

НОВЫЙ КВАНТОВЫЙ АЛГОРИТМ МОНТЕ-КАРЛО В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ: ПРОБЛЕМА ЗНАКА И ЭФФЕКТ ХЕССА–ФЕРБЕНКА

*П. Ф. Карцев**

*Московский инженерно-физический институт
(государственный университет)
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 апреля 2003 г.

Представлен точный численный алгоритм на основе диаграммного квантового метода Монте-Карло в импульсном представлении, в ряде случаев не имеющий проблемы знака и расширяющий класс моделей, которые можно исследовать кластерными методами. Ослабление проблемы знака продемонстрировано определением основного состояния электронов на цепочке в модели Хаббарда. При помощи алгоритма исследовано поведение одномерной бозонной системы с притяжением во вращающемся кольце в области предсказанного Уедой и Леггеттом эффекта Хесса–Фербенка и подтверждено его существование при сравнительно малом числе частиц $N \sim 10$. В пределе $N \rightarrow \infty$ найдена аналитическая граница эффекта.

PACS: 02.70.Tt, 71.10.Fd, 03.75.Hh

1. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании многих статистических моделей успешно применяются квантовые методы Монте-Карло (КМК) — диаграммный [1, 2], вариационный и другие. Так, в частности, при помощи диаграммного КМК определены параметры кубитов на основе магнитных нанокластеров Fe и Mn [3], при которых время потери когерентности достаточно велико для реализации на их основе квантовых вычислительных устройств. Из важных теоретических результатов стоит отметить исследование квазиконденсации двумерного взаимодействующего бозе-газа [4] и определение величины сдвига критической температуры взаимодействующего бозе-газа [5].

Одна из трудностей, ограничивающих использование КМК, — так называемая проблема знака (sign problem) — возникает из-за представления статистической суммы знакопеременным рядом, в результате чего возрастает погрешность рассчитываемых средних величин. Средний знак статистического веса $\langle \text{sign} \rangle$, определяющий эффективность расчета, с уменьшением температуры убывает по экспоненци-

альному закону [6], поэтому исследование низкотемпературных свойств многих перспективных систем оказывается невозможным.

Знак члена ряда зависит от набора соответствующих внутренних параметров метода (от так называемой монтекарловской конфигурации), гамильтониана конкретной системы и выбранного алгоритма. При моделировании фермионных систем в знак также вносит вклад антикоммутиация волновой функции относительно перестановки частиц.

Некоторые модели не имеют проблемы знака, но для ее возникновения достаточно сравнительно малого возмущения гамильтониана, несущественного для физической картины. И наоборот, некоторые системы можно малым изменением или даже тождественным преобразованием привести к виду, при котором возможно моделирование методом КМК без проблемы знака. Так, изменение фазы на одной из подрешеток простой квадратной (кубической) решетки [7] позволяет изменить знак матричного элемента перескока t между ближайшими соседями, что позволяет избежать появления знака при $t > 0$.

Иногда проблемы знака можно избежать с помощью правильного выбора численного метода. Так, в некоторых случаях при исследовании системы элек-

*E-mail: kash@picolab.mephi.ru, kpf@mail.ru

тронов со спином детерминантным методом все слагаемые положительны [8]. Однако характерное время численных расчетов по детерминантным алгоритмам пропорционально кубу размера L системы, в то время как у траекторных методов оно линейно, поэтому последние часто оказываются эффективнее при исследовании больших систем ($L > 10$) даже при наличии знака. С другой стороны, для малых систем ($L < 10$) во многих случаях предпочтительнее является точная диагонализация гамильтоновой матрицы [9, 10].

Существует метод коррекции, позволяющий определить энергию основного состояния с большой точностью [6], даже если проблема знака препятствует достижению достаточно низкой температуры. Однако рецепт для коррекции подобным образом любого рассчитываемого среднего неизвестен. Таким образом, проблема знака — серьезное препятствие для методов КМК.

В этой работе мы представляем новый траекторный алгоритм в импульсном представлении, разработанный на основе диаграммного квантового метода Монте-Карло (ДКМК) [11]. Описываемый алгоритм ослабляет проблему знака при моделировании слабозаимодействующих систем и дает возможность исследовать новые модели, к которым неприменимы действующие в реальном пространстве алгоритмы. Одна из таких моделей изучена в разд. 3.

2. ДИАГРАММНЫЙ КВАНТОВЫЙ МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

2.1. Формулировка диаграммного квантового метода Монте-Карло

В соответствии с [11] гамильтониан системы разбивается на две части: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, где основная часть \hat{H}_0 имеет диагональный вид в представлении чисел заполнения $\{n\}$:

$$\hat{H}_0|\{n\}^{(j)}\rangle = E_0^{(j)}|\{n\}^{(j)}\rangle,$$

а возмущение $\hat{V} = \sum_p \hat{Q}_p$. Тогда статистическая сумма в представлении взаимодействия записывается как

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{n^{(1)}\} \\ \{\ddots\}}} \int_0^{\beta} (-d\tau_{m-1}) \int_0^{\tau_{m-1}} (-d\tau_{m-2}) \dots \int_0^{\tau_1} (-d\tau_0) \times \\ \times \exp(-\beta E_0^{(0)}) \prod_{j=1}^m \exp(-\tau_j E_0^{(j-1)}) \times \\ \times \langle \{n\}^{(j-1)} | \hat{V} | \{n\}^{(j)} \rangle \exp(\tau_j E_0^{(j)}), \quad (1)$$

где

$$\{n\}^{(m)} \equiv \{n\}^{(0)}, \quad \tau_m \equiv \tau_0 + \beta, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Здесь и далее $\hbar = 1$.

Расчеты проводятся в предположении непрерывности мнимого времени $0 \leq \tau \leq \beta$, которое для простоты компьютерной реализации разбивается на достаточно мелкие отрезки $\Delta\tau \sim 10^{-8}\beta$. Каждое слагаемое в выражении (1) может быть представлено с помощью набора траекторий частиц в $(d+1)$ -мерном пространстве (\mathbf{x}, τ) и записывается в виде

$$W \sim \sim \prod_{j=1}^m \left(-\Delta\tau \langle \{n\}^{(j-1)} | \hat{Q}_{p_j} | \{n\}^{(j)} \rangle \exp(\dots) \right), \quad (2)$$

где значения τ_j отвечают временам изменений мировых линий под действием возмущения \hat{Q}_{p_j} — так называемых кинков [11], а набор значений $p_j, \{n\}^{(j)}, \tau_j$ задает монтекарловскую конфигурацию.

