

量子自旋系统的块自旋方案及其 簇团 Monte Carlo 模拟方法*

应 和 平

浙江近代物理中心, 浙江大学物理系, 杭州 310027

U. J. Wiese

Institute for Theoretical Physics, University of Bern, (H-3012 Bern, Switzerland)

1992 年 5 月 5 日收到

本文提出了一种关于一维和二维量子自旋系统的 Monte Carlo 模拟新算法。具体给出了对于一维和二维 Heisenberg 模型的计算方案。在 $s = 1/2$ 的铁磁和反铁磁链情况下的计算结果证实了此方法有效地克服了“临界慢化 (CSD)”效应和能够达到更低的温度区域进行计算。该方法可推广到各向异性和高自旋 ($s = 1, 3/2, \dots$) 量子系统、二维经典 8-顶角格点模型和低维费密系统。

PACC: 7510J; 7540M; 7540G; 0530

一、引 言

二维量子自旋系统作为一种探索高温超导机制(电子交换相互作用)的有效模型, 近几年来一直受到人们的重视。准二维反铁磁性质的发现(非掺杂 La_2CuO_4 材料)及有关的实验结果^[1]和 Hubbard 模型在大 U (同格点上两电子的库仑作用势)半填充条件下与反铁磁 Heisenberg 模型 (AFMH)

$$H = J \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad J > 0, \quad s^2 = s(s+1) \quad (1)$$

的等价性^[2], 使得重新对该模型产生了极大的兴趣。Fabricius^[3] 等人去年的两项工作分别得到了一维和二维 AFMH 在较小格点上的直接对角化的严格解; 而文献[4]的解析计算给出了该模型的重要低温性质。另一方面, 利用数值方法研究该系统的工作也由于其与高温超导理论紧密相关而十分活跃。文献[5]综述了在这个方向上的近期进展及各种数值方法的计算结果, 其中引用的主要方法之一就是 Monte Carlo 模拟方法研究量子自旋系统的 Suzuki-Trotter (S-T) 方法^[6]。

S-T 方法建立了一种 D 维量子系统与 $D+1$ 维经典多自旋耦合模型的等价关系。通过引入附加的一维量子维度, 或称 Trotter 维度, 给出其路径积分表示。该形式为类

* 国家自然科学基金资助的课题。

Ising 变量的 4-自旋耦合系统,使得 Monte Carlo 的重要抽样技术(如 Metropolis 或 Heat-bath 方法)能够适用于该等价经典系统. Cullen 和 Landau 的最初工作首先给出了一维 $s = 1/2$ 量子 Heisenberg 模型,包括其各向异性耦合的 X-Y 模型,处于横场下的 Ising 模型的模拟结果^[7]. 近期的 Makivic 和 Ding 的研究则给出了二维情况下的较大格点中的数值结果^[8]. 但是,至今为止,该方法对于量子自旋系统的模拟存在如下困难: 其一是量子模型具有的平移、转动或反演对称性使得等价经典模型存在“禁态”,从而造成局域迭代的效率很低; 其二是引入的改变磁化强度的非局域迭代在低温下的接受率非常低(正比于 $\exp(-\frac{1}{2}\beta|J|)$); 其三是一方面为了保证 S-T 方法的正确性,人们必须增加量子维度上的格点数 m ,使得 $\beta J/m = \epsilon\beta J$ 为一小量以减小非对易性的影响,另一方面,重要抽样技术又要求 $\exp(\epsilon\beta J)$ 不能很小,从而需人为地选择某最佳 m 值,并随不同的温度 $T = 1/\beta$ 而不断调节. 这些困难造成了在连续极限下 ($\epsilon \rightarrow 0$) 的临界慢化 (CSD) 效应,即迭代的自关联时间长度 τ (得到统计独立新组态的特征迭代数)有如下的幂次增长形式(当 $\epsilon \rightarrow 0$):

$$\tau \propto 1/\epsilon^z = m^z \quad (z > 1). \quad (2)$$

这一点非常类似于经典系统在临界区域内 ($T \approx T_c$) 的 CSD 效应^[9,10], $\tau \propto L^z$, $z \approx 2$.

