

量子 Monte Carlo 簇团迭代法关于 蜂窝状点阵 QHAF 模型研究*

应和平 季达人 王志坚

(浙江近代物理中心, 浙江大学物理系, 杭州 310027)

(1994 年 8 月 1 日收到)

采用一种有效的簇团迭代法, 对蜂窝状点阵量子 Heisenberg 反铁磁 (QHAF) 模型进行了 Monte Carlo 模拟。该方法避免了对于相应三维自旋模型迭代时出现的禁态和临界慢化效应。研究表明, 该方法适用于普遍的具有 $A-B$ 子格点阵的 $S = 1/2$ 反铁磁模型的研究。

PACC: 7510J; 7470H; 7540M; 0550

1 引 言

近年来, 人们重新对二维格点系统, 特别是 Hubbard 模型和 QHAF 模型产生了极大的兴趣。Hubbard 模型由于能够描述强关联电子系统而成为探索高温超导体的理论出发点之一^[1]。该模型在大 U (同格点上两电子间库仑作用势) 和半填充条件下等价于 $S = 1/2$ QHAF 模型。实验上已有的 La_2CuO_4 材料具有准二维反铁磁长程序的特性及有关结果, 也促使人们在理论方面展开对二维 QHAF 模型的深入研究。Manousakis 的文章综述了近期有关 $S = 1/2$ QHAF 模型的主要研究方法^[2]。而 Barnes 的总结则着重于阐述该模型的多种 Monte Carlo 模拟方法及其关于基态和有限温度性质的研究结果^[3]。同时, 两者都十分注意该模型与氧化物高温超导性的实验结果的比较, 并引用了一种重要的 Monte Carlo 模拟研究有限温度 QHAF 模型的方法: Suzuki-Trotter (S-T) 方法^[4]。

S-T 方法建立了一种 D 维量子自旋系统与 $(D + 1)$ 维相应经典自旋系统的等价关系, 即通过引入附加的量子维度 (Trotter 方向) 给出了量子模型的路径积分形式的配分函数, 导出的经典模型为多自旋耦合的系统。Monte Carlo 重要抽样技术 (如 metropolis) 适用于该经典系统。但是, 标准的 S-T 方法由于没有很好地解决量子守恒条件导致的某些约束而直接采用局域迭代算法, 存在着一些不足之处 (详见文献 [5] 引言中的讨论)。为此, Wiese 和 Ying 首先提出了“块自旋”方案和非局域簇团取样迭代技术^[5], 后者来源于关于克服通常的经典自旋系统的临界慢化效应的一种有效的 Monte Carlo 新方法^[6]。

* 国家自然科学基金及国家教育委员会归国留学人员基金资助的课题。

文献[6]的工作成功地发展了该方法于一维量子自旋系统的研究,解决了标准的 S-T 方法面临的一些困难。随后, Evertz 和 Marcu 提出了二维 6-顶角和 8-顶角格点模型(分别对应一维各向同性和各向异性 QHAF 链)的一种新的簇团迭代法(loop-cluster algorithm, LCA)^[8], 它已被发展应用于二维正方点阵 QHAF 模型的研究^[9], 并取得了有意义的研究结果^[10]。

本文采用链分解方案和该 LCA 簇团迭代技术, 考察了一种具有 A-B 子格点阵结构的蜂窝状格点 QHAF 模型。研究了该模型的有限温度配分函数的基本性质, 进而给出其内能、均匀磁化率和参差磁化率的 Monte Carlo 模拟结果, 证实了 LCA 方法能够应用于一般的具有 A-B 子格点阵结构的 QHAF 模型及其特殊情形。

2 模型与分解方案

二维 $S = 1/2$ QHAF 模型的 Hamiltonian 量为

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad J > 0. \quad (1)$$

它定义在如图 1 所示的蜂窝状点阵上, 即具有周期性边界条件的六角点阵。每个格点上

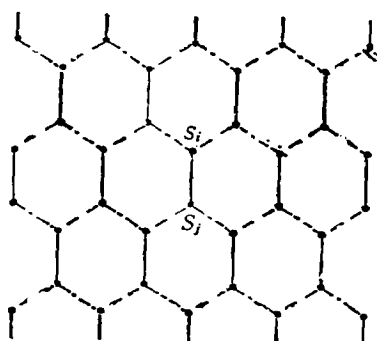


图 1 蜂窝状点阵 QHAF 模型示意图 每个格点上定义一个自旋变量, 最近邻链相互作用分别属于 H_1 (实线)、 H_2 (虚线)和 H_3 (点划线)