Оператор возмущения \hat{V} разбивается на слагаемые \hat{Q}_p из соображений удобства. Так, в модели хаббардовского типа для члена перескока вида $\hat{Q}_{ij} = -t_{ij} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j$ (\hat{a}_i^+ и \hat{a}_j — операторы рождения и уничтожения) кинк представляет собой перескок траектории с узла j на узел i в момент мнимого времени τ . С другой стороны, в операторе возмущения допустимы и диагональные слагаемые, не приводящие к изменению чисел заполнения затронутых узлов. В представленном далее алгоритме используются кинки обоих типов.

В качестве элементарного шага Монте-Карло используются добавление и уничтожение кинков, а также изменение их положения τ в мнимом времени. Вычисление проводится при помощи алгоритма Метрополиса, в котором для каждого процесса изменения (update) конфигурации существует обратный, а вероятность R принять переход между конфигурациями A и B выбирается в соответствии с выражением

$$W_A R_{A \rightarrow B} f_{A \rightarrow B} = W_B R_{B \rightarrow A} f_{B \rightarrow A},$$

где W_A, W_B — соответственно, статистические веса старой и новой конфигураций, $f_{A \rightarrow B}$ и $f_{B \rightarrow A}$ — вероятности выбора в алгоритме преобразований $A \rightarrow B$ и $B \rightarrow A$. Простейший вариант выбора R — так называемый алгоритм термостата (heat-bath algorithm) [8]:

$$R_{A \rightarrow B} = \frac{W_B f_{B \rightarrow A}}{W_A f_{A \rightarrow B} + W_B f_{B \rightarrow A}}. \quad (3)$$

Также на систему процессов накладывается естественное требование: должна существовать отличная от нуля вероятность перехода между любыми двумя допустимыми (т. е. с весом $W \neq 0$) монтекарловскими конфигурациями за конечное число шагов.

2.2. Диаграммный квантовый алгоритм Монте-Карло в импульсном представлении

Представленный алгоритм разработан для фермионных и бозонных систем, имеющих гамильтониан типа Хаббарда в импульсном представлении:

$$\hat{H} = \sum_p \epsilon_p \hat{a}_p^+ \hat{a}_p + \sum_{p,q,r,s} U_{pqrs} \hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s, \quad (4)$$

где ϵ_p — энергия частицы с импульсом p . Далее будем рассматривать типичный член взаимодействия

$$U_{pqrs} = U_{q-r} \delta_{p+q,r+s},$$

хотя для описываемого алгоритма сохранение импульса несущественно.

Взаимодействие, взятое в качестве возмущения \hat{V} , порождает кинки, показанные на рис. 1. Соответствующий кинку множитель, входящий в вес конфигурации помимо экспоненциального множителя, дается суммой соответствующих членов ряда $U_{pqrs} \sqrt{n_p n_q n_r n_s}$ для всех неэквивалентных перестановок импульсов p, q, r, s . Так, в случае, когда $U_{pqrs} = U_0 \delta_{p+q,r+s}$, кинкам a и b соответствуют множители $-\Delta\tau U_0 n_q (n_q - 1)$ и $-4\Delta\tau U_0 n_{q_1} n_{q_2}$.

Пример конфигурации приведен на рис. 2.

2.2.1. Проблема знака в новом алгоритме

Знак статистического веса определяется количеством кинков и соответствующими матричными элементами возмущения \hat{V} . Среднее число кинков в конфигурации оценивается как $\beta|V|$ (см. [11]), поэтому при моделировании слабовзаимодействующих систем описываемый алгоритм оказывается предпочтительнее обычных траекторных алгоритмов из-за соответствующего ослабления проблемы знака.

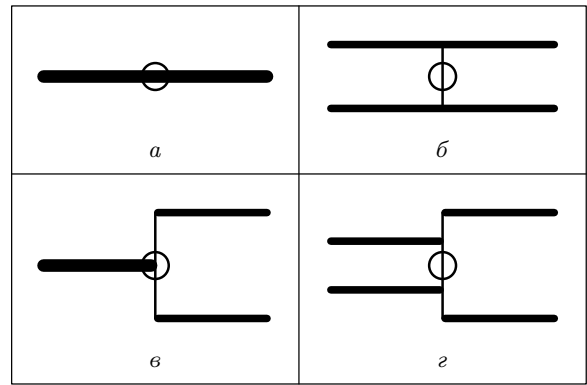


Рис. 1. Кинки, порождаемые двухчастичным взаимодействием: a, b — диагональные, v, z — недиагональные; a, b в случае контактного взаимодействия, $U_{pqrs} = U_0 \delta_{p+q,r+s}$, можно учесть аналитически; a, v возникают лишь при моделировании бозе-системы. Здесь и далее ось мнимого времени направлена горизонтально, импульсы отсчитываются вертикально, число заполнения символизируется толщиной линии, кинк обозначен кружком

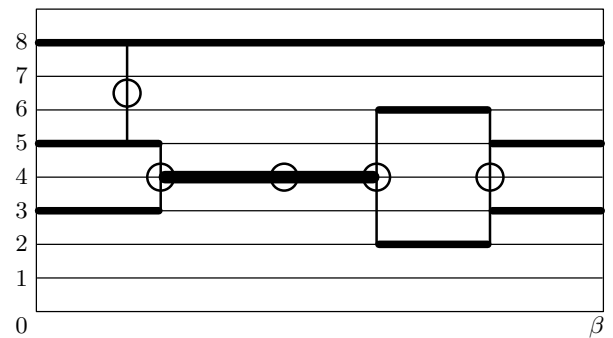


Рис. 2. Пример конфигурации траекторий со всеми типами кинков $a-z$ (см. рис. 1)

Также важно отметить, что при взаимодействии частиц в точке $U_{pqrs} = U_0 \delta_{p+q,r+s}$ диагональная часть взаимодействия дает всего лишь сдвиг энергии, что позволяет упростить алгоритм, исключив из него диагональные (рис. 1 a, b) кинки. Тогда даже в случае отталкивания или ферми-статистики статистический вес может стать отрицательным лишь для конфигураций с количеством кинков не менее трех, тем самым проблема знака, способная замедлить расчет, при высоких температурах существенно ослабляется.

