

大粒子数二维硬核玻色子系统的量子蒙特卡罗模拟*

许莹 李晋斌†

(南京航空航天大学理学院, 南京 211100)

(2011年8月24日收到; 2011年10月25日收到修改稿)

采用随机级数展开的量子蒙特卡罗方法研究二维硬核的玻色-赫伯德模型的热力学性质. 首先通过算符变换将模型映射成为二维反铁磁海森伯模型. 变换后的模型比通常的海森伯模型多一项, 该项正比于系统的格点总数 N , 对于大粒子数的系统, 该项使模拟耗时指数增加, 所以难以计算大粒子数系统. 采用非局域操作循环更新后, 这个困难可以得到很好的解决, 可使粒子数总数增大到几千个. 研究表明, 粒子数密度在 $0-0.5$ 范围内增大时, 能量呈递减趋势, 并趋于某一定值, 随着正方晶格系统尺度增大, 能量也随之增大; 正方晶格系统尺度一定时, 能量和磁化强度随着温度的升高而增大, 化学势的变化对能量和磁化强度没有影响, 能量随着正方晶格系统尺度增大而增大, 磁化强度却随之减小; 正方晶格系统尺度一定时, 化学势的增大对比热没有影响, 随着温度的升高比热出现先增大后减小的趋势, 最后趋于某个值, 达到平衡, 而正方晶格系统尺度越大, 比热曲线增大部分的趋势越大, 减小部分的趋势也更明显, 参照朗道超流理论, 本文模拟的能量和比热曲线趋势与朗道二流体模型下 He II 的理论研究一致; 不同正方晶格系统尺度的影响不大, 均匀磁化率倒数在 $0-0.5(J/k_B)$ 的低温范围内有很小的波动, J 为耦合能, k_B 为玻尔兹曼常数, 温度在 $0.5-2(J/k_B)$ 的范围内, 均匀磁化率的倒数随着温度的升高而增大, 且曲线的趋势显示了一种类似近藤行为.

关键词: 量子蒙特卡罗方法, 随机级数展开, 硬核玻色子, 玻色-赫伯德模型

PACS: 02.70.Ss, 02.70.Uu, 05.30.Jp, 71.10.Fd

1 引言

超流、玻色-爱因斯坦凝聚 (Bose-Einstein condensation, BEC) 现象一直是物理学家关注的热点问题 [1]. 1995 年, 科罗拉多大学 Cornell 小组 [2] 在实验室实现碱金属超冷原子凝聚. 1998 年, Jaksch 等 [3] 理论上证明了光晶格中的玻色超冷原子存在从超流到莫特绝缘态的量子相变. 2002 年, Greiner 等 [4] 在受限于光晶格的原子气体中实现了从超流到莫特绝缘态的量子相变, 实验上证实了 Jaksch 的理论预言. 此后 BEC 中的超流绝缘体相变始终是实验、理论物理学家共同关注的焦点. 2009 年, Pollet 等 [5] 证明了一般的、边界无序的玻色体系在超流和莫特绝缘体之间不存在直接的量子相变, 他们采用蠕虫量子蒙特卡罗方法, 发现任何无序势场的玻色系统在超流-绝缘临界线及其附

近都可压缩, 为今后的实验提供了理论基础. 2010 年, Bakr 等 [6] 在 ^{87}Rb 单原子层上探索了超流到莫特绝缘体的转变. 2011 年, Crepin 等 [7] 用强耦合、场论、重正化群和量子蒙特卡罗、密度矩阵方法分析和模拟了两条腿梯子几何模型上的硬核玻色子的物理行为, 发现在半满和横向小范围跳跃的情况下, 硬核玻色子会发生阶梯的莫特绝缘相变, 而自由费米子仍处于金属相变; 在粒子数半满情况之外, 硬核玻色子仍会发生以 Luttinger 液体指数 K_s 为特点的超流相变, 当密度在 $1/2-1$ 之间时会有所变化. 上述研究都以玻色-赫伯德模型为理论模型, 这是因为在窄带系统中, 粒子间存在很强的相互作用, 而以单粒子近似为基础的能带理论忽略了这种效应, 赫伯德模型包含粒子的动能项和相互作用项, 考虑这两项之间的竞争, 可以很好地解释超流-绝缘态的量子相变 [3]. 已有的关于超流和莫特绝缘相变 [7-11] 的研究大多是采用超流密度来作为判断是

* 国家自然科学基金 (批准号: 11104143) 资助的课题.

† E-mail: jinbin@nuaa.edu.cn

否出现超流和莫特绝缘相变的依据, 而另一个重要参量——能隙^[12]却少有人关注. 本文采用量子蒙特卡罗 (quantum monte carlo, QMC) 方法详细研究相变过程中与能量相关的物理性质.

