

# 六方晶格上的经典二聚体模型有限温相变的蒙特卡洛研究

靳小博, 李方楠, 刘逸奇\*

Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China

我们研究了六方晶格上的经典 Dimer 模型, dimer 之间存在倾向于使它们形成  $\infty$  状结构的相互作用势。这个模型与六方晶格上的量子 Dimer 模型的经典极限一致。通过蒙特卡洛模拟的方法, 我们发现体系存在从低温有序相到高温无序相的转变, 体系不发散的比热结果与正方晶格经典 Dimer 模型一致, 表明体系可能经历 KT 相变。我们定义了两种序参量来描述体系随温度变化行为, 结果表明两序参量都能很好的体现体系的有序程度和相变行为。

## I. 引言

二聚体 (dimers) 指 Resonating Valence Bond 连接两体形成的成双形态。二聚体密铺于晶格之上的模型最早在经典统计力学领域被提出 [1], 二维晶格上二聚体密铺问题 (不能重叠) 的严格数值解, 即有多少种密铺情况的问题于十九世纪六十年代被解决 [2-4]。随着 Resonating Valence Bond (RVB) 理论的发展, 量子二聚体模型 (QDM) 作为描述短程 RVB 基态 (即只有最近邻自旋磁子之间会形成 Resonating Valence Bond) 的模型由 Rokhsar 和 Kivelson 二人提出 [5]。近年来随着其与 RVB 理论相联系的工作 [6, 7] 的发表, 二聚体模型重新引起了人们的关注, 其中一项很重要的工作是对六方晶格上的有相互作用的量子二聚体模型的相图之研究 [8]。

在以往的研究中, 量子情形下的二聚体模型更受到关注, 无论是正方晶格还是六角晶格; 正方晶格上的经典二聚体模型也有较多工作, 其中 Fabien Alet 等人的工作 [9] 表明该体系在低温有序相和高温相之间经历了 Kosterlitz-Thouless (KT) 相变。因此我们思考六角晶格上的经典二聚体模型有怎样的相变行为, 并且为更直观清晰地理解量子二聚体模型的有限温相图, 我们应用 Monte Carlo 方法对六方晶格上有相互作用的经典二聚体模型可能发生的有限温相变进行了研究。我们主要模拟研究了不同尺寸晶格下体系比热容随温度的变化, 发现在有限温下随温度升高体系存在有序相到无序相的转

变, 并且有可能是 Kosterlitz-Thouless (KT) 相变。另外我们针对经典体系定义了两种不同的序参量, 并比较了它们对体系有序程度以及相变点的表征情况。为更准确地找到相变点位置, 我们学习了 Binder cumulant 的定义并加入模拟研究中。最后我们将不同温度下每一次测量得到的序参量投点于二维 XY 图中, 以期更详细地展示体系相变行为。

文章结构如下, 第二部分主要介绍所研究模型和模拟方法, 第三部分讨论热力学量的定义, 第四部分展示模拟结果。

## II. 模型和方法

### A. 经典 Dimer 模型

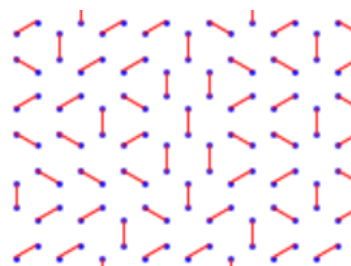


图 1: 一个 bond (红线) 连接两个单体 (蓝点) 即为一个 singlet, 图为六方晶格下的一种 singlet 密铺的状态, 保证每个格点都与另一格点配对

我们研究的是相互之间有作用的二聚体密铺于六方晶格之上的这样一个模型 (Fig.1)。在对六方晶格量子体系 (QDM) 的研究中 [8], 体系哈密顿量如下:

\* 按姓名拼音排序

$$\begin{aligned}
H_{QDM} &= -t\hat{T} + v\hat{V} \\
&= -t(|\zeta\rangle\langle\zeta| + h.c.) + v(|\zeta\rangle\langle\zeta| + |\zeta\rangle\langle\zeta|)
\end{aligned}
\quad (1)$$

