

Методы численного моделирования актуальных задач,
г. Таруса, 2009



*Компьютерное моделирование неравновесной
критической динамики структурно
неупорядоченных ферромагнетиков*

Прудников Владимир Васильевич

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



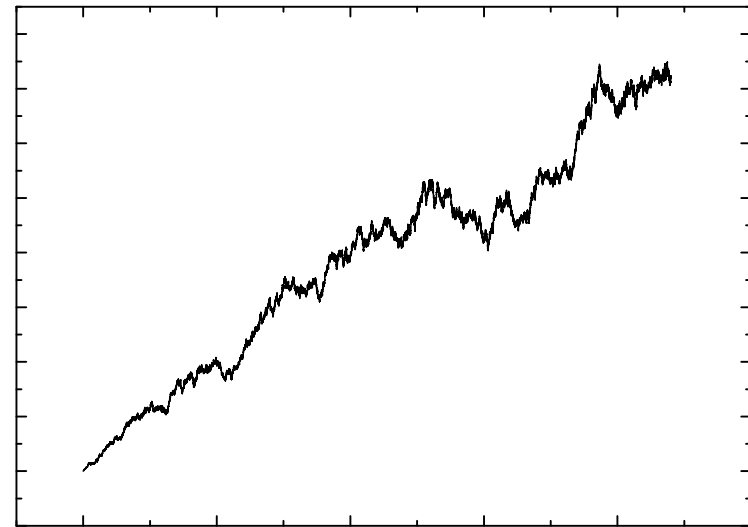
Содержание

- Методы компьютерного моделирования фазовых переходов.
- Влияние дефектов структуры на критическое поведение.
- Неравновесная коротко-временная критическая динамика неупорядоченных систем.

Фазовые переходы

Проблема описания фазовых переходов – одна из наиболее сложных и постоянно актуальных задач статистической теории.

При $\tau = (T - T_c) / T_c \ll 1$, где T_c – критическая температура, наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации некоторых термодинамических переменных, характеризующиеся эффективно сильным взаимодействием между собой.



Фазовые переходы



Корреляционная функция:

$$G(r - r') = \langle S(r)S(r') \rangle - \langle S(r) \rangle \langle S(r') \rangle \sim \frac{e^{-\frac{|r - r'|}{\xi(\tau)}}}{|r - r'|^{d-2+\eta}},$$
$$\xi(\tau) \sim |\tau|^{-\nu} \rightarrow \infty.$$

Автокорреляционная функция:

$$A(t - t') = \langle S(r, t)S(r, t') \rangle - \langle S(r, t) \rangle \langle S(r, t') \rangle \sim e^{-\frac{|t - t'|}{\tau_{corr}(\tau)}},$$
$$\tau_{corr}(\tau) \sim |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty.$$

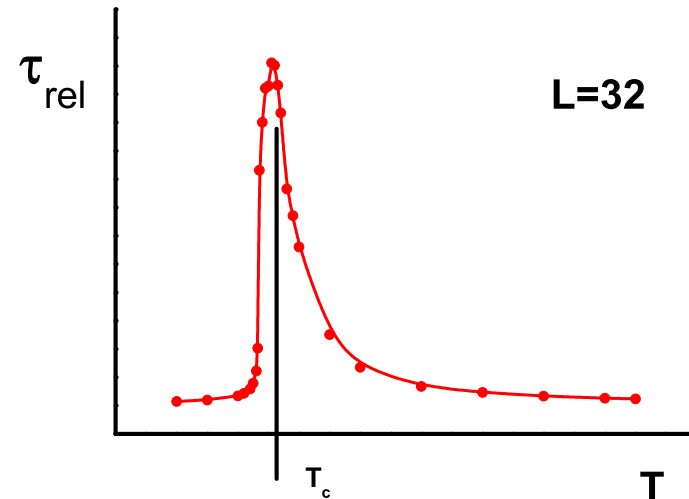


Фазовые переходы

Параметр порядка
(намагниченность M для
ферромагнитных систем):

$$M(t) = \langle S(r, t) \rangle \sim e^{-\frac{t}{\tau_{rel}(\tau)}},$$

$$\tau_{rel}(\tau) \sim |\tau|^{-z\nu} \rightarrow \infty.$$



Фазовые переходы

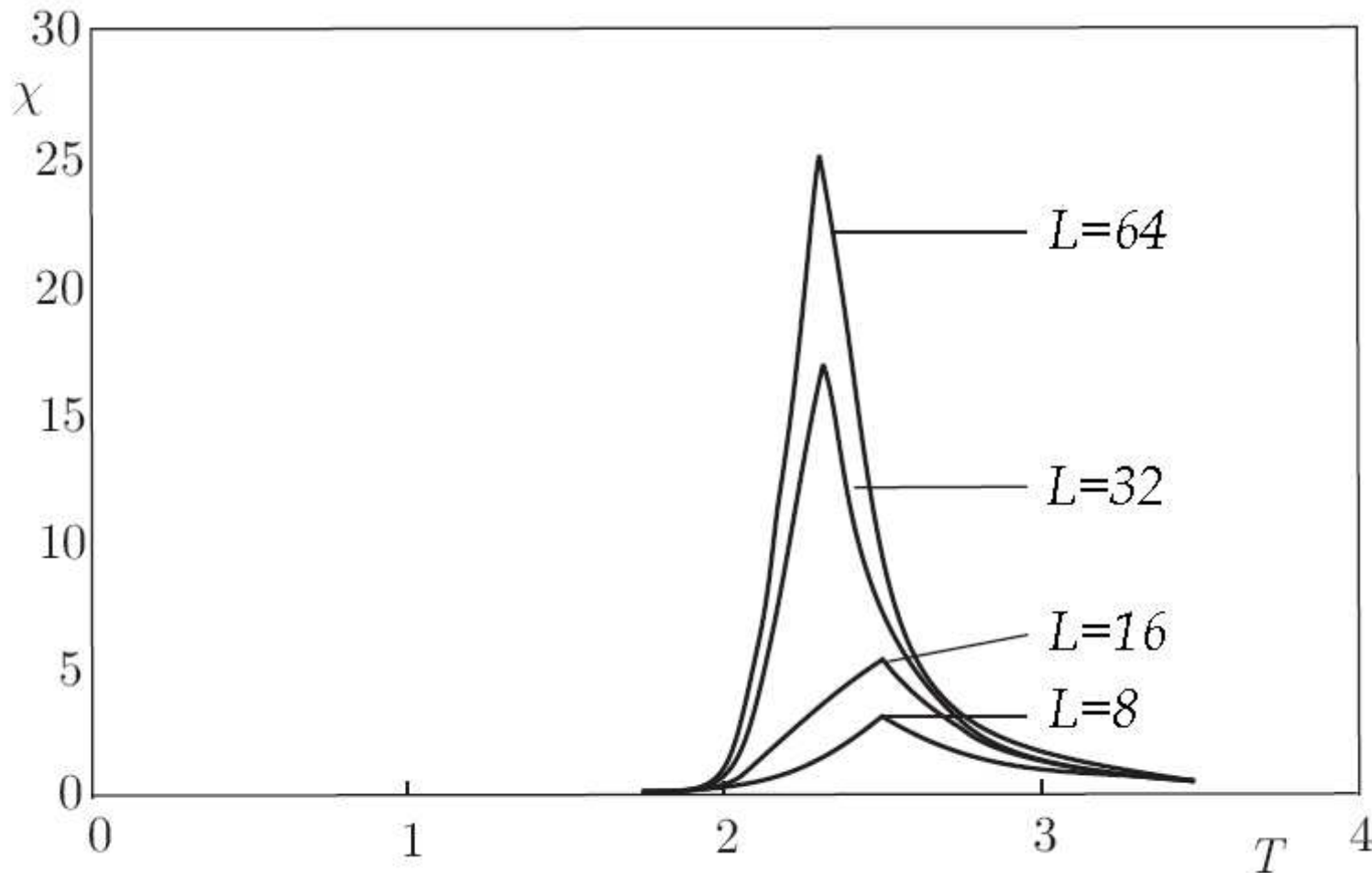
намагниченность $M(T)$, восприимчивость $\chi(T)$, теплоемкость $C(T)$,

