

Study of q -state clock model using Wolff algorithm

作者：程大榕

指導教師姓名：吳桂光

Email: s06210013@thu.edu.tw

摘要

我利用蒙地卡羅法進行了二維鐵磁性正方晶格 clock model 的數值模擬，對 $q=2$ 到 $q=9$ 個自旋態的 clock model 進行了 10^6 Monte Carlo Step (MCS) 次計算。結果呈現系統於 $q=2$ 時，為 Ising-like 相變，有一個相變；隨著 q 的增加，從 $q=5$ 或 $q=6$ 開始出現了 Kosterlitz and Thouless (KT) -like 相變，整個系統在溫度的提升過程中發生了兩次相變，很是令人好奇。當我計算完 $q=9$ 的系統後，在分析比熱隨溫度變化的行為中發現其主要有三個相，分別為 long range ordered (LRO) 相、quasi-long range ordered (QLRO) 相以及高溫的無序相，最後透過計算 Binder ratio 得出兩個臨界溫度分別為 0.33、0.91。

研究計畫內容

(一) 研究動機與研究問題

繼先前 2-Dimensional Ising model with Wolff algorithm 後，當時是對單一自旋有兩種可能態 (spin up、spin down) 的二維正方晶格模型進行研究，由於對一個沒有任何限制的自旋來說，在空間中可以朝向任何方向，或是我們可以說自旋投影到任意座標軸有著無限多種可能的值，以此為出發點，開始了對 clock model 的模擬，在這個模型中，它的自旋自由度非常高，透過 q 參數的數值調整，能夠使我們得到 Ising model ($q=2$)、three-state Potts model ($q=3$) 甚至到自旋態連續分布的 XY model ($q=\infty$)，因此我希望透過數值模擬的方式，研究鐵磁性二維正方晶格的 clock model，觀察隨著 q 的增長，系統行為的改變，以及探討當 $q=9$ 時系統的比熱、磁矩、分布以及臨界溫度。

目前對於該題目已經有科學家對此做出貢獻以及結論，好比如在 $q=5$ 將開始出現所謂的 KT 相變，那麼這此篇內容，除了透過還原整個研究來學習，還運用了多位物理學家對此領域探討所用的方法，以此增進自己對該領域的了解，以及對於數值模擬技術的成長。

(二) 文獻回顧與探討

clock model模型為XY model的離散版，在確立了XY model具有KT相變後，物理學家也開始產生了對於clock model研究的興趣，其模型從 $q=6$ 開始會出現KT相變，且系統內部會隨著溫度的提升出現兩次相變[1]。除了物理量的分析外，還希望能透過整理現有資訊作圖以協助之後的討論，於是我透過一種數據分析的設計——磁矩於複數平面的視覺化分布[2]，呈現系統在不同溫度下的自旋分布情形，可以使得我更容易了解整個系統。雖然知曉了自旋分布，不過當更深入了解兩個相變間系統內部的情形和臨界溫度，會得知其主要有三個狀態LRO、QLRO和無序態，同時這三個態的兩個臨界溫度可以透過Binder ratio來決定，且在KT相變時會出現正反渦旋的自旋分布排列 [3]。

(三) 研究方法及步驟

在模擬系統的過程中，需建立在熱力學中不同能量態在不同溫度下須遵守的Boltzmann機率分布；那麼以 $q=9$ 為例，假若系統有 n 個晶格，整個系統所有的可能態就會有 9^n 種可能性，在稍微大一點的尺寸下，當然不可能將每個態都做分析，所以本篇採用了蒙地卡羅模擬法，進行隨機抽樣、熱平衡兩個步驟來完成對clock model的模擬，最後再取平均對物理量進行分析。

1. clock model基本設置：

模型尺寸單邊晶格數 L ，系統總晶格數 $n = L^2$ ；具週期性邊界條件。

自旋為 \vec{s}_i ， \vec{s}_j ，其中 $\langle i,j \rangle$ 指的是所有最近鄰的自旋（這裡後續我會使用NN表示最近鄰的意思）：

$$\vec{s}_i = (\sin \theta_i, \cos \theta_i) \quad (1)$$

其中 $\theta_n = n \left(\frac{2\pi}{q} \right)$ ， $n=0,1,2,\dots,q-1$ ，這裡的 q 代表著一個自旋所有可能的狀態數，以 $q=6$ 為例，如下**FIG.1**。

