



УДК 539.173

Прудников П.В. – доктор физико-математических наук

E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

Медведева М.А. – аспирант

E-mail: mmed@mail.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Адрес организации: 644077, Россия, г. Омск, ул. Мира проспект, д. 55-А

Шакирзянов Ф.Р. – ассистент

E-mail: faritbox@mail.ru

Казанский государственный архитектурно-строительный университет

Адрес организации: 420043, Россия, г. Казань, ул. Зеленая, д. 1

**Численное исследование неравновесной критической динамики
структурно неупорядоченных систем с протяженными дефектами структуры
вблизи температуры фазового перехода второго рода***

Аннотация

Проведено численное исследование методами Монте-Карло поведения характеристик сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами структуры. Определены статистические и динамические критические индексы для систем при моделировании из полностью упорядоченного состояния.

Были исследованы эффекты старения, проявляющиеся в двухвременной зависимости корреляционной функции и функции отклика от времени приготовления образца t_w и времени наблюдения $t-t_w$, а также в нарушении флуктуационно-диссипативного отношения.

Ключевые слова: методы Монте-Карло, неупорядоченные системы, коротковременная динамика, модель Гейзенберга, протяженные дефекты структуры.

Исследование критического поведения неупорядоченных систем остается одной из главных проблем в физике конденсированных сред и вызывает большой интерес, потому что все реальные твердые тела содержат дефекты. Структурный беспорядок нарушает трансляционную симметрию кристалла и тем самым существенно усложняет теоретическое описание материала. Учет влияния дефектов особенно важен вблизи критической точки, где поведение системы характеризуется аномально большим откликом на любое даже слабое возмущение.

При теоретическом описании поведения сильно неупорядоченных систем с концентрацией спинов $p \leq 0,60$ уже нельзя считать концентрацию дефектов малой величиной, что сильно затрудняет или даже делает невозможным их теоретическое описание. Для описания таких систем разрабатываются специальные численные методы, целью которых является нахождение критических индексов данных систем в зависимости от концентрации дефектов структуры. Впоследствии это позволит выяснить вопрос о существовании нового класса универсальности для сильно неупорядоченных систем.

Наличие дефектов структуры приводит к смене динамики изотропного магнетика, описываемой моделью J , на релаксационную динамику модели А по классификации Гальперина-Хоенберга [1]. Однако, согласно критерию Харриса, критическое поведение модели Гейзенберга устойчиво относительно влияния точечного некоррелированного структурного беспорядка. В этом плане, становится очень важным исследование влияния протяженных примесных структур на критическое поведение характеристик модели Гейзенберга.

Для описания сложных протяженных дефектов вводятся различные модели структурного беспорядка. В данной работе исследуется модель Вейнриба-Гальперина с так называемой дальнодействующей изотропной корреляцией дефектов [2], когда парная корреляционная функция $g(x-y)$ спадает с расстоянием по степенному закону с

* Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (проект 2012-1.4-12-000-1004-006).

$g(x-y) \sim |x-y|^{-a}$, где a – параметр корреляции дефектов структуры. При наличии в системе протяженных дефектов – дислокаций или плоскостей, ориентированных случайным образом, ее критическое поведение может быть также описано в рамках модели Вейнриба-Гальперина при значениях параметра корреляции $a=d-1$ или $a=d-2$, соответственно, где d – размерность системы. В проведенном в работе [3] теоретико-полевым исследовании трехмерных систем с дальнедействующей корреляцией дефектов в двухпетловом приближении было показано, что дефекты, обладающие свойством дальней пространственной корреляции, изменяют критическое поведение не только систем с однокомпонентным параметром порядка, как в случае точечных дефектов, но и систем с многокомпонентными параметрами порядка.

Наиболее распространенными в нашей стране вычислительными системами являются кластерные. Для подобных систем задача о критическом поведении неупорядоченных систем допускает крупноблочную декомпозицию. Наиболее эффективная параллелизация методов Монте-Карло возникает при расчете примесной конфигурации со статистическими прогонками на отдельном процессорном элементе. При этом подходе отсутствуют межсетевые обмены между процессорными элементами. Уникальной особенностью методов Монте-Карло является высокая эффективность вычислений на очень большом числе процессорных элементов.

В данной работе впервые исследуется критическое поведение трехмерной сильно неупорядоченной спиновой системы с линейными дефектами структуры, описываемой моделью Гейзенберга, с гамильтонианом:

$$H = -J \sum_{i,j} p_i p_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1)$$

где $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ – это трехмерный единичный вектор в узле i , $J > 0$ характеризует обменное взаимодействие ближайших спинов, носящее ферромагнитный характер, p_i – случайные переменные, характеризующие замороженный структурный беспорядок в системе ($p_i=1$, когда узел i занят спином, и $p_i=0$, когда узел пуст). Общая спиновая концентрация в системе была выбрана равной $p=0,60$. Полагается, что дальнедействующие эффекты корреляции между точечными дефектами реализуются в виде случайно ориентированных линий с корреляционными характеристиками, спадающими по степенному закону с показателем $a=2$. Для этого был использован следующий способ создания примесных конфигураций: из заполненной спинами трехмерной решетки случайным образом удалялись линии, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации примесей. Для обеспечения изотропности распределения дефектов в кристалле число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживалось одинаковым.

В работе [4] для получения критической температуры для слабо неупорядоченной трехмерной модели Гейзенберга с линейными дефектами с концентрацией спинов $p=0,80$ мы применяли метод кумулянтов Биндера и методику пересечения кривых x/L .

Выражение для кумулянта Биндера можно представить в виде:

$$U_4 = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{[\langle m^4 \rangle]}{[\langle m^2 \rangle]^2} \right), \quad (2)$$

где скобки $\langle \mathbf{K} \rangle$ обозначают статистическое усреднение, а скобки $[\mathbf{K}]$ – усреднение по различным примесным конфигурациям. Для неупорядоченных систем вычисление k -го момента намагниченности $m^{(k)}(t)$ осуществляется в виде:

$$m^{(k)}(t) = \left[\left\langle \left(\frac{1}{pL^3} \left| \sum_{i=1}^{N_s} \vec{S}_i p_i \right| \right)^k \right\rangle \right]. \quad (3)$$

Кумулянт $U_4(L, T)$ имеет важную для описания поведения конечных систем скейлинговую форму:

$$U_4(L, T) = u(L^{1/n}(T - T_c)), \quad (4)$$

не содержащую мультипликативной зависимости от L . Данная скейлинговая зависимость кумулянта позволяет определять критическую температуру $T_c(L \rightarrow \infty)$ через координату точки пересечения кривых, задающих температурную зависимость $U_4(L, T)$ для различных L . Более того, легко показать, что в критической области при $T