定义了一个 $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_i$ ($\boldsymbol{\sigma}_i$ 为 Pauli 矩阵) 自旋变量, 求和运算对所有最近邻链 $\langle i, j \rangle$ 进行。

根据文献[4]所述的链分解 Checkerboard 方案和 S-T 公式, (1)式的配分函数

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}_{\{\boldsymbol{\sigma}_i\}} \{ \exp(-\beta \hat{H}) \} \\ &= \text{Tr}_{\{\boldsymbol{\sigma}_i\}} \left\{ \exp \left(-\beta \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \right) \right\} \end{aligned} \quad (2)$$

可表示为具有 Ising 自旋变量 $s_i = \pm 1$ 形式的三维自旋系统, 它具有 4-自旋相互作用。具体地说, 有如下的三个操作过程。

(1) 把 H 分解成三个子集,

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3,$$

其中

$$\hat{H}_1 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}(x_i, y_i) \cdot \mathbf{S}(x_i, y_i + a), \quad (3a)$$

$$\hat{H}_2 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}(x_i, y_i) \cdot \mathbf{S} \left(x_i + a \sin \frac{\pi}{6}, y_i - a \cos \frac{\pi}{6} \right), \quad (3b)$$

$$\hat{H}_3 = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}(x_i, y_i) \cdot \mathbf{S} \left(x_i - a \sin \frac{\pi}{6}, y_i - a \cos \frac{\pi}{6} \right), \quad (3c)$$

式中 a 为六角点阵格距, $\hat{H}_1$ 仅包括所有垂直方向上的近邻作用链, $\hat{H}_2$ 仅为所有与 x 方向成 $\pi/6$ 夹角的近邻链, 而 $\hat{H}_3$ 为所有与负 x 方向成 $\pi/6$ 夹角的近邻链。这样, 就把图 1 所

示的全部近邻链分解为三部分。该操作使得各个子集 $\{\hat{H}_i\}$ 中的每条链相互作用项可对易。

(2) 应用 S-T 公式, 重写配分函数 (2) 式

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\omega_i} \{ \exp(-\varepsilon \hat{H}_1) \exp(-\varepsilon \hat{H}_2) \exp(-\varepsilon \hat{H}_3) \}^M, \quad (4)$$

式中 $\varepsilon = \beta/M$ 为引入的欧氏时间方向 (T 方向) 上的格距。实际计算时, 取 ε 足够小, 使得非对易性引起的误差 (为 ε^2 数量级) 小于统计误差。

(3) 在每一个因子 $\exp(-\varepsilon H_i)$ (共 $3M$ 个) 中各插入一套 σ^z 的本征态 $\{|s_i = \pm 1\rangle\}$, 并计算相应的跃迁矩阵元 (4-自旋元格相互作用):

$$T_p(s_1, s_2; s'_1, s'_2) = \left\langle s_1, s_2 \left| \exp \left(-\varepsilon \frac{J}{4} (\sigma_i \cdot \sigma_j) \right) \right| s'_1, s'_2 \right\rangle. \quad (5)$$

完成上述三个步骤后, 把二维量子自旋系统变换成等价的三维经典自旋系统,

$$Z_M = \prod_{(r_i, t_i)} \sum_{s(r_i, t_i) = \pm 1} \exp[-S(\{s(r_i, t_i)\})], \quad (6)$$

式中 $\{r_i, t_i\}$ 的取值分别为 $1, 2, \dots, N$ 和 $1, 2, \dots, 3M$, $\exp[-S]$ 为 (5) 式所示的元格耦合的乘积 (可参见文献 [9] 的插图 1)。

导出的三维 Ising 型自旋系统 $\{s(r_i, t_i) = \pm 1\}$ 定义在层状的蜂窝状点阵上 (即每一层中的任一点 r_i 在第三维 t 方向上作延伸), 并且在 t 方向必须取周期性边界条件。Monte Carlo 模拟过程对该等价的三维自旋系统进行。

