第42卷第6期 物 理 学 报 Vol. 42, No. 6
1993年6月 ACTA PHYSICA SINICA June, 1993

蜂窝状格子带有晶场作用的铁磁 Ising 混合自旋 $S=1$ 和 $S=1/2$ 的相图的 Monte-Carlo 研究

张国民 杨传章
苏州大学物理系,苏州 215006
1992年8月4日收到

利用具有翻转单个自旋的 Metropolis-Monte-Carlo 算法,研究蜂窝状格子带有晶场作用的铁磁 Ising 混合自旋 $S=1$ 和 $S=1/2$ 的相图,所得相图与严格解相接近,好于关联有效场方法得出的结果. 因此 Metropolis-Monte-Carlo 算法同样也可以用于研究混合自旋模型.

PACC: 7510H;7540C

一、引 言

自从 Metropolis 等人[1]提出重要抽样的 Monte-Carlo 算法以来,Monte-Carlo 方法已经广泛地用于研究各种物理现象[2]. 如临界点和多临界点,经典流体,聚合物问题,渗流等方面,在自旋系统方面也得到了广泛的应用. 但是直到现在,在研究自旋系统方面,所有的研究模型均为铁磁和反铁磁,系统中只涉及到一种自旋,没有考虑到亚铁磁体即系统中有可能出现两种自旋. 本文的主要目的在于把 Metropolis-Monte-Carlo 算法推广到研究混合自旋模型. 由于对于混合自旋模型至今还没有人用 Monte-Carlo 方法研究过,因此我们选择带有晶场作用的蜂窝状格子铁磁 Ising 模型[3]作为研究对象,因为这个模型具有严格解[4],可以与本文结果相比较,从而以此来判断 Metropolis 算法究竟能否用于研究这种混合自旋模型. 通过模拟计算发现,对于本文研究的混合自旋模型,通过 Monte-Carlo 方法得出的相图与严格解析解很接近,因此可以认为 Metropolis-Monte-Carlo 算法不仅可以定性地研究混合自旋模型,而且借助于有限尺寸标度理论[5],可以定量地研究所有的混合自旋模型. 由于本文的主要目的是用来判断 Metropolis 算法是否可以用来研究混合自旋模型,因此不利用有限尺寸标度理论来较精确地计算相变温度. 本文选择两种大小晶格尺寸:一种为12×12,还有一种为24×24. 最后的转变温度是在24×24晶格上计算的.

二、混合自旋模型与 Monte-Carlo 算法

本文所研究的混合自旋模型的哈密顿量为[4,6]

$$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}S_i\mu_j+\Delta\sum_i S_i^2,$$

其中 $S=\pm 1;0$，$\mu=\pm 1$，$\langle ij\rangle$ 为对所有的近邻求和，J 为近邻交换作用常数，Δ 为晶场. 这里 Δ 只作用于自旋 S 上. 自旋 S 和自旋 μ 在蜂窝状格点上交替排列，如图1所示.

对于峰窝状的带有晶场作用的混合自旋模型，其转变温度随 Δ/J 的变化关系可以严格求解[4]Takahito Kaneyoshi[6]曾用关联有效场的方法近似地给出转变温度随 Δ/J 的变化关系.

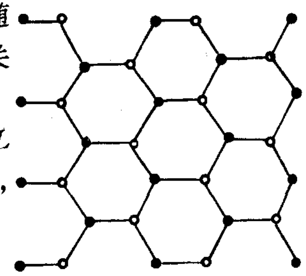

图1　蜂窝状混合自旋模型的自旋 S 和自旋 μ 的排列情况　自旋 S 用“●”表示，自旋 μ 用“○”表示

本文使用了 Metropolis 算法，对具有周期性边界条件的 $L\times L$ 的格点依次进行扫描，每个格点以概率 p 翻转到新的状态，这里 p 为

$$p=\begin{cases}1 & \Delta E\leqslant 0;\\ \exp(-\Delta E/K_BT) & \Delta E>0,\end{cases}$$

其中 ΔE 是当格点试探着翻转到新状态时所引起的能量变化. 由于考虑的是混合自旋，且晶场只作用于自旋 S，因此自旋 S 与自旋 μ 所引起的能量变化不一样，这与非混合自旋模型不一样，所以在我们所编制的 Fortran 程序中，能够识别自旋 S 和自旋 μ. 下面给出自旋 S 和自旋 μ 所对应的能量变化，从而可以定出自旋翻转概率 p.