其中第一项为动能项，它倾向于使式中类似苯环的结构旋转  $60^\circ$ ，这是考虑量子体系带来的结果；第二项为势能项，我们研究经典极限下的二聚体模型，因此只取势能项，它代表所有晶格中二聚体占据位置形成这样或那样结构的晶格的数目。这样定义与正方晶格上的经典二聚体模型类似 [9]。因此，体系的配分函数和能量可定义如下：

$$Z = \sum_c \exp(-\beta E_c) \quad (2)$$

$$E_c = v[N^c(\zeta) + N^c(\zeta)] \quad (3)$$

配分函数中对  $c$  求和即是对二聚体密铺于六方晶格上的所有可能情况求和，能量表示  $c$  情况下体系能量正比于式中这两种晶格的数目。 $v$  是势能系数，这里我们取  $v = -1$ ，则体系倾向于更多地形成能量式中所示晶格。模型直观示意图见 Fig.2，这是在以下模型下低温出现的基态。注意二聚体密铺于晶格之上要满足不能重叠的原则，即一个格点只能被一个自旋单体占据。

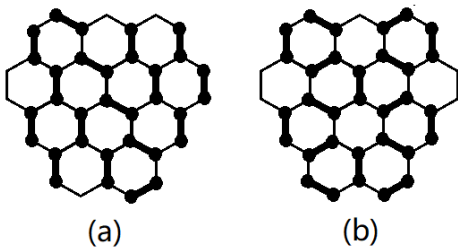


图 2: 六方晶格的 Dimer 模型中每个格点都与另一个格点配对形成 singlet。(a) 是一种简单的满足所有格点配对的情况，但不是能量最低的状态。(b) 是我们的模型中基态配对状况，形成了尽可能多的式 (3) 中类似苯环的形状

### B. 周期性边界条件

为满足正六边形晶格的对称性，我们设计了菱形晶格，在如图所示的周期性边界条件下，整个体系在如图所示的六个方向上是相同的，与六边形晶格有着相同的对称性。

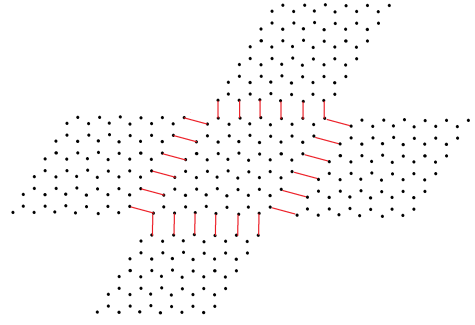


图 3: 中央的菱形晶格是我们研究的模型，利用周期性边界条件将其对边相连

### C. 经典 Dimer 模型中的蒙特卡罗方法

我们采用蒙特卡罗方法 [10] 模拟体系在不同温度下的状态，主要思想为 Metropolis 重要性抽样 [11]，简述如下，二聚体密铺情况为  $c_i$  时体系能量为  $E_i$ ，体系在另一种密铺情况  $c_j$  时能量为  $E_j$ ，考虑  $\exp(-\frac{E_j - E_i}{kT})$  和 0-1 的随机数  $r$ ，若  $r < \exp(-\frac{E_j - E_i}{kT})$ ，则让体系从  $c_i$  到达  $c_j$  状态。

**Directed-Loop 算法:** 二聚体模型中不能通过一个个翻转 singlet 来实现更新，这是因为在密铺情况下只翻转一个 singlet 总会致晶格格点被自旋单体重复占据，因此必须采用其它方法使几个 singlet 同时翻转来实现新的状态。我们采用 MC directed-loop 算法 [12] 实现体系状态的更新，即从所研究晶格上某一格点出发沿着晶格的边随机地连成一个闭合的环，这里的随机是有条件的随机，必须保证连接过程中的每相邻两步都走在 singlet 上，见图 Fig.4。环上的每个 dimer 同时沿环的某个方向（顺时针或逆时针）移动一步，即得到体系可能更新到的新状态。该算法能迅速有效地更新体系状态，并保证所有状态都是体系允许的状态，即晶格格点不会被自旋单体重复占据。