$$M(T) \sim (-\tau)^\beta, \quad \chi(T) \sim |\tau|^{-\gamma}, \quad C(T) \sim |\tau|^{-\alpha},$$

где α, β, γ – критические индексы.

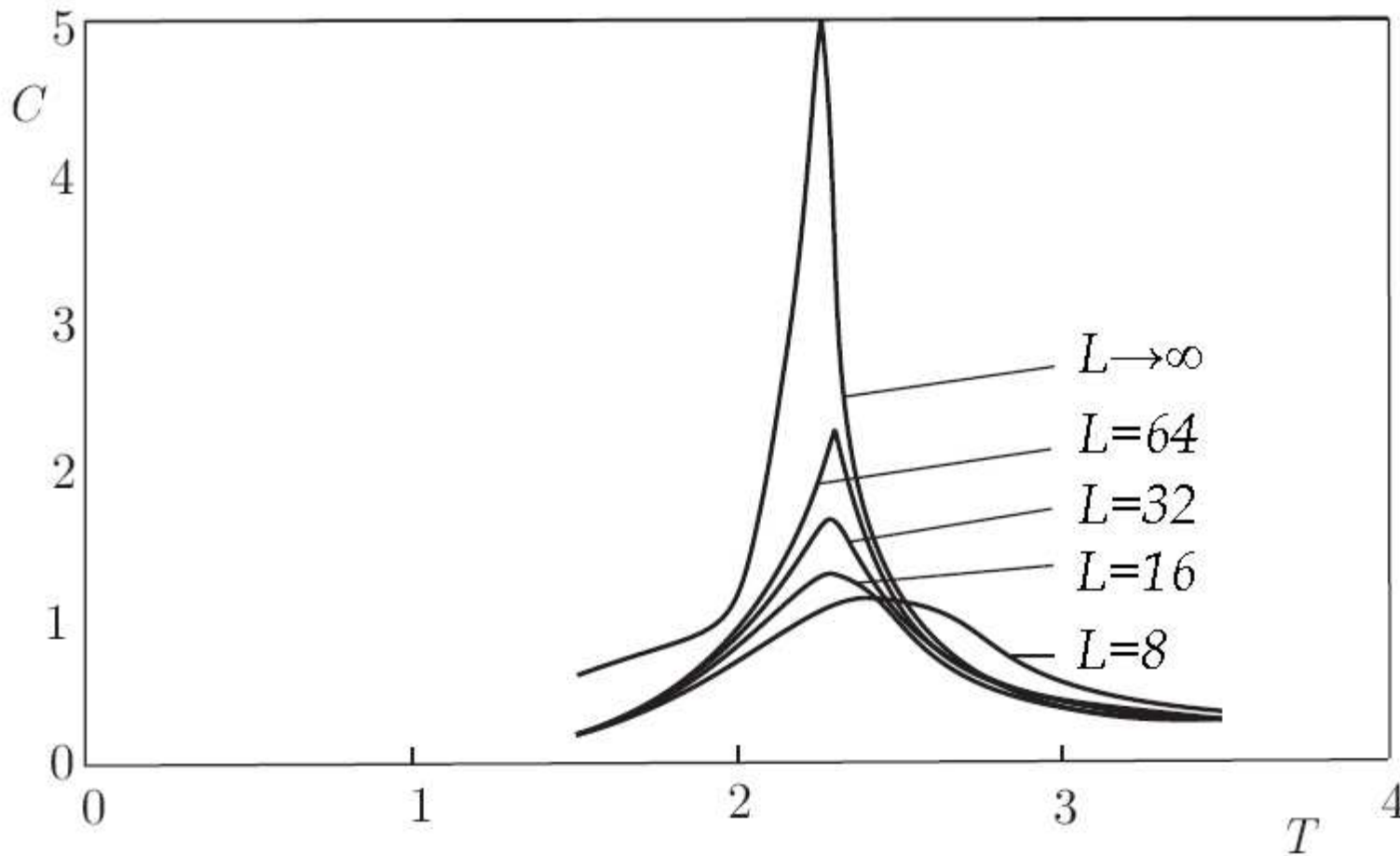
Компьютерное моделирование критических явлений дает возможность получения наглядной информации о росте флуктуаций намагниченности и критическом замедлении процессов релаксации в ферромагнитных системах по мере приближения к температуре фазового перехода, о проявлении аномальных свойств в поведении теплоемкости и магнитной восприимчивости.

Фазовые переходы



Графики температурной зависимости восприимчивости χ моделируемых двумерных систем с различными размерами L вблизи температуры фазового перехода

Фазовые переходы

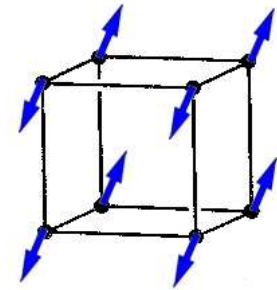


Графики температурной зависимости теплоемкости C моделируемых двумерных систем с различными размерами L вблизи температуры фазового перехода

Модель Изинга

Макроскопические свойства системы определяются свойствами ее возможных микросостояний.

$$E = -J \sum_{i,j} S_i S_j - h \sum_i S_i,$$



где S_i – спины (в модели Изинга $S = \pm 1$), первая сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов, а вторая - по всем спинам решетки. Константа обменного взаимодействия J является мерой силы взаимодействия между ближайшими соседними спинами.

