论文

3维有限宽度Ising模型的模拟计算

曹斌^{1,2}, 杨薇^{1,2}, 崔春翔^{1,2*}

1. 河北省新型功能材料重点实验室, 天津 300130;

2. 河北工业大学材料学院, 天津 300130

* 联系人, E-mail: hutcui@hebut.edu.cn

收稿日期: 2016-09-04; 接受日期: 2016-10-26; 网络出版日期: 2017-03-10

国家自然科学基金(编号: 51271070)、河北省自然科学基金(编号: E2014202008, E2016202406)、国际科技合作计划项目(编号: 2010DFA51920)、河北省高等学校科学技术研究重点项目(编号: ZH2011202)和河北省新型功能材料重点实验室资助

摘要 本文发展了一种计算方法将3维Ising模型的转化矩阵 V_1 替换为一个秩更小的转化矩阵. 将转化矩阵 V_1 表示为基矢量的线性叠加, 我们发现可以将基矢量分为几组, 一个基矢量与 V_1 的矩阵乘积可以被表示为同组基矢量的线性叠加. 以此为原理, 我们建立了一个新的转化矩阵 V_2 来描述一个基矢量和 V_1 的乘积与同组基矢量之间的关系, 而一组包含基矢量的个数就是 V_2 的秩. V_2 的秩比 V_1 小得多并包含最大特征值. 本文用此方法计算了单位比热和单位磁矩. 结果显示存在一对温度和磁场的组合使比热取得最大值, 当 N_1N_2 增加时, 比热峰值也增加.

关键词 Ising模型, 磁序, 比热, 统计力学**PACS:** 05.50.+q, 75.10.Hk, 75.40.-s, 64.60.De

1 引言

自从Onsager^[1]给出2维Ising模型精确解以来, 3维Ising模型精确解引起了广大研究者的兴趣^[2-6]. 3维Ising模型可以描述晶体的磁性, 还可以用来对合金中的有序-无序转变等现象进行解释, 为磁性材料的研究提供理论基础. 例如, Ising模型中有原子间交换能和原子磁矩两个参数, 如果交换能大, 磁矩小, 材料磁性不容易被外部磁场改变, 就是硬磁材料, 如果交换能小, 磁矩大, 材料磁性就容易被外部磁场改变, 就是软磁材料. 因此, 3维Ising模型对于软硬磁耦合纳米线材料的研究具有很重要的理论意义. 现有的几种研究3

维Ising模型精确解的技术有: 重整化群方法^[7]、簇变量方法^[8]、线性链近似法^[9]、分子长近似法^[10]等. 在另一方面, 以Monte Carlo方法为代表的数值模拟计算方法近年来也取得了很大进展. Liu等人^[11]研究了外磁场条件下各向异性经典磁铁的非线性磁化动力学机制. Jiang等人^[12]使用有效场方法研究了自旋为1的Ising模型相图并给出了二级相变的表达式. El-Showk等人^[13]使用3维共形场理论的交叉对称条件和么正性来研究3维Ising模型, 发现3维Ising模型处于参数空间的边界上因此难以求解. Jin等人^[14]使用Monte Carlo方法模拟计算了Ising模型的一级相变, 并研究了热力学参数的临界条件. Wu等人^[15]使用边界传播子算法研

引用格式: 曹斌, 杨薇, 崔春翔. 3维有限宽度Ising模型的模拟计算. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 060503
Cao B, Yang W, Cui C X. Simulation of 3-dimensional finite Ising model (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 060503, doi: 10.1360/SSPMA2016-00377

究有限宽度的Ising模型,发现边界条件会对自由能和比热的计算结果构成很大影响,计算结果和Onsager模型的理论值取得了一致. Deviren等人^[16]使用有效场理论研究了时间相关的外磁场中的Ising模型并发现相变点处于最小耦合点. Heyl等人^[17]发现3维Ising模型在相变点上具有周期非线性特点. Del Campo等人^[18]使用渐进参数法研究了Ising模型在相变点附近的热力学性质. Ates等人^[19]研究了Ising模型相变作为一级相变的热力学参数变化. Zhang等人^[20]使用Ising模型解释了磁铁矫顽现象. Barnett等人^[21]比较了Ising模型相变点附近的长程交互作用和短程交互作用间的不同. Schoelz等人^[22]利用Ising模型研究了石墨烯在相变点附近的热力学变化. Dublenych^[23]通过计算得到了Ising模型在外场条件下的基态精确解. Lau等人^[24]使用数值模拟方法计算了Ising模型的相变熵. Langer^[25]计算了临界点附近的相关性长度. Fytas等人^[26]通过计算模拟方法求解Ising模型配分函数并发现比热在相变点附近指数升高. Wu等人^[15]计算了Ising模型的自由能和比热在相变点附近的级数展开. Corberi等人^[27]认为在相变点附近,热力学参数对数增长. Powalski等人^[28]研究了3角Ising模型并发现了一个二级量子相变现象. Damski^[29]推导出了一个量子Ising模型保真率的封闭解. Bastidas等人^[30]研究了各向异性Ising模型的非平衡相变. Henry等人^[31]使用自旋波理论研究了Ising模型基态的性质并发现基态保持稳定. 而Jin等人^[32]则研究了Ising模型相变时的稳定性问题并发现临界温度以下系统保持稳定. Blöte等人^[33]使用分布式计算方法大大提升了Monte Carlo方法计算精度. 目前的主流计算方法均使用了有效场理论,而Ising模型的核心问题是精确求解转化矩阵的最大特征值.

本文将研究一个 $N_1 \times N_2 \times N_3$ 的Ising模型特征值求解问题,其中 N_1 和 N_2 均取有限值. 第二部分建立一个 $2^{N_1 N_2} \times 2^{N_1 N_2}$ 的转化矩阵 V_1 ,然后建立一个秩更小且包含 V_1 最大特征值 $\lambda_{\max}$ 的矩阵 V_2 . 第三部分利用 $\lambda_{\max}$ 计算单位比热 C_{pa} 和单位磁化强度 M_{pa} . 第四部分讨论计算结果.

