Семинар «Вычислительная физика: алгоритмы, методы и результаты», Таруса–2011

Численные методы изучения неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем

Прудников В.В., Прудников П.В., Поспелов Е.А., Чабров А.В, Питеримов А.Ю

кафедра теоретической физики
Омский государственный университет
им. Ф.М. Достоевского

Введение

- Влияние дефектов структуры на поведение систем при фазовых переходах второго рода;
- Неравновесная коротко-временная критическая динамика;
- Критическое поведение сильно неупорядоченных систем.

Виды дефектов

$$H = \int d^d x \left[\tfrac{1}{2} \sum_i^p \left[(\nabla \phi_i)^2 \right) + \tau_0 \phi_i^2 + \mathbf{V(x)} \phi_i^2 \right] + \tfrac{g_0}{4!} \left(\sum_i^p \phi_i^2 \right)^2 \right]$$

$$\langle\langle V(x) \rangle\rangle = 0 \qquad \langle\langle V(x) V(y) \rangle\rangle \sim \mathbf{u(x-y)}$$

однородные системы

$$u(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = 0$$

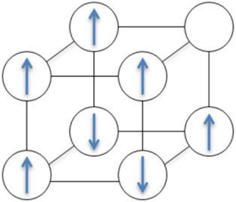
точечные дефекты

$$u(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = v\,\delta^d(\mathbf{x}-\mathbf{y}),$$
$$v \sim V^2\, c_{imp}$$

изотропная дальнодействующая корреляция

$$u(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \sim |\mathbf{x}-\mathbf{y}|^{-\mathbf{a}}$$

Неупорядоченная модель Изинга



- Трехмерная кубическая решетка
- Узел занят магнитным или немагнитным атомом
- Спин может принимать только два положения
- В гамильтониане учитываются только ближайшие соседи спина
- Гамильтониан неупорядоченной модели Изинга есть:

$$H = -J \sum_{<i,j>} a_i a_j S_i S_j \qquad (1)$$

a_i задаются функцией распределения:

$$P(a_i) = (1-p)\delta(a_i) + p\delta(1-a_i)$$

Дефекты структуры

- **Расплавленные** и **вмороженные** примеси
- Расплавленные примеси:[1]
  $x = x * (1 - \alpha_{pure})^{-1}, C(T) \sim (T - T_c)^{-\alpha}$
- Критерий Хариса: $\alpha_{pure} > 0$, новое критическое поведение[2]
- Теоретико-полевое описание: $\alpha_{pure} = 0.109(4)$[3]
- Порог спиновой перколяции для кубической решетки
  $p_c \approx 0.69$
  - $\mathbf{p_c < p < 1}$: слабо неупорядоченные системы
  - $\mathbf{p < p_c}$: сильно неупорядоченные системы

[1] Fisher, ME Phys. Rev. 176 257 (1968)
[2] Harris A B J. Phys. C: Solid State Phys. 7 1671 (1974)
[3] Р.Фольк, Ю.Головач, Т.Яворский, УФН, т.173, с.175(2003)

Метод коротковременной динамики(МКД)

- Время релаксации: $\tau \sim |T - T_c|^{-z\nu}$
- Основой МКД является существование универсальных временных зависимостей термодинамических функций в том временном промежутке, когда система не достигла состояния равновесия
- На основе ренорм-группового анализа было показано,[4] что для k-го момента намагниченности реализуется следующая скейлинговая форма:

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-\frac{k\beta}{\nu}} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0) \quad (2)$$

где b - масштабный фактор, m_0 - приведенная намагниченность, $\tau = \frac{T - T_c}{T_c}$ - приведенная температура

[4] Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann, Z. Phys. B., vol. 73, p. 539, (1989)

Метод коротковременной динамики $m_0 = 1$

Начальное состояние системы: $m_0 = 1$ и $m_0 \ll 1$
Полагая $b = t^{1/z}$ и $m_0 = 1$, получаем намагниченность(k=1) в виде:

$$M(t,\tau) = t^{-\beta/\nu z} M(1, t^{1/\nu z}\tau) \sim t^{-\beta/\nu z}(1 + At^{1/\nu z}\tau + O(\tau^2))$$

В критической точке $\tau \to 0$:

