

三腿梯子上硬核玻色-哈伯德模型的量子蒙特卡罗研究

冯乐, 张万舟

(太原理工大学 物理与光电工程学院, 太原 030024)

摘要:运用集团平均场和密度矩阵重整化群方法得到三腿梯子上玻色-哈伯德模型基于 z 方向密度交错排布的超固体相,比单层三角晶格多一种超固体.然而平均场超流序参量没有考虑超流的方向,这种超固体的本质有待于进一步探索.本文运用可靠的有向圈随机序列展开量子蒙特卡罗方法模拟了三腿梯子上硬核玻色-哈伯德模型,通过测量层内和层间的结构因子和超流刚度,发现系统具有密度 $\rho=1/2$ 的固体,增加量子隧穿后, z 方向不存在超固体.计算结果有助于冷原子实验寻找新的量子相.

关键词:量子蒙特卡罗方法;超固体;三腿梯子;玻色-哈伯德模型

中图分类号:O413

文献标志码:A

自然界中微观粒子分为玻色子和费米子.玻色子在光学晶格上可以实现玻色-爱因斯坦凝聚,并且存在丰富的量子相,如超流相和超固体相.超固体是一种同时具有对角长程序和非对角长程序的相,对角长程序也可以称为晶体序.杨振宁先生在 1962 年首先提出非对角长程序这一概念^[1].非对角长程序是量子效应的体现.1969 年,物理学家 Adree 和 Lifshits 提出玻色-爱因斯坦凝聚体中的空位使固体具有了超流特性^[2].近年来,激光冷却实验技术^[3]以及高级数值方法的快速发展激发了人们对超固体的研究兴趣.

对于软核玻色子系统,超固体相是通过在固体相中掺杂玻色子(空位)^[4-7],即“空位凝聚”机制形成的.然而对于存在最近邻排斥作用的硬核玻色子,在正方晶格^[6,8-9],六角晶格^[7],kagome^[10]晶格,star^[11]晶格和 Shastry-Sutherland^[12]晶格中并没有超固体相.超固体相在这些晶格^[6,9]中不稳定,容易发生相分离.但是,在引入几何阻挫^[13-15]后,系统容易形成稳定的超固体相.比如,人们在单层三角晶格上的硬核玻色子系统中发现了超固体.在半填充附近,系统同时具有对角长程序和非对角长程序.次近邻相互作用^[16]诱导出的阻挫也会促进超固体的形成.此外,各向异性对超固体相有着很重要的作用^[17-18].人们观察到很多新奇的超固体,比如在双层晶格上的配对超固体相^[19],在三角晶格中配对隧穿超固体相^[20-21], f 波超固体相^[22]和分子超固体相^[23].

最近,文献^[24]将集团平均场和密度矩阵重整化群方法^[25]结合起来,研究多层三角晶格上硬核玻色-哈伯德模型,发现 z 方向密度交错排布的密度为 $1/2$ 的固体相,以及基于该固体相的超固体相.文中平均场序参量 $\langle a_i^+ \rangle$ 不能考虑超流刚度的方向,因此这种超固体的本质有待于进一步检验.

本文用量子蒙特卡罗方法^[26-28]研究了三腿梯子上硬核玻色-哈伯德模型,通过测量 z 方向结构因子和超流刚度,发现 z 方向存在密度为 $1/2$ 的固体相,但是不存在超固体.

1 模型和观测量

硬核玻色-哈伯德模型的哈密顿量:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t(a_i^+ a_j + h. c.) + \sum_{\langle i,j \rangle} V n_i n_j - \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

收稿日期:2016-11-20;修回日期:2017-01-01.

基金项目:国家自然科学基金(11305113)

作者简介(通信作者):张万舟(1982-),男,安徽六安人,太原理工大学副教授,博士,主要从事蒙特卡罗模拟关联量子系统的研究,E-mail:zhangwanzhou@tyut.edu.cn.

其中, $\langle i, j \rangle$ 表示最近邻格点, a_i^+ (a_i) 是一个玻色子在格点 i 的产生(湮灭)算符, t 是隧穿参数, V 是排斥相互作用, μ 为化学势和 n_i 为每个格点玻色子占据数, 其值为 0 或 1.

