

二维 XY 模型的 Kosterlitz-Thouless 相变的计算机模拟

July 2, 2017

汪文韬 孙汉林 史鲁川

Abstract

我们对二维 XY 模型的 Kosterlitz-Thouless 相变进行了计算机模拟，模拟了涡旋数密度，空间关联长度和平均磁化强度随时间和温度的演化规律，计算了相变温度，和理论值符合得较好。

1 Kosterlitz-Thouless 相变简介

2016 年，诺贝尔物理学奖颁发给了 D.Thouless, F.Haldane 和 J.Kosterlitz，以表彰他们“在物质的拓扑相变和拓扑相领域的理论性发现¹。”时至今日，拓扑相变与量子霍尔效应，拓扑绝缘体，拓扑超导体，拓扑金属，高温超导等领域关系都十分密切。

Kosterlitz-Thouless 相变与传统连续相变不同，相变过程并不涉及自发对称性破缺。在二维系统中，出现了涡旋这一拓扑结构。低温状态下，涡旋和反涡旋成对存在，随着温度升高，束缚态涡旋逐渐分离成为自由涡旋。这一相变过程不涉及对称性破缺。这是 KT 相变与传统相变的最大区别。

Mermin-Wagner 定理已经证明，二维的有限温体系不能发生连续对称性自发破缺。但是实验中已经观察到二维超流相变。因此需要一种新的相变理论来解释这种现象。Berezinskii, Kosterlitz 和 Thouless 提出了 BKT 相变理论，提出了涡旋-反涡旋束缚态转变为自由涡旋状态的相变机制。这一机制并不存在连续自发对称性破缺，因此并不违反 Mermin-Wagner 定理。

2 XY 模型

XY 模型与 Ising 模型类似，是用于描述物质铁磁性的模型。XY 模型中包含了用来描述单个原子磁矩的参数 σ_i ，而且模型中会引入特定交互作用的参数，使得相邻的自旋能够相互影响。但是与 Ising 模型不同， σ_i 的值可以取 $[0, 2\pi)$ 内的任意值，即代表原子的自旋方向可以取二维空间内的任意方向。XY 模型的表达式如下：

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \sum_j h_j \vec{s}_j = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \cos(\theta_i - \theta_j) - \sum_j h_j \vec{s}_j \quad (1)$$

其中 H 表示系统的哈密顿量， J_{ij} 表示近邻自旋交换作用能， $\sum_j h_j \vec{s}_j$ 表示外场作用。沿着涡旋中心顺时针转动一圈，涡旋中的自旋方向沿顺时针方向转动，而反涡旋沿逆时针方向转动。在 BKT 相变中，涡旋和反涡旋组成一个束缚态的涡旋-反涡旋对，当温度升高时，涡旋对分开，形成自由状态涡旋，系统的拓扑结构发生变化。

