

05,11

Критическая релаксация трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга

© В.А. Мутайламов¹, А.К. Муртазаев^{1,2}

¹ Институт физики ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия

E-mail: vadim.mut@mail.ru

Методом коротковременной динамики изучена критическая релаксация из низкотемпературного упорядоченного состояния трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на простой кубической решетке. Исследованы системы кубической формы с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L = 32, 64, 96$ и 128 в каждом кристаллографическом направлении. Вычисления проводились методом Монте-Карло с использованием стандартного алгоритма Метрополиса. Рассчитаны значения статических критических индексов намагниченности и радиуса корреляции, а также величины динамического критического индекса.

DOI: 10.21883/FTT.2018.06.45984.12M

1. Введение

Исследование динамических критических свойств спиновых систем является одной из актуальных задач современной статистической физики и физики фазовых переходов. К настоящему времени в этой области достигнуты существенные успехи, обусловленные главным образом теоретическими и экспериментальными исследованиями. Тем не менее построение строгой и последовательной теории динамических критических явлений на основе микроскопических гамильтонианов является одной из центральных проблем современной теории фазовых переходов и критических явлений, которая все еще далека от своего решения.

В последнее время для изучения критической динамики моделей магнитных материалов стал успешно применяться метод коротковременной динамики (short-time dynamic) [1–5], в котором в рамках модели А (классификация классов универсальности динамического критического поведения Хальперина и Хоэнберга [6]) исследуется критическая релаксация магнитной модели из неравновесного состояния в равновесное. Традиционно считается, что универсальное скейлинговое поведение существует только в состоянии термодинамического равновесия. Однако было показано, что универсальное скейлинговое поведение для некоторых динамических систем может реализовываться на ранних этапах их временной эволюции из высокотемпературного неупорядоченного состояния в состояние, соответствующее температуре фазового перехода [7]. Такое поведение реализуется после некоторого отрезка времени, который является достаточно большим в микроскопическом смысле, но остается малым в макроскопическом. Аналогичная картина наблюдается и в случае эволюции системы из низкотемпературного упорядоченного состояния [1,2].

Ранее нами методом коротковременной динамики исследована критическая релаксация из низкотемператур-

ного упорядоченного состояния трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на простой кубической решетке для линейного размера $L = 64$ [8]. В настоящей работе для оценки влияния размеров систем на получаемый результат мы исследовали критическую релаксацию данной модели для линейных размеров $L = 32, 64, 96$ и 128 . Кроме того, мы улучшили статистику вычислений и изменили метод определения критической температуры. Это позволило нам увеличить точность определения значений критической температуры и критических индексов.

2. Методика исследований

Используя метод ренормгруппы, авторы [7] показали, что вдали от точки равновесия после микроскопически малого отрезка времени для k -го момента намагниченности реализуется скейлинговая форма

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

где $M^{(k)}$ — k -й момент намагниченности; t — время; τ — приведенная температура; L — линейный размер системы; b — масштабный фактор; β и ν — статические критические индексы намагниченности и радиуса корреляции; z — динамический критический индекс; x_0 — новый независимый критический индекс, определяющий скейлинговую размерность начальной намагниченности m_0 .

При старте из низкотемпературного упорядоченного состояния ($m_0 = 1$) в критической точке ($\tau = 0$), полагая $b = t^{1/z}$ в уравнении (1), для систем с достаточно большими линейными размерами L теория предсказывает степенное поведение намагниченности в коротковременном режиме

$$M(t) \sim t^{-c_1}, \quad c_1 = \frac{\beta}{\nu z}. \quad (2)$$

Логарифмируя обе части уравнения (2) и беря производные по τ при $\tau = 0$, получаем степенной закон для логарифмической производной

$$\partial_\tau \ln M(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{-c_l}, \quad c_l = \frac{1}{\nu z}. \quad (3)$$

Для куммулянта Биндера $U_L(t)$, рассчитываемого по первому и второму моментам намагниченности, теория конечно-размерного скейлинга дает следующую зависимость при $\tau = 0$:

$$U_L(t) = \frac{M^{(2)}}{(M)^2} - 1 \sim t^{c_U}, \quad c_U = \frac{d}{z}, \quad (4)$$

где d — размерность системы.