对于自旋 S，如果新的状态为 S'，则所引起的能量变化为

$$\Delta E=-J(S'-S)\sum_j\mu_j+\Delta(S'^2-S^2),$$

其中 S' 是任意选取的，$\sum\limits_j$ 是对近邻求和，对于峰窝状只有三个近邻，如图2(a)所示.

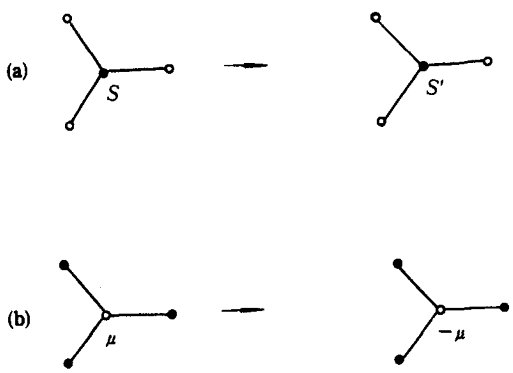

图2　计算 Metropolis 算法中的能量变化　(a)自旋 S 变到 S'；(b)　自旋 μ 变到 $-\mu$

对于自旋 μ，新的状态选为 $-\mu$，则所引起的能量变化为

$$\Delta E=2\mu J\sum_j S_j.$$

由于自旋 S 和自旋 μ 所引起的能量变化不一样，因此翻转概率 p 也不一样，这正是混合自旋的 Metropolis 算法的变化之处.

由于我们感兴趣的是相变温度，因此测出比热 C 随温度的变化曲线，将比热峰点出现的温度定为相变温度[7]. 改变 Δ/J，同样也能测出比热 C，定出峰位，因此整个相图便可测出.

三、模拟结果与相图

利用上述方法，分别在12×12，24×24两种大小的格子上计算比热 C，一般开始的1000MCS(Monte Carlo Step 1 per spin)不进行统计平均，对以后的2000—5000MCS 进行

统计平均,初始位形选为两种自旋均取1,固定 Δ/J ,然后对温度 K_BT/J 进行扫描. 对于 $\Delta/J=0$,比热随温度的变化曲线如图3所示. 随着晶格尺寸的增大,比热的峰值越来越大,同时比热峰点向着低温区移动,可以从图3看出, $\Delta/J=0$,比热峰位 $K_BT_c/J=1.33$. 这与严格解 $K_BT_c/J=1.32$相接近,而比关联有效场1.783有较大改进.

可以发现,随着 Δ/J 的增加,对于同样大小的晶格,比热的峰值越来越小,比热的峰点向低温区移动,典型的例子如图4所示. 利用找峰点的方法,最后本文所研究的混合自旋模型的相图如图5所示,同时与关联有效场[6]和严格解[4]作了比较.

