

Report

PB20020480 王润泽

1 Question

研究2维XY模型+一维Ising相互作用体系的相变

2 Background

2.1 Ising模型

Ising模型是统计物理中一个重要的模型，用于描述在不同温度下自发磁化的现象。它由二维晶格上的一组自旋组成，每个自旋取值为+1或-1。自旋与周围自旋的相互作用通过两个参数描述： J 代表正的相互作用，也就是说，两个自旋越相似（两个+1或两个-1），其相互作用越大；其哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

对于一维Ising模型没有相变解，而二维时存在相变。

2.2 二维XY模型

2维XY模型是一个简单的经典统计物理系统，其中二维正方格子上的自旋在连续空间范围内取值。在此模型中，自旋之间存在相邻交互作用，其哈密顿量可以写成以下形式：

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

其中， J 表示耦合常数， θ_i 是位于格点 (i, j) 处的自旋角度。

这个模型存在一个连续的相变，当温度低于某个临界温度时，系统的自旋将具有长程有序性。尽管系统的平均磁化强度为零，但系统可以存在一种亚稳态，自旋的排列形成涡旋。在相变温度以上，涡旋是自由的。在相变温度之下，自旋涡旋是成对出现的，并且对于 $T < T_{KT}$ 的所有温度系统都和 $T = T_{KT}$ 时一样，因此临界点实际上是临界线。XY模型模拟结果如下：

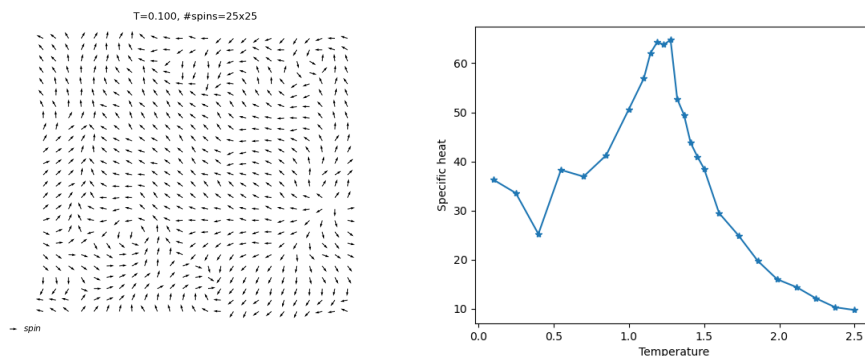


图1 左：稳定下XY模型旋度；右：热容随温度变化曲线

3 Experiment

3.0 实验方法---Monte Carlo 模拟

Monte Carlo模拟的主要过程是Metropolis 演化算法，一共有N个粒子，每个粒子只与相邻的粒子产生相互作用。则以下为算法的基本形式

1. 随机选出一个自旋处于 μ 状态，计算所有和其自旋相关的能量贡献，为 H_μ 。(也就是所有和它相邻自旋交互作用的能量贡献)
2. 随机的改变其自旋状态，变为状态 ν ，再次计算一次所有和它相关的能量贡献，为 H_ν
3. 如果其能量贡献下降，状态改变为 ν 。
4. 如果贡献能量上升，则令自旋有 $\exp -\beta(H_\nu - H_\mu)$ 的概率接受改变。如果接受，状态变为 ν ，否则保持原状为 μ
5. 重复步骤一，直到能量趋于稳定

假设迭代经过n步骤，去掉前面热化的m步，则剩下 $N_E = n - m$ 的状态作为统计量统计，能量E，磁化强度M，热容 C_v ，寻找相变点。

$$\langle E \rangle = \frac{1}{N_E} \sum_{k=1}^{N_E} E_k$$
$$\langle M \rangle = \frac{1}{N_E} \sum_{k=1}^{N_E} (\mu_B \sum_{i=1}^N \sigma_i)$$
$$C = \frac{\Delta E^2}{k_B T^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

3.1 模型一

模型一，主要构建的是如下类型的相互作用体系

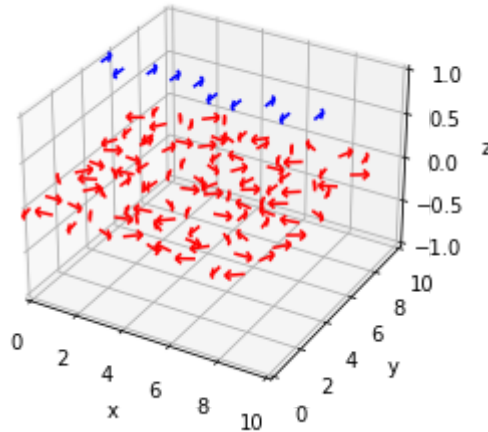


图2 模型一

即一维Ising模型在上方($z=1$)，XY模型在 $z=0$ 的平面上，整个体系产生相互作用。能量表达式为

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - J_2 \sum_{\langle k,l \rangle} \sigma_k \sigma_l - J_3 \sum_{\langle u,v \rangle} \cos \theta_u \sigma_v$$