2 基本模型

3维Ising模型是 $N_1 \times N_2 \times N_3$ 的立方点阵. 每个格点上的原子自旋为+1或-1. 本文用 $\sigma_{j,k,l} = \pm 1$ 来描述对应

原子的自旋状态. 系统总能量 E 可表示为

$$E = \sum_{j=0}^{N_1-1} \sum_{h=0}^{N_2-1} \sum_{l=0}^{N_3-1} (-J_1 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j+1,h,l} - J_2 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j,h+1,l} - J_3 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j,h,l+1} - \mu B \sigma_{j,h,l}), \quad (1)$$

其中 J_1, J_2, J_3 是相邻原子间的交换能, μ 是自旋磁矩, B 是磁场强度. 边界条件为

$$\sigma_{0,h,l} = \sigma_{N_1,h,l}, \sigma_{j,0,l} = \sigma_{j,N_2,l}, \sigma_{j,h,0} = \sigma_{j,h,N_3}.$$

配分函数为

$$Z = \sum_{\sigma_{j,h,l}=\pm 1} e^{-\frac{E}{kT}}, \quad (2)$$

自由能 F 可由 Z 推导出来, 比热 C 和磁化强度 M 可由 F 推导出来:

$$F = -kT \ln Z, \quad (3)$$

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2}, \quad (4)$$

$$M = -\frac{\partial F}{\partial B}. \quad (5)$$

为了计算 Z ,将原子点阵分为 N_3 层. 每层包含 N_1 排和 N_2 列. 用一个数字 v_l 表示第 l 层的状态, $1 \leq v_l \leq 2^{N_1 N_2}$. E 可表示为

$$E = \sum_{l=0}^{N_3-1} E_1(v_l) + \sum_{l=0}^{N_3-1} E_2(v_l, v_{l+1}), \quad (6)$$

$$E_1(v_l) = \sum_{j=0}^{N_1-1} \sum_{h=0}^{N_2-1} (-J_1 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j+1,h,l} - J_2 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j,h+1,l} - \mu B \sigma_{j,h,l}), \quad (7)$$

$$E_2(v_l, v_{l+1}) = - \sum_{j=0}^{N_1-1} \sum_{h=0}^{N_2-1} J_3 \sigma_{j,h,l} \sigma_{j,h,l+1}. \quad (8)$$

配分函数变为

$$Z = \sum_{v_l} \prod_{l=0}^{N_3-1} e^{\frac{-E_1(v_l) - E_2(v_l, v_{l+1})}{kT}}, \quad (9)$$

$e^{\frac{-E_1(v_l) - E_2(v_l, v_{l+1})}{kT}}$ 是矩阵 V_1 的元素 V_l , v_l 是行数, v_{l+1} 是列数.

Z 可表示为

$$Z = \text{Tr}(V_1^{N_3}) = \lambda_1^{N_3} + \lambda_2^{N_3} + \lambda_3^{N_3} + \dots, \quad (10)$$

这里 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$ 是 V_1 的特征值. 设最大的特征值为 $\lambda_{\max}$, 则当 N_3 无穷大时,

$$\lim_{N_3 \rightarrow \infty} (\lambda_1^{N_3} + \lambda_2^{N_3} + \lambda_3^{N_3} + \dots) = \lambda_1^{N_3}. \quad (11)$$

现在只需求出 V_1 的最大特征值 $\lambda_{\max}$ 即可.

本文用一个特例来说明如何求解 $\lambda_{\max}$. 当 $N_1=2$, $N_2=1$ 时, V_1 可以表示为

$$\begin{aligned} V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B+2J_3}{kT}} D_1 + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B}{kT}} D_2 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B-2J_3}{kT}} D_3 + e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}} (D_4 + D_6) \\ & + e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} \frac{1}{2} (D_5 + D_{10}) \\ & + e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \frac{1}{2} (D_5 - D_{10}) + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B-2J_3}{kT}} D_7 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B}{kT}} D_8 + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B+2J_3}{kT}} D_9, \end{aligned} \quad (12)$$

$$D_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (13)$$

$$D_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (14)$$

$$D_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (15)$$

$$D_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (16)$$

$$D_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

$$D_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (18)$$

$$D_7 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (19)$$

$$D_8 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$D_9 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (21)$$

$$D_{10} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

D_j 和 V_1 的矩阵乘积可表示为

$$\begin{aligned} D_1 V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B+2J_3}{kT}} D_1 + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B}{kT}} D_2 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B-2J_3}{kT}} D_3, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} D_2 V_1 = & 2e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}} (D_1 + D_3) \\ & + \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right) D_2, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} D_3 V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B-2J_3}{kT}} D_1 + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B}{kT}} D_2 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B+2J_3}{kT}} D_3, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} D_4 V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B+2J_3}{kT}} D_4 + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B}{kT}} D_5 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B-2J_3}{kT}} D_6, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} D_5 V_1 = & 2e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}} (D_4 + D_6) \\ & + \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right) D_5, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} D_6 V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B-2J_3}{kT}} D_4 + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B}{kT}} D_5 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B+2J_3}{kT}} D_6, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} D_7 V_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B+2J_3}{kT}} D_7 + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B}{kT}} D_8 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B-2J_3}{kT}} D_9, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} D_8 V_1 = & e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}} 2(D_7 + D_9) \\ & + \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right) D_8, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_9 \mathbf{V}_1 = & e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B-2J_3}{kT}} \mathbf{D}_7 + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B}{kT}} \mathbf{D}_8 \\ & + e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B+2J_3}{kT}} \mathbf{D}_9, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\mathbf{D}_{10} \mathbf{V}_1 = \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right) \mathbf{D}_{10}. \quad (32)$$

$\mathbf{D}_1 \mathbf{V}_1 - \mathbf{D}_3 \mathbf{V}_1$ 可以表示为 $\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_3$ 的线性组合. $\mathbf{D}_4 \mathbf{V}_1 - \mathbf{D}_6 \mathbf{V}_1$ 可以表示为 $\mathbf{D}_4 - \mathbf{D}_6$ 的线性组合. $\mathbf{D}_7 \mathbf{V}_1 - \mathbf{D}_9 \mathbf{V}_1$ 可以表示为 $\mathbf{D}_7 - \mathbf{D}_9$ 的线性组合. $\mathbf{D}_{10} \mathbf{V}_1$ 是常数乘以 $\mathbf{D}_{10}$. 因此可以将 $\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_{10}$ 分为4组: $\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_3$, $\mathbf{D}_4 - \mathbf{D}_6$, $\mathbf{D}_7 - \mathbf{D}_9$ 和 $\mathbf{D}_{10}$. $\mathbf{D}_j \mathbf{V}_1$ 可以被表示为同组矩阵 $\mathbf{D}_k$ 的线性组合, 这样可以利用 $\mathbf{D}_1 - \mathbf{D}_{10}$ 的分组计算 $\mathbf{V}_1^{N_3}$. 为此我们建立一个新的转化矩阵 $\mathbf{V}_2$ 来描述同组 $\mathbf{D}_j$ 之间的关系:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_2 = & e^{\frac{2J_2}{kT}} \\ & \times \begin{bmatrix} e^{\frac{2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_1-2\mu B}{kT}} & e^{\frac{-2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} \\ 2e^{\frac{-2J_1}{kT}} & e^{\frac{2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{-2J_3-2J_1}{kT}} & 2e^{\frac{-2J_1}{kT}} \\ e^{\frac{-2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_1+2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (33)$$