В случае притягивающего взаимодействия и отсутствия антисимметрии вклад любого кинка в статистический вес оказывается положительным, и при расчетах таких задач описываемым алгоритмом

проблемы знака вовсе нет. Это обстоятельство позволяет исследовать подобные системы с большой точностью даже при низких температурах. Пример такой задачи рассмотрен в следующем разделе.

2.2.2. Связь знака с числом оборотов

Для стандартного траекторного метода фермионная составляющая знака определяется количеством пересечений траекторий. Простые топологические соображения дают выражение [12]

$$\text{sign}_F W = (-1)^{\sum_i (Z_i - 1)}, \quad (5)$$

где Z_i — так называемое число оборотов (winding number) i -й траектории по оси мнимого времени. Это соотношение позволяет быстро определять знак статистического веса после изменения конфигурации.

Однако в описываемом алгоритме траектории частиц попарно связаны через кинки, из-за чего число оборотов траекторий часто не определено. Поэтому, чтобы сохранить применимость формулы (5), кинки b , z (рис. 1) переопределяются как одновременный перескок двух частиц без пересечения траекторий, с соответствующим изменением веса кинка. Так, вес кинка b (рис. 1) принимает вид $-2\Delta\tau(U_0 - U_q)$.

2.2.3. Процессы

На рис. 3 показаны процессы, выбранные для изменения конфигурации мировых линий, исключая «дырочную» версию процесса (b) и движение кинка во мнимом времени. Также требуется создавать и уничтожать диагональные кинки в случае, если диагональная часть возмущения не была учтена аналитически как сдвиг энергии. Заметим, из всех перечисленных процессов лишь перепутывание кинка с прямым участком траектории (рис. 3б) способно изменить число оборотов траектории и тем самым (следуя выражению (5)) фермионную составляющую знака.

Важно, что показанные процессы локально сохраняют импульс и, следовательно, неспособны изменить полный импульс K системы. Моделирование в секторе фазового пространства с фиксированным K сокращает время вычислений энергетических уровней, характеризующихся определенным импульсом. Однако для расчетов других величин полный импульс системы в течение моделирования должен принимать все возможные значения. Легче

всего добиться этого введением в алгоритм «перекошенных» кинков (рис. 4), соответствующих в гамильтониане фиктивному члену

$$\eta \sum_{\substack{pqrs \\ p+q \neq r+s}} \hat{a}_p^+ \hat{a}_q^+ \hat{a}_r \hat{a}_s,$$

(см. также алгоритм «червя» («worm» algorithm) [13]). Статистика, как и в работе [13], набирается в отсутствие «перекошенных» кинков, а малая величина η выбирается из соображений эффективности.

2.3. Ферми-модель Хаббарда на цепочке

Для проверки алгоритма мы рассчитали энергию E_0 основного состояния системы электронов на цепочке из восьми узлов, описываемой гамильтонианом

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (\hat{a}_{i\sigma}^+ \hat{a}_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad (6)$$

для числа частиц $N_\uparrow = N_\downarrow = 4$, $t = 1$, $U = -1$ и $K = 0$. Здесь $\langle ij \rangle$ обозначает суммирование по соседним узлам. Малость системы позволила проверить алгоритм с большой точностью. Полученное при $\beta = 8.0$ значение $E_0 \approx -11.952(5)$ совпало с результатами расчетов стандартным траекторным методом в обычном представлении (алгоритм червя [13]): $E'_0 \approx -11.(9)$ при $\beta = 2.0$, и по методу точной диагонализации: $E_0 = -11.952326\dots$

Такая высокая точность нового алгоритма обусловлена сужением фазового пространства из-за фиксации суммарного импульса K . Основной ($E_0 = -11.952326\dots$) и следующий за ним ($E_1 = -11.901727\dots$) уровни энергии настолько близки, что их невозможно различить при реально достижимой из-за проблемы знака температуре, используя стандартные методы Монте-Карло, точность которых поэтому ограничена двумя-тремя знаками. Однако второй из этих уровней соответствует ненулевому импульсу и поэтому в расчетах по предлагаемому алгоритму не участвует.

Вычисления возможны, когда величина среднего знака $\langle \text{sign} \rangle$ превышает несколько процентов. Зависимость среднего знака от обратной температуры β при расчетах обоими алгоритмами КМК показана на рис. 5. Характер зависимостей подтверждает наше предположение о том, что в предложенном алгоритме ситуация с проблемой знака значительно оптимистичней. Максимально достижимое значение β

