作业 9 程序说明文档

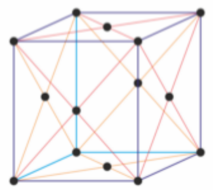
杨媛冰　20307110478　物理系

题目 1　Heisenberg Model

1、题目描述

Write a MC code for a 3D Face-Centered Cubic lattice using the Heisenberg spin model (adopt periodic boundary condition). Estimate the ferromagnetic Curie temperature.

$$H = -J \sum_{<i,j>_{NN}} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \qquad J = 1, \qquad \left|\vec{S}_i\right| = 1$$



2、程序描述

程序采用了 Metropolis 算法，计算了三维面心立方晶胞的海森堡自旋模型的 M-T 图，通过图像得到了居里温度 T_c。

程序中较为关键的原理如下。

(1)　Metropolis 算法原理

对于一个晶体的自旋状态 S，从中选择一个位置的自旋 $\vec{s}_0$，将其变为另一个随机产生的新自旋 $\vec{s}$，计算晶体能量的变化 $\Delta E = E_{\vec{s}} - E_{\vec{s}_0}$，求得相应的玻尔兹曼分布对应的概率 $p = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$。随机产生一个在 $[0, 1)$ 均匀分布的随机数 X，若 $X \leq p$，则接受这个变化，得到新的自旋构型。

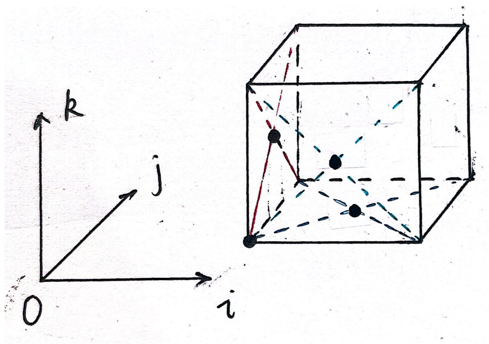
重复以上步骤获得 Markov 链，在达到平衡状态后计算晶体中原子的平均自旋，即晶体中所有原子总自旋对原子数的平均。本程序中取原子平均自旋的模长作为观测指标以及序参量 M。

(2) 随机产生模长为 1 的自旋 $\vec{s}$

在三维空间中，要随机产生各个方向均匀分布的模长为 1 的向量，即产生在单位球面上随机分布的点的坐标。若用球坐标 (r,θ,ϕ) 来标记点，则 $r=1$，θ 和 ϕ 分别服从 $f(\theta)=\dfrac{1}{2\pi}$ 和 $f(\phi)=\dfrac{1}{2}sin\phi$ 的概率分布。随机产生在 $[0,1)$ 上均匀分布的随机数 X_1，X_2，由 Inverse Transformation 方法得到 $\theta=2\pi X_1$，$\phi=arccos(1-2X_2)$，最终产生的向量 $\vec{s}=(x,y,z)$ 的分量为 $x=sin\phi cos\theta$，$y=sin\phi sin\theta$，$z=cos\phi$。

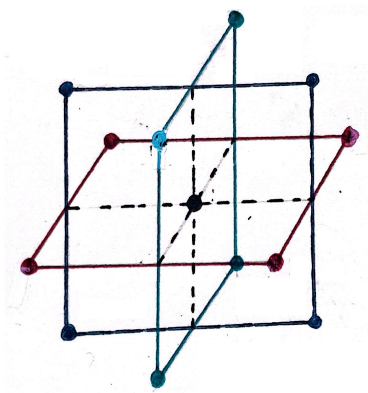
(3) 晶体状态的储存方法

面心立方晶胞的晶体可以看做是 4 个立方晶胞晶体的叠加，用 4 个三维数组即可储存，注意每个数组的元素是该位置原子的自旋，即向量 $\vec{s}$。本程序中属于某个晶胞的原子位置如下图所示。



(4) 指定位置处原子能量的计算

面心立方晶胞的配位数为 12，即对于某个位置处的原子，其最近邻的原子有 12 个，其分布如下所示。



利用海森堡模型计算中心原子与其周围最近邻的 12 个原子的相互作用能，将其作为中心原子的能量。

本程序取玻尔兹曼常数 $k_B=1$，相互作用系数 $J=1$，程序的可调参数如下表所示。该晶体的周期循环单位为 $N\times N\times N$，即 x，y，z 方向上的晶胞数均为 N。

N	一个周期内的晶胞数	$loop$	每次 Metropolis 算法的 Markov 链长度
$time$	每个温度 T 的 Markov 链个数	$Tstep$	温度的步长
$Tinterval$	温度区间		

表 1. 程序可调参数

程序的思路为：对于每一个温度 T，产生 $time$ 条 Markov 链，对于每条 Markov 链观测其达到平衡态后晶体内所有原子的平均自旋，取这 $time$ 次观测到的原子平均自旋的平均值作为最终该温度下序参量 M 的观测值。绘制 $M-T$ 图，观察得到 T_c 的值。

程序的开发环境为 Python 3.8，源文件为 HeisenbergModel.py，运行时请保证第三方库 Numpy、Matplotlib 已安装并导入，程序伪代码如下所示。