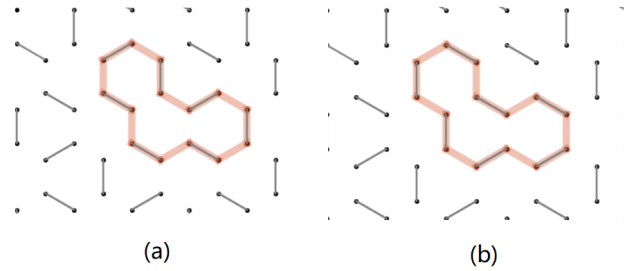


图 4: 随机选取 loop 更新路径，(a) 图为 loop 更新前，(b) 图为 loop 更新后

#### D. 有限尺寸效应 Finite Size Effects

对有限尺寸体系的蒙特卡洛模拟由于尺寸的有限性，体系热力学量在相变点附近的特性会被削减[10]，就难以准确判断相变类型并且难以准确计算临界指数和相变点位置即相变温度等表征相变的热力学量。因此，我们不断增大体系尺寸进行测量，以期观察随体系尺寸增大热力学量在相变点附近变化趋势，以此判断在无限大体系中的相变行为。另外为更准确地确定相变点位置和体现相变行为，我们测量体系不同尺寸下的另一热力学量 Binder cumulant[13]。

#### III. Dimer 模型中的热力学量

**比热容** 我们关注体系比热容即每个格点热容随温度的变化，通过观察比热容随温度的变化行为判断我们所研究体系的相变行为。由配分函数可知，体系比热容可如下表示，其中  $N$  为总格点数。

$$C_v/N = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NkT^2} \quad (4)$$

**两种序参量的定义方式** 将正方晶格序参量定义[9][14][15] 类比为六角晶格，我们定义两种与以往六方晶格量子二聚体模型研究中 [8] 不同的序参量。

预期体系在低温下会出现这样的有序态（见 Fig.5），看作体系基态，这与六角晶格 QDM 的经典极限（Eq.(1) 中的  $v < 0$ ）一致，可称为 columnar valence bond solids[8]。Fig.5 中，columnar 基态有三种可能的简并态，定义序参量的出发点是使序参量能体现并区分这三种简并态。为此我们先依据晶格的位置将晶格分为三类，具体做法是将晶格的每列分别以圆、左三角、右三角交替标记，我们将这一套标记符号称为晶格分类符号；可以注意到在不同的基态中，singlet 占据成（Fig.5）这种结构的晶格所对应的晶格分类符号是不同的，因此可将三种简并态区分开来，此时可将序参量定义如下，

$$\phi_1 = \frac{3}{N} \cdot [N^c(\circ)e^{i0} + N^c(\triangleleft)e^{i\frac{2\pi}{3}} + N^c(\triangleright)e^{i\frac{4\pi}{3}}] \quad (5)$$

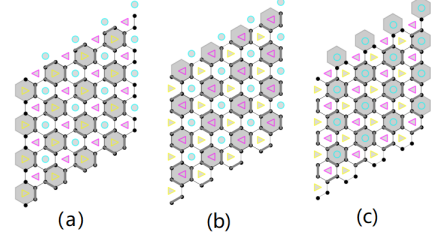


图 5: 基态的三种简并态: 晶格分类符号按规则与晶格固联, 三种简并态可通过与简并态分类符号对应的晶格, 即图中灰色晶格来区分

式中  $\circ$ ,  $\triangleleft$ ,  $\triangleright$  可称为简并态分类符号，通过上述分析可知，这三种简并态分类符号可代表三种简并态，序参量定义式将三种简并态分类符号分别对应于相位为  $0$ 、 $\frac{2\pi}{3}$ 、 $\frac{4\pi}{3}$  的三个旋转对称的向量，并作归一化处理，式中  $N$  表示总晶格数目。我们预期低温下体系几乎全部处于基态的一种简并态下，则根据上述序参量定义，此时体系序参量是朝三个方向中某一方向的单位向量；预期随着温度升高，体系的某些区域会进入不同的简并态，形成不同的 domain，这里的 domain 指同一简并态集中形成的区块，上述定义式中用三种简并态分类符号对应的晶格数目来表示不同 domain 的大小，高温下形成不同 domain，随着温度升高不同 domain 的大小逐渐接近，序参量大小逐渐减小。上述定义可类比于二维 Ising 模型。

