

自旋 $S=3/2$ 和 $S=2$ Blume-Capel 模型相变的 Monte Carlo 研究

张 国 民 杨 传 章

(苏州大学物理系, 苏州 215006)

(1994年2月3日收到)

利用计算机 Monte Carlo 模拟, 研究自旋 $S=3/2$ 和 $S=2$ Blume-Capel 模型的相图. 与最近刚发展起来的适用于研究 $S>1$ 的关联有效场相比较, 得出如下结论: 对于 $S=3/2$ 和 $S=2$, 关联有效场过高地估计了它们的相变温度; 对于 $S=3/2$ 的相图, 除了有二级相变线外, 还发现了一级相变线; 对于 $S=2$, 关联有效场同样过高地估计了三临界点的值.

PACC: 7510H; 7540C

1 引 言

自旋 $S=1$ 的带有单离子各向异性的 Ising 模型通常称为 Blume-Capel (BC) 模型^[1]. 由于用它可以解释物理中的多临界现象, 因而引起了人们的广泛注意^[2-6], 并利用各种方法, 如平均场重整化群^[2]、变分法^[3]、有效场方法^[4]来研究它. 但是很少有人去研究自旋 $S>1$ 的 BC 模型^[7]. 这是因为随着自旋 S 的增大, 系统将变得更加复杂, 有些近似处理方法将会带来技术处理上的困难. 最近, Kaneyoshi 等人利用 Ising 自旋恒等式和微分算符技巧, 将有效场理论推广到 $S>1$ 的情形^[8]. (在文献[8]中称为新有效场理论.) 他们利用这种新有效场理论研究了一系列的自旋 $S>1$ 的 Ising 自旋系统的相变性质^[7-10]. 由于到目前为止, 对于 $S>1$ 的 Ising 自旋系统很少有人用其它方法研究过^[7], 因此这种新有效场理论的近似程度究竟如何, 人们还不知道. 本文的主要目的就是试图通过其它方法来验证这种新有效场理论的近似程度. Monte Carlo 方法除了有限尺寸效应(可通过标度理论^[11]解决)和可以控制的统计误差外, 它能正确地处理自旋之间的相互作用, 不带任何其他近似, 因此 Monte Carlo 计算机模拟能够用来验证新有效场理论的近似程度. 本文的工作是在文献[11-13]以及文献[14]的启示下进行的. 在文献[14]中研究了自旋 $S=3/2$ 的 BEG 模型. 通过模拟并与新有效场理论比较, 我们发现, 对于 $S=3/2$ 和 $S=2$, 关联有效场过高地估计了它们的相变温度. 对于 $S=3/2$ 的相图, 除了有二级相变线外, 我们还发现了一条一级相变线. 对于 $S=2$, 关联有效场近似同样过高地估计了三临界点的值.

2 模型与模拟结果

BC 模型是带有晶场作用的 Ising 模型, 其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - D \sum_i S_i^2,$$

式中 J 为近邻交换积分, D 为晶场。等号右端第一项对最近邻求和, 第二项对所有格点求和。自旋 S_i 的取值为 $S_i = -S, -S+1, \dots, S-1, S$, 共有 $(2S+1)$ 种可能值。故当 $S=3/2$, 自旋 S_i 可取 $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ 四种值, 对于 $S=2$, 自旋 S_i 可取 $-2, -1, 0, 1, 2$ 五种值。

我们采用了标准的翻转单个自旋的 Metropolis 算法^[15]。晶格大小为 30×30 的平方点阵。我们采用了周期性边界条件。开始的 1000 MCS 作为系统趋于热平衡所需的时