Канонический ансамбль

Канонический ансамбль - вероятность W_n , что система находится в микросостоянии, задаваемом набором квантовых чисел n , с энергией E_n

$$W_n = \left(\frac{1}{Z} \right) \exp \left(-\frac{E_n}{kT} \right),$$

где $Z = \sum_{n=1}^{N_0} \exp(-E_n/kT)$ – статистическая сумма, N_0 – полное число микросостояний системы.

Средняя энергия

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n W_n = \left(\frac{1}{Z} \right) \sum_n E_n \exp \left(-\frac{E_n}{kT} \right).$$

Метод Монте-Карло

Среднее значение физической величины A по m сгенерированным из полного числа N_0 конфигураций

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^{N_0} A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) \cong \frac{\sum_{n=1}^m A_n \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}{\sum_{n=1}^m \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right)}.$$

Используя метод существенной выборки, генерируем конфигурации в соответствии с функцией P_n

$$\langle A \rangle \cong \sum_{n=1}^m \frac{A_n}{P_n} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) / \sum_{n=1}^m \frac{1}{P_n} \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right).$$

Алгоритм Метрополиса

P_n может быть выбран в виде канонического распределения

$$P_n = \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right) / \sum_{n=1}^m \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right).$$

В этом случае, среднее физической величины $\langle A \rangle$ превращается в среднее арифметическое

$$\langle A \rangle \cong \frac{1}{m} \sum_{n=1}^m A_n.$$

Алгоритм Метрополиса



1. Формируем равновесную конфигурацию.
2. Производим случайное пробное изменение в начальной конфигурации, т.е. случайным образом выбираем какой-нибудь спин и пробуем его опрокинуть.
3. Вычисляем ΔE , т.е. изменение энергии системы, обусловленное произведенным пробным изменением конфигурации.
4. Если $\Delta E \leq 0$, то принимаем новую конфигурацию и переходим к шагу 8.
5. Если $\Delta E > 0$, то вычисляем вероятность перехода $W = \exp(-\Delta E/kT)$.



Алгоритм Метрополиса

6. Генерируем случайное число r в интервале $(0, 1)$.
7. Если $r \leq W$, то новую конфигурацию принимаем, в противном случае сохраняем предыдущую конфигурацию.
8. Определяем значения требуемых физических величин.
9. Повторяем шаги 2 – 8 для получения достаточного числа конфигураций.
10. Вычисляем средние по конфигурациям, которые статистически независимы.

Критерий Харриса

Влияние точечных дефектов структуры на термодинамические характеристики определяется критическим показателем теплоемкости для однородных систем α_0

$\alpha_0 > 0$ беспорядок **существенен**,
новый тип критического поведения

$\alpha_0 < 0$ беспорядок **несущественен**,
критическое поведение системы характеризуется показателями однородной системы

Модель	Изинга	XУ	Гейзенберга
α_0 (МС)	0.1109(15)	-0.0148(15)	-0.1339(33)
α_0 (TFD)	0.1091(24)	-0.011(4)	-0.122(10)
α_0 (EXP)	0.1099(7)	-0.01056(38)	-0.135(20)

Неупорядоченная модель Изинга

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} p_i p_j S_i S_j,$$

p_i - случайная переменная, описываемая функцией распределения

$$P(p_i) = p \delta(p_i - 1) + (1 - p) \delta(p_i),$$

$$p_i = \begin{cases} 1, & \text{узел } i \text{ занят спином,} \\ 0, & \text{узел пуст.} \end{cases}$$

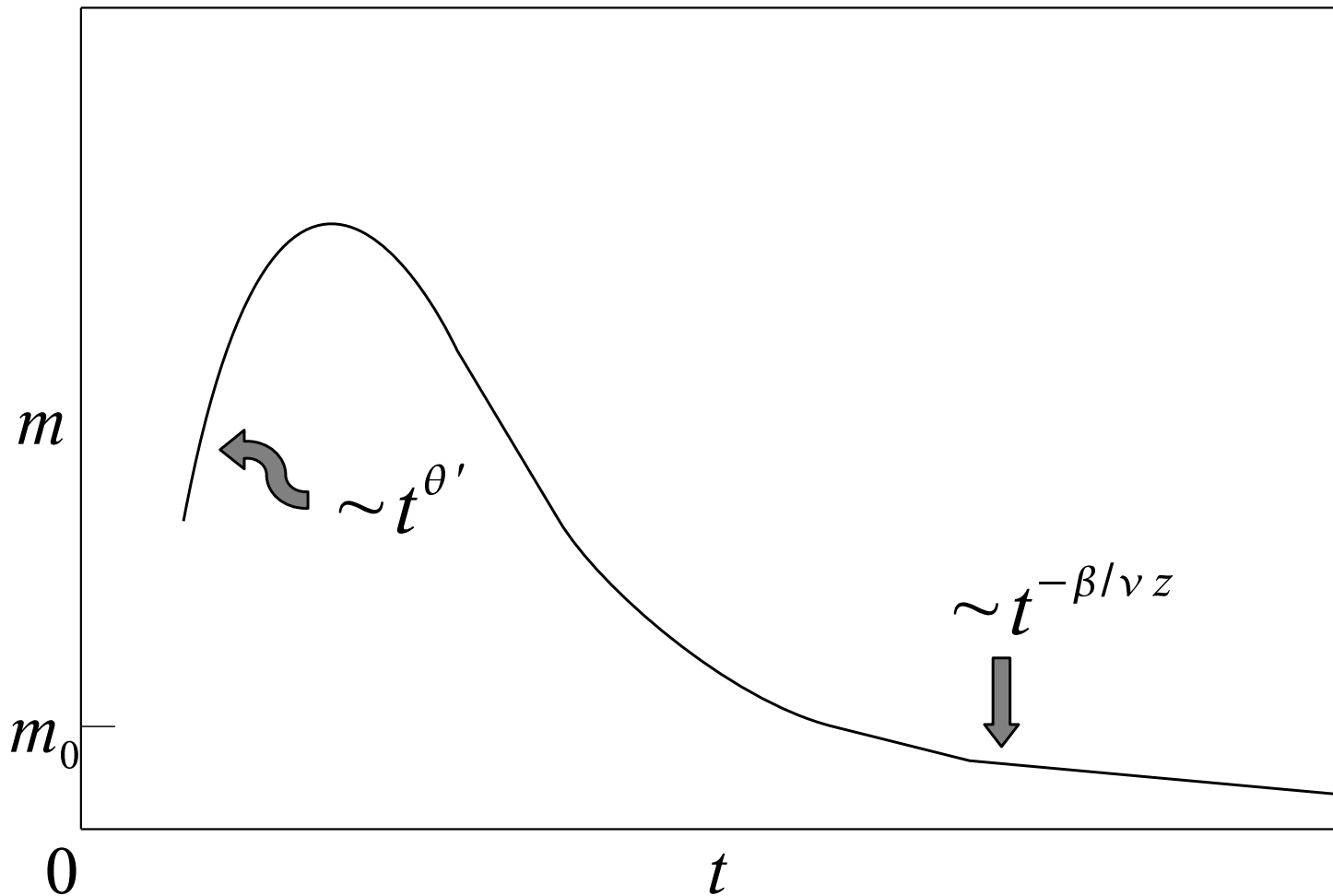
Концентрация спинов $p = \frac{1}{L^3} \sum_{i=1}^{L^3} p_i |S_i|$

