ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМ МЕТОДАМИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ФИЗИКИ.

Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Камилов И.К.

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, г. Махачкала

На основе высокоэффективного петлевого алгоритма квантового метода Монте-Карло проведены исследования двумерной модели Гейзенберга со спином S = ½. Рассчитаны температурные зависимости основных термодинамических величин: энергия E, теплоемкость C, восприимчивость χ и т.д. Показано, что квантовый метод Монте-Карло позволяет проводить высокоточные исследования квантовых спиновых систем больших размеров и в широком диапазоне температур.

В последние годы исследованию численными методами низкоразмерных ($1d$ и $2d$) квантовых систем уделяется значительное внимание. С одной стороны, этот интерес обусловлен тем, что на примере низкоразмерных систем удобнее исследовать особенности квантовых систем. С другой стороны, интерес стимулируется большим количеством экспериментальных работ на квазиодномерных и квазидвумерных магнитных системах [1].

Открытие высокотемпературной сверхпроводимости также сильно усилило интерес к низко-размерным квантовым спиновым системам. Теоретически, механизм спаривания, связанный с флуктуациями спинов, был использован как один из возможных вариантов объяснения высокотемпературной сверхпроводимости. На данный момент еще до конца не известно, вносят ли существенный вклад в сверхпроводимость спиновые флуктуации или нет.

Также одной из важных проблем является вопрос, связанный с природой основного состояния двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга. В силу низкой размерности пространства и малой величины спина весьма существенными оказываются квантовые флуктуации, которые могут полностью разрушить дальний порядок. Численные расчеты и анализ экспериментальных данных свидетельствуют о существовании в гейзенберговских антиферромагнетиках дальнего порядка при нулевой температуре.

В последние годы много работ посвящено теоретическому и экспериментальному исследованию двухмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга со спином $S = ½$ [2, 3]. Следует отметить, что строгое теоретическое исследование термодинамического поведения этой системы чрезвычайно затруднено, в то время как различные подходы, основанные на квантовом методе Монте-Карло (МК), являются весьма мощными средствами для получения надежных и высокоточных данных о термодинамических свойствах квантовых спиновых систем.

Одним из эффективных методов исследования квантовых спиновых систем методами МК является подход, основанный на формуле Сузуки-Троттера, с помощью которой d – мерная квантовая система переводится в $(d+1)$ – мерную классическую систему изинговского типа с четырехспиновым взаимодействием [4]:

$$\exp\left(\sum_{i=1}^{p} A_i\right) = \lim_{m\to\infty}\left(e^{A_1/m} \times e^{A_2/m} \times \cdots e^{Ap/m}\right)^m, \tag{1}$$

где m – целое положительное число (число Троттера).

Для антиферромагнитной модели Гейзенберга возможны только шесть различных конфигураций плакетов [6]:

$$S_p = \left\{ \begin{pmatrix} + & + \\ + & + \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} - & - \\ - & - \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} - & + \\ - & + \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} - & + \\ + & - \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} + & - \\ - & + \end{pmatrix} \right\} \tag{2}$$

Нами, используя высокоэффективный петлевой (Loop) алгоритм квантового метода Монте-Карло [5], основанный на подходе Сузуки-Троттера, проведены исследования квантовой модели Гейзенберга на квадратной решетке со спином $S = ½$. Пример полученной с помощью формулы Сузуки-Троттера классической системы изображен на рисунке 1. Закрашенные прямоугольники на этом рисунке обозначают так называемые плакеты с четырехспиновым взаимодействием. Исследования проводились для систем с линейными размерами $L \times L \times 4m$ с $L = 32$ и $m = 8$, 16, 32 и 64. Таким образом, число спинов в системе составило $N = 32768$, 65536, 131072 и 262144. На систему в реальных и троттеровском направлениях накладывались периодические граничные условия.

