

我们研究什么？

陈锟，黄远，邓友金

合肥微尺度物质国家实验室，近代物理系

中国科学技术大学

涌现

自然规律的精髓也许不在于精美的相对论，也不在于奇妙的量子力学，而在于看似平淡无奇的概念“涌现”(emergence)。Wikipedia 上给出了一个涌现的定义，“**emergence is conceived as a process whereby larger entities, patterns, and regularities arise through interactions among smaller or simpler entities that themselves do not exhibit such properties**”。在我们的科学体系中，从单体的微观规律出发涌现出多体的宏观现象以及宏观规律的过程无处不在：亚原子尺度描述夸克、电子、光子的各种相互作用的量子场论可以在原子尺度上涌现出描述各种原子能级结构的薛定谔方程（量子力学）；进一步的，量子力学在分子尺度上则涌现出整个化学体系；这一涌现过程还将不断进行下去，从化学与物理的诸多简单明了的规律中，最终将涌现出复杂的生命体；更奇妙的是，一系列生命体（神经元细胞）的组合还能涌现出智能；而诸多独立智能的互动则进一步涌现出各种经济社会规律等等等等。涌现的结果总是那么让人拍案叫绝，如果真的有一位上帝设计了终极理论，他/她却未必料到我们的宇宙奇观；正如当年图灵、冯诺依曼这些计算机的设计者不会想到他们搭建的框架可以涌现出 Google 这样的互联网服务；而熟悉互联网概念的我们也未必能看清在此之上能涌现出何等伟大的智能体。

我们研究什么？

科学探索通常可以划分为两类哲学思想。其中一种为还原主义(reductionism)，即从已被观测到的宏观现象/规律出发，寻找更加微观、基础的规律。比如海森堡、薛定谔为了解释诸多实验现象而创造了量子物理；而 60、70 年代的粒子物理大跨越则为了解释各种高能现象而找到了相应的量子场论。这一思想同样也可以反过来，成为所谓的涌现主义(pluralism)，即从已知的规律基础上，发挥想象力搭建新的涌现规律。如量子化学企图从量子力学出发，重新解释化学规律；再如分子生物学则在化学规律的基础上，解释各种生命现象。具体到方法论上，这两种哲学思想实质上分别对应于归纳与演绎。

我们的研究基本属于第二种思想，是凝聚态物理的一支。主要目标便是从单个原子的量子物理定律出发，研究固体、液体等多体系统在不同温度下（涌现出来的）物理性质。这里我们强调多体是由于在原子（或电子等）数目足够多时，系统可以用统计物理进行研究，从而区别于通常研究少体问题的量子化学。另一点需要说明的是，不同温度区间，或者不同能量尺度下，系统有可能涌现出截然不同的新规律。在低温下，材料的涌现规律仍然表现出一定的量子本性。而在高温下，由于能量尺度高，任何微观、单体的量子规律将最终涌现出宏观尺度下的经典物理。一个典型的例子是液氦(He4)。单体 He4 原子的运动规律为与环境存在一定相互作用的薛定谔方程；而当 10^{23} 量级的 He4 原子组成多体量子系统时，涌现结果则与温度相关：当温度足够低时，液氦是一种量子流体，出人意料的表现

出超流性，完全没有粘滞系数。而温度足够高时，液氦由经典的流体力学描述，具有粘滞性；与水遵从同样的力学规律。

更专业的解释

一个凝聚态系统的物理规律由该系统的哈密顿量来刻画，其参数 (g_1, g_2, \dots) 包括系统基本粒子的质量，基本粒子之间的两体、三体相互作用强度等等。而概念“涌现”也有一个更加专业化的名词“重整化”(renormalization)。物理学家们在过去的半个多世纪中发展出了一整套数学工具来系统地研究量子多体系统，即重整化群方法(the renormalization group method)。

翻译成凝聚态理论中的重整化的语言，前文提到的微观/少体与宏观/多体的区别在于我们观察凝聚态系统的精细程度的大小，或者说粗粒化(coarse grain)程度。如果观察的分辨率高到原子尺度，则观察者可以识别出凝聚态系统真正的基本粒子，即原子；从而写出由参数(g_1, g_2, \dots)描述的哈密顿量；而如果观察的分辨率很低，此时观察者实际上只能探测到粗粒化之后的基本粒子，系统的微观哈密顿量将被重整化为另一个由参数(f_1, f_2, \dots)描述的哈密顿量。因此涌现过程在凝聚态中实质上就是不同粗粒化程度下系统有效哈密顿量的重整化。而我们的研究目的正是要回答在何种参数条件下，系统可以重整化出何种有趣的物理。