$$(a_1 \mathbf{D}_1 + a_2 \mathbf{D}_2 + a_3 \mathbf{D}_3) \mathbf{V}_1^n = a_{10} \mathbf{D}_1 + a_{11} \mathbf{D}_2 + a_{12} \mathbf{D}_3, \quad (34)$$

$$[a_{10} \ a_{11} \ a_{12}] = [a_1 \ a_2 \ a_3] \mathbf{V}_2^n, \quad (35)$$

$$(a_4 \mathbf{D}_4 + a_5 \mathbf{D}_5 + a_6 \mathbf{D}_6) \mathbf{V}_1^n = a_{13} \mathbf{D}_4 + a_{14} \mathbf{D}_5 + a_{15} \mathbf{D}_6, \quad (36)$$

$$[a_{13} \ a_{14} \ a_{15}] = [a_4 \ a_5 \ a_6] \mathbf{V}_2^n, \quad (37)$$

$$(a_7 \mathbf{D}_7 + a_8 \mathbf{D}_8 + a_9 \mathbf{D}_9) \mathbf{V}_1^n = a_{16} \mathbf{D}_7 + a_{17} \mathbf{D}_8 + a_{18} \mathbf{D}_9, \quad (38)$$

$$[a_{16} \ a_{17} \ a_{18}] = [a_7 \ a_8 \ a_9] \mathbf{V}_2^n, \quad (39)$$

$$\mathbf{D}_{10} \mathbf{V}_1^n = \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right)^n \mathbf{D}_{10}. \quad (40)$$

接下来利用 $\mathbf{V}_2$ 来计算 $\mathbf{V}_1^{N_3}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_1^{N_3} = & \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_1^{N_3-1} \\ = & (a_1 \mathbf{D}_1 + a_2 \mathbf{D}_2 + a_3 \mathbf{D}_3 + a_4 \mathbf{D}_4 + a_5 \mathbf{D}_5 + a_6 \mathbf{D}_6 \\ & + a_7 \mathbf{D}_7 + a_8 \mathbf{D}_8 + a_9 \mathbf{D}_9 + a_{10} \mathbf{D}_{10}) \mathbf{V}_1^{N_3-1} \\ = & a_{10} \mathbf{D}_1 + a_{11} \mathbf{D}_2 + a_{12} \mathbf{D}_3 + a_{13} \mathbf{D}_4 + a_{14} \mathbf{D}_5 \\ & + a_{15} \mathbf{D}_6 + a_{16} \mathbf{D}_7 + a_{17} \mathbf{D}_8 + a_{18} \mathbf{D}_9 \\ & + a_{19} \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right)^{N_3-1} \mathbf{D}_{10}, \end{aligned} \quad (41)$$

其中

$$a_1 = e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B+2J_3}{kT}}, \quad a_2 = e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B}{kT}},$$

$$a_3 = e^{\frac{2J_1+2J_2-2\mu B-2J_3}{kT}}, \quad a_4 = e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}},$$

$$a_5 = \frac{1}{2} e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} + \frac{1}{2} e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}},$$

$$a_6 = e^{\frac{-2J_1+2J_2}{kT}}, \quad a_7 = e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B-2J_3}{kT}},$$

$$a_8 = e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B}{kT}}, \quad a_9 = e^{\frac{2J_1+2J_2+2\mu B+2J_3}{kT}},$$

$$a_{19} = \frac{1}{2} \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right),$$

利用式(35), (37), (39), 我们可以得到 $a_{10} - a_{18}$:

$$[a_{10} \ a_{11} \ a_{12}] = [a_1 \ a_2 \ a_3] \mathbf{V}_2^{N_3-1}, \quad (42)$$

$$[a_{13} \ a_{14} \ a_{15}] = [a_4 \ a_5 \ a_6] \mathbf{V}_2^{N_3-1}, \quad (43)$$

$$[a_{16} \ a_{17} \ a_{18}] = [a_7 \ a_8 \ a_9] \mathbf{V}_2^{N_3-1}. \quad (44)$$

$\mathbf{V}_1^{N_3}$ 的迹为

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\mathbf{V}_1^{N_3}) = & a_{10} + 2a_{14} + a_{18} \\ & + 2a_{19} \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right)^{N_3-1} \\ = & [a_1 \ a_2 \ a_3] \mathbf{V}_2^{N_3-1} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + 2[a_4 \ a_5 \ a_6] \mathbf{V}_2^{N_3-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + [a_7 \ a_8 \ a_9] \mathbf{V}_2^{N_3-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ & + 2a_{19} \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right)^{N_3-1}, \end{aligned} \quad (45)$$

这里的 $\mathbf{V}_2^{N_3-1}$ 可以表示为

$$\mathbf{V}_2^{N_3-1} = \mathbf{G} \begin{bmatrix} \alpha_1^{N_3-1} & & \\ & \alpha_2^{N_3-1} & \\ & & \alpha_3^{N_3-1} \end{bmatrix} \mathbf{G}^{-1}, \quad (46)$$