Температурная область влияния дефектов

$$\frac{|T - T_c(p_s)|}{T_c(p_s)} \leq \left(\frac{\Delta J}{J_0} \right)^{1/\varphi}$$

Критическое поведение структурно неупорядоченной системы с соответствующими "новыми" критическими индексами наблюдается в узкой температурной области вблизи критической температуры T_c с переходным этапом от критического поведения однородной системы к критическому поведению неупорядоченной системы.

Коротко-временная динамика



Janssen H.K., Schaub B., Schmittmann B. Z. Phys. B, 1989.

Коротко-временная динамика

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

a) релаксация из упорядоченного состояния $m_0 = 1$

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

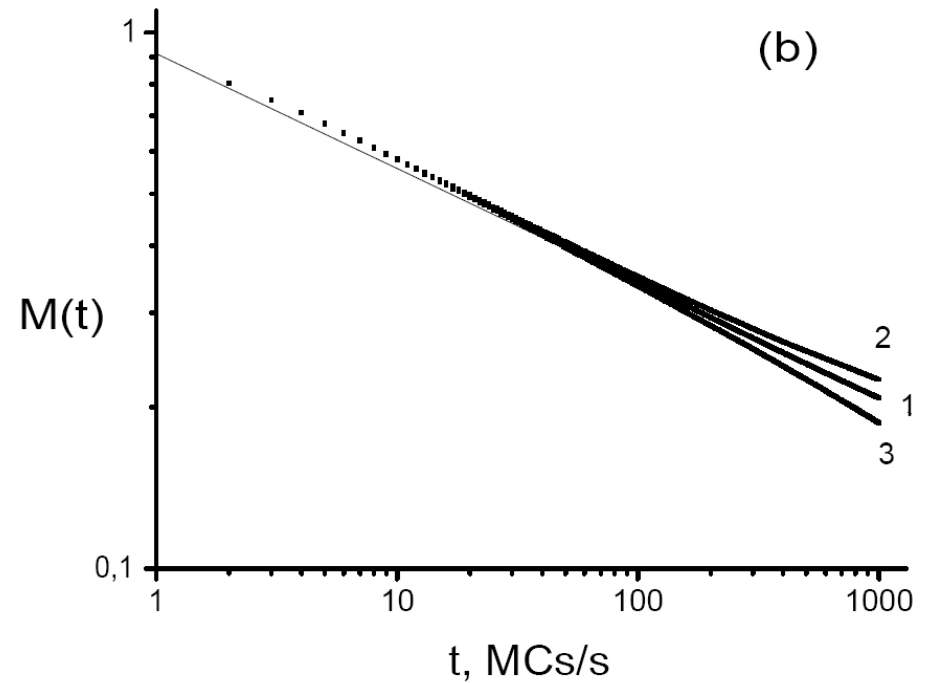
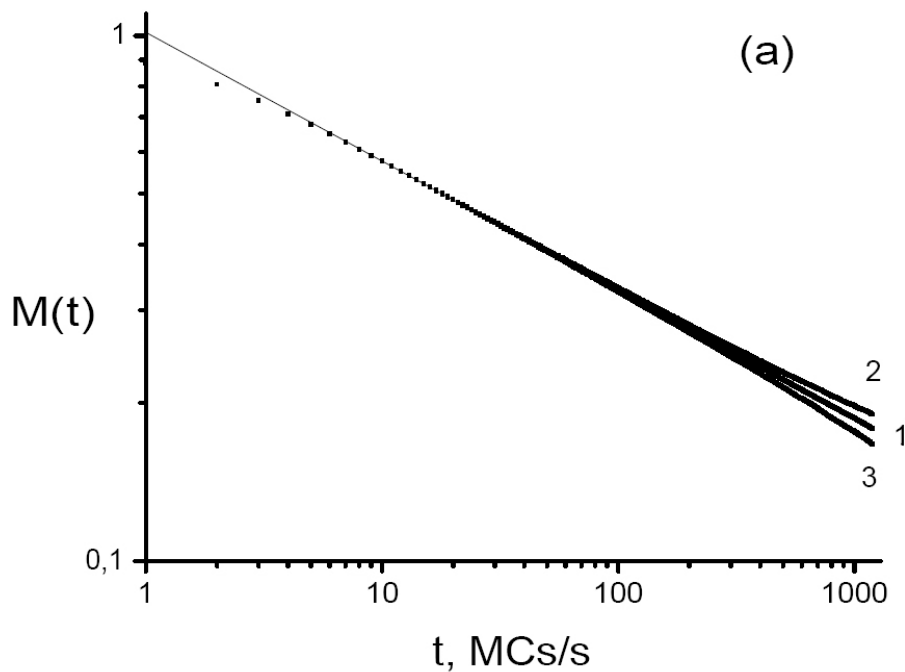
$$U_2 = \frac{[\langle M^2 \rangle]}{[\langle M \rangle]^2} - 1 = t^{d/z} U(1, t^{1/\nu z} \tau) \sim t^{d/z} \Big|_{\tau=0},$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \ln M(t, \tau) \Big|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}.$$