2 随机级数展开 (stochastic series expansions, SSE) 方法主思想

QMC 方法自 20 世纪 80 年代早期提出之后, 一直是对多体物理系统进行数值模拟的最有效方法之一. 该方法非常适合研究有限温度下晶格的哈密顿量, 例如, 海森伯模型和赫伯德模型. 有限温度下的 QMC 可以用来估计力学量算符的期望值

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ \mathbf{A} e^{-\beta \mathbf{H}} \},$$

$$Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathbf{H}} \}. \quad (1)$$

在未知哈密顿量和本征态的情况下, 需要通过一些技巧来建立构形空间 $\{C_i\}$, 这样期望值就可以写成经典形式:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \frac{\text{Tr} \{ \mathbf{A} e^{-\beta \mathbf{H}} \}}{\text{Tr} \{ e^{-\beta \mathbf{H}} \}} \rightarrow \frac{\sum_i \mathbf{A}(C_i) W(C_i)}{\sum_i W(C_i)}, \quad (2)$$

这里 $W(C_i)$ 为期望值相关的权重函数, 构形空间的性质取决于所采用的转变. 因此对于一个已知的哈密顿量, 可以有很多不同的 QMC 方法解决问题, 只是有些方法更加有效. 为了解决各种不同的物理问题, QMC 方法发展出若干不同的针对性方法, 如 SSE 蒙特卡罗方法^[13]、路径积分蒙特卡罗方法^[14]、格林函数蒙特卡罗方法等. 其中 SSE 蒙特卡罗方法在处理存在外场和化学势情况下的量子自旋体系和玻色子体系^[15]很有成效.

SSE 方法^[16-21]的出发点是配分函数的幂级数展开, 配分函数为

$$Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathbf{H}} \}, \quad (3)$$

其中 \mathbf{H} 是系统的哈密顿量, $\beta = J/k_B T$ 是反转温度^[22], 取 k_B 为自然单位, 并以 J 为能量单位, 得到 $\beta = 1/T$. 在 SSE 方法中, 选择一组合适的希尔伯特空间矢量 $\{|\alpha\rangle\}$ 为基底 (例如 S^z 的本征基底 $\{|\alpha\rangle\} = \{|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle\}$), 因此将配分函数 Z 展开为

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | \mathbf{H}^n | \alpha \rangle. \quad (4)$$

幂级数的关联指数在统计上为

$$\langle n \rangle \propto N_s \beta, \quad (5)$$

其中 N_s 为系统中的格点或轨道的数目. 在实际计算中, 对 n 的无限求和可以处理为在有限长 $L \propto N_s \beta$ 处进行截断. L 的最适合的值可以在量子蒙特卡罗模拟的初始热平衡态阶段进行调节: 开始时选取一个相对较小的 L 的值, 然后开始 QMC 更新过程, 当超出截断长度 L 时, 更新过程暂停, L 将增加 10%—20%^[16], 然后继续更新.

引入结合相互作用, 化学势项 $\mu \cdot \mathbf{n}(1)$ 和 $\mu \cdot \mathbf{n}(2)$ 形成的结合项为 $\frac{\mu}{C} [\mathbf{n}(1) + \mathbf{n}(2)]$ (其中 1, 2 分别代表格点 1, 2), 常数 C 必须确保所有结合项的和与之前格点上的项之和相同^[16]. 假设 \mathbf{H} 是结合项 \mathbf{H}_b 的有限求和, 因此 (4) 式中的算符 \mathbf{H}^n 可以表示为 $\prod_{i=1}^n \mathbf{H}_{a_i, b_i}$, 其中, $a_i \in \{1, 2\}$, 1 为对角元, 2 为非对角元; $b_i \in \{1, \dots, L\}$, 代表结合索引序号. 将算符 \mathbf{H}^n 在 $n = L$ 处截断, 并插入单位算符 $\mathbf{H}_{0,0} = 1$, 将配分函数重新写为

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{\{S_L\}} \frac{\beta^n (L-n)!}{L!} \left\langle \alpha \left| \prod_{i=1}^L (-\mathbf{H}_{a_i, b_i}) \right| \alpha \right\rangle, \quad (6)$$

其中, S_L 表示引入算符索引序列

$$S_L = [a_1, b_1]_1, [a_2, b_2]_2, \dots, [a_L, b_L]_L. \quad (7)$$

定义传播态

$$|\alpha(l)\rangle = \prod_{i=1}^l \mathbf{H}_{a_i, b_i} |\alpha\rangle, \quad (8)$$

对于两个自旋

$$|\alpha(l)\rangle = |S_{i(l)}^z, S_{j(l)}^z\rangle, \quad (9)$$

N_b 为晶格中结合相互作用的总数, 在对角元更新中, 细致平衡条件下的接受率为

$$P([0, 0]_l \rightarrow [1, b]_l) = \frac{N_b \beta \langle \alpha(l) | \mathbf{H}_{1,b} | \alpha(l) \rangle}{L - n}, \quad (10)$$

$$P([1, b]_l \rightarrow [0, 0]_l) = \frac{L - n + 1}{N_b \beta \langle \alpha(l) | \mathbf{H}_{1,b} | \alpha(l) \rangle}. \quad (11)$$

3 硬核的玻色 - 赫伯德模型

考虑格点上最近邻相互作用为排斥的玻色 - 赫伯德模型^[9,23,24], 其哈密顿量可以表示为

$$\mathbf{H}_{\text{BH}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) - \sum_i \mu n_i$$

$$+ \sum_i V_1 n_i (n_i - 1) + V_2 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (12)$$

其中 $\langle i, j \rangle$ 表示最近邻格点, \mathbf{a}_i^\dagger (\mathbf{a}_i) 分别代表在格点 i 上产生 (湮没) 一个玻色子, μ 代表单个格点上的化学势, $\mathbf{n}_i = \rho_i \equiv \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i$ 为格点 i 上的粒子数 (密度) 算符, t 表示玻色粒子在邻近的格点间的跳跃长度, V_1 为格点上的排斥作用, V_2 为邻近格点的排斥作用. 只考虑同位排斥时 $V_2 = 0, V_1 \rightarrow \infty$ 给玻色-赫伯德模型加上了硬核的条件限制, 即要求格点上的玻色子个数只能是 0 或者 1, 且 $\mathbf{n}_i = \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i$, 则哈密顿量^[24]

$$\mathbf{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_j + \mathbf{a}_j^\dagger \mathbf{a}_i) - \mu \sum_i n_i. \quad (13)$$

本文考虑格点数为 $L \times L$ 的二维硬核的玻色子系统, 计算机模拟中取 t 为能量标度 1.