其中 J_1, J_2, J_3 分别代表XY模型耦合常数, 一维Ising模型耦合常数, XY模型与Ising模型相互作用常数;
 i, j, u 粒子属于XY模型, k, l, v 粒子属于Ising模型; XY模型只与周围4个点有相互作用, Ising模型只与其周围
 两个点有相互作用; 两个模型之间, Ising模型的粒子只与其下方投影点的XY模型粒子起相互作用。

根据上述模型, 设 $\mu_B = 1, J_1 = J_2 = J_3 = 1, k_B = 1$ 得到以下结果

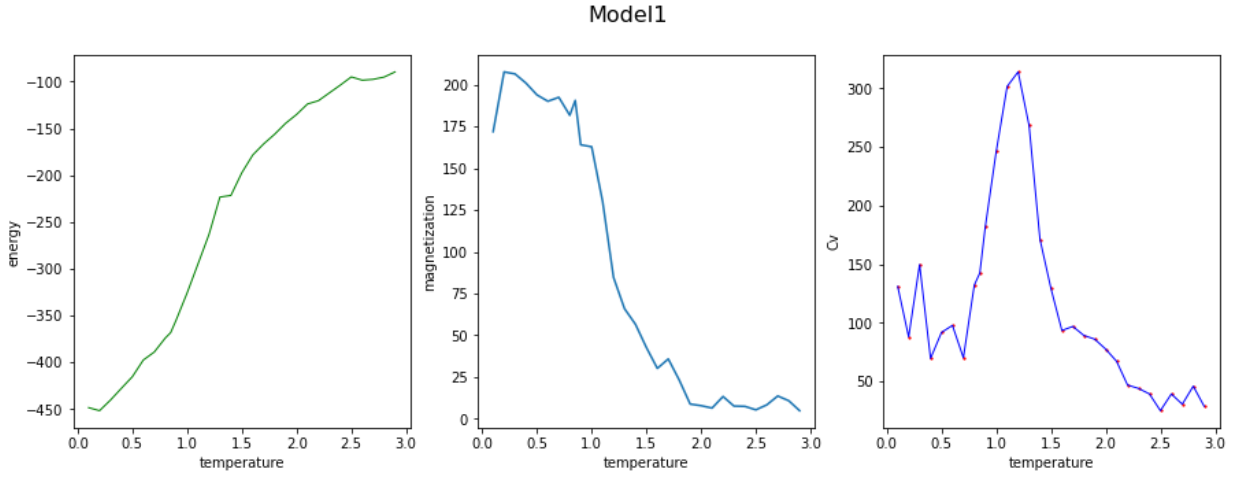


图3: 模型一的能量, 磁场, 热容随温度变化图像

其中比热的临界温度大致在 (1.1, 1.2) 范围内, 这与XY模型的临界温度接近, 可以认为这类模型中XY模型
 由于粒子数众多, 占据了主导作用, 导致最终相变点任然由XY模型决定。

