

[文章编号] 1001-246X(2009)06-0937-05

三维 Ising 模型的蒙特卡罗模拟

黄纯青, 邓绍军

(佛山科学技术学院理学院光电子与物理系, 广东 佛山 528000)

[摘 要] 采用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 重点抽样法对三维 Ising 模型进行计算机模拟, 测量无外磁场时三维 Ising 模型中自旋键链的能量、磁化强度、比热及磁化率的统计平均值与标准误差 (不确定度)。结果表明, 三维 Ising 模型在无外磁场时存在自发磁化现象, 铁磁 \rightarrow 非铁磁相变临界点在 $J/(k_B T_C) = 0.222\ 0$, 或居里温度 $T_C = 4.500\ 0$ 处。并研究存在外磁场时上述物理量随温度与外磁场的变化规律, 给出物理解释。

[关键词] 三维 Ising 模型; 重点抽样法; 相变临界点; 温度; 外磁场

[中图分类号] O414.2

[文献标识码] A

0 前言

Ising 模型^[1]广泛应用于统计物理、材料物理、凝聚态物理等领域, 它由德国物理学家伦兹 (Lenz) 在 20 世纪 20 年代提出, 可用来描述单轴各向异性磁性系统, 合金等物理体系。1925 年, Ising 给出了其在一维情况下的严格解, 证明了在一维情况下不存在相变, 且在温度不为绝对零度的情况下都无自发磁化。1936 年, 佩尔论论证了二维伊辛模型存在自发磁化; Onsager 在 1944 年做出了零磁场下在二维空间的严格解并计算了它的相变温度, 研究了比热等物理量在相变点的行为。杨振宁在 1952 年给出了外磁场很小时二维 Ising 模型的解析解^[1]。

不管是一维还是二维系统都不是真实的物理系统, 而是一个理想模型, 只有三维系统才与实际物理系统相对应, 因此研究三维 Ising 模型更有意义。一般认为三维 Ising 模型没有解析解, 只能采用近似方法。随着计算机技术的发展, 其在诸多领域中有重要应用, 常被用作检验各种数值方法或解析近似方法的标准。Ising 模型许多变形 (如类 Heisenberg 模型^[2,3]、磁性膜系统^[4]、一维亚铁磁混合自旋链^[5]等) 在诸多研究领域中有实际应用。

本文在个人电脑上使用蒙特卡罗 (Monte Carlo) 重点抽样法^[6]研究三维 Ising 模型在一定温度与磁场下自旋键链的平均能量 $\langle E \rangle$ 、平均磁化强度 $\langle M \rangle$ 、平均比热 c_V 、平均磁化率等物理量随温度与外磁场变化的规律, 考察格点数以及抽样数量对结果可靠性的影响, 重点考察三维 Ising 模型的铁磁 \rightarrow 非铁磁相变临界点与物理量随外磁场的变化规律。

1 Ising 模型介绍

Ising 模型是在统计物理中广泛研究的模型之一, 最初被用于研究磁性物体在磁场中的行为。现在看来, 它是铁磁体的一种最简单的理论模型, 可近似描述单轴各向异性铁磁体, 稍加改变, 还可用来描述反铁磁体, 气 \rightarrow 液相变, 二元溶液相变以及合金的有序 \rightarrow 无序相变等。

如图 1, 设有 $L \times L \times L$ 个自旋粒子, 处于三维晶格格点位置上, 每个粒子的自旋只能取向上或向下两个态, 并只考虑近邻自旋之间的相互作用, 这样的自旋系统称为 Ising 模型。其哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mu B \sum_i s_i, \quad (1)$$

其中第 i 个格点位置的自旋 s_i 取值为 $+1$ 或 -1 , 分别对应于自旋向上或向下, $\sum_{\langle i,j \rangle}$ 表示对一切可能的近邻

[收稿日期] 2008-08-04; [修回日期] 2009-02-26

[作者简介] 黄纯青 (1963-), 男, 广东揭阳, 副教授, 博士, 主要从事量子物理研究。

© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

键链对 $\langle i, j \rangle$ 求和, J 为与交换积分成正比的耦合常数. 这里令 $J > 0$, 代表铁磁体; $J < 0$, 描述反铁磁体. 式中的第一项为交换能, 只限于最近邻之间, 第二项代表在外磁场 B 中的塞曼能, μ 为与自旋相应的磁矩. 因为式(1)中的自旋不当作算符处理, 所以是一种半经典模型. 以下只讨论 $J > 0$, 即铁磁情形.