$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 是 $\mathbf{V}_2$ 的特征值, $\mathbf{G}$ 是包含3个对应 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 的特征矢量的 3×3 矩阵, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 的表达式为

$$\alpha_1 = e^{\frac{2J_2}{kT}} \left[a_{21} - \frac{a_{20}}{3a_{21}} + \frac{1}{3} \left(e^{\frac{2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{-2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} \right) \right], \quad (47)$$

$$\alpha_2 = e^{\frac{2J_2}{kT}} \left[a_{21} e^{i\frac{2\pi}{3}} - \frac{a_{20}}{3a_{21} e^{i\frac{2\pi}{3}}} + \frac{1}{3} \left(e^{\frac{2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{-2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} \right) \right], \quad (48)$$

$$\alpha_3 = e^{\frac{2J_2}{kT}} \left[a_{21} e^{i\frac{-2\pi}{3}} - \frac{a_{20}}{3a_{21} e^{i\frac{-2\pi}{3}}} + \frac{1}{3} \left(e^{\frac{2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{-2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} \right) \right], \quad (49)$$

$$\begin{aligned} a_{20} = & e^{\frac{4J_1}{kT}} \left[\left(e^{\frac{4J_3}{kT}} - e^{\frac{-4J_3}{kT}} \right) - \frac{1}{3} e^{\frac{4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right)^2 \right] \\ & + \frac{1}{3} e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 5e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) - \frac{1}{3} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 e^{\frac{-4J_1}{kT}}, \end{aligned} \quad (50)$$

$$a_{21} = \sqrt[3]{-\frac{1}{2}a_{22} \pm \sqrt{a_{23}}}, \quad (51)$$

$$\begin{aligned} a_{22} = & e^{\frac{6J_1}{kT}} \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right) \left[\frac{1}{3} e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{4J_3}{kT}} - e^{\frac{-4J_3}{kT}} \right) - \frac{2}{27} e^{\frac{6J_3}{kT}} \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right)^2 \right] \\ & + \frac{1}{9} e^{\frac{2J_1}{kT}} e^{\frac{4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 5e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right)^2 + \frac{1}{3} e^{\frac{2J_1}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \\ & + \left(e^{\frac{-2J_3}{kT}} - e^{\frac{2J_3}{kT}} \right)^3 + \frac{1}{9} e^{\frac{-2J_1}{kT}} e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 5e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \\ & - e^{\frac{-6J_1}{kT}} \frac{2}{27} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^3, \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} a_{23} = & \frac{1}{108} e^{\frac{12J_1}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left[-4e^{\frac{-4J_3}{kT}} - e^{\frac{4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} - e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right)^2 \right] \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \\ & + \frac{1}{54} e^{\frac{8J_1}{kT}} e^{\frac{6J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 3e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right) \\ & \times \left[\left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right)^2 - 4e^{\frac{-4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 3e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \right] - \frac{1}{108} e^{\frac{4J_1}{kT}} e^{\frac{8J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} \right)^4 \\ & + \frac{1}{54} e^{\frac{4J_1}{kT}} e^{\frac{4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{4J_3}{kT}} + 14 - 23e^{\frac{-4J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right)^2 \\ & + \frac{2}{27} e^{\frac{4J_1}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{8J_3}{kT}} - 14e^{\frac{4J_3}{kT}} + 24 - 14e^{\frac{-4J_3}{kT}} + e^{\frac{-8J_3}{kT}} \right) + \frac{1}{54} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right) \\ & \times \left[e^{\frac{6J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 3e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right)^2 + 2e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right) \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - 2e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \right] \\ & + \frac{1}{108} e^{\frac{-4J_1}{kT}} \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left(e^{\frac{2J_3}{kT}} + e^{\frac{-2J_3}{kT}} \right)^2 \left[4 \left(e^{\frac{4J_3}{kT}} - e^{\frac{-4J_3}{kT}} \right) - e^{\frac{4J_3}{kT}} \left(e^{\frac{2\mu B}{kT}} + e^{\frac{-2\mu B}{kT}} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (53)$$

将式(46)–(53)代入式(45), 就可以得到 $\text{Tr}(\mathbf{V}_1^{N_3})$ 的表达式:

$$\text{Tr}(\mathbf{V}_1^{N_3}) = \alpha_1^{N_3} + \alpha_2^{N_3} + \alpha_3^{N_3} + \left(e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}} \right)^{N_3}. \quad (54)$$

$\mathbf{V}_1$ 的特征值是 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$. $\mathbf{V}_1^{N_3}$ 的迹为

$$\text{Tr}(\mathbf{V}_1^{N_3}) = \lambda_1^{N_3} + \lambda_2^{N_3} + \lambda_3^{N_3} + \lambda_4^{N_3}. \quad (55)$$

我们可以看到 $\text{Tr}(\mathbf{V}_1^{N_3})$ 的两种表达式的相似性. $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 也是 $\mathbf{V}_1$ 的特征值. 下面我们需要研究 $\mathbf{V}_2$ 是否包含 $\mathbf{V}_1$ 的最大特征值. 设 $J_1 = J_2 = J_3 = B = 0$, 则式(33)的 $\mathbf{V}_2$ 和 $\mathbf{V}_1$ 就变成

$$\mathbf{V}_2|_{J_1=J_2=J_3=B=0} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (56)$$

$$\mathbf{V}_1|_{J_1=J_2=J_3=B=0} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (57)$$

显然, $\mathbf{V}_2$ 的特征值是4和0. $\mathbf{V}_2$ 的特征值也是4和0. 对其他情况的 N_1, N_2 而言, $\mathbf{V}_2|_{J_1=J_2=J_3=B=0}$ 的第一行元素是1, 第二行元素是 $f_1 > 0$, 第三行是 $f_2 > 0$, 第 j 行是 $f_j > 0$. 而且 $f_1 + f_2 + f_3 + \dots = 2^{N_1 N_2} - 1$. 因此 $\mathbf{V}_2|_{J_1=J_2=J_3=B=0}$ 的特征值是 $2^{N_1 N_2}$ 和0. $\mathbf{V}_1|_{J_1=J_2=J_3=B=0}$ 的特征值也是 $2^{N_1 N_2}$ 和0. 当 J_1, J_2, J_3, B 变为非零值时, 特征值 $2^{N_1 N_2}$ 和0也会变, 从 $2^{N_1 N_2}$ 演化出来的特征值会比那些从0演化出来的特征值更大. 例如: $N_1 = N_2 = 1$ 时, 两个特征值为

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} e^{\frac{J_1+J_2}{kT}} \left[e^{\frac{-\mu B+J_3}{kT}} + e^{\frac{\mu B+J_3}{kT}} + \sqrt{e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} - 2 \right) + 4e^{\frac{-2J_3}{kT}}} \right], \quad (58)$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} e^{\frac{J_1+J_2}{kT}} \left[e^{\frac{-\mu B+J_3}{kT}} + e^{\frac{\mu B+J_3}{kT}} - \sqrt{e^{\frac{2J_3}{kT}} \left(e^{\frac{-2\mu B}{kT}} + e^{\frac{2\mu B}{kT}} - 2 \right) + 4e^{\frac{-2J_3}{kT}}} \right]. \quad (59)$$

当 J_1, J_2, J_3, B 发生变化时, λ_1 始终是最大特征值. 因此 $\mathbf{V}_2$ 包含 $\mathbf{V}_1$ 的最大特征值, 且的 $\mathbf{V}_2$ 秩明显小于 $\mathbf{V}_1$.