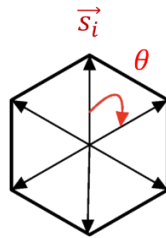


FIG.1.箭頭所指的六個方向為 $q=6$ 時對應到六個可能的態，以及角度 θ 起始點的設定和增加方向。

整個系統的Hamiltonian可寫為Eq.(2)，其中在我們討論的模型下是沒有外加磁場的 $\vec{h}=0$ ，同時我們研究的是鐵磁性系統，這裡的鐵磁性系統意思是指在低溫時，系統內所有自旋皆朝向同一方向的系統，為了這樣的結果，我們必須要讓相同方向自旋時的能量為最低才有可能發生，所以接下來的模擬將會設定交互作用力常數 $J=1$ ，故應將Eq.(2)改為Eq.(3)。

$$H = -J\sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + \sum_i \vec{h} \cdot \vec{s}_i \quad (2)$$

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (3)$$

2. Wolff algorithm [1] :

選擇該演算法，主要避免臨界溫度附近的critical slowing，也就是當系統從有序要到無序時，若我們使用的是單一自旋翻轉的方式，由於我們現在探討的是鐵磁性系統，那麼當我們要從有序的自旋中翻轉自旋，可想而知是多麼不容易的一件事，這會造成系統在臨界溫度的模擬誤差變大，應此為使得我們的模擬能夠順利，故以此作為本篇演算法。

第一步：在Eq.(4)的條件下，隨機選取任一 \hat{n} 做為鏡軸的法方向，如

FIG.3(a)、3(b)。

$$\hat{n} = (\sin \phi_k, \cos \phi_k) \Rightarrow \begin{cases} \phi_k = k \left(\frac{\pi}{q} \right), & q \in \text{even} \\ \phi_k = \left(k + \frac{1}{2} \right) \left(\frac{\pi}{q} \right), & q \in \text{odd} \end{cases} \quad (4)$$

其中 $k = 0, 1, 2, \dots, 2q - 1$ 。

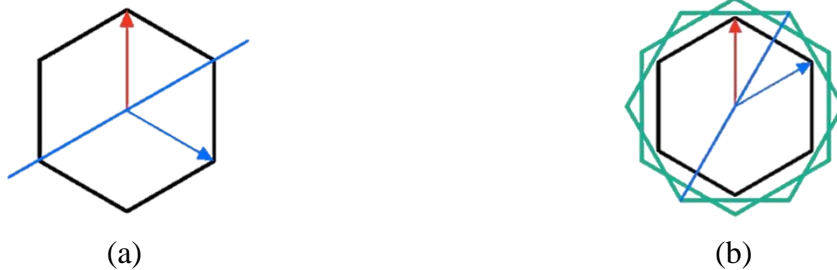


FIG.2.以 $q=6$ 為例(a)圖中紅色箭頭為原本的自旋方向，而所謂的鏡軸就是指藍色的線。紅色箭頭經過鏡軸作用後，紅色箭頭便會翻轉到藍色箭頭的位置，

這個部分在待會的步驟中會詳述。(b)綠色部分為原本六個態箭頭所指位置的連線，六邊形，旋轉 $\frac{1}{2}\theta$ 角，兩者交點與六邊形中心的連線即可成為一條鏡軸。

第二步：選取任意自旋 \vec{s}_i

第三步：讀取NN自旋 \vec{s}_j ，並以Eq. (5)的機率進行圈取，被圈取的 \vec{s}_j 同樣讀取NN自旋進行圈取。（這裡的 T 是指Boltzmann constant和絕對溫度的乘積）

$$p_{cluster} = 1 - \exp\left[-2\frac{J}{T}(\hat{n} \cdot \vec{s}_i)(\hat{n} \cdot \vec{s}_j)\right] \quad (5)$$

上式圈取機率，在圈取自旋翻轉後能量改變較高的情況下較大。

第四步：如果第三步停止的話，就對所有被圈取的自旋對應的角度作用一個翻轉運算子Eq. (6)

$$\hat{R}\theta = 2\phi - \theta + \pi \quad (6)$$

3. MCS：

何謂一個蒙地卡羅步驟MSC？在本篇中，指的是進行一次Wolff algorithm的四個步驟。經過足夠次的MCS後將可以使得系統達到熱平衡。

4. 量測物理量：

磁矩：

$$|m| = \sqrt{\left(\frac{1}{n}\sum_i \sin \theta_i\right)^2 + \left(\frac{1}{n}\sum_i \cos \theta_i\right)^2} \quad (7)$$

