



**CSRC**

# 量子磁性与多体计算培训班

## 培训手册

2024年6月12日—6月14日

中国·北京

## 培训班介绍

北京计算科学研究中心(以下简称中心)是隶属于中国工程物理研究院的独立法人单位,是以计算科学为牵引的多学科基础研究机构,成立于2009年8月。中心的定位是开展计算科学研究,促进科技发展,打造一个国际一流的开展计算科学及相关学科交叉研究的综合平台。

中心积极引进高层次人才,致力于开展计算科学相关学科的交叉和创新研究,共有七个研究部:物理系统模拟研究部、量子物理与量子信息研究部、材料与能源研究部、复杂系统研究部、应用与计算数学研究部、力学研究部、计算方法研究部。研究领域涵盖了数学、力学、物理学、化学、材料科学、计算机科学等多个基础、前沿领域。中心积极与国内外知名科研机构以合办会议、合带博士后、人员互访等丰富形式开展合作,努力推动学科交叉、加强学术交流。作为一个基础性、跨学科、开放式的综合研究平台,中心将成为中物院在各个研究领域开展创新研究的重要支撑,开展对外科学技术交流合作的桥梁和纽带,高层次人才引进与培养的摇篮,同时填补我国计算科学相关学科交叉研究领域的空白。

本次培训班是由北京计算科学研究中心物理系统模拟研究部主办,培训主题是"量子磁性与多体计算",旨在深入探讨新型材料化合物以及人工原子阵列系统中的量子磁性和奇异现象。我们将系统介绍强关联微观模型的基本理论和主流的量子多体计算方法,并追踪该领域的一些代表性前沿进展。培训班全程采取集中授课+交流讨论的形式,6月12日至6月13日每天上、下午各安排两场专题授课,上午08:30开始,下午14:00开始。每场课程持续约1.5小时,包含课间休息和提问交流环节。在专家授课结束后,6月14日上午安排相关主题的研究生交流报告,每个报告约20分钟。建议学员可提前熟悉固体物理、凝聚态理论、计算物理等相关基础内容。通过这次培训班,希望能够拓宽学员们的科研视野,为未来的相关研究工作打下坚实基础,同时加强与中物院内外研究单位科研人员的合作交流。

我们诚挚欢迎各位学员参加本次培训班!

# 培训须知

**培训地址:** 北京计算科学研究中心三层第二会议室, 北京市海淀区西北旺东路 10 号院东区 9 号楼中关村软件园二期(100193)

**现场报到:** 6 月 12 日上午 07:30~08:30

中心三层第二会议室外

**培训时间:**

- ◇ 6 月 12 日至 6 月 13 日(专家授课), 上午 08:30 开始, 下午 14:00 开始
- ◇ 6 月 14 日(研究生交流汇报), 上午 09:00 开始

**用餐安排:** 培训期间午餐、晚餐自助, 请前往中心 B1 层餐厅凭餐券用餐

**发票领取:** 6 月 13 日(星期四), 下午 14:00~17:00 (第二会议室外)

**无线网络:** 账户名: csrc\_guest | Wi-Fi 密码: csrc20150308

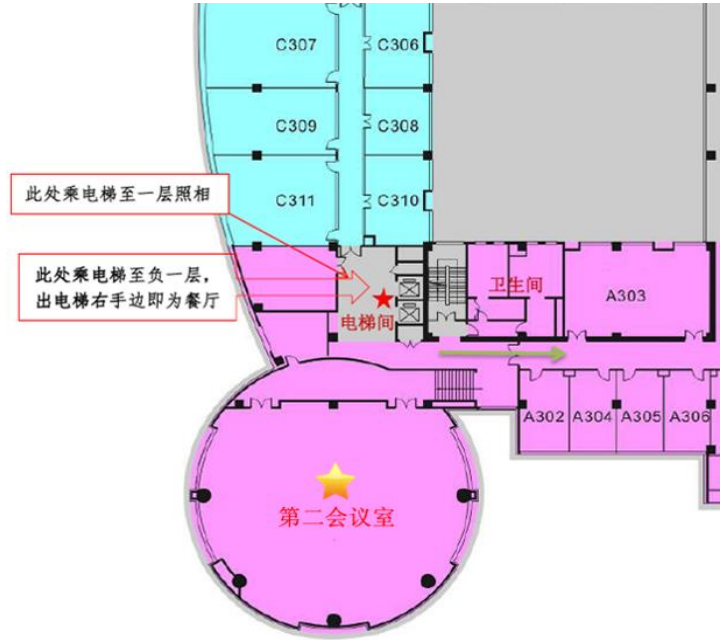
**文件下载:** 培训日程、参会证明等相关文件提供电子版, 如需下载请至培训班网页: <http://www.csrc.ac.cn/en/event/schools/2024-04-30/102.html>