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z} \tag{3}$$

Логарифмическая производная намагниченности $\partial_\tau lnM$:

$$\partial_\tau lnM(t) \sim t^{1/\nu z} \tag{4}$$

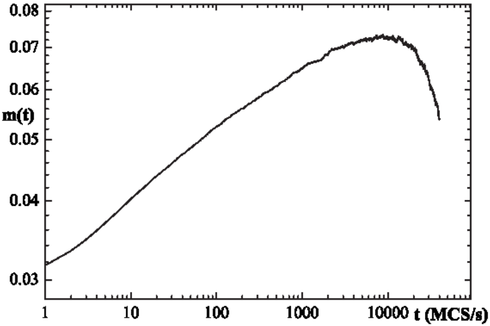
Кумулянт Биндера второго порядка $U_2 = M^{(2)}/M^2 - 1$:

$$U_2(t) \sim t^{d/z} \tag{5}$$

При $\tau \to 0$ для намагниченности имеет место временная зависимость:

$$M(t) \sim t^{\theta'} \tag{6}$$

Эволюция намагниченности в МКД на примере системы с p=0.8[5], $m_0 = 0.03$



[5] P. Prudnikov, V. Prudnikov, E. Pospelov, et. al, Phys. Rev. E (2010)

Второй момент намагниченности и автокорреляционная функция:

$$M^{(2)}(t) \sim t^{c_2}, \qquad A(t) \sim t^{-c_a} \tag{7}$$

Показатели c_2 и c_a связаны с известными критическими индексами:

$$c_2 = \left(d - \frac{2\beta}{\nu}\right)\frac{1}{z}, \qquad c_a = \left(\frac{d}{z} - \theta'\right) \tag{8}$$

В работе[6] было предложено рассматривать поведение кумулянта:

$$F_2(t, L) = \frac{M^{(2)}(t, L)|_{m_0=0}}{M(t, L)|_{m_0=1}} \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)\frac{1}{z}}}{t^{-2\beta/\nu z}} \sim t^{d/z} \tag{9}$$

[6] R. da Silva, N. A. Alves, J. R. Drugowich de Felicio (2002)

Детали моделирования

- Линейный размер решетки: $L = 128$, концентрация спинов $p = 0.5, 0.6$;
- Единица времени - шаг Монте-Карло на спин(mcs/s) - переворот всех спинов системы;
- k-й момент намагниченности и автокорреляционная функция:

$$M^{(k)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} S_i \right)^{(k)} \right\rangle \right],$$

$$A(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} S_i(t) S_i(0) \right) \right\rangle \right]. \tag{10}$$

Детали моделирования

- В качестве реализации метода Монте-Карло используется алгоритм Метрополиса
- Критическая температура[7] (в единицах J/k):
  Слабо неупорядоченные системы:

$$\begin{cases} p=0.95 & T_c = 4.26267(4) \\ p=0.80 & T_c = 3.49948(18) \end{cases}$$

Сильно неупорядоченные системы:

$$\begin{cases} p=0.60 & T_c = 2.42413(9) \\ p=0.50 & T_c = 1.84509(6) \end{cases}$$

[7] В.В.Прудников, П.В.Прудников, А.Н.Вакилов, А.С.Криницин, ЖЭТФ, т.132, вып.2 (2007)

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$$

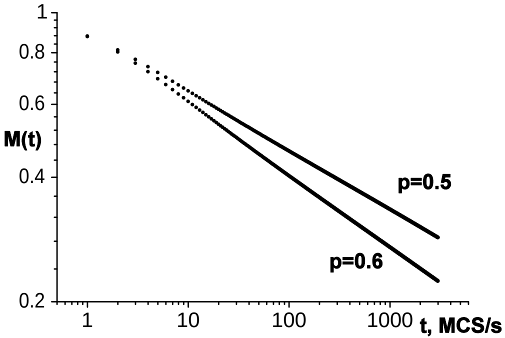


Рис. 1: Временная зависимость намагниченности в двойном логарифмическом масштабе

Результаты моделирования. $m_0 = 1$

$$U_2(t) \sim t^{d/z}$$

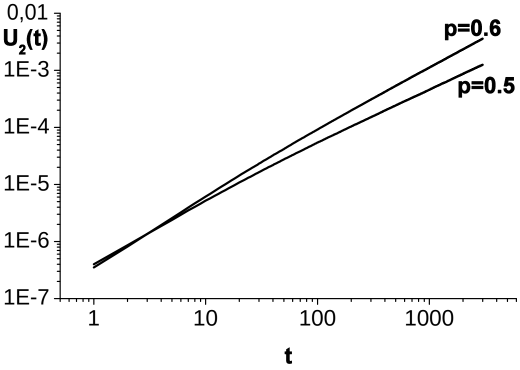


Рис. 2: Временная зависимость кумулянта Биндера втрого порядка в двойном логарифмическом масштабе

