

Динамика возмущений начального состояния системы в исследовании критического поведения неупорядоченных систем

В. В. Прудников¹⁾, А. Н. Вакилов, Д. В. Талашок

Омский государственный университет им. Достоевского, 644077 Омск, Россия

Поступила в редакцию 13 октября 2014 г.

Осуществлено компьютерное моделирование критической динамики в трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга методом динамики возмущения начального состояния системы. Для систем со спиновыми концентрациями $p = 0.8$ и 0.6 вычислены значения критических температур и динамического критического индекса z , характеризующего релаксационные свойства вблизи критической точки. Анализ полученных результатов показал неуниверсальность критической динамики неупорядоченной модели Изинга, для объяснения которой введены представления о двух универсальных типах критического поведения, соответствующих слабо и сильно неупорядоченным системам.

DOI: 10.7868/S0370274X14220159

Теоретическое и экспериментальное исследование критического поведения неупорядоченных систем с замороженными дефектами структуры представляет большой интерес. Большинство реальных твердых тел содержит замороженные дефекты структуры, присутствие которых влияет на характеристики систем и может сильно модифицировать их поведение при фазовых переходах. Это приводит к возникновению в структурно неупорядоченных системах новых сложных явлений, обусловленных эффектами аномально сильного взаимодействия флуктуаций ряда термодинамических величин, когда любое возмущение, вносимое дефектами структуры даже при их низкой концентрации, может привести к сильному изменению состояния системы. Для описания таких систем требуется разработка специальных аналитических и численных методов.

При изучении влияния структурного беспорядка на фазовые переходы второго рода возникают два вопроса: изменяются ли критические индексы “чистого” магнетика при разбавлении его примесью немагнитных атомов, а если да, то являются ли новые критические индексы универсальными, т.е. не зависящими от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции? Ответ на первый вопрос был дан в работе [1]. В ней было показано, что критические индексы систем с замороженными дефектами структуры изменяются по сравнению с их бездефектными аналогами, если критический индекс теплоемкости “чистой” системы положителен. Этому критерию

удовлетворяют лишь трехмерные системы, чье критическое поведение описывается моделью Изинга.

Исследованиям ренормгрупповыми методами, численными методами Монте-Карло и экспериментальным исследованиям критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков к настоящему моменту посвящено значительное количество работ [2–4]. И если на вопрос о существовании нового класса универсальности критического поведения, который образуют разбавленные изингоподобные магнетики, уже получен положительный ответ, то вопросы о независимости асимптотических значений критических индексов от степени разбавления системы, мере влияния кроссоверных эффектов на эти значения, а также о возможности существования двух или более режимов критического поведения для слабо и сильно неупорядоченных систем остаются открытыми и горячо обсуждаются.

В ряде работ, посвященных описанию критической динамики разбавленной трехмерной модели Изинга, в результате применения как ренормгруппового подхода, так и методов компьютерного моделирования было показано, что наличие дефектов структуры наиболее сильно проявляется в изменении значений динамического критического индекса z . Указанный индекс характеризует аномальный рост времени релаксации системы с приближением к температуре фазового перехода по сравнению с изменением значений статических критических индексов. В представленной работе для выявления влияния структурного беспорядка на динамические критические свойства трехмерной модели Изинга с концентрацией спинов $p = 0.8$ и 0.6 был применен метод

¹⁾e-mail: prudnikov@univer.omsk.su

динамики возмущения начального состояния системы. Этот метод компьютерного моделирования применяется как инструмент численной оценки критической температуры и критических индексов [5–7].