为此,本文在利用 S-T 方法建立了 4-自旋耦合等价模型后,进一步转换其为“块自旋”(blockspin)及其最近邻耦合的自旋系统,然后推广了在经典模型中能够有效地克服 CSD 效应的 Swendsen 和 Wang^[9] 或 Wolff^[10] 的“簇团”(cluster)迭代计算方法,应用于块自旋形式的等价模型上. 我们在直至含 128 个自旋链和取 $m = 128$ 的较大格点上 ($L \times 2m$),对铁磁和反铁磁情形进行了 Monte Carlo 模拟,证实了该簇团迭代方法有效地克服了 CSD 效应并可获得较低温度区域内的结果.

二、Suzuki-Trotter 方 法

该方法直接应用 Trotter 公式^[6]

$$\exp[-\beta(H_1 + H_2 + \cdots + H_s)] = \lim_{m \rightarrow \infty} \left[\exp\left(-\frac{\beta H_1}{m}\right) \exp\left(-\frac{\beta H_2}{m}\right) \cdots \exp\left(-\frac{\beta H_s}{m}\right) \right]^m \quad (3)$$

于量子自旋系统的配分函数计算,以消除量子算符的非对易性的影响. 下面以 $s = 1/2$ 的一维模型给出链分解的详细推导(对二维情况则直接给结果). 此时,(1)式对应的 Hamiltonian 量为如下形式:

$$H = J \sum_{x=1}^L \sigma_x \cdot \sigma_{x+1} \quad (\sigma \text{ 为 Pauli 矩阵}), \quad (4)$$

其中 L 为自旋个数,取为偶数 ($L = 2l$),并取 x 方向周期性边界条件; $J < 0$ 对应于铁磁耦合, $J > 0$ 则为反铁磁耦合. 分解(4)式的 H 为分别可对易的两个子集

$$H_1 = J \sum_{x=2p-1}^L \sigma_x \cdot \sigma_{x+1}, \quad H_2 = J \sum_{x=2p}^L \sigma_x \cdot \sigma_{x+1}, \quad (5)$$

使得

$$H = H_1 + H_2, \quad [H_k(x_i), H_k(x_j)]_{i \neq j} = 0 \quad (k=1,2), \quad (6)$$

其中 $H_k(x_i) = J \sigma_{x_i} \cdot \sigma_{x_i+1}$, p 取整数. 应用(3)式, 给出其配分函数表示

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta H) = \lim_{m \rightarrow \infty} \text{Tr} [\exp(-\epsilon \beta H_1) \exp(-\epsilon \beta H_2)]^m, \quad (7)$$

其中 $\epsilon = 1/m$. 然后, 在各项算符 $-\epsilon \beta J \sigma_i \cdot \sigma_{i+1}$ 之间分别插入 σ^z 的本征态 $|s_i = \pm 1, i=1, L\rangle$,

$$\sum_{\{s_i = \pm 1\}} |s_1, s_2, \dots, s_L\rangle \langle s_L, \dots, s_2, s_1| = 1, \quad (8)$$

再经过简单的运算, 有

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{s(x,t)\}} \exp[-S(\{s(x,t)\})] \\ &= \sum_{\{s(x,t)\}} T^A[\{s(x,t)\}] T^B[\{s(x,t)\}], \end{aligned} \quad (9)$$

$$T^A = \prod_{x=2p-1}^L \prod_{t=2q-1}^{2m} \langle s_{x,t}, s_{x+1,t} | \exp(-\epsilon \beta J \sigma_{x,t} \cdot \sigma_{x+1,t}) | s_{x,t+1}, s_{x+1,t+1} \rangle, \quad (10a)$$

$$T^B = \prod_{x=2p}^L \prod_{t=2q}^{2m} \langle s_{x,t}, s_{x+1,t} | \exp(-\epsilon \beta J \sigma_{x,t} \cdot \sigma_{x+1,t}) | s_{x,t+1}, s_{x+1,t+1} \rangle, \quad (10b)$$

其中 $S(\{s(x,t)\})$ 为(5)式的有效作用量, 求和 $\sum_{\{s(x,t)\}}$ 为对所有的自旋组态进行: $\{s(x,t), x=1, L, t=1, 2m\}$, p, q 取整数; T^A 和 T^B 分别为对应 H_1 和 H_2 中各项的跃迁矩阵的乘积. 图 1 给出其格点形式的表示, 每个格点上占据一个类 Ising 变量 $s_{x,t}$, 变量总数为 $L \times 2m$ 个, 每个划线方格表示一个 T 跃迁矩元(4-自旋耦合).