这种重整化过程可以十分戏剧化。比如，前文提到的 He4 的例子。在足够低温下将系统粗粒化之后表现为超流体，其中的基本粒子为没有质量的声子与带质量的旋子。由这些基本粒子写出的有效哈密顿量与 He4 原子的哈密顿量已经没有任何联系了。这类富于想象力的涌现现象是我们研究中的一大重点。

重整化理论同样为连续相变点附近的凝聚态系统提供了一种深刻的洞察力。例如，我们知道，把一块处于铁磁态的磁铁加热到居里温度之上，它的磁性就会消失，变成顺磁态。此时我们如果在大尺度上（粗粒度高）测量整个磁化强度，我们会觉得磁铁完全处于无序态；但是如果我们用更精细的磁强计在显微镜视野下仔细观察磁铁的局部细节（粗粒度低），我们会发现即使对于略高于居里温度（顺磁-铁磁相变点），小尺度上的磁铁依然处于铁磁态。换句话说，大尺度上的顺磁体包含了大量小尺度的磁畴。当然这些磁畴的尺寸都足够小，以至于取大尺度平均之后，整体的磁性消失。在这个例子中，不同尺度下系统变现出不同的观测性质正是有效哈密顿量重整化的一个体现。更加有趣的是，如果温度刚好处于居里温度时，系统中既有小尺寸的磁畴，也可以有任意大尺寸的磁畴；这些磁畴大小的分布刚好可以使得整个磁铁不管在何种粗粒度观察都表现出完全一样的物理——磁铁中的磁畴分布居然是分形结构，有效哈密顿量具有重整化不变性！实际上，这个结论是普适的，如果一个多体系统处于连续相变点上，系统总是具有重整化不变性，我们通常将这样的系统是**临界**的。正是由于这种分形结构的存在，使得临界系统的物理性质具有**普适性**。比如，普通水到气体的相变，与液氦从流体到气体的相变具有完全相同的有效哈密顿量。更多的细节可以参见郝柏林老师的科普读物《边缘奇迹——相变与临界现象》。研究这种相变点附近的神奇的**分形**性质是我们研究中的另一大重点。

研究方法之一：计算机模拟

虽然科学发展了数千年，但是实际上我们真正能够用数学精确求解的系统十分稀少，其中的绝大多数都是线性系统，特别是谐振子系统（比如地球公转的问题可以通过写出径向运动方程转化为谐振子问题，而被电磁波照射的金属原子可以也当作一个谐振子来处理，黑体辐射谱则可以通过许多谐振子热力学平均得到；甚至在量子场论中，光子等自由粒子场都可以看作真空中无穷多谐振子的振动）。而当我们遇到非线性系统时，例如在谐振子线性势能之外再加上高阶项，那么我们通常有两种选择：1) 用初等数学函数猜出系统的运动方程解；2) 把高阶势能当作小参数做微扰展开的进行处理。但是 1) 的问题不仅在于“猜”需要足够的洞察力，而且也在于实际上初等函数的表达能力十分有限，绝大多数系统甚至都不可能写出这样的解；而 2) 的问题在于对于高阶势能很强的系统，小参数不存在，微扰展开得到的级数是发散的，因此这种方法完全不适用。这就是我们要强调数学工具存在局限性的原因。