当层间耦合等于 0, 模型的哈密顿量公式(1)简化为在单层 3 格点上的硬核玻色-哈伯德模型. 如果拓展 3 格点到三角晶格, 系统存在超固体^[13]. 在相图中超固体的四周是在弱耦合区域的超流相和在强耦合区域密度为 1/3 和 2/3 的固体相^[13]. 当每层格点不考虑层内耦合(隧穿和排斥相互作用), 只考虑层间耦合, 则模型简化为一维玻色-哈伯德模型, 不存在超固体.

图 1 给出经典极限 $t = 0$ 时所有可能的固体相. $\mu/V < 0$, 系统为空相; $0 < \mu/V < 1$ 和 $3 < \mu/V < 5$, 系统分别为 $\rho = 1/3$ 和 $2/3$ 的固体相, 玻色子在 z 方向每层的占据数分别为 11111111... 和 22222222...; 在这两个固体相之间系统为 $\rho = 1/2$ 的固体相, 其中 $\rho = (\sum_i^N n_i)/N$, N 为总格点数, 玻色子在 z 方向每层的占据数为 21212121... . 为了和文献[24] 结果进行对比, 本文也将 xy 平面内的晶格格点数限定为 3, z 方向的层数为 L_z .

定义结构因子 $S^{xy}(\mathbf{Q})$ 和 $S^z(\mathbf{Q})$ 来区分 xy 平面和 z 方向不同的固体序. xy 平面上的结构因子

$$\frac{1}{3} S^{xy}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{L_z} \sum_{j=1}^{L_z} \langle \rho_{xy}^j(\mathbf{Q}) \rho_{xy}^{j+}(\mathbf{Q}) \rangle, \quad (2)$$

其中 $\rho_{xy}^j(\mathbf{Q}) = \frac{1}{3} \sum_i n_i^j \exp(i\mathbf{Q}r_i^j)$ 和 $\mathbf{Q} = (4\pi/3, 0, 0)$, j 为层指标, 公式(2) 左侧“3”代表每层为 3 个格点, “1/3”表示将结构因子归一化, 公式(2) 右侧“1/ L_z ”指的是结构因子对每一层求平均. z 方向上的结构因子

$$S^z(\mathbf{Q})/N = \langle \rho_z(\mathbf{Q}) \rho_z^+(\mathbf{Q}) \rangle, \quad (3)$$

其中 $\rho_z(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N} \sum_i n_i \exp(i\mathbf{Q}r_i)$ 和 $\mathbf{Q} = (0, 0, \pi)$, 也可以用相邻 2 层格点上玻色子的密度差来定义 z 方向上的固体序^[24]. xy 平面和 z 方向的超流刚度分别定义为

$$\rho_{xy}^S = 3 \langle W_{xy}^2 \rangle / 2t\beta, \quad (4a)$$

$$\rho_z^S = L_z \langle W_z^2 \rangle / 2t\beta, \quad (4b)$$

其中 W_{xy} 和 W_z 分别表示 xy 方向和 z 方向上的缠绕数, 公式(4a) 中“3”表示 xy 平面内 3 个格点看成一个长度为 3 格点的周期链. 值得注意的是 xy 平面限定为 3 格点, 尽管此时 ρ_{xy}^S 不能判断 xy 平面是否具有超流序, 但可以作为参考.

2 量子蒙特卡罗方法

本文出发点是哈密顿量 H , 并将其代入下面配分函数的高温级数展开形式^[26-28]

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha} \frac{\beta^n}{n!} \langle \alpha | (-h)^n | \alpha \rangle, \quad (5)$$

其中 $\{ | \alpha \rangle \}$ 表示希尔伯特空间基矢, $T = 1/\beta$. 为了方便, 将哈密顿量分解为作用在棒上的算符求和形式

$$H = - \sum_{b=1}^M H_b, \quad (6)$$

每一项 H_b 可以附着在 M 个棒中的任意一个, 令 $b = (i(b), j(b))$ 表示连接格点 $i(b), j(b)$ 的棒. 把上述分解的哈密顿量代入配分函数中

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{C_n\}} \sum_{\alpha(0) \dots \alpha(\Delta)} \frac{\beta^n}{n!} \prod_{p=1}^{\Delta} \langle \alpha(p) | H_{b_p} | \alpha(p-1) \rangle, \quad (7)$$