直接计算可给出^[7]每个 $T^A(T^B)$ 矩阵的 16 个矩阵元中只有 6 个非零元

$$\begin{aligned} T(1,1;1,1) &= T(-1,-1;-1,-1) = \exp(-\epsilon \beta J) \\ &\quad \begin{pmatrix} J < 0 \\ J > 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$T(+1,-1;+1,-1) = T(-1,+1;-1,+1)$$

$$= \frac{1}{2} \exp(-\epsilon \beta J) [1 + \exp(4\epsilon \beta J)] \begin{pmatrix} J < 0 \\ J > 0 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$T(+1,-1;-1,+1) = T(-1,+1;+1,-1)$$

$$= \frac{1}{2} \exp(-\epsilon \beta J) [1 - \exp(4\epsilon \beta J)] \quad (J < 0), \quad (13a)$$

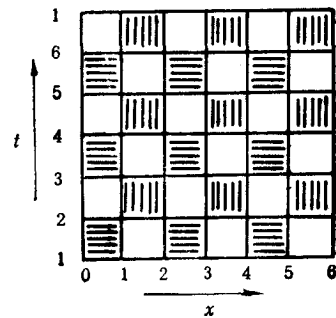


图 1 (4)式表示的一维量子模型的等价 4-自旋相互作用的经典自旋系统每个格点上占据一个类 Ising 变量 $s(x,t)$; 横线元格表示 T^A 矩阵元; 竖线元格则为 T^B 矩阵元, t 方向必须为周期性边界条件

$$T(+1, -1; -1, +1) = T(-1, +1; +1, -1) \\ = \frac{1}{2} \exp(-\epsilon \beta J) [\exp(4\epsilon \beta J) - 1] \quad (J > 0). \quad (13b)$$

配分函数的求迹运算要求在 t 方向必须用周期性边界条件: $s_{x,t+2m} = s_{x,t}$. 对于反铁磁耦合 ($J > 0$), 计算中已对某子格点上的 σ 变量((4)式中每对自旋中确定一个)作了 π 转动: $U_B = \exp\left(i\pi \sum_{j \in B} \sigma_j^z\right)$, 以保持非零矩阵元的正定性.

至此, 我们完成了一维链模型的等价 4-自旋耦合的二维表示. 由于 T 矩阵的正定性, 可把(9)式中的有效作用量 $S(\{s(x, t)\})$ 视为 Boltzman 因子, 它给出进行 Monte Carlo 模拟迭代的组态分布几率. 但值得注意的是, 由于量子系统具有的对称性, 导致了 4-自旋耦合的等价模型(由(9), (10)式表示)存在, 由于 T 矩阵零元而出现许多“禁态”, 因此从一个允许组态跃迁到一个新的允许组态的必要条件是同时改变某闭合路径上的所有自旋 $s(x, t)|_c$, 闭合路径 c 由图 1 中的一个“空”元格——非 T 矩阵元格, 或相连的几个“空”元格, 或沿 t 方向的整体链 ($x = x_0, t = 1, 2m$) 所构成(由于 t 方向的周期性, 这条整体链也构成一闭合路径). 但是, 该条件仍然不能完全避免产生禁态, 因此造成大量的无效迭代, 即尝试组态为禁态. 而且, 随 m 的增大, 无效迭代出现的几率也迅速增加. 换言之, 自关联时间长度 τ 随 m 呈指数增长^[7]. 表 2 中的 Metropolis 迭代方法的结果给出, 当 $2m = 64$, $T = 0.125$ 时, $\tau_s \geq 3000$. 从而要求寻找新的迭代取样方法来有效地进行 Monte Carlo 模拟.

三、块自旋方案和簇团迭代方法

正如上节所述, 由于等价模型出现禁态, 必须采用闭合路径的多个自旋的集体翻转迭代形式, 以及新组态的接受率敏感地依赖量子维度参数 m , 都暗示着必须构造不同标度的闭合路径. 为此我们引入如下的“块自旋”和簇团迭代新方法.