**注意事项:**

- ◇ 请自觉遵守培训纪律, 不迟到、不早退, 因故不能参加培训或须提前离会, 请尽早联系告知会务组。
- ◇ 培训期间中物院院内单位学员须每天签到一次, 以便统计发放培训证书。
- ◇ 进入会场前请自觉将手机调至静音状态, 以免影响他人。

**会务联系:**

- ◇ 北京计算科学研究中心 刘薇 (13717776118, weiliu@csrc.ac.cn)
- ◇ 北京计算科学研究中心 冯怡 (18600984303, fengyi@csrc.ac.cn)



## 培训日程(I)

2024.06.12 (星期三)上午, 第二会议室	
07:30~08:30	现场报到、签到
主持人: 胡时杰 (北京计算科学研究中心)	
08:30~10:00	刘正鑫 (中国人民大学) Variational Monte Carlo Approach for Elementary Excitations in Quantum Magnets
10:00~10:30	提问交流、合影、课间茶歇
10:30~12:00	王艳成 (北京航空航天大学杭州国际创新学院) 随机序列展开的量子蒙特卡罗方法
12:00~13:45	讨论交流、午餐午休
2024.06.12 (星期三)下午, 第二会议室	
13:45~14:00	签到
主持人: 黄 兵 (北京计算科学研究中心)	
14:00~15:30	张学锋 (重庆大学) Application of SSE on Different Quantum Many-Body System
15:30~16:00	提问交流、课间茶歇
16:00~17:30	严 正 (西湖大学) 如何通过量子蒙卡提取自旋系统中的量子纠缠信息
17:30~18:30	讨论交流、晚餐

## 培训日程(II)

2024.06.13 (星期四)上午, 第二会议室	
08:15~08:30	签到
主持人: 杨 文 (北京计算科学研究中心)	
08:30~10:00	秦明普 (上海交通大学) 密度矩阵重正化群的介绍以及最新进展
10:00~10:30	提问交流、课间茶歇
10:30~12:00	罗 强 (南京航空航天大学) 强关联电子体系中的量子磁性、量子物质和量子材料
12:00~13:45	讨论交流、午餐午休
2024.06.13 (星期四)下午, 第二会议室	
13:45~14:00	签到
主持人: 莫崇杰 (北京计算科学研究中心)	
14:00~15:30	谢志远 (中国人民大学) 张量网络态方法及其在量子阻挫自旋系统中的应用
15:30~16:00	提问交流、课间茶歇
16:00~17:30	冉仕举 (首都师范大学) 张量网络机器学习方法及其应用
17:30~18:30	交流总结、晚餐

## 培训日程(III)

2024.06.14 (星期五)上午, 第二会议室	
主持人: 胡时杰 (北京计算科学研究中心)	
09:00~11:15 (研究生交流报告)	王宇婷 (北京邮电大学) Monte Carlo Study of an Extended Baxter-Wu Model
	何继路 (北京计算科学研究中心) 自旋 $3/2$ $J_1$ - $J_2$ -Dz 链基态相图: 二聚化和矢量手征性
	孙键豪 (北京计算科学研究中心) Stripes and the Emergence of Charge $\pi$ -phase Shifts in Isotropically Paired Systems
11:15~12:15	午餐、离会

# 培训内容

# Variational Monte Carlo Approach for Elementary Excitations in Quantum Magnets

Zheng-Xin Liu

*Renmin University of China*

**Abstract:** Quantum magnets provide a good platform to understand various quantum phases of matter. While the elementary excitations in a magnetically ordered ground states are known as magnons, geometric frustration can yield strong fluctuations in relatively ‘high energy’ excitations which are beyond the linear spin wave theory. Strong geometry frustration or spin orbital coupling in quantum magnets can yield magnetically disordered ground states including the exotic quantum spin liquid (QSL) phases. Like the band structure of electrons, the fractionalized spinon excitations in QSLs can be fully gapped, or may form a conic dispersion, or even form a fermi surface. The Variational Monte Carlo method, which is based on Gutzwiller projected wave functions in the spinon representation, provides a straightforward description of all these states. Through several examples, we will illustrate the fractionalized excitations in magnetically ordered states, field induce QSL phases and intrinsic QSLs.

## About the Speaker



Zheng-Xin Liu acquired his Ph.D. in the Hong Kong University of Science and Technology in 2010. In the following five years he worked in the Institute for Advanced Study in Tsinghua University as a post doctor and then as an associate member. He joined Renmin University of China in 2015. Dr. Liu's research area includes quantum magnetism, topological phases and symmetries in condensed matter physics. Recently, his interest is focused on quantum spin liquids in Kitaev materials and band structures of itinerant electrons in magnetically ordered systems.