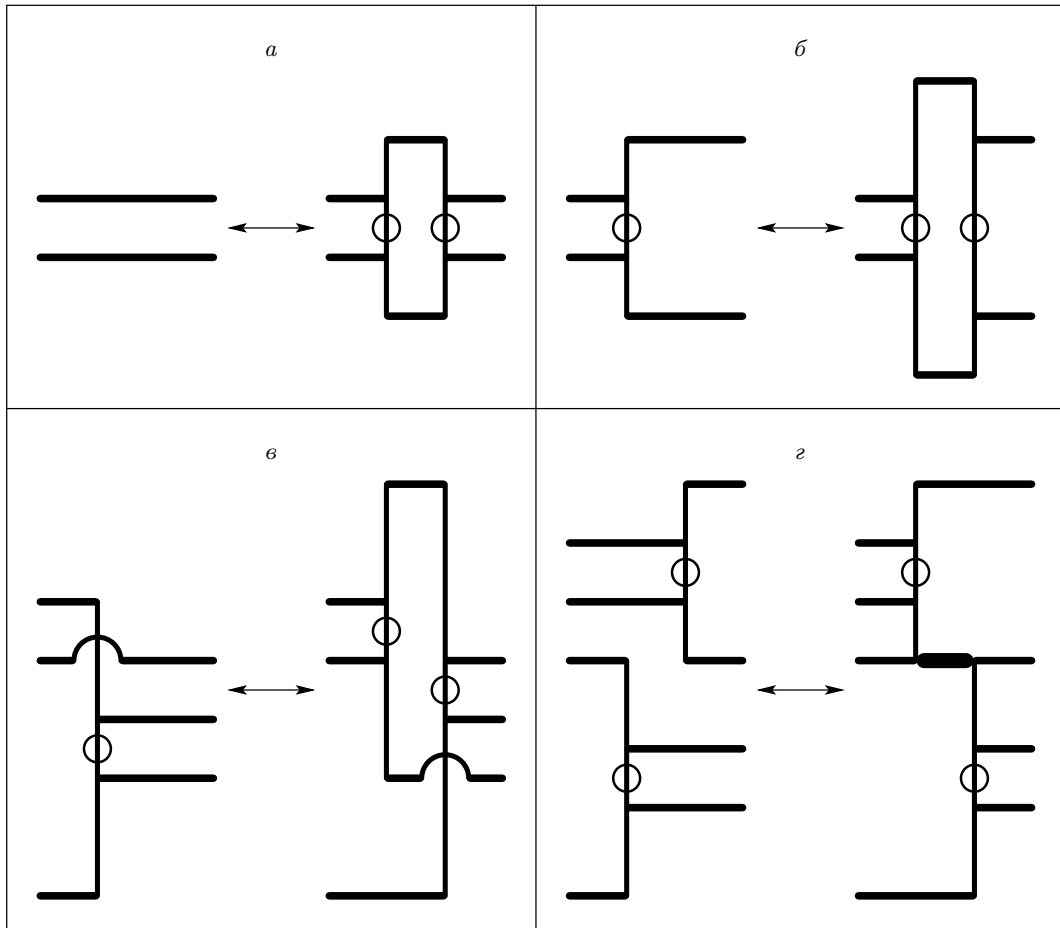


Рис. 3. Процедуры изменения недиагональных кинков: создание/уничтожение пары кинков (а), превращение одного кинка в два (б), перепутывание кинка и прямого участка траектории (в) и сдвиг кинка через соседний (г)

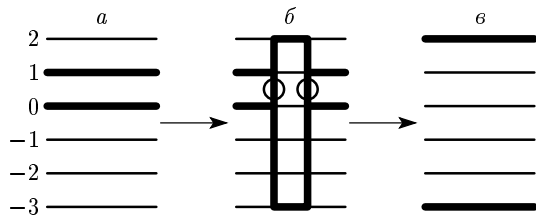


Рис. 4. Создание пары «перекрещенных» кинков (а→б) и дальнейшее их «схлопывание» в другом порядке (б→с) позволяет изменять суммарный импульс конфигурации; $K = 1$ (а), $K = -1$ (с)

увеличилось от 7 до 40. Благодаря притягивающему характеру взаимодействия после перехода в импульсное представление в знаке осталась лишь фермионная составляющая. (Но заметим, что отталкивание, $U > 0$, в этой системе также можно пере-

сти в притяжение при помощи электрон-дырочного преобразования для частиц одного из двух значений спина σ .)

3. БОЗЕ-ГАЗ С ПРИТЯЖЕНИЕМ ВО ВРАЩАЮЩЕМСЯ КОЛЬЦЕ

Описанный алгоритм был применен в исследовании основного состояния квазиодномерного бозе-газа во вращающемся кольце радиуса R с притягивающим взаимодействием между частицами [14, 15]. Гамильтониан системы имеет вид, аналогичный (4):

$$H = \hbar\omega_c \sum_k \left(k - \frac{\omega}{2\omega_c} \right)^2 n_k + \frac{g}{2} \sum_{k,l,q} a_k^\dagger a_l^\dagger a_{l-q} a_{k+q}, \quad (7)$$

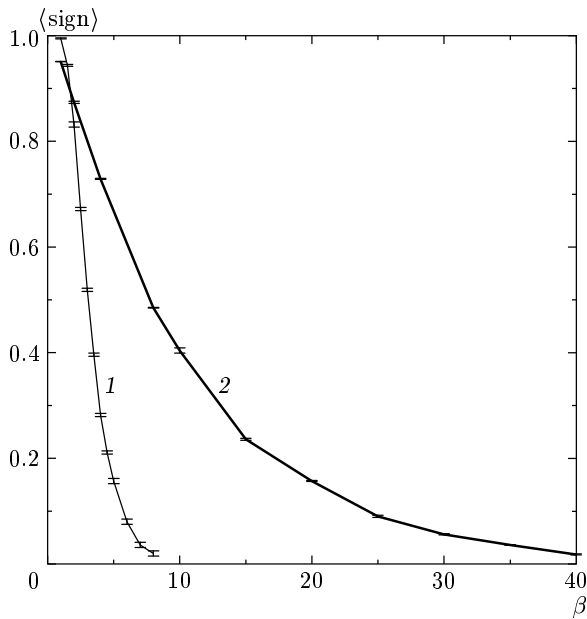


Рис. 5. Зависимость среднего знака от температуры при расчетах в обычном (1) и импульсном (2) представлениях одномерной модели Хаббарда для электронов на цепочке из восьми узлов с числом частиц $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 4$, $U = -1$, $t = 1$

где ω — угловая скорость вращения контейнера, $\omega_c = \hbar/2mR^2$ — критическая угловая скорость, $g = 2a_s\hbar^2/mRS < 0$ — эффективная амплитуда взаимодействия, a_s — длина s -волнового рассеяния, m — масса атома, $S = \pi r^2$ — площадь поперечного сечения тора.

Примером бозе-системы с отрицательной длиной рассеяния является атомарный газ ^7Li , исследуемый в экспериментах по наблюдению бозе-конденсации при сверхнизкой температуре [16]. Более того, для других щелочных металлов знак длины рассеяния можно изменять при помощи резонанса Фешбаха [17]. Важно отметить, что, хотя в объеме [18] конденсат притягивающихся атомов нестабилен, в одномерном случае «капля» (droplet) является основным состоянием и устойчива [19]. Рассматриваемая модель становится эффективно одномерной при достаточно низкой температуре и $r \ll R$. Варианты экспериментальной реализации подобной системы приведены в работах [20, 21].

Для упрощения анализа принимается $\hbar = 1$, $\omega_c = 1$ и вводится безразмерный параметр взаимодействия