3.2 模型二

模型二, 主要构建的是如下类型的相互作用体系

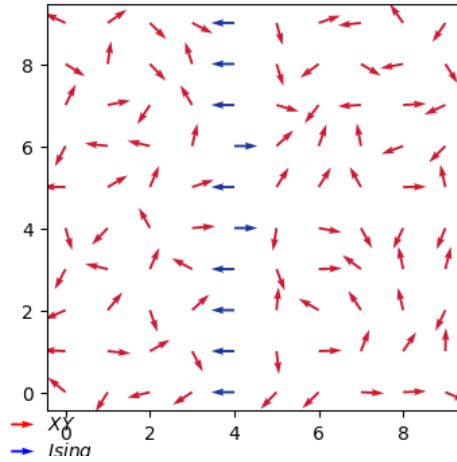


图4: 模型二

即一维Ising模型在 XY模型中轴上, 整个体系产生相互作用, 该模型主要模拟的是XY模型中参入一维Ising
 模型杂质后的表现。能量表达式为

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

其中, $i = width/2$ 处的粒子 $\theta \in \{0, \pi\}$, 其他的地方的粒子 $\theta \in [0, 2\pi)$

根据上述模型得到以下结果

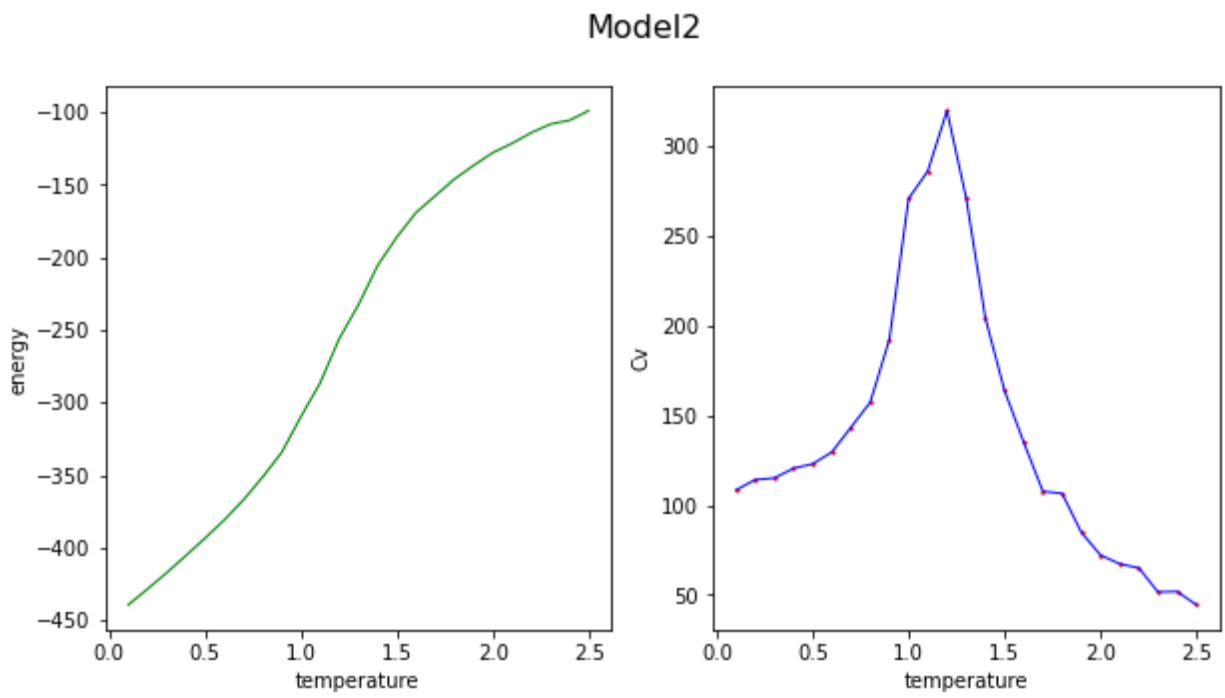


图5：模型二能量,热容随温度变化图像

热容的相变点依然和XY模型一致,但涡旋图像发生改变，如下图:

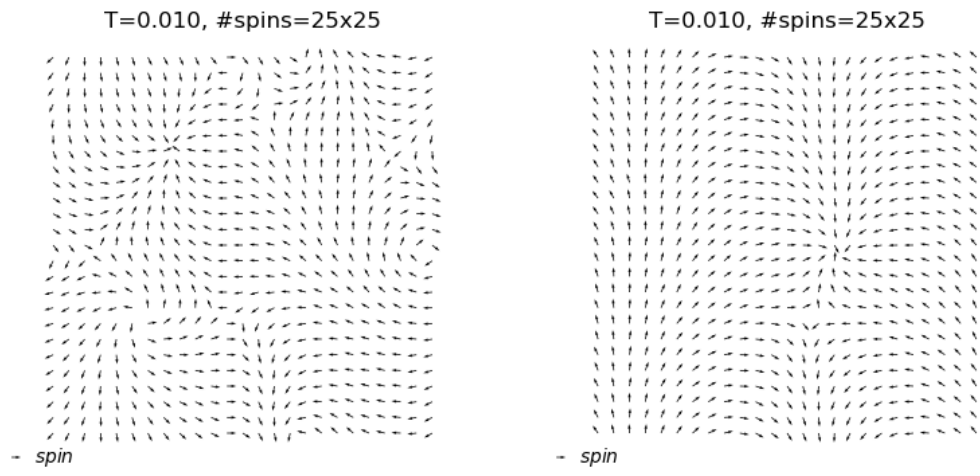


图6：左：模型二极速冷却后旋度图；右：XY模型极速冷却后旋度图

由于XY模型与一维Ising模型的相互作用，在低温下，Ising模型不再只朝一个方向。同时与XY模型在相同温度下对比可以看到，模型二有更多的的涡旋数目。

3.3 模型三

模型三，主要构建的是如下类型的相互作用体系

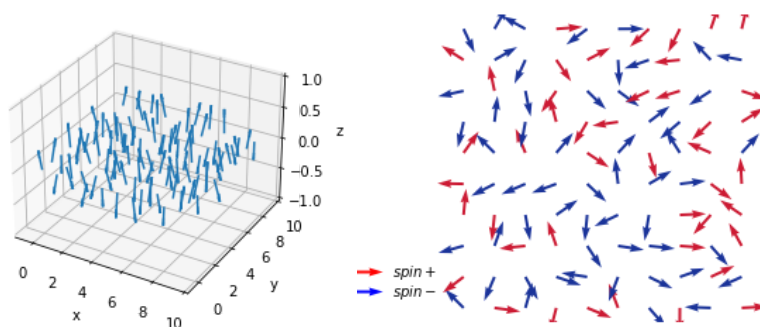


图7 左：模型三的3维图像；右：模型三的2维平面图

该模型是在XY模型的基础上，为平面上的粒子增加了Z轴的维度，使得其不仅可以在平面转动，还可以上下翻转，这更加接近电子自旋的实际状态。在该模型中，粒子自旋方向实际上是跟Z轴呈 $\pi/4$ 或 $3\pi/4$ 的旋转的，二维平面图更加直观描述了该模型的样子。该模型实际上属于是二维Ising模型与XY模型的结合。

体系能量表达式为：

$$H = -\frac{J}{\sqrt{2}} \sum_{\langle i,j \rangle} [\cos(\theta_i - \theta_j) + \sigma_i \sigma_j]$$

根据上述模型得到以下结果：

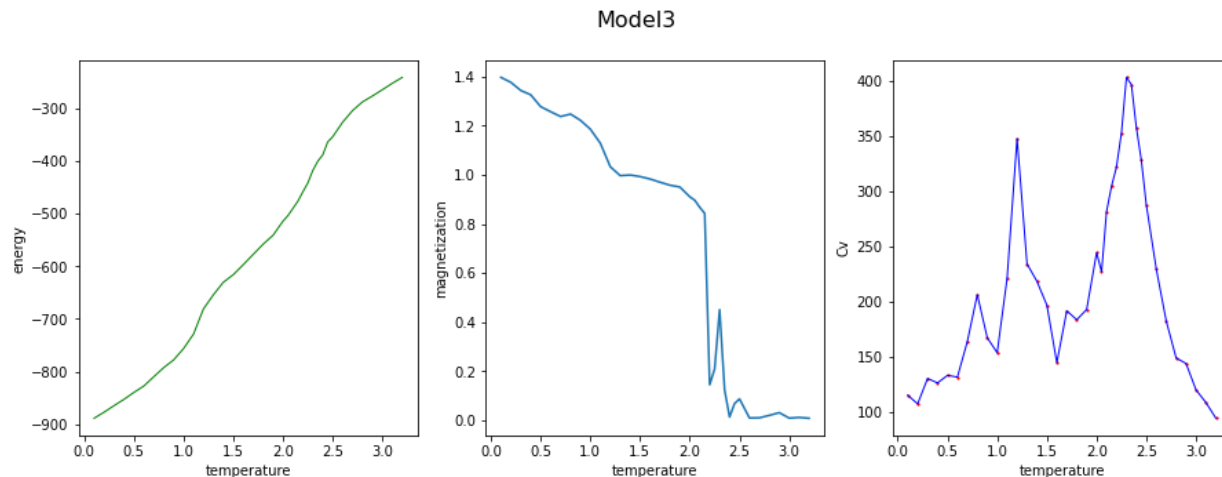


图9：模型三的能量，磁场，热容随温度变化图像

从该热容随温度变化的图像可以看到，存在着两个尖峰，分别是XY模型相变的临界点 T_1 ，和二维Ising模型的临界点 T_2 。从磁场变化看出，在 T_2 临界点处，磁场变化最明显，可以认为是相变的温度。

