



Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005"
International Conference "Fizika-2005"
Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9 **İyun** **June** **2005** **№90** **səhifə** **page** **336-338**
Июнь **стр.**

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ КВАНТОВЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

МАГОМЕДОВ М.А., МУРТАЗАЕВ А.К.

*Институт физики ДагНЦ РАН,
 Россия, Махачкала, 367003, ул. М. Ярагского 94.
 тел.: +7(8722)626675, факс: +7(8722)628900
 e-mail: magomedov_ma@iwt.ru*

На основе высокоэффективного петлевого алгоритма квантового метода Монте-Карло проведены исследования одномерных квантовых спиновых систем со спином $S = 1/2$. Рассчитаны температурные зависимости основных термодинамических величин: энергии E , теплоемкости C , восприимчивости χ и т.д. Показано, что результаты, полученные на основе квантового метода Монте-Карло, находятся в хорошем согласии с теоретическими данными и хорошо описывают термодинамические свойства некоторых реальных квазиодномерных магнитных материалов.

В последние годы исследованию численными методами низкоразмерных ($1d$ и $2d$) квантовых систем уделяется значительное внимание. Интерес к таким системам также стимулируется и большим количеством экспериментальных работ на квазиодномерных и квазидвумерных магнитных системах. Следует отметить, что теоретическое исследование этих систем чрезвычайно затруднено, в то время как различные подходы, основанные на квантовом методе Монте-Карло (МК), являются весьма мощными средствами для получения численных данных о поведении этих систем.

К настоящему времени имеются два разных подхода к использованию процедуры МК в задачах такого рода: подход Хэндскомба и подход, основанный на формуле Сузуки-Троттера для разложения экспоненциального оператора [1]:

$$\exp\left(\sum_{i=1}^p A_i\right) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(e^{A_1/m} \times e^{A_2/m} \times \dots \times e^{A_p/m} \right)^m, \quad (1)$$

где m – целое положительное число (число Троттера).

Формула Сузуки-Троттера переводит любую d -мерную квантовомеханическую систему в $(d+1)$ -мерную классическую систему общего типа. Следует отметить, что формула (1) справедлива только при $(m \rightarrow \infty)$, однако при проведении исследований из-за нехватки вычислительных мощностей приходится

ограничить величину числа Троттера, при этом вычисляемые данные будут содержать некоторую погрешность. Тем не менее, этот метод является одним из самых высокоэффективных методов исследования квантовых систем и позволяет вычислять с высокой точностью термодинамические параметры системы в широком диапазоне температур, в том числе и в низкотемпературной области, где теоретические методы сталкиваются с серьезными трудностями.

Нами, используя высокоэффективный петлевой (Loop) алгоритм [2], основанный на подходе Троттера, проведены исследования одномерной квантовой ферро- (ФМГ) и антиферромагнитной модели Гейзенберга (АФМГ), а также XY-модели (XY) со спином $S = 1/2$. Расчеты проводились для систем с линейными размерами $L \times 2m$ (L – линейные размеры системы в реальном направлении), при $L = 128$ и $m = 16; 32; 64; 128$ соответственно. Таким образом, число спинов в системе равнялось $N = 4096; 8192; 16384$ и 32768 . Следует отметить, что использованные нами размеры являются достаточно большими для подобного рода исследований. На систему в обоих направлениях накладывались периодические граничные условия.

Гамильтониан исследованных нами систем может быть представлен в следующем виде [3-5]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z \right), \quad (2)$$

где $J > 0$ и $\Delta = 0, 1, \text{ и } -1$ для XY-модели, ферро- и антиферромагнитной модели Гейзенберга соответственно. Суммирование ведется по всем парам $\langle i, j \rangle$ ближайших соседей.

Следует отметить, что в случае антиферромагнитной модели Гейзенберга напрямую применить формулу Сузуки-Троттера (1) не удастся из-за так называемой проблемы отрицательных статистических весов: веса некоторых состояний после перехода от квантовой системы к классической оказываются отрицательными [2]. В случае двухподрешеточных систем эту проблему удается решить поворотом каждого второго спина (т.е. в одной из подрешеток) вокруг оси z на 180 градусов ($S_i^x \rightarrow -S_i^x$ и $S_i^y \rightarrow -S_i^y$). В результате такого преобразования положительные веса остаются неизменными, а отрицательные веса меняют знак, при этом, не изменяясь по величине. При этом термодинамические свойства системы остаются неизменными. Уравнение (2) записано с учетом такого преобразования.