为了简单表示硬核约束的条件, 将系统映射到二维反铁磁海森伯模型上, 取 $\mathbf{a}_i^\dagger \leftrightarrow \mathbf{S}_i^+, \mathbf{a}_i \leftrightarrow \mathbf{S}_i^-,$ 以及 $\mathbf{n}_i \leftrightarrow \mathbf{S}_i^z + 1/2$, 映射后的硬核的玻色-赫伯德模型的哈密顿量为

$$\mathbf{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_j^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_j^+) - \mu \sum_i \mathbf{S}_i^z - \frac{\mu}{2} N. \quad (14)$$

写成对角元和非对角元的形式为

$$\mathbf{H} = t \sum_{b=1}^L (\mathbf{H}_{1,b} - \mathbf{H}_{2,b}), \quad (15)$$

其中 $\mathbf{H}_{1,b}$ 是对角元, $\mathbf{H}_{2,b}$ 是非对角元,

$$\mathbf{H}_{1,b} = -C - \frac{\mu}{tC} (\mathbf{S}_i^z + \mathbf{S}_j^z) - \frac{\mu}{2tC} N, \quad (16)$$

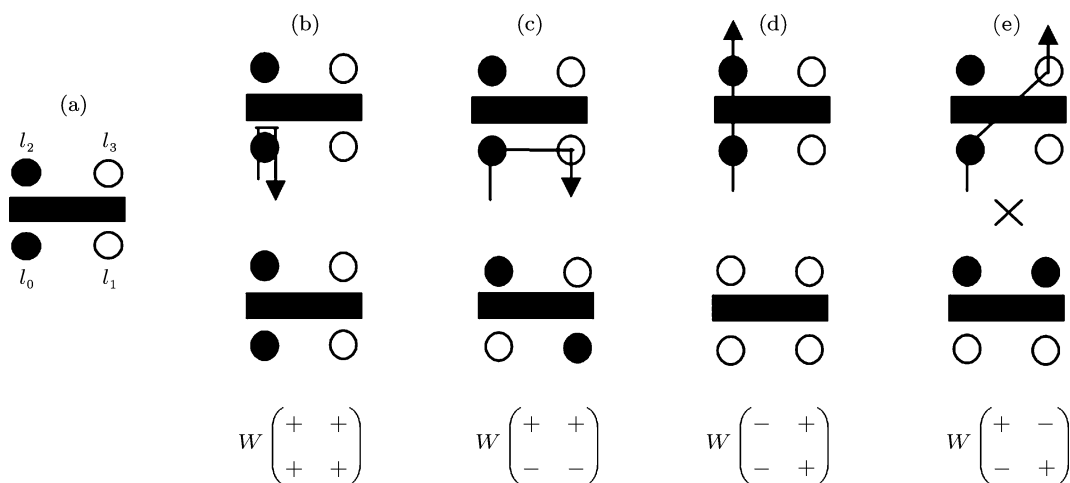


图 2 进入腿为 l_0 , 离开腿分别为 l_0, l_1, l_2, l_3 四种情况示意图 (a) 选定的顶角; (b) 反弹过程; (c) 反转过程; (d) 直线过程; (e) 跳跃过程

$$\mathbf{H}_{2,b} = -(\mathbf{S}_i^+ \mathbf{S}_i^- + \mathbf{S}_i^- \mathbf{S}_i^+). \quad (17)$$

反铁磁的海森伯模型要求 (14) 式中的求和号前面的系数小于 0, 在计算机模拟中取 t 为 1, 因此需要做一些处理. 在对角元中加入负的常数 C , 确保每一个矩阵元都小于或等于 0, 这些处理技巧并未改变系统的物理性质. 系统的矩阵元共有六种情况:

$$\begin{aligned} \langle \downarrow\downarrow | \mathbf{H}_{1,b} | \downarrow\downarrow \rangle &= -C - \mu/C + \mu N/(2C), \\ \langle \uparrow\uparrow | \mathbf{H}_{1,b} | \uparrow\uparrow \rangle &= -C - \mu/C - \mu N/(2C), \\ \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{H}_{1,b} | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{H}_{1,b} | \uparrow\downarrow \rangle \\ &= -C - \mu N/(2C), \\ \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{H}_{2,b} | \uparrow\downarrow \rangle &= \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{H}_{2,b} | \downarrow\uparrow \rangle = -1/2. \end{aligned} \quad (18)$$

图 1 中的六种顶角分别对应着系统的六种矩阵元. 其中, 空心的圆环表示自旋向下, 实心的圆环表示自旋向上, 单杠表示整个的结合算符 \mathbf{H}_b , 单杠下 (上) 方的圆环表示对角元或非对角元算符作用之前 (后) 的自旋态.