其中 $\{C_n\}$ 表示 n 个棒哈密顿量 H_b 的所有可能集合, 接着在每一对相邻的棒哈密顿量之间引入希尔伯特基

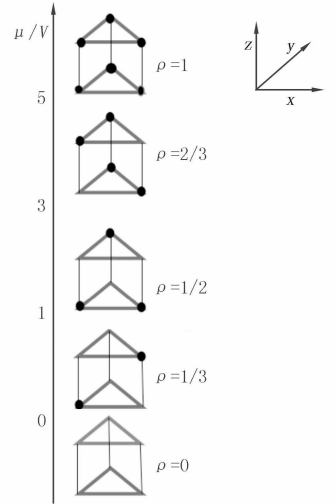


图1 玻色子(黑点)在晶格中的分布示意图

矢 $|\alpha(p)\rangle$, 其中 $|\alpha(p)\rangle = \prod_{j=1}^p H_{b_j} |\alpha(0)\rangle$. 为了保证公式(7)中的算符串长度能够保持为一个常数, 在每个算符串长度 n 小于截断长度时 Λ 插入 $(\Lambda - n)$ 个单位算符串 I_d , 并定义 $H_0 = I_d$. 配分函数更新为

$$Z = \sum_{n=0}^{\Lambda} \sum_{\{C_{\Lambda}\}} \sum_{\alpha(0)\dots\alpha(\Lambda)} \frac{\beta^n (\Lambda - n)!}{\Lambda!} \prod_{p=1}^{\Lambda} \langle \alpha(p) | H_{b_p} | \alpha(p-1) \rangle, \quad (8)$$

其中 n 表示在算符串 C_{Λ} 中非单位算符的个数, 对以上配分函数做重要性抽样, 可在位形上观测出所需物理量的期望值.

3 数值结果与讨论

3.1 力学平衡测试

图 2(a)和(b)给出严格对角化和蒙特卡罗计算的单层三腿梯子即 $L_z = 1$ 时 ρ 和 S^{xy} , 相应参数在 $\mu/V = 2.036, t/V = 0.25$ 以及 $1 \leq \beta \leq 25$. 两种方法得到的数据非常一致, 验证了程序的正确性. 在蒙特卡罗模拟过程中, 能量达到平衡时, 超流密度和结构因子是否平衡仍需要检验. 如图 2(c)~(f)所示, 在 $\mu/V = 2.54, t/V = 0.25$ 时, 通过扫描 β 在 $1 \sim 25$ 的情况下分别测量 xy 和 z 方向上的结构因子和超流刚硬度的变化曲线、发现在 $\beta = 10$ 时 $L_z = 4, 8, 16$ 的 ρ_s^{xy}, S^{xy} 和 S^z 以及 $L_z = 4, 8$ 的 ρ_s^z 分别达到收敛状态; 在 $\beta = 20$ 时, $L_z = 16$ 的 ρ_s^z 达到收敛状态, 即此时系统已经到达了平衡态. 本文通过改变 β 保证系统达到平衡态和结论的可靠性.