对于图 1 所示的自旋系统, 定义两类块自旋(元格形式), 由空元格上 4 个自旋构成

$$B(x = 2p, t = 2q) = \{s(x-1, t-1), s(x, t-1), s(x-1, t), s(x, t)\}, \quad (14a)$$

$$\tilde{B}(x = 2p, t = 2q) = \{s(x, t), s(x+1, t), s(x, t+1), s(x+1, t+1)\}. \quad (14b)$$

T^A 和 T^B 矩阵元则分别为 $B(\tilde{B})$ 形式块自旋的 x 方向 (t 方向) 和 t 方向 (x 方向) 的近邻耦合链, 见图 2(a) 和 (b) 所示. 我们还构造了另二类块自旋

$$B_0(x = 2p) = \sum_{t=1}^{2m} s(x, t), \quad \tilde{B}_0(x = 2p-1) = \sum_{t=1}^{2m} s(x, t), \quad (15)$$

作为(14)式的补充(图 2(c)), 以保证各态遍历性(见以下的详细讨论).

容易看出, 在确定的 $\{B\}$ 和 $\{\tilde{B}\}$ 的表示中, 自旋变量 $\{s(x, t)\}$ 分别属于并仅仅属于某一块自旋; 其二, 块自旋本身为最近邻耦合(2-块自旋相互作用), 每个块自旋有 16 种组态, 格距为 2.

对于二维 Heisenberg 模型, 采用如下的链分解方案:

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4, \quad (16)$$

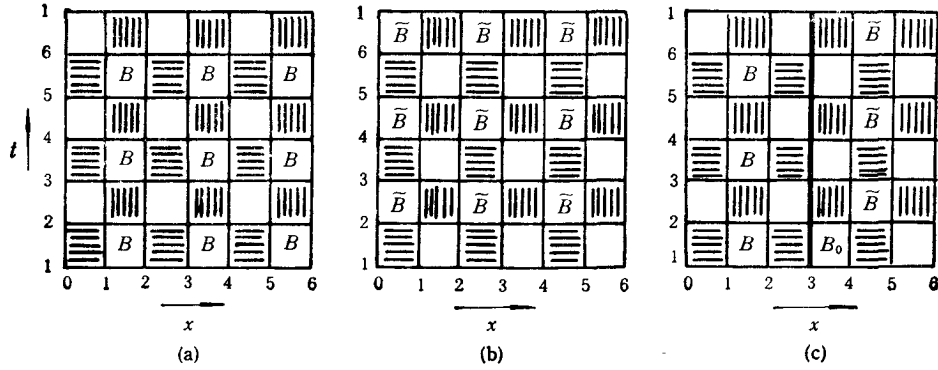


图 2

(a) 和(b)分别表示由(14a)和(14b)式所定义的元胞形式块自旋及其近邻耦合链(T^A 和 T^B 矩阵元); (c)则为补充定义的非局域块自旋 B_0 , t 方向的周期性边界条件保证了它为闭合路径形式

$$H_1 = J \sum_{\{2k-1, l\}} \sigma_{x,y} \cdot \sigma_{x+1,y}, \quad H_2 = J \sum_{\{2k, l\}} \sigma_{x,y} \cdot \sigma_{x+1,y},$$

$$H_3 = J \sum_{\{k, 2l-1\}} \sigma_{x,y} \cdot \sigma_{x,y+1}, \quad H_4 = J \sum_{\{k, 2l\}} \sigma_{x,y} \cdot \sigma_{x,y+1}, \quad (17)$$

其中的求和 $\{2k-1, l\}$ 表示对 $x=1, 3, \dots, L_x-1, y=1, 2, 3, \dots, L_y-1, L_y$ 进行. 图 3 则给出相应的一种元胞形式的块自旋(该方案含 8 个 $s(x, y, t)$ 自旋变量).

块自旋的一次翻转定义为改变其所有的单个自旋变量.

$$B = \{s_1, s_2, \dots, s_n\} \rightarrow -B$$

$$= \{-s_1, -s_2, \dots, -s_n\}. \quad (18)$$

至此已经可以采用重要抽样技术进行 Monte Carlo 模拟, 即用 Metropolis 或 Heat bath 方法对块自旋 $\{B, B_0\}$ 和 $\{\tilde{B}, \tilde{B}_0\}$ 进行迭代, 这与以往的方法完全一致(表 1 和表 2(b) 部分计算结果与文献[7]相同).

