

ЭФФЕКТИВНЫЙ КВАНТОВЫЙ АЛГОРИТМ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

*В. А. Кашурников**, *А. В. Красавин***

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

Представлен новый эффективный алгоритм Монте-Карло, основанный на принципах непрерывного времени, позволяющий в произвольном дискретном базисе рассчитывать термодинамические величины и линейный отклик смешанных бозон-фермионных, спин-бозонных и других систем с сильными корреляциями, не допускающих аналитического описания.

PACS: 02.70.Ss, 05.30.-d, 75.10.Jm, 75.40.Mg

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в экспериментальных исследованиях рассматриваются все более сложные системы с сильным межчастичным взаимодействием и смешанной статистикой [1] — достаточно упомянуть бозонные оптические решетки, реализующиеся в магнитных ловушках при сверхнизких температурах. Как известно [2, 3], статистическое описание таких систем адекватно модели решеточных бозонов с ненулевым спином. Соответствующий гамильтониан является гамильтонианом модели Бозе–Хаббарда для бозонов с $S = 1$ [2]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\beta} (a_{i\beta}^{\dagger} a_{j\beta} + a_{j\beta}^{\dagger} a_{i\beta}) - \sum_i \mu_i n_i + \frac{U_0}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + \frac{U_2}{2} \sum_i (\mathbf{S}_i^2 - 2n_i). \quad (1)$$

В выражении (1) $n_i \equiv \sum_{\alpha} n_{i\alpha}$ — оператор полного числа частиц на узле i , \mathbf{S}_i — оператор полного спина на узле,

$$\mathbf{S}_i^2 - 2n_i = 2n_{i1}n_{i0} + 2n_{i0}n_{i,-1} - 2n_{i1}n_{i,-1} - n_{i1} - n_{i,-1} + n_{i1}^2 + n_{i,-1}^2 + 2a_{i1}^{\dagger} a_{i,-1}^{\dagger} a_{i0} a_{i0} + 2a_{i0}^{\dagger} a_{i0}^{\dagger} a_{i1} a_{i,-1}, \quad (2)$$

$\beta = 0, \pm 1$ — проекция спина бозона, t — амплитуда перескока на ближайший узел, μ_i — внешнее поле, действующее на узел i .

Часто можно пренебречь дополнительными степенями свободы и ограничиться только нулевой проекцией спина, учитывая, что, например, для атомов ^{23}Na отношение констант взаимодействия в гамильтониане (1) $U_2/U_0 = 0.04$ [4]. Однако учет ненулевого спина приводит к более богатой фазовой картине: при определенных значениях параметров в системе существует ферромагнитное состояние и имеет место фазовый переход первого рода [5, 6], при этом аналитическое описание (1) с учетом слагаемого с U_2 возможно только в приближении среднего поля.

Другой пример системы со смешанной статистикой — фермионы с точным учетом электрон-фононного взаимодействия, например, в модели Холстейна–Хаббарда [7] с одной оптической модой Ω :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \Omega \sum_i n_{ib} - \alpha \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} n_{i\sigma} (b_j^{\dagger} + b_j) - \mu \sum_{i, \sigma} n_{i\sigma}. \quad (3)$$

Здесь a^{\dagger} , a (b^{\dagger} , b) — электронные (фононные) операторы рождения и уничтожения, $n_{ib} = b_i^{\dagger} b_i$, $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma}$, α — константа электрон-фононного взаимодействия; t , U — параметры Хаббарда для данной модели, μ — химический потенциал. Даже упрощенная модель с одноузельным электрон-фононным взаимодействием $-\alpha \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} (b_i^{\dagger} + b_i)$ не имеет коррект-

*E-mail: kashur@rol.ru, kash@pico.mephi.ru

**E-mail: AvKrasavin@mail.ru

ных аналитических приближенных решений. Имеющиеся численные подходы для этой модели очень приближенно учитывают колебания решетки [8, 9], часто используют известные канонические преобразования [10], упрощающие в ряде случаев задачу.

Для модели (3) ситуация усложняется также из-за антисимметрии электронной волновой функции, что приводит к проблеме знака в численной процедуре Монте-Карло и невозможности корректного расчета. Эту проблему можно было бы частично преодолеть, если перейти к импульсному базису, в котором упрощенная модель в одномерном случае имеет следующий вид (m — число узлов):

$$H = -2t \sum_{q,\sigma} \cos \frac{2\pi q}{m} a_{q\sigma}^\dagger a_{q\sigma} - \mu \sum_{q,\sigma} n_{q\sigma} + \Omega \sum_q b_q^\dagger b_q + \frac{U}{m} \sum_{q,q',q''} a_{q'\uparrow}^\dagger a_{q'+q\uparrow} a_{q''\downarrow}^\dagger a_{q''-q\downarrow} - \frac{\alpha}{\sqrt{m}} \sum_{q,q',\sigma} (a_{q'\sigma}^\dagger a_{q'+q\sigma} b_q^\dagger + a_{q'\sigma}^\dagger a_{q'-q\sigma} b_q). \quad (4)$$

Частичное решение проблемы знака в импульсном базисе связано с распределением состояний по одночастичным энергиям

$$\varepsilon_q = -2t \cos(2\pi q/m)$$

и, соответственно, с их своеобразной предварительной «сортировкой» по статистическим весам при применении процедуры Монте-Карло.

В качестве систем со сложной статистикой можно также упомянуть спин-фононные модели, интенсивно исследуемые в последнее время [11], и модели типа модели Рашбы–Пекара [12] для системы экситон-поляронов.

Таким образом, для расчета моделей со смешанной статистикой и сильным взаимодействием необходим достаточно гибкий метод стохастического моделирования, позволяющий работать с произвольным дискретным базисом (узельным, импульсным или другим), а также с произвольного вида диагональными и недиагональными слагаемыми в гамильтониане.