$$\gamma = \frac{|g|(N-1)}{\hbar\omega_c}.$$

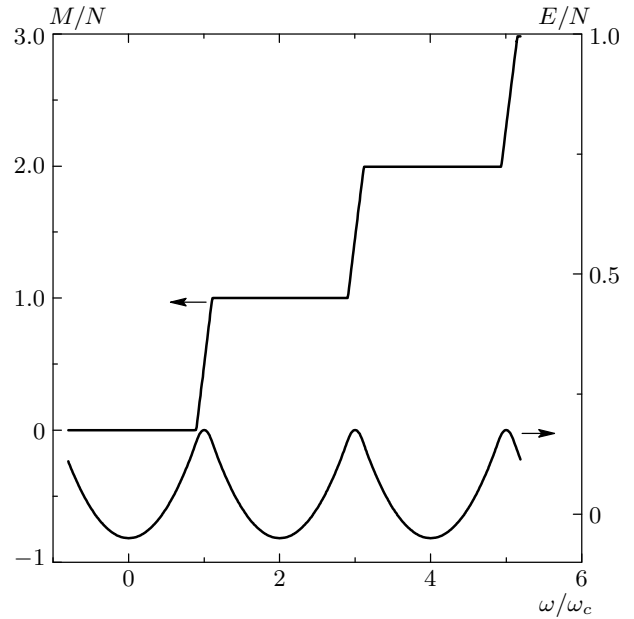


Рис. 6. Энергия E и вращательный момент M исследуемой системы в основном состоянии, полученные в соответствии с макроскопическими методами взаимодействующего бозе-газа, в зависимости от скорости вращения ω при $\gamma = 0.1$ и $N \rightarrow \infty$. Хотя состояния, соответствующие горизонтальным плато, в описании Бермана с сотрудниками [22] нестабильны, корректность графиков подтверждена в данной работе точным численным расчетом многочастичного основного состояния

3.1. Введение в проблему

Уеда и Леггетт, предложившие в работе [14] эту систему в качестве модели невращающейся жидкости (irrotational fluid), показали, что в макроскопическом пределе и при $\gamma < \gamma_c \sim 1$ существует граничная скорость вращения тора ω_* , ниже которой газ в основном состоянии не увлекается стенками (так называемый эффект Хесса–Фербенка). При этом все частицы занимают одно состояние с вращательным моментом $k = 0$ и график зависимости момента системы от скорости вращения имеет горизонтальные плато, повторяющиеся с периодом $2\omega_c$ (см. рис. 6). Сходный результат дает исследование системы в пределе $\gamma \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$ при помощи численного решения уравнения Гросса–Питаевского.

С другой стороны, моделирование динамики системы в базисе когерентных состояний, проведенное Берманом с сотрудниками [22], поставило под сомнение стабильность конденсатного состояния в области плато даже при малых γ и, тем самым, применимость к этой задаче стандартных методов слабо-

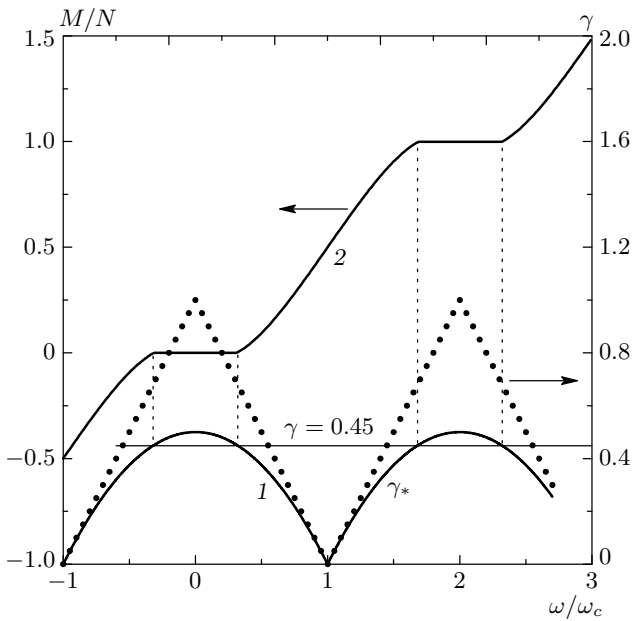


Рис. 7. Точная фазовая диаграмма (1) эффекта Хесса–Фербенка, полученная при анализе данной системы в пределе $N \rightarrow \infty$ (формула (8), эффект существует при $\gamma < \gamma_*(\omega)$). Точками показана приближенная зависимость [14]. При $\gamma \ll 1$ графики совпадают; с увеличением γ ширина плато сокращается быстрее и при $\gamma = \gamma_c = 1/2$ эффект исчезает. 2 — Зависимость вращательного момента M системы от ω для $\gamma = 0.45$, полученная при численном решении уравнения Гросса–Питаевского. Размер плато на кривой 2 соответствует выражению (8)

взаимодействующего бозе-газа. Таким образом, до последнего времени не существовало единого мнения об истинном поведении квазиодномерной системы бозонов с притяжением во вращающемся сосуде.

Для родственной задачи притягивающихся бозонов на бесконечной прямой существуют точные аналитические решения уравнений Гросса–Питаевского [23] и Шредингера [19]. В пределе $N \rightarrow \infty$ они дают одинаковые результаты для основного состояния системы (см. [24]), и это косвенным образом говорит в пользу стандартных методов и описания Уеды и Леггетта для системы в кольце.

Точку в этом вопросе может поставить расчет основного состояния системы точным численным методом. Однако стандартные методы КМК, действующие на решетке, в данном случае оказываются мало полезны, так как при этом потребуются дискретизация пространственной координаты [25], вносящая в результат систематическую погрешность [26].

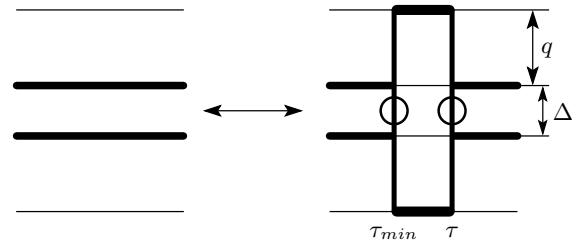


Рис. 8. Иллюстрация к обозначениям q, Δ в тексте

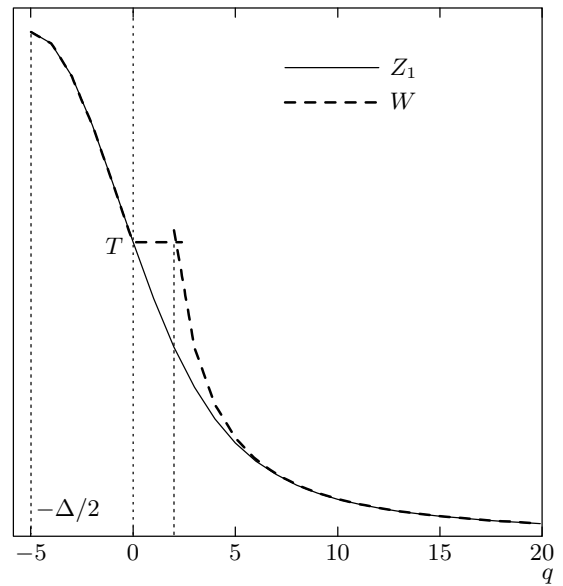


Рис. 9. Кусочная аппроксимация W функции $Z_1(\delta E(q), T)$, использованная в процессах обновления a, b (рис. 3) для ускорения выбора момента q . Значение момента Δ фиксируется при выборе места обновления

При исследовании данной проблемы был использован представленный в разд. 2 алгоритм диаграммного КМК в импульсном представлении, не требующий дискретизации координаты. Второе и главное преимущество нового алгоритма в этой задаче — полное отсутствие проблемы знака.