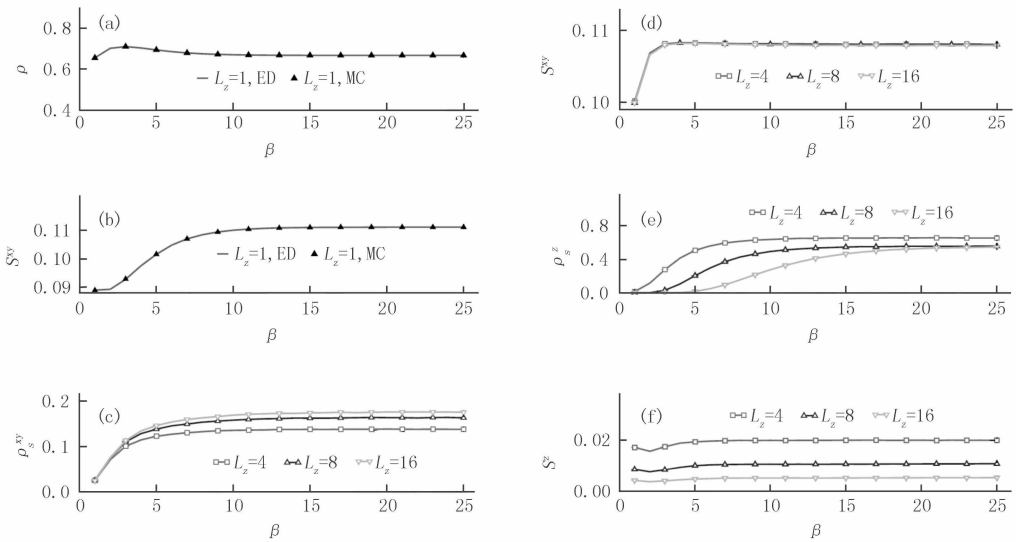


图2 $\mu/V=2.036, t/V=0.25$ 以及 $1 \leq \beta \leq 25$ 时, 单层三腿梯子即 $L_z=1$ 时严格对角化(ED)和蒙特卡罗程序(MC)下(a) ρ (b) S^{xy} 分别随 β 变化的曲线; 不同 $L_z=4, 8$ 和 16 下(c) ρ_s^{xy} (d) S^{xy} (e) ρ_s^z (f) S^z 分别随 β 变化的曲线

系统在 t/V 很小时分别处于空相、固体相和 $\rho = 1$ 的绝缘相, 而 t/V 很大时处于超流相. 为了寻找超固体相, 分别扫描了 $t/V = 0.06, 0.15, 0.25, 0.6$ 和 $\mu/V = 0.5, 1.5, 2.036, 2.54$ 时不同尺寸 $4, 8, 16$ 的各个物理量的变化曲线. 为了方便、简洁, 只选择了 $t/V = 0.15$ 和 $\mu/V = 2.036$ 两种情况进行展示.

3.2 固定 $t/V = 0.15$, 物理量随 μ/V 的变化

三角晶格 xy 平面内存在超固体^[13-15], 但 z 方向上是否存在超固体并不清楚. 本文用可靠的量子蒙特卡罗方法来验证. 为了确保计算结果达到收敛, 在计算 $L_z = 4, 8$ 和 $L_z = 16$ 时 β 分别取 10 和 20 . 为了验证程序正确性, 选择 $t/V = 0.15$, 化学势从 -2 增加到 6 , 测得的密度与经典极限一致. 如图 3(a) 所示, 系统分别依次进入空相, $\rho = 1/3, \rho = 1/2$ 和 $\rho = 2/3$ 的固体相. 这与文献[24]的结果是一致的. 图 3(b)(c) 分别测量了结构因子 S^{xy} 和 S^z , 很好的区分出三个密度平台. 在 $1/3, 2/3$ 平台区域, S^{xy} 不等于 $0, S^z$ 在热力学极限下为 0 , 说明了系统在 xy 平面具有 $4\pi/3$ 固体序. 幸运的是, $\mu/V = 2$ 附近的参数区间也发现了 $\rho = 1/2$ 的固体相, 相应

的 S^z 不等于 0.

为了检验系统是否具有超固体,图 3(d)(e) 给出了超流刚度 ρ_s^{xy} 和 ρ_s^z . xy 方向上为 3 个格点,增加 z 方向上的长度, ρ_s^{xy} 几乎保持不变,可见 z 方向长度的增加并没有改变 xy 方向的物理量. 图 3(f) 给出了 $\mu/V = 1.5$ 时 S^z 和 ρ_s^z 的有限长度标度图, $\mu/V = 1.5$ 和 2.0 时 S^z 显然不为 0, ρ_s^z 在热力学极限下为 0, 所以系统在 $t/V = 0.15$ 时, 系统具有 z 方向密度交错排布的固体序, 不存在相应的超固体.