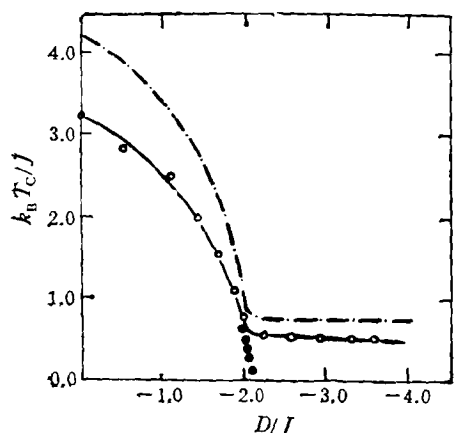


图1 $S=3/2$ 时 BC 模型的相图 —— 为 Monte Carlo 方法; --- 为新有效场近似; ●●● 为一级相变, 是用 MC 方法求得

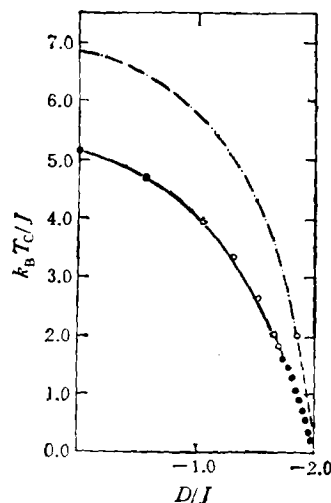


图2 $S=2$ 时 BC 模型的相图 --- 和 ... 分别为新有效场近似和用 Monte Carlo 方法求出的二级相变线; 其余符号说明同图1

间, 不进行统计平均, 而对以后的 3000 MCS 对所测的物理量进行统计平均。对于本文所讨论的自旋 $S=3/2$ 和 $S=2$, 测出在固定晶场时比热 c 随温度 $k_B T/J$ 变化的曲线。我们将比热峰点所对应的温度 $k_B T/J$ 作为所求出的相变温度。图1中高温区的二级相变线和图2中的相图都是采用此种方法得出的。

由于对应于图1中的二级相变线和图2中的二级相变线的确定方法, 我们以前曾作过详细报道^[11,13], 故这里不再重复。这里主要给出图1中对应于低温区的一级相变线和图2中三临界点和一级相变线的确定方法。

图1中的一级相变线是通过测量 χ_Q 在固定温度 $k_B T/J$ 而对晶场 D 扫描时变化曲线所确定的。这里 χ_Q 定义为^[14]

$$\chi_Q = \beta N (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2),$$

$$\langle Q \rangle = \frac{2}{N} \left(\sum_A (S_A)^2 - \sum_B (S_B)^2 \right),$$

这里 $N = L \times L$, A, B 是将平方点阵分成两套子晶格。图3示出 $k_B T/J = 0.4$, D/J 从 -1.0 变到 -3.0 的 χ_Q 曲线。从图3可以看到在 $D/J = -2.0$ 处 χ_Q 有一峰值。我

们将峰值处的 $(k_B T/J, D/J)$ 作为图 1 中低温区的相变点。此处的相变是一级相变还是二级相变, 可通过下列方法确定:

1) 改变初始位形, 然后测量 $\langle Q \rangle$ 随 D/J 变化的情况, 发现在相变点附近 $\langle Q \rangle$ 会受到初始位形的影响。即使将热平衡的时间增大到 5000 MCS, 同样会发现 $\langle Q \rangle$ 受到初

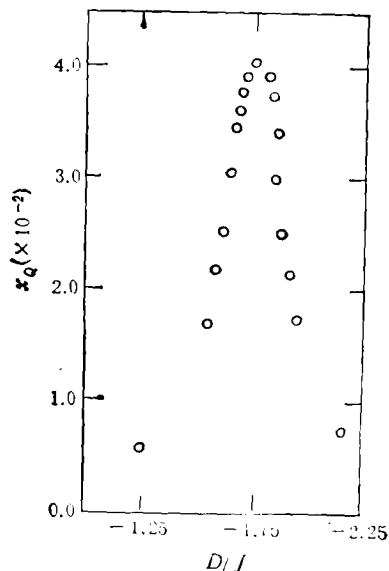


图 3 $\langle Q \rangle$ 随 D/J 变化曲线 $k_B T/J = 0.4$;
 $S = 3/2$

始位形的影响。由于只有在一级相变点附近, $\langle Q \rangle$ 会受到初始位形的影响, 而在二级相变点附近, $\langle Q \rangle$ 与初始位形无关, 因此我们判断此处的相变是一级相变, 而不是二级相变。这与我们在研究 $S = 1$ BC 模型^[13]相一致。此种方法在文献 [13] 中已有详细报道, 这里不再详述。

2) 由于在一级相变点, 序参量 $\langle Q \rangle$ 不连续, 这和二级相变点处序参量连续不一样。利用此特点, 可以判断此处的相变是一级相变还是二级相变。为了克服晶格尺寸效应, 必须将晶格尺寸取得很大, 而考虑到计算机的计算能力, 晶格尺寸不可能取得很大, 因此我们选取 100×100 的晶格。以往经验^[17]表明, 对于这样大的尺寸, 足可以将一级相变点处的序参量分开。若晶格尺寸取得很小, 晶格尺寸效应可能会导致序参量的连续^[1], 从而误认为是二级相变。我们选取 100×100 的晶格大小, 对于这样大小的尺寸, 虽然也有

有限尺寸效应, 对序参量的值有影响, 但是这种影响是很小的, 不可能使本来不连续的物理量变成连续, 因此我们选取的晶格尺寸足以使不连续的物理量分开。在具体模拟中, 选取温度为相变温度, 通过测量在相变温度处 $\langle Q \rangle$ 随时间的演化 (这里的时间即 Monte Carlo step/spin), 发现随着初始位形为有序和初始位形为无序, $\langle Q \rangle$ 会趋于不同的值, 因此我们判断此处的相变是一级相变。这种判断相变类型的方法我们在文献 [15] 中作了详细报道。