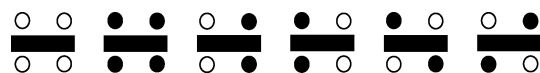


图 1 分别对应六种矩阵元的六种顶角的示意图

SSE 方法的模拟过程包括对角元更新和非对角元更新两个过程. 在对角元更新过程中, 对角算符和单位算符之间的置换遵守 (10) 和 (11) 式的概率公式. 在非对角元更新中, 顶角的路径选择有多种情况, 对应一个固定的进入腿, 离开腿的选择有四种情况, 随机选择进入腿的情况下, 进入腿和离开腿有若干种随机组合.

选择一种顶角的类型, 进入腿和离开腿的示意图如图 2 所示, 其中第一行的图是更新前顶角的状态, 第二行是更新后的状态. 图 2(b)—(c) 分别称为反弹过程、反转过程、直线过程和跳跃过程, 图 2(e) 的情况不会发生, 因为跳跃过程发生后对应的矩阵元不存在.

非对角元更新即为循环的建立, 经过对角元的更新, 顶角的类型已经确定, 通过非对角元更新, 将这些已经确定好的顶角按照一定的路径连接起来. 在进行计算机模拟时, 每一种过程都有可能发生, 因此路径的选择具有一定的随机性. 正方晶格系统尺度的大小会影响 n 达到平衡时的值, 随着系统尺

度的增加, n 会有所增加, 达到细致平衡的时间就会随之增加. 同时, 由于系统尺度的增加, 可选择路径的情况增加, 于是过程变得复杂, 导致计算机模拟时间指数增加.

随机选择一个顶角的任意一个腿为进入腿, 通过比较概率的范围选择一个离开腿进入到下一个顶角中, 直到最后一个离开腿和第一个进入腿重合时, 循环结束. 若进入腿和离开腿不同, 这两个腿上的自旋态将发生改变, 本文中取的自旋态为 $\pm 1/2$, 即原来为 $1/2$ 的自旋态变为 $-1/2$, $-1/2$ 的自旋态变为 $1/2$. 例如进入腿为 l_0 , 离开腿为 l_1 的过程发生的概率可以表示为

$$P_{l_1, l_0} = \frac{W \begin{pmatrix} + + \\ - - \end{pmatrix}}{W \begin{pmatrix} + + \\ + + \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} + + \\ - - \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} - + \\ - + \end{pmatrix} + W \begin{pmatrix} + - \\ - + \end{pmatrix}}, \quad (19)$$

$$W \begin{pmatrix} f_3, f_4 \\ f_1, f_2 \end{pmatrix} (p) = \langle f_3 S_i^z(p), f_4 S_j^z(p) | \mathbf{H}_b | f_1 S_i^z(p-1), f_2 S_j^z(p-1) \rangle, \quad (20)$$

其中, \pm 号代表 ± 1 , $+$ 号表示算符作用后的态未发生变化, $-$ 号表示算符作用后的态发生了变化.

实际的计算模拟中, 反弹过程经常发生, 而反弹过程对系统不产生变化, 可以通过改变矩阵元的值来减少或去除反弹过程. 如果每一个结合作用上的所有矩阵元都相等, 或者可以将对角矩阵元的值做一个合适变化, 这些作用在不影响细致平衡的条件下, 反弹过程会受到压制.

4 计算结果与分析

整个计算机的模拟过程如下.

步骤 1 取 100 个 $L \times L$ 的单元, 对系统进行预热, 预热步数为 10^6 次. 在预热阶段, 需要进行对角元更新和非对角元更新. 对角元更新通过 (10) 和 (11) 式达到平衡, 平衡后所有顶角的类型已经确立, 接着进行非对角元更新, 非对角元更新将这些已经确定类型的顶角连接起来. 每个顶角有四个腿, 计算机随机选择一个顶角的任意一个腿作为第一个进入腿. 再根据 (19) 式定义的概率选择离开腿, 直到第二次到达第一个进入腿时, 循环结束, 然后重新选择进入腿. 经过非对角元更新, 除了反弹过

程, 原来的顶角的类型会发生变化, 计算机会记录下这些变化, 变化后的态将代替之前的态, 循环的过程中, 态也会一直变化.

步骤 2 在预热阶段之后进行正式计算, 取计算步数为 5×10^5 次. 首先要对需要计算的量进行清零, 然后经过对角元更新到非对角元更新, 更新的过程和预热阶段一样, 但是会将需要记录的量做好记录.

步骤 3 对记录的物理量求两次平均, 先对计算的循环次数求平均, 再对选取的 100 个单元求平均, 得到最终的结果.

本文研究了不同正方晶格系统尺度 ($L = 4, 6, 8$) 的系统, 研究的物理量为

$$E = -\frac{1}{N\beta} \langle \mathbf{n} \rangle, \quad (21)$$

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i^z \rangle, \quad (22)$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} \left\langle \left(\sum_{i=1}^N S_i^z \right)^2 \right\rangle, \quad (23)$$

$$C = \frac{\langle \mathbf{n}^2 \rangle - \langle \mathbf{n} \rangle^2 - \langle \mathbf{n} \rangle}{N}. \quad (24)$$

4.1 能量与粒子数密度之间的关系

图 3 为不同尺度正方晶格系统粒子数密度与能量的关系. 正方晶格系统尺度分别为 $L = 4, 6, 8$ 的系统, 粒子数密度的变化范围为 $0-0.5$, 能量以 J 为单位. 从图 3 中可以看出, 随着正方晶格系统尺度的增加, 系统的能量有所增加. 正方晶格系统尺度一定时, 随着粒子数密度的增加, 能量呈递减趋势, 最终趋于某个定值, 达到平衡. 本文结果与文献 [24] 中图 1 的结果一致. 表明本文的计算方法和模拟过程正确.