Основные термодинамические величины (энергия E , теплоемкость C и восприимчивость χ) могут быть вычислены по следующим флуктуационным соотношениям [3-5]:

$$E^{(m)} = \langle F^{(m)} \rangle, \quad (3)$$

$$C^{(m)} T^2 = \langle F^{(m)^2} - G^{(m)} \rangle - \langle F^{(m)} \rangle^2, \quad (4)$$

$$\chi^{(m)} = \frac{1}{T} \left(\langle M^{(m)^2} \rangle - \langle M^{(m)} \rangle^2 \right), \quad (5)$$

где T – температура, $\beta = 1/T$. Значения $F^{(m)}$, $G^{(m)}$ даны, к примеру, в [3, 5].

Петлевой алгоритм позволяет использовать при вычислении термодинамических величин так называемые улучшенные функции, которые характеризуются быстрой сходимостью и очень высокой точностью по сравнению со стандартными формулами. Например, для восприимчивости можно показать [2]:

$$\chi_{impr}^{(m)} = 2dN\beta \left\langle \frac{M_C^2}{|N_C|} \right\rangle \quad (6)$$

где d – размерность системы, N – число реальных спинов в системе, M_C – намагниченность кластера, N_C – размер кластера.

Следует отметить, что вычисляемые по формулам (3-6) средние величины будут соответствовать точным значениям при $(m \rightarrow \infty)$. Особенно сильно отклонение от точного значения проявляется при низких температурах. Для определения точного значения мы использовали квадратичную

аппроксимацию [3, 4]. К примеру, для энергии можно показать:

$$E(m) = E(\infty) + a/m^2 + b/m^4. \quad (7)$$

На рисунке 1. представлена зависимость энергии E от температуры T для одномерной антиферромагнитной модели Гейзенберга (1d АФМГ) при различных значениях числа Троттера m , а также значения, получаемые аппроксимацией ($m \rightarrow \infty$) по формуле (7). При аппроксимации термодинамических величин использовались значения с числом Троттера $m = 32, 64$ и 128. На этом же рисунке приведены и аналитические данные, полученные диагонализацией гамильтониана для цепочки конечных размеров ($N \leq 11$) с последующей экстраполяцией данных к ($N \rightarrow \infty$) [6].

Как видно из рисунка, в высокотемпературной области ошибка, связанная с конечностью Троттеровского разбиения, не существенна. Однако с понижением температуры погрешность быстро увеличивается, и при малых значениях m наблюдаются достаточно сильные отклонения от точного значения. Аппроксимация данных по формуле (7) позволяет значительно уменьшить погрешность вычисляемых величин.

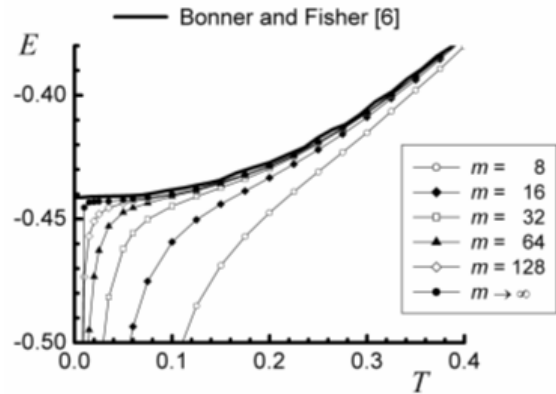


Рис. 1. Зависимость энергии E от температуры T при различных значениях m для 1d АФМГ ($\Delta = -1$).

Наши результаты находятся в хорошем согласии с аналитическими данными, и это свидетельствует о высокой точности и надежности использованного метода и полученных нами результатов.

Температурная зависимость энергии E для различных исследованных нами квантовых моделей при $(m \rightarrow \infty)$ представлена на рисунке 2. Также приведены и аналитические данные для ферро- и антиферромагнитной моделей Гейзенберга, а также XY – модели [6]. Как видно из рисунка, при низких температурах значение энергии для различных моделей при изменении значения Δ от 1 к -1 значительно уменьшается. Это является следствием квантовых эффектов, которые приводят к тому, что, в отличие от классических систем, энергия основного состояния для 1d антиферромагнитной модели Гейзенберга оказывается меньше, чем для 1d

ферромагнитной модели Гейзенберга с тем же абсолютным значением Δ .

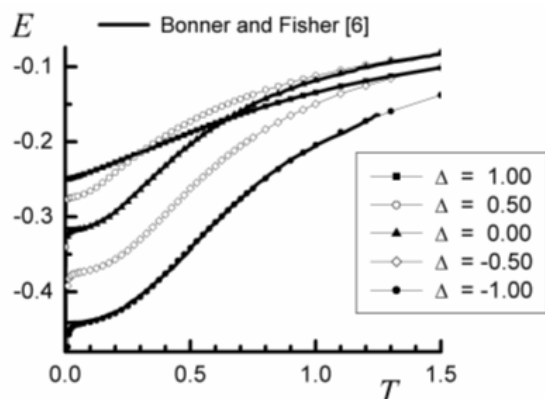


Рис. 2. Зависимость энергии E от температуры T для различных одномерных моделей при $(m \rightarrow \infty)$.