从旋度图可以对比一下温度变化的过程：

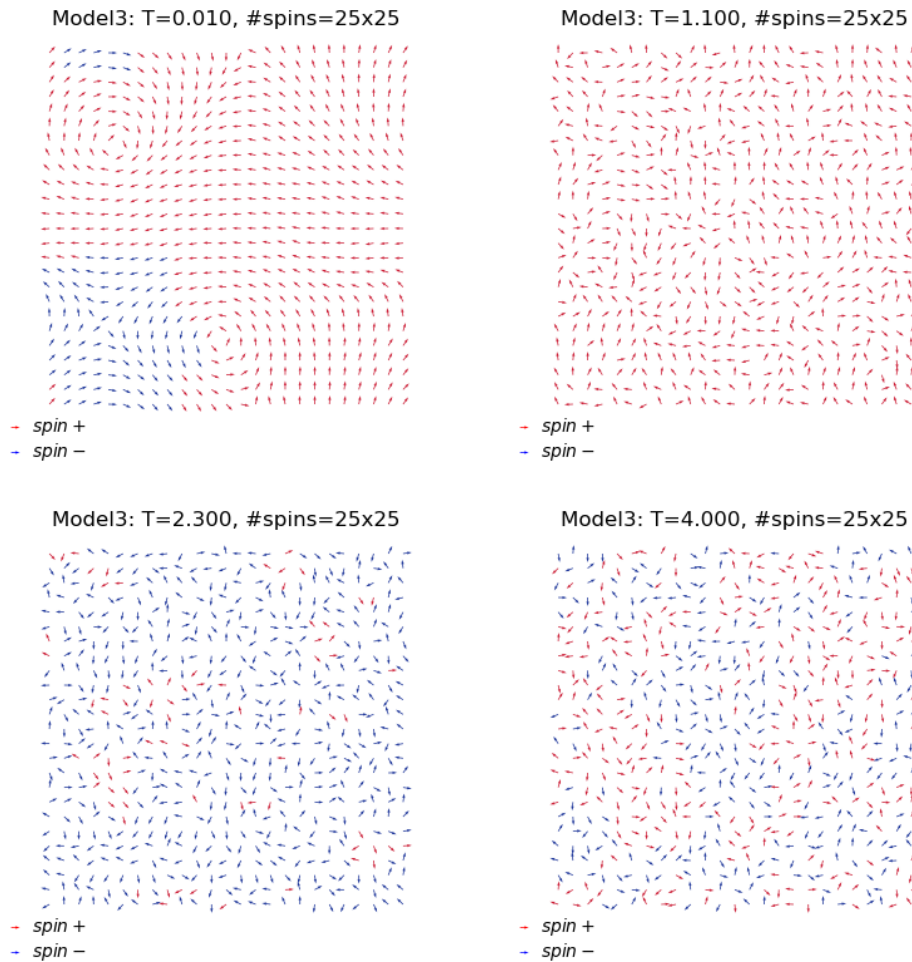


图10 模型三中不同温度下旋度的对比

当温度 $T < T_1$ 时粒子有旋度，局部也会有Z轴翻转；当温度 $T \approx T_1$ 时旋度较多，开始出现混乱，但Z轴方向依然较稳定；当温度 $T \approx T_2$ 时，粒子在XY平面方向上几乎混乱，而Z轴出现相变，开始有大面积翻转现象；当 $T \gg T_2$ 后粒子在Z轴上也表现出混乱状态，整体为随机状态。

4 Summary

本次实验主要是探究XY模型+Ising模型的相互作用体系的相变，由于没有规定模型具体耦合形式，故探究了三种类型的模型。

1. 第一种模型主要是探究二者相互作用，即一个模型激发出磁场对另一个模型产生影响，彼此相互作用最终稳定。从结果可以看到，体系的相变主要还是取决于XY模型的相变，因为其维数更大，占据了主导作用。
2. 第二种模型主要是探究XY模型中参入一维Ising模型杂质后的表现。从结果可以看出参入Ising模型后，在低温下XY模型的涡旋数目明显增多，但比热容达到峰值的位置保持不变。
3. 第三种模型主要是探究XY模型+2维Ising模型相互作用体系，更加真实的模拟电子自旋的物理图像。实验结果展示出，在低温下，由于XY模型的作用，系统局部会发生Z轴翻转的现象；而从磁场变化图像中看到，2维Ising模型对磁场变化起到了相变主导的作用；比热容随温度变化图像有两个尖峰，分别对于着XY模型和2维Ising模型的临界温度。