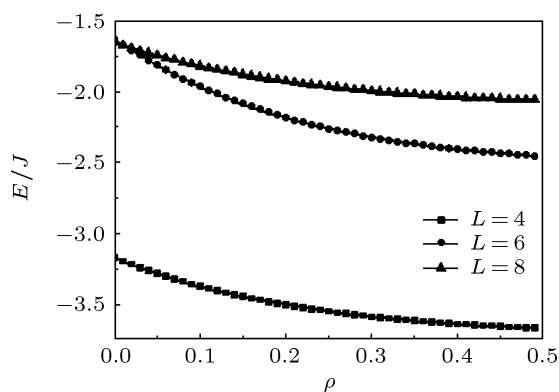


图 3 不同尺度的正方晶格系统, 粒子数密度与能量的关系

4.2 物理量与温度之间的关系

能量是本文主要关注的物理量, 除此之外还研究了磁化强度和均匀磁化率. 计算了正方晶格系统尺度一定时 ($L = 4$), 化学势 $\mu = 0.5, 1, 1.5, 2$ 时, 物理量 (能量、比热、磁化强度、磁化率) 与温度的关系, 以及固定化学势 $\mu = -1$, 计算了不同的正方晶格系统尺度 ($L = 4, 6, 8$) 对上述物理量的影响.

4.2.1 能量与温度的关系

图 4 为 $L = 4$ 时, 温度与能量的关系. 从图 4 中可以看出, 当 μ 从 -2 变化到 -0.5 时, 能量曲线重合成一条曲线. 说明对于系统尺度一定的正方晶格, 温度一定时, 化学势的改变对能量没有影响; 而化学势一定时, 随着温度的升高, 能量随之升高, 并且在高温区能量逐渐接近于某个值, 达到平衡.

图 5 为不同正方晶格系统尺度时, 温度与能量的关系. 从图 5 可以看出, 相同的温度下, 随着正方晶格系统尺度的增加, 能量呈现出一定范围的增加; 而随着温度的增加, 不同的正方晶格系统尺度的系统都呈现出能量增加的趋势, 且趋势一致. 这是因为在温度足够高时, 量子效应减弱到可以忽略, 系

统可以看成经典系统.

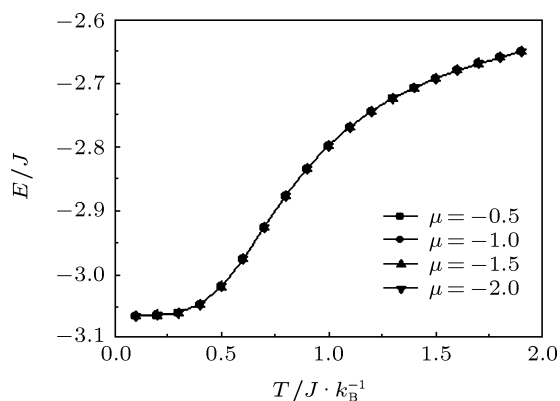


图 4 $L = 4$ 时, 温度与能量的关系

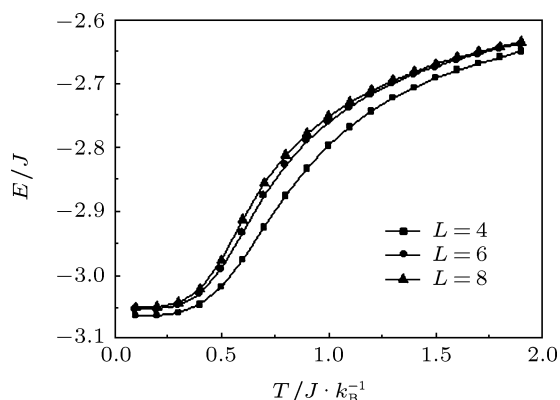


图 5 不同尺度的正方晶格系统, 温度与能量的关系

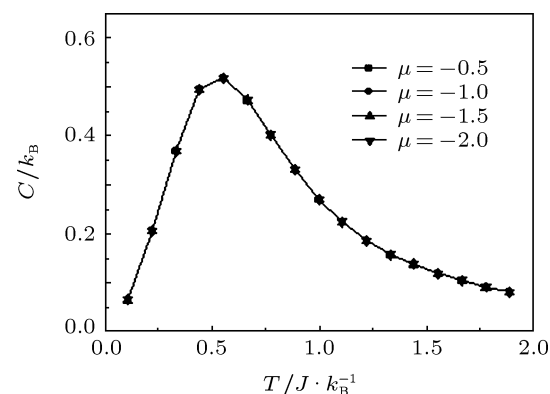


图 6 $L = 4$ 时, 温度与比热的关系

4.2.2 比热与温度的关系

图 6 为 $L = 4$ 时, 温度与比热的关系. 从图 6 中可以看出, 随着化学势的增大, 比热曲线和能量曲线一样, 重合成一条曲线, 可见化学势的改变对比热没有影响, 而随着温度的升高, 比热呈先增大后减小的趋势, 最后趋于某个值, 达到平衡.

图 7 为不同尺度的正方晶格系统, 温度与比热的关系. 从图 7 中可以看出, 对于不同正方晶格系统尺度, 系统比热都呈先增大后减小的趋势, 系统尺度越大, 比热曲线增大和减小的趋势越明显. 可以看出, 比热增大的趋势较快, 而减小的趋势较慢, 比热变化的趋势接近于朗道超流理论中的 λ 相变, 并且系统尺度越大, 趋势越接近.