В данной работе предлагается алгоритм квантового метода Монте-Карло, основанный на алгоритме Continuous Time World Line (CTWL) [13, 14], позволяющий рассчитывать произвольный гамильтониан общего вида и работать в различных базисных состояниях. Основные принципы, предложенные в работе [13] и развитые для конкретных моделей в ряде последующих работ (см., например, далеко не полный перечень работ [14–23]), не всегда позволяют решить проблемы конкретной реализации общей

схемы [13, 14], что в свою очередь не дает возможности напрямую рассчитывать конкретные физические системы. Данная работа направлена на преодоление существенных проблем конкретной реализации моделирования методом Монте-Карло и предлагает способы расчета физических систем со сложной, а иногда смешанной статистикой. При этом схема из работы [13] существенно обобщена, введены дополнительные процедуры обновления фазовых состояний, существенно расширено понятие «дискретный базис». Предложенный алгоритм протестирован на примере моделей с электрон-фононным взаимодействием, а также бозе-моделей с ненулевым спином. Получены первые физические результаты для небольших систем.

2. ФОРМУЛИРОВКА МЕТОДА ДЛЯ ПРОИЗВОЛЬНОГО ДИСКРЕТНОГО БАЗИСА

Следуя работам [13, 14], разобьем гамильтониан H рассматриваемой физической системы в представлении взаимодействия на основную (затравочную) часть H_0 и возмущение V . Тогда получим

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta(H_0+V)} = e^{-\beta H_0} \sigma(\beta),$$

$$\sigma(\beta) = T_\tau \exp \left(- \int_0^\beta V(\tau) d\tau \right),$$

где

$$V(\tau) = e^{\tau H_0} V e^{-\tau H_0},$$

а T_τ обозначает упорядочение переменных τ . Статистическая сумма принимает вид, удобный для вычисления методом Монте-Карло:

$$Z = \text{Sp} \left(e^{-\beta H_0} \left[1 - \int_0^\beta d\tau V(\tau) + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 V(\tau_1) V(\tau_2) - \dots \right] \right). \quad (5)$$

Дискретный аналог формулы (5) при разбиении временной шкалы на интервалы $\Delta\tau$ ($\beta = \Delta\tau N$) имеет вид

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{n_1, n_2, \dots, n_N \\ \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_N \\ \tau_{N+1} \equiv \tau_1}} (-\Delta\tau)^N \times \\ \times \prod_{k=0}^N (\langle n_k | V | n_{k+1} \rangle \exp(-(\tau_{k+1} - \tau_k) E_k)), \quad (6)$$

где

$$\langle n_k | V | n_{k+1} \rangle \equiv V_k$$

обозначает, как правило, недиагональное слагаемое в возмущении V и называется кинком, приводящим к изменению состояния, а шаг шкалы мнимого времени $\Delta\tau \rightarrow 0$. Совокупность состояний $|n_j\rangle$ составляет мгновенную конфигурацию, которая имеет простое графическое представление в виде траекторий, сходное с видом конфигурации в стандартном дискретном траекторном (World Line) методе Монте-Карло (рис. 1а).

В зависимости от конкретного гамильтониана H выбирается возмущение V и набор процедур, обеспечивающий полный перебор всех возможных мгновенных конфигураций.

Рассмотрим оператор энергии физической системы достаточно общего вида:

$$H = \sum_{kl n_1 n_2 n_3 n_4} t_{kl}^{n_1 n_2 n_3 n_4} (A_k^{n_1 n_2 \dagger} A_l^{n_3 n_4} + \text{H.c.}) + \\ + \sum_{kl n_2 n_2} U_{kl}^{n_1 n_2} M_{kl}^{n_1 n_2} + \sum_{k n_1 n_2} B_k^{n_1 n_2} (A_k^{n_1 n_2} + \text{H.c.}) + \\ + \sum_{kn} C_k^n N_k^n + \sum_{kl n_1 n_2 n_3} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + \text{H.c.}). \quad (7)$$

Здесь k, l — нумерация «узлов» дискретного базиса, n_1, n_2, \dots — состояния, реализуемые на конкретном «узле». Операторы $A_k^{n_1 n_2}$ — операторы перехода «узла» k из состояния n_1 в состояние n_2 ; N_k^n , $M_{kl}^{n_1 n_2}$ — диагональные операторы (в данном представлении). Все параметры гамильтониана, характеризующие амплитуды переходов (t), диагональные межчастичные взаимодействия (U) и отклик на внешние поперечные (B, D) и продольные (C) поля, могут быть уникальны для каждого состояния и «узла» и могут включать в себя рассчитанные заранее матричные коэффициенты. Таким образом, полагается, что они уже учитывают все особенности статистики (бозе, ферми, спиновой), в частности, учитывают множители вида \sqrt{n} (для бозе-статистики), $\sqrt{(S+S^Z)(S-S^Z+1)}$ (для спиновой статистики) или $(-1)^{\sum_k n_k}$ (для ферми-статистики). Соответственно, действия операторов на базисные функции приводят либо к переходу в новые состояния для

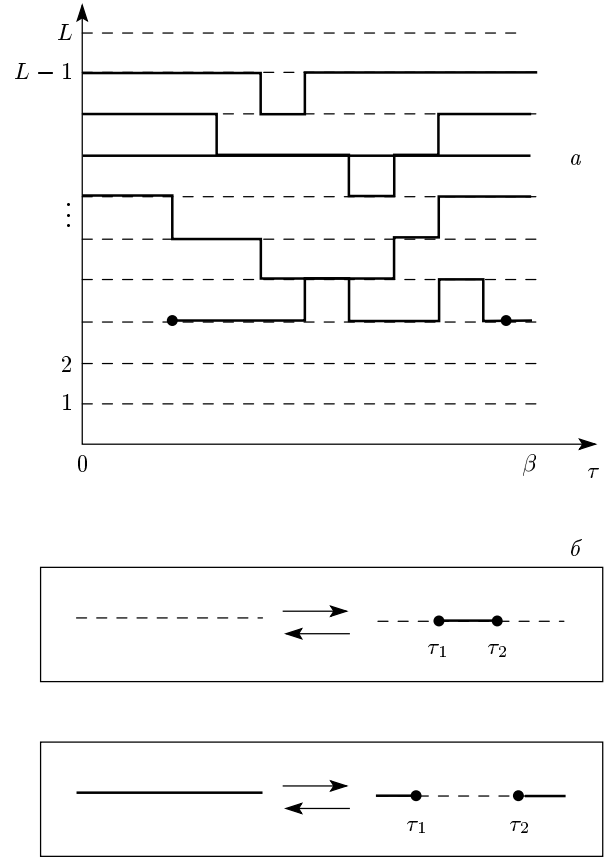


Рис. 1. а — Вид фазовых траекторий с разрывами («червями») [13], эффективно обновляющими мгновенные конфигурации. Вертикальная ось — координаты «узлов», горизонтальная ось — мнимое время. б — Рождение и замыкание «червей»