В рамках данного метода исследуется развитие двух конфигураций спинов (для определенности обозначим их А и В), эволюционирующих с одинаковой динамикой и одинаковой последовательностью случайных чисел. На каждом временном шаге рассматривается различие между данными спиновыми конфигурациями в узлах с одинаковыми пространственными координатами. Величина, характеризующая различие между такими системами, называется расстоянием Хемминга (*Hamming distance*). Математически ее можно представить в следующем виде:

$$D(L, T, t) = \frac{1}{2N_s} \sum_{i=1}^{N_s} |S_i^A(t) - S_i^B(t)|, \quad (1)$$

где $N_s = pL^d$ – число спинов, находящихся в одной спиновой конфигурации. В общем случае расстояние Хемминга между спиновыми конфигурациями зависит от температуры T , времени моделирования t , линейного размера решетки L , граничных условий и начального состояния спиновых конфигураций $S_i^A(0)$ и $S_i^B(0)$. Для того чтобы уменьшить погрешности проводимых вычислений, необходимо осуществлять неоднократное повторение эксперимента с использованием различных примесных конфигураций. Поэтому при расчете целесообразно использовать среднее значение величины $D(L, T, t)$:

$$\langle D(L, T, t) \rangle = \frac{1}{N_I} \sum_{j=1}^{N_I} D_j(L, T, t), \quad (2)$$

где $D_j(L, T, t)$ – расстояние для j -го независимого испытания, N_I – число испытаний. При проведении компьютерного моделирования было выбрано низкотемпературное начальное состояние, в котором система является полностью упорядоченной, т.е. все спины системы ориентированы в одном направлении. Рассматривались две спиновые конфигурации с противоположными по направлению приведенными суммарными значениями магнитного момента, равными по модулю единице:

$$\{S_i^A(0)\} = -\{S_i^B(0)\} = 1. \quad (3)$$

С целью выявления влияния динамики эволюции системы на величины критических показателей были проведены два независимых исследования с выбором различных типов эволюции спиновых систем и с последующим применением метода динамики возмущения начального состояния системы. Для численной

реализации эволюции спиновых систем применялся алгоритм Метрополиса с динамикой односпиновых переворотов [8, 9]. При исследовании поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга с линейным размером решетки $L = 32$ на временном промежутке $t = 500$ MCS/s при различных температурах (рис. 1) были выявлены две температурные области. В пер-

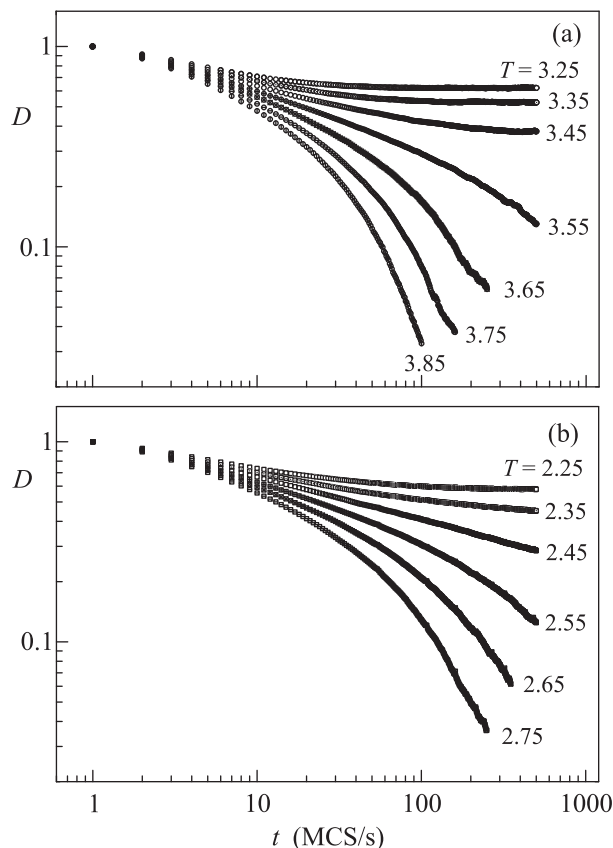


Рис. 1. Зависимости расстояния Хемминга от времени моделирования для трехмерной модели Изинга в случае $p = 0.8$ (а) и 0.6 (б) при различных температурах

вой из них убывающая функция $D(t)$ характеризуется малыми изменениями и достаточно быстро приходит к некоторому равновесному постоянному значению. Вторая область характеризуется сильно убывающей функцией $D(t)$, не стремящейся к постоянной величине. Исходя из такого поведения функции расстояния Хемминга можно сделать заключение о том, что температура фазового перехода находится в температурном промежутке между двумя этими областями. Результаты проведенных исследований поведения $D(t)$ для трехмерной модели Изинга со спиновыми концентрациями $p = 0.8$ и 0.6 представлены на рис. 1.