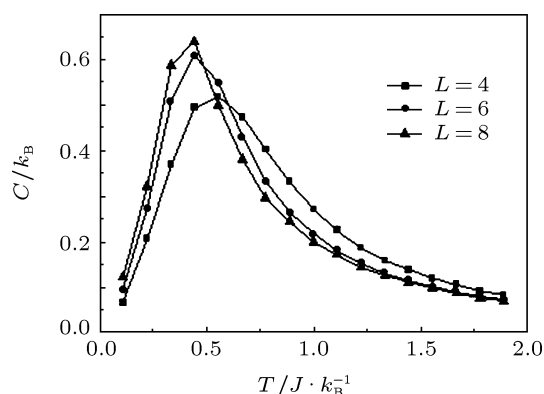


图 7 不同尺度的正方晶格系统, 温度与比热的关系

参照朗道超流理论^[12], 在 He II 中存在两种不同的元激发, 即声子和旋子, 它们都是玻色子. 在低温下, 热力学函数可表示为声子部分和旋子部分之和. 当 $T < 0.5$ K 时, 声子部分起主要作用; 当 $T > 1$ K 时, 主要贡献来自于旋子部分. 声子部分的内能和比热表示为

$$E_{\text{ph}} = \frac{4}{15} \pi^5 V k_B T \left(\frac{k_B T}{h u_1} \right)^3, \quad (25)$$

$$(C_V)_{\text{ph}} = \frac{16}{15} \pi^5 V k_B T \left(\frac{k_B T}{h u_1} \right)^3. \quad (26)$$

旋子部分的内能和比热为

$$E_r = \bar{N}_r \left(\Delta + \frac{1}{2} k_B T \right), \quad (27)$$

$$(C_V)_r = \bar{N}_r k_B \left\{ \frac{3}{4} + \frac{\Delta}{k_B T} + \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^2 \right\}. \quad (28)$$

从 (25) 和 (27) 式可以看出, 声子部分和旋子部分的内能都会随着温度的升高而升高, 图 4 和图 5 中能量曲线的变化和朗道模型的理论结果基本一致. (26) 式中声子部分的比热也随着温度的升高而升高, 且正比于温度的三次方, 而 (28) 式中比热与温度的关系呈反比, 温度的影响最大为二次方, 因此比热增大得较快的曲线减小得较慢.

4.2.3 磁化强度与温度的关系

图 8 为 $L = 4$ 时, 温度与磁化强度的关系. 从图 8 中可以看出, 随着化学势的增大, 磁化强度曲线也重合成一条曲线, 说明对于系统尺度一定的正方晶格, 温度一定时, 化学势的改变对磁化强度没有影响; 而化学势一定时, 随着温度的升高, 磁化强度也同时升高, 并且在高温区磁化强度逐渐接近于某个值, 达到平衡.

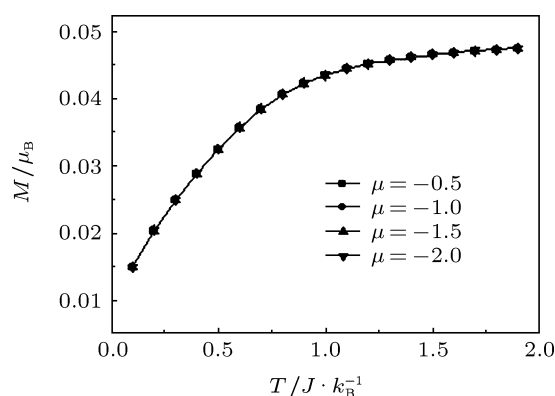


图 8 $L = 4$ 时, 温度与磁化强度的关系

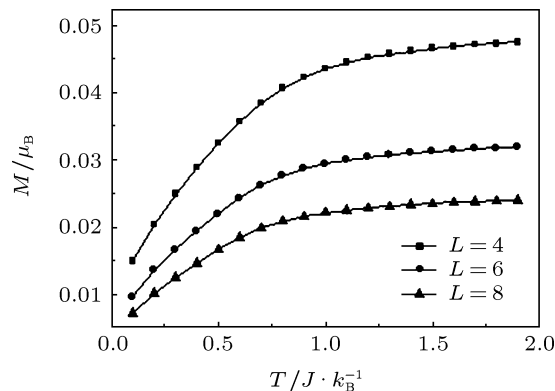


图 9 不同尺度的正方晶格系统, 温度与磁化强度的关系

图 9 为不同的正方晶格系统尺度, 温度与磁化强度的关系. 从图 9 中可以看出, 同一温度情况下, 系统尺度增大, 系统的磁化强度却随之减小; 而随着温度增大, 不同的正方晶格系统尺度的系统都呈现出磁化强度增加的趋势, 且趋势一致. 由于反铁磁性为弱磁性, 所以磁化强度值比较小. 在低温区, 磁化强度值接近于零. 这是因为, 在极低温度下, 相邻原子的自旋取向完全相反, 其磁矩几乎抵消, 磁化强度几乎接近于 0, 当温度升高时, 自旋反向的作用减弱, 磁化强度增加. 在高温区, 磁化强度随温度的变化比较缓慢, 这是由于此时的热骚动影响

较大.