进一步, 我们引入如下的簇团迭代方法. 在任意两个近邻块自旋中, 由几率

$$P = 1 - \min\{1, \exp[-\mathcal{S}(B_i, -B_j)] / \exp[-\mathcal{S}(B_i, B_j)]\} \quad (19)$$

决定构成一条激活链 $\langle i, j \rangle$, 其中, $\mathcal{S}(B_i, B_j)$ 为其两个块自旋之间的(T 矩阵)有效作用量. 所有由激活链相联的块自旋构成一个簇团, 其包括单个块自旋作为特例. 一步 Monte Carlo 迭代含二步骤: 其一是按几率(19)式构造激活链; 其二是根据一定的几率同时翻转簇团内的所有块自旋. 第二步的翻转方案也有两种: 一是在整个格点上构成了多个簇团后, 以 $1/2$ 几率独立地改变每个簇团的自旋量(SW 的多簇团方法^[9]); 二是任取某一个簇团(实际上是随机选取某一块自旋, 并构

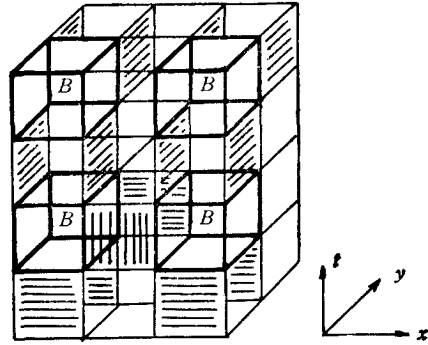


图 3

二维量子模型的元胞形式块自旋, 经过 x 方向, y 方向分别平移两个格距, t 方向平移四个格距而得到整个点阵上的块自旋形式; 划线元格给出它们的近邻耦合 (T^A, T^B, T^C, T^D 矩阵元); 另一类块自旋由此形式作整体在 x 方向, y 方向和 t 方向平移一个格距而得到: $(x, y, t) \rightarrow (x+1, y+1, t+1)$

造含该块自旋的一个簇团),并翻转其所有块自旋量(Wolff 的单簇团方法^[10]).

由于块自旋作用量(T 矩阵)具有对称性

$$S(B_i, -B_j) = S(-B_i, B_j), S(-B_i, -B_j) = S(B_i, B_j), \quad (20)$$

可以容易地看出其簇团迭代法满足细致平衡条件(见文献[10]中[6]式):

$$\frac{W(\{B\} \rightarrow \{B'\})}{W(\{B'\} \rightarrow \{B\})} = \exp[-S(\{B\})] / \exp[-S(\{B'\})]. \quad (21)$$

采用簇团迭代法的优点是完全避免了禁态的出现. 当翻转某一块自旋后, 若遇到的尝试新组态为禁态, 其 Boltzmann 因子就为零, 因此构成这条激活链的几率就为 1. 而簇团的边缘则肯定满足 $S(B_i, B_j) \approx 0$, $S(B_i, -B_j) \approx 0$ ($B_i \in C$, $B_j \notin C$). 从而有效地提高了新组态的接受率(迭代效率), 减小了自关联时间长度 τ . 并且, 该方法自动地进行各种标度(不同簇团大小)下的迭代, 而不必根据温度人为调节 Trotter 维度参数 m (只要根据计算机的容量, 选择尽可能大的 m 值即可). 而以往的方法则要根据不同的温度值, 选择不同的最佳 m 值, 一方面保证 βJ 为一小量, 另一方面又使该量在一定的范围内 ($\beta J \sim 0.2$). 我们的数值计算结果完全证实了该方法的有效性和正确性.

四、计算结果与讨论

模拟时, 为了保证各态遍历性, 我们交替地应用 $\{B\}$ 和 $\{\tilde{B}\}$ 块自旋方案, 并为了保证磁化强度 $M = \frac{1}{2} \sum_x s(x, t)$ 和 “Staggered” 磁化强度 $M_s = \frac{1}{2} \sum_x (-1)^x s(x, t)$ 有奇数的变化而引入了(15)式所示的非局域块自旋形式. 不然, M 和 M_s 仅有偶数的改变而非各态遍历.