¹<https://zh.wikipedia.org/wiki/诺贝尔物理学奖得主列表>

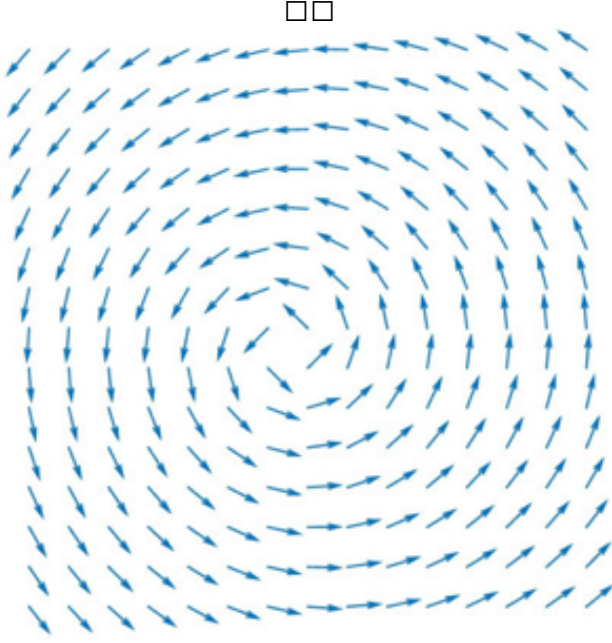


Figure 1: 涡旋

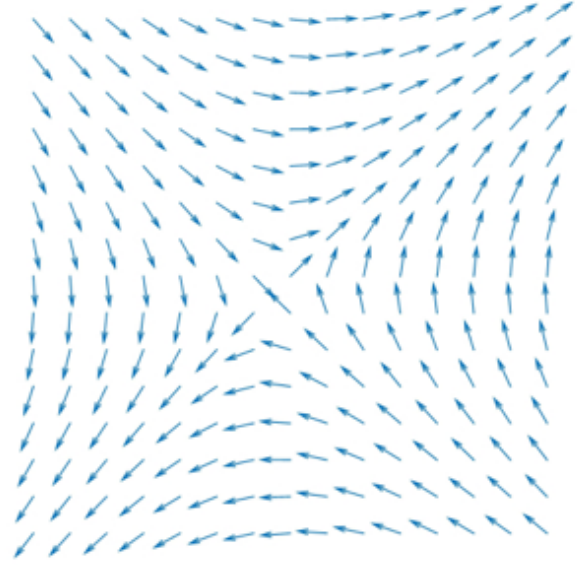


Figure 2: 反涡旋

3 数值模拟

3.1 计算机模拟的模型

建立一个 $L * L$ 的矩阵，矩阵内每一个量取值为 $[0, 2\pi)$ ，代表单位自旋的方向与选取的轴之间的夹角。如果是有序初态，就令系统所有自旋的初值为 0。如果是无序初态，就对每一个自旋引入 $[0, 2\pi)$ 之间的随机变量。在时间 $\Delta t = \frac{1}{L^2}$ 时引入 $[0, 2\pi)$ 之间的随机数改变任意一个粒子的自旋方向，其它粒子的自旋不变，使系统变动到新的组态。计算自旋方向改变之后系统的能量变化 H ，假设系统符合玻尔兹曼分布。引入 $[0, 1]$ 之间的随机数 P 和变化的概率 $e^{-\Delta H/KT}$ 相比较来决定是否允许这个改变。其中 K 是玻尔兹曼常数， T 是系统的温度（以 J 为单位）。如果 $P \leq e^{-\Delta H/KT}$ ，则系统接受组态的改变。如果 $P > e^{-\Delta H/KT}$ ，则系统回到改变前的状态。不断重复以上过程，系统就随时间 t 演化。每 L^2 次改变称为一个蒙特卡洛时间步，即 $\Delta t = 1$ 。²

* 边界条件

为了减弱有限系统对模拟的影响，采用周期性边界条件：在矩阵外再增加一层。第 $L+1$ 行、 $L+1$ 列的值与第 1 行、第 1 列相同，第 0 行、第 0 列的值与第 L 行、第 L 列的值相同。统计时只统计第一行到第 L 行。

3.2 涡旋数密度

二维 XY 模型的 KT 相变是系统在低温下产生涡旋与反涡旋的相变，模拟系统的涡旋数密度有重要的意义。涡旋数密度的定义式是 $n_v(t) = \langle |\sum \frac{\theta_i(t) - \theta_j(t)}{2\pi}| \rangle$ （考虑角度的周期性，取值范围为 $[-\pi, \pi]$ ），如果大于 π ，则减去 2π ，如果其小于 $-\pi$ ，则加上 2π 。求和对格点周围顺时针方向的四个连接进行，为了统计涡旋与反涡旋的总数值，需要加上绝对值。 $\langle \dots \rangle$ 表示对整个系统的格点求平均，也表示对所有样本求平均。经过足够长的时间，系统各态历经，系统达到系统中可能的所有状态，从而时间平均与系综平均等价，得到涡旋数密度的稳定值。涡旋数密度的标度形式为 $\langle n_v(t) \rangle \sim \xi(t)^{d-\eta}$ 其中 $d = 2$ ，表示系统的维数。

²具体的模拟方法，我们重复了前人做的一部分工作 [1][2]，并在此基础上增加了对空间关联长度的模拟。

3.2.1 计算方式

从有序初态和无序初态出发，分别对 100×100 的系统进行了 5000 次模拟，计每 10000 次为一步，每 5 步将之前所有的系统的涡旋数密度相加对系统变动的总次数求平均，求得系统至时间 t 为止的涡旋数密度的平均值。