以上研究表明, 系统的能量和磁化强度的曲线随温度的增大而增大, 并趋于某一固定的值, 曲线的趋势和各向同性的反铁磁海森伯模型一致, 和预计结果基本相同, 研究结果与参考文献 [21] 中结果基本一致. 本文研究二维玻色 - 赫伯德模型时, 将其哈密顿量经过 $\mathbf{a}_i^\dagger \leftrightarrow \mathbf{S}_i^+$, $\mathbf{a}_i \leftrightarrow \mathbf{S}_i^-$, 以及 $\mathbf{n}_i \leftrightarrow \mathbf{S}_i^z + 1/2$ 的变换, 映射到二维海森伯模型中, 映射后的哈密顿量 (14) 式具有与海森伯模型哈密顿量相似的表示形式, 且本文处理两个模型的方法相同, 因此处理后的玻色 - 赫伯德模型与海森伯模型有相似的性质.

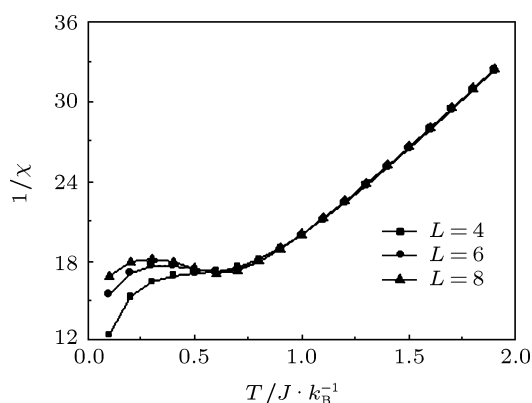


图 10 不同尺度的正方晶格系统, 温度与均匀磁化率的关系

4.2.4 均匀磁化率与温度的关系

图 10 为不同尺度的正方晶格系统, 温度与均匀磁化率的关系. 均匀磁化率是一个无量纲的常数. 从图 10 中可以看出, 对于不同的正方晶格系统尺度, 均匀磁化率的倒数随温度的升高基本呈增大的趋势, 除了低温区域里有些很小的波动, 在高温区域, 均匀磁化率的倒数趋于一致, 正方晶格系统尺度的影响几乎为 0, 这显示了某种材料自身的性质. 这与参考文献 [25] 中的图 13. 3.7 有相同的趋势, 特别当 $L = 8$ 时, 与 CeAl_3 [25] 曲线的趋势几乎一致, 显示了一种类似近藤行为. 近藤效应 [23, 26] 中电阻极小是由于频繁的自旋翻转散射 [25], 而 SSE 方法中通过对角元更新, 所有的顶角通过随机数的比较连接起来, 同时格点上的自旋态在连接过程中也不停地翻转, 与电阻极小的物理机理有相似之处, 因此本文的结果类似于近藤效应.

5 结论

本文详细介绍了 SSE QMC 方法的主要思想和计算机模拟过程, 并运用 SSE QMC 方法以及处理多粒子情况的一些技巧, 基于二维硬核玻色 - 赫伯德模型, 研究了相变过程中与能量相关的物理性质.

本文分别研究了正方晶格系统尺度为 $L = 4, 6, 8$ 的系统, 粒子数密度的变化范围为 $0-0.5$, 温度的变化范围为 $0-2(J/k_B)$. 从物理量与温度的研究结果可以看出, 正方晶格系统尺度一定时, 能量和磁化强度随温度的升高而增大, 化学势的变化对能量和磁化强度没有影响. 能量随着正方晶格系统尺度增大而增大, 磁化强度却随之减小, 说明二维硬核的玻色 - 赫伯德模型和各向同性的二维反铁磁海森伯模型有相似的热力学性质. 正方晶格系统尺度一定时, 化学势的增大对比热同样没有影响, 比热随着温度的升高出现先增大后减小的趋势, 最后趋于某个值, 达到平衡. 正方晶格系统尺度越大, 比热曲线增大部分和减小部分趋势也越明显. 参照朗道超流理论, 本文模拟的能量和比热曲线的趋势与朗道二流体模型下 He II 的理论研究一致. 同时, 不同的正方晶格系统尺度对均匀磁化率倒数的影响不大, 均匀磁化率的倒数在温度 $0-0.5(J/k_B)$ 范围内有很小的波动, 在 $0.5-2(J/k_B)$ 温度范围内随温度的升高而增大. 磁化率的研究数据证明本文研究的玻色 - 赫伯德模型具有类似近藤效应的行为, 说明 SSE 蒙特卡罗方法可以模拟出频繁的自旋翻转散射这个造成电阻极小的物理机理. 能量与粒子数的研究表明, 粒子数密度在 $0-0.5$ 范围内增大时, 能量呈递减趋势, 并趋于某一定值, 随着正方晶格系统尺度增大, 能量增大.

本文计算的最大系统为 8×8 的正方晶格, 对于更大的系统, 正方晶格系统尺度达到上千, 本文所介绍的方法同样适用. 当然, 随着研究系统的增大, 过程的复杂性增加, 计算机模拟的时间也会增加.

感谢美国加州州立大学 Northridge 分校的赵继泽老师在课题研究遇到困难、停滞不前时提供的启发性讨论和建设性意见, 同时感谢周琼在课题研究过程中给予的有价值的讨论.