недиагональных для данного представления операторов, либо оставляют их без изменения в случае диагональных операторов:

$$A_k^{n_1 n_2} | \dots n_1^k \dots \rangle = | \dots n_2^k \dots \rangle, \\ N_k^{n_1} | \dots n_1^k \dots \rangle = | \dots n_1^k \dots \rangle, \quad (8) \\ M_{kl}^{n_1 n_2} | \dots n_1^k \dots n_2^l \dots \rangle = | \dots n_1^k \dots n_2^l \dots \rangle.$$

Под состояниями «узла» n^k понимаются также и частично диагонализированные (аналитически или численно) состояния, так что каждый «узел» данного гамильтониана исходно мог быть составлен из 3–10 реальных узлов пространственной решетки первичной модели, но после диагонализации таких первичных кластеров в гамильтониане в новом представлении учитывается информация только об энергиях диагонализированных состояний и матричных элементах переходов между ними и между со-

седними кластерами. Это позволяет, во-первых, частично решить проблему знака (если она имеется), так как первичная диагонализация сортирует состояния по энергии, и, во-вторых, не учитывать высокоэнергетические состояния, заведомо не дающие вклад в статистику. «Обрезание» высокоэнергетических состояний аналогично методу пространственной ренормализационной группы.

Таким образом, процедуре Монте-Карло может в общем случае предшествовать точная диагонализация исходных частей системы (по состояниям конкретных узлов или групп узлов) и построение гамильтониана (7). Переход в новый базис может быть точным, если учитываются все исходные состояния системы, или приближенным, если происходит ограничение на число состояний получившегося «узла», в этом случае гамильтониан (7) будет эффективным гамильтонианом.

Формулировка модели (7) с конкретным описанием одночастичных и двухчастичных слагаемых, которые наиболее часто встречаются в физических системах, представляется наиболее удобной и позволяет сразу использовать метод для конкретных примеров физических систем, что будет показано в следующих разделах. Для реализации разложения (5), (6) исходный (нулевой) гамильтониан и возмущение были выбраны естественным образом:

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_{kl n_1 n_2} U_{kl}^{n_1 n_2} N_k^{n_1} N_l^{n_2} + \sum_{kn} C_k^n N_k^n, \\
 V &= \sum_{kl n_1 n_2} t_{kl}^{n_1 n_2 n_3 n_4} (A_k^{n_1 n_2 \dagger} A_l^{n_3 n_4} + \text{H.c.}) + \\
 &+ \sum_{k n_1 n_2} B_k^{n_1 n_2} (A_k^{n_1 n_2} + \text{H.c.}) + \\
 &+ \sum_{kl n_1 n_2 n_3} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + \text{H.c.}),
 \end{aligned} \tag{9}$$

так что возмущение включает все недиагональные слагаемые, а диагональная часть учитывается при изменении энергии в экспонентах разложения (6).

3. ПРОЦЕДУРЫ ОБНОВЛЕНИЯ МГНОВЕННЫХ КОНФИГУРАЦИЙ В ФАЗОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

В этом разделе будут описаны все процедуры обновления траекторий, которые необходимы для эргодичности численной схемы.

Напомним, что основная идея СТWL-алгоритма [13, 14] заключается в том, чтобы совокупность состояний, содержащих замкнутые траектории в фазовом пространстве, дополнить фиктивными

состояниями, включающими разрывы траекторий (рис. 1а). Это эквивалентно добавлению к гамильтониану фиктивных слагаемых вида

$$\sum_i (b_i^\dagger + b_i) \tag{10}$$

(в узельной схеме).

Два разрыва траекторий образуют как бы «червя» («worm»), эффективно двигающегося по фазовому пространству (рис. 1а) и обновляющего траектории. При этом происходят периодические замыкания и рождения «червя» (рис. 1б). После замыкания «червя» фиктивная добавка (10) исчезает и можно собирать информацию об энергии системы и других физических величинах в реальной фазовой конфигурации. Алгоритм [13] устроен так, что допускает не более одного «червя» в конфигурации, поэтому вероятность замыкания «червя» порядка $1/L^2$, где L — размер системы. Такое обновление траекторий, когда перемещение от одной реальной конфигурации к другой происходит через большое число виртуальных (фиктивных) состояний, оказалось настолько эффективным, что резко повысило скорость сходимости алгоритма и дало возможность реализовать целый ряд модификаций алгоритма для различных моделей со спиновыми, бозонными и фермионными степенями свободы как в дискретном, так и в континуальном базисе [15–21], а также сделало схему расчета эргодичной из-за включения фазовых траекторий с ненулевым значением числа закруток фазовых траекторий (winding number) [13–15]. Заметим, что идея включения фиктивных (виртуальных) состояний также имеет место в развитых в последнее время детерминантных методах Монте-Карло [21, 23, 24], эффективных петлевых алгоритмах [25–27] и их последующих модификациях [28–30], а также в различных алгоритмах высокотемпературных разложений [31–35]. Кроме того, дополнительный учет статистики по виртуальным состояниям позволяет также в едином алгоритме получать информацию о недиагональных корреляторах (например, о мацубаровской функции Грина [13, 15–17, 20, 23]).

В представленном здесь методе также имеют место фиктивные разрывы траекторий. Однако благодаря наличию во многих моделях явных слагаемых типа (10), например, при взаимодействии с внешними поперечными полями,

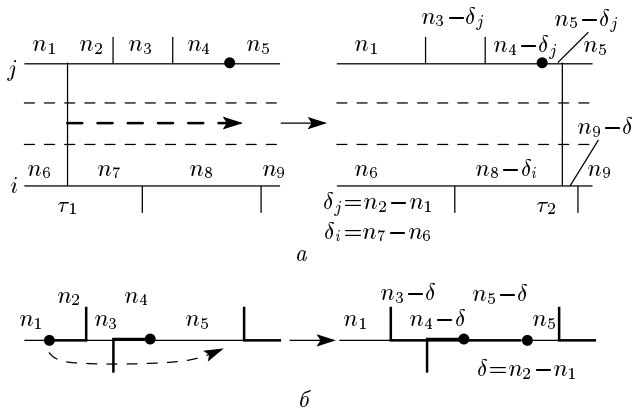


Рис. 2. *a* — Процедура «move» для кинка, связывающего два «узла». *б* — Процедура «move» для движения «червя»

$$\sum_{kn_1n_2} B_k^{n_1n_2} (A_k^{n_1n_2} + \text{H.c.}) + \sum_{kln_1n_2n_3} D_{kl}^{n_1n_2n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1n_2} + \text{H.c.}), \quad (11)$$

