

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫

成果報告
 期中進度報告

計畫類別： 個別型計畫 整合型計畫

計畫編號：NSC 96-2112-M-029-003-MY3

執行期間：96年8月1日至99年7月31日

執行機構及系所：東海大學物理系

計畫主持人：陳永忠

共同主持人：

計畫參與人員：

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告 完整報告

本計畫除繳交成果報告外，另須繳交以下出國心得報告：

- 赴國外出差或研習心得報告
- 赴大陸地區出差或研習心得報告
- 出席國際學術會議心得報告
- 國際合作研究計畫國外研究報告

處理方式：除列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年 二年後可公開查詢

中 華 民 國 99 年 10 月 31 日

國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

- 達成目標
- 未達成目標（請說明，以 100 字為限）
- 實驗失敗
 - 因故實驗中斷
 - 其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

- 論文： 已發表 未發表之文稿 撰寫中 無
- 專利： 已獲得 申請中 無
- 技轉： 已技轉 洽談中 無
- 其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以 500 字為限）

在自旋 1 的反鐵磁森堡鍵的 Gaussian 相變問題上顯示以 fidelity 來決定相變並非絕對有效，研究人員應嘗試其他的判斷方法，近來有研究群指出能量的高階導數的不連續性可能是其他的判斷法。1/4 填滿 $t-v_1-v_2$ 模型的研究成果是本計畫最重要的貢獻，我們相信更多的理論與數值計算將有助於我們理解超固體發生的機制與條件。各向異性的三角形晶格的相變行為是非常有趣的結果，它將強關聯系統因一作用參數的連續改變而導致系統基態之相變表露無遺。

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

以數值方法研究強關聯超導與超流體系的相變問題

Numerical Study of the Quantum Phase Transition of the Strongly Correlated Superconductors and Superfluids

計畫編號：NSC 96-2112-M-029-003-MY3

執行期限：96年8月1日至99年7月31日

主持人：陳永忠 執行機構及單位名稱：東海大學物理系

電子信箱(E'mail)位址：ycchen@thu.edu.tw

一、中文摘要

本計畫的工作成果包括(1).建立變分蒙地卡羅法及格林函數蒙地卡羅法在強關聯玻色子系統中之研究，並完成二維平方晶格之超固相研究(2).以密度矩陣重正化法研究一維強關聯自旋中的Haldane相。(3).以格林函數蒙地卡羅法及Swinger Boson平均場計算異向性三角形格硬核玻色子模型。上述成果居已發表[1,2,3,4]。仍在進行中的工作，則有強關聯雙層玻色子系統及三體限制的強關聯玻色子模型。

Abstract

We have completed the following works in the last three years: (1) Multi-parameters optimization in Variational Monte Carlo method, (2) ground-state properties of the anisotropic bosonic Hubbard model in the triangular lattice, and (3) t-V₁-V₂ HCB on the square lattice. (4) Green's Function Monte Carlo method is employed to explore the ground state properties. (5) The supersolid phases in the t-V₁-V₂ model at density 1/4 and 4/3 are verified. The results of the above research works are all published. The ongoing topics are numerical studies of (1) strongly correlated double-layer Hubbard bosons and (2) Bose-Hubbard with three-body constraint.

Keywords: Variational Monte Carlo method, triangular anisotropic bosonic Hubbard

model, t-V₁-V₂ HCB, Green's Function Monte Carlo, star supersolid

二、研究結果

1. 自旋S=1的反鐵磁海森堡模型之高斯相變

自旋S=1的反鐵磁海森堡模型的相圖已有許多的研究結果，然而以量子資訊研究的fidelity及entanglement entropy來研究其量子相變則為新的嘗試。一維自旋模型中包括兩個參數， λ 及D， λ 是近鄰自旋交互作用在自旋空間的異向性，D則為z軸單離子異向性(single-ion anisotropy)。

Fidelity是系統在微量的變數變化下，相鄰兩基態波函數的內積，當系統發生量子相變時，fidelity應有一劇烈的變化，因而可藉由fidelity的計算來判斷系統可能的量子相變。在數值的研究中，我們挑選三個 λ 值，分別2.59、1及0.5並且在 λ 固定的情況下，計算fidelity對D的函數關係，藉以判斷可能的量子相變。結果我們發現 $\lambda=2.59$ 及1均可以fidelity來得到Dc分別為2.293及1，與文獻中的結果一致。然而 $\lambda=0.5$ 則無法以fidelity的計算得到文獻中Dc=0.65。