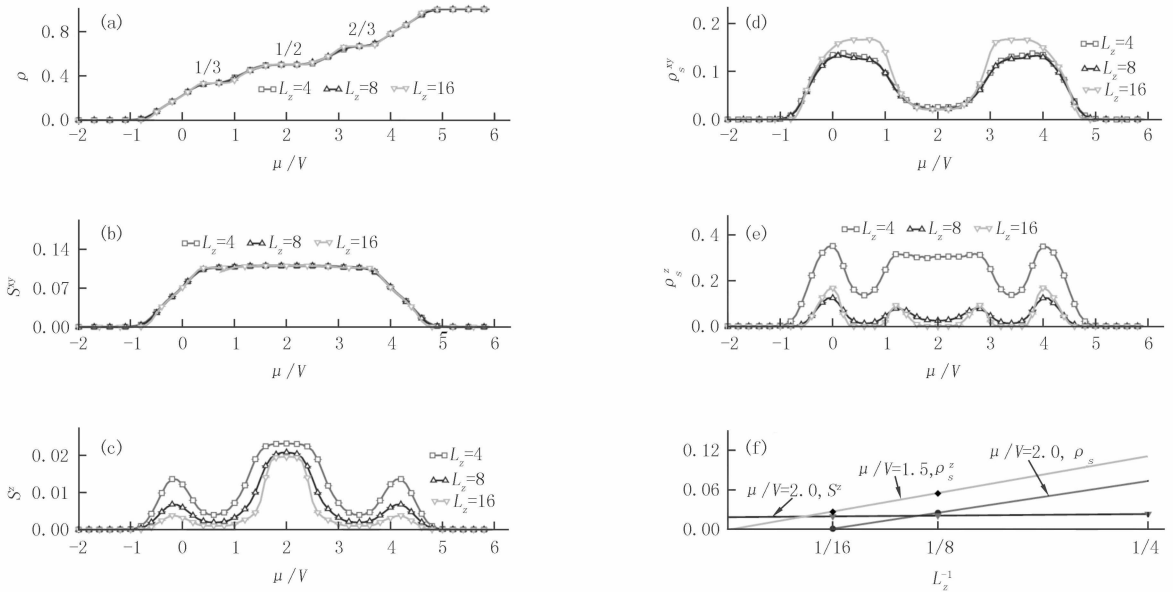


图3 化学势 $-2 < \mu/V < 6$, L_z 为 4, 8 和 16 时 (a) ρ (b) S^y (c) S^z (d) ρ_s^{xy} (e) ρ_s^z 分别随 μ/V 变化的曲线; (f) $\mu/V=1.5$ 时, S^z 和 ρ_s^z 的有限长度标度图

3.3 固定 $\mu/V = 2.036$, 物理量随 t/V 的变化

前面固定 t/V , 扫描化学势没能发现 z 方向的超固体. 接下来选择固定 $\mu/V = 2.036$, 让系统处于 $\rho = 1/2$ 固体相, 令 $L_z = 4, 8$ 时 $\beta = 10$, $L_z = 16$ 时 $\beta = 20$, 通过扫描 t/V , 从 0 增加到 0.7, 如图 4 所示.

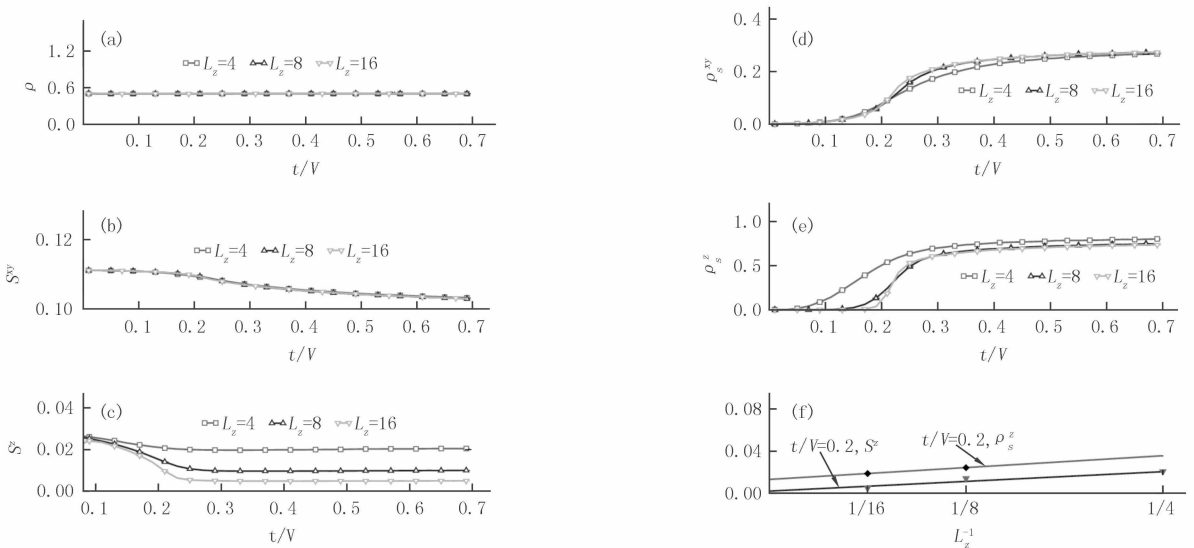


图4 $0 < t/V < 0.7$ 时, 不同 $L_z=4, 8$ 和 16 下 (a) ρ (b) S^y (c) S^z (d) ρ_s^{xy} (e) ρ_s^z 分别随着 t/V 变化曲线; (f) $t/V=0.2$ 时, S^z 和 $0.1\rho_s^z$ 的有限长度标度图