Таким образом, в ходе одного численного эксперимента метод коротковременной динамики позволяет с использованием соотношений (2)–(4) определить значения трех критических индексов β, ν и z . Кроме того, зависимости (2), построенные при различных значениях температуры, позволяют определить величину T_c по их отклонению от прямой линии в двойном логарифмическом масштабе.

3. Модель

С использованием данного метода нами исследована критическая релаксация из низкотемпературного упорядоченного состояния трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на простой кубической решетке. Впервые данная модель была предложена Вильямом [9] в двумерном случае на квадратной решетке для описания спиновых стекол. В дальнейшем она была обобщена Бланкштейном [10] для трехмерного случая. Схематически модель показана на рис. 1.

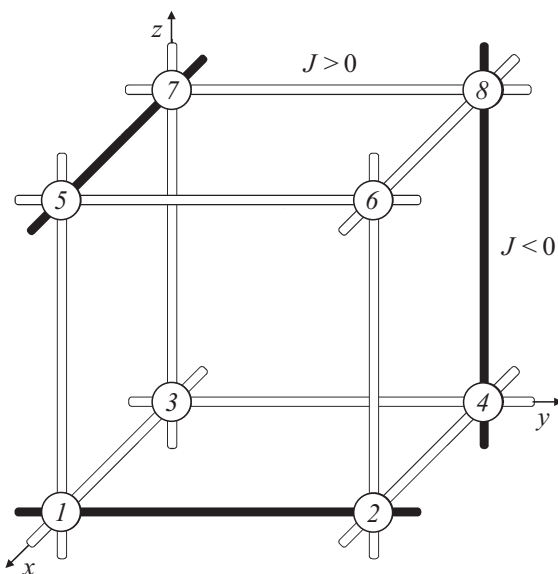


Рис. 1. Полностью фрустрированная модель Изинга на простой кубической решетке. Белым цветом отмечены ферромагнитные связи ($J > 0$), черным — антиферромагнитные ($J < 0$).

Интерес к данной модели обусловлен тем, что при изучении фрустрированных систем основное внимание уделяется моделям на треугольной и гексагональной решетках, тогда как свойства моделей на кубической решетке исследованы мало. В том числе, практически не изучено динамическое критическое поведение данных систем.

Гамильтониан фрустрированной модели Изинга может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{(i,k)} J_{ik} S_i S_k, \quad S_i = \pm 1, \quad (5)$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки i ; J_{ik} — обменное взаимодействие между спинами для ферромагнитных ($J > 0$) и антиферромагнитных ($J < 0$) связей. Фрустрации в этой модели обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий [9].

4. Результаты

Нами исследованы системы кубической формы с периодическими граничными условиями, содержащие $L \times L \times L$ элементарных ячеек. Вычисления проводились для систем с линейными размерами $L = 32, 64, 96$ и 128 , содержащими соответственно $N = 32\,768, 262\,144, 884\,736$ и $2\,097\,152$ спинов, методом Монте-Карло с использованием стандартного алгоритма Метрополиса. Релаксация системы осуществлялась из начального низкотемпературного полностью упорядоченного состояния со стартовым значением намагниченности $m_0 = 1$ в течение времени $t_{\max} = 1000$, где в качестве единицы „времени“ брался один шаг расчета методом Монте-Карло на спин. Релаксационные зависимости для каждого значения температуры вычислялись n раз, полученные данные усреднялись. Величина n выбиралась в зависимости от размера системы и составляла $n = 10^5$ для $L = 32$ и $L = 64, n = 8 \cdot 10^4$ для $L = 96$ и $n = 7 \cdot 10^4$ для $L = 128$. Отметим, что в [8] мы использовали значение $n = 5 \cdot 10^4$ для линейного размера $L = 64$.