Результаты моделирования. $m_0 = 1$

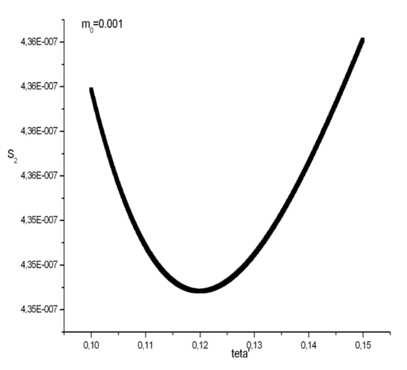
Таблица 1: Значения критических показателей, полученных аппроксимацией временных зависимостей.

показатель	p=0.5	p=0.6
β	0.355(5)	0.354(3)
ν	0.757(8)	0.729(4)
z	3.27(3)	2.82(1)
β/ν	0.469(4)	0.486(2)

$$X(t) = t^{\delta}\left(A(p)t^{\delta} + B(p)t^{-\omega/z}\right) \tag{11}$$

- исследуемый временной интервал $[t_0, t_1]$ разбивался на все возможные интервалы с $\Delta t = 50, \ldots, (t_1 - t_0)$, Δt - длина интервала
- на каждом интервале значение ω/z варьировалось в пределах $[0.04, 0.3]$ с шагом 0.5
- для всех ω/z на каждом интервале проводилась аппроксимация полученных данных выражением (11)
- выбирались такие интервалы, на которых достигался минимум по δ для конкретного ω/z
- производилось усреднение выбранных показателей и расчет погрешностей аппроксимации для каждого ω/z

(a)



(b)

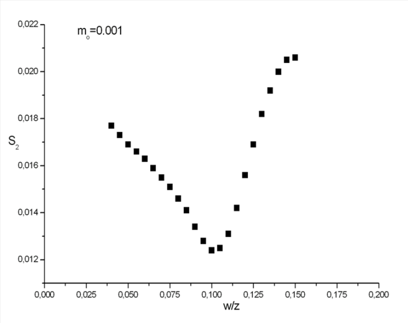


Рис. 3: Зависимость погрешности аппроксимации для индекса θ'. (a) - $\omega/z = 0.1$, интервал - [800;2100]; (b) - погрешность по ω/z

Таблица 2: Значения критических показателей, полученных при проведении процедуры поправок к скейлингу

показатель	p=0.5	p=0.6
β	0.314(41)	0.349(40)
ν	0.711(40)	0.711(31)
z	2.655(34)	2.520(95)
β/ν	0.442(25)	0.490(24)

Результаты моделирования. $m_0 \ll 1$

$$M(t) \sim t^{\theta'}$$

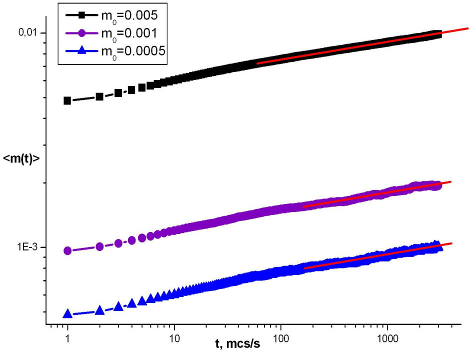


Рис. 4: Временная зависимость намагниченности для начальных состояний с $m_0 = 0.0005, 0.001, 0.005$ в двойном логарифмическом масштабе. p $= 0.6$

$$M^{(2)}(t) \sim t^{c_2}$$

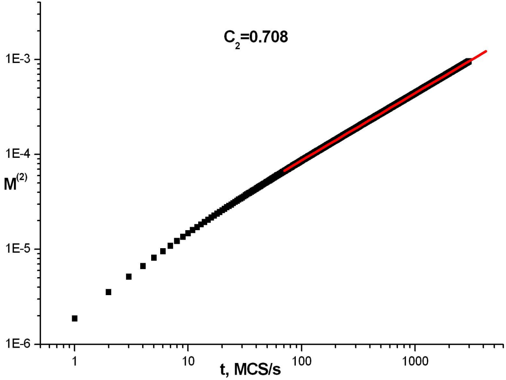


Рис. 5: Временная зависимость второго момента намагниченности в двойном логарифмическом масштабе. p = 0.6