2 模拟方法与计算公式

Monte Carlo(MC) 方法是一种利用随机数对问题的概率模型进行模拟从而获得问题的解的方法. 又称统计模拟 (Statistical Simulation) 方法. 重点抽样法^[7] (Importance Sampling) 的思想是按照一定的概率密度分布来进行抽样, 而不是均匀地进行抽样. 具体计算步骤如下:

- ①初始化. 产生 $[0, 1]$ 区间的随机数, 根据相应初值条件产生系统初态;
- ②预热. 预先让系统进行 $Warmup$ 次预抽样, 使系统经历一段时间的演化达到热平衡状态;
- ③抽样. 采用重点抽样法^[7], 每隔 $Skip$ 个完全循环, 记录计算所需要的物理量, 重复 $Updates$ 次;
- ④计算统计平均值与标准误差;
- ⑤输出数据.

对于具有 $N = L^3$ 个系统, 每次测量都需要计算每个自旋键链占有的能量、比热、磁化强度等物理量, 使用的计算公式如下:

能量

$$\langle E \rangle_k = \left[-J \sum_{\langle 1, 2 = i, j, k \rangle} s_1 s_2 - \mu B \sum_{i=1}^N s_i \right] / L^3; \tag{2}$$

比热

$$\langle c_V \rangle_k = L^3 \times \frac{\langle E^2 \rangle_k - \langle E \rangle_k^2}{T^2}; \tag{3}$$

磁化强度

$$\langle m \rangle_k = \sum_i s_{i, k} / L^3. \tag{4}$$

共测量了 $Updates$ 个数据, 记录每次测量结果, 可得统计平均值,

$$\langle E \rangle = \sum_{k=1}^{Updates} \langle E \rangle_k / Updates, \tag{5}$$

$$\langle c_V \rangle = \sum_{k=1}^{Updates} \langle c_V \rangle_k / Updates, \tag{6}$$

$$\langle m \rangle = \sum_{k=1}^{Updates} \langle m \rangle_k / Updates. \tag{7}$$

根据

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \frac{1}{Updates(Updates - 1)} \sum_{k=1}^{Updates} [A_k^2 - \langle A \rangle^2], \tag{8}$$

可以计算出各物理量的不确定度. 此外系统的磁化率为

$$\chi = \frac{\langle \Delta m_k^2 \rangle}{k_B T} = \frac{\sum_{k=1}^{Updates} \beta (\langle m_k^2 \rangle - \langle m \rangle^2)}{Updates}, \tag{9}$$

这里 k_B 为玻尔兹曼常数, $\beta = 1/(k_B T)$.

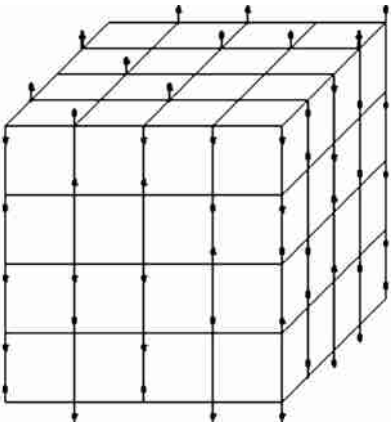


图 1 三维 Ising 模型
Fig. 1 A 3 dimensional Ising model

3 结果与讨论

3.1 蒙特卡罗模拟参数的确定

根据重点抽样法对三维 Ising 模型进行模拟, 必须选定很多参数. 包括格点数 N_x, N_y, N_z , 抽样数量 $Updates$, 预热数 $Warmup$, 抽样间隔 $Skip$. 为了合理选择参数, 成功完成模拟计算, 我们进行了数值模拟实验. 在周期性边界条件下, 确定了如下的模拟参数: $Updates = 20\,000$, $Warmup = 2\,000$, $Skip = 200$.

