

三维伊辛模型的蒙特卡罗模拟

吴洋, 段海明

(新疆大学物理科学与技术学院, 乌鲁木齐 830046)

摘要: 本文采用蒙特卡罗方法模拟三维晶格系统伊辛模型。它是一种计算机模拟的方法, 采用随机抽样, 能够比较逼真地描述真实物理实验过程, 精确性好。在不同温度下, 分别模拟了具有简立方晶格、体心立方晶格及面心立方晶格相互作用的三维伊辛模型, 从而通过编程所得数据绘图分析三种格点的临界态及其它物理量的变化性质。模拟结果表明: 在高温下, 系统磁性消失; 在低温下, 系统具有磁性, 并存在一个临界状态。同时研究了三种晶格的磁化率、能量及比热随温度的变化趋势, 分析了产生这种趋势现象的物理原因, 并同国外三维伊辛模型的不同格点研究结果进行对比, 在误差范围内, 是完全一致的。

关键词: 凝聚态物理学; 三维伊辛模型; 蒙特卡罗方法; 临界态

中图分类号: 0552.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-2850(2008)08-0805-5

Monte Carlo simulation of 3-D Ising model

WU Yang, DUAN Haiming

(School of Physics Science and Technology, Xinjiang University, Urumqi 830046)

Abstract: In this article, 3-D Ising model is simulated by the means of Monte Carlo, such as the simple cubic lattice, the body-centered cubic lattice and the face-centered cubic lattice. It is a computer simulation method, using random sampling, to compare realistic description of the real physics experiment with good accuracy, and draw analysis of the three critical state and other physical changes in nature by programming data. The result suggests that under high temperature, the magnetic of the systems disappears, and at low temperature, it is magnetic, with a transition. The paper also studied the susceptibility, energy and heat capacity as a function of the temperature of the three lattice models. The three-dimensional Ising model is contrasted with abroad results, and it is entirely consistent with the margin of error.

Key words: condensed matter physics; three-dimensional Ising model; Monte Carlo method; transition

0 引言

伊辛模型是一个简单却很重要的物理模型^[1~5], 伊辛在1925年解出的精确解表明一维伊辛模型中没有相变发生。二维伊辛模型^[6~10]的临界问题及精确解在上世纪40年代由昂萨格严格求出。人们采用了分子场及其改进理论、高温级数展开、低温级数展开、重整化群理论等多种方法计算三维伊辛模型^[11~16]的解, 但至今还没有计算出被学术界公认的三维伊辛模型的精确解。本文通过蒙特卡罗方法模拟得到了三维伊辛模型的近似解。

1 模型分析与计算

1.1 模型格点选取

本文为了研究三维伊辛模型的解, 选取三维格点。首先选取最简单的简立方格点, 因为它具有典型性和代表性。它直接由二维平面4个最近邻延伸到三维空间6个最近邻。然后, 再推广到体心立方

作者简介: 吴洋 (1985-), 男, 本科, 主要研究方向: 计算物理

通信联系人: 段海明, 教授, 主要研究方向: 计算物理, E-mail: dhm@xju.edu.cn

晶格和面心立方晶格，只是最近邻点数目增加，处理问题的方法是相同的。

1.2 模型边界条件分析

选取周期性边界条件，考虑到计算机的运算能力有限，所研究模型的大小也应是有限的。但又要模拟无限大的空间系统，所以只有将边界条件取为周期性，才能很好地解决这个问题。无论是对简立方格点、体心立方格点还是面心立方格点，只要是处于边界的格点，就可以通过周期边界条件进行延伸，从而保证每个格点周围的最近邻格点数是一致的。使用周期性边界条件，通常还可以减少来自边界的干扰。

1.3 反转概率函数选取

采用蒙特卡罗模拟方法研究三维伊辛模型，反转概率的选取是很关键的一步。假设一个自旋反转使系统的能量降低，由于总是想要处于或靠近模型的基态，应当以概率为1接受这一变动。因此，在能量变化为负的情形下，取跃迁概率为1。但是这样一来，就陷入能量极小之中。为了避免发生这种情况，要接受能量增加的变动。不过只允许能量增加的变动很少发生，因此它们的反转概率很低。可以将反转概率和 $[0, 1]$ 之间的随机数比较，确定是否反转。