2. t-V₁-V₂ HCB 模型研究

在量子自旋系統中加上磁場後測量其磁化強度會觀測到磁化強度平台，這個現象是由於量子力學效應以及強關聯作用的具體展現。從理論上，量子自旋可轉換為

作用的玻色子系統，在實驗上則有液態氦所屬的超流體與之相應。新近由冷原子領域的快速發展，科學家能以雷射光束製作理論上的晶格結構，再將冷原子(玻色子或費米子)置入其中，便可模擬強關聯作用的量子系統。由於這些實驗技術與物理的突破，理論上所預言的超固體相也在實驗上被證實了。

計畫主持人延續在強關聯電子系統的經驗，擴展至強關聯玻色子系統。我們的主要工作是希望將「多變數變分蒙地卡羅法」用到玻色子系統。雖然「隨機級數展開蒙地卡羅法」(SSE)能提供近乎精確基態的數值結果，然而對於有組錯或是費米子-玻色子混合的系統則因為有負號問題，此法將無法應用。相對的，變分法不受負號影響，並且可提供基態波函數的解析性質。

此領域的標準模型是 $V=2$ 的 t - V 硬核玻色子平方晶格(Hard Core Boson, HCB)，與此對應的量子自旋系統即為 $S=1/2$ 反鐵磁海森堡模型。由於高溫超導的緣故，此模型已有豐富的數值與解析的研究工作。1988年 Huse 及 Essler(HE)提出以 Jastrow 的 pair correlation function 方式架構的波函數，其所得之變分能量非常接近基態。

HE 所用的 Jastrow 函數是 power-law，然而我們將所有的 $V(|i-j|)$ 視為獨立的變分函數，經以 Newton method 優化後則發現指數函數才是正確的行為，關於這一點我們認為是有限尺度效應所造成。證實變分法能成功地應用到強關聯玻色子模型後，我們完成了兩個工作。其一是與 University of Toronto 合作，計算 anisotropic 三角形晶格 HCB(Harf Core Boson)以及平方晶格的 t - V_1 - V_2 HCB 模型。在三角形晶格上，我們發現隨著異向性的增大，超固體的 Diagonal order 的向量 Q 會跟著改變，似乎形成所謂的非同調的超固體(Incommensurate Supersolid)。這是一個新發現，我們已將這個成果發表於 European

Physics Letters。在 t - V_1 - V_2 模型方面，本計畫主持人與本系吳桂光教授合作研究在密度 $1/4(3/4)$ 時存在的超固體。我們的變分法研究結果與吳教授的量子蒙地卡羅的結果一致，證實了 $1/4$ 超固體確實存在，並且隨著密度的改變可觀測到 $1/4$ 超固體與條紋超固體之間的一階相變。這結果也已發表於 Physical Review B。

我們所發現的 star 超固體也為同時期的另兩個研究群所證實，但這兩個工作均強調超固體僅在偏離 $1/4$ 密度時才出現，並且相信只要是分數密度下不可能存在同調超固體(commensurate supersolid)。針對這個議題，我們在這一年的工作中，試圖以不同的數值方法來檢驗。首先我們以精確對角化法(ED)計算 6×6 晶格的精確解，以提供 QMC 及 VMC 比較。我們發現 QMC 的結果與 ED 的結果完全吻合，而 VMC 計算的臨界 V_1, V_2 則有較大有誤差。為了進一步佐證 QMC 在大晶格的數據，我們決定利用 GFMC 來進一步改進 VMC 的結果。我們的 GFMC 數據亦顯示 QMC 的計算是精確的，在 $1/4$ 填滿的密度下，基態確實存在超固體。

3. 雙層玻色子系統之研究

在平方晶格的硬核玻色子 t - V 模型中，研究發現在半填滿時，系統只有超流及固體兩相($V_c=2t$)，不存在超固體。即使密度偏離 0.5，系統發生不穩定形成超流與固體相分離，超固相仍無法形成。在考慮雙層的模型中則發現，由於層間的交互作用，使得超固體可以形成。透過玻色子與自旋的轉換，雙層玻色子系統對應於雙層磁性系統，然而模型計算所得的超固相發生區域具有過大的自旋異向性作用($V \gg t$)，磁性材料中很難實現。如果除了近鄰作用之外尚且存在 frustration，例如層間的對角線交互作用，則可能間接造成自旋