Далее в этом разделе представлены результаты расчетов КМК для $N = 2, \dots, 100$ при различных значениях параметров ω и γ , подтверждающие существование в данной системе эффекта Хесса–Фербенка [15]. Аналитически получена точная фазовая граница эффекта.

3.2. Макроскопический случай: точная граница эффекта

Использованный в работе [14] метод Хартри-Фока в базисе состояний $\{\dots, n_{-k}, \dots, n_{-1}, n_0, n_1, \dots, n_k, \dots\}$ является точным при $\gamma \rightarrow 0$, так как при учете только двух вращательных состояний k с наименьшей энергией ϵ_k гамильтониан принимает диагональный вид. При $\gamma \sim 1$, однако, становятся существенными поправки от вышележащих уровней.

Воспользуемся методом Боголюбова [27] для учета всех моментов k . Плато на графике $M(\omega)$ соответствует ситуации, когда все частицы занимают одно вращательное состояние с моментом $k = l$ (для определенности $l = 0$). Тогда с точностью до поправок, пропорциональных $1/N$, гамильтониан (7) можно записать в виде

$$\hat{H} = H_0 + \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k - \frac{\gamma}{2} \sum_{k \neq 0} \left(2\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+ + \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \right),$$

где $\epsilon_k = k^2 - k\omega$. Проводя замену $\hat{a}, \hat{a}^+ \rightarrow \hat{b}, \hat{b}^+$:

$$\hat{a}_k = u_k \hat{b}_k + v_k \hat{b}_{-k}^+,$$

$$\hat{a}_k^+ = u_k^* \hat{b}_k^+ + v_k^* \hat{b}_{-k},$$

с коэффициентами

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{1 - |L_k|^2}}, \quad v_k = \frac{L_k}{\sqrt{1 - |L_k|^2}},$$

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1$$

и требуя обращения в нуль коэффициентов при $\hat{b}_k \hat{b}_{-k}$ и $\hat{b}_k^+ \hat{b}_{-k}^+$, получаем следующие выражения:

$$L_k = \chi_k - \sqrt{\chi_k^2 - 1},$$

$$\chi_k = \frac{E_k}{\gamma} - 1,$$

$$E_k = \frac{\epsilon_k + \epsilon_{-k}}{2} = k^2.$$

Отметим, что такое решение возможно лишь при $\gamma < 1/2$. Также очевидно, что в основном состоянии все частицы занимают момент $l = 0$ только в случае, если энергия квазичастиц, определяемая выражением

$$\epsilon(k) = \frac{1 - L_k}{1 + L_k} - \omega,$$

больше нуля. В противном случае приведенные рассуждения неверны и момент $k = \pm 1$ оказывается заселен макроскопическим количеством частиц, тем

самым момент вращения M системы становится отличен от нуля. Точка «переключения», дающая точную границу эффекта Хесса-Фербенка в исследуемой системе (см. рис. 7), определяется выражением

$$(\omega - 2l)^2 = 1 - 2\gamma. \quad (8)$$

Это соотношение также можно получить, анализируя однородность решения уравнения Гросса-Питаевского [28], — в терминах макроскопической волновой функции именно нарушение однородности позволяет системе изменить вращательный момент. Решение уравнения Гросса-Питаевского для данной задачи дается эллиптической функцией Якоби dn , и хотя ее параметры в общем случае определяются численно [29], получить аналитическое решение для момента возникновения неоднородности основного состояния достаточно просто.

3.3. Мезоскопический случай: особенности алгоритма

Во всех реализациях диаграммного метода Монте-Карло, подобно алгоритму червя [13], время τ создаваемого или сдвигаемого кинка выбирается с вероятностью

$$\frac{\exp[-\delta E(\tau - \tau_{min})]}{Z_1},$$

пропорциональной множителю $\exp(-\delta E\tau)$, который получает статистический вес после изменения конфигурации. Нормирующий множитель $Z_1(\delta E, \tau_{max} - \tau_{min})$ входит в выражение $f_{A \rightarrow B} / f_{B \rightarrow A}$ (см. (3)), используемое при определении вероятности принятия процесса, и с возрастанием δE эффективность обновления (вероятность перехода в новую конфигурацию) уменьшается. В связи с этим из-за особенностей спектра ($\epsilon_k \sim k^2$) в данной задаче потребовалось также «взвешивать» и момент k , определяющий место действия процедуры.

Так, в процессах a, b (рис. 3) энергия траекторий в затрагиваемом промежутке изменяется на сколь угодно большую величину $\delta E = 2q(q + \Delta)$ (см. рис. 8), и необходимо выбирать q и Δ с вероятностью W , соответствующей $Z_1(\delta E, \tau_{max} - \tau_{min})$. Использованное для ускорения расчетов приближение показано на рис. 9. Подробности каждого из четырех процессов приведены в работе [15].

Также стоит отметить, что в моделировании использовались только недиагональные кинки (рис. 1 b, z), так как диагональная часть взаи-

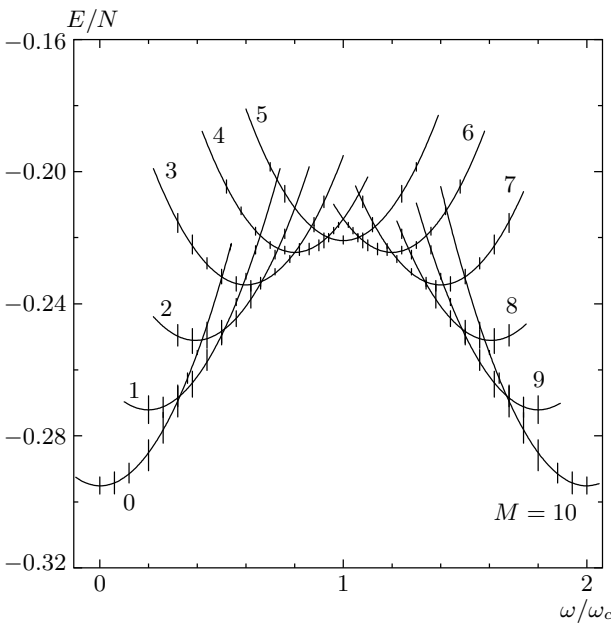


Рис. 10. Рассчитанные энергии основного состояния исследуемой системы при $\gamma = \gamma_c = 1/2$ для 10 частиц при различных моментах вращения $M = 0, \dots, 10$. Значение момента вращения M показано числом у кривой. Без вращения основному состоянию системы соответствует значение вращательного момента $M = 0$, с увеличением ω основным состоянием становится ветвь с $M = 1, 2$ и т. д. Несмотря на погрешность показанных на графике расчетных точек, точность графиков составляет 10^{-2} , так как $E_0(M, \omega) = E_0^M + N(\omega/2 - M/N)^2$