- [1] Leggett A J 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 307
- [2] Anderson M H, Ensher J R, Mathews M R, Weiman C E, Cornell E A 1995 *Science* **269** 198
- [3] Jaksch D, Bruder C, Cirac J I, Gardiner C W, Zoller P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3108
- [4] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, Hänsch T W, Bloch I 2002 *Nature* **415** 39
- [5] Pollet L, Prokof'ev N V, Svistunov B V, Troyer M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 140402
- [6] Bakr W S, Peng A, Tai M E, Ma R, Simon J, Gillen J I, Folling S, Pollet L, Greiner M 2010 *Science* **329** 547
- [7] Crepin F, Lafforencie N, Roux G, Simon P 2011 *Phys. Rev. B* **84** 054517
- [8] Lafforencie N, Mila F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 037203
- [9] Jordan J, Orús R, Vidal G 2009 *Phys. Rev. B* **79** 174515
- [10] Hen I, Rigol M 2009 *Phys. Rev. B* **80** 134508
- [11] Fisher M P A, Weichman P B, Grinstein G, Fisher D S 1989 *Phys. Rev. B* **40** 546
- [12] Beijing University Physics Department "Quantum Statistical Physics" 1987 *Quantum Statistical Physics* (Beijing: Beijing University Press) pp232–240 (in Chinese) [北京大学物理系〈量子统计物理学〉编写组 1987 量子统计物理学 (北京: 北京大学出版社) 第 232—240 页]
- [13] Landau D P, Binder K 2008 *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (2nd Ed.) (Beijing: BookWorld Publications) pp277–312
- [14] Zhao X W, Cheng X L, Zhang H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 482 (in Chinese) [赵杏文, 程新路, 张红 2010 物理学报 **59** 482]
- [15] Zhou L, Liu Z J, Yan W B, Mu Z J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 074205
- [16] Dorneich A, Troyer M 2001 *Phys. Rev. E* **64** 066701
- [17] Sylljuasen O F, Sandvik A W 2002 *Phys. Rev. E* **66** 046701
- [18] Zyubin M V, Kashurnikov V A 2004 *Phys. Rev. E* **69** 036701
- [19] Kawashima N, Gubernatis J E, Evertz H G 1994 *Phys. Rev. B* **50** 136
- [20] Alet F, Wessel S, Troyer M 2005 *Phys. Rev. E* **71** 036706
- [21] Zhou Q, Li J B 2011 *Journal of Guangxi University* (Nat. Sci. Ed.) **36** 334 (in Chinese) [周琼, 李晋斌 2011 广西大学学报 (自然科学版) **36** 334]
- [22] Wang Z C 2005 *Thermodynamics and Statistical Physics* (Beijing: Higher Education Press) pp248–286 (in Chinese) [汪志诚 2005 热力学统计物理 (北京: 高等教育出版社) 第 248—286 页]
- [23] Li Z Z 1985 *Solid State Theory* (Beijing: Higher Education Press) pp390–402 (in Chinese) [李中正 1985 固体理论 (北京: 高等教育出版社) 第 390—402 页]
- [24] Bernardet K, Batrouni G G, Meunier J L, Schmid G, Troyer M, Dorneich A 2002 *Phys. Rev. B* **65** 104519
- [25] Feng D, Jin G J 2003 *Condensed Matter Physics* (Vol. 1) (Beijing: Higher Education Press) pp381–417 (in Chinese) [冯端, 金国钧 2003 凝聚态物理学 (上卷) (北京: 高等教育出版社) 第 387—417 页]
- [26] Jiang Z T 2010 *Chin. Phys. B* **19** 077307

Simulation of two-dimensional many-particle hardcore bosons by using the quantum Monte Carlo method*

Xu Ying Li Jin-Bin[†]

(College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211100, China)

(Received 24 August 2011; revised manuscript received 25 October 2011)

Abstract

In this paper, the stochastic series expansion quantum Monte Carlo method is employed to investigate the thermodynamic properties of hardcore Bose-Hubbard model in two-dimensional space. The two-dimensional hardcore Bose-Hubbard model can be mapped into the two-dimensional antiferromagnetic quasi-Heisenberg model under transform of bosonic operators. There is an additional term which is proportional to the total number of sites compared with real Heisenberg model and it is difficult for simulation. Using a nonlocal “operator-loop update”, it allows one to simulate thousands of sites. Our simulation results show that, first, energy decreases with the increase of density of particles in a range from 0 to 0.5, and finally approaches to a fixed value. Moreover, with the size of square lattice increasing, energy also increases. Second, when we fix the system size, energy and magnetization increase with temperature, but not with of chemical potential. When we increase the system size, energy increases, while, the magnetization decreases. Third, specific heat is independent of chemical potential, but it dramatically increases with temperature and approaches to a peak, then decreases slowly. According to Landau theory of superfluidity, the tends of curve for energy and specific heat fit the research of He II in the Landau two-fluid model. Fourth, different square lattice linear system sizes have a little influence on tiny differences to the reciprocal of uniform susceptibility. There are small fluctuations in a range from 0 to $0.5(J/k_B)$, where J is the coupling energy, k_B is the Boltzmann constant, but the reciprocal of uniform susceptibility increases with temperature increasing in a range from 0.5 to $2(J/k_B)$. The tends of curve are similar to those of Kondo effect.

Keywords: quantum Monte Carlo method, stochastic series expansions, hardcore Boson, Bose-Hubbard model

PACS: 02.70.Ss, 02.70.Uu, 05.30.Jp, 71.10.Fd

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.11104143).

[†] E-mail: jinbin@nuaa.edu.cn