系統能量：

$$E = -\frac{1}{n}\langle J\sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \rangle \quad (8)$$

比熱：

$$C = \frac{1}{T^2}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (9)$$

複數平面視覺化分布[2]：

$$M = n^{-1}\sum_j e^{i\theta_j} = |M|e^{i\phi} \quad (10)$$

一維高斯分布，Binder ratio：

一維高斯積分通式：

$$\langle x^n \rangle = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}} dx \quad (11)$$

以下將 $\bar{x} = \langle x \rangle := \lambda$ ，並進行變數變換運算後可得

$$\langle x^0 \rangle = 1 \quad (12)$$

$$\langle x^1 \rangle = \lambda \quad (13)$$

$$\langle x^2 \rangle = \sigma^2 + \lambda^2 \quad (14)$$

$$\langle x^3 \rangle = \lambda(3\sigma^2 + \lambda^2) \quad (15)$$

$$\langle x^4 \rangle = 3\sigma^4 + 6\lambda^2\sigma^2 + \lambda^4 \quad (16)$$

當系統從低溫到高溫時，會從有序排列變成無序排列，故在高溫時 $\lambda = 0$ ，代入Eq.(13~16)會只剩下Eq.(15,17)，在此設計兩者比例組合為零時為無序態，[3] Eq.(18)，也就得出Binder ratio。

$$U_4 = 1 - \frac{\langle x^4 \rangle}{3\langle x^2 \rangle^2} \quad (17)$$

二維高斯分布，Binder ratio：

有了Eq.(18)，那麼在二維高斯分布的設計同樣圍繞在平方的平均以及四次方的平均來討論。

二維高斯積分：

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{1}{\sigma^2 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + y^2) e^{-\frac{(x-\lambda_x)^2 + (y-\lambda_y)^2}{2\sigma^2}} dx dy \quad (18)$$

令 $\lambda_x = 0, \lambda_y = 0$ (高溫無序態) 可得

$$\langle r^2 \rangle = 2\sigma^2 \quad (19)$$

$$\langle r^4 \rangle = 8\sigma^4 \quad (20)$$

經過同Eq.(18)的設計可得Eq.(13) [2] [3]

$$U_m = 1 - \frac{\langle r^4 \rangle}{2\langle r^2 \rangle^2} \quad (21)$$

(四) (現有)結果及討論

經過 10^6 MCS，在不同的 q 值上，磁矩Eq.(7)跟溫度的關係如FIG.3所示，觀察到系統隨著 q 的增加，相變從原本的一次變成了兩次，很是神奇，為了更進一步探討兩次相變究竟發生了什麼，我做了複數平面視覺化分布Eq.(10)分析如FIG.3(a~d)所示，若我們單單從M來看，會觀察到隨著溫度的增加，逐漸向中心移動，呈現一維高斯分布，所以在尋找從有序態到無序態的臨界溫度很容易地可

以透過Eq.(17)作圖來得到。

不過單單知道有序態到無序態臨界溫度的找尋方法還不夠，我在 $q=9$ 做出的結果顯示，總共有兩個臨界溫度。目前的資訊量不足以我去判斷，所以接下來我除了做比熱Eq.(9)的分析外，還在不同溫度區間觀察自旋在系統內分布情形，如FIG.4所示。