異向性作用，因而形成超固相。然而有層間對角交互作用的模型因有「負號問題」無法以量子蒙地卡羅模擬計算，目前尚無可靠的數值結果來確認此一猜測。VMC 法雖不是精確的數值方法，但在玻色子的超固相研究尚且可以給出定性上正確的預測，並且沒有負號問題的限制[5,6]，因此我們將考慮使用 VMC 來進行雙層玻色子模型在 Frustration 作用下的超固相研究。

若在層間引入玻色子的吸引或排斥，將分別導致配對(pair)或反配對(anti-pair)玻色子超流體。最近的研究指出，若在雙層玻色子模型中引入近鄰及 Hubbard U 的庫侖作用，則有可能形成配對超固體。事實上，我們也可考慮平面模型，但允許一晶格點可有雙佔據，但三體以上的佔據完全排除，則也可能經由調適 on-site 吸引 ($U < 0$)，而得到配對的超流體[16,17,18]。目前我們仍在進行這些研究工作。

三、計畫成果自評

由上述的結果可以看出，我們的工作釐清了早先研究工作的一些不適當處。這對於國內外相關的後續研究工作有著相當程度的幫助。

在自旋 1 的反鐵磁森堡鏈的 Gaussian 相變問題上顯示以 fidelity 來決定相變並非絕對有效，研究人員應嘗試其他的判斷方法，近來有研究群指出能量的高階導數的不連續性可能是其他的判斷法。1/4 填滿 $t-v_1-v_2$ 模型的研究成果是本計畫最重要的貢獻，我們相信更多的理論與數值計算將有助於我們理解超固體發生的機制與條件。各向異性的三角形晶格的相變行為是非常有趣的結果，它將強關聯系統因一作用參數的連續改變而導致系統基態之相變表露無遺。

整體而言，我們在此三年計畫共發表了

四論文，兩篇 Physical Review，一篇 Europhys Letters 及一篇 Journal of Physics C，符合我們的預期成效。

四、參考文獻

1. K.K. Ng and Y.C. Chen, "Supersolid phases in the bosonic extended Hubbard model", PHYSICAL REVIEW B 77, 52506 (2008).
2. Yu-Chin Tzeng, Hsiang-Hsuan Hung, Yung-Chung Chen, and Min-Fong Yang, "Fidelity approach to Gaussian transitions", PHYSICAL REVIEW A 77, 62321 (2008).
3. Sergei V. Isakov, Hong-Chi Chien, Jian-Jheng Wu, Yung-Chung Chen, Chung-Hou Chung, Krishnendu Sengupta and Yong Baek Kim, "Commensurate lock-in and incommensurate supersolid phases of hard-core bosons on anisotropic triangular lattices", Europhysics Letters, 87, 36002 (2009).
4. K.K. Ng, Y.C. Chen and Y. C. Tzeng, "Quarter-filled supersolid and solid phases in the extended Bose-Hubbard model", J. Phys.: Condens. Matter 22, 185601 (2010).
5. A. Hemmerich and T. W. Hansch, Phys. Rev. Lett. 70, 410 (1993).
6. D. Jaksch et al., Phys. Rev. Lett. 81, 3108 (1998).
7. M. Greiner et al., Nature (London) 415, 39 (2002).
8. M. Ben Dahan et al., Phys. Rev. Lett. 76, 4508 (1996);
9. S. R. Wilkinson et al., Phys. Rev. Lett. 76, 4512 (1996).
10. J. H. Denschlag et al., J. Phys. B 35, 3095 (2002).
11. M. Freedman et al., Ann. Phys. (N.Y.)

- 310, 428 (2004).
12. E. Kim and M. H. W. Chan, *Nature* (London) 427, 225 (2004).
 13. A. J. Legett, *Science* 305, 1921 (2004).
 14. M. Greiner et al., *Phys. Rev. Lett.* 87, 160405 (2001).
 15. E. A. Altman et al., *Phys. Rev. A* 70, 013603 (2004).
 16. S. Diehl, M. Baranov, A. J. Daley, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* 104, 165301 (2010).
 17. S. Diehl, M. Baranov, A. J. Daley, and P. Zoller, arXiv:0912.3192 and 0912.3196.
 18. K. P. Schmidt, J. Dorier, A. Läuchli, and F. Mila, *Phys. Rev. B* 74, 174508 (2006).