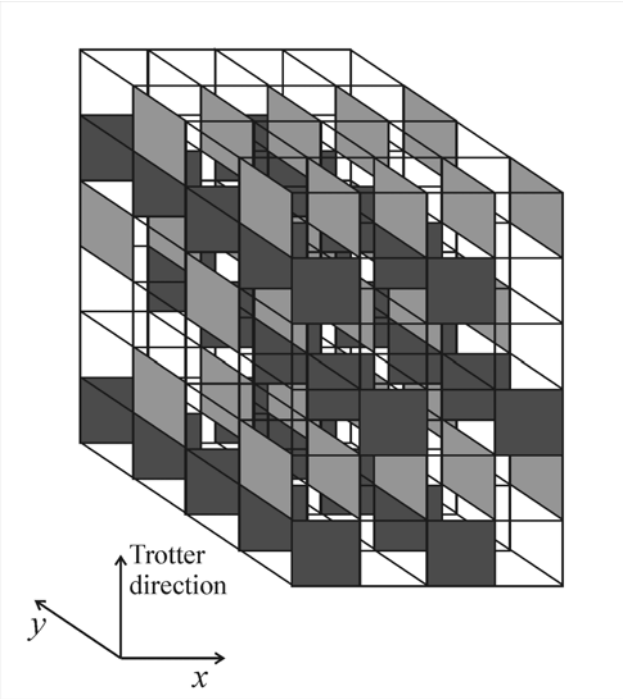

Рис.1. Схематическое изображение 3d классической системы, получаемой из 2 квантовой системы с помощью формулы Сузуки-Троттера.

Гамильтониан исследованной нами системы может быть представлен в следующем виде [6]:

$$H = -J \sum_{i,j} \left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z \right), \qquad (3)$$

где $J > 0$, $\Delta = -1$ и S_i^x, S_i^y, S_i^z – спиновые операторы Паули.

Следует отметить, что выражение (3) записано с учетом унитарного преобразования, заключающегося в перевороте каждого второго спина (т.е. в одной из подрешеток) вокруг оси z на 180 градусов. Это преобразование позволяет избавиться от проблемы отрицательных весов, возникающей при применении к антиферромагнитной модели Гейзенберга формулы Сузуки-Троттера.

Одно-кластерный вариант петлевого алгоритма для одномерной антиферромагнитной модели Гейзенберга со спином $S = ½$ можно представить в следующем виде [5]:

1. Задать начальную конфигурацию спинов.
2. Выбрать случайным образом начальный узел $x(i_0, j_0, r_0)$. Этот узел является общим для двух плакетов (один из них расположен выше узла, а другой ниже), и в зависимости от значения спина ($S = \pm 1$) в узле мы будем двигаться вверх (для $S = +1$) или вниз (для $S = -1$).
3. Для построения петли нам следует двигаться вдоль плакетов, пока не вернемся в исходный узел $x(i_0, j_0, r_0)$. На каждом плакете имеется возможность совершать

вертикальный или горизонтальный шаг. Пусть выбирается горизонтальный шаг с вероятностью:

$$p=\begin{cases}0, & S_p=\begin{pmatrix}+ & + \\ + & +\end{pmatrix} \text{ или } \begin{pmatrix}- & - \\ - & -\end{pmatrix} \\ \tanh\left(\dfrac{\beta}{2m}J\right), & S_p=\begin{pmatrix}+ & - \\ + & -\end{pmatrix} \text{ или } \begin{pmatrix}- & + \\ - & +\end{pmatrix} \\ 1, & S_p=\begin{pmatrix}- & + \\ + & -\end{pmatrix} \text{ или } \begin{pmatrix}+ & - \\ - & +\end{pmatrix},\end{cases} \tag{4}$$

4. В противном случае совершаем вертикальный шаг. Отметим также, что кластер в нашем случае состоит из одной петли.
5. Переворачиваем полученную петлю. Переворачивание петли заключается в изменении знака всех спинов, лежащих в узлах, которые входят в петлю.
6. Проанализировать полученную конфигурацию и сохранить рассчитанные величины для последующего усреднения.
7. Повторить шаги 2 – 6 необходимое число раз.
8. Вычислить средние значения термодинамических величин.

Основные термодинамические величины (такие как энергия E, теплоемкость C, и восприимчивость χ) могут быть вычислены по следующим флуктуационным соотношениям [5-7]:

$$E^{(m)}=\left\langle F^{(m)}\right\rangle \tag{5}$$

$$C^{(m)}T^2=\left\langle F^{(m)^2}-G^{(m)}\right\rangle-\left\langle F^{(m)}\right\rangle^2 \tag{6}$$

$$\chi^{(m)}=\beta\left\langle M^{(m)^2}\right\rangle-\left\langle M^{(m)}\right\rangle^2 \tag{7}$$

где T – температура, β – величина обратная температуре. Значения $F^{(m)}$, $G^{(m)}$ даны, к примеру, в работах [6, 7].