3.2 无外磁场时相变临界点的确定

根据上述模拟参数, 采用周期性边界条件, 首先测量了无外磁场时三维 Ising 模型每个自旋键链的平均能量 $\langle E \rangle$ 、磁化强度 $\langle M \rangle$ 、比热 c_V 、磁化率 χ 等物理量(图 2). 发现无外磁场情况下, 三维 Ising 模型在低温下平均磁化强度为 1, 系统存在自发磁化现象, 这与前面讲到的 $J > 0$ 对应铁磁体相符. 随着温度升高, 系统的平均磁化强度减少, 平均能量增加, 自发磁化被破坏. 当温度从大于 T_C 或小于 T_C 两边趋于居里温度时, 系统的比热 c_V 趋于无限大, 这是物质在铁磁性状态和非铁磁性状态之间的相变. 从图 2 可以看到, 相变临界点在 $J/(k_B T_C)$ 为 0.210~0.225 之间. 为了判定相变临界点的位置, 在转变温度 T_C 附近研究物理量的行为. 计算 T_C 附近平均磁化率随温度的变化(图 3). 由图 3 可以得出, 三维 Ising 模型在无外磁场情况下由铁磁 \rightarrow 非铁磁的相变临界点为 $J/(k_B T_C) = 0.222\,0$, 或 $T_C = 4.500\,0$, 这与文[8]采用集群计算机系统模拟得到的结果 $J/(k_B T_C) = 0.221\,654\,4$ 一致.

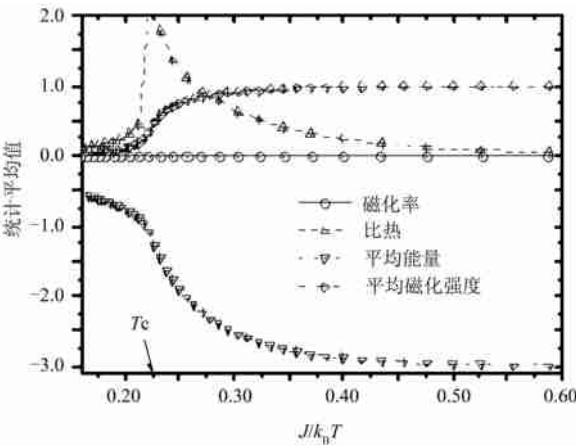


图 2 无外磁场时物理量随温度的变化
Fig 2 Physical quantities versus $J/(k_B T)$ as $B = 0$

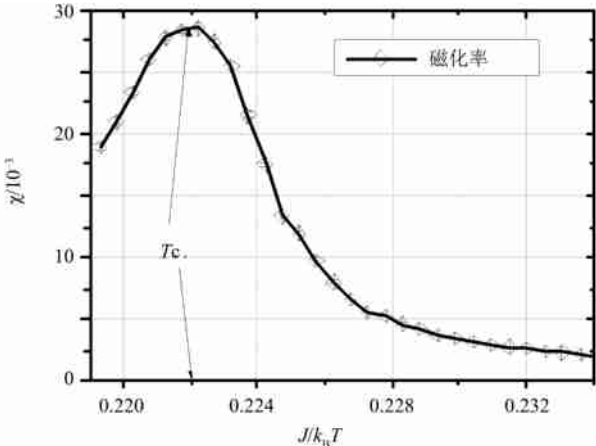


图 3 无外磁场时 T_C 附近磁化率随温度的变化
Fig. 3 χ versus $J/(k_B T)$ as T is near T_C and $B = 0$

3.3 物理量随温度(或外磁场)的变化规律

3.3.1 比热

图 4 为引入外磁场后不同外磁场强度下三维 Ising 模型的比热 c_V 随温度的变化情况. 可以发现, $B \neq 0$ 时, 比热曲线为单峰结构的连续曲线, 系统不存在铁磁 \rightarrow 非铁磁相变. 或者说, 外磁场的引入改变了三维 Ising 模型的相结构.

3.3.2 磁化强度

三维 Ising 模型的磁化强度随温度与外磁场强度的变化情况见图 5. 可见在相同温度下, 外磁场强度越大, 平均磁化强度也越大. 原因是, 根据(1)式和能量最低原理, 有外磁场存在时自旋将尽可能选择与外磁场相同的取向, 或者说系统发生了顺磁磁化, 外磁场越强, 顺磁磁化越厉害.

4.3.3 磁化率

不同外磁场下, 自旋键链的平均磁化率随温度变化的规律如图 6. 可以看到:
1) 在低温区($J/(k_B T) > 0.5$), 不同外磁场下, 磁化率的低温极限行为是一致的, 磁化率与温度成反比. 物理上的解释是在低温区, 系统自发磁化较强, 外磁场还不足以破坏这种自发磁化形成的相结构.