克服这种数学的局限性的一大希望便是求助于计算机的帮助。其中的思路非常简单，假设非线性谐振子的运动方程解为 $x=x(t)$ ，与其用初等方程写出函数 $x(t)$ ，我们不如在计算机内存中保存下对于所有不同参数 t 的函数值 $x(t)$ 。原则上，函数信息仍然是完备的，我们仍然可以对内存中的 $x(t)$ 做求导、求积分等运算。这样只要我们编写一个计算机程序可以找到符合非线性谐振子运动方程的解，那么对于强高阶势能，之前提到的问题 1) 就迎刃而解；而问题 2) 也完全不会出现。幸运的是，这样的一个计算机程序实际上并不难编写，因为我们可以从一个系统在 0 时刻的初态出发，可以算出系统按照运动方程演化极短的一段时间 dt 后的末态；然后我们可以将这个末态当作下一轮计算的初态，计算出 $2dt$ 时间后系统的末态；如此循环，便可以得到整个运动解 $x(t)$ 。我们将这种迭代求解运动方程的方法称之为计算机模拟——如果我们的宇宙就是上帝的超级计算机中的一个程序，那么这也将是宇宙演化的方式。当然有时我们也可以用另外的思路来编写这一计算机程序，比如我们可以用变分方法（如蒙特卡洛变分法，Variational Monte Carlo）来寻找使得非线性谐振子的拉格朗日量最小的运动解。我们也广义地将之称为计算机模拟。

数学的局限性在处理涌现过程时同样存在，而且也同样可以用计算机模拟的方法得到解决。非平庸的涌现过程往往不是简单的线性问题。典型的如量子场论中人们虽然能够写出夸克之间的相互作用，但是由于这种相互作用很强，我们却不知道为什么这样的相互作用导致了夸克禁闭的出现；因此人们发展一套计算机模拟方法，称之为格点动力学模拟。再如我们可以相对较为清楚的知道神经元之间是如何通信，但是却对如何在此之上涌现出智能毫无头绪；因此人们发展了对应的计算机模拟方法，称之为人工神经网络，极大得推进了人工智能的发展。

在凝聚态物理中，也有类似的情形。比如，对于金属材料，由于存在小参数，我们可以相对较好用微扰论预言重整化后 BCS 超导态的出现；而对于一些铜、铁氧化物材料，这样的小参数并不存在，我们没有任何数学理论可以令人信服地描述这些材料中如何涌现出高温超导态。为了理解高温超导现象，走得比数学理论更远，我们目前正致力于发展一套基于费曼图展开和蒙特卡洛方法的模拟算法——图形蒙特卡洛算法 (Diagrammatic Monte Carlo)。我们从一个多体电子系统的简化版哈密顿量 (Fermi-Hubbard 模型) 出发，然后使用蒙特卡洛方法生成并计算系统的费曼图展开，最终求出系统的格林函数（相当于系统

的运动解)。我们希望最终我们可以从不同温度、不同参数下的系统的格林函数中提取各种物理性质,从而确定出系统在哪些条件下会表现出不能用 BCS 超导理论解释的高温超导性。

凝聚态物理中另一个让各种微扰论数学方法纷纷折戟的坑就是相变点附近的临界系统的物理性质。这是因为物理上的(二维、三维)临界系统通常都属于强相互作用系统,没有小参数可以用来做微扰展开。计算机模拟成了研究临界系统中涌现性质的最可靠的方法。比如,在 BCS 超导态到绝缘体的相变点附近(或者超流体到绝缘体的相变附近,两者具有相同的物理性质),虽然系统的微观运动方程只具有经典的伽利略不变性,但是实际上系统中将会涌现出相对论性的洛伦兹不变性,当然此时系统的速度上限“光速”由另一种涌现出来的粒子——声子——的速度“声速”决定。有趣的是,微扰理论的计算表明,对于高维系统(三维以上),除了声子之外,还有一种更为有趣的涌现粒子:著名的希格斯粒子。这个系统中的希格斯粒子和我们宇宙的希格斯粒子具有相同的起源机制,也有相同的性质:带质量但是不带自旋和荷,一个希格斯粒子还可以衰减成两个声子/光子。使用计算机模拟的方法,我们证明,这样的希格斯粒子同样也存在于二维的临界系统中(参见 *Universal properties of the Higgs resonance in (2+1)-dimensional U(1) critical systems*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 170403 (2013))。实际通过计算机模拟,我们甚至可以看到狭义相对论中的时间膨胀效应:希格斯粒子的寿命会在相对晶格高速运动时变长!