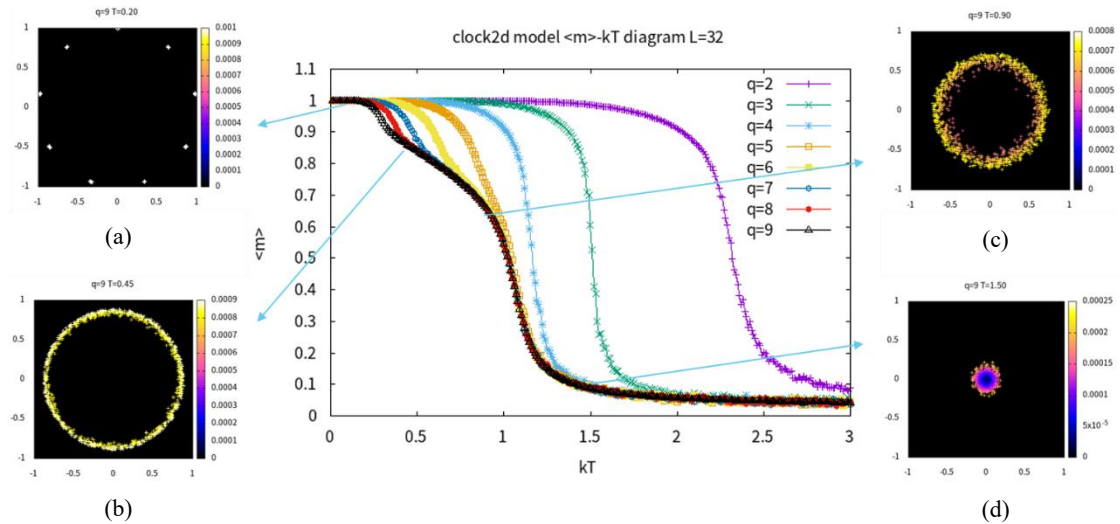


FIG.3.為磁矩與溫度在不同 q 下的關係圖。(a)為 T (或 kT) = 0.2, $q=9$ 時，系統的自旋在複數空間中的分布情況，其主要分布在九個固定態上，而顏色則代表著自旋磁矩的強度。(b)、(c)、(d)分別為 $T=0.45$ 、 0.90 、 1.50 下的分布情形。

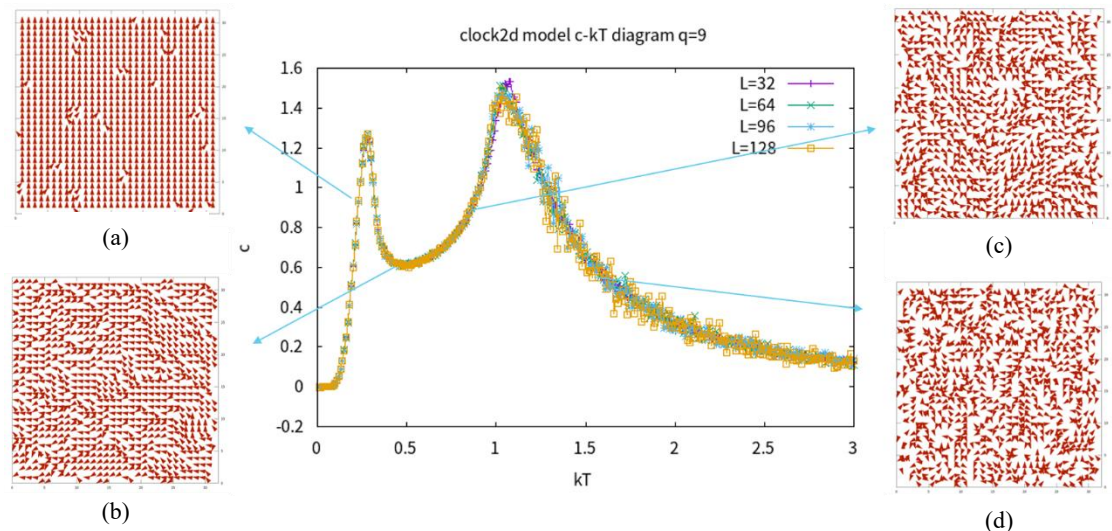


FIG.4.比熱與溫度在不同系統尺寸下的關係圖。(a)~(d)分別是溫度為 0.21 、 0.45 、 0.93 、 1.50 時系統內部自旋分布情形。

在FIG.4中，從比熱的兩個高峰可以很明顯驗證其具有兩次相變，FIG.4(a)可以看出此時是所謂的LRO；FIG.4(b)則是介於無序跟有序，既不是有序也不是無

序的QLRO；在KT相變的部分FIG.4(c)，如預期出現了正反渦旋的排列[3]（圖中有一個正反渦旋）；無序排列在FIG.4(d)可以看的非常清楚。

增加了FIG.4的分析後，很清出的知道，有序排列到無序排列的臨界溫度，乃指的是KT臨界溫度，也就是說我們透過Eq.(18)作圖即可得到KT相變臨界溫度 T_C^{KT} ，如FIG.5所示。

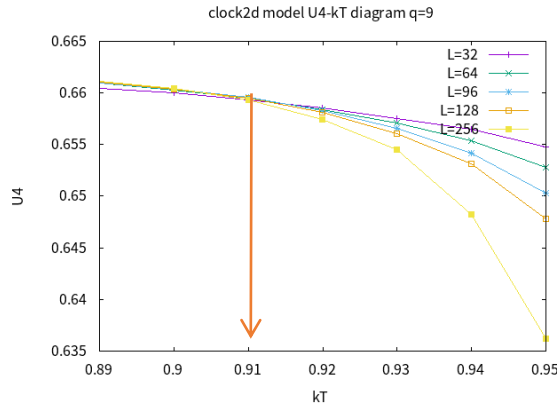


FIG.5. $U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$ 和溫度關係圖。可以透過讀取交點的溫度來得到臨界溫度 $T_C^{KT} \approx 0.91 \sim 0.9$ [3]。