В соответствии с полученными результатами критическую температуру исследуемых систем можно оценить как $T_c = 3.50(5)$ для $p = 0.8$ и $T_c = 2.40(5)$ для $p = 0.6$. Более точные значения критических температур можно получить с использованием методов конечномерной теории скейлинга. Для этого введем характеристическое время τ_1 и квадрат времени τ_2 со скейлинговыми зависимостями вида [5]

$$\tau_1(L, T) = \frac{\sum_t \langle tD(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (4)$$

$$\tau_2(L, T) = \frac{\sum_t \langle t^2 D(L, T, t) \rangle}{\sum_t \langle D(L, T, t) \rangle}, \quad (5)$$

$$\tau_1(L, T) = u(L) f_1[v(L)(T - T_c)], \quad (6)$$

$$\tau_2(L, T) = u^2(L) f_2[v(L)(T - T_c)]. \quad (7)$$

Из выражений (6) и (7) следует, что отношение данных времен

$$R(L, T) = \frac{\tau_2(L, T)}{\tau_1^2(L, T)} \quad (8)$$

при $T = T_c$ не будет зависеть от линейного размера решетки L . Таким образом, если построить характеристические кривые для величины $R(L, T)$ как функции температуры для различных L , то они пересекутся в точке, соответствующей критической температуре. Полученные температурные зависимости $R(L, T)$ для систем с линейными размерами решеток $L = 16, 32$ и 64 показаны на рис. 2. Проведенные исследования позволили получить следующие результаты: для $p = 0.8$ $T_c = 3.500(7)$, для $p = 0.6$ $T_c = 2.498(7)$. Рассчитанные значения критических температур находятся в хорошем соответствии с результатами, полученными для данных систем в других работах (табл. 1). При температурах, близких к

Таблица 1

Значения критической температуры для трехмерной модели Изинга с концентрацией спинов $p = 0.8$ и 0.6

Источник	$T_c(p = 0.8)$	$T_c(p = 0.6)$
Данная работа	3.500(7)	2.498(7)
[10]	3.49942(1)	2.42418(5)
[11]	3.4992(5)	2.4220(6)
[4]	3.4956(6)	2.4178(6)
[12]		3.49962(24)
[13]		3.49972(47)
[14]	3.4959(2)	2.4178(2)
[15]	3.49948(18)	2.42413(9)

температуре фазового перехода, наблюдаются аномально большие и долгоживущие флуктуации параметра порядка с эффектами сильной пространственной и временной корреляции. В качестве величины,