预期随温度升高，体系某些区域会进入不同的简并态，形成不同的 domain。上式三种晶格可分别代表三种简并态，统计上式三种晶格的数目则分别代表体系中三种 domain 的大小，将其分别对应于相位为  $0, 2\pi/3, 4\pi/3$  三个旋转对称的向量，即为我们定义的序参量。设想低温有序态处于三种简并态中某一种，则体系  $\phi_1$  为朝三个方向中某一方向的单位向量；预期随着温度升高体系某些区域出现另外两种简并态，形成不同的 domain，当体系完全混乱，三种 domain 总的面积近似相等，则序参量为零，这与二维 Ising 模型类似。

但上述定义只考虑  $\circ$  这样晶格的数目，包含信息有限。因此我们再定义另一种序参量，同样从正方晶格经典 Dimer 模型类比过来 [9][14]，从 bonds 和格点出发，仍然遵循使序参量能体现并区分三种简并态的原则，定义序参量如下，

$$\begin{aligned} \phi_2 = \frac{2}{N} \cdot \{ & [N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet})] \cdot e^{i0} \\ & + [N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet})] \cdot e^{i\frac{2\pi}{3}} \\ & + [N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet}) + N^c(\text{singlet})] \cdot e^{i\frac{4\pi}{3}} \} \end{aligned} \quad (6)$$

| 序参量                   | 不同格点类型 |  |  |
|-----------------------|--------|--|--|
| $e^{i0}$              |        |  |  |
| $e^{i\frac{2\pi}{3}}$ |        |  |  |
| $e^{i\frac{4\pi}{3}}$ |        |  |  |

式中  $N$  表示总格点数。与第一种序参量类似，我们将体系中格点分为三类，即上方表格中的三行，上表符号中红色 bond 表示有 singlet 占据，这三类格点分别对应三种基态简并态。上式表示将三类格点分别对应于在复平面上相位为  $0, 2\pi/3, 4\pi/3$  三个旋转对称的序参量矢量，统计该序参量平均值，从而可以体现体系中不同 domain 的数量，进而体现体系的有序程度。这与  $\phi_1$  定义类似，但后一种定义包含更多格子的信息。我们在研究中同时统计了这两种序参量。

**Binder Cumulant** 上文已指明，为更准确地确定相变点位置和体现相变行为，我们测量体系不同尺寸 Binder cumulant。参考正方晶格经典 Dimer 模型的研究，我们对 Binder cumulant 的定义如下：

$$B_{\phi_2} = 1 - \frac{\langle \phi_2^4 \rangle}{3\langle \phi_2^2 \rangle^2} \quad (7)$$

由于计算量问题，我们只考虑了包含更多信息的第二种序参量对应的 Binder cumulant。这一物理量的引入是为了削减有限尺寸效应的影响，突出相变点行为，更精确地确定相变点位置。

#### IV. 结果与讨论

**比热容** 体系比热随温度的变化显示出一个比较光滑的峰，表明该体系可能存在一个从低温有序相 (columnar phase) 到高温无序相的二级相变。但这与典型的二级相变——二维 Ising 模型的相变不同，以往对于二维 Ising 模型的蒙特卡洛模拟结果表明其比热随温度变化的峰会随着体系尺寸的增大而迅速

趋向发散 [16]，而该体系比热变化峰并没有随着尺寸增大而发散，这与正方晶格上的经典 Dimer 模型的结果类似。这种在相变点附近并不发散的比热变化表明其很有可能是 KT 相变。