我們回過頭來看FIG.3(a)~(d)會發現，系統除了一開始離散的九個態外，其餘皆保持連續的圓形分布，也就是說在LRO和QLRO間所發生的相變，影響的是角度的分布，而非M的分布，這點可以在FIG.3(a)和(b)中觀察到。在固定M下，角度的改變，使得其分布符合二維的高斯分布，故可以使用Eq.(21)作圖，得出LRO和QLRO的臨界溫度 T_C^ϕ ，如FIG.6所示。

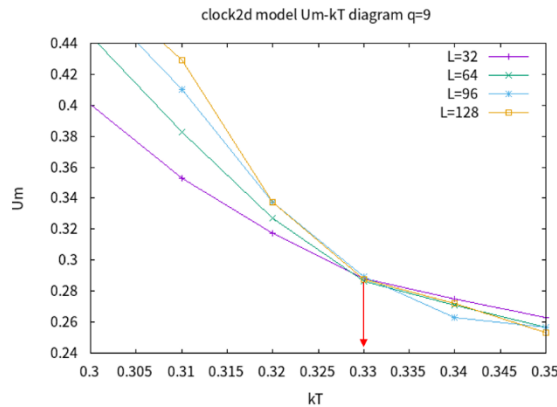


FIG.6. $U_m = 1 - \frac{\langle m_\phi^4 \rangle}{2\langle m_\phi^2 \rangle^2}$ 和溫度的關係圖。[3]其中 $\phi = \tan^{-1} \frac{\sum_i \sin \theta_i}{\sum_i \cos \theta_i}$ ， $m_\phi = \langle \cos(q\phi) \rangle$ ，這裡之所以設計成討論 $\cos(q\phi)$ 的平均，是因為這樣的設計可以使

得，在LRO中的九個固定態時所得到的 $\langle \cos(q\phi) \rangle = 1$ ，當在QLRO時 $\langle \cos(q\phi) \rangle = 0$ 。同樣我們可直接透過讀取交點得到 $T_c^\phi \approx 0.33 \approx 0.332(1)$ [3]。

(五) 個人貢獻主要項目及比重

整份報告皆由我一人獨自完成，佔總貢獻100%。

(六) 預期結果

1. 在磁矩的分析上，符合隨著 q 的增加漸漸出現兩個相變的情形；在比熱的分析上也確實表現出兩個相變的發生，兩者的結果皆完全符合預期。
2. 在QLRO時，系統自旋內部排列可以清出看出一塊一塊的領域 (domain)，符合預期 FIG.4(b)。
3. KT相變時，系統內部自旋會出現正反渦旋排列，符合預期FIG.4(c)。

(七) 結論

綜括以上結果，可以得知clock model隨著 q 的增加會從原本的Ising like相變，變為KT-like相變，並且會從一個相變變為兩個相變，這兩個相變主要包含了三個態，分別為LRO、QLRO和無序態。LRO特徵為自旋排列皆在特定方向；QLRO特徵為，有領域 (domain) 的排列，且介於有序和無序之間；無序態特徵為隨意分布，沒有特定喜好排列方式，這裡值得注意的是在QLRO過渡到無序態的KT相會呈現正反渦旋的自旋排列。在此也透過了Binder ratio得到了兩個臨界溫度 $T_c^\phi \approx 0.33$ 、 $T_c^{KT} \approx 0.91$ 。

接著將再次對於Ising model進行研究，不過與先前不同的是，接下來將考慮次近鄰自旋的交互作用力，為提高計算速率，也將學習平行計算。

(八) 參考文獻

- [1] Raymond P. H. Wu, Veng-cheong Lo, and Haitao Huang. J. Appl. Phys. 112, 063924 (2012).
- [2] Seung Ki Baek, Petter Minnhagen, and Beom Jun Kim. PHYSICAL REVIEW E 80, 060101(R) (2009).
- [3] Swarnajit Chatterjee, Sanjay Puri and Raja Paul. Phys. Rev. E 98, 032109 (2018)