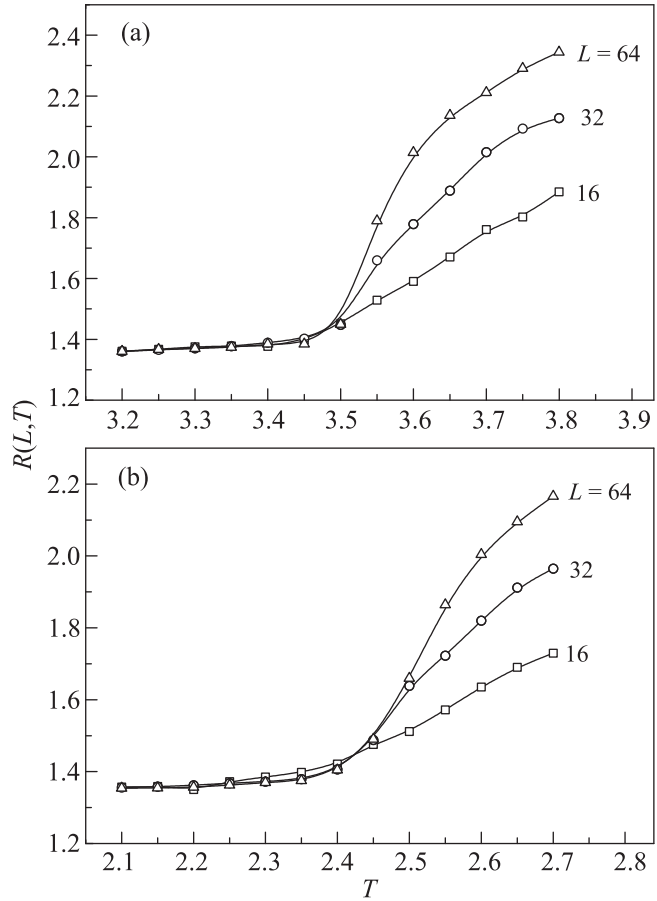


Рис. 2. Зависимости $R(L, T)$ для трехмерной модели Изинга в случае $p = 0.8$ (a) и 0.6 (b)

характеризующей такие флуктуации, выступает корреляционная длина $\xi(T)$ – средний линейный размер магнитных доменов как макроскопических областей с сильно коррелированными спинами. Из-за долгоживущих флуктуаций параметра порядка и эффектов сильной корреляции время релаксации системы τ_r в окрестности T_c неограниченно возрастает. Для описания критического замедления релаксации системы вводят динамический критический индекс z :

$$\tau_r \sim \xi(T)^z. \quad (9)$$

При моделировании конечных систем рост корреляционной длины $\xi(T)$ вблизи критической температуры T_c ограничивается размером системы L , т.е. $\xi(T) \sim L$. В результате для времени релаксации системы вблизи критической температуры будет справедливым соотношение

$$\tau_r \sim L^z. \quad (10)$$

В рамках метода динамики возмущения начального состояния в качестве времени релаксации системы

выступает введенное в (4) характеристическое время $\tau_1(L, T)$. Таким образом, для вычисления критического динамического индекса z нам требуется исследовать зависимость времени $\tau_1(L, T)$ от линейного размера решетки при соответствующей критической температуре. При реализации численного эксперимента рассматривались кубические решетки с линейными размерами $L = 8, 16, 32, 64$. Результаты линейной аппроксимации зависимости полученных значений τ_1 от размера L данных решеток, осуществленной в двойном логарифмическом масштабе, представлены на рис. 3.

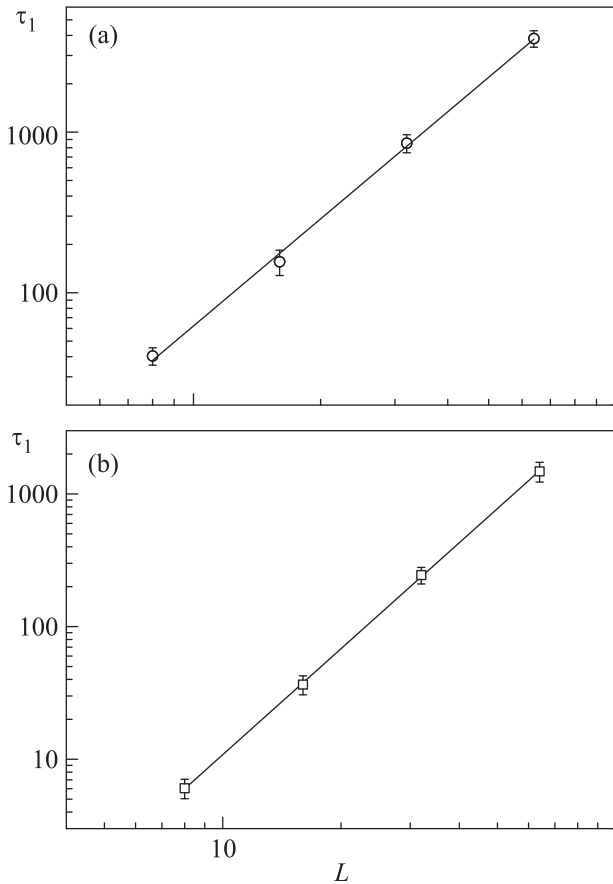


Рис. 3. Зависимость времени релаксации от линейного размера решетки L ($L = 8, 16, 32, 64$) для трехмерной модели Изинга в случае $p = 0.8$ (а) и 0.6 (б)

Путем анализа проведенных аппроксимаций были получены следующие значения критического индекса z для трехмерной структурно неупорядоченной модели Изинга с исследуемыми спиновыми концентрациями: $z(0.8) = 2.21(6)$ и $z(0.6) = 2.61(7)$.