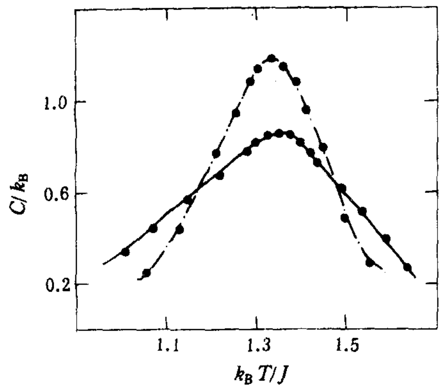

图3　比热 C 随温度 K_BT/J 的变化曲线($\Delta/J=0$)　——为12×12,—·—为24×24

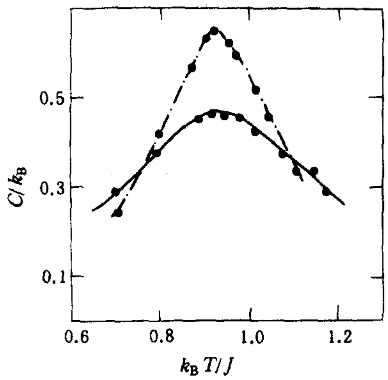

图4　比热 C 随温度 K_BT/J 的变化曲线($\Delta/J=2.0$)
——为12×12;—·—为24×24

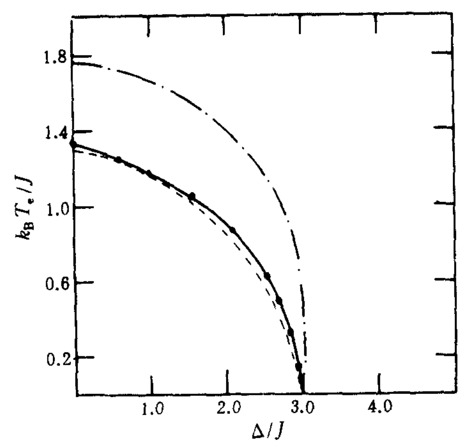

图5　转变温度 K_BT_c/J 随晶场 Δ/J 的变化曲线—— 为 Monte-Carlo;—·—为关联有效场;– – –为严格解

四、结　　论

本文将 Metropolis-Monte-Carlo 算法推广到混合自旋模型中,对于所研究的混合自旋模型,Monte-Carlo 方法给出的相图与严格解相接近,好于关联有效场的结果. 因此

Metropolis 算法同样可以用来研究混合自旋模型.虽然本文研究的是比较简单且有严格解析解的混合自旋模型,但是本文所推广的 Metropolis 算法似可以用来研究更为复杂的没有严格解的混合自旋模型:象具有键无规的或者晶场无规的混合自旋模型,这方面的工作正在进行中.

本文的所有计算均在 Taiji 2230计算机上完成,在此衷心感谢苏州大学计算中心的大力协助.

[1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, *J. Chem. Phys.*, **21** (1953),1057.

[2] K. Binder, Applications of the Monte-Carlo Method in Statistical Physics (Springer-Verlag, Berlin, 1987), p. 299.

[3] T. Iwashita and Uryu, *Phys. Status Solidi* (*b*), **125**(1984),551.

[4] C. Domb, *Adv. Phys.*, **9**(1960),149.

[5] K. Binder, *J. Comp. Phys.*, **59**(1985),1.

[6] Takahito Kaneyoshi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **56**(1987),2675.

[7] D. P. Landau, *Phys. Rev.*, **B13**(1976),255.

MONTE CARLO STUDY OF THE PHASE DIAGRAM OF ISING FERROMAGNET WITH MIXED SPINS OF $S=1/2$ AND $S=1$ WITH A CRYSTAL FIELD INTERACTION ON THE HONEYCOMB LATTICE

ZHANG GUO-MING　　YANG CHUAN-ZHANG
Department of Physics, Suzhou University, Suzhou 215006
(Received 4 August 1992)

ABSTRACT

The single-spin-flip Metropolis-Monte-Carlo algorithm is applied to the study of phase diagram of Ising ferromagnet with mixed spins of $S=1/2$ and $S=1$ with a crystal field interaction on the honeycomb lattice. The phase diagram we obtained is very close to the exact solutions and better than the results of effective field theory with correlations. All these make us arrixe the conclusion that the Metropolis Monte Carlo algorithm can also be used to study the mixed-spin model.

PACC: 7510H; 7540C