# 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

**Магомедов М.А.**
**Муртазаев А.К.**
**Камилов И.К.**
Институт физики Дагестанского научного центра РАН

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].

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 Судзуки-Троттера, с помощью которой $d$ – мерная квантовая система переводится в $(d+1)$ – мерную классическую систему изинговского типа с четырехспиновым взаимодействием [4]:

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

где $m$ – целое положительное число (число Троттера).

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 $S = ½$. 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.

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

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

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

Следует отметить, что выражение (2) записано с учетом унитарного преобразования, заключающегося в перевороте каждого второго спина вокруг оси $z$ на 180 градусов. Это преобразование позволяет избавиться от проблемы отрицательных весов, возникающей при применении к антиферромагнитной модели Гейзенберга формулы Сузуки-Троттера.

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:

$$E(m) = E(\infty) + a/m^2 + b/m^4 . \qquad (3)$$

На рисунке 1. представлена зависимость энергии $E$ от температуры $T$. На рисунке даны значения, полученные после аппроксимации ($m \to \infty$) по формуле (3). 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 $|J|$).

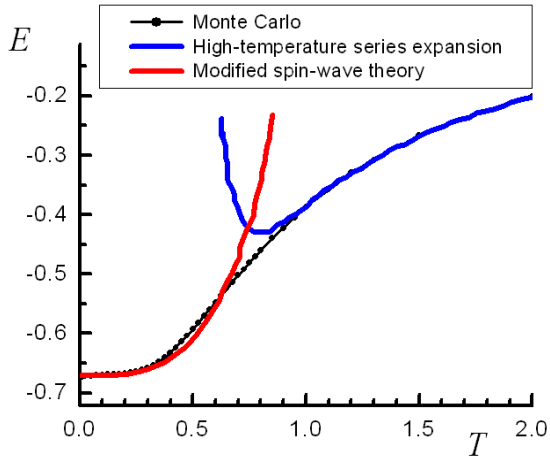


*Рис.1. Температурная зависимость энергии E для двумерной антиферромагнитной модели Гейзенберга.*

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]. Как следует из графика, наши результаты 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.