3、伪代码

Algorithm 1 Metropolis for Heisenberg Model

输出: the image of $M-T$

set the adjustable parameters

function SGENERATOR

  $\theta \leftarrow 2\pi X_1$ ▷ $X_1 \sim U[0,1)$

  $\theta \leftarrow arccos(1-2X_2)$ ▷ $X_2 \sim U[0,1)$

  $x \leftarrow sin\phi cos\theta$

  $y \leftarrow sin\phi sin\theta$

  $z \leftarrow cos\phi$

  return $[x,y,z]$

end function

function GETENERGY$(mode,i,j,k,S,newspin)$

  $i\_prime \leftarrow i+1 \bmod N$

  $j\_prime \leftarrow j+1 \bmod N$

  $k\_prime \leftarrow k+1 \bmod N$

  if $mode=0$ **then**

    $s_0 \leftarrow S[0,i,j,k]$

    $sumspin \leftarrow S[1,i,j,k]+S[1,i,j-1,k]+S[1,i-1,j-1,k]+S[1,i-1,j,k]+S[2,i,j,k]+S[2,i,j,k-1]+S[2,i,j-1,k-1]+S[2,i,j-1,k]+S[3,i,j,k]+S[3,i,j,k-1]+S[3,i-1,j,k-1]+S[3,i-1,j,k]$

  else if $mode=1$ **then**

$s_0 \leftarrow S[1, i, j, k]$

$sumspin \leftarrow S[0, i, j, k]+S[0, i\_prime, j, k]+S[0, i\_prime, j\_prime, k]+S[0, i, j\_prime, k]+ S[2, i, j, k] + S[2, i\_prime, j, k] + S[2, i\_prime, j, k-1] + S[2, i, j, k-1] + S[3, i, j, k] + S[3, i, j\_prime, k] + S[3, i, j\_prime, k-1] + S[3, i, j, k-1]$

else if $mode = 2$ **then**

$s_0 \leftarrow S[2, i, j, k]$

$sumspin \leftarrow S[3, i, j, k] + S[3, i, j\_prime, k] + S[3, i-1, j\_prime, k] + S[3, i-1, j, k] + S[1, i, j, k] + S[1, i, j, k\_prime] + S[1, i-1, j, k\_prime] + S[1, i-1, j, k] + S[0, i, j, k] + S[0, i, j\_prime, k] + S[0, i, j\_prime, k\_prime] + S[0, i, j, k\_prime]$

else if $mode = 3$ **then**

$s_0 \leftarrow S[3, i, j, k]$

$sumspin \leftarrow S[2, i, j, k]+S[2, i\_prime, j, k]+S[2, i\_prime, j-1, k]+S[2, i, j-1, k]+S[0, i, j, k]+S[0, i\_prime, j, k]+S[0, i\_prime, j, k\_prime]+S[0, i, j, k\_prime]+ S[1, i, j, k] + S[1, i, j, k\_prime] + S[1, i, j-1, k\_prime] + S[1, i, j-1, k]$

end if

$H_1 \leftarrow -J \cdot s_0 \cdot sumspin$

$H_2 \leftarrow -J \cdot newspin \cdot sumspin$

return H_1, H_2

end function

function METROPOLIS(S, T)

for $mode = 0 \to 3$ **do**

for $i = 0 \to N-1$ **do**

for $j = 0 \to N-1$ **do**

for $k = 0 \to N-1$ **do**

$newspin \leftarrow$ SGENERATOR

$energyBefore, energyLater \leftarrow$ GETENERGY$(mode, i, j, k, S, newspin)$

$\alpha \leftarrow$ the minimum of $e^{-\frac{energyLater-energyBefore}{k_B T}}$ and 1

if $X \leq \alpha$ **then** $\triangleright\ X \sim U[0,1)$

$S[mode, i, j, k] \leftarrow newspin$

end if

end for

end for

  end for
 end for
end function
function GETEQUILIBRIUM($N, temperature, loop$)
 set all element of S to be $[0,0,1]$
 for $item = 0 \to loop - 1$ **do**
  $S \leftarrow$METROPOLIS$(S, temperature)$
 end for
 calculate the average spin of all S element $avmagnetism$
end function
for $i = 0 \to \dfrac{Tinterval[1]}{Tstep} + 1$ **do**
 $Tlist[i] \leftarrow Tinterval[0] + i \cdot Tstep$
end for
for $T \in Tlist$ **do**
 for $i = 0 \to time - 1$ **do**
  $M \leftarrow$GETEQUILIBRIUM$(N, T, loop)$
  $mlist[i] \leftarrow \|M\|$
 end for
 calculate the average value of $mlist$: $magnetization$
 plot $(T, magnetization)$
end for

4、输出结果

将程序的可调参数设置为如下值，运行得到相应的 M-T 图。

N	5	$loop$	200
$time$	10	$Tstep$	0.05
$Tinterval$	[0.0001,10]		

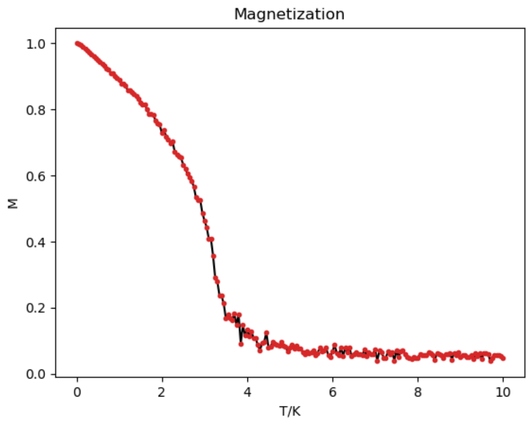


图 1 M-T 图

从图中看到，该面心立方晶体的居里温度 T_c 约为 $4K$。