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 [5]:

$$\chi_{impr}^{(m)}=2dN\beta\left\langle\frac{M_C^2}{|N_C|}\right\rangle \tag{8}$$

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

Следует отметить, что определяемые термодинамические величины будут соответствовать точным значениям при ($m\to\infty$), а при конечных значениях числа Троттера m они будут содержать некоторую погрешность, которая особенно сильно проявляется при низких температурах. Для избавления от этой погрешности и определения точного значения термодинамических величин мы использовали квадратичную аппроксимацию [6]. К примеру, для энергии можно показать:

$$E(m)=E(\infty)+a/m^2+b/m^4\,. \tag{9}$$

На рисунке 2. представлена зависимость энергии E от температуры T для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга. На рисунке даны значения, полученные после

аппроксимации ($m \to \infty$) по формуле (9). При аппроксимации термодинамических величин использовались значения с числом Троттера $m = 16$, 32 и 64. Для сравнения с нашими результатами на рисунке приведены также и аналитические данные, полученные на основе модифицированной теории спиновых волн [2], а также высокотемпературного разложения в ряды [3]. Следует отметить, что значения энергии и температуры на рисунке даны в относительных единицах (в единицах обменного интеграла $|J|$).

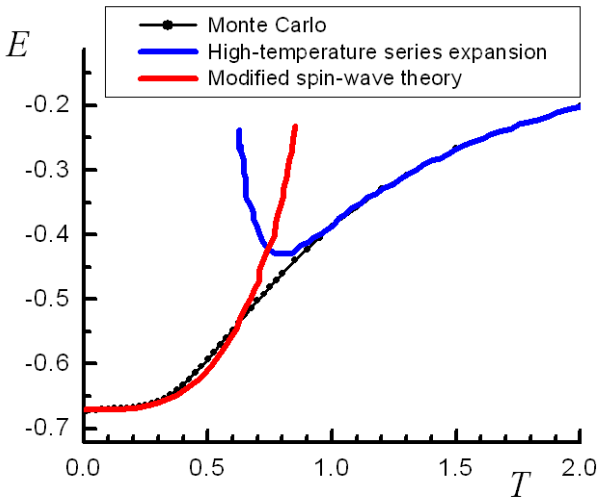

Рис.2. Температурная зависимость энергии E для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.

Таким образом, из рисунка хорошо видно, что модифицированная теория спиновых волн хорошо описывает поведение системы в основном состоянии и при низких температурах [2]. Однако с повышением температуры теория спиновых волн перестает работать. Поведение системы в высокотемпературной области (при температурах $T \geq 1$) хорошо описывается с помощью высокотемпературного разложения в ряды [3].

Температурная зависимость теплоемкости C для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга представлена на рисунке 3. На рисунке даны также экспериментальные данные для квазидвумерной системы [1], и теоретические данные, полученные на основе высокотемпературного разложения в ряды до девятого порядка [3].

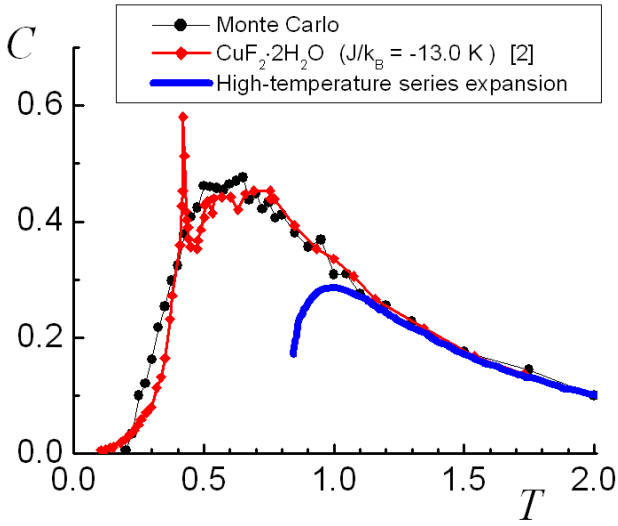

Рис.3. Зависимость теплоемкости C от температуры для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.