通过以上两点我们判断在图 3 中峰值处所发生的相变是属于一级相变而不是二级相变。

为了比较, 将新有效场理论的结果也示于图 1 中。从图 1 中可以明显看出, 新有效场理论过高地估计了相变温度, 且随着晶场的增大, 新有效场理论与我们的结果偏差越来越大, 即使在晶场很小时, 新有效场理论与我们的结果仍有偏差, 但是这种偏差相对晶场较大时却小一点。从图 1 还可以看出, Monte Carlo 方法在低温区预见了有一级相变的存在, 这个结果和最近的重整化群结果^[16]一致。二级相变的物理意义是将有序区和无序区在相图上分开, 而一级相变的物理意义却是把有序态 $(3/2, 3/2)$ 和 $(1/2, 1/2)$ 分开。这里态的表示沿用文献 [14] 中的表示方法。这里的一级相变完全是由自旋 S 的值为 $3/2$ 决定的。

图 2 中二级相变是通过比热峰点确定的。在低温区发现能量 E 有磁滞现象发生^[13]。

同样按照我们以前的方法^[13], 逐步调节温度 $k_B T/J$ 可以确定三临界点的值。在低温区, 比热 c 和 χ_0 均会出现峰值, 只不过此时用两种方法求出的结果一致。他们都对应于相图上的同一点。我们最后得到的三临界点的值为 $k_B T/J = 1.60$, $D/J = -1.75$, 而新有效场理论给出的三临界点的值为 $k_B T/J = 2.0$, $D/J = -1.83$, 因此有效场理论给出的值比我们的。同样从图 2 可以看出, 有效场理论给出的整个相图的相变温度比我们的高。这个结论和 $S = 3/2$ 的情形一致。

3 结 论

本文给出了 $S = 3/2$ 和 $S = 2$ BC 模型的相图。与关联有效场比较, 得出如下结论: 对于 $S = 3/2$ 和 $S = 2$, 关联有效场过高地估计了它们的相变温度; 对于 $S = 3/2$ 的相图, 除了有二级相变线外, 我们还发现了一级相变线; 对于 $S = 2$, 关联有效场同样过高地估计了三临界点的值。

本文全部数据均在苏州大学计算中心的 Taiji 2230 计算通过, 在此深表感谢。

- [1] M. Blume, V. J. Emery, *Phys. Rev.*, **A4**(1974), 1071.
- [2] O. F. De Alcantara Bonfim, *Physica*, **A130**(1985), 367.
- [3] R. Micnas, *Physica*, **A98**(1979), 403.
- [4] R. Honmura and T. Kaneyosho, *J. Phys. C*, **12**(1979), 3979.
- [5] T. Kaneyoshi and J. Micnicki, *J. Phys. Condensed Matter*, **2**(1990), 8773.
- [6] N. Boccara, A. Elkenz and M. Saber, *J. Phys. Condensed Matter*, **1**(1989), 5721.
- [7] G. Le Gal, T. Kaneyoshi and A. Khater, *Physica A*, **195**(1993), 174.
- [8] T. Kaneyoshi, J. W. Tucker and M. Jascur, *Physica A*, **186**(1992), 495.
- [9] M. Jascur and T. Kaneyoshi, *Physica A*, **195**(1993), 497.
- [10] T. Kaneyoshi and M. Jascur, *Phys. Lett.*, **A177**(1993), 172.
- [11] G. M. Zhang and C. Z. Yang, *Z. Phys. B*, **94**(1993), 145.
- [12] G. M. Zhang and C. Z. Yang, *J. Phys. A: Math. and Gen.*, **26**(1993), 4907.
- [13] 张国民, 杨传章, *物理学报*, **42**(1993), 128.
- [14] F. C. Sa. Barreto *et al.*, *Physica*, **A172** (1990), 378.
- [15] 张国民, 杨传章, *物理学报*, **42**(1993), 1680.
- [16] A. Bakchichi, A. Bassir and A. Benyoussef, *Physica A*, **195**(1993), 188.
- [17] G. M. Zhang and C. Z. Yang *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 9487.

MONTE CARLO STUDY OF THE PHASE DIAGRAMS OF $S=3/2$ AND $S=2$ BLUME-CAPLE MODEL

ZHANG GUO-MING YANG CHUAN-ZHANG

(*Department of Physics, Suzhou University, Suzhou 215006*)

(Received 3 February 1994)

ABSTRACT

We studied the phase diagrams of $S = 3/2$ and $S = 2$ Blume-Caple model by using Monte Carlo computer simulations. A comparison with the new effective field theory with correlations makes us to draw the following conclusion: Effective field theory with correlations overestimates the critical temperatures for both $S = 3/2$ and $S = 2$ Blume-Caple model. For $S = 3/2$, besides a second order transition occurring at high temperature, there exists a first order transition line occurring in the low temperature region. For $S = 2$, the effective field theory also overestimates the tricritical point in the phase diagram.

PACC: 7510H; 7540C