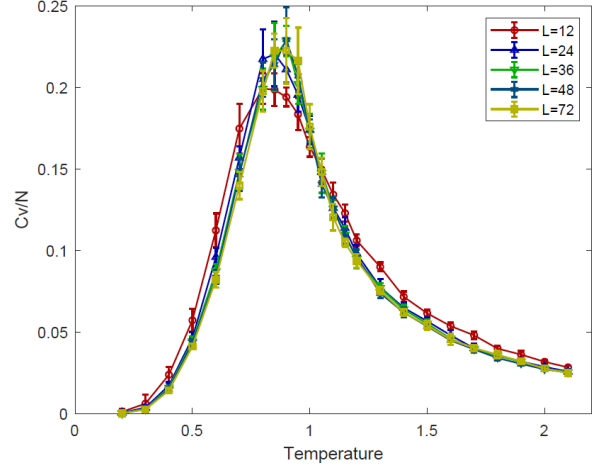


图 6: 不同尺寸下比热容随温度的变化

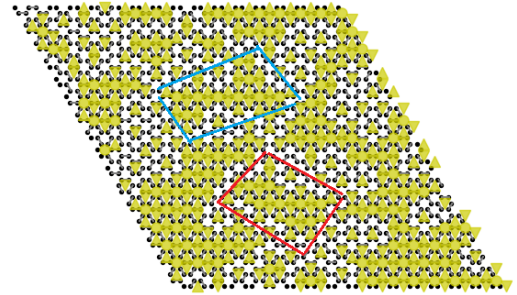


图 7: 较高温下体系出现的 domain

**两种序参量** 我们先考虑序参量的模随温度的变化情况，结果表明我们所定义的两序参量的模的变化趋势基本一致。Fig.8 中低温时体系序参量模基本为 1，体系处于某一种基态简并态，序参量为沿定义中三种方向之一的向量。在比热容变化图所表明的相变点 (0.95K-1.0K) 附近，序参量的模随温度升高迅速减小到接近零，进一步表明在此处温度附近存在相变行为。高温下序参量的模接近零，体系处于无序相，体系中出现不同的 domain (Fig.7)，并且高温下序参量的模接近零的结果表明不同 domain 所占面积随温度升高趋近相等，这与定义序参量时的预期一致。另外不同 domain 的形成表明体系并非完全无序，这是由于二聚体模型本身带来的几何限制，高温下体系仍保有准长程关联。

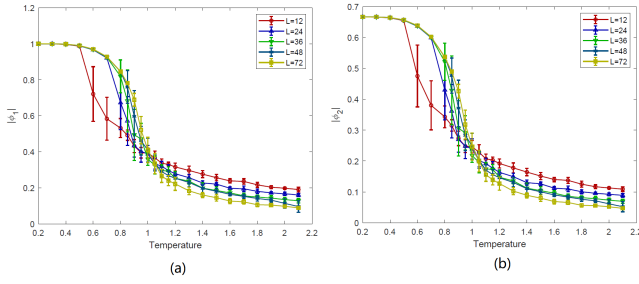


图 8: 不同尺寸的晶格下序参量随温度变化曲线。(a) 为第一种序参量  $|\phi_1|$  的定义 Eq.5, (b) 为第二种序参量  $|\phi_2|$  的定义 Eq.6

**Binder cumulant** 结果表明, Binder cumulant 量在高温区间较为混乱无规律 (Fig.9(a))。这是因为在每个温度下的蒙特卡洛模拟我们都采用从某一基态出发的方式, 以期让体系更快地进入准静态。当温度较低时, 体系涨落很小, 体系状态迅速到达准静态, 模拟更新次数足以得到一个较为准确的值, 但高温下体系涨落明显, 可能更新到的状态更多, 而我们采用的更新次数不变, 就导致最终测量时体系未到达真正的稳态, 使得结果在高温区间较为混乱无规律。另外在高温区间大尺寸体系的结果与较小尺寸体系的结果偏差较大, 但其 error bar 却较小。这是由于更新次数不足, 体系被困在亚稳态中而并未到达真正的稳态时就测量, 导致大尺寸结果偏差较大但 error bar 却较小。不过 Binder cumulant 量在前半段的变化也能表明在相变点附近存在交点的行为 (Fig.9(b))。