часто нет необходимости добавлять фиктивные члены в оператор энергии, так что все конфигурации являются реальными физическими, дающими вклад в статистическую сумму. Потому в данном подходе возможны состояния с любым количеством разрывов («червей»), и их количество диктуется величиной взаимодействий B, D . Заметим, что в случае отсутствия слагаемого типа (11) в конкретном гамильтониане его все равно необходимо включить для обновления траекторий перехода $n_1 \leftrightarrow n_2$, присутствующего в первом недиагональном слагаемом, пропорциональном t , и считать фиктивным. При этом накладывается ограничение на количество фиктивных «червей». Окончательно, в схеме возможны как реальные, так и фиктивные «черви», согласно слагаемому (11), при этом все они обновляются по единой схеме Метрополиса.

Для реализации метода были разработаны специальные процедуры обновления состояний в фазовом пространстве, аналоги процедур «kink-antikink», «move», «jump», «reconnection», «creation-annihilation» в алгоритме CTWL (см. [13]). Эти модифицированные процедуры схематично представлены на рис. 2–5.

На рис. 2 показана процедура «move» — движения либо кинка, связывающего два «узла», не обязательно соседних (рис. 2*a*), либо разрыва траектории — «червя» (рис. 2*б*). Заметим, что перемещение кинка («червя») возможно не обязательно с фик-

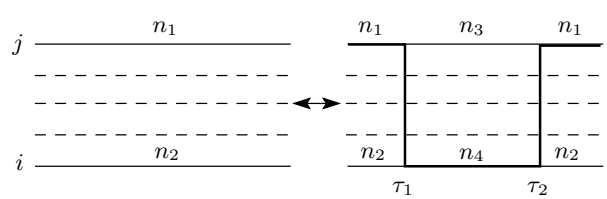


Рис. 3. Процедура «kink-antikink», изменяющая состояние без разрыва траекторий

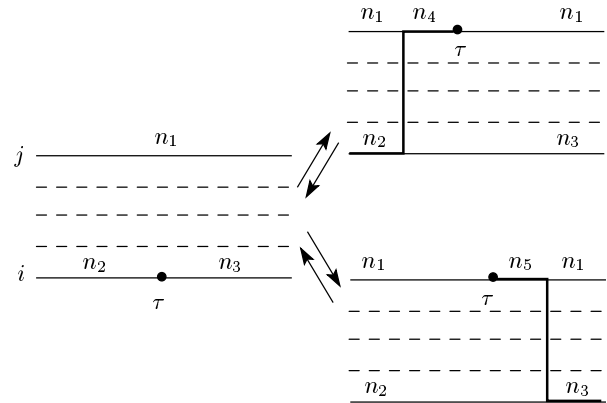


Рис. 4. Процедура «jump-antijump». Согласно [13], эта же процедура может быть и процедурой «reconnection-antireconnection», отличаясь от первой только заменой «дырка» \leftrightarrow «частица»

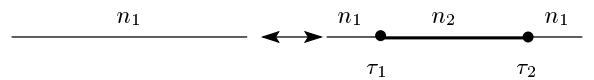


Рис. 5. Процедура «creation-annihilation». «Частица» («дырка») здесь условно понимается как $n_1 < n_2$ ($n_1 > n_2$)

сированными изменениями чисел заполнения δ_i, δ_j , как представлено на рисунке, возможен вариант с вероятностным выбором типа кинка в каждом интервале по τ . Это одна из важнейших процедур для эффективного обновления конфигураций: из-за большого разнообразия в общем случае типов кинков («червей») необходимы их постоянные перестановки по шкале мнимого времени.

На рис. 3 показана модифицированная процедура «kink-antikink» (и обратная к ней), на рис. 4 — процедура «jump-antijump», включающая в себя в данном алгоритме автоматически и процедуру «reconnection-antireconnection» [13], на рис. 5 — аналог процедуры «creation-annihilation». Общее замечание по этим процедурам состоит в следующем: для чисел заполнения в этом методе нет понятий

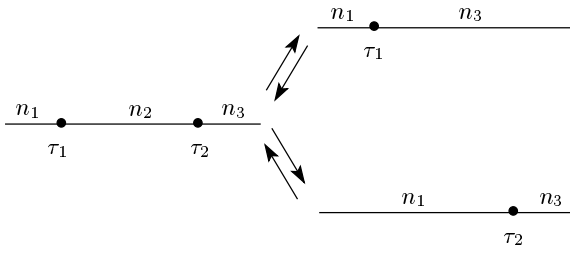


Рис. 6. Дополнительные процедуры, приводящие к изменению чисел и сортов разрывов («червей»)

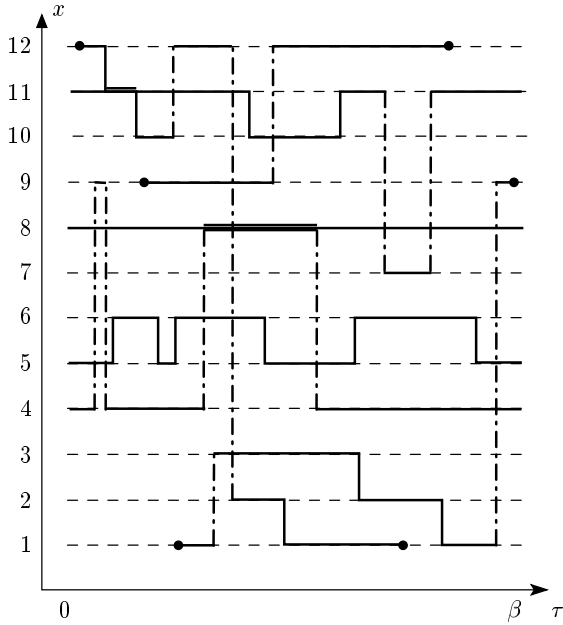


Рис. 7. Типичная мгновенная конфигурация в фазовом пространстве (фазовые траектории) при моделировании с помощью нового алгоритма методом Монте-Карло в 12-узельном кластере. Занятые состояния отмечены жирными линиями. Вертикальные линии — переходы между состояниями — кинки. Точками показаны обрывы траекторий, соответствующие слагаемым типа $A_i^{n_1 n_2}$, $A_j^{n_1 n_2 \dagger}$. Все траектории, кроме обрывов («червей»), связаны, соединение происходит через несколько «узлов», т. е. моделируется ситуация с переходами не только на ближайшие «узлы»