Нами были также учтены ведущие поправки к асимптотической зависимости времени релаксации вследствие влияния конечности моделируемых си-

стем. Только учет данных поправок к скейлингу позволяет получать корректные значения критических индексов в термодинамическом пределе:

$$\tau_r = AL^z(1 + BL^{-\omega}), \quad (11)$$

где ω – критический индекс поправки к скейлингу. Значения ω для различных спиновых концентраций были взяты из работы [15]: $\omega(0.8) = 0.23(13)$, $\omega(0.6) = 0.28(15)$. С учетом поправки к скейлингу получены следующие значения: $z(0.8) = 2.28(7)$, $A(0.8) = 0.21$, $B(0.8) = 0.91$ и $z(0.6) = 2.67(8)$, $A(0.6) = 0.02$, $B(0.6) = 0.147$.

Для сопоставления с полученными значениями в табл. 2 представлены результаты других работ по определению методами компьютерного моделирования динамического индекса z для трехмерной модели Изинга с различными спиновыми концентрациями.

Проведенное сравнение показывает, что значение z для образцов с концентрацией спинов $p = 0.8$, найденное в данной работе, находится в достаточно хорошем соответствии со значениями, полученными в работах [16, 11, 17, 19]. Вместе с тем оно существенно отличается от результатов работы [18]. В этой работе был проведен анализ численного исследования критической динамики трехмерной модели Изинга со спиновой концентрацией, изменяющейся в широком интервале. Исходя из идеи универсальности критического поведения неупорядоченных систем для всех концентраций дефектов с учетом влияния ведущих поправок к скейлингу для динамической восприимчивости системы авторы [18] выделили асимптотическое значение индекса $z = 2.62(7)$. При этом полученное ими значение индекса поправки к скейлингу, $\omega = 0.50(13)$, находится в сильном несоответствии с результатами теоретико-полевого расчета, $\omega = 0.25(10)$ [20], а также с результатами численного исследования той же модели, давшими $\omega = 0.37(6)$ [13] и $\omega(0.8) = 0.23(13)$ [15]. Для сильно неупорядоченной системы с концентрацией спинов $p = 0.6$ результаты нашей работы с $z(0.6) = 2.67(8)$ хорошо согласуются с результатами работ [16, 11] и той же работой [18]. Из Табл. 2 наглядно видно, что в большинстве работ выявлено существенное увеличение динамического индекса z с увеличением содержания в системе примесей. Основываясь на этом, можно в действительности говорить о неуниверсальности критического поведения для неупорядоченной модели Изинга. Изменение типа критического поведения при концентрации спинов $p > 0.69$ мы связываем с появлением в системе протяженных примесных кластеров с длиной связности, сравнимой с корреляционной длиной системы. Для кубической решет-