从 (5) 式可知, 每一因子 $T_p(s_1, s_2; s'_1, s'_2)$ 共有 $2^4 = 16$ 个组态。其中只有 6 个组态是允许的, 它们可以分为如下三类:

$$\text{I: } C_1 = [1, 1; 1, 1], \quad C'_1 = [-1, -1; -1, -1], \quad (7a)$$

$$\text{II: } C_2 = [1, -1; 1, -1], \quad C'_2 = [-1, 1; -1, 1], \quad (7b)$$

$$\text{III: } C_3 = [1, -1; -1, 1], \quad C'_3 = [-1, 1; 1, -1]. \quad (7c)$$

相应的约化组态分布几率为

$$P(C_1) = P(C'_1) = 1, \quad (8a)$$

$$P(C_2) = P(C'_2) = \frac{1}{2} [\exp(\varepsilon J) + 1], \quad (8b)$$

$$P(C_3) = P(C'_3) = \frac{1}{2} [\exp(\varepsilon J) - 1]. \quad (8c)$$

其余的 10 个组态对应的 $T_p(s_1, s_2; s'_1, s'_2) = 0$, 相应地 (6) 式中含有这些组态的等价作用量 $S(\{s(r_i, t_i)\})$ 为无穷大, 这就造成了所谓的禁态问题, 增加了数值模拟困难。

关于正方格点上 QHAF 模型的研究, 已证实了 LCA 迭代方法克服了低温迭代困难和 $\varepsilon \rightarrow 0$ 的临界慢化效应, 提高了计算效率^[9,10], 并且, 在文献 [9,10] 中还给出了如何生成簇团的详细过程。它的基本思想是从任意的一点 (r_i, j) 出发, 根据其元格组态和相应约化组态几率 ((7) 和 (8) 式), 逐链生成一个闭合圈 (loop-cluster), 然后, 集体翻转该圈上所有自旋, 从而完成一次 Monte Carlo 迭代。该方法满足细致平衡条件, 并且避免了禁态问题的出现。

3 Monte Carlo 模拟结果与讨论

首先构造了三套系列满足周期性边界条件的三维多层蜂窝状点阵: $N \times 3M$ ($N = 256, 576, 1024; 3M = 36-450$), 然后, 对于定义在如此点阵上的等价 Ising 自旋系统进行 Monte Carlo 模拟计算. M 的取值保证 $\varepsilon = \beta/M \leq 0.1$, 即当温度 T 愈低时 ($\beta = T^{-1}$ 愈大), M 值随之增大. 温度区域取值在 $0.06 \leq T/J \leq 1.50$, 相比于已有的同类工作达到了更低的温度点, 其原因在于我们的方法允许取更大的 M 值. 计算中发现, 当 $\beta J < 2.0$ 时簇团主要沿欧氏时间 (t 方向) 生成, 它关于每层蜂窝状点阵的大小变化不敏感; 当 $\beta J \geq 2.0$ 时, 簇团则同时沿 t 方向和层内方向形成闭合圈. 这个结果类似于文献 [9] 的表 2 的数据, 即正方点阵上簇团大小关于 t 的变化关系. 同时, 由于 t 的取值随 β 线性增加, 这两个因素使得低温段的模拟计算花费更多的计算机时.

