

多自旋相互作用 Ising 模型相变类型的 Monte Carlo 研究

张国民 杨传章

苏州大学物理系, 苏州 215006

1992 年 8 月 3 日收到;

1993 年 3 月 3 日收到修改稿

利用 Monte Carlo 方法, 我们发现在水平方向上具有 m 自旋相互作用而在竖直方向具有 n 自旋相互作用的二维 Ising 模型. 当 $m=n=3$ 时, 其相变是一级相变, 而当 $m=3, n=2$ 时, 其相变却是二级相变.

PACC: 7510H; 7540C

一、引 言

近年来, 多自旋相互作用 Ising 模型引起了人们的浓厚兴趣, 这是因为不仅多自旋相互作用本身能够用来描述许多物理问题^[1,2], 而且由于多自旋的相互作用, 将使系统呈现许多二自旋相互作用所无法呈现的物理现象^[3,4], 使人们对临界和相变性质有了更深入的了解. 最近 Turban^[5]又引入了一种包含有多自旋相互作用的 q 态 Potts 模型, 研究相变性质随 q 和自旋相互作用个数的变化而变化的情况, 并指出随着 q 和自旋相互作用个数的增加, 系统将会从二级相变过渡到一级相变, 因此当 q 确定时, 具体确定当自旋相互作用数目究竟取多少时系统发生二级相变, 又取多少时系统开始发生一级相变, 是研究相变中的一个最基本的问题. 本文的目的就是试图通过 Monte Carlo 方法确定当 $q=2$ 即系统是 Ising 模型时, 自旋相互作用数目究竟取多少时系统开始发生一级相变.

二、多自旋相互作用模型与 Monte Carlo 方法

Turban^[5]引进的 q 态 Potts 模型在 $q=2$ 时, 其哈密顿量为

$$-\beta H = \sum_{\langle ij \rangle} \left\{ k_x \prod_{l_x=0}^{m-1} S_{i,j,l_x} + k_r \prod_{l_y=0}^{n-1} S_{i,j+l_y} \right\}, \quad (1)$$

式中 K_x, K_r 分别代表水平方向和竖直方向上的交换相互作用常数, 第一项是对水平方向上所有的连续 m 个自旋乘积的求和, 第二项是对竖直方向上的所有的 n 个自旋乘积的求和. Turban 严格证明, 只要系统发生相变, 那么不管 m 和 n 取多少, 其相变温度是 $K_c = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) = 0.44072$ (这里我们只考虑各向同性的情况, 即 $K_r = K_x$). 对于模型(1)式人

们通过各种方法讨论究竟当 m 和 n 取多少时系统开始发生一级相变. Turban 用平均场^[6]讨论了当 n 固定取 2, 而 m 任意的情况, 指出当 $m=3$ 时, 系统将会发生一级相变. 但是后来的 Monte Carlo 研究^[7,8]表明, 当 $m=3$ 时, 系统并不是发生一级相变, 而是发生二级相变, 而当 $m=4$ 时, 才会发生一级相变. 本文所讨论的是 n 不固定的情况, 因为当 $n=2, m=3$ 时, 系统发生二级相变. 如果我们不是象文献[6—8]中那样固定 $n=2$, 再增加 m , 而是当 $m=3$ 时, 使 n 从 2 开始增大, 那么当 n 增大到某一值时, 根据 Turban 的猜测, 系统一定会开始发生一级相变. 我们最后的结论是: 当 $m=3, n=3$ 时, 系统将开始发生一级相变. 我们判断一级相变的依据是用 Monte Carlo 方法, 检测到在相变点能量 E 具有不连续性.

我们使用了标准的翻转单个自旋的 Metropolis 算法^[9]: 对具有周期性边界条件的 $L \times L$ 的平方点阵上的格点 s 依次进行扫描, 使自旋 $S = \pm 1$ 以几率 p 翻转到 $s = \pm 1$, p 由下式给出:

$$p = \begin{cases} 1 & \Delta E \leq 0, \\ \exp(-\Delta E/k_B T) & \Delta E > 0, \end{cases}$$

式中 ΔE 是当所选择一个格点 s 试探地翻转到其相反自旋值所引起的能量变化, 即 $\Delta E = E_{\text{New}} - E_{\text{Old}}$, 这里 E_{Old} 是未翻转的能量, E_{New} 是翻转以后系统的能量. 本文选取两种初始位形, 第一种是所有自旋取 $s = \pm 1$, 第二种是完全无序的. Metropolis 算法的优点是: 不管初始位形如何, 只要经过足够长的扫描次数以后, 系统都将会处于平衡态. 用 Monte Carlo 方法判断相变的依据是: 在二级相变的相变温度, 不管初始位形如何, 系统最后只有一个能量值, 在发生一级相变时, 系统的能量在相变点具有两个能量值, 如果开始的初始位形为有序的, 那么最终系统将处于有序态, 即低温相态, 如果开始的初始位形是无序的, 那么最终系统将处于无序态, 即高温相态, 因此利用这种方法便可以判断相变类型, 这种方法已成功地用于文献[7, 10]中.