发现 $\rho, S^{xy}, \rho_s^{xy}$ 几乎没有大小效应, 不同长度 L_z 时的结果收敛, 和预期结果相同. ρ_s^z 随着 t/V 的增加而增大, S^z 随着 t/V 的增加而减小, 两者都随着长度 L_z 的增加而减小. 图 4(f) 给出了 S^z 和 ρ_s^z 的有限长度标度图.

当 $t/V = 0.15$ 时, $\rho_s^z = 0$ 而 $S^z \neq 0$; $t/V = 0.2$ 时, $S^z = 0$ 而 $\rho_s^z \neq 0$, 没有找到两者都不等于 0 的参数区间, 说明系统处于密度为 $1/2$ 的固体相或超流相, 不存在 z 方向的超固体相。

4 结 论

研究了三腿梯子上硬核玻色-哈伯德模型. 为了确保结果正确、数据可靠, 本文对比了严格对角化和量子蒙特卡罗计算的 ρ 和 S^{xy} , 确保两者数据完全一致; 同时分别计算了物理量随着 β 的变化曲线, 保证温度足够低, 系统达到基态。

为了寻找三腿梯子 z 方向上是否具有超固体相, 扫描取各种可能值的 t/V 、 μ/V , 并分别详细分析了固定 $t/V = 0.15$ 和 $\mu/V = 2.036$ 时系统物理量 ρ , S^{xy} , S^z , ρ_s^{xy} 和 ρ_s^z 的变化曲线图. 发现系统具有 z 方向密度交错排布的固体序, 但是当原子在格点间隧穿强度较大时, z 方向结构因子和超流刚度在热力学极限下不能同时不为 0, 说明系统 z 方向没有超固体相。

文献[24]中超流刚度运用的是平均场序参量, 不能考虑超流刚硬度的方向, 克服了这一困难. 此结果为下一步固定 z 方向检验 xy 方向物理量的标度行为, 以及改变 z 方向和 xy 方向相互作用比例的进一步探索提供了参考。