Условия моделирования

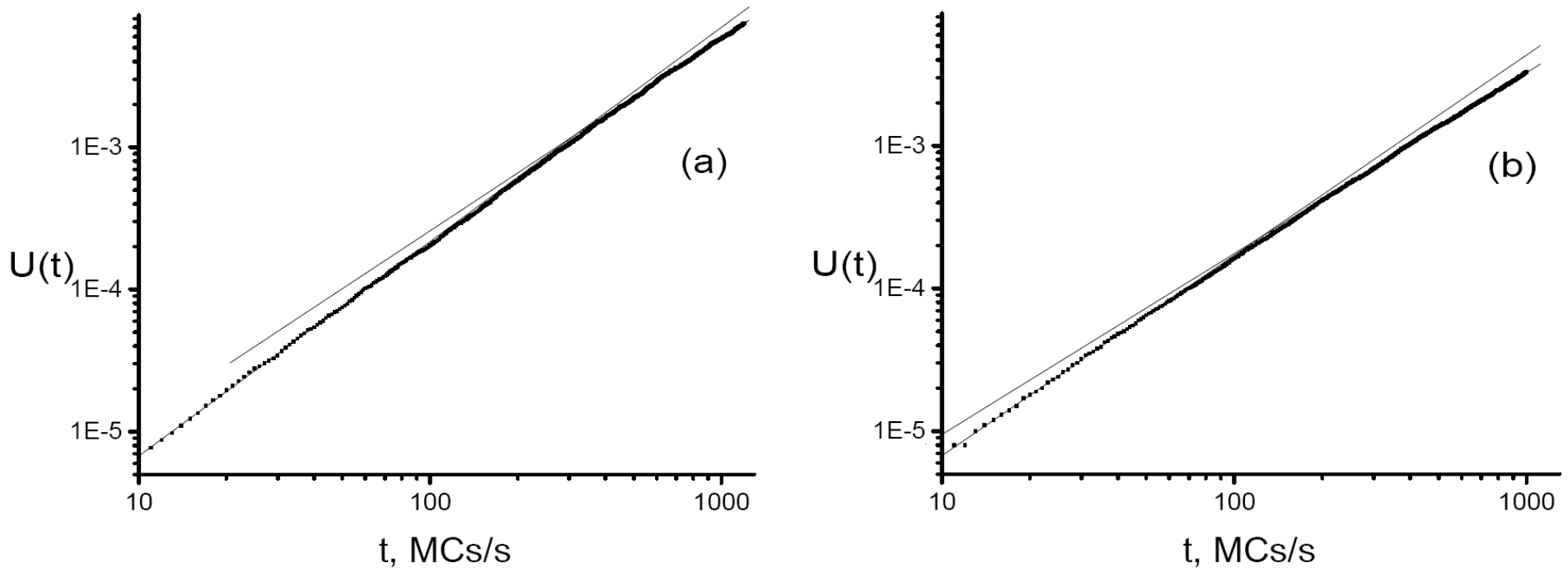
- Система: кубическая решетка с $L = 128$
- Спиновая концентрация $p = 0.95$
 - Критическая температура $T_c = 4.26267(4)$;
 - Усреднение по 6 000 прим.конфигураций;
- Спиновая концентрация $p = 0.8$
 - Критическая температура $T_c = 3.49948(18)$;
 - Усреднение по 50 000 прим.конфигураций;
- Спиновая концентрация $p = 0.6$
 - Критическая температура $T_c = 2.42413(9)$;
 - Усреднение по 18 000 прим.конфигураций;

Коротко-временная динамика



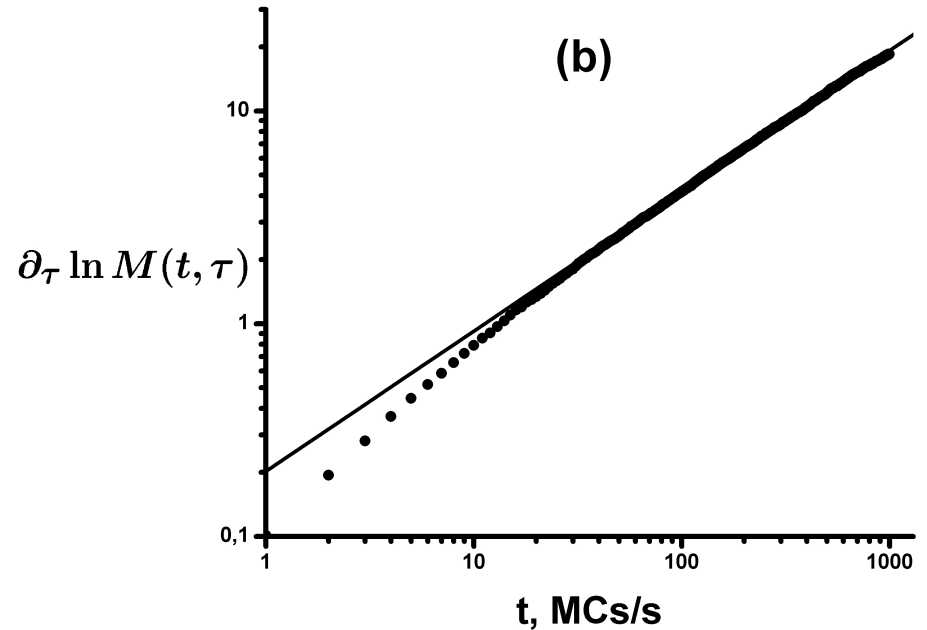
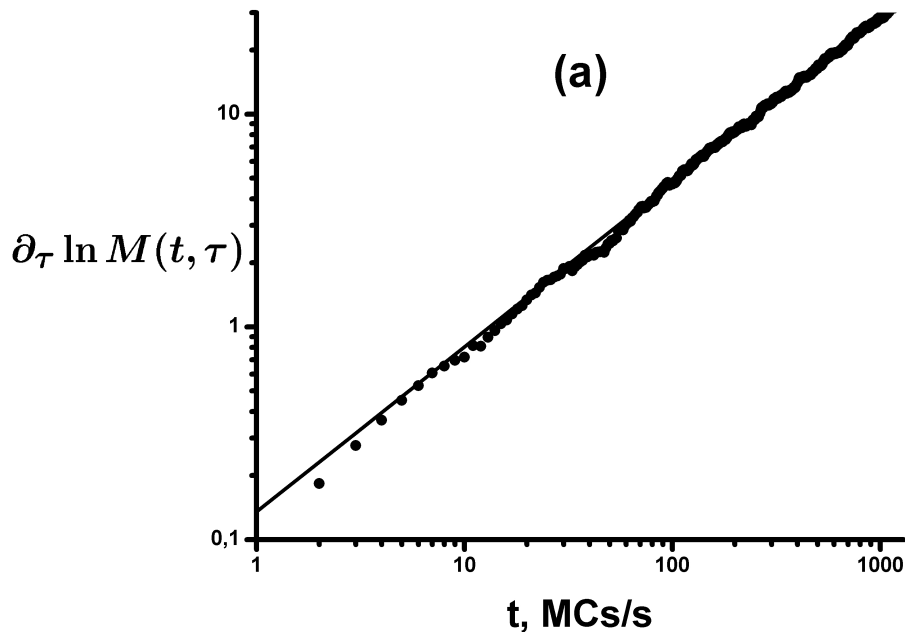
Временные зависимости намагниченности для систем с $p = 0.95$ **(a)** и $p = 0.80$ **(b)** при температурах T_c (кривая **1**) и $T_c \pm \Delta T$ (кривые **3** и **2**) в двойном логарифмическом масштабе.