«частица» и «дырка», что было существенно при реализации СТWL-алгоритма для узельных моделей типа модели Хаббарда. Тем не менее, в данном подходе все процедуры условно делятся на два класса: «электроноподобные» и «дырочноподобные» (например, с $n_1 > n_3$ и с $n_1 < n_3$ для процедуры «kink-antikink» на рис. 3), что облегчает составление корректных соотношений детального баланса.

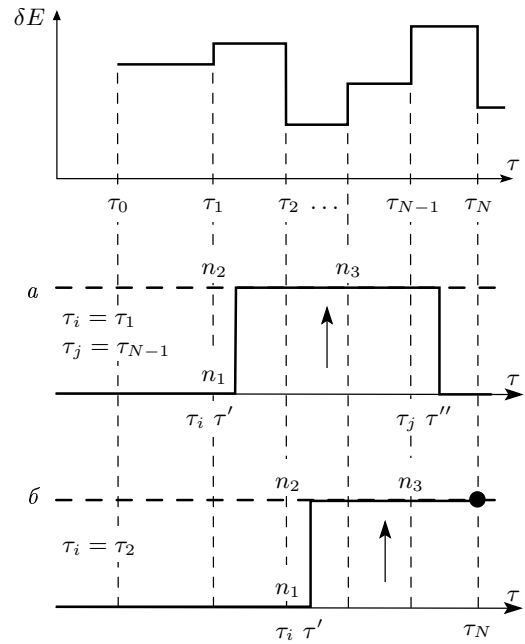


Рис. 8. Процедуры «kink-antikink» (a) и «jump» (b), реализующиеся на фоне кусочной функции $\delta E(\tau)$ — приращения энергии от диагональных слагаемых за счет изменения состояния

Были также введены дополнительные процедуры, учитывающие возможность различных способов изменения узельных состояний. Эти процедуры показаны на рис. 6. В частном случае $n_3 = n_1 + 1 = n_2 + 2$ на языке узельного базиса их можно интерпретировать как переходы состояний типа

$$\begin{aligned}
 a(\tau_1) \dots (a^\dagger(\tau_2))^2 &\leftrightarrow a^\dagger(\tau_1) \dots, \\
 a(\tau_1) \dots (a^\dagger(\tau_2))^2 &\leftrightarrow a(\tau_2) \dots,
 \end{aligned}
 \tag{12}$$

при этом меняются количество и сорта обрывов траекторий («червей»). Пример мгновенной конфигурации системы с несколькими разрывами траекторий для 12-узельного кластера, полученной в процессе счета, представлен на рис. 7.

Расчет соответствующих вероятностей переходов между состояниями выполняется согласно подходу, изложенному в работе [13], с учетом уравнений детального баланса, вероятностей обращений к процедурам и других необходимых атрибутов стохастической схемы для корректной реализации алгоритма Метрополиса, поэтому мы остановимся только на особенностях расчета применительно к данному алгоритму. Заметим, что для учета слагаемых вида

$$\sum_{kl n_1 n_2 n_3} D_{kl}^{n_1 n_2 n_3} N_l^{n_3} (A_k^{n_1 n_2} + \text{H.c.}) \quad (13)$$

необходимо при любом движении или изменении «червя» $A_k^{n_1 n_2}$ учитывать взаимодействие внешнего поля, характеризуемое параметром $D_{kl}^{n_1 n_2 n_3}$, с узлом l в состоянии n_3 . Таким образом, во всех процедурах, связанных с разрывами траекторий, следует учитывать такое взаимодействие (т. е. все разрывы траекторий все время находятся в постоянно меняющемся поле взаимодействия $D_{kl}^{n_1 n_2 n_3}$) и пересчитывать амплитуды «червей» старого и нового состояний с учетом параметра D . Затем точно рассчитываются все изменения энергий в соответ-

ствии с выражением (9) для H_0 . Для этого вероятности переходов были обобщены на случай кусочно-непрерывного действия, порожденного потенциалом взаимодействия с другими «узлами», на фоне которого происходят все изменения состояний на выбранных «узлах».

За счет изменения состояния появляется приращение энергии $\delta E(\tau)$ — кусочная функция мнимого времени τ , определяемая всеми диагональными взаимодействиями H_0 (рис. 8). С учетом этого отношение статистических весов нового и старого состояний в процедуре «kink–antikink» (как и в процедуре «creation–annihilation») (рис. 8a) равно

$$\frac{W_{new}}{W_{old}}[i, j] = \begin{cases} Q_1(\tau_i) Q_1(\tau_j) \exp \left[- \int_{\tau_{i+1}}^{\tau_{j-1}} \delta E(\tau) d\tau \right] \prod_{k=i}^j \delta V_k, & i \neq j, \\ Q_2(\tau_i) \delta V_i, & i = j, \end{cases}$$

$$\delta V_k = \frac{V_k^{new}}{V_k^{old}}, \quad (14)$$

$$Q_1(\tau_i) = \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} d\tau' \exp[-\delta E(\tau')(\tau' - \tau_i)],$$

$$Q_2(\tau_i) = \int_{\tau_i}^{\tau_{i+1}} d\tau' \int_{\tau_i}^{\tau'} d\tau'' \exp[-\delta E(\tau')(\tau' - \tau'')],$$

а в процедуре «jump» (рис. 8б) оно равно

$$\frac{W_{new}}{W_{old}}[i] = Q_1(\tau_i) \exp \left[- \int_{\tau_{i+1}}^{\tau_N} \delta E(\tau) d\tau \right] \prod_{k=i}^N \delta V_k. \quad (15)$$

Здесь V_k — матричный элемент (см. (6)) недиагонального взаимодействия (9), меняющего базисную функцию при мнимом времени τ_k . В частности, в произведение $\prod_{k=i}^j \delta V_k$ входят и множители от появившихся дополнительных кинков (или «червей») (рис. 8):

$$|t_{ij}^{n_1 n_2 n_3 n_4}|^2 - \text{«kink–antikink»}, \quad (16)$$

$$t_{ij}^{n_1 n_2 n_3 n_4} B_j^{n_3 n_2} - \text{«jump»}.$$

Процедура выбора конкретных значений τ' и τ'' (см. рис. 8) состоит из трех этапов.