为了进一步说明这个问题, 我们将 $N_1 = 2, N_2 = 1$ 时的转化矩阵 $\mathbf{V}_1$ 进行对角化计算.

$\mathbf{V}_1$ 进行对角化之后, 对角矩阵的4个元素就是4个特征值, 其中3个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ 如式(47)–(49)所示, 第4个特征值 λ_4 是

$$e^{\frac{-2J_1+2J_2+2J_3}{kT}} - e^{\frac{-2J_1+2J_2-2J_3}{kT}}.$$

本文使用的热力学参数为:

$$J_1 = J_2 = J_3 = 1 \text{ kJ/mol},$$

$$\mu = 9.27400949 \times 10^{-24} \text{ J/T},$$

$$k = 1.3806488 \times 10^{-23} \text{ J/K},$$

其中 μ 是单位原子磁矩, k 是波尔兹曼常数.

在 $B=1 \text{ T}$ 情况下, 本文计算了3个温度下对应的对角化矩阵的4个元素的模:

$$T=60 \text{ K}: |\lambda_1| = 1.95 \times 10^5,$$

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = 2.75 \times 10^4, |\lambda_4| = 55.1,$$

$$T=100 \text{ K}: |\lambda_1| = 1.59 \times 10^3,$$

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = 2.22 \times 10^2, |\lambda_4| = 10.9,$$

$$T=140 \text{ K}: |\lambda_1| = 2.06 \times 10^2,$$

$$|\lambda_2| = |\lambda_3| = 28.1, |\lambda_4| = 5.39,$$

其中 λ_1 和 λ_4 始终是正实数, 可以看到, $\mathbf{V}_2$ 包含的特征值 λ_1 始终是模最大的.

我们可以从上面的例子总结建立一个更小的转化矩阵 $\mathbf{V}_2$ 的步骤, 首先将 $\mathbf{V}_1$ 表示为

$$\mathbf{V}_1 = \sum_n e^{\frac{p_n J_1 + q_n J_2 + r_n \mu B + s_n J_3}{kT}} \mathbf{D}_n, \quad (60)$$

$(p_1, q_1, r_1, s_1), (p_2, q_2, r_2, s_2) \dots$ 是不同的整数组. $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \dots \mathbf{D}_w$ 是一系列 $2^{N_1 N_2} \times 2^{N_1 N_2}$ 矩阵, 元素为0或1. 挑选任意两个 $\mathbf{D}_j$ 和 $\mathbf{D}_k$, 如果矩阵乘积 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 能被表示为 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \dots$ 的线性组合, 则继续寻找下一对 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$. 如果 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 不能被表示为 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \dots$ 的线性组合, 则构造一个新的矩阵:

$$\mathbf{D}_{w+1} = \mathbf{D}_j \mathbf{D}_k - a_1 \mathbf{D}_1 - a_2 \mathbf{D}_2 \dots,$$

其中 $a_1, a_2 \dots$ 是 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 和 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 \dots$ 之间的矩阵点积, 这样构造出来的 $\mathbf{D}_{w+1}$ 和原来的 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2 \dots$ 之间保持正交关系, 而且补充了 $\mathbf{D}_{w+1}$ 后, 就能将 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 表示为 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \dots \mathbf{D}_{w+1}$ 的线性叠加了. 如此往复, 直到所有 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 均能表示为 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \dots$ 的线性叠加为止. 我们将这时

的 $\mathbf{D}_1, \mathbf{D}_2, \mathbf{D}_3 \cdots$ 称为完备矩阵序列. 我们发现, 可以将完备矩阵序列分为若干组, 一组矩阵中的任意一个元素 $\mathbf{D}_j$ 和完备矩阵序列中的任意一个元素 $\mathbf{D}_k$ 相乘, $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 总是可以表示为和 $\mathbf{D}_j$ 同组的若干个矩阵的线性叠加. 例如: 其中一组矩阵是只有第一行包含非零元素, 其他各行均为零. 因为 $\mathbf{D}_j$ 只有第一行有非零元素, 所以 $\mathbf{D}_j$ 和 $\mathbf{D}_k$ 相乘后, 乘积 $\mathbf{D}_j \mathbf{D}_k$ 也是只有第一行包含非零元素, 其他各行均为零. 我们可以利用这一点简化计算过程, 即只计算第一行元素不为零的一组矩阵.

在实际的计算过程中, 我们要建立一系列矩阵 $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3 \cdots$, 保证任意 $\mathbf{F}_k \mathbf{V}_1$ 能够表示为 $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3 \cdots$ 的线性叠加.

$$\mathbf{F}_k \mathbf{V}_1 = \sum_l \mathbf{F}_l b_{k,l}, \quad (61)$$

$b_{k,l}$ 就是转化矩阵 $\mathbf{V}_2$ 的元素.

为了计算上的方便, 我们建立的 $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3 \cdots$ 都是只有第一行包含非零元素的矩阵, 我们先利用 $\mathbf{F}_1$ 作为第一个矩阵:

$$\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (62)$$

$\mathbf{F}_1$ 的所有元素为0, 但左上角的元素为1.

设现在已经产生了 w 个矩阵: $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \cdots, \mathbf{F}_w$, 如果存在一对 $\mathbf{F}_k$ 和 $\mathbf{D}_l$, 使得 $\mathbf{F}_k \mathbf{D}_l$ 无法表示为 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_w$ 的线性叠加, 则添加一个新矩阵 $\mathbf{F}_{w+1}$,

$$\mathbf{F}_{w+1} = \mathbf{F}_k \mathbf{D}_l - \sum_{m=1}^w \frac{\mathbf{F}_m[(\mathbf{F}_k \mathbf{D}_l) \cdot \mathbf{F}_m]}{\mathbf{F}_m \cdot \mathbf{F}_m}, \quad (63)$$

其中 $\cdot$ 是矩阵点积符号, $\mathbf{F}_m \cdot \mathbf{F}_n = \sum_{p,q} \mathbf{F}_{m,p,q} \mathbf{F}_{n,p,q}$.