参 考 文 献

- [1] Yang C N. Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors[J]. Rev Mod Phys, 1962, 34(4): 694-704.
- [2] Andreev A F, Lifshitz I M. Quantum theory of defects in crystals[J]. Sov Phys JETP, 1969, 29(6): 1107-1113.
- [3] Greiner M, Mandel O, Esslinger T, et al. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms[J]. Nature, 2002, 415(6867): 39-44.
- [4] Otterlo A V, Wagenblast K II. Coexistence of Diagonal and Off-Diagonal Long Range Order: A Monte Carlo Study[J]. Phys Rev Lett, 1994, 72(22): 3598-3601.
- [5] Batrouni G G, Scalettar R T, Zimanyi G T, et al. Supersolids in the Bose-Hubbard Hamiltonian[J]. Phys Rev Lett, 1994, 74(13): 2527-2530.
- [6] Sengupta P, Pryadko L P, Alet F, et al. Supersolids versus phase separation in two-dimensional lattice bosons[J]. Phys Rev Lett, 2005, 94(20): 207202.
- [7] Gan J Y, Wen Y C, Ye J W, et al. Extended Bose-Hubbard model on a honeycomb lattice[J]. Phys Rev B, 2007, 75(21): 214509.
- [8] Hébert F, Batrouni G G, Scalettar R T, et al. Quantum phase transitions in the two-dimensional hardcore boson model[J]. Phys Rev B, 2002, 65(1): 014513.
- [9] Batrouni G G, Scalettar R T. Phase Separation in Supersolids[J]. Phys Rev Lett, 2000, 84(7): 1599-1602.
- [10] Isakov S V, Wessel S, Melko R G, et al. Hard-Core Bosons on the Kagome Lattice: Valence-Bond Solids and Their Quantum Melting[J]. Phys Rev Lett, 2006, 97(14):147202.
- [11] Isakov S V, Sengupta K, Kim Y B. Bose-Hubbard model on a star lattice[J]. Phys Rev B, 2009, 80(21): 308-310.
- [12] Meng Z Y, Wessel S. Phases and magnetization process of an anisotropic Shastry-Sutherland model[J]. Phys Rev B, 2008, 78(22): 224416.
- [13] Wessel S, Troyer M. Supersolid hard-core bosons on the triangular lattice[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(12):127205.
- [14] Melko R G, Paramakanti A, Burkov A A, et al. Supersolid Order from Disorder: Hard-Core Bosons on the Triangular Lattice[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(12): 127207.
- [15] Boninsegni M, Prokof'ev N. Supersolid Phase of Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice[J]. Phys Rev Lett, 2005, 95(23): 237204.
- [16] Chen Y C, Melko R G, Wessel S, et al. Supersolidity from defect condensation in the extended boson Hubbard model[J]. Phys Rev B, 2007, 77(1): 014524.
- [17] Chan Y H, Han Y J, Duan L M. Supersolid and charge-density-wave states from anisotropic interaction in an optical lattice[J]. Physics, 2010, 82(5): 178-183.
- [18] Ying T, Batrouni G G, Rousseau V G, et al. Phase stability in the two-dimensional anisotropic boson Hubbard Hamiltonian[J]. Phys Rev B, 2013, 87(19): 172-176.
- [19] Trefzger C, Menotti C, Lewenstein M. Pair-supersolid phase in a bilayer system of dipolar lattice bosons[J]. Phys Rev Lett, 2009, 103(3): 035304.
- [20] Jiang H C, Fu L, Xu C K. Pair Superfluid and Supersolid of Correlated Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice[J]. Phys Rev B,

- 2012,86(4): 999-1002.
- [21] Zhang W Z, Yin R X, Wang Y C. Pair supersolid with atom-pair hopping on the state-dependent triangular lattice[J]. Phys Rev B, 2013,88(17): 1352-1355.
- [22] Hung H H, Lee W C, Wu C J. Frustrated Cooper pairing and the s -wave supersolidity in cold-atom optical lattices[J]. Phys Rev B, 2011,83(14): 144506.
- [23] Pollet L, Picon J D, Büchler H P, et al. Supersolid phase with cold polar molecules on a triangular lattice[J]. Phys Rev Lett, 2010, 104(12): 125302.
- [24] Suzuki R, Koga A. Supersolid states in a hard-core Bose-Hubbard model on a layered triangular lattice[J]. J Phys Soc Jpn, 2013, 83(6): 1469-1477.
- [25] Schollwöck U. The density-matrix renormalization group[J]. Rev Mod Phys, 2005, 77(1): 259-315.
- [26] Sandvik A W, Kurkijärvi. Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems[J]. Phys Rev B, 1991, 43(7): 5950-5961.
- [27] Sandvik A W. Stochastic series expansion method with operator-loop update[J]. Phys Rev B, 1999, 59(22): 14157-14160.
- [28] Syljuåsen O F, Sandvik A W. Quantum Monte Carlo with Directed Loops[J]. Phys Rev E, 2002, 66(4): 046701.

Quantum Monte-Carlo Simulation of the Hard-core Bose-Hubbard Model on the Three-leg Ladder

Feng Le, Zhang Wanzhou

(School of Physics and Optoelectronics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: By combination of the cluster mean-field and density matrix renormalization methods, the hard-core Bose-Hubbard model on the three-leg ladder was studied and found the supersolid phase based on the density wave phase along the z direction, an additional supersolid phase compared with the hard-core bosons on the one-layered triangular lattices. However, the superfluid order denoted by the mean-field theory did not consider the direction, the nature of the supersolid needs further exploration. In this paper, with the stochastic series expansion directed loop quantum Monte Carlo method, we simulated the hard-core Bose-Hubbard model on the three-leg ladder. By measuring the structured factors and the superfluid stiffness, we found that the system has the solid with density $1/2$ while the supersolid along the z direction does not exist with nonzero quantum tunneling. The calculated results are helpful to guide cold atoms experiment to find new quantum phases.

Keywords: quantum Monte Carlo method; supersolid; the three-leg ladder; Bose-Hubbard model

[责任编辑 杨浦]