可能類型 $(+1, -1/2, -1/2)$ 。

3.3 模擬退火

在這一節我們討論另一種非平橫過程，即所謂的「模擬退火」(simulated annealing)，指一緩慢降溫的過程，在演算法上為一應用很廣的尋找最佳解方法，其概念來自冶金等常用的淬火 (annealing) 技術。我們主要循降溫路徑逼近量子臨界點，並探討前面所討論的 Kibble-Zurek 機制。

由前面的計算結果，已知零溫量子臨界點位於 $\Gamma_c/J = 1.64$ (我們設 $J = 1$)。我們固定 $\Gamma = 1.64$ ，以 SSE 法隨蒙地卡羅時間 s_{mc} 以不同速率線性調降溫度至近零溫的 $T = 512^{-1}$ (根據前一節的結果，這個溫度在我們模擬的系統尺度為等效零溫)。這裡速率的定義

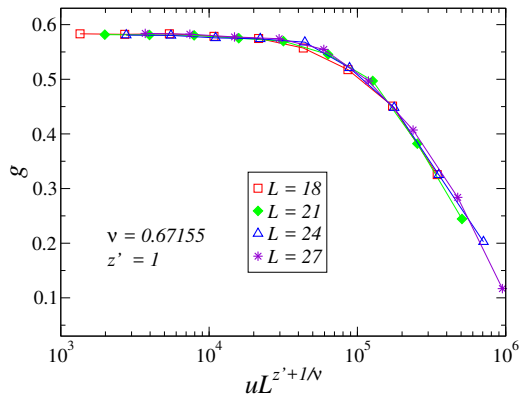
$$u = \frac{T_f^{-1} - T_i^{-1}}{N_{mc}}, \quad (3.19)$$

其中 T_i 為初始溫度，我們設 $T_i = 1/2$ ，而 T_f 為終止溫度，我們取 $T_f = 1/512$ ； N_{mc} 則為模擬時間 (蒙地卡羅時間)。我們期待有限系統下觀察量與速率的關係由雷同式 (2.53) 的標度形式描述：

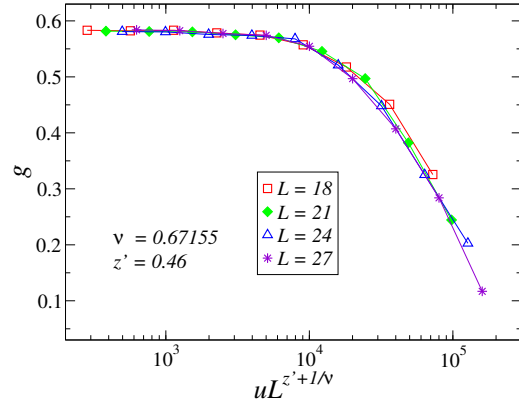
$$O = L^{d_O} \tilde{O}(uL^{z'+1/\nu}), \quad (3.20)$$

其中 d_O 表示臨界指數，而 z' 雷同動力學指數，但這裡我們先區分 z' 與哈密頓 (量子) 動力學指數 z 。

圖 3.8 展示 Binder 比值及磁化量平方與降溫速率的關係。利用式 (3.20) 與 3D-

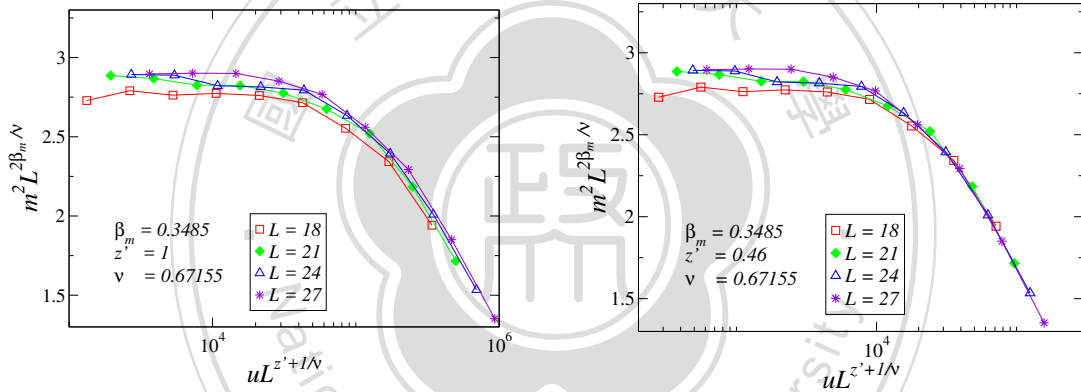


(a)



(b)

圖 3.9: Binder 比值模擬退火之標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 、與量子動力學指數一致的 $z' = z = 1$ (a) 及 Swendsen-Wang 演算法的臨界動力學指數 $z' = 0.46$ (b)。



(a)

(b)

圖 3.10: 磁化量模擬退火之標度圖。用來擬合的臨界指數為 $\nu = 0.67155$ 、與量子動力學指數一致的 $z' = z = 1$ (a) 及 Swendsen-Wang 演算法的臨界動力學指數 $z' = 0.46$ (b)。