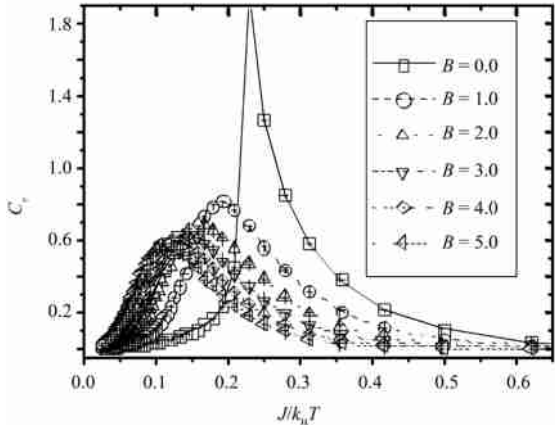


图 4 不同外磁场强度下比热随温度的变化
Fig. 4 c_v versus $J/(k_B T)$ at different B

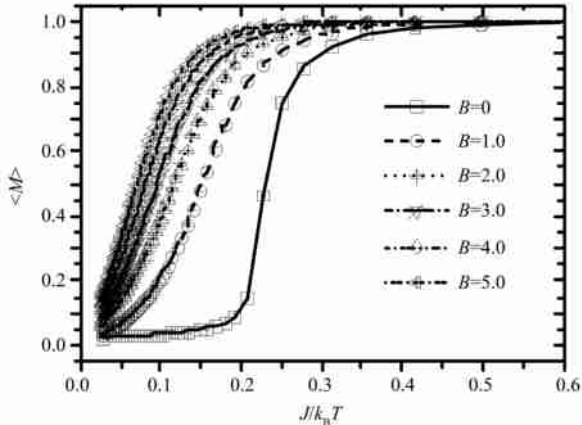


图 5 平均磁化强度随温度与外磁场强度的变化
Fig. 5 $\langle M \rangle$ versus $J/(k_B T)$ at different B

2) 在中温区 ($0.5 > J/(k_B T) > 0.15$), 不同外磁场下, 随温度的增加, 磁化率的变化规律都经历了一个增加过程. 这是因为这时热运动还不足以抵抗外磁场对自旋转向的“口令”作用, 自旋磁矩尽可能转到与外磁场相同的方向上, 发生了顺磁磁化.

3) 在高温区 ($J/(k_B T) < 0.15$), 磁化率随温度的增加而减少, 而且外磁场越强, 相应的磁化率峰值对应的温度越高. 物理上的原因是随着热运动加剧, 弱化了外磁场的作用, 随温度的增加, 自旋无序排列的几率增大, 磁化率就越低. 外磁场越强, 要抵抗外磁场的作用, 需要的温度越高, 因此磁化率峰值对应的温度随外磁场的增强而变大.

4.3.4 平均能量

不同外磁场下, 自旋键链的平均能量随温度变化的规律如图 7, 可以看到:

- 1) 在低温区, 平均能量随外磁场的增大而线性减少, 这与(1)式相符.
- 2) 在高温区, 自旋键链的平均能量随温度的升高而增加, 而且具有相同的极限值. 这是因为高温时热运动加剧, 破坏了自旋取向的同一性, 在极端情况下(1)式的第二项没有贡献(平均值为零), 因此自旋键链的平均能量具有相同的高温极限.

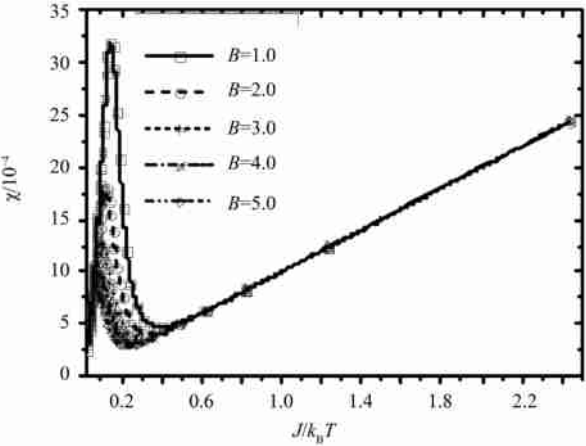


图 6 平均磁化率随温度与外磁场强度的变化
Fig. 6 χ versus $J/(k_B T)$ at different B

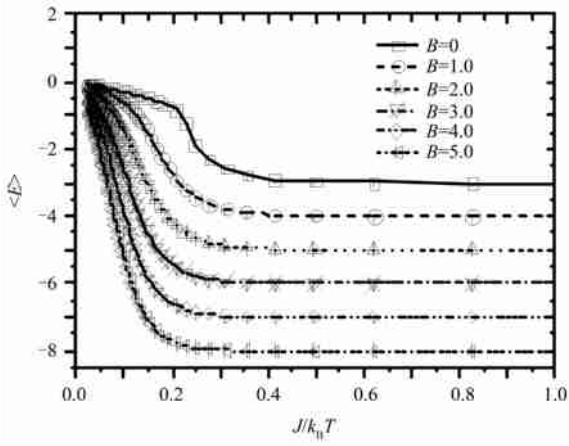


图 7 平均能量随温度与外磁场强度的变化
Fig. 7 $\langle E \rangle$ versus $J/(k_B T)$ at different B