Коротко-временная динамика



Временные зависимости критического поведения ($T = T_c$) кумулянта Биндера для систем с $p = 0.95$ **(a)** и $p = 0.80$ **(b)** в двойном логарифмическом масштабе

Коротко-временная динамика



Временные зависимости критического поведения ($T = T_c$) логарифмической производной намагниченности для систем с $p = 0.95$ **(a)** и $p = 0.80$ **(b)** в двойном логарифмическом масштабе

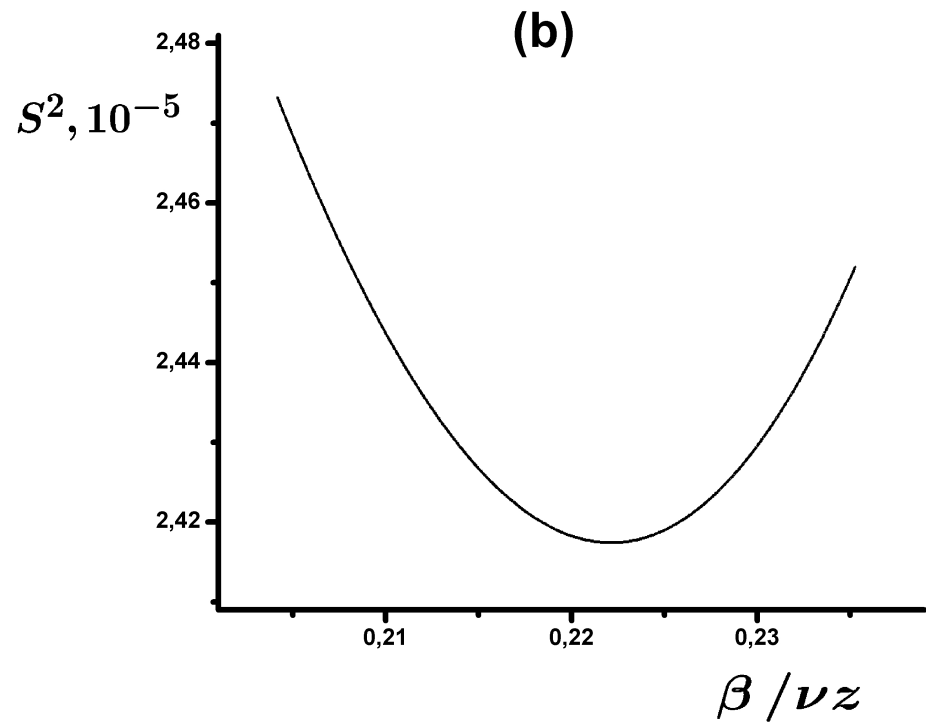
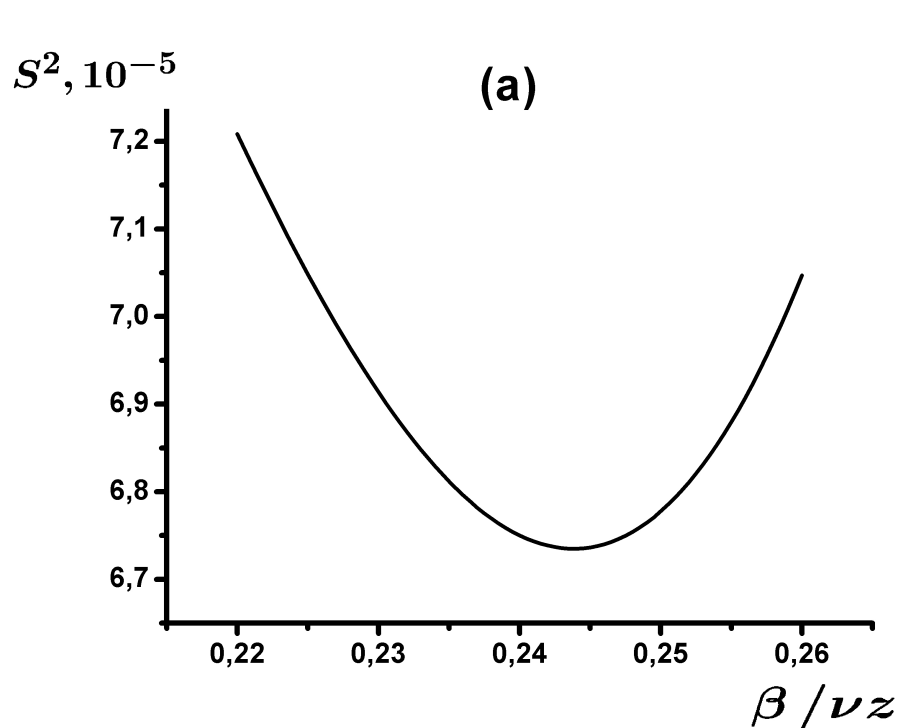
Поправки к скейлингу

Учет поправок к асимптотической зависимости измеряемых величин за счет влияния конечности моделируемых систем.

$$X(t) \sim t^{\Delta} \left(1 + A_x t^{-\omega/z} \right)$$

Для расчета значений критических показателей $\Delta = -\beta/\nu z$, $1/\nu z$, d/z применен метод наименьших квадратов для осуществления наилучшей аппроксимации значений $M(t)$, $U(t)$ и $\partial_{\tau} \ln M(t)$; показатель ω/z определялся из условия минимальности значений относительных погрешностей S^2 проведенных аппроксимаций.

Поправки к скейлингу



Погрешность аппроксимации намагниченности при значении $\omega/z = 0.181$ для систем с $p = 0.95$ **(a)** и при значении $\omega/z = 0.265$ для систем с $p = 0.80$ **(b)**



Критические индексы

система	z	β/ν	ν	β	ω
слабонеупорядоченная $p = 0.95$	2.185(17)	0.533(7)	0.668(22)	0.356(11)	0.369(92)
слабонеупорядоченная $p = 0.8$	2.208(22)	0.490(6)	0.685(23)	0.336(10)	0.397(97)
сильнонеупорядоченная $p = 0.6$	2.537(84)	0.644(84)			0.56(12)
Ballesteros H.G., Phys.Rev.B,1998 $p = 0.9 \div 0.4$			0.684(5)	0.355(3)	0.370(63)
Calabrese P., Phys.Rev.E,2003 $p = 0.8$			0.683(3)	0.354(2)	
Прудников В.В. и др. ЖЭТФ,2007 $p = 0.95 \div 0.8$			0.693(5)		0.26(13)
$p = 0.6 \div 0.5$			0.731(11)		0.28(15)
Прудников В.В. и др. ЖЭТФ,1993 $p = 0.8$	2.20(8)				
$p = 0.6$	2.58(9)				
$p = 0.4$	2.65(12)				
Wiseman S., Phys.Rev.E.,1998 $p = 0.6$			0.717(7)	0.313(12)	
Heuer H-O., J.Phys. A, 1993 $p = 0.6$	2.53(3)		0.72(2)	0.33(2)	
Pelissetto A., Phys.Rev.B,2000 (теор.пол.)		0.515(15)	0.678(10)	0.349(5)	0.25(10)
Прудников В.В. и др., ТМФ,2006 (теор.пол.)	2.1792(13)				
Rosov N., Phys.Rev.B,1992 (эксп.) $p = 0.9$	2.18(10)				