На рисунке 3 показана температурная зависимость теплоемкости C для одномерной антиферромагнитной модели Гейзенберга при различных значениях числа Троттера m . Для сравнения на рисунке приведены также и аналитические данные [6], а также экспериментальные данные для двух квазиодномерных магнитных систем [7].

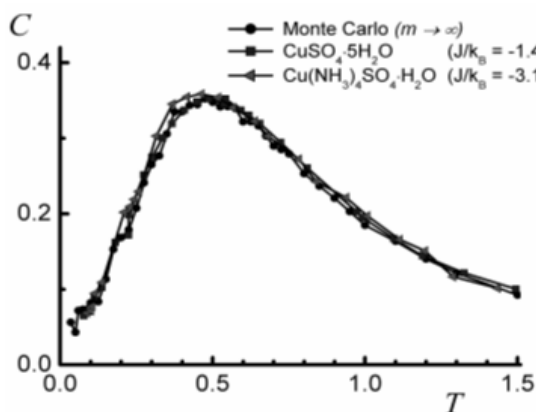


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C от температуры T для $1d$ АФМГ ($\Delta = -1$).

Для обоих материалов даны и значения параметра обменного взаимодействия J/k_B между атомами в одной цепочке. Обменное взаимодействие между атомами, находящимися в разных цепочках близко к нулю и составляет в среднем $|J'/J| \approx 10^{-2} \div 10^{-4}$ [7]. Как видно из рисунка, наши результаты находятся в хорошем согласии с аналитическими данными, а также хорошо описывают свойства реальных магнитных систем, величины параметра обменного

взаимодействия в которых могут отличаться в несколько раз.

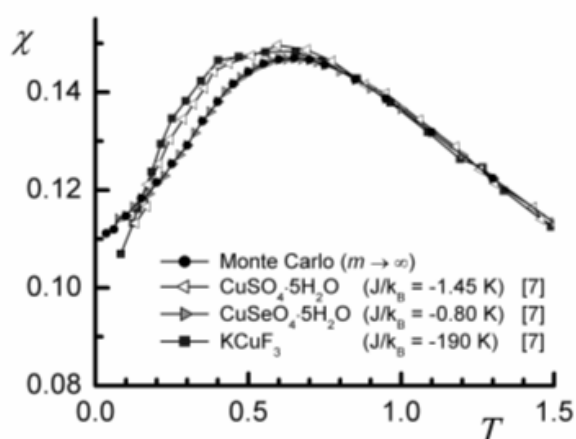


Рис. 4. Температурная зависимость восприимчивости χ для $1d$ АФМГ ($\Delta = -1$).

На рисунке 4 представлена зависимость восприимчивости χ , вычисленной на основе улучшенного флуктуационного соотношения (6), от температуры для одномерной антиферромагнитной модели Гейзенберга. Как видно из рисунка, восприимчивость имеет плоский пик при температуре $T \sim 0.65$ и принимает конечное значение $\chi \sim 0.110$ при $T \rightarrow 0$.

На рисунке для сравнения приведены также и экспериментальные данные для некоторых квазиодномерных реальных магнитных материалов. Из приведенных данных видно, что наши данные находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Таким образом, нами, используя высокоэффективный петлевой алгоритм квантового метода Монте-Карло, проведены высокоточные исследования ряда моделей низкоразмерных квантовых спиновых систем. В широком диапазоне температур, в том числе и в низкотемпературной области, вычислены температурные зависимости основных термодинамических величин квантовых моделей магнетиков. Сложность рассматриваемых моделей не дает возможности провести сколь угодно строгие аналитические расчеты для систем больших размеров, что делает целесообразным применение методов вычислительной физики.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 04-02-16487), грантом президента РФ по поддержке ведущих научных школ (грант № НШ-2253.2003.2) и ФЦП "Интеграция" (№ ИО228).

- | | |
|---|---|
| <p>[1]. M. Suzuki Prog. Theor. Phys. V.56, P.1454 (1976).</p> <p>[2]. H.G. Evertz Cond-mat/9707221</p> <p>[3]. Yutaka Okabe, Macoto Kikuchi Phys. Rev. B. V.34, P.7896 (1986).</p> <p>[4]. Yutaka Okabe, Macoto Kikuchi J. Phys. Soc. Jpn. V.57, P.4351 (1988).</p> | <p>[5]. John.J. Cullen, D.P. Landau, Phys. Rev. B. V.27, P.297 (1983).</p> <p>[6]. J.C. Bonner, M.E. Fisher Phys. Rev. V.135, № 3A. - P. A640 (1964).</p> <p>[7]. De Jongh L.J., Miedema A.R. // Advances in Physics. V.23, №1. P.1 (1974).</p> |
|---|---|