我们着重计算了表征 Monte Carlo 方法动力学过程的自关联函数和自关联长度 τ . 设 A 为某一可观察量(组态 $\{s(x, t)\}$ 的函数), 我们针对 A 随迭代时间的发展状态, 考察其“遗忘”速率而引入如下的自关联函数及其归一化形式:

$$C_{AA}(t) = \langle A_{i_0} A_{i_0+t} \rangle - \langle A \rangle^2, \quad (22)$$

$$\rho_{AA}(t) = C_{AA}(t) / C_{AA}(0), \quad (23)$$

其中 $\langle \dots \rangle$ 为平衡态下的期望值. 积分形式的自关联时间长度 $\tau_{\text{int}, A}$ 及其等价形式 $\tilde{\tau}_{\text{int}, A}$ 为

$$\tau_{\text{int}, A} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \rho_{AA}(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{+\infty} \rho_{AA}(t), \quad (24)$$

$$\tilde{\tau}_{\text{int}, A} = \left[\ln \left(\frac{2\tau_{\text{int}, A} + 1}{2\tau_{\text{int}, A} - 1} \right) \right]^{-1} = -\ln \left(\frac{\sum_{t=0}^{\infty} \rho_{AA}(t)}{\sum_{t=1}^{\infty} \rho_{AA}(t)} \right). \quad (25)$$

明显地, 当迭代过程为完全独立时(相邻迭代组态完全非相关), $\tau_{\text{int}}^0 = 1/2$, $\tilde{\tau}_{\text{int}}^0 = 0$. 当 $\rho_{AA}(t)$ 具有指数函数形式: $\rho_{AA}(t) = \exp(-|t|/\tau)$ 时, 则有 $\tilde{\tau}_{\text{int}} = \tau$ ($\tau \gg 1$). 故积分形式的自关联时间长度 τ_{int} 或 $\tilde{\tau}_{\text{int}}$ 表征了 Monte Carlo 迭代方法的优劣(迭代

效率高低)。

我们分别以内能 e , 磁化率 χ 和 “Staggered” 磁化率 χ_s 作为可观察量。

$$e = -\frac{1}{L} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{1}{L} \left\langle \frac{\partial S}{\partial \beta} \exp(-S) \right\rangle, \quad (26a)$$

$$\chi = \frac{\beta}{L} \langle M^2 \rangle, \quad M = \sum_{i=1}^L s(x, i), \quad (26b)$$

$$\chi_s = \frac{\beta}{L} \langle M_s^2 \rangle, \quad M_s = \sum_{i=1}^L (-1)^i s(x, i). \quad (26c)$$

计算了它们的积分形式的 $\tilde{\epsilon}_{int}$ 量。

计算中, Monte Carlo 迭代总数为 55000 次, 最初的 5000 次使系统达到热平衡态。初始组态为随机态。我们也进行了完全有序态出发(经典铁磁或反铁磁基态), 但计算结果相同。完成在 $\{B\}$ 和 $\{\tilde{B}\}$ 两种方案下的两次簇团迭代为一完整的 Monte Carlo 迭代。计算结果见表 1(a) 和表 2(a)。作为比较, 还给出了相应的 Metropolis 方法的计算结果(表 1(b) 和表 2(b))。

表 1 $L = 32$ (量子自旋变量数) 和 $\beta = 1/T$ 时的计算结果 F 表示铁磁链, A 表示反铁磁链情况。

(a) 为簇团迭代方法所得结果; (b) 为 Metropolis 方法所得结果。括号中数字是末位数误差值

(a)