Коротко-временная динамика

b) эволюция из неупорядоченного состояния
 $m_0 = 0.03; 0.02; 0.01; 0.0001$

$$M(t) \sim t^\theta, \quad \theta = \left(x_0 - \frac{\beta}{\nu} \right) \frac{1}{z},$$

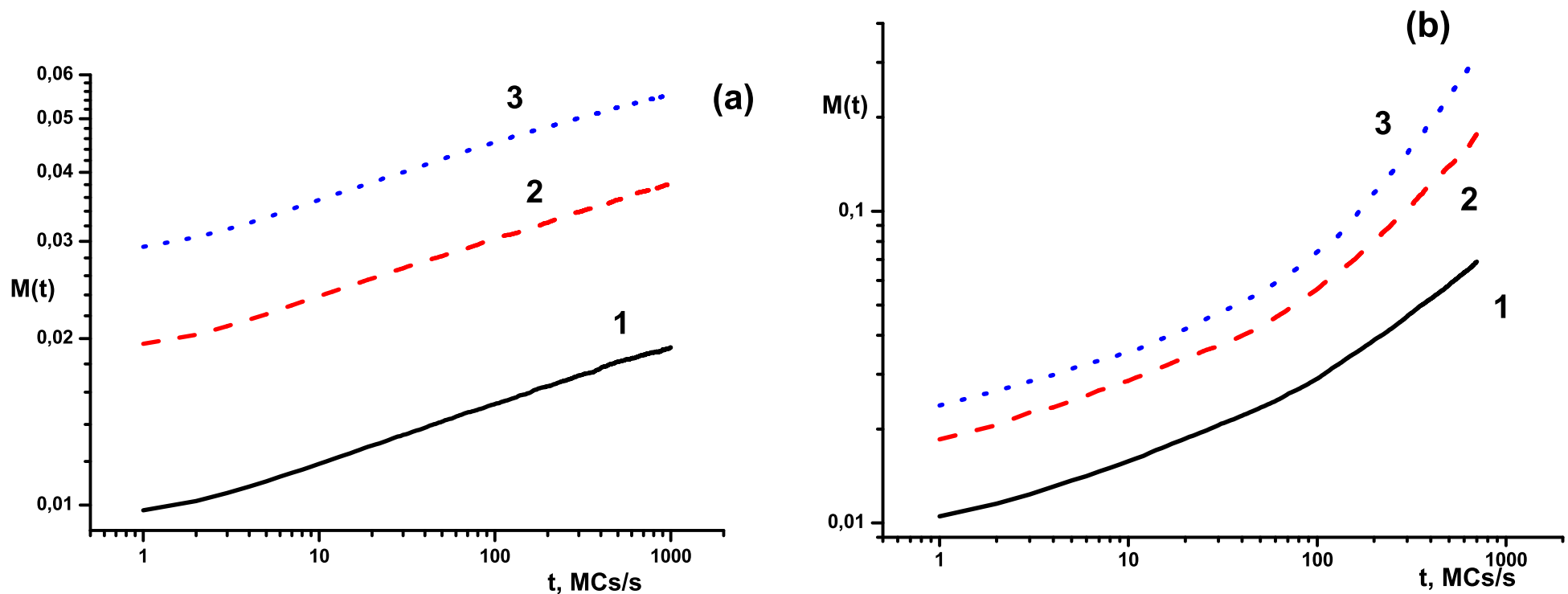
$$M^{(2)}(t) \sim t^{c_2}, \quad c_2 = \left(d - 2 \frac{\beta}{\nu} \right) \frac{1}{z},$$

$$A(t) = \frac{1}{N} \langle S_i(t) S_i(0) \rangle \sim t^{-c_a}, \quad c_a = \frac{d}{z} - \theta.$$

Параметры моделирования

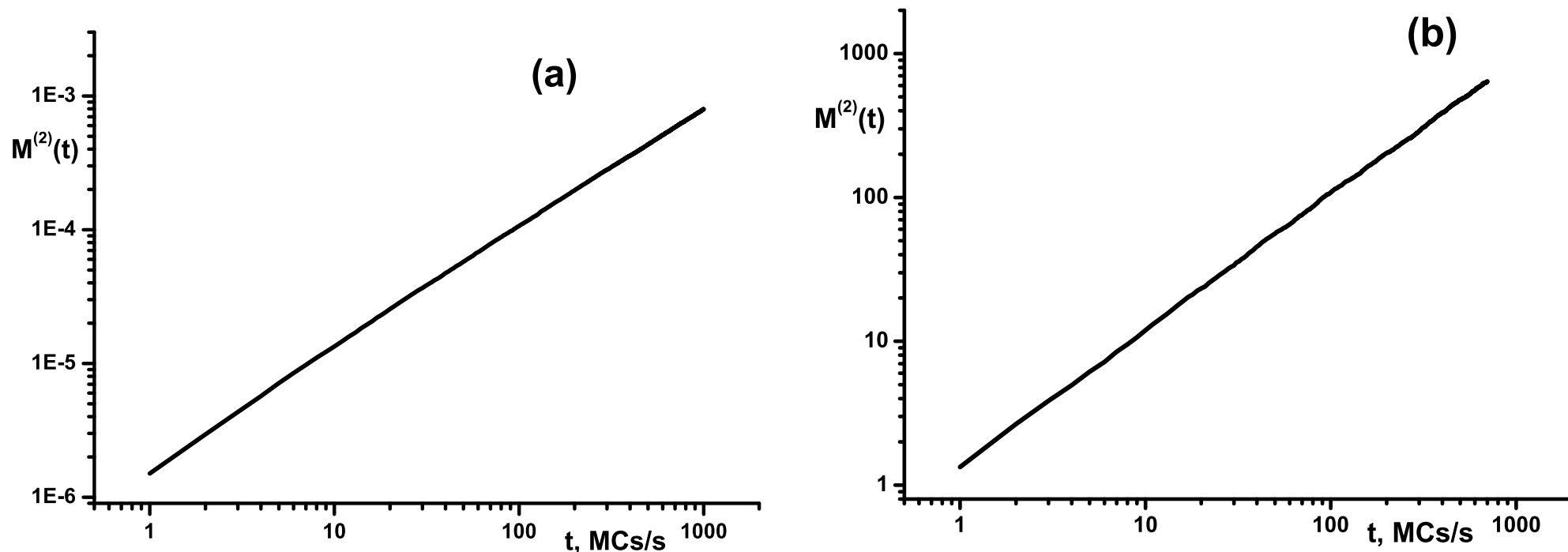
- Система: кубическая решетка с $L = 128$
- Спиновая концентрация $p = 0.8$
 - Критическая температура $T_c = 3.49948(18)$;
 - Усреднение по 1 000 прим.конфигураций;
 - Усреднение по 25 прогонам для каждой примесной конфигурации;
- Спиновая концентрация $p = 0.6$
 - Критическая температура $T_c = 2.42413(9)$;
 - Усреднение по 14 000 прим.конфигураций;
 - Усреднение по 10 прогонам для каждой примесной конфигурации;