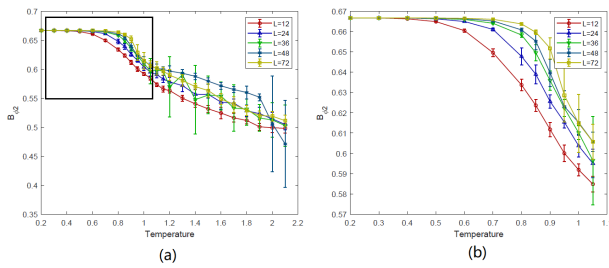


图 9: 不同尺寸的晶格在不同温度下对应的 Binder cumulant 变化。(b) 展示的是 (a) 中黑框部分的细节

**序参量变化散点图** 为更充分地展示体系的相变行为, 我们将模拟过程中每一次测量的序参量向量显示于二维 XY 图中 (fig.10), 以观察体系状态随温度的变化情况。

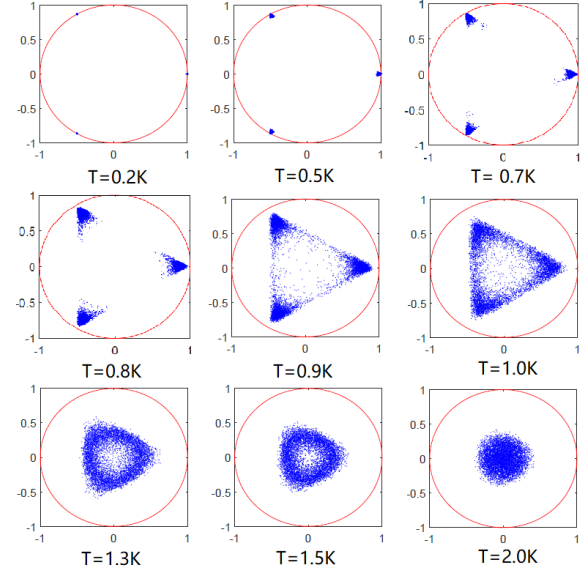


图 10:  $L=48$  的六边形晶格在不同温度下的序参量在二维平面上的分布

低温时, 体系序参量集中在三个基态简并态附近,  $T=0.2K$  时体系只处在三个基态简并态上, 因而图中只有三个点; 高温时 ( $T=2.0K$ ), 序参量均匀弥散在原点附近的圆内; 在相变点 ( $T=0.9K, 1.0K$ ) 附近, 序参量点呈现出一个不甚尖锐的三角形, 这表明体系在三种简并态间不停变化。我们所研究体系相变点附近并没有呈现出像正方晶格 Dimer 模型相变点附近体系出现的  $U(1)$  对称性, 这与前人的研究结果一致。另外, 如果我们只考虑从某一基态出发, 会发现体系更容易跑向初始基态逆时针相邻的另一基态简并态 (Fig.11), 我们从相位为  $\frac{2\pi}{3}$  的基态简并态出发, 从散点图中可以清晰地看出体系更多地出现在相位为 0 的简并态, 而几乎不会出现在相位为  $\frac{2\pi}{3}$  的简并态, 因此我们判断体系从某一简并态出发到另外两种简并态的概率不同。这应该与体系的几何限制相关, 但更具体的原因还有待进一步探究。

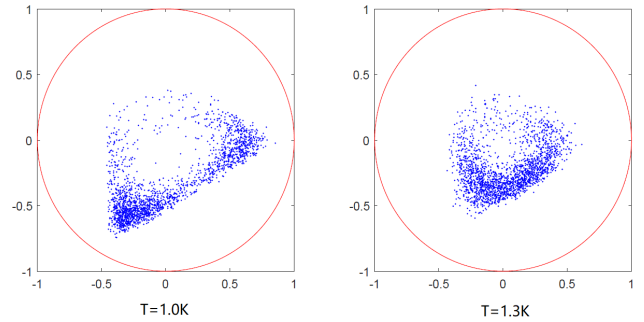


图 11: 从三种简并态中的一种基态出发, 序参量在二维平面上的分布

## V. 展望

六角晶格经典二聚体模型不发散的比热容变化与正方晶格经典二聚体模型 [9] 一致, 表明体系有限温相变很有可能是 KT 相变, 但我们仍需要更准确有效的判据来确定体系的相变类型, 比如研究体系的关联函数。