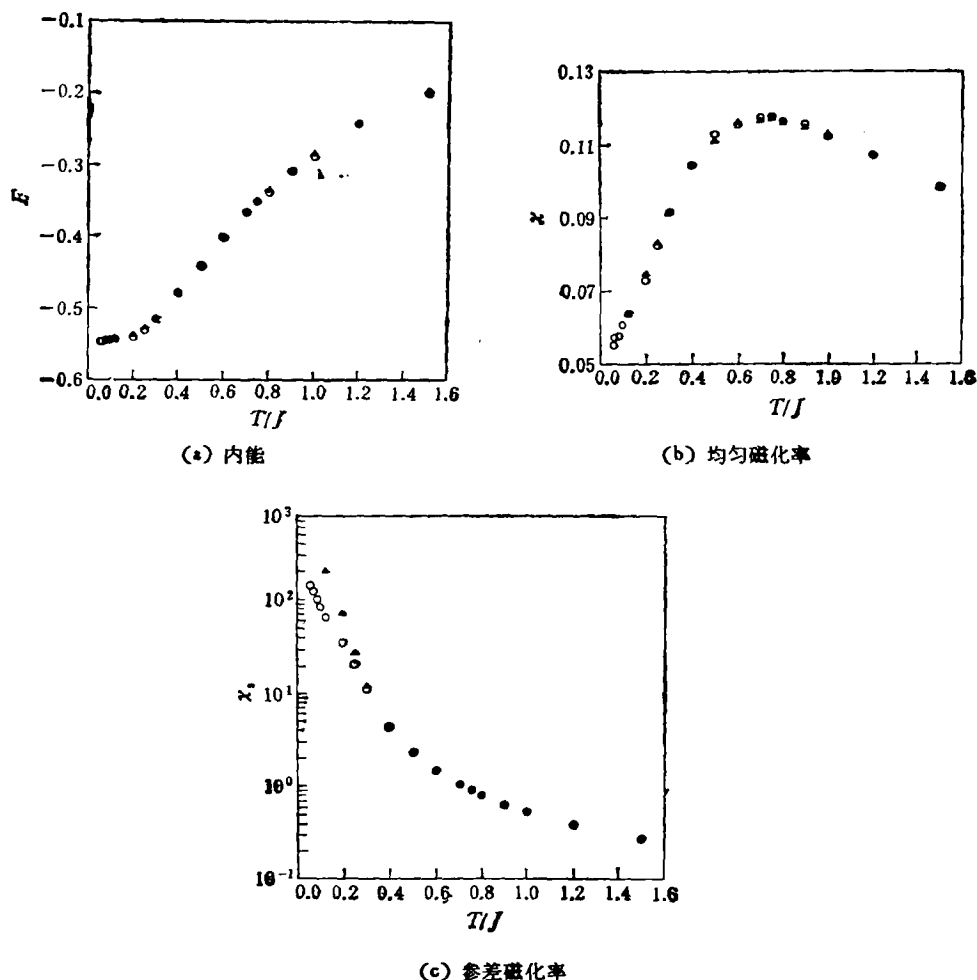


图2 256和1024两套点阵上的热力学量与温度 T/J 的变化曲线 这些结果显示出有关的低温 ($T/J < 0.2$) 特性及有限体积效应, $\circ$ 为 $N = 256$; $\blacktriangle$ 为 $N = 1024$

在验证了该 LCA 方法对蜂窝状点阵 QAFH 模型仍然有效后, 即它的自关联时间^[5,9] $\tau_c \approx 1$, $\tau_{\chi_c} \approx 1$, 我们进而计算了有关热力学量, 即内能 E , 均匀磁化率 χ 和参差磁化率 χ_s ,

$$E = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -\frac{1}{N} \left\langle \frac{\partial S}{\partial \beta} \right\rangle, \quad (9)$$

$$\chi = \frac{\beta}{N} \langle M^2 \rangle, \quad M = \sum_N s(\mathbf{r}_i, t), \quad (10)$$

$$\chi_s = \frac{\beta}{N} \langle M_s^2 \rangle, \quad M_s = \sum_N (-1)^{\delta} s(\mathbf{r}_i, t), \quad (11)$$

式中 $\langle \dots \rangle$ 表示对(6)式的 Monte Carlo 热力学平均, 当 $\mathbf{r}_i \in A$ 子格点时, $\delta = 1$, 而当 $\mathbf{r}_i \in B$ 时, $\delta = -1$. 应用簇团算法的另一个优点是可以采用“纠定计算法”(improved estimators)^[10], 以减小组态的随机涨落效应, 改善模拟计算的精确度和节省机时. 我们在计算 E, χ 和 χ_s 时都采用了这一可靠而有效的技术.

模拟过程中, Monte Carlo 迭代总数为 100000, 最初的 10000 迭代使系统达到热平衡. 每一步迭代完成一个簇团的构造, 并翻转全部簇团(闭合圈)上自旋变量

$$\{s'(\mathbf{r}_i, t_j) = -s(\mathbf{r}_i, t_j), (\mathbf{r}_i, t_j) \in \text{loop-cluster}\}. \quad (12)$$

初始组态取为随机组态. 我们也进行了从完全有序态(经典反铁磁基态)出发的有关计算, 发现与前者的结果一致. 有关的计算结果如图 2 和表 1 至表 3 所示.

与正方点阵 QHAF 的 Monte Carlo 模拟结果^[9]相比较, 两种模型有许多类似的性质. 首先, 两者的内能曲线的变化趋势相同, 在 $T/J = 0.2-0.3$ 左右两段有不同的 $E(T)$ 关于 T 的变化关系; 其次, χ 和 χ_s 的有限体积效应也相同, 双方的 χ_s 在 $T/J < 0.3$ 区域内有十分明显的有限体积效应. 与手征微扰理论得到的在低温段 ($T/J \leq 0.3$) 二维 QHAF