这样产生出来的 $\mathbf{F}_{w+1}$ 和原来的 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_w$ 保持正交关系, 并且可以将 $\mathbf{F}_k \mathbf{D}_l$ 表示为 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_{w+1}$ 的线性叠加.

接下来寻找另一对不能表示为 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_{w+1}$ 的线性叠加的 $\mathbf{F}_k \mathbf{D}_l$, 反复进行这一步, 直到所有的 $\mathbf{F}_k \mathbf{D}_l$ 都能表示为 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_{N_c}$ 的线性叠加. 其中 N_c 是最后的矩阵个数, 也是 $\mathbf{V}_2$ 的秩.

除了第一行以外, $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_{N_c}$ 的所有元素均为0. 为了书写简单, 我们用 $1 \times 2^{N_1 N_2}$ 矢量 $\mathbf{F}'_1 - \mathbf{F}'_{N_c}$ 来替代 $\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_{N_c}$. 为了计算方便, 我们使 $\mathbf{F}'_1 - \mathbf{F}'_{N_c}$ 的元素为0或1. 例如, 如果有一对 $\mathbf{F}'_j$ 和 $\mathbf{F}'_k$ 如下:

$$\mathbf{F}'_j = [1 \ 9 \ 1 \ 1], \quad (64)$$

$$\mathbf{F}'_k = [3 \ -1 \ 3 \ 3]. \quad (65)$$

两个矢量都是在1, 3, 4位置具有相同的元素, 因此可转化为

$$\mathbf{F}'_j = [1 \ 0 \ 1 \ 1], \quad (66)$$

$$\mathbf{F}'_k = [0 \ 1 \ 0 \ 0]. \quad (67)$$

我们将 $2^{N_1 N_2}$ 个位置划分为 N_c 个区域, 每个矢量只有一个对应的区域元素为1, 其他位置的元素均为0.

$\mathbf{V}_2$ 的每一行元素就是 $\mathbf{F}'_k \mathbf{V}_1$ 表示为 $\mathbf{F}'_1 - \mathbf{F}'_{N_c}$ 的线性叠加后的对应系数:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}'_k \mathbf{V}_1 &= b_{k,1} \mathbf{F}'_1 + b_{k,2} \mathbf{F}'_2 + b_{k,3} \mathbf{F}'_3 \cdots, \\ b_{k,m} &= [(\mathbf{F}'_k \mathbf{V}_1)^T \mathbf{F}'_m] / (\mathbf{F}'_m{}^T \mathbf{F}'_m). \end{aligned} \quad (68)$$

当 $N_1=N_2=1$ 时, $\mathbf{V}_2$ 与 $\mathbf{V}_1$ 相同. 当 $N_1=2, N_2=1$ 时, $\mathbf{V}_2$ 为

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_2|_{N_1=2, N_2=1} &= e^{\frac{2J_2}{kT}} \\ &\times \begin{bmatrix} e^{\frac{2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_1-2\mu B}{kT}} & e^{\frac{-2J_3+2J_1-2\mu B}{kT}} \\ 2e^{\frac{-2J_1}{kT}} & e^{\frac{2J_3-2J_1}{kT}} + e^{\frac{-2J_3-2J_1}{kT}} & 2e^{\frac{-2J_1}{kT}} \\ e^{\frac{-2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_1+2\mu B}{kT}} & e^{\frac{2J_3+2J_1+2\mu B}{kT}} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (69)$$

当 $N_1=3, N_2=1$ 时, $\mathbf{V}_2$ 为

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_2|_{N_1=3, N_2=1} &= e^{\frac{3J_2}{kT}} \\ &\times \begin{bmatrix} e^{\frac{3J_1-3\mu B+3J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1-3\mu B+J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1-3\mu B-J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1-3\mu B-3J_3}{kT}} \\ 3e^{\frac{-J_1-\mu B+J_3}{kT}} & \left(2e^{\frac{-J_1-\mu B-J_3}{kT}} + e^{\frac{-J_1-\mu B+3J_3}{kT}} \right) & \left(2e^{\frac{-J_1-\mu B+J_3}{kT}} + e^{\frac{-J_1-\mu B-3J_3}{kT}} \right) & 3e^{\frac{-J_1-\mu B-J_3}{kT}} \\ 3e^{\frac{-J_1+\mu B-J_3}{kT}} & \left(2e^{\frac{-J_1+\mu B+J_3}{kT}} + e^{\frac{-J_1+\mu B-3J_3}{kT}} \right) & \left(2e^{\frac{-J_1+\mu B-J_3}{kT}} + e^{\frac{-J_1+\mu B+3J_3}{kT}} \right) & 3e^{\frac{-J_1+\mu B+J_3}{kT}} \\ e^{\frac{3J_1+3\mu B-3J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1+3\mu B-J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1+3\mu B+J_3}{kT}} & e^{\frac{3J_1+3\mu B+3J_3}{kT}} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (70)$$

其他情况下, $\mathbf{V}_2$ 的秩为

$N_1=3, N_2=1: N_c=4;$

$N_1=4, N_2=1: N_c=6;$

$N_1=2, N_2=2: N_c=7;$

$N_1=5, N_2=1: N_c=8;$

$N_1=6, N_2=1: N_c=13;$

$N_1=3, N_2=2: N_c=13;$

$N_1=7, N_2=1: N_c=18;$

$N_1=8, N_2=1: N_C=30;$
 $N_1=4, N_2=2: N_C=34;$
 $N_1=9, N_2=1: N_C=46;$
 $N_1=3, N_2=3: N_C=36;$
 $N_1=10, N_2=1: N_C=78;$
 $N_1=5, N_2=2: N_C=78;$
 $N_1=11, N_2=1: N_C=126;$
 $N_1=12, N_2=1: N_C=224;$
 $N_1=6, N_2=2: N_C=237;$
 $N_1=4, N_2=3: N_C=158;$
 $N_1=13, N_2=1: N_C=380;$
 $N_1=14, N_2=1: N_C=687;$
 $N_1=7, N_2=2: N_C=687;$
 $N_1=15, N_2=1: N_C=1224;$
 $N_1=5, N_2=3: N_C=707;$
 $N_1=16, N_2=1: N_C=2250;$
 $N_1=8, N_2=2: N_C=2299;$
 $N_1=4, N_2=4: N_C=1459;$
 $N_1=17, N_2=1: N_C=4112;$
 $N_1=18, N_2=1: N_C=7685;$
 $N_1=9, N_2=2: N_C=7685;$
 $N_1=6, N_2=3: N_C=4236;$
 $N_1=19, N_2=1: N_C=14310.$

我们可以看到 N_C 远小于 $2^{N_1N_2}$.