На рисунке 4. представлена зависимость восприимчивости χ_{impr}, вычисленной на основе улучшенного флуктуационного соотношения (8), от температуры для двумерной

антиферромагнитной модели Гейзенберга при различных значениях числа Троттера m, и значения, получаемые при аппроксимации ($m \to \infty$). На этом же рисунке приведены и данные лабораторного эксперимента для квазидвумерной системы [1]. Здесь же представлены и теоретические данные, полученные на основе модифицированной теории спиновых волн [2], и высокотемпературного разложения в ряд до десятого порядка [3]. Как видно из рисунка, восприимчивость имеет плоский пик при температуре $T \approx 0.95$, и принимает конечное значение $\chi \approx 0.045$ при $T \to 0$.

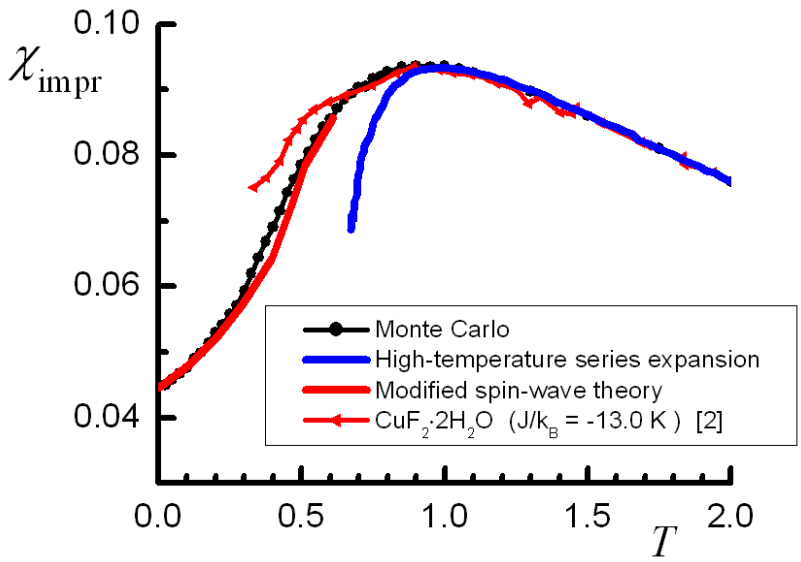

Рис.4. Зависимость восприимчивости χ от температуры для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.

Таким образом, как видно из приведенных графиков, наши результаты, полученные квантовым методом Монте-Карло, хорошо согласуются с теоретическими данными как в высокотемпературной, так и в низкотемпературной областях. Данные, полученные с использованием высокоэффективного петлевого алгоритма квантового метода Монте-Карло, не только не уступают по точности, но иногда и превосходят результаты, полученные другими методами, и адекватно описывает квантовые спиновые системы в широкой температурной области.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 04-02-16487), грантом президента РФ по поддержке ведущих научных школ (грант № НШ-2253.2003.2), ФЦП “Интеграция” (№ И0228) и грантом Комиссии РАН по работе с молодежью (№35).

Литература

1. *De Jongh L.J., Miedema A.R.* Experiments on simple magnetic model systems // Advances in Physics. – 1974. - V. 23, №1. - P.1-260.
2. *Takahashi M.* Modified spin-wave theory of a square-lattice antiferromagnet // Phys. Rev. B. – 1989. - V. 40, № 4. - P.2494-2501.
3. *Rushbrooke G.S., Baker G.A., Wood Jr., and P.J.* in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by Domb C. and Green M.S. (Academic, New York, 1974), Vol. 3, Chap. 5.
4. *Suzuki M.* Relationship between $d-$Dimensional Quantal Spin Systems and $(d+1)-$ Dimensional Ising System // Progr. Theor. Phys. – 1977. – V. 56, №5. – P. 1454 – 1469.
5. *Evertz H.G.* The Loop Algorithm // Cond-mat/9707221.
6. *Okabe Y., Kikuchi M.* Quantum Monte Carlo Simulation of the Spin 1/2 *XXZ* Model on the Square Lattice // Jour. Phys. Soc. Jap. – 1988. - V.57, № 12. – P.4351-4358.
7. *Cullen John. J., Landau D. P.* Monte Carlo studies of one-dimensional quantum Heisenberg and *XY* Models // Phys. Rev. – 1983. - V.27, № 1. – P.297-313.