# 随机序列展开的量子蒙特卡罗方法

王艳成

北京航空航天大学杭州国际创新学院

**摘要:** 这个报告将介绍量子自旋体系或者玻色系统中比较常用的量子蒙特卡罗方法—随机序列展开(Stochastic Series Expansion, SSE)算法。我们将以有向圈(directed loop)算法为例,详细给出该算法的基本思路以及程序实现。进一步,我们会结合具体模型和物理观测量展示该算法在实际量子多体计算中的应用。

## 主讲人简介



王艳成,北京航空航天大学杭州国际创新学院副教授。2013年在北京师范大学物理学取得博士学位,之后在中科院物理所从事博士后研究,2017年底加入中国矿业大学材料与物理学院,2022年6月加入北航杭州国际创新学院。主要从事量子多体系统中新奇量子相与量子相变的研究,已在 Nature Communications, Physical Review Letters, Physical Review B/E, SciPost

Physics, npj Quantum Materials 等国内外著名学术期刊上发表学术论文30余篇。主持国家自然科学基金、江苏省自然科学基金、浙江省自然科学基金等项目。主要讲授《大学物理》、《力学》等课程。

# Application of SSE on Different Quantum Many-Body System

Xue-Feng Zhang

*Chongqing University*

**Abstract:** Stochastic Series Expansion (SSE) method is widely used in various quantum many-body simulation. In this lecture, several systems will be discussed, including quantum magnetism, ultra-cold atoms, trapped ions, Rydberg array and so on.

## About the Speaker



Prof. Dr. Xue-Feng Zhang obtained a doctoral degree from the Institute of Theoretical Physics, the Chinese Academy of Sciences in 2011. Then, as a post-doc, he worked at the Technical University of Kaiserslautern and the Max-Planck Institute for the Physics of Complex Systems. Now, he is a professor at Chongqing University, China. His main research interest is focusing on the theory of quantum many-body systems, especially the topological phase of matter and ultra-cold atoms in an optical lattice.

# 如何通过量子蒙卡提取自旋系统中的量子纠缠信息

严正

西湖大学

**摘要:** 本次课程我将重点讲述路径积分形式的蒙卡如何在自旋和玻色系统中提取多体纠缠信息, 包括: 纠缠熵、纠缠谱、纠缠哈密顿量等。当然也会穿插介绍这些纠缠物理量的用途, 比如探测对称性破缺、临界行为、共形场论等。

## 主讲人简介



严正, 现任西湖大学物理系特聘研究员, 量子多体计算实验室负责人。2013 年获大连理工大学学士学位, 2019 年获得复旦大学理论物理博士学位。2019 年开始在香港大学工作, 历任博士后研究员和研究助理教授。2023 年加入西湖大学, 同年获得国家高层次青年人才项目资助。课题组主要开展量子多体理论和数值计算方向的研究, 以及与之相关的量子模拟/计算、量子材料交叉学科研究。目前发表论文约 40 篇, 大多数是 Phys. Rev. B。

# 密度矩阵重正化群的介绍以及最新进展

秦明普

上海交通大学

**摘要:** 密度矩阵重正化群方法是目前研究(准)一维量子多体系统最准确的算法。它被广泛地应用到物理学的诸多领域中。在这个报告中,我会主要介绍密度矩阵重正化群算法,包括最原始的“长点”形式以及在矩阵乘积态语言下的形式。我还会介绍我们最近关于密度矩阵重正化群算法的推广。

## 主讲人简介



秦明普, 2008年毕业于北京航空航天大学。2013年在中国科学院物理研究所获得理学博士学位。之后在威廉玛丽学院从事博士后工作。2014年至2018年同时加入Simons基金会多电子问题合作组。2019年1月加入上海交通大学物理与天文学院任长聘教轨副教授。主要研究方向为凝聚态物理中的强关联量子多体问题。专注于发展和改进强关联量子多体计算方法,包括密度矩阵重正化群,辅助场量子蒙特卡洛,张量网络态等方法。最近推广了密度矩阵重正化群方法,增加了它能够描述的纠缠,使得它能够准确处理更大的系统。在费米子负符号问题的研究中做出了一些工作,提出了自洽优化限制路径蒙特卡洛中试探波函数的方法。最近与合作者在二维Hubbard模型的研究中取得了一些成果,确定了掺杂的二维Hubbard模型在只有最近邻跃迁时的基态为条纹相,没有超导序,而引入次近邻跃迁后Hubbard模型的基态能够与铜基超导定性吻合。