3 计算

图1显示了单位原子比热 $C_{pa} = \frac{C}{N_1N_2N_3}$ 随温度 T 和磁场强度 B 发生的变化. 当 $B=0$ 时, C_{pa} 在 $T=47.966$ K时达到最大值 1.94×10^{-23} J/K. 但 C_{pa} 的最大值 2.142907×10^{-23} J/K出现在 $T=49.178$ K, $B=\pm 4.1715$ T. 当磁场强度 B 的值固定时, 存在一个对应的温度 T_C 使 C_{pa} 达到最大值. 当磁场强度 B 增加时, T_C 也会变大. 当 $B=0$ 时, T_C 取最小值.

本文用 T_X 和 B_X 表示 C_{pa} 取最大值时的温度和磁场强度, T_0 表示 $B=0$ 情况下 C_{pa} 达到最大值时对应的温度. 下面是几种情况下 T_X , B_X 和 T_0 的取值:

$N_1=17, N_2=1: T_X=27.795$ K,
 $B_X=\pm 1.372$ T, $T_0=27.249$ K;
 $N_1=16, N_2=1: T_X=27.598$ K,
 $B_X=\pm 1.135$ T, $T_0=27.245$ K;
 $N_1=8, N_2=2: T_X=44.031$ K,

$B_X=\pm 3.508$ T, $T_0=43.177$ K;
 $N_1=4, N_2=4: T_X=49.080$ K,
 $B_X=\pm 4.426$ T, $T_0=48.063$ K;
 $N_1=15, N_2=1: T_X=27.835$ K,
 $B_X=\pm 1.603$ T, $T_0=27.232$ K;
 $N_1=5, N_2=3: T_X=48.466$ K,
 $B_X=\pm 5.222$ T, $T_0=47.192$ K;
 $N_1=7, N_2=2: T_X=44.048$ K,
 $B_X=\pm 4.168$ T, $T_0=43.156$ K.

图2显示了不同温度下单原子磁化强度 $M_{pa} = \frac{M}{N_1N_2N_3}$ 随磁场 B 变化的曲线. 可以看到 M_{pa} 随温度升高而变小. 如果磁场强度 B 足够大, 则 M_{pa} 增加的速度变慢, 也就是达到了磁饱和状态.

图1 不同温度下 C_{pa} 随磁场变化的曲线, $N_1=N_2=4$
Figure 1 C_{pa} versus B with different temperatures, $N_1=N_2=4$.

图2 不同温度下 M_{pa} 随 B 发生变化的曲线, $N_1=N_2=4$
Figure 2 M_{pa} versus B with different temperatures, $N_1=N_2=4$.

图3 $B=0$ 情况下 C_{pa} 随温度变化的曲线, $T'=T-T_0$
Figure 3 C_{pa} in different cases when $B=0$, $T'=T-T_0$.

图3显示了 $B=0$ 时, 不同格点数情况下 C_{pa} 随温度变化的曲线. 我们用 $T'=T-T_0$ 替代普通温度, 这是为了能直接比较不同格点数情况下 C_{pa} 的峰值. T_0 是无磁场情况下 C_{pa} 达到峰值时对应的温度. 可以看到当 N_1N_2 增加时, C_{pa} 的峰值也会增加. 如果 N_1N_2 无穷大, C_{pa} 峰值也会趋向于无穷大. 临界温度 T_c 会随着磁场强度发生变化.

4 结论

本文以 $2^{N_1N_2} \times 2^{N_1N_2}$ 的转化矩阵 V_1 为基础建立了一个秩更小且包含最大特征值的转化矩阵 V_2 . 然后计算了单位原子比热 C_{pa} 和单位原子磁化强度 M_{pa} . 我们发现存在着一对特定的温度 T 和磁场强度 B 使 C_{pa} 取得最大值. 当 N_1N_2 增加时, C_{pa} 的峰值也会增加.

参考文献

- 1 Onsager L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys Rev*, 1944, 65: 117–149
- 2 Gao Z, Xu J H, Wang Z L. Critical behavior at the surface of a semi-infinite mixed-spin ising system with surface random field and amorphism (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 1999, 48: 2131–2136 [高瞻, 徐坚宏, 王振林. 无规场非晶化表面的临界行为. *物理学报*, 1999, 48: 2131–2136]
- 3 Shao Y Z, Lan T, Lin G M. Dynamical transition and tricritical points of 3d kinetic ising spin system (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2001, 50: 942–947 [邵元智, 蓝图, 林光明. 三维动态Ising模型中的非平衡相变: 三临界点的存在. *物理学报*, 2001, 50: 942–947]
- 4 Laaboudi B, Saber M, Benaboud A, et al. Temperature dependences of the order parameters of a magnetic Ising superlattice of two ferromagnet materials with spins $\mu=1/2$ and $S=1$. *Chin Phys B*, 1999, 8: 199–207
- 5 Ni J, Gu B L. Ferrimagnetic phases of the blume-emery-griffiths model and the potts model on the diamond lattice. *Chin Phys B*, 2000, 9: 469–473
- 6 Deng L L, Yan S L. Critical properties of the transverse ferromagnetic spin system with random single-ion anisotropy. *Chin Phys B*, 2002, 11: 383–388
- 7 Pollard R J, McCann V H, Ward J B. Magnetic structures of α -MnS and MnSe from ^{57}Fe Mossbauer spectroscopy. *J Phys C-Solid State Phys*, 1983, 16: 345–353
- 8 Ng W M, Barry J H. Cluster-variation method applied in the pair approximation to the $S=1$ Ising ferromagnet having additional single-ion-type uniaxial anisotropy. *Phys Rev B*, 1978, 17: 3675–3683
- 9 Chakraborty K G, Tucker J W. Linear chain approximation for an anisotropic cubic spin-one Ising model. *Phys A-Statist Mech Its Appl*, 1986, 137: 111–121
- 10 Kaufman M, Kanner M. Random-field Blume-Capel model: Mean-field theory. *Phys Rev B*, 1990, 42: 2378–2382
- 11 Liu W M, Wang X B, Pu F C, et al. Nonlinear dynamics of the magnetization in an anisotropic ferromagnet with a magnetic field. *Phys Rev E*, 1996, 54: 4612–4625
- 12 Jiang X F, Li J L, Zhong J L, et al. Effect of a crystal field on phase transitions in a spin-1 transverse Ising model. *Phys Rev B*, 1993, 47: 827–830
- 13 El-Showk S, Paulos M F, Poland D, et al. Solving the 3D Ising model with the conformal bootstrap. *Phys Rev D*, 2012, 86: 025022, arXiv: 1203.6064
- 14 Jin S, Sen A, Sandvik A W. Ashkin-Teller criticality and pseudo first-order behavior in a frustrated Ising model on the square lattice. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 045702, arXiv: 1110.5874
- 15 Wu X, Izmailian N, Guo W. Finite-size behavior of the critical Ising model on a rectangle with free boundaries. *Phys Rev E*, 2012, 86: 041149, arXiv: 1207.4540
- 16 Deviren B, Canko O, Keskin M. Kinetic Ising model in a time-dependent oscillating external magnetic field: Effective-field theory. *Chin Phys B*, 2010, 19: 050518
- 17 Heyl M, Polkovnikov A, Kehrein S. Dynamical quantum phase transitions in the transverse-field Ising model. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 135704, arXiv: 1206.2505