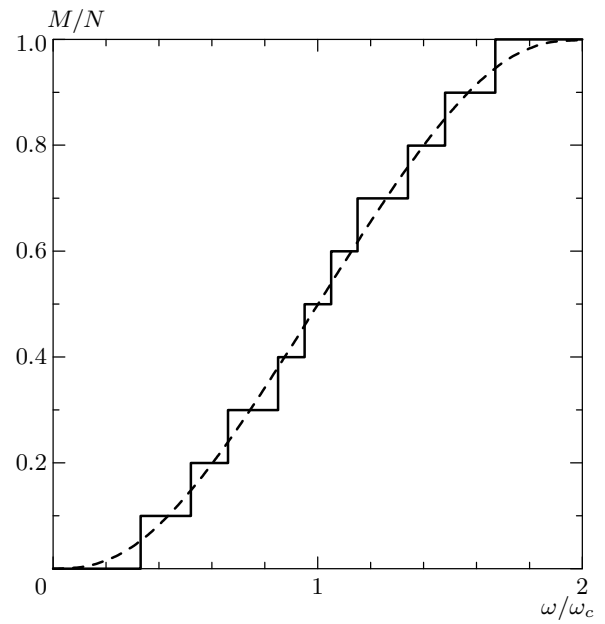


Рис. 11. Зависимость вращательного момента системы из 10 частиц в основном состоянии от скорости вращения при $\gamma = \gamma_c = 1/2$, определенная в соответствии с рис. 10. Абсолютная погрешность составляет 10^{-2} . Штриховая линия — макроскопическая зависимость

модействия в данном случае дает лишь сдвиг энергии:

$$\hat{H} = -\frac{|g|}{2}(2N^2 - N) + \sum_k \left[\left(k - \frac{\omega}{2}\right)^2 \hat{n}_k + \frac{|g|}{2} \hat{n}_k^2 \right] - \frac{|g|}{2} \sum_{\substack{k,l,q \\ q \neq 0 \\ q \neq l-k}} \hat{a}_k^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_{l-q} \hat{a}_{k+q}$$

3.4. Мезоскопический случай: результаты расчетов

Расчеты энергии основного состояния проводились при фиксированном вращательном моменте M системы, затем выбиралась ветвь с минимальной энергией (см. рис. 10 и 11). На рис. 12 показаны графики $M(\omega)/N$ для $N = 5, 10$ и 20 частиц при $\gamma = 0.2$. Для сравнения на том же графике приведена макроскопическая зависимость, полученная при помощи численного решения уравнения Гросса-

са-Питаевского для того же значения γ . Удивительно, что ширина плато практически не меняется с уменьшением числа частиц и выражение (8) оказывается применимым даже при $N < 10$, хотя при малом числе частиц ширина промежуточных ступенек сравнивается с размером плато. Та же ситуация наблюдается и при других значениях γ . (Отметим отличие определения $\gamma = |g|N/\hbar\omega_c$, приведенного в работе [14], от $\gamma = |g|(N-1)/\hbar\omega_c$, использованного в данной работе; для малого числа частиц второй вариант более корректен.)

Таким образом, фазовая граница эффекта Хесса-Фербенка, найденная в пределе $N \rightarrow \infty$, остается неизменной при числе частиц, достаточно малом для расчетов кластерными методами.

В качестве иллюстрации была рассчитана корреляционная функция «плотность-плотность»

$$K(x) = \frac{1}{N(N-1)} \langle \Psi^+(x') \Psi^+(x'+x) \Psi(x'+x) \Psi(x') \rangle_{x'}$$

для однородного и неоднородного (в макроскопическом пределе) случаев (соответственно рис. 13 и 14). При малом числе частиц их положения в обоих случаях сильно коррелируют и зависимости практически одинаковы, при большом N графики соответствуют решению уравнения Гросса-Питаевского.

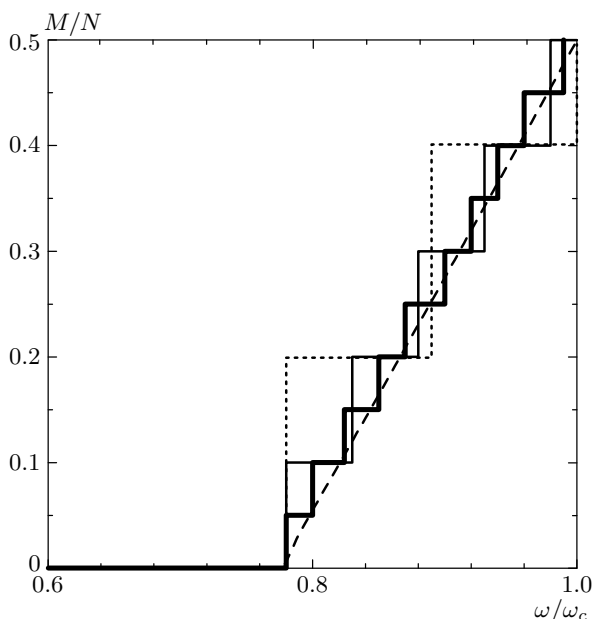


Рис. 12. Зависимость вращательного момента системы в основном состоянии от скорости вращения, рассчитанная для 5, 10, 20 частиц, при $\gamma = 0.2$. Абсолютная погрешность составляет 10^{-2} . Штриховая линия — макроскопическая зависимость. Существенно, что с изменением числа частиц размер плато остается практически постоянным