表 1 256×3M 点阵上 E, χ 和 χ_s 的 Monte Carlo 模拟结果

βJ	3M	Ea^2/J	$\chi a^2/J$	$\chi_s a^2/J$
18.0	540	-0.5476(15)	0.0551(6)	143.8(8)
15.0	540	-0.5468(15)	0.0574(6)	122.4(6)
12.0	360	-0.5446(13)	0.0580(6)	100.2(5)
10.0	300	-0.5458(13)	0.0607(6)	82.5(5)
8.0	240	-0.5438(14)	0.0639(6)	66.1(5)
5.0	150	-0.5403(14)	0.0728(7)	35.1(2)
4.0	120	-0.5309(14)	0.0824(7)	20.79(12)
1/0.3	120	-0.5147(14)	0.0914(8)	11.25(7)
2.50	75	-0.4783(13)	0.1043(6)	4.296(2)
2.0	75	-0.4405(11)	0.1127(6)	2.275(9)
1/0.6	75	-0.4031(13)	0.1154(6)	1.460(6)
1/0.7	60	-0.3673(14)	0.1171(5)	1.0421(24)
1/.75	60	-0.3529(14)	0.1173(5)	0.9082(28)
1.25	60	-0.3387(14)	0.1163(5)	0.7917(25)
1/0.9	60	-0.3095(14)	0.1155(5)	0.6404(19)
1.0	60	-0.2865(13)	0.1124(4)	0.5295(14)
1/1.2	30	-0.2430(13)	0.1071(3)	0.3906(9)
1/1.5	30	-0.1994(13)	0.0983(3)	0.2753(6)

表 2 $576 \times 3M$ 点阵上 E, χ 和 χ_c 的 Monte Carlo 模拟结果

βJ	$3M$	Ea^2/J	$\chi a^2/J$	$\chi_c a^2/J$
12.0	360	-0.5468(10)	0.0594(4)	204.0(8)
10.0	300	-0.5461(13)	0.0606(6)	166.1(9)
8.0	240	-0.5455(14)	0.0637(6)	128.0(7)
5.0	150	-0.5384(14)	0.0745(7)	71.7(5)
4.0	120	-0.5309(14)	0.0824(7)	20.75(12)
1/0.3	120	-0.5160(14)	0.0907(7)	11.98(8)
2.50	75	-0.4796(11)	0.1042(6)	4.334(9)
2.0	60	-0.4419(11)	0.1116(5)	2.294(9)
1/0.6	60	-0.4045(12)	0.1154(5)	1.457(5)
1/0.7	60	-0.3686(13)	0.1165(5)	1.044(3)
1/.75	60	-0.3518(13)	0.1169(5)	0.905(3)
1.25	60	-0.3390(14)	0.1158(4)	0.7978(20)
1/0.9	60	-0.3103(14)	0.1147(4)	0.6662(18)
1.0	45	-0.2845(14)	0.1129(4)	0.5305(14)
1/1.2	30	-0.2436(13)	0.1072(3)	0.3896(9)
1/1.5	30	-0.1973(14)	0.0982(3)	0.2759(6)

表 3 $1024 \times 3M$ 点阵上 E, χ 和 χ_c 的 Monte Carlo 模拟结果

βJ	$3M$	Ea^2/J	$\chi a^2/J$	$\chi_c a^2/J$
10.0	300	-0.5458(13)	0.0613(5)	273.7(1.2)
8.0	240	-0.5438(14)	0.0637(6)	203.8(1.2)
5.0	150	-0.5403(14)	0.0745(7)	71.6(5)
4.0	120	-0.5309(14)	0.0830(5)	27.58(19)
1/0.3	120	-0.5147(14)	0.0913(6)	12.05(7)
2.50	75	-0.4783(13)	0.1044(6)	4.316(20)
2.0	75	-0.4405(11)	0.1111(6)	2.278(9)
1/0.6	75	-0.4031(13)	0.1158(5)	1.458(5)
1/0.7	60	-0.3673(14)	0.1165(5)	1.044(3)
1/.75	60	-0.3531(14)	0.1173(5)	0.905(3)
1.25	60	-0.3387(14)	0.1160(4)	0.7991(24)
1/0.9	60	-0.3095(14)	0.1146(4)	0.6391(18)
1.0	45	-0.2865(13)	0.1126(4)	0.5311(14)
1/1.2	30	-0.2430(13)	0.1073(3)	0.3899(9)
1/1.5	30	-0.1973(14)	0.0982(3)	0.2758(6)

模型具有长程反铁磁性及其动力学由磁子 (goldstone) 决定的结论一致^[10,11]。而出现的差别仅仅是由于配位的不同而导致的 χ 峰值对应的温度值从 $T_p = 1.0J$ 下降到 $T'_p = \frac{3}{4} T_p \approx 0.75J$ 。