三、模拟结果

利用上述方法, 选取 $m=3, n=3, L=132$, 最后的模拟结果如图 1(b) 所示. 当初始位形为所有自旋 $s = \pm 1$ (图中对应于初始位形是这种情况的用“○”表示), 经过开始的几十个 MCS (Monte Carlo step/per spin) 后, 我们发现系统最后的能量在 -0.8 附近上下涨落, 而当开始的位形全部无序时, 我们发现同样经过几十个 MCS 后, 系统最后的能量在 -0.47 处涨落. 图 1(b) 只给出 MCS = 2000. 在我们的计算机模拟中, 曾计算到 MCS = 50000, 这时的情况和 MCS = 2000 一样, 对于不同的初始位形, 系统最后将趋于两个不同的能量值. 为了便于比较, 我们在图 1(a) 中给出 $m=3, n=2, L=132$. 从文献[8]中, 这时系统将发生二级相变. 在图 1(a) 中, 当初始位形为有序和无序时, 系统经过几百 MCS 的弛豫后, 将分别在 -0.56 附近涨落. 由于晶格尺寸大小因素的影响, 系统在不同的位形下最后趋于的同一能量值有很小的涨落, 从图 1(a) 可以看出, 这种尺寸效应对 $L=132$ 时已经很小. 因此对于 $m=n=3$, 模型(1)式将发生一级相变, 因为若为二级相变, 在相同的实验参数下 (在相变点模拟, $L=132$), 系统将趋于同一能量值, 在 MCS = 50000 时系统更应

趋于同一能量值,而在我们的模拟中,以上现象均没发生.晶格尺寸效应的因素同样可以忽略,因为对于 $L=132, \Delta E=0.8-0.47=0.33$,这是相变潜热,晶格尺寸效应的影响不可能这样大.因此我们判定当 $m=n=3$ 时,模型(1)式将发生一级相变,对应于 -0.8 的态是低温相,而对应于 -0.47 的态是高温相,因此我们的结论证实了 Turban 猜想,同时是对文献[6—8]中结论的补充和推广.

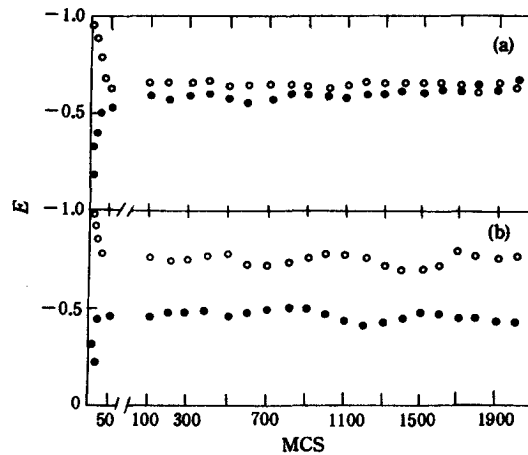


图1 在相变温度 $K_c = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) = 0.44072$, 对于初始位形为有序(图中用“○”表示)和无序(图中用“●”表示)随“时间”演化的情形.晶格大小是 132×132 , 能量在 $T=0K(\infty)$ 处分别是 $-2K_c(0)$; (a)表示 $m=3, n=2$; (b)表示 $m=n=3$

四、结 语

应用 Monte Carlo 方法,确定了多自旋相互作用 Ising 模型(1)式,除了在 $m=4, n=2$ 时系统开始发生一级相变,在 $m=3, n=3$ 时系统也将开始发生一级相变,我们的结果验证了 Turban 猜想.

衷心感谢苏州大学计算中心的大力支持.全部数据均在 Taiji2230 计算机上完成.

- [1] G. B. Taggart and A. Tahir-Kheli, *Prog. Theor. Phys.*, **47**(1972),370.
- [2] K. Binder and D. P. Landau, *Phys. Rev.*, **B21**(1980),1941.
- [3] R. J. Baxter and F. Y. Wu, *Aust. J. Phys.*, **27**(1974),357.
- [4] R. J. Baxter, *Aust. J. Phys.*, **27**(1974),369.
- [5] L. Turban, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **15**(1982),L227.
- [6] J. M. Debierre and L. Turban, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **16**(1983),3571.
- [7] F. C. Alcaraz, *Phys. Rev.*, **B34**(1986),4885.
- [8] N. Caticha, J. Chanine and J. R. Drugowich de Felicio, *Phys. Rev.*, **B43**,(1990),1173.
- [9] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.*, **21**

(1953),1087.

[10] F. C. Alcaraz and L. Jacobs, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **15**(1982),L357.

MONTE CARLO STUDY OF THE ORDER OF PHASE TRANSITION OF A MULTISPIN INTERACTIONS ISING MODEL

ZHANG GUO-MIN YANG CHUAN-ZHANG

Department of Physics, Suzhou University, Suzhou, 215006

(Received 3 August 1992; revised manuscript received 3 March 1993)

ABSTRACT

The order of phase transition of a two-dimensional Ising model with m -body interactions in the horizontal direction and n -body interactions in the vertical direction in the $m=3, n=3$ case is of the first-order which is determined by our Monte Carlo algorithm, while in the $m=3, n=2$ case the transition is of the second order.

PACC: 7510H; 7540C