在二维的 BCS 超导态到绝缘体的相变点附近涌现出洛伦兹不变性还会导致一个有趣的结果:如果按照弦论中的全息映射原理(holographic mapping),这样的二维的临界系统可以认为是一个三维球形时空(严格的说,是一个反德西特空间)中的世界到球面上的一个投影。而三维球形时空中的物理则由某种量子引力理论描述,并且时空中心处包含一个史瓦西黑洞,其霍金温度则对应于球面上临界系统的热力学温度。如果假设这种充满想象力的全息原理是正确的,而且量子引力理论刚好有小参数可供微扰,那么我们就可以用量子引力理论严格地计算各种物理量,映射到球面上之后我们便可以获得原先临界系统的物理性质。人们尝试构造了一些量子引力理论来计算二维 BCS 超导态到绝缘体的相变点附近的临界系统的一些输运性质(如电导率)。我们则使用了计算机模拟的方法测量了该临界系统精确的输运物理量的值,从而在凝聚态系统中实现了对全息映射原理第一次检验(参见 *Universal Conductivity in a Two-dimensional Superfluid-to-Insulator Quantum Critical System*, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 030402 (2014))。

宏观物性的微观机制本质上是“多电子问题”,即大量电子在原子核及电子间相互作用下的量子行为。早在80多年前,英国著名物理学家狄拉克就深刻地认识并写下了“多电子问题”的哈密顿量。实践证明,多电子问题的解决异常困难,核心是“费米子符号问题”。任何能解决问题的方法不仅具有重大的基础意义,也将产生巨大的应用价值——将在理解新材料及设计新材料中发挥关键作用。2010年以来,针对费米-哈勃模型,我们致力于发展图形蒙特卡洛方法以及与其它数值方法的结合。费米-哈勃模型是凝聚态物理学最重要的模型之一,也被认为是高温超导物理的基本模型。在过去的几十年里,人们已经开展了大量的研究。然而,其在二维及高维空间的相图一直不清楚。我们应用了半解析手段以及图形蒙特卡洛方法,测定了在相互作用不太强以及电子数密度不太高的“涌现”BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 区间的基态超导相图(Arxiv:1408.2088)。目前,受到美国 Simons 基金会的支持,我们与十几个来自欧美的国际研究组一起,用不同的方法对二维费米-哈勃模型的物理量进行标定。

另外一些使用计算机模拟方法来研究临界系统的例子可以参见我们的其他一些文章，如：*Deconfined criticality flow in the Heisenberg model with ring-exchange interactions*, *Phys. Rev. Lett.* 110, 185701 (2013)，再如 *Finite-temperature phase transition in a class of 4-state Potts antiferromagnets* , *Phys. Rev. Lett.* 107 150601 (2011) 等等。

研究方法之二：量子模拟

为了克服前面提到的数学方法的局限性，除了可以使用普通的计算机外，我们甚至可以尝试构造特殊的“量子计算机”来模拟实际的物理系统。当然我们这里所谓的“量子计算机”并非是在真正意义上可以随意编程，普适用途的计算机，我们更多的是指通过控制多个原子之间的相互作用来实现某个特定的哈密顿量，通过一段时间的演化后，通过测量末态系统的物理量，我们便达到了模拟的目的。我们称这样的实验为量子模拟。

比如为了研究 BCS 超导态到绝缘体的相变点附近的临界系统，最直接的量子模拟方案便是取一块金属，调节温度使得材料刚好处于超导态到绝缘态的相变点处，再用电流计、磁场计等探测工具测量它——换句话说，这种量子模拟就完全等同于我们通常意义上的实验方案：我们的哈密顿量是从什么材料中抽象出来的，那么就用这个材料来研究。但是现实世界中的材料是十分复杂的，其中太多不可控的因素，有可能导致我们从材料中观测到的现象并非是我们的目标哈密顿量导致的结果。

因此很多时候，我们有必要使用间接的方案：比如为了研究 BCS 超导态到绝缘体的相变点附近的临界系统，我们可以使用激光搭建光晶格来代替金属中的晶格，而用超低温下的玻色原子（Bose 子）团来代替金属中的电子气，最终构造出来的哈密顿量可以实现超流体到绝缘体的相变，与 BCS 超导态到绝缘体的相变具有完全相同的物理性质。寻找量子模拟的实现方案需要丰富的想象力。

最近，我们通过这种量子模拟的思路，使用超冷原子模拟了一个具有自旋-轨道耦合的哈密顿量，我们不仅定出它的相图，还观测到其中涌现出来的一种有趣粒子：旋子（参见 Si-Cong Ji et al. *Experimental determination of the finite-temperature phase diagram of a spin-orbit coupled Bose gas* , *Nature Physics* (2014)）