	$2m$	e	τ_e	χ	τ_χ	χ_s	τ_{χ_s}
F	32	-0.1338(5)	1.4(1)	0.364(2)	0.52(3)	0.1796(6)	0.52(3)
	64	-0.1338(5)	1.5(2)	0.371(2)	0.58(3)	0.1790(6)	0.48(3)
	128	-0.1338(5)	1.5(1)	0.369(1)	0.55(3)	0.1790(6)	0.49(2)
	256	-0.1339(5)	1.5(1)	0.369(1)	0.56(3)	0.1782(6)	0.54(3)
A	32	-0.2049(8)	1.8(1)	0.1354(4)	0.34(3)	0.4275(9)	0.43(4)
	64	-0.2029(8)	2.0(1)	0.1362(4)	0.42(3)	0.426(1)	0.45(3)
	128	-0.2036(8)	1.9(1)	0.1374(4)	0.41(3)	0.4246(9)	0.41(3)
	256	-0.2038(8)	1.8(1)	0.1362(4)	0.39(2)	0.4246(9)	0.44(3)

(b)

	$2m$	e	τ_e	χ	τ_χ	χ_s	τ_{χ_s}
F	32	-0.1347(6)	1.7(2)	0.352(8)	8.1(5)	0.176(2)	1.8(2)
	64	-0.1335(7)	3.0(2)	0.378(8)	9.0(5)	0.180(2)	2.4(2)
	128	-0.133(1)	5.6(3)	0.348(8)	8.0(3)	0.179(2)	2.6(2)
	256	-0.133(1)	10.7(4)	0.377(8)	8.5(3)	0.177(2)	3.3(2)
A	32	-0.207(1)	2.8(1)	0.134(2)	4.0(2)	0.426(6)	4.3(2)
	64	-0.205(2)	4.9(2)	0.137(2)	3.7(1)	0.429(6)	5.1(2)
	128	-0.203(2)	7.3(3)	0.140(2)	3.9(2)	0.422(7)	5.9(2)
	256	-0.204(2)	13(1)	0.138(2)	3.4(3)	0.404(7)	5.5(3)

计算结果给出, 当温度不太低时, 簇团迭代方法已经改善了迭代效率(提高了 2 倍直至 1 个数量级), 见表 1(a) 和 (b)。当降低温度, Metro-Polis 方法就遇到了困难, $\tau_\chi(M)$

表 2 $L = 128$ 自旋系统在不同的温度 (β) 和量子维度参数 (m) 下 (保持 $e\beta J = \beta J/m$ 为常数) 的计算结果 其余符号表示同表 1

(a)

	$2m$	β	e	τ_e	χ	τ_χ	χ_c	τ_{χ_c}
F	16	2	-0.1881(2)	1.8(1)	0.935(2)	0.56(2)	0.330(1)	0.49(2)
	32	4	-0.2211(1)	1.9(1)	2.52(1)	1.2(1)	0.664(1)	0.9(1)
	64	8	-0.2374(1)	1.6(1)	7.30(8)	3.9(3)	1.331(5)	2.9(2)
	128	16	-0.24475(8)	1.9(2)	23.2(7)	17(2)	2.64(3)	19(2)
A	16	2	-0.3443(4)	1.9(1)	0.1435(6)	0.28(2)	1.239(2)	0.41(2)
	32	4	-0.4217(2)	1.6(1)	0.1251(5)	0.37(3)	3.399(7)	0.41(2)
	64	8	-0.4410(1)	1.3(1)	0.1173(5)	0.42(2)	8.51(2)	0.49(3)
	128	16	-0.44512(7)	1.0(1)	0.1120(7)	0.65(5)	20.76(5)	0.61(4)

(b)

	$2m$	β	e	τ_e	χ	τ_χ	χ_c	τ_{χ_c}
F	16	2	-0.1878(2)	2.4(2)	0.80(7)	94(8)	0.332(1)	1.0(1)
	32	4	-0.2212(2)	4.9(3)	2.4(4)	180(15)	0.665(6)	4.9(3)
	64	8	-0.238(2)	5.4(6)	8.0(4)	3300(200)	1.29(1)	22(3)
A	16	2	-0.3443(4)	1.9(1)	0.148(5)	17(1)	1.24(1)	1.5(1)
	32	4	-0.4226(2)	2.0(1)	0.122(5)	23(1)	3.34(3)	2.5(1)
	64	8	-0.4410(2)	2.2(2)	0.14(2)	200(20)	8.5(1)	12(1)