1.4 具体计算步骤

1) 先选定格点规格 $L \times L \times L$ ，对温度（即 J/KT ）赋初值。任选一个自旋点阵排列为起始状态，由每一格点及其邻近自旋情况，可得反转的概率。当格点为点阵边缘的格点时，可采取周期性边界条件确定格点的近邻；

2) 由 $[0, 1]$ 均匀分布产生一个随机数，与所求的概率值比较，判断是否接受反转；

3) 按上面的方法确定点阵上所有格点的自旋指向，即完成一个蒙特卡罗步（MCS）；

4) 演化足够的MCS，使系统达到平衡状态，以后每隔若干MCS抽取一格状态为样本，计算样本的每格点磁化强度 M ，收集足够的样本，求平均每格点的磁化强度 $\langle M \rangle$ ；

5) 将 J/KT 值加上一增量作为新的 J/KT 值，重复以上步骤，即可得到 $\langle M \rangle$ 随 J/KT 值的变化关系，同样可得到能量、磁化率、比热随 J/KT 的变化关系。

2 数据结果及分析

2.1 数据绘图

按上述算法编程，即可进行模拟计算，模拟数据结果如图1~图6所示。

2.1.1 简立方格点

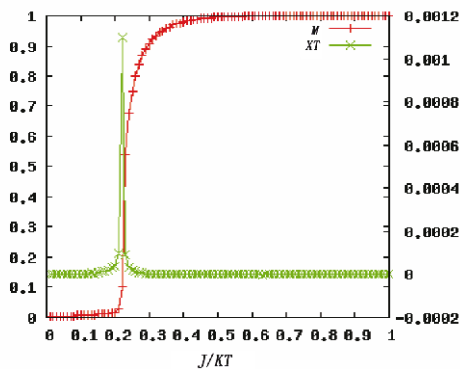


图1 磁距、磁化率随温度变化
Fig.1 The magnetic and the susceptibility as a function of the temperature

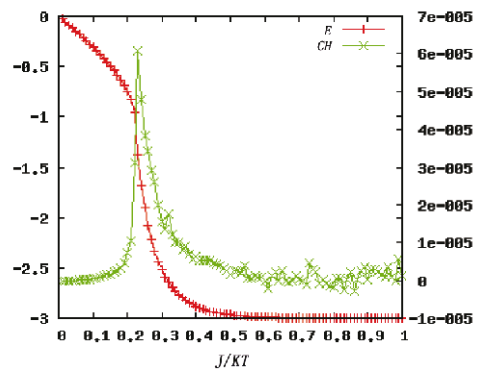


图2 能量、比热随温度变化
Fig.2 The energy and the heat capacity as a function of the temperature

2.1.2 体心立方格点

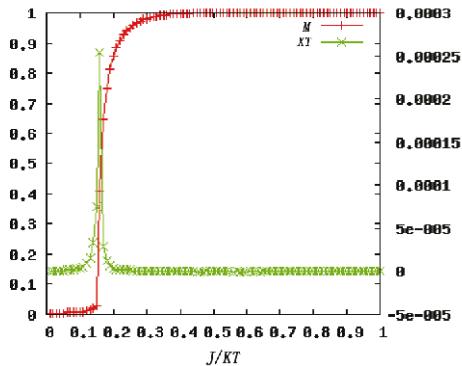


图 3 磁距、磁化率随温度变化
Fig. 3 The magnetic and the susceptibility as a function of the temperature

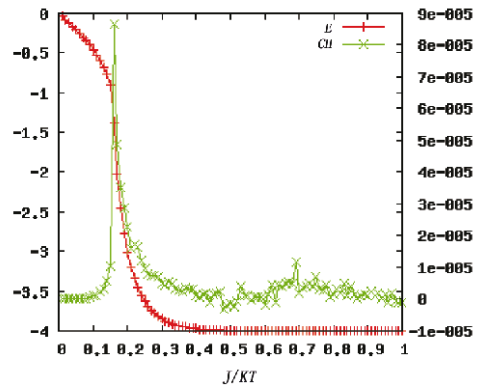


图 4 能量、比热随温度变化
Fig. 4 The energy and the heat capacity as a function of the temperature