- 18 Del Campo A, Rams M M, Zurek W H. Assisted finite-rate adiabatic passage across a quantum critical point: Exact solution for the quantum Ising model. [Phys Rev Lett](#), 2012, 109: 115703, arXiv: [1206.2670](#)
- 19 Ates C, Olmos B, Garrahan J P, et al. Dynamical phases and intermittency of the dissipative quantum Ising model. [Phys Rev A](#), 2012, 85: 043620, arXiv: [1112.4273](#)
- 20 Zhang S, Li J, Gilbert I, et al. Perpendicular magnetization and generic realization of the Ising model in artificial spin ice. [Phys Rev Lett](#), 2012, 109: 087201, arXiv: [1207.1456](#)
- 21 Barnett L, Lizier J T, Harré M, et al. Information flow in a kinetic Ising model peaks in the disordered phase. [Phys Rev Lett](#), 2013, 111: 177203
- 22 Schoelz J K, Xu P, Meunier V, et al. Graphene ripples as a realization of a two-dimensional Ising model: A scanning tunneling microscope study. [Phys Rev B](#), 2015, 91: 045413, arXiv: [1501.04129](#)
- 23 Dublenych Y I. Ground states of the Ising model on the shastry-sutherland lattice and the origin of the fractional magnetization plateaus in rare-earth-metal tetraborides. [Phys Rev Lett](#), 2012, 109: 167202, arXiv: [1207.3030](#)
- 24 Lau H W, Grassberger P. Information theoretic aspects of the two-dimensional Ising model. [Phys Rev E](#), 2013, 87: 022128, arXiv: [1210.5707](#)
- 25 Langer J S. Ising model of a glass transition. [Phys Rev E](#), 2013, 88: 012122
- 26 Fytas N G, Martín-Mayor V. Universality in the three-dimensional random-field Ising model. [Phys Rev Lett](#), 2013, 110: 227201, arXiv: [1304.0318](#)
- 27 Corberi F, Lippiello E, Mukherjee A, et al. Crossover in growth law and violation of superuniversality in the random-field Ising model. [Phys Rev E](#), 2012, 85: 021141, arXiv: [1202.1534](#)
- 28 Powalski M, Coester K, Moessner R, et al. Disorder by disorder and flat bands in the kagome transverse field Ising model. [Phys Rev B](#), 2013, 87: 054404, arXiv: [1212.0736](#)
- 29 Damski B. Fidelity susceptibility of the quantum Ising model in a transverse field: The exact solution. [Phys Rev E](#), 2013, 87: 052131, arXiv: [1212.1528](#)
- 30 Bastidas V M, Emary C, Schaller G, et al. Nonequilibrium quantum phase transitions in the Ising model. [Phys Rev A](#), 2012, 86: 063627, arXiv: [1207.5242](#)
- 31 Henry L P, Holdsworth P C W, Mila F, et al. Spin-wave analysis of the transverse-field Ising model on the checkerboard lattice. [Phys Rev B](#), 2012, 85: 134427, arXiv: [1202.1462](#)
- 32 Jin S, Sen A, Guo W, et al. Phase transitions in the frustrated Ising model on the square lattice. [Phys Rev B](#), 2013, 87: 144406, arXiv: [1212.5339](#)
- 33 Blöte H W J, Shchur L N, Talapov A L. The cluster processor: New results. [Int J Mod Phys C](#), 1999, 10: 1137–1148

Simulation of 3-dimensional finite Ising model

CAO Bin^{1,2}, YANG Wei^{1,2} & CUI ChunXiang^{1,2*}

¹ Key Lab for New Type of Functional Materials in Hebei Province, TianJin 300130, China;

² School of Material Science and Engineering, Hebei University of Technology, TianJin 300130, China

We have developed a method to change the transfer matrix V_1 of 3D Ising model into a much smaller transfer matrix. V_1 can be written as the linear combination of basic vectors. We discover that these basic vectors can be divided into several groups. The point product of one basic vector and V_1 can be written as the linear combination of basic vectors from the same group. Based on that, we establish a new transfer matrix V_2 to describe the relationship between basic vectors of the same group. The number of members from the same group is the order of V_2 . V_2 is much smaller than V_1 and contains the largest eigenvalue of V_1 . We use this method to calculate the specific heat and magnetic momentum per atom. The results show that there's a pair of temperature and magnetic field strength that can make the specific heat get to its maximum value. When N_1N_2 increases, the maximum value of specific heat increases too.

Ising model, magnetic ordering, specific heat, statistical mechanics

PACS: 05.50.+q, 75.10.Hk, 75.40.-s, 64.60.De

doi: [10.1360/SSPMA2016-00377](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00377)