4 结 论

本文使用 Monte Carlo 重点抽样法研究了三维 Ising 模型, 确定合理的抽样参数为 $L = 20$, $U_{\text{updates}} =$
© 1994-2010 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

20 000, $Skip = 200$. 得到如下结论:

1) 三维 Ising 模型存在自发磁化现象, 即没有外磁场时, 低温下三维 Ising 模型的自旋键链有相同方向, 但随温度的增加, 系统将发生铁磁 \rightarrow 非铁磁相变. 模拟计算得到的相变点为 $J/(k_B T_c) = 0.222\ 00$, 或者 $T_c = 4.500\ 0$, 这与文[8]采用集群计算机系统模拟得到的结果 $J/(k_B T_c) = 0.221\ 654\ 4$ 一致.

2) 引入外磁场以后, 三维 Ising 模型的铁磁 \rightarrow 非铁磁相变消失了, 或者说, 外磁场的引入改变了三维 Ising 模型的相结构.

3) 不同外磁场下, 在低温区 ($J/(k_B T) > 0.5$), 磁化率与温度成反比; 在中温区 ($0.5 > J/(k_B T) > 0.15$), 磁化率随温度的上升递增; 在高温区 ($J/(k_B T) < 0.15$), 磁化率随温度的增加而减少, 而且外磁场越强, 相应的磁化率峰值对应的温度越高.

4) 在低温区, 自旋键链的平均能量随外磁场的增大而线性减少, 但不同外磁场下, 自旋键链的平均能量具有相同的高温极限.

[参 考 文 献]

- [1] 北京大学物理系《量子统计物理学》编写组. 量子统计物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1987: 323–348.
- [2] Weng Zhenzhen, Feng Qian, Xiao Yan, et al. Micromagnetism and Monte Carlo simulation of magnetism of a two dimension diluted system[J]. Chinese J Comput Phys, 2004, **21**(3): 339–345.
- [3] Hu Yong, Du An. Hysteresis loops of FM core/AFM systems: A Monte Carlo study[J]. Chinese J Comput Phys, 2008, **25**(3): 573–578.
- [4] Du Haifeng, Du An, Hu Yong. Monte Carlo simulation of magnetic monolayer films[J]. Chinese J Comput Phys, 2006, **23**(5): 583–588.
- [5] Shen Shuangjuan, Jiang Liqin, Yang Yanmin, et al. Magnetic properties of a mixed one dimensional ferromagnetic spin chain: Monte Carlo simulation[J]. Chinese J Comput Phys, 2007, **24**(2): 321–325.
- [6] 朱本仁. 蒙特卡罗方法引论[M]. 济南: 山东大学出版社, 1987: 49–92.
- [7] 杨清健. 计算物理[M]. 上海: 上海科学出版社, 1988: 143–147.
- [8] Talapov A L, B te H W J. The magnetization of the 3D Ising model [J]. J Phys A: Math Gen, 1996, **29**: 5727–5733.

Monte Carlo Simulation of 3-dimensional Ising Model

HUANG Chunqing, DENG Shaojun

(Department of Optical Electronics and Physics, Foshan University, Foshan 528000, China)

Abstract: A 3 dimensional Ising model is simulated with Monte Carlo importance sampling method. Statistical values of energy, strength of magnetization, specific heat and rate of magnetization of spin links as well as their standard errors (uncertainties) are measured. 3 dimensional Ising model shows spontaneous magnetization with no exterior magnetic field. Critical point of phase transformation is at $J/(k_B T_c) = 0.222\ 0$ or $T_c = 4.500\ 0$. Phase transformation at high temperature disappears with exterior magnetic field. Relationship between physical quantities, temperature and exterior magnetic field is investigated and analyzed.

Key words: 3 dimensional Ising model; importance sampling; critical point of phase transformation; temperature; exterior magnetic field