XY 的臨界指數 [14]，我們於圖 3.9 及 3.10 分別以量子動力學指數 $z' = z = 1$ 及對應蒙地卡羅方法的動力學指數來擬合作標度圖；這裡的蒙地卡羅法動力學指數為 Swendsen-Wang 演算法 [23] 在 3D-XY 普適類的臨界動力學指數 $z' = 0.46$ [50]。因所模擬的系統尺度及退火速率太小，我們無法由計算結果判斷何者動力學指數較適切；理論上模擬退火法應與演算法的動態性質相關（而非量子動力學），在磁化量模擬退火標度圖退火速率較大處以 $z' = 0.46$ 的擬合品質（圖 3.10(b)）看似較 $z' = 1$ 佳（圖 3.10(a)），或許可視為支持此理論的數值結果，但尚待進一步的探討及驗證。



4 總結與展望

在量子相變問題空間及時間的關聯性是不可分的，兩方向的關聯長度藉著動力學指數 z 聯繫。在量子蒙地卡羅計算上，已知的動力學指數 z 常是能進一步獲得其它臨界指數的先決條件，例如在路徑積分蒙地卡羅模擬上，我們需將空間的長度 L 與虛數時間上的長度（溫度倒數） β 之比值藉 z 固定。本論文以兩種建構在算符的量子蒙地卡羅演算法探討三角晶格易辛反鐵磁的平衡及非平衡臨界現象。我們以不同的方式及過程示範如何不經上述的 L - β 比值而能求得動力學指數，惟在模擬退火法的探討上，尚待更精確的計算結果。

本論文探討的三角晶格易辛反鐵磁為一挫折性模型，具豐富的相態。在零橫場下的基態為一臨界態 [2]，因強挫折性此臨界點之非平衡模擬勢必伴隨極緩慢之動力學性質，這將是未來值得探討之一有趣的課題。



參考文獻

- [1] G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
- [2] J. Stephenson, Journal of Mathematical Physics **11**, 413 (1970).
- [3] Y. Jiang and T. Emig, Phys. Rev. B **73**, 104452 (2006).
- [4] R. Moessner, S. L. Sondhi, and P. Chandra, Phys. Rev. Lett. **84**, 4457 (2000).
- [5] R. Moessner and S. L. Sondhi, Phys. Rev. B **63**, 224401 (2001).
- [6] R. Moessner, S. L. Sondhi, and P. Chandra, Phys. Rev. B **64**, 144416 (2001).
- [7] S. V. Isakov and R. Moessner, Phys. Rev. B **68**, 104409 (2003).
- [8] D. Blankschtein, M. Ma, A. N. Berker, G. S. Grest, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. B **29**, 5250 (1984).
- [9] H. F. Trotter, Proc. Am. Math. Soc. **10**, 545 (1959).
- [10] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976).
- [11] J. V. José, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **16**, 1217 (1977).
- [12] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977).
- [13] J. Cardy, *Scaling and renormalization in statistical physics*, volume 5, Cambridge university press, 1996.
- [14] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. B **63**, 214503 (2001).
- [15] M. Žukovič, L. Mižišin, and A. Bobák, Acta Physica Polonica A **126**, 40 (2014).
- [16] S. Liang, Phys. Rev. B **42**, 6555 (1990).

- [17] A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **95**, 207203 (2005).
- [18] A. W. Sandvik and K. S. D. Beach, arXiv:0704.1469, (2007).
- [19] R. G. Melko, *Stochastic Series Expansion Quantum Monte Carlo*, pages 185–206, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2013.
- [20] A. W. Sandvik, Phys. Rev. E **68**, 056701 (2003).
- [21] S. Inglis and R. G. Melko, New Journal of Physics **15**, 073048 (2013).
- [22] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [23] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [24] K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
- [25] A. W. Sandvik, AIP Conf. Proc. **1297**, 135 (2010).
- [26] E. Farhi et al., Science **292**, 472 (2001).
- [27] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 174302 (2013).
- [28] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **114**, 147203 (2015).
- [29] M. W. Johnson et al., Nature **473**, 194 (2011).
- [30] M. Born and V. Fock, Zeitschrift für Physik **51**, 165 (1928).
- [31] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E **58**, 5355 (1998).
- [32] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car, Science **295**, 2427 (2002).
- [33] G. E. Santoro and E. Tosatti, Journal of Physics A: Mathematical and General **39**, R393 (2006).
- [34] S. Boixo et al., Nature Physics **10**, 218 (2014).
- [35] C. De Grandi and A. Polkovnikov, *Adiabatic Perturbation Theory: From Landau–Zener Problem to Quenching Through a Quantum Critical Point*, pages 75–114, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [36] 黃湘喻, 以模擬量子退火過程探索自旋系統的基態, Master’s thesis, 國立政治大學, 2014.

- [37] B. Damski and W. H. Zurek, *Phys. Rev. A* **73**, 063405 (2006).
- [38] T. W. Kibble, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **9**, 1387 (1976).
- [39] T. W. Kibble, *Physics Reports* **67**, 183 (1980).
- [40] W. Zurek, *Nature* **317**, 505 (1985).
- [41] W. H. Zurek, *Physics Reports* **276**, 177 (1996).
- [42] J. Dziarmaga, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 245701 (2005).
- [43] A. Polkovnikov, *Phys. Rev. B* **72**, 161201 (2005).
- [44] W. H. Zurek, U. Dorner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 105701 (2005).
- [45] A. W. Sandvik and J. Kurkijärvi, *Phys. Rev. B* **43**, 5950 (1991).
- [46] A. W. Sandvik, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **25**, 3667 (1992).
- [47] D. C. Handscomb, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **58**, 594–598 (1962).
- [48] D. C. Handscomb, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **60**, 115–122 (1964).
- [49] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **56**, 11678 (1997).
- [50] M. Hasenbusch and S. Meyer, *Physics Letters B* **241**, 238 (1990).