1. С учетом детального баланса оценивается суммарная статистическая вероятность появления в интервале (τ_0, τ_N) нового состояния вида, показанного на рис. 8:

$$\frac{W_{new}}{W_{old}}[\text{kink–antikink}] = \sum_{i,j} \frac{W_{new}}{W_{old}}[i, j], \quad (17)$$

$$\frac{W_{new}}{W_{old}}[\text{jump}] = \sum_i \frac{W_{new}}{W_{old}}[i].$$

2. Если возможно появление такого состояния, взвешивается относительная вероятность реализации кинков уже в конкретных интервалах (τ_{j+1}, τ_j) , (τ_{i+1}, τ_i) т. е. взвешиваются между собой слагаемые в суммах (17).

3. Внутри интервалов (τ_{i+1}, τ_i) , (τ_{j+1}, τ_j) происходит выбор конкретных значений τ' и τ'' согласно распределениям вероятностей — подынтегральным функциям в выражениях для $Q_{1,2}(\tau)$.

4. РАСЧЕТ МОДЕЛИ ХОЛСТЕЙНА – ХАББАРДА

В этом и следующих разделах представлены результаты тестирования предложенного алгоритма для небольших физических систем. Выбор малых кластеров диктовался необходимостью точной проверки результатов метода Монте-Карло с помощью метода точной диагонализации гамильтоновой матрицы.

Алгоритм Монте-Карло был протестирован на модели Холстейна – Хаббарда (3) для четырех узлов для случая периодических условий. Для конкретной реализации использовались как узельное (3), так и импульсное представление (4). Покажем, как одну и ту же задачу для схемы (7) можно представить в существенно различных видах.

Узельная кодировка является, в общем случае, стандартной для таких моделей. Отметим только, что имеет место три типа «узлов» — два электронных (для каждой проекции спина) с заполнением $n = 0, 1$ и один бозонный с заполнением $n_b = 0, 1, \dots, N_{max}$ (в рассматриваемом случае $N_{max} = 4$). Таким образом, имеем 12-узельный кластер из различного типа «узлов».

Кодировка состояний в импульсном базисе показана на рис. 9; 16 возможных электронных состояний (для одной проекции спина) представлены как «числа заполнения» n от 0 до 15 и помещены на один «электронный узел», а фононы остаются в стандартном узельном представлении (на четырех узлах), причем разрешенные состояния фононов $n_b = 0, 1, \dots, 4$. Таким образом, для метода Монте-Карло имеем шесть эффективных «узлов»: два электронных с 16 состояниями для каждого спина и четыре бозонных, каждый с пятью возможными состояниями. Удобство представления электронных состояний одним эффективным «узлом» состоит в том, что все матричные элементы в формуле (4) с учетом антисимметрии заранее рассчитываются и закладываются в схему метода Монте-Карло. Если исходно в (4) присутствуют четырехфермионные слагаемые, связанные с четырьмя различными импульсами, то в конечном выражении (7) получают только члены гамильтониана, связывающие либо два эффективных электронных «узла», либо один электронный и один бозонный «узел», что укладывается в схему процедур обновления конфигураций, обсуждавшихся в предыдущем разделе. Более того, и в узельной схеме можно объединять фермионы в эффективные «узлы», что существенно упрощает моделирование.

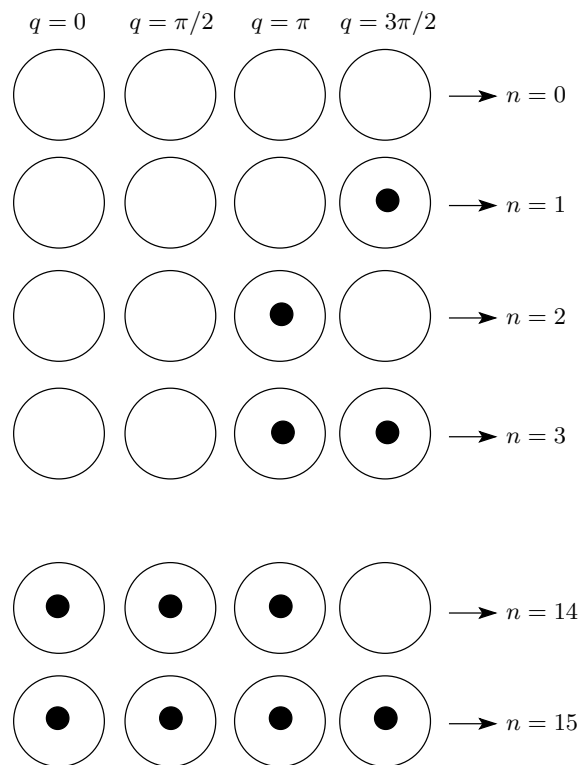


Рис. 9. Кодировка импульсов для одной проекции спина электронов в модели Холстейна – Хаббарда

Для проверки корректности метода проводилась точная диагонализация гамильтоновой матрицы модели (и в узельном, и в импульсном представлении).