Для каждого линейного размера вычисления проводились при пяти значениях температуры в окрестностях точки фазового перехода. Значения этих температур в единицах обменного интеграла $k_b T / |J|$ приведены в табл. 1. Величина T_3 выбиралась максимально близкой к величине T_c . По полученным результатам методом

Таблица 1. Значения температур, при которых проводились вычисления

L	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5
32	1.3387	1.3437	1.3487	1.3537	1.3587
64	1.3387	1.3437	1.3487	1.3537	1.3587
96	1.3389	1.3439	1.3489	1.3539	1.3589
128	1.3387	1.3437	1.3487	1.3537	1.3587

Таблица 2. Значения критических индексов и критических температур

L	T_c	c_1	c_{11}	c_U	β	ν	z
32	1.34362(2)	0.142(3)	0.702(3)	1.186(7)	0.202(4)	0.563(4)	2.530(7)
64	1.34872(3)	0.184(3)	0.839(3)	1.343(7)	0.220(4)	0.534(4)	2.234(7)
96	1.34870(3)	0.183(3)	0.839(3)	1.345(7)	0.218(4)	0.534(4)	2.230(7)
128	1.34873(3)	0.183(3)	0.839(3)	1.344(7)	0.218(4)	0.534(4)	2.232(7)

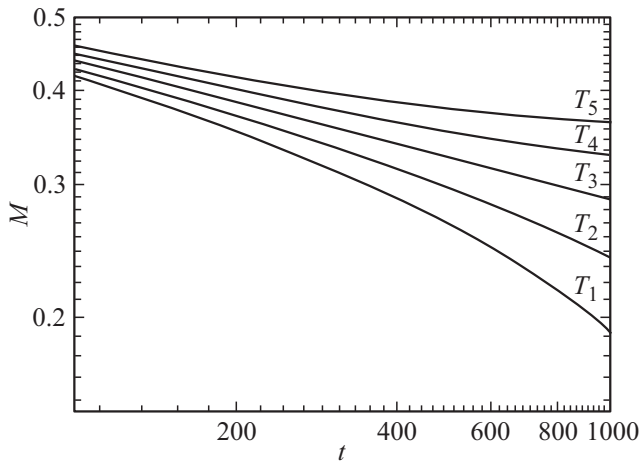


Рис. 2. Зависимость намагниченности от времени при пяти значениях температур для линейного размера $L = 64$. Величины температур указаны в табл. 1.

наименьших квадратов проводилась аппроксимация зависимостей (2), (3) и (4) в интервале температур от T_1 до T_5 с шагом $\Delta T = 10^{-5}$.

Критическая температура определялась по зависимости намагниченности от времени (2), которая в точке фазового перехода должна представлять собой прямую линию в двойном логарифмическом масштабе. Отклонение от прямой линии определялось методом наименьших квадратов. За критическую принималась температура, при которой это отклонение было минимальным. Рис. 2 демонстрирует типичную зависимость намагниченности от времени при различных значениях температуры (здесь и далее все величины приведены в условных единицах). Найденные таким образом значения критических температур для всех линейных размеров приведены в табл. 2.

В работе [8] мы анализировали температурные кривые намагниченности с шагом $\Delta T = 10^{-4}$ в области точки фазового перехода, после чего проводили прямые вычисления при найденной критической температуре. Изменение методики определения критической температуры в настоящей работе позволило увеличить точность наших вычислений.

Полученные нами зависимости намагниченности, ее логарифмической производной и куммулянта Биндера от времени в критической точке в двойном логарифмическом масштабе в интервале времени $t = [10; 1000]$

представлены соответственно на рис. 3, 4 и 5. Сплошными линиями на графиках представлены результаты для линейных размеров $L = 64, 96$ и 128 . Пунктирными линиями представлены результаты для линейного размера $L = 32$.

Как видно из рис. 3 и 4, графики для $L = 64, 96$ и 128 практически совпадают друг с другом. Так, например, разница в значениях M в каждый момент времени t для всех этих размеров L составляет порядка 10^{-3} . При этом

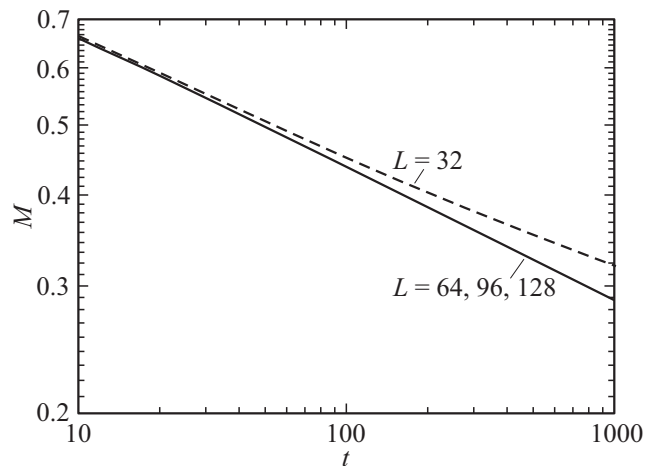


Рис. 3. Зависимость намагниченности от времени в точке фазового перехода для всех линейных размеров L .