$$A(t) \sim t^{-c_a}$$

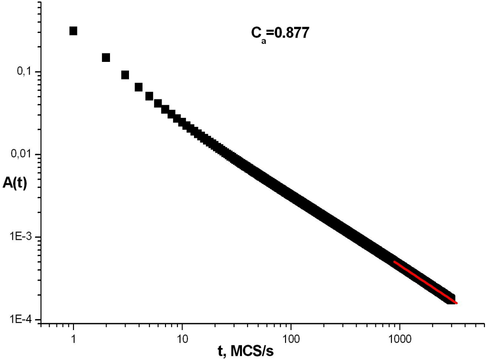


Рис. 6: Временная зависимость автокрреляционной функции в двойном логарифмическом масштабе. p = 0.6

Результаты моделирования. $m_0 \ll 1$

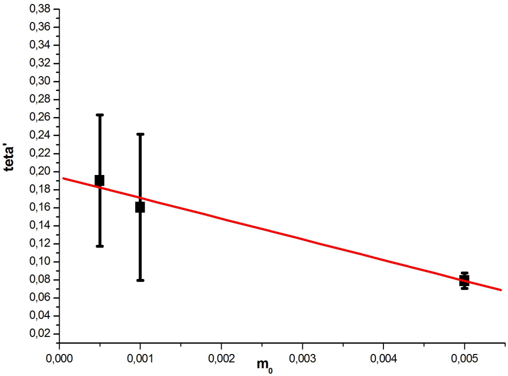


Рис. 7: Зависимость показателя θ' от начальной намагниченности m_0. $\theta'(m_0 \to 0) = 0.194$, p=0.6

Таблица 3: Итоговые значения критических показателей

показатель	p=0.5	p=0.6
θ'	0.192(26)	0.194(41)
z	2.740(90)	2.760(110)
$z(F_2)$	2.647(48)	2.627(41)
$z(m_0 = 1)$	2.655(34)	2.520(95)
β/ν	0.430(38)	0.479(76)
$\beta/\nu(m_0 = 1)$	0.442(25)	0.490(24)
$\beta(m_0 = 1)$	0.314(41)	0.349(38)
$\nu(m_0 = 1)$	0.711(40)	0.712(31)

Результаты

Таблица 4: Сравнение с другими работами

Источник	p	θ'	β/ν	β	ν	z
Данная работа	0.5-0.6	0.193(41)	0.459(40)	0.331(41)	0.711(40)	2.657(34)
сильно неупорядоченные системы						
G. Parisi et. al, 1999	0.4-0.6					2.62(7)
А.К. Муртазаев, УФН, 2006	0.6		0.481	0.349(9)	0.725(9)	
Heuer. J. Phys. A., 1993	0.6		0.451(18)			
Shehr G., J. of Phys., 2006	0.49-0.8	0.10(2)				
слабо неупорядоченные системы						
Prudnikov V. V. et. al, Phys. Rev. E, 2010	0.8	0.127(16)	0.519(14)			2.188(23)
Pelissetto, Vicari, 2000 (FTM)			0.515(15)	0.349(5)	0.685(10)	
Prudnikov et. al, 2006 (FTM)						2.1792(13)
Rosov, et.al., FepZn1-pF2, 1988 (EXP)	0.9					2.18(10)
Rosov, et.al., FepZn1-pF2, 1992 (EXP)	0.9			0.70(2)		
однородные системы						
Zheng B., J. Phys. A, 1999	1	0.108(2)	0.517(2)			2.042(6)

Заключение

- Проведено исследование неравновесного критического поведения сильно неупорядоченной модели Изинга с концентрациями $p = 0.5$ и 0.6
- Показано существование двух независимых классов универсальности, соответствующих слабо и сильно неупрядоченным системам

Приложение. Алгоритм Метрополиса

1. Формируем начальную конфигурацию
2. Случайным образом выбираем спин и пробуем его перевернуть
3. Вычисляем изменение энергии ΔE
4. Если $\Delta E < 0$, то принимается новая конфигурация
5. Если $\Delta E > 0$, вычисляем вероятность перехода $W = exp(-\Delta E/kT)$
    - Генерируем случайное число r из интервала (0;1)
    - Если $r < W$, принимаем новую конфигурацию, в противном случаи оствляем старую
6. Определяем значения требуемых физических величин
7. Повторяем 2-6 для получения достаточного количества конфигураций
8. Производим статистическое усреднение