На рис. 10 представлены зависимости числа фононов от величины константы электрон-фононного взаимодействия (данные совпадают в обеих кодировках). Заметим, что число электронов выдерживалось равным половинному заполнению по узлам. Как видно из рисунка, с ростом константы взаимодействия число фононов также возрастает, что совпадает с теоретическими предсказаниями. Какие-либо более детальные сопоставления с теорией проводить рано, так как рассмотренный кластер слишком мал. Кроме того, напомним, что в данной работе сделан акцент в основном на методологическом аспекте и на тестировании нового алгоритма. Тем не менее, заметим, что о проведении корректных расчетов фононной подсистемы методами Монте-Карло в многочастичной электронной задаче без дополнительных упрощений нам неизвестно, так как даже редуцированное электрон-фононное слагаемое в формуле (3) для одной фононной моды представляет собой достаточно сложную часть взаимодей-

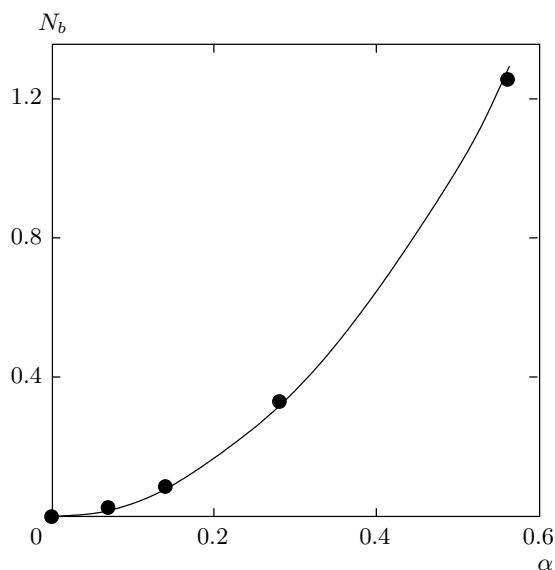


Рис. 10. Зависимость числа фононов N_b от величины электрон-фононного параметра α в модели Холстейна–Хаббарда. Результаты расчетов методом Монте-Карло (точки) и методом точной диагонализации (сплошная кривая). Число узлов $N_a = 4$, периодическая одномерная цепочка. Параметры модели: $t = 1.4$, $U = 0.5$, $\Omega = 1$, $\mu = 0.5$, $\beta = 10$

ствия для прямых расчетов с помощью алгоритмов метода Монте-Карло.

Из рис. 10 видно, что результаты, полученные методом Монте-Карло и методом точной диагонализации, практически совпадают.

Конечно, проблема знака, типичная для фермионов, имеет место и для этой модели. Однако в импульсном базисе состояния уже первично отсортированы по диагональным энергиям вида $\sum_q a_q^\dagger a_q$, что существенно ослабляет проблему. Кроме того, при практически половинном заполнении на узле (для фермионов), что имеет место для данного случая, из-за симметрии «частица–дырка» проблема знака также частично решена.

5. РАСЧЕТ МОДЕЛИ БОЗЕ – ХАББАРДА С $S = 1$

Предложенный в настоящей работе метод был также использован для анализа модели бозонов с $S = 1$ (1) — наиболее адекватной модели для бозе-газа в магнито-оптических ловушках при сверхнизкой температуре.

Способы кодирования состояний проиллюстри-

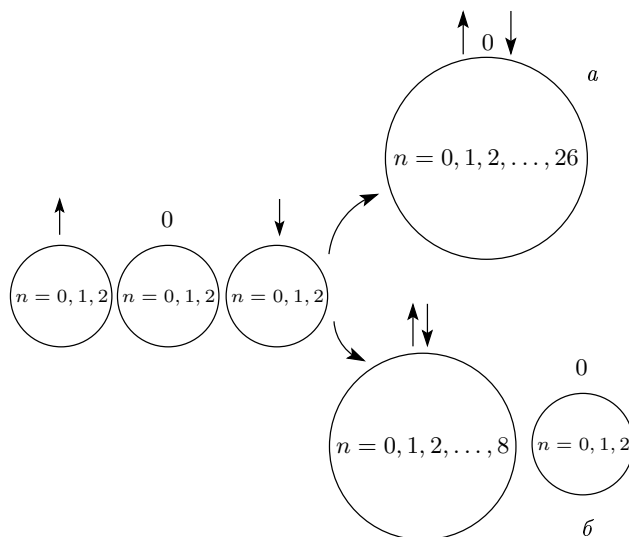


Рис. 11. Два типа кодировки на «узле» для модели бозонов с $S = 1$ при $N_{max} = 2$: *a* — объединение всех проекций в один эффективный «узел» с числом состояний 27; *б* — представление в виде двух «узлов» — с ненулевыми и нулевой проекциями спина, с числом состояний 9 и 3, соответственно

рованы на рис. 11. Заметим, что самая проблемная часть гамильтониана (1) — это слагаемые вида $a_1^\dagger a_{-1}^\dagger a_0 a_0$ (см. (2)), так как они связывают три проекции спина, т. е. три «узла», если бы отдельно учитывалась каждая проекция. Объединяя состояния с двумя (или со всеми тремя) проекциями спина в состояния одного эффективного «узла» (рис. 11), схему Монте-Карло можно упростить, что позволяет рассчитать характеристики системы бозонов с $S = 1$. Такое представление соответствует предложенной выше схеме обновления конфигураций. Существенно, что для одной и той же модели можно использовать различные кодировки, исходя из удобства расчетов.

Результаты расчетов методом Монте-Карло энергии системы и числа заполнения бозонов показаны на рис. 12. Эти данные также были протестированы с помощью метода точной диагонализации. При расчетах методом точной диагонализации максимальные числа заполнения бозонов были существенно ограничены ($n_b = 0, 1, 2$), что обуславливалось возможностями данного метода. Заметим, что для корректной проверки необходимо, чтобы все три проекции спинов бозонов при расчете методом Монте-Карло имели те же числа заполнения, что и при расчете методом точной диагонализации. Ме-

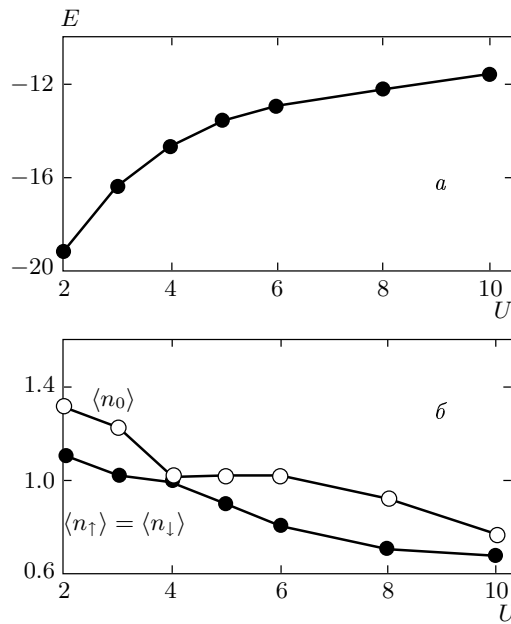


Рис. 12. Зависимости энергии системы (а) и среднего числа заполнения бозонов (б) для различных проекций спина от параметра взаимодействия U . Расчет методом Монте-Карло модели бозонов с $S = 1$ на трех узлах. Максимальное заполнение узла $N_{max} = 2$ (три состояния на узле для одной проекции спина). Параметры модели: $t = 1$, $\mu = 0.5$, $U_2 = -0.5$, $\beta = 10$. Проведена перекодировка состояний со спинами ± 1 , так что в расчете используется эффективный «узел» с числом состояний $3 \times 3 = 9$

няя значения химического потенциала, нам удалось достичь совпадения результатов для чисел заполнения бозонов, полученных обоими методами, и показать, что в пределах погрешности совпадают и рассчитанные этими методами значения энергии системы.