ки спинов при концентрации примесей в ней, равной 0.3117, примесный кластер имеет фрактальную размерность $d_f = 2.54$ [9]. Это соответствует параметру a в модели Вейнриба–Гальперина с дальнедействующей изотропной корреляцией дефектов, характеризуемой функцией $g(r) \sim r^{-a}$ [21–26]. При увеличении концентрации примесей вплоть до порога спиновой перколяции в системе существует как протекающий примесный кластер сложной структуры с длиной связности, сравнимой с корреляционной длиной, так и множество малых кластеров. При этом в системе одновременно присутствуют протяженные плоские, линейные и объемные дефекты с различной длиной связности. Влияние этих дефектов и приводит к критическому поведению отличному от критического поведения для слабо неупорядоченной модели Изинга. В результате можно предсказывать как минимум два типа универсального критического поведения в структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Они соответствуют поведению слабо неупорядоченных систем со спиновой концентрацией $p_c^{(\text{imp})} < p < 1$ и поведению сильно неупорядоченных систем с $p_c^{(s)} < p < p_c^{(\text{imp})}$, где $p_c^{(\text{imp})}$ и $p_c^{(s)}$ – пороги примесной и спиновой перколяции соответственно (для кубических решеток в приближении взаимодействия ближайших соседей $p_c^{(s)} = 0.3117$ и $p_c^{(\text{imp})} = 1 - p_c^{(s)} = 0.6883$). Вблизи границ данных интервалов спиновой концентрации можно ожидать влияния кроссоверных эффектов для слабо неупорядоченных систем со стороны критического поведения “чистых” систем с $p = 1$ (см. результаты работы [17]) и критического поведения вблизи порога примесной перколяции, а для сильно неупорядоченных систем – со стороны критического поведения вблизи порогов примесной и спиновой перколяции. Данные представления позволяют более адекватно объяснить весь накопленный материал по описанию как равновесного, так и неравновесного критического поведения в структурно неупорядоченной трехмерной модели Изинга.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект # 14-12-00562). Для проведения расчетов были использованы ресурсы суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. A. V. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
2. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
3. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).

Значения критического индекса z и их сравнение с результатами других работ

z	
Настоящая работа, $p = 0.8$	2.28(7)
Настоящая работа, $p = 0.6$	2.67(8)
[16], $p = 0.95$	2.19(7)
$p = 0.8$	2.20(8)
$p = 0.6$	2.58 (9)
[11], $p = 0.95$	2.16(1)
$p = 0.9$	2.232(4)
$p = 0.8$	2.38(1)
$p = 0.6$	2.53(3)
[17], $p = 0.95$	2.185(25)
$p = 0.8$	2.208(32)
[18], $p = 0.8, p = 0.6, p = 0.95$	2.62(7)
[19], $p = 0.8, p = 0.6$	2.35(2)

4. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
5. F. Wang, N. Hatono, and M. Suzuki, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 4543 (1995).
6. G. G. Batrouni and A. Hansen, J. Stat. Phys. A.: Math. Gen. **25**, 1059 (1992).
7. S. C. Glotzer, P. H. Poole, and N. Jan, J. Stat. Phys. **68**, 895(1992).
8. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, П. В. Прудников, *Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования*, Физматлит, М. (2009), 224 с.
9. Х. Гулд, Я. Тобочник, *Компьютерное моделирование в физике*, в 2 частях, Мир, М. (1992), ч. 2, 400 с.
10. S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1988); Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998).
11. Н.-О. Heuer, J. Phys. A **26**, L333 (1993).
12. P. Calabrese, V. Martin-Mayor, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. E **68**, 036136 (2003).
13. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor, M. Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
14. J. S. Wang and D. Chowdhury, J. Phys. (Paris) **50**, 2905 (1989).
15. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницын, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
16. В. В. Прудников, А. Н. Вакилов, ЖЭТФ **103**, 962 (1993).
17. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. S. Krinitsyn, A. N. Vakulov, E. A. Pospelov, and M. V. Rychkov, Phys. Rev. E **81**, 011130 (2010).

18. G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, Phys. Rev. E **60**, 5198 (1999).
19. M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari, J. Stat. Mech., P11009, (2007).
20. A. Ptilisetto and E. Vicari, Phys. Rev. B **62**, 6393 (2000).
21. A. Weinrib and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **27**, 413 (1983).
22. V. V. Prudnikov, J. Phys. C **16**, 3685 (1983).
23. V. V. Prudnikov and I. D. Lawrie, J. Phys. C **17**, 1655 (1984).
24. S. N. Dorogovtsev, Sov. Phys. JETP **53**, 1070, (1981).
25. V. V. Prudnikov and A. A. Fedorenko, J. Phys. A: Math. Gen **32**, L399 (1999).
26. V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, and A. A. Fedorenko, J. Phys. A.: Math. Gen. **32**, 8587 (1999).