计算结果还显示,由于采用 LCA 方法和纠定算法,所得的热力学量的误差小,并能达到比其他有关工作^[12]更低的温度区域。我们还利用 Suzuki 公式,给出 $M \rightarrow \infty$ 时极限下的 E_∞ 值。它与有限 M 值的 E_M 之间存在的关系为^[13,14]

$$E_\infty = E_M + A/M^2 + B/M^4, \quad (13)$$

利用三套不同点阵 $256 \times 3M$ ($M = 360, 450, 540$), 可计算出相应的在 $T/J \leq 0.1$ 时的

E_M 值,从而给出如下的一个关于外推至 $T \rightarrow 0$ 时的基态能量的估计:

$$e_0 = -0.5460(10)J. \quad (14)$$

相比于同类 S-T 方法的研究工作,由于我们采用了较大的 M 值和在更低的温度点作外推,所得的数值结果更可信。另一方面,相比于一些可直接研究 Heisenberg 模型基态和低激发态性质的 Monte Carlo 方法,如 Lanczos, 投影算符和 Green 函数方法^[13,15],我们的方法不依赖于尝试波函数的选择,因而可以作为一种独立的比较参考点。

我们的结论是, LCA 方法能够成功地应用于蜂窝状点阵 QAFH 模型的研究。结合已有的关于正方点阵的研究^[9,10],验证了该方法能够有效地模拟一般的具有 $A-B$ 子格点阵的 Heisenberg 模型及相关自旋系统,如量子 X-Y 模型、非各向同性的 XXZ 模型及含横外场的 Ising 模型等。进一步,与正方点阵 QHAF 模型的研究有相似的低温性质的结果给出了两者属同一个普适类的一个证据,并有待于利用手征微扰理论等解析方法作进一步的验证。目前,关于发展该方法应用于有关量子自旋系统的研究仍在进行中。

感谢与李文铸教授和陈锋博士的讨论。

- [1] The Hubbard Model, Recent Results, Series on Advances in Statistical Mechanics Vol. 7, eds. Mario, Rasetti (World Scientific, 1991).
- [2] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.*, **63**(1991), 1.
- [3] T. Barnes, *Int. J. Mod. Phys.*, **2**(1991), 659.
- [4] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.*, **56**(1976), 1454; *Commun. Math. Phys.*, **51**(1976), 183.
- [5] H.-P. Ying and D.-R. Ji, *Commun. Theor. Phys.*, **21**(1994), 412.
- [6] U.-J. Wiese and H.-P. Ying, *Phys. Lett.*, **A168**(1992), 143.
- [7] R. Swensen and J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987), 86; U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 361; *Nucl. Phys.*, **B334**(1990), 581.
- [8] G. Evertz and M. Marcu, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 875; *Nucl. Phys. B(proc. suppl.)*, **30**(1993), 277.
- [9] 应和平、季达人, *物理学报*, **42**(1993), 1845.
- [10] 应和平、U.-J. Wiese, *物理学报*, **42**(1993), 1658.
- [11] P. Hasenfratz and F. Niedermayer, *Z. Phys. B* **92**(1993), 91.
- [12] M. S. Macvić and H.-Q. Ding, *Phys. Rev.*, **B 43**(1991), 3652.
- [13] M. Suzuki, *Phys. Lett.*, **A 113**(1985), 299.
- [14] D.-R. Ji and H.-P. Ying, *Chin. Phys. Lett.*, **119**(1994), 47.
- [15] G. Sun and F.-C. Pu, *Commun. Theor. Phys.*, **19**(1993), 145; G. Sun, *ibid.*, **17**(1992), 111.

A LOOP-CLUSTER UPATING MONTE CARLO STUDY FOR THE TWO-DIMENSIONAL QHAF ON THE HEXAGONAL LATTICES

YING HE-PING JI DA-REN WANG ZHI-JIAN

*(Zhejiang Institute of Modern Physics, Department of Physics, Zhejiang University,
Hangzhou 310027)*

(Received 1 August 1994)

ABSTRACT

A new type of cluster algorithm is developed to simulate the two-dimensional spin one half quantum Heisenberg antiferromagnet (QHAF) on a hexagonal lattice. The numerical results show that the method can be applied to study efficiently the QHAF systems at lowertemperatures, with large Trotter number, on the general bipartite lattices.

PACC: 7510J; 7470H; 7540M; 0550