Как видно из рис. 12, число бозонов для различных проекций спина как функция параметра взаимодействия испытывает излом при $U \approx 4$: в этой точке происходит резкое перераспределение бозонной плотности между нулевой и ненулевыми компонентами спина. Конечно, кластер слишком мал, чтобы делать какие-либо выводы о наличии фазового перехода, кроме того, при расчетах использовано слишком сильное ограничение на максимальные числа заполнения ($N_{max} = 2$). Однако можно сказать, что полученные результаты согласуются как с выводами о возможности фазового перехода первого рода [5], так и с наблюдениями своеобразной димеризации основного состояния [36].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен новый эффективный алгоритм квантового метода Монте-Карло, основанный на предложенном в работах [13, 14] алгоритме CTWL. Основные характерные черты данного подхода — использование обобщенного дискретного базиса, гибкость схемы Монте-Карло, позволяющая рассчитывать сложные физические системы со смешанной статистикой, возможность работать с произвольным числом разрывов траекторий («червей») в мгновенных конфигурациях. Кроме того, возможны предварительная частичная диагонализация исходной системы, и, как следствие, реализация начальной сортировки узельных состояний по энергии, что приводит к более эффективной сходимости алгоритма и к ослаблению проблемы знака.

Для краткости изложения детали расчета различных корреляционных функций в настоящей работе не обсуждались, однако следует заметить, что в рамках данного подхода на основании информации о статистике «червей» несложно получить информацию о температурной функции Грина $\langle A_k^{n_1 n_2 \dagger}(0) A_l^{n_3 n_4}(\tau) \rangle$.

Авторы выражают благодарность П. Ф. Карцеву за полезные обсуждения работы. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-02-16406).

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Mathey, S.-W. Tsai, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **97**, 030601 (2006).
2. S. Tsuchiya, S. Kurihara, and T. Kimura, Phys. Rev. A **70**, 043628 (2004).
3. K. V. Krutitsky and R. Graham, Phys. Rev. A **70**, 063610 (2004).
4. T.-L. Ho, Phys. Rev. Lett. **81**, 742 (1998); T. Ohmi and K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1822 (1998); D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **80**, 2027 (1998).
5. T. Kimura, Phys. Rev. Lett. **94**, 110403 (2005).
6. K. W. Krutitsky, M. Timmer, and R. Graham, Phys. Rev. A **71**, 033623 (2005).
7. M. Hohenadler, M. Aichhorn, and W. Linden, Phys. Rev. B **71**, 014302 (2005).

8. S. Mishchenko and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036402 (2004).
9. Z. B. Huang, W. Hanke, and E. Arrigoni, *Phys. Rev. B* **68**, 220507 (2003).
10. A. S. Alexandrov, *Phys. Rev. B* **61**, 12315 (2000).
11. С. С. Аплеснин, *ЖЭТФ* **124**, 1080 (2003).
12. S. Mishchenko, N. Nagaosa, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. B* **66**, 020301 (2002).
13. N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, E-print archives, cond-mat/9703200; Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, *Письма в ЖЭТФ* **64**, 853 (1996).
14. Н. В. Прокофьев, Б. В. Свистунов, И. С. Тупицын, *ЖЭТФ* **87**, 310 (1998); N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn, *Phys. Lett. A* **238**, 253 (1998).
15. V. A. Kashurnikov, A. V. Krasavin, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. B* **58**, 1826 (1998); V. A. Kashurnikov, N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and M. Troyer, *Phys. Rev. B* **59**, 1162 (1999).
16. P. F. Kartsev, *Phys. Rev. A* **68**, 063613 (2003); П. Ф. Карцев, *ЖЭТФ* **124**, 932 (2003).
17. A. S. Mischenko, N. V. Prokof'ev, A. Sakamoto, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. B* **62**, 6317 (2000); A. S. Mischenko, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. B* **64**, 033101 (2001).
18. E. A. Burovski, A. S. Mishchenko, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 186402 (2001).
19. V. A. Kashurnikov, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. A* **66**, 031601 (2002).
20. A. Kuklov, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 050402 (2004).
21. E. Burovski, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, *Phys. Rev. B* **70**, 193101 (2004).
22. А. С. Мищенко, *УФН* **175**, 925 (2005).
23. M. Boninsegni, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 070601 (2006); *Phys. Rev. E* **74**, 036701 (2006).
24. A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, and A. I. Lichtenstein, *Phys. Rev. B* **72**, 035122 (2005).
25. N. Kawashima, J. E. Gubernatis, and H. G. Evertz, *Phys. Rev. B* **60**, 136 (1994).
26. B. B. Beard and U. J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5130 (1996).
27. H. Onishi, M. Nishino, N. Kawashima, and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 2547 (1999).
28. O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik, *Phys. Rev. E* **66**, 046701 (2002).
29. P. Henelius, P. Frobrich, P. J. Kuntz, C. Timm, and P. J. Jensen, *Phys. Rev. B* **66**, 094407 (2002).
30. M. V. Zyubin and V. A. Kashurnikov, *Phys. Rev. E* **69**, 036701 (2004).
31. A. W. Sandvik, R. R. P. Singh, and D. K. Campbell, *Phys. Rev. B* **56**, 9051 (1997).
32. A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **59**, R14157 (1999).
33. M. V. Mostovoy, D. I. Khomskii, and J. Knoester, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 147203 (2003).
34. N. Prokof'ev and B. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 160601 (2001).
35. V. A. Kashurnikov, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 120402 (2001).
36. V. Apaja and O. F. Syljuasen, *Phys. Rev. A* **74**, 035601 (2006).