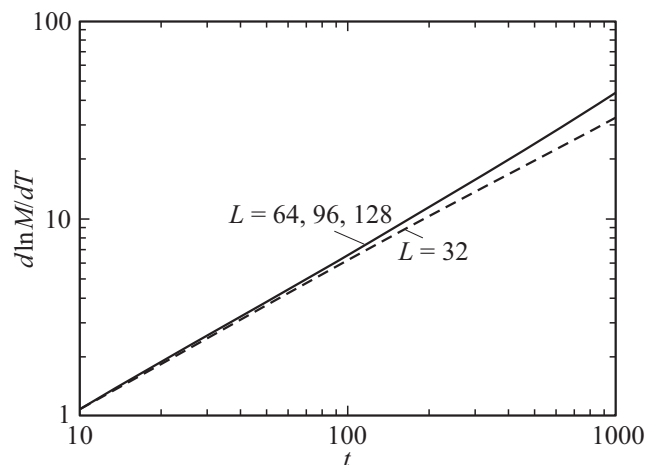


Рис. 4. Зависимость производной логарифма намагниченности от времени в точке фазового перехода для всех линейных размеров L .

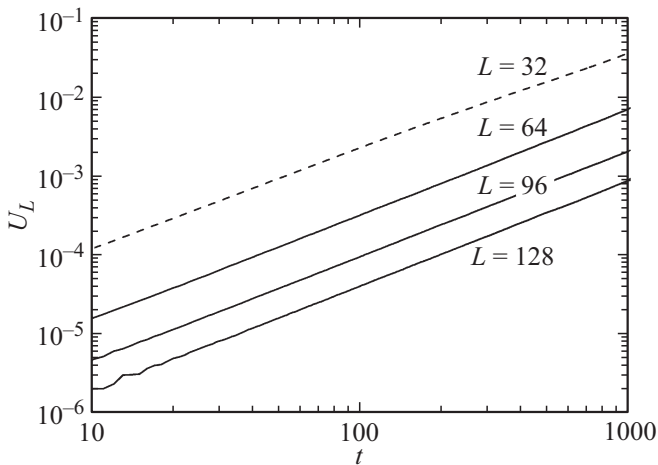


Рис. 5. Зависимость куммулянта Биндера от времени в точке фазового перехода для всех линейных размеров L .

зависимости для $L = 32$ значительно от них отличаются, и в характере их поведения наблюдается значительное отклонение от скейлингового поведения для значений времени $t \ll 1000$. В результате графики для $L = 32$ не представляют собой прямую линию в двойном логарифмическом масштабе даже в точке фазового перехода.

Несколько иная ситуация с графиком зависимости куммулянта Биндера от времени. Поскольку величина самого куммулянта невелика, различие в зависимостях для разных линейных размеров проявляется достаточно хорошо. Построенные по формуле (4) линии аппроксимации для значений $L = 64, 96$ и 128 не совпадают между собой, но имеют практически одинаковый угол наклона. Для $L = 32$, как и в случае с рис. 3 и 4, не реализуется скейлинговое поведение и его график не является прямой линией в двойном логарифмическом масштабе.

Анализ графиков показал, что степенное скейлинговое поведение исследованной системы для линейных размеров $L = 64, 96$ и 128 реализуется с момента времени порядка $t = 150$. Поэтому аппроксимации всех кривых проводились в интервале времени $t = [200; 1000]$. Логарифмическая производная в точке фазового перехода вычислялась аппроксимацией методом наименьших квадратов по пяти зависимостям намагниченности от времени, построенным при указанных в табл. 1 температурах. Отметим, что в работе [8] для вычисления логарифмической производной нами использовались три зависимости намагниченности от времени.