Коротко-временная динамика



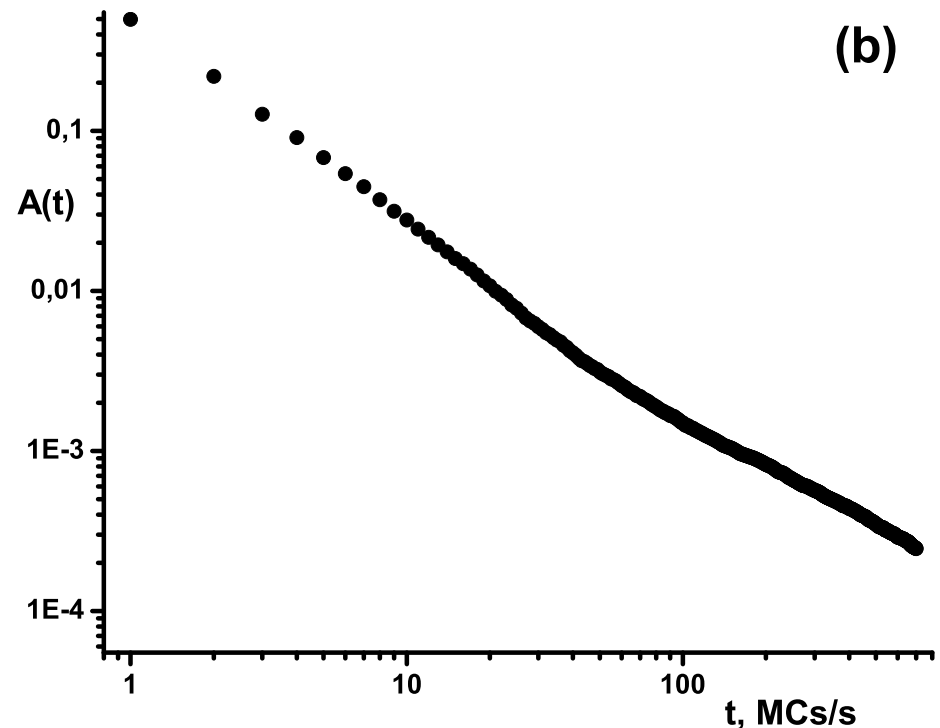
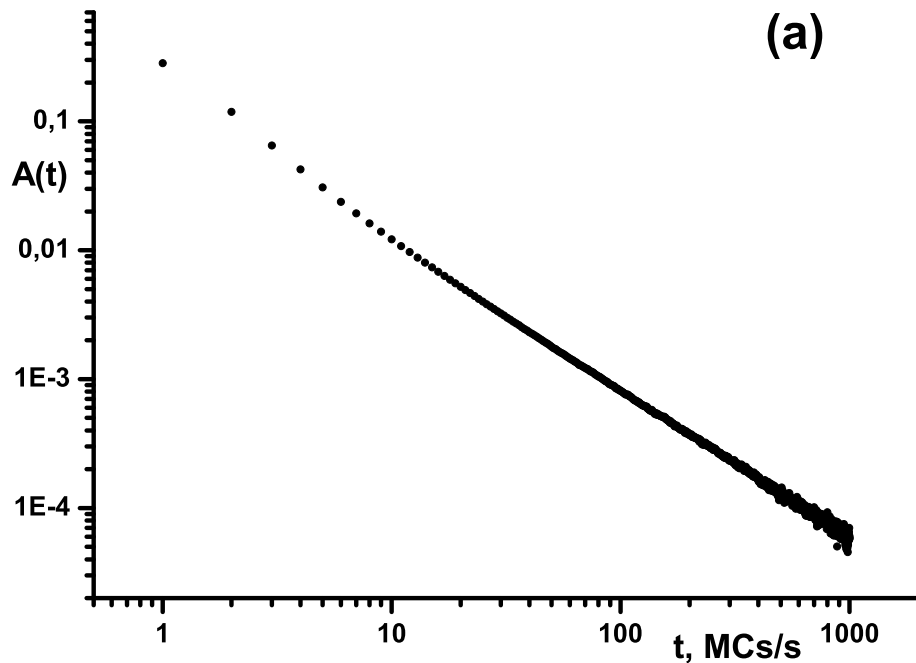
Временные зависимости критического поведения намагниченности для систем с $p = 0.80$ **(a)** и $p = 0.60$ **(b)** при начальных значениях $m_0 = 0.01$ **(1)**; 0.02 **(2)**; 0.03 **(3)** в двойном логарифмическом масштабе.

Коротко-временная динамика



Временные зависимости критического поведения ($T = T_c$) второго момента намагниченности $M^{(2)}(t)$ для систем с $p = 0.80$ (a) и $p = 0.60$ (b) в двойном логарифмическом масштабе.

Коротко-временная динамика



Временные зависимости критического поведения ($T = T_c$) автокорреляционной функции $A(t)$ для систем с $p = 0.80$ **(a)** и $p = 0.60$ **(b)** в двойном логарифмическом масштабе.

Индексы 3D модели Изинга



система	θ	z	β/ν	ν	β
однородная $t \in [10, 100]$	0.106(4)	2.03(3)	0.520(9)		
слабонеупор. $p = 0.8$ $t \in [300, 800]$	0.120(16)	2.185(10)	0.531(18)		
сильнонеупор. $p = 0.6$ $t \in [150, 700]$	0.270(39)	2.504(37)	0.524(16)		
Ballesteros H.G., et. al. Phys. Rev. B, 1998				0.684(5)	0.355(3)
Calabrese P., et. al. Phys. Rev. E, 2003				0.683(3)	0.354(2)
Прудников В.В. и др. ЖЭТФ, 1993		2.20(8)			
Schehr G., Paul R., 2005	0.10(2)				
Прудников В.В. и др., ТМФ, 2006 (теор.пол.)		2.1792(13)			
Janssen H.K., H.K. J.Phys.A, 1995 (теор.пол. ε)	0.087				
Прудников В.В. и др., 2009 (теор.пол. $d = 3$)	0.264				
Прудников В.В. и др., ЖЭТФ 2008 (ε $p = 1$)	0.1078(22)				
Rosov N., et.al., Phys. Rev. B, 1992 (эксп.)		2.18(10)			



Вычислительные ресурсы:

- Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН (Москва);
- Вычислительный кластер УГАТУ (Уфа);
- Вычислительный кластер ОмГУ (Омск);