# 强关联电子体系中的量子磁性、量子物质和量子材料

罗强

南京航空航天大学

**摘要:** 朗道基于对称性破缺和序参量的相变理论构筑了凝聚态物理的重要基石, 为人们研究物质形态和相变类型提供了理论指导。然而, 以 Haldane 相和 Kosterlitz-Thouless 相变为代表的新奇量子相和非常规量子临界性揭开了凝聚态物理的新面纱, 不断增进人们对相和相变的新认识。在这个报告里, 我们将首先回顾朗道范式, 并从一维自旋体系入手介绍量子磁性领域涌现出的典型现象。随后, 我们将聚焦于阻挫磁性, 并重点介绍量子自旋液体的理论、实验进展和量子多体计算结果。特别地, 报告人将介绍若干量子自旋液体候选材料, 包括三角晶格上的稀土磁性材料和蜂窝晶格上的 Kitaev 材料等, 并展示相关的大规模数值计算结果。

## 主讲人简介



罗强, 南京航空航天大学副研究员, 硕士生导师。2014 年于扬州大学获学士学位, 2019 年于中国人民大学获博士学位。2019 年~2021 年在加拿大多伦多大学从事博士后研究, 2021 年 10 月至今任职于南航物理学院。主要从事凝聚态理论中新奇量子态和非常规量子临界性方面的探索, 研究兴趣包括阻挫磁性、量子自旋液体和 Kitaev 材料等。迄今在 Phys. Rev. B/E/Res., npj

Quantum Mater. 和 Rep. Prog. Phys. 等期刊发表论文 20 余篇, 主持省部级和国家自然科学基金项目 3 项。

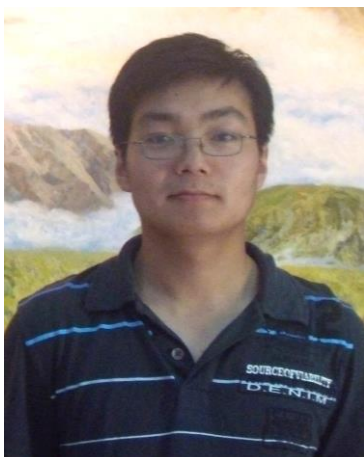
# 张量网络态方法及其在量子阻挫自旋系统中的应用

谢志远

中国人民大学

**摘要:** 报告将介绍张量网络态的基础知识, 包括投影纠缠对态的基本性质, 典型量子态的表示, 常用的基态求解方法, 投影纠缠单形态拟设与算法, 以及这些算法在阻挫自旋系统中的应用, 比如量子自旋液体、自旋轨道液体、解禁闭量子临界等系统。如果时间允许, 报告也会涉及到激发态的求解方法和应用。

## 主讲人简介



谢志远, 中国人民大学物理系教授。2007 年本科毕业于哈尔滨工业大学, 2012 年在中科院理论物理研究所获得博士学位, 2012.10~2015.09 在中科院物理所从事博士后研究工作, 2015 年 10 月至今在中国人民大学物理系工作。研究方向为理论凝聚态物理, 长期从事量子多体计算方法(尤其是数值重正化群方法)在强关联多体系统中的发展和应用。他所关注的系统, 包括低维量子

磁性系统、自旋玻璃与无序系统、具有临界性质的经典统计系统, 非常规超导微观模型等。近年来开始关注张量网络与深度学习、量子计算和材料科学之间的交叉研究领域。

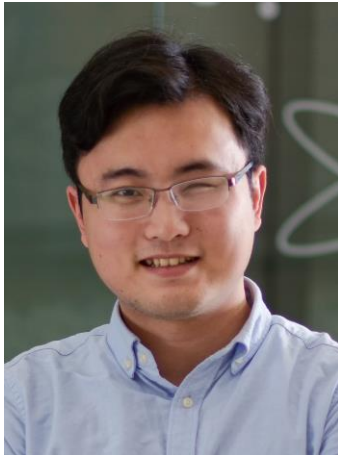
# 张量网络机器学习方法及其应用

冉仕举

首都师范大学

**摘要：**本报告将从“核函数”与“参数化模型”两个方面，介绍张量网络与机器学习的交叉研究，将着重介绍几种基于张量网络的机器学习模型与算法，以及其在量子计算模拟优化、量子多体系统数值计算等方面的应用。

## 主讲人简介



冉仕举，首都师范大学物理系教授，主要研究量子多体物理、张量网络理论与方法、量子信息与量子计算、量子机器学习等；主讲本科生专业课“电动力学”，承担研究生课程“计算物理”与“科技论文写作”；在 PRL、PRB 等发表论文 49 篇；以第一作者出版英文专著“*Tensor Network Contractions*” (Springer)；出版中文独著《张量网络》(首都师范大学出版社)，该书获批 2022 年度国家出版基金；获批国家发明专利 1 项；担任国家及北京市自然科学基金项目负责人；获英国物理学会出版社高被引奖、北京市普通高校优秀指导教师。