2.1.3 面心立方格点

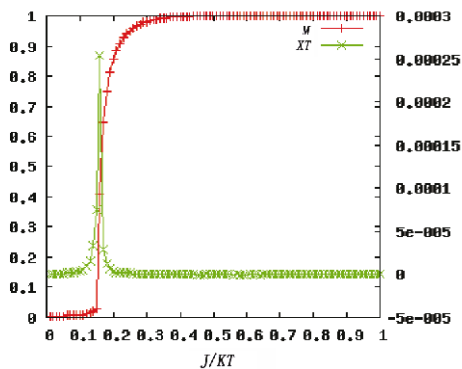


图 5 磁距、磁化率随温度变化
Fig. 5 The magnetic and the susceptibility as a function of the temperature

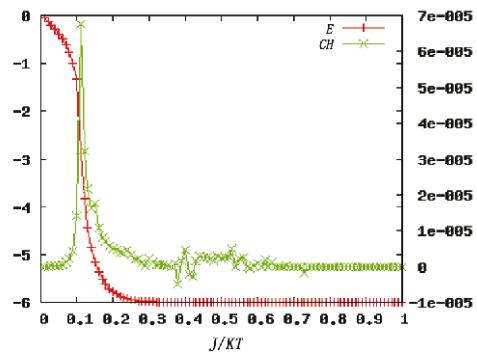


图 6 能量、比热随温度变化
Fig. 6 The energy and the heat capacity as a function of the temperature

2.2 结果分析

图 1~图 6 分别表示简立方格子、体心立方格子及面心立方格子的每个格点平均磁距 (M) 和磁化率 (XT) 随温度 (J/KT) 的变化关系以及能量 (E) 和比热 (CH) 随温度 (J/KT) 的变化关系。

从图中可以得到,对于三种不同的格子,随着温度减小(相对应图中 J/KT 值的增大),有着共同的顺磁态向铁磁态转变的规律,并且磁距对应的磁化率和能量对应的比热在突变处出现尖峰,与热力学公式相符。但是,不同的是后两种格子相对简立方格子临界值向高温方向偏移。在二维情形中,平均场结果: $J/KT=1/Zd$ (Zd 为格点最近邻配位数)。假设在三维情形中该结论仍成立,考虑到简立方格点的配位数较小,其 J/KT 的临界值较高。

3 结论

本文通过蒙特卡罗方法模拟三维格点伊辛模型,通过数据结果分别得出简立方格子、体心立方格子和面心立方格子顺磁态向铁磁态转变临界值 J/KT 分别为: 0.22、0.16、0.10。与文献[15]~[16]中简立方格点结果 $J/KT=0.22165$ 以及文献[14]中面心立方格点结果 $J/KT=0.102$ 比较,在本文所研究的精度范围内(精确到小数点后两位数字)是完全一致的。可以将 J/KT 做更精确地循环以得出

更精确的结果。本文的研究结果可以为以后进一步探讨三维伊辛模型的精确解提供一定的参考依据。

致谢

本论文完成过程中,得到了段海明教授的悉心指导,使得本文最终获校级优秀毕业论文。论文后续修改时又得到了段老师的多次帮助,在此表示衷心感谢!

[参考文献] (References)