Таблица 3. Литературные данные

Параметр	[11]	[12]	[13]
T_c	1.344(2)	1.355(2)	1.347(1)
β	0.21(2)	—	0.25(2)
ν	0.55(2)	0.55(2)	0.56(2)

В результате аппроксимации полученных данных методом наименьших квадратов в интервале времени $t = [200; 1000]$ по формулам (2)–(4) были рассчитаны значения индексов c_1, c_{11} и c_U . Их значения позволили рассчитать величины статического критического индекса β , статического критического индекса радиуса корреляции ν и динамического критического индекса z . Все полученные нами результаты приведены в табл. 2.

Как видно из таблицы, значения критических индексов и критических температур для линейных размеров $L = 64, 96$ и 128 в пределах погрешности совпадают между собой, а значения для $L = 32$ сильно от них отличаются. Строго говоря, не совсем корректно говорить о критических индексах для $L = 32$, так как для этого размера скейлинговое поведение в полной мере не реализуется.

Из-за сильного влияния размерных эффектов для $L = 32$ невозможно точно определить значения критической температуры и критических индексов, соответственно результаты для этой системы необходимо исключить из рассмотрения. При этом для систем с линейными размерами $L = 64, 96$ и 128 не наблюдается заметного влияния размерных эффектов на получаемый результат.

В табл. 3 приведены литературные данные результатов исследований статических критических свойств обсуждаемой модели [11–13]. Сравнение табл. 2 и 3 показывает, что полученные нами результаты для линейных размеров $L = 64, 96$ и 128 хорошо согласуются с результатами этих работ. Значение динамического критического индекса для полностью фрустрированной модели Изинга получено нами впервые и близко к теоретически предсказанному для анизотропных магнетиков ($z = 2$, модель A, [6]). Отличие от значения $z = 2$ может быть объяснено влиянием фрустраций, но для окончательного ответа на этот вопрос необходимы дальнейшие исследования критической динамики фрустрированных систем.

5. Заключение

Результаты работы демонстрируют эффективность применения метода коротковременной динамики к изучению критических свойств трехмерных моделей с фрустрацией. Достоинством данного метода является то, что он позволяет в рамках одного численного эксперимента получить не только значение динамического критического индекса, но и значения статических критических индексов и критической температуры. Кроме того, при таком подходе не проявляется критическое замедление, поскольку пространственный радиус корреляции остается небольшим в коротковременном отрезке даже вблизи критической точки [7]. Показано, что для полностью фрустрированной модели Изинга с линейным размером от $L = 64$ и более отсутствует влияние конечных размеров на получаемый результат.

Список литературы

- [1] A. Jaster, J. Mainville, L. Schulke, B. Zheng, E. Print. E-Print arXiv: cond-matt/9808131 v1 (1998).
- [2] B. Zheng. *Physica A* **283**, 80 (2000).
- [3] V.V. Prudnikov, P.V. Prudnikov, B. Zheng, S.V. Dorofeev, V.Yu. Kolesnikov. *Prog. Theor. Phys.* **117**, 973 (2007).
- [4] E.V. Albano, M.A. Bab, G. Baglietto, R.A. Borzi, T.S. Grigera, E.S. Losear, D.E. Rodriguez, M.L. Rubic Puzzo, G.P. Saracco. *Rep. Prog. Phys.* **74**, 026501 (2011).
- [5] А.К. Муртазаев, В.А. Мутайламов. *ЖЭТФ* **143**, 695 (2013).
- [6] P.C. Hohenberg, B.I. Halperin. *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435 (1977).
- [7] H.K. Janssen, B. Schaub, B. Schmittman. *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989).
- [8] В.А. Мутайламов, А.К. Муртазаев. *Письма в ЖЭТФ* **102**, 56 (2015).
- [9] J. Villain. *J. Phys. C* **10**, 1717 (1977).
- [10] D. Blankshtein, M. Ma, A. Nihat Berker. *Phys. Rev. B* **30**, 1362 (1984).
- [11] А.К. Муртазаев, И.К. Камиллов, М.К. Рамазанов. *ФТТ* **47**, 1125 (2005).
- [12] H.T. Diep, P. Lallemand, O. Nagai. *J. Phys. C* **18**, 1067 (1985).
- [13] L.W. Bernardi, K. Hukushima, H. Takayama. *J. Phys. A* **32**, 1787 (1999).