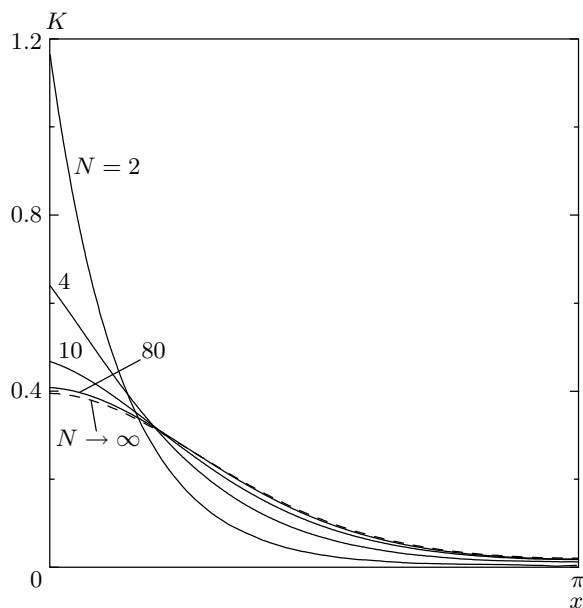


Рис. 14. Корреляционная функция $K(x)$ «плотность–плотность» системы при $\omega = 0$ и $\gamma = 0.75 > \gamma_c = 1/2$ (вне плато) для 2, 4, 10 и 80 частиц. Штриховая кривая — решение уравнения Гросса–Питаевского

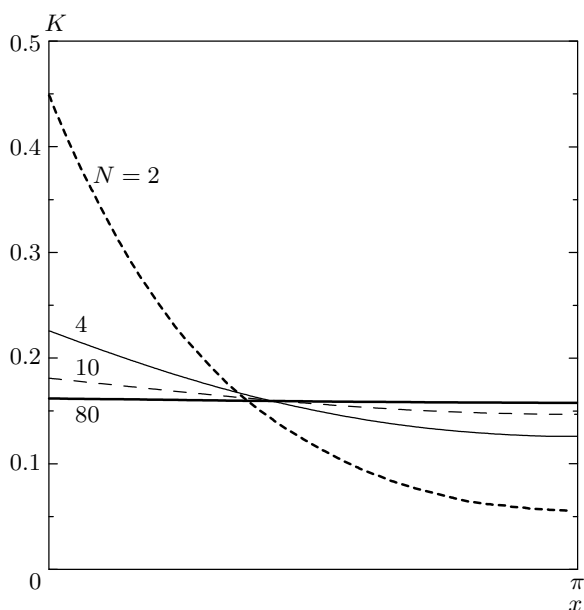


Рис. 13. Корреляционная функция $K(x)$ «плотность–плотность» системы при $\omega = 0$ и $\gamma = 0.25 < \gamma_c = 1/2$ (внутри плато) для 2, 4, 10 и 80 частиц. С уменьшением числа частиц корреляции возрастают

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен вариант квантового диаграммного алгоритма Монте-Карло в импульсном представлении, наиболее эффективный при исследовании слабозаимодействующих систем. Данный метод применим к новым квантовым моделям, ранее недоступным для исследования кластерными методами. Приведены аргументы в пользу ослабления проблемы знака по сравнению со стандартными траекторными методами; в некоторых моделях проблема знака отсутствует. Одна из таких моделей — бозе-газ с притяжением в тонком вращающемся кольце — впервые исследована при помощи метода КМК. Представленный алгоритм позволил проследить изменения основного состояния данной системы в зависимости от скорости вращения контейнера и величины взаимодействия при числе частиц N от 2 до 100 и подтвердить существование в данной системе эффекта Хесса–Фербенка [14]. В пределе $N \rightarrow \infty$ найдено точное уравнение фазовой границы эффекта, верное даже в случае сравнительно малого числа частиц $N \sim 10$.

Я выражаю благодарность В. А. Кашурникову, Б. В. Свистуну и Н. В. Прокофьеву за внимание

к проблеме и ценные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 03-02-16979, 01-02-16508).

ЛИТЕРАТУРА

1. N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **87**, 160601 (2001).
2. E. A. Burovski, A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **87**, 186402 (2001).
3. P. C. E. Stamp and I. S. Tupitsyn, E-print archives, cond-mat/0302015.
4. Yu. M. Kagan, V. A. Kashurnikov, A. V. Krasavin et al., Phys. Rev. A **61**, 043608 (2000).
5. V. A. Kashurnikov, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, Phys. Rev. Lett. **87**, 120402 (2001).
6. N. Furukawa and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 810 (1991).
7. E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
8. J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, and R. Blankenbecler, Phys. Rev. Lett. **47**, 1628 (1981).
9. C. Lancsoz, J. Res. NBS **45**, 244 (1950); E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
10. J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **67**, 035103 (2003).
11. Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, ЖЭТФ **114**, 570 (1998).
12. N. Kawashima and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. B **50**, 136 (1994).
13. N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, Phys. Lett. A **238**, 253 (1998).
14. M. Ueda and A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **83**, 1489 (1999).
15. P. F. Kartsev, E-print archives, cond-mat/0211356.
16. C. C. Bradley, C. A. Sackett, and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **78**, 985 (1997); C. A. Sackett and R. G. Hulet, Phys. Rev. Lett. **74**, 1315 (1995).
17. J. L. Roberts, N. R. Claussen, S. L. Cornish, Phys. Rev. Lett. **86**, 4211 (2001).
18. R. A. Duine and H. T. C. Stoof, Phys. Rev. Lett. **86**, 2204 (2001).
19. J. B. McGuire, J. of Math. Phys. **5**, 622 (1964).
20. E. M. Wright, J. Arlt, and K. Dholakia, Phys. Rev. A **63**, 013608 (2000).
21. A. S. Arnold and E. Riis, E-print archives, cond-mat/0110295.
22. G. P. Berman, A. Smerzi, and A. R. Bishop, Phys. Rev. Lett. **88**, 120402 (2002).
23. H. Hasimoto, J. Fluid Mech. **51**, 477 (1972).
24. Y. Castin and Ch. Herzog, E-print archives, cond-mat/0012040.
25. I. Carusotto and Y. Castin, Phys. Rev. Lett. **90**, 030401 (2003).
26. Z. Néda and Z. Dezsö, E-print archives, cond-mat/9912383.
27. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Физматлит, Москва (2001), с. 130.
28. E. P. Gross, Nuovo Cim. **20**, 454 (1961); Л. П. Питаевский, ЖЭТФ **40**, 646 (1961).
29. R. Kanamoto, H. Saito, and M. Ueda, E-print archives, cond-mat/0210229.