- [1] 吴国均, 胡经国. Ising 模型的 Monte Carlo 模拟[J]. 吉首大学学报 (自然科学版), 2000, 21 (2): 3~4.
WU G J, HU J G. Ising model of Monte Carlo simulation[J]. Journal of Jishou University(Natural Sciences Edition), 2000, 21(2): 3~4. (in Chinese)
- [2] 刘策军, 严尚维, 宋钢, 等. $S = 1$ 伊辛模型临界温度 METROPOLIS 动力学标度计算[J]. 华南农业大学学报, 1996, 17 (4): 114~117.
LIU C J, YAN S W, SONG G, et al. $S = 1$ Ising model critical temperature METROPOLIS dynamics scale computing[J]. Journal of the South China Agricultural University, 1996, 17(4): 114~117. (in Chinese)
- [3] 陶玉荣, 胡经国. 晶格 Ising 模型动力学模拟[J]. 徐州师范大学学报 (自然科学版), 2001, 19 (2): 35~39.
TAO Y R, HU J G. Lattice Ising model dynamics simulation[J]. Journal of Xuzhou Normal University(Natural Science Edition), 2001, 19(2): 35~39. (in Chinese)
- [4] 黄东, 翁永刚. 一种具有铁磁反铁磁相互作用 Ising 模型的热力学研究[J]. 物理学报, 1994, 43 (7): 1172~1176.
HUANG D, WENG Y G. Thermodynamics behavior of the Ising model with ferromagnetic and antiferromagnetic interactions[J]. Acta Physica Sinica, 1994, 43(7): 1172~1176. (in Chinese)
- [5] 张翠萍, 辛子华. 三亚点阵 Ising 模型相图[J]. 沈阳师范学院学报 (自然科学版), 2001, 19 (3): 35~38.
ZHANG C P, XIN Z H. Three-dimensional lattice Ising model phase diagram[J]. Journal of the Shenyang Normal University(Natural Science Edition), 2001, 19(3): 35~38. (in Chinese)
- [6] 张祥, 陈冬保, 陈武鸣. 二维伊辛模型蒙特卡罗模拟[J]. 南京大学学报, 1997, 33 (1): 137~138.
ZHANG X, CHEN D B, CHEN W M. The Monte Carlo simulation model two-dimensional[J]. Journal of Nanjing University, 1997, 33(1): 137~138. (in Chinese)
- [7] 林旭升. 二维伊辛模型相变临界点温度的模拟计算[J]. 大学物理, 2000, 19 (5): 13~15.
LIN X S. Two-dimensional Ising model of the phase transition temperature of the critical point simulation[J]. College Physics, 2000, 19(5): 13~15. (in Chinese)
- [8] 刘策军, 郑有因. 二维伊辛模型自旋状态图样的蒙特卡罗模拟[J]. 华南农业大学学报, 1995, 16 (4): 103~104.
LIU C J, ZHENG Y Y. Two-dimensional Ising model of the design of the spin state of Monte Carlo simulation[J]. Journal of the South China Agricultural University, 1995, 16(4): 103~104. (in Chinese)
- [9] 孙前芳. 二维伊辛模型附近临界指数的计算机模拟[J]. 科学技术与工程, 2005, 5 (17): 1237~1239.
SUN Q F. Ising, two-dimensional model near the critical index of computer simulation[J]. Science Technology and Engineering, 2005, 5(17): 1237~1239. (in Chinese)
- [10] 郭子政, 周培勤, 吴小薇. 二维 Fibonacci 准晶伊辛模型的蒙特卡罗计算[J]. 内蒙古大学学报 (自然科学汉文版), 1997, 1 (1): 31~32.
GUO Z Z, ZHOU P Q, WU X W. Two-dimensional Fibonacci quasicrystals Ising model Monte Carlo calculations [J]. Journal of University of Inner Mongolia(Chinese Version of Natural Sciences), 1997, 1(1): 31~32. (in Chinese)
- [11] 林旭升. 三维伊辛模型临界点模拟计算[J]. 汕头大学学报 (自然科学版), 1999, 14 (2): 11~12.
LIN X S. Three-dimensional Ising model simulation of the critical point[J]. Journal of Shantou University(Natural Science Edition), 1999, 14(2): 11~12. (in Chinese)
- [12] 许玲, 晏世雷. 三维横向晶场稀疏 Ising 模型的相变行为及磁化[J]. 苏州大学学报 (自然科学版), 2007, 23 (1):

35~38.

XU L, YAN S L. Three-dimensional crystal field lateral sparse Ising model and the transformation of magnetization [J]. Journal of Suzhou University(Natural Science Edition), 2007, 23(1): 35~38. (in Chinese)

- [13] 邵元智, 蓝图, 林光明. 三维动态 Ising 模型中的非平衡相变: 三临界点的存在[J]. 物理学报, 2001, 90 (5): 943~946.

SHAO Y Z, LAN T, LIN G M. Ising dynamic three-dimensional model of non-equilibrium phase transition: the existence of three critical point[J]. Acta Physica Sinica, 2001, 90(5): 943~946. (in Chinese)

- [14] SAUL D M. Confluent singularities and correction-to-scaling exponent for the $d=3$ fcc Ising model[J]. Phys. Rev. B, 1975, 11(7): 2571~2572.

- [15] ALAN M, FERRENBURG, LANDAU D P. Critical behavior of the three-resolution Monte Carlo study[J]. Phys. Rev. B, 1991, 44(10): 5081~5082.

- [16] BAILLIE C F. Monte Carlo renormalization-group study of the three-dimensional Ising model[J]. Phys. Rev. B, 1992, 45(18): 10438~10439.