另外, 我们所得到的不同尺寸下热力学量的变化曲线虽基本光滑, 但在相变点附近的误差较大, 难以做更加精细的测量工作, 比如临界指数的分析; 并且 Binder cumulant 随温度的变化曲线在后半段的混乱表明体系蒙特卡洛模拟计算的时间不足。因此我们还可以延长计算时间得到较为准确的数据, 来做更加精细的分析。

最后, 关于该模型从某一基态出发到达另外两个基态简并态的概率并不相等的问题还需更深入的探究。

## VI. 致谢

在此, 我们真诚地感谢娄捷老师对我们的问题不遗余力的解答以及悉心的指导, 还要感谢齐润泽学长和周正同学的帮助与指点。

## VII. 附录

### A. 团队分工

靳小博 (33.3%): 联系老师、阅读文献、理论工作、计算机模拟实验、撰写论文

李方楠 (33.3%): 阅读文献、构建和改进程序、计算机模拟实验、排版论文、图表绘制数据处理

刘逸奇 (33.3%): 阅读文献、构建和改进程序、计算机模拟实验、图表绘制数据处理

- 
- [1] R. H. Fowler, G. S. Rushbrooke, An attempt to extend the statistical theory of perfect solutions, Trans. Faraday Soc., 1937, 33, 1272-1294.
  - [2] P. W. Kasteleyn, H. Raether, Dimer Statistics and Phase Transitions, Journal of Mathematical Physics 4, 287 (1963); <https://doi.org/10.1063/1.1703953>
  - [3] H. N. V. Temperley, Michael E. Fisher (1961) Dimer problem in statistical mechanics-an exact result, Philosophical Magazine, 6:68, 1061-1063, DOI: 10.1080/14786436108243366
  - [4] Michael E. Fisher, Statistical Mechanics of Dimers on a Plane Lattice, Phys. Rev. 124, 1664 -Published 15 December 1961
  - [5] Daniel S. Rokhsar and Steven A. Kivelson, Superconductivity and the Quantum Hard-Core Dimer Gas, Phys. Rev. Lett. 61, 2376 -Published 14 November 1988
  - [6] R. Moessner and S. L. Sondhi, Resonating Valence Bond Phase in the Triangular Lattice Quantum Dimer Model, Phys. Rev. Lett. 86, 1881 -Published 26 February 2001
  - [7] R. Moessner, S. L. Sondhi, and Eduardo Fradkin, Short-ranged resonating valence bond physics, quantum dimer models, and Ising gauge theories, Phys. Rev. B 65, 024504 -Published 10 December 2001
  - [8] R. Moessner, S. L. Sondhi, and P. Chandra, Phase diagram of the hexagonal lattice quantum dimer model, Phys. Rev. B 64, 144416 - Published 19 September 2001
  - [9] Fabien Alet, Jesper Lykke Jacobsen, Grégoire Misguich, Vincent Pasquier, Frédéric Mila, and Matthias Troyer, Interacting Classical Dimers on the Square Lattice, Phys. Rev. Lett. 94, 235702 - Published 15 June 2005
  - [10] Landau D P, Binder K. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics[J]. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, 2011, 7(2):xvi+471.
  - [11] J. Chem. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. Phys. 21, 1087 (1953); <https://doi.org/10.1063/1.1699114>
  - [12] Sandvik A W. Deconfinement and criticality in extended two-dimensional dimer models[J]. Physics, 2005.
  - [13] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. Z.Phys. B43 (1981) 119-140, DOI: 10.1007/BF01293604
  - [14] P. W. Leung, K. C. Chiu, and Karl J. Runge. Columnar dimer and plaquette resonating-valence-bond orders in the quantum dimer model. Phys. Rev. B 54, 12938 -Published 1 November 1996
  - [15] Fabien Alet, Yacine Ikhlef, Jesper Lykke Jacobsen,

Grégoire Misguich, and Vincent Pasquier. Classical dimers with aligning interactions on the square lattice. Phys. Rev. E 74, 041124 - Published 26 October 2006

[16] Arthur E. Ferdinand and Michael E. Fisher. Bounded

and Inhomogeneous Ising Models. I. Specific-Heat Anomaly of a Finite Lattice. Phys. Rev. 185, 832 - Published 10 September 1969