3.2.2 模拟结果

对于有序初态和无序初态的模拟结果如下：

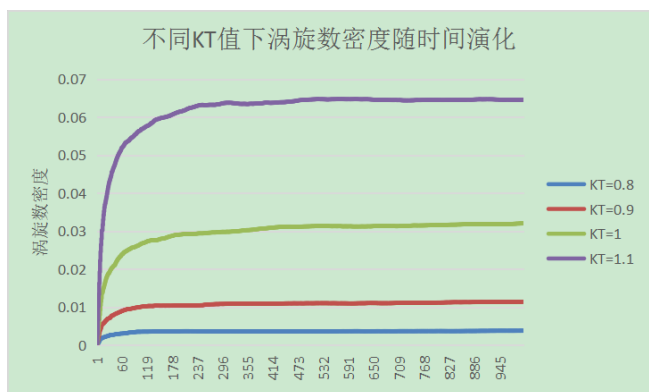


Figure 3: 有序初态涡旋数随时间的演化

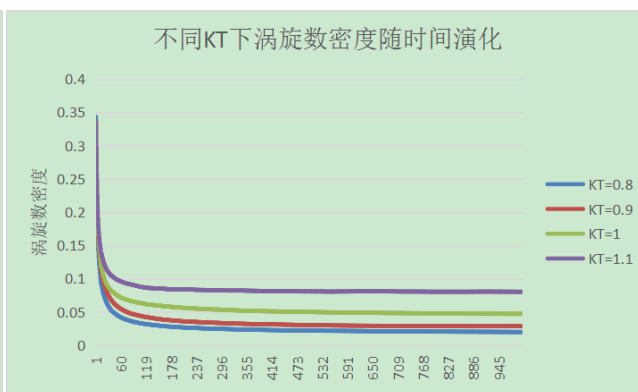


Figure 4: 无序初态涡旋数随时间的演化

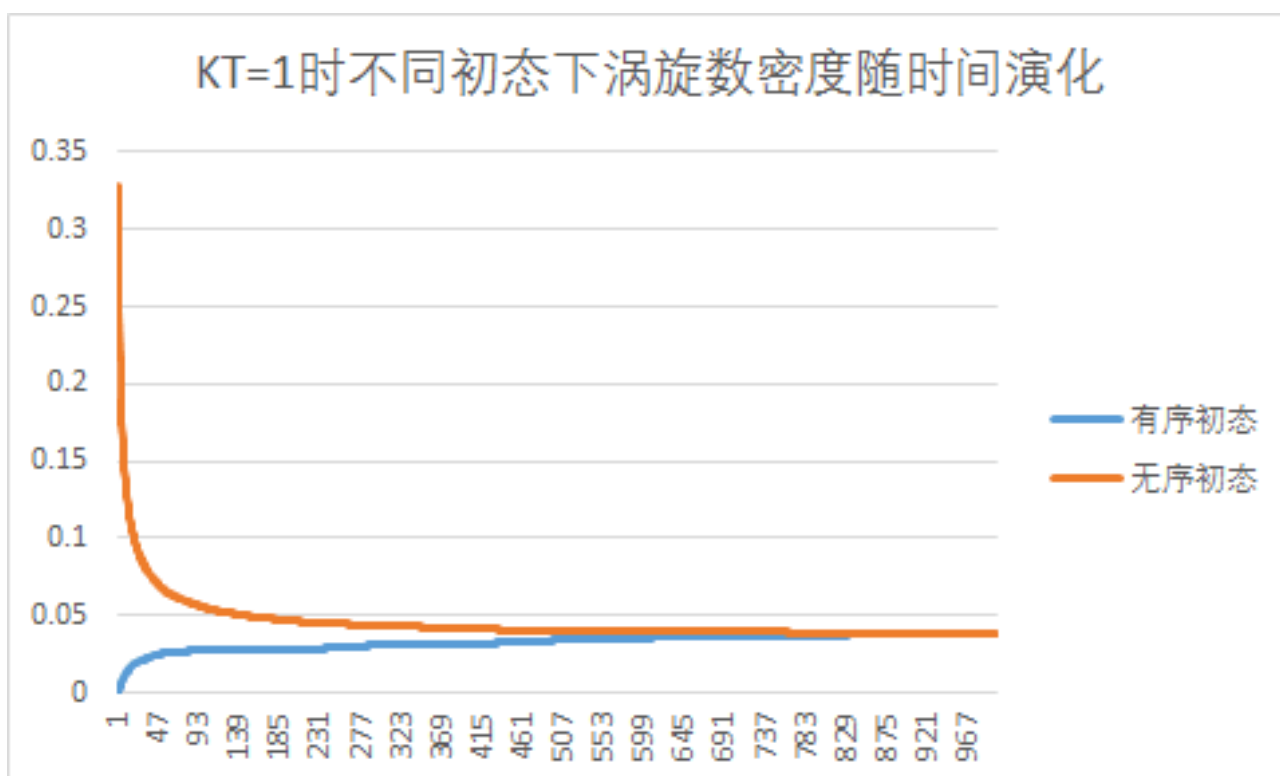


Figure 5: 涡旋数密度随时间演化

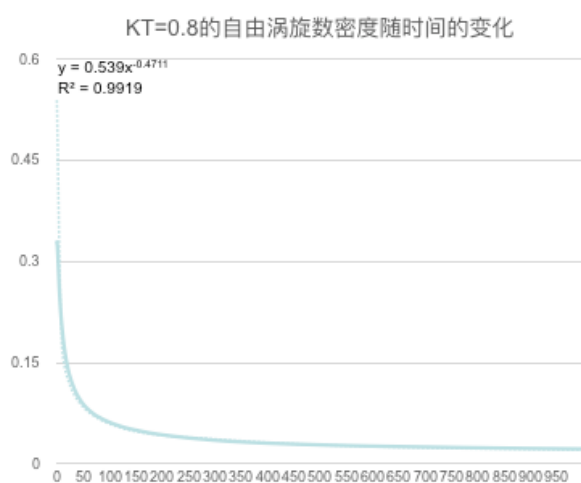


Figure 6: 自由涡旋数密度随时间演化 $KT = 0.8$

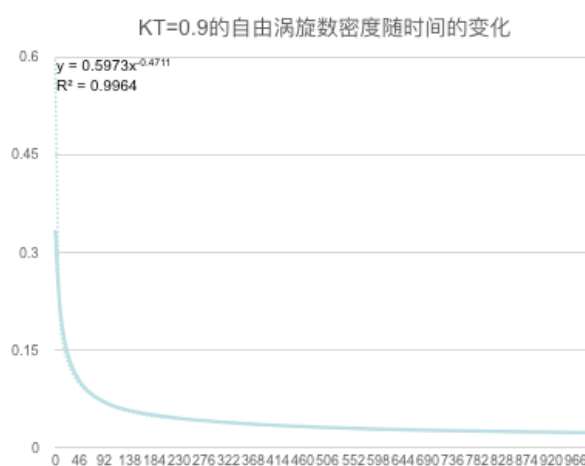


Figure 7: 自由涡旋数密度随时间演化 $KT = 0.9$

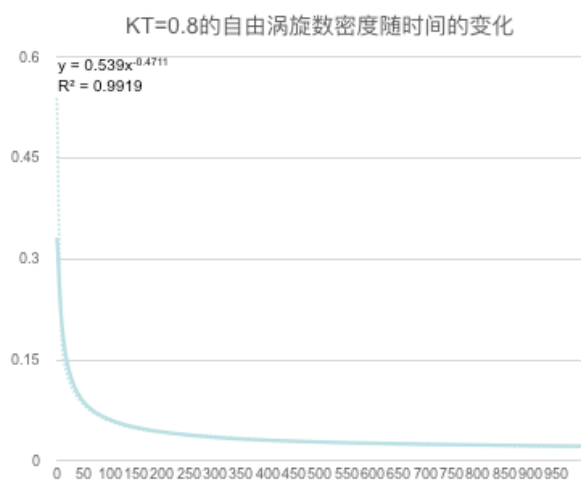


Figure 8: 自由涡旋数密度随时间演化 $KT = 1.0$

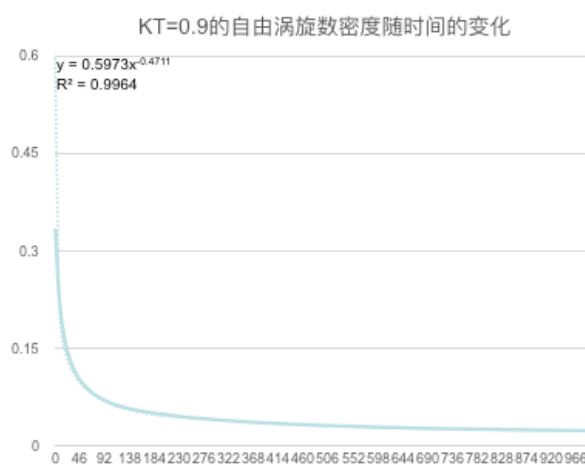


Figure 9: 自由涡旋数密度随时间演化 $KT = 1.1$

3.2.3 结论

从有序初态出发和无序初态出发都能达到一个稳定值，这个稳定值是相同的，并且随温度的上升而增大。这反应了随温度上升，系统的涡旋数密度逐渐增大。但是从有序初态出发，系统能在很短的时间内达到稳定状态，从无序初态出发，系统达到稳定状态的时间很长。从有序初态和无序初态出发随时间变化的曲线并不能很好的用函数模拟，但是采用无序初态的曲线减去有序初态的曲线得到的自由涡旋数密度随时间变化的曲线符合很好的幂律衰减的规律。从理论上讲，从有序初态开始时，系统内涡旋数密度为 0，因此产生的涡旋都是束缚态涡旋对；从无序初态开始时，涡旋是自由涡旋，随着时间增加，涡旋与反涡旋结合湮灭，涡旋数密度降低。两条曲线相减就是系统的自由涡旋数密度。温度越高，热运动越明显，涡旋湮灭速度快，幂指数越小。

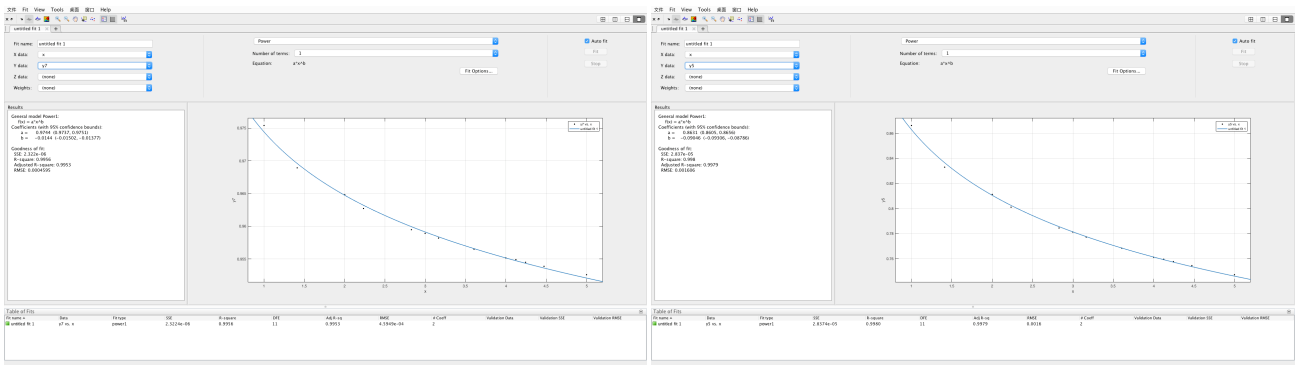
3.3 空间关联长度

两个位点 m 、 n 之间自旋的空间关联函数为 $\langle \vec{S}_m \cdot \vec{S}_n \rangle = \langle \cos(\theta_m - \theta_n) \rangle$ ， S_m 、 S_n 指的是 m 、 n 点的自旋。二维 XY 模型中自旋都是单位自旋，因此可以直接用 m 、 n 处自旋的角度来表示。理论上指出在低温下两点的自旋空间关联函数随距离幂律衰减，且这个幂指数不是普适常数，而是随温度连续变化。它们的关系式为。通常把这种低温下关联函数呈幂律衰减，但又没有长程序的相称为具有准长程序的相。在 $< T_c$ 时系统处于自旋波态，有遵从幂律的准长程序。通过对空间关联函数的模拟，拟合出两点关联函数与空间距离 r 的关系，能确定相变的温度。当两点间空间关联函数与幂指数模拟符合的很好但不能符合指数模拟时，系统有准长程序，表明系统温度在 T_c 以下。通过不断提高温度，找到相变温度 T_c 。

3.3.1 计算方式

由于模拟的步数是有限的，对于两个固定的点 M 、 N ，无法确定它们各态历经，因此很难取得各态历经的稳定值。因此选择对点阵中所有距离为 r 的点之间的关联函数数值进行统计。从有序初态（即初始自旋朝向同一个方向）出发，对 $100 * 100$ 的系统进行了 5000 次模拟，计每 10000 次为一步，每 5 步将之前所有的距离为 r 的点之间的空间关联函数值相加对系统变动的总次数求平均，求得系统至时间 t 为止的空间关联函数的平均值。

3.3.2 模拟结果



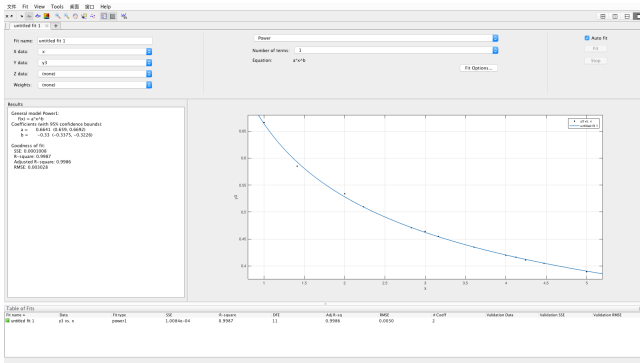


Figure 12: 幂函数拟合 $KT = 1, R^2 = 0.9986$

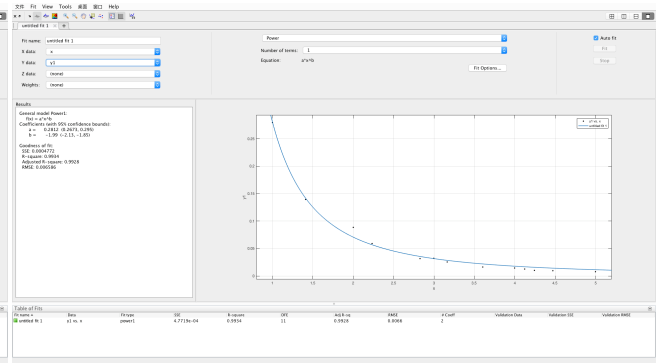


Figure 13: 幂函数拟合 $KT = 2, R^2 = 0.9928$

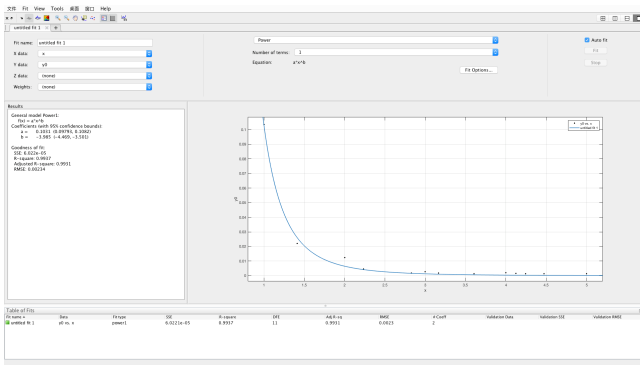


Figure 14: 幂函数拟合 $KT = 5, R^2 = 0.9931$

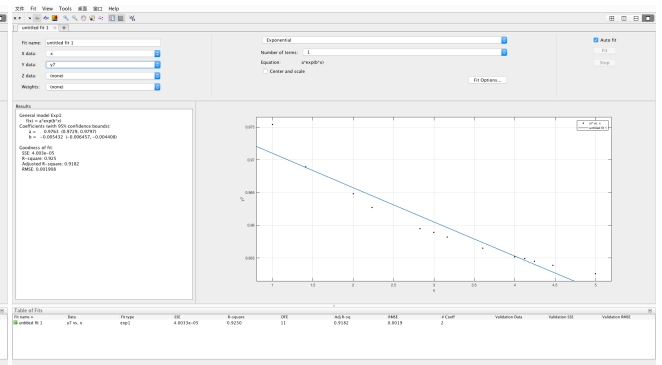


Figure 15: 指数函数拟合 $KT = 0.1, R^2 = 0.9182$

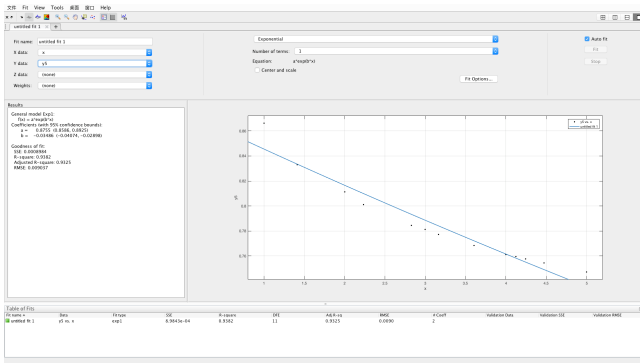


Figure 16: 指数函数拟合 $KT = 0.5, R^2 = 0.9325$

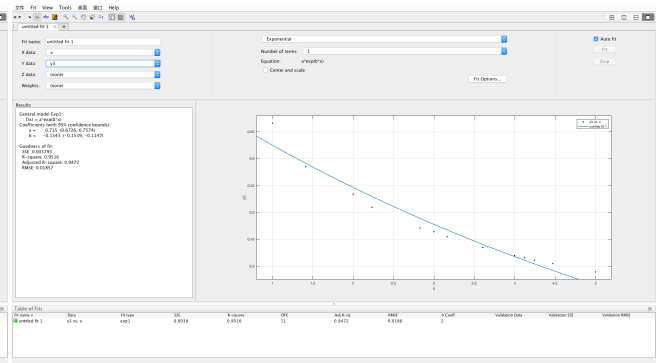


Figure 17: 指数函数拟合 $KT = 1, R^2 = 0.9472$

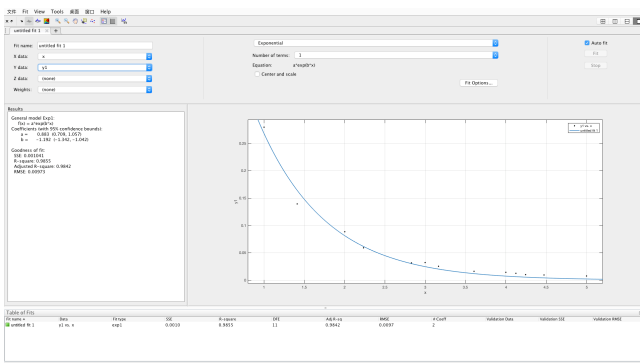


Figure 18: 指数函数拟合 $KT = 2, R^2 = 0.9842$

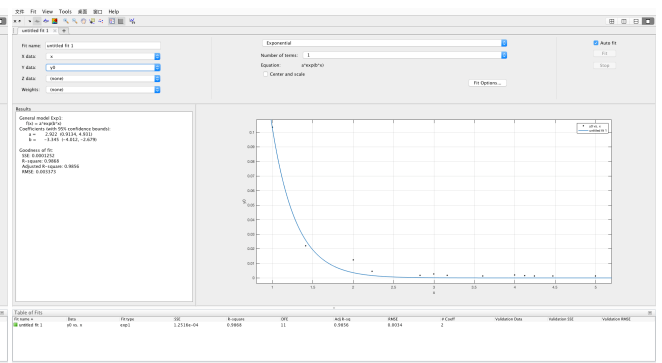


Figure 19: 指数函数拟合 $KT = 5, R^2 = 0.9856$

3.3.3 结论

系统的空间关联函数在低温时符合幂律分布，在高温时符合指数分布，和 $\langle \vec{S}_m \cdot \vec{S}_n \rangle \sim r^{-\frac{1}{2\pi\beta J}}$ 符合得很好。

3.4 平均磁化强度

平均磁化强度的定义式是 $M_x = M \cos \alpha = \frac{1}{N} \sum S_n$ 。这里的 N 指的是格点的数目，对于 $L \times L$ 的矩阵， $N = L \times L$ 。 S 指的是系统的自旋， S_x 是自旋在 X 方向上的投影。相变的序参量就是平均磁化强度。在系统发生临界现象时，系统发生自发对称性破缺。温度低于某个临界温度 T_c 时，系统处于铁磁相（低对称性）， $\langle M_x \rangle$ 不等于 0，而当 $T > T_c$ 时，热运动使自旋无序取向，系统处于顺磁态（高对称性），此时的 $\langle M_x \rangle = 0$ 。通过对系统平衡态的序参量 $\langle M_x \rangle$ 的测量，可以确定系统发生相变的温度 T_c 。在 KT 相变温度以下的区域，序参数满足幂次律标度行为， $M(t) \sim \xi(t)^{-\frac{z}{2}}$ ， $\xi(t)$ 是空间关联长度， t 是蒙特卡洛时间步， ξ 是静态临界指数，与系统的温度有关。 $\xi(t)$ 一般具有幂次标度行为， $\xi(t) \sim t^{\frac{1}{z}}$ ，对于二维 XY 模型， $z = 2$ 。

3.4.1 计算方式

从有序初态（即初始自旋朝向同一个方向）出发，对 100×100 的系统进行了 5000 次模拟，计每 10000 次为一步，每 5 步将这一段时间的平均磁化强度加起来对这段时间系统变动的次数求平均，求得一段时间中系统的平均磁化强度。通过升高系统的温度，找到系统的序参量 M 从低对称性到高对称性的转变温度 T_c 。

3.4.2 模拟结果

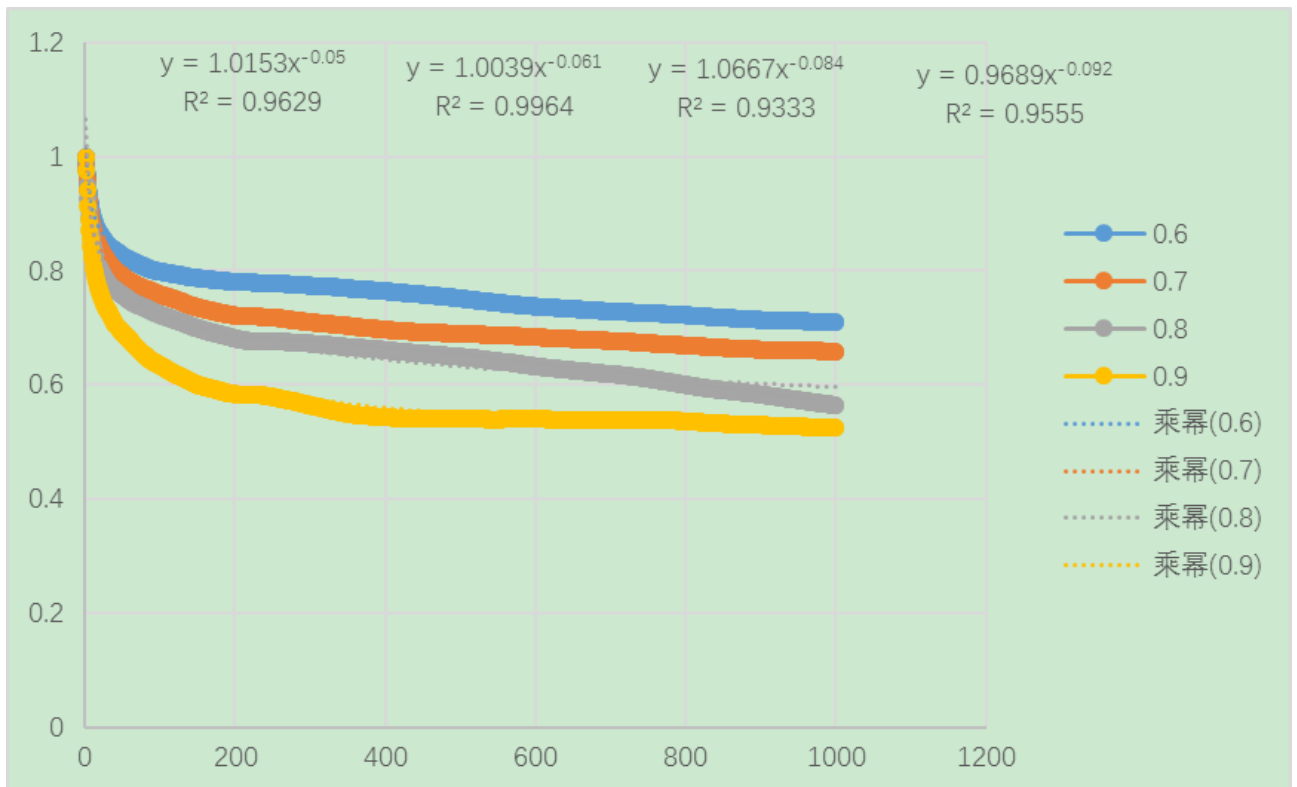


Figure 20: 平均磁化强度和温度、演化时间的关系



Figure 21: 平均磁化强度随时间的变化关系 $KT=1.03$

* 我们在此处改变了统计方式。若仍对全局统计，理论上需要演化无穷长时间才能达到稳定。由于计算机模拟的限制，我们将全局统计改成了分段统计，以便更快达到零点。

3.4.3 结论

相变的温度大约是 $T_c = 1.03$ ；通常认为 KT 相变温度为 $T_c = 0.89(J)$ 。通过平均磁化强度模拟获得相变温度与 KT 相变温度的时间有差异，一是因为系统是有限的，没有达到热力学极限。二是因为计算资源的限制，在更低的温度下需要更长的时间才能达到平衡。通过对图像进行函数拟合，发现平均磁化强度随时间的变化满足幂次律关系。

4 结语

应用蒙特卡洛方法，对二维 XY 系统的涡旋数密度，空间关联长度，平均磁化强度进行了模拟。采用无序初态的曲线减去有序初态的曲线得到的自由涡旋数密度随时间变化的曲线符合很好的幂律衰减的规律，和理论预测的自由涡旋数随时间变化曲线相符；对于空间关联长度的模拟结果显示，低温下关联长度符合幂律衰减，高温时符合指数衰减，这和理论预测完全相符；估计出了 Kosterlitz-Thouless 相变点，和理论值相差不多。

5 参考文献

- [1] 刘策军, 陈代森. 外磁场中二维 XY 模型的动力学相变 [J]. 暨南大学学报 (自然科学与医学版), 1998, (03): 25-28.
- [2] 钦小平, 阮世平. XY 模型中涡旋数密度的 Monte Carlo 模拟 [J]. 浙江科技学院学报, 2012, (04): 283-286.
- [3] Jensen H J. The Kosterlitz-Thouless Transition [J]. Lecture notes on Kosterlitz-Thouless transition in the XY model, Imperial College, 2003.