迅速增大 (见表 2(b) $\beta = 8$ 时的两个结果), 而簇团方法 (c) 的 $\tau_\chi(c)$ 则仅仅为几个迭代长度, 并能较容易地进入更低温度区域内计算 (见表 2(a), $\beta = 16$ 的两个结果); 对于反铁磁链, 簇团迭代方法几乎消除了临界慢化效应, 其动力学临界指数 $z = 0.0(1)$; 对于铁磁情况, 则有效地减弱了临界慢化效应, $z = 0.8(2)$ 。

最后作以下几点讨论。

1. 文中仅仅给出了采用 Wolff 的单簇团方法所得计算结果, 其原因是该方案能够推广到计算机平行和矢量运算^[12], 进一步节省计算机时。我们同样地完成了相似的多簇团 (SW) 方法的计算程序, 并获得了一致的结果。

2. 以往人们往往把注意力集中在单个自旋变量 $s(x, t)$ 和作用链 $T^A(T^B)$ 上, 我们则注意到由于禁态存在而必须采用闭合路径迭代以及通常的人为选择闭合路径存在低温下导致重要抽样的奇点涨落困难, 进而引入了块自旋方案和推广了用于经典自旋模型的簇团迭代方法。关于一维模型的尝试证实了该方法的有效性。

3. 我们认为, 之所以新方法有效地减小了自关联时间, 提高了迭代取样效率, 其原因首先是它完全避免了禁态的出现, 自动地进行局域和非局域两种闭合路径迭代; 其次是它能够自动地进行多标度迭代 (不同簇团大小的迭代取样), 并随温度有不同的簇团分布。

4. 该方法可以直接推广到各向异性和含外场的情况, 可直接应用于经典 8-顶角模型^[11]。我们期望经过修改后能够推广到高自旋 ($s = 1, 3/2, \dots$) 量子系统和低维费密系统。

感谢 Hasenfratz 教授鼓励作者进入这一研究领域。作者应和平感谢包玉刚基金会的资助和与季达人教授、张剑波博士的讨论。本文的计算工作在 Bern 大学的 VAX-6420 计算机上完成。

- [1] D. Vaknin *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 2802; G. Shirane *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 1613; Y. Endoh *et al.*, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 7443; R. J. Birgeneau *et al.*, *Phys. Rev.*, **B38**(1988), 6614; G. Aeppli *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 2052.
- [2] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 1317.
- [3] K. Fabricius, U. Low and K.-H. Mutter, preprint of WU B91-01; WU B91-15.
- [4] P. Hasenfratz and F. Niedermayer, *Phys. Lett.*, **B268**(1991), 231.
- [5] T. Barnes, *Inter. Mod. Phys.*, **C2**(1991), 659.
- [6] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.*, **56**(1976), 1454; *Commun. Math. Phys.*, **51**(1976), 183.
- [7] J. J. Cullen and D. P. Landau, *Phys. Rev.*, **B27**(1983), 297.
- [8] M. S. Makivic and H. -Q. Ding, *Phys. Rev.*, **B39**(1991), 3562.
- [9] R. Swendsen and J. -S. Wang, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 86.
- [10] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 361; *Nucl. Phys.*, **B334**(1990), 581.
- [11] Hans De Raedt and Ad Lagendijk, *Phys. Rep.*, **127**(1985), 233.
- [12] H. G. Evertz, preprint of FSU-SCRI-91-183(1991).

BLOCKSPIN SCHEME AND THE CLUSTER-UPDATING ALGORITHMS FOR THE QUANTUM SPIN SYSTEMS*

YING HE-PING

Zhejiang Institute of Modern Physics, Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027

U. J. WIESE

Institute for Theoretical Physics, University of Bern, CH-3012 Bern, Switzerland

(Received 5 May 1992)

ABSTRACT

In this paper, we proposed a blockspin scheme and developed the usual cluster-updating algorithms for the one-and two-dimensional quantum spin systems, saying $s=1/2$ isotropic Heisenberg models. The results for the ferro-and antiferro-magnet chains showed that the critical slowing down (CSD) was indeed eliminated, and so it offered a possibility to improve the estimations in the lower-temperature region. We expect that the algorithms could also be applied to the anisotropic or/and the higher-spin cases, as well as some other interesting models, such as eight-vortex lattice model and low-dimensional Fermi-systems.

PACC: 7510J; 7540M; 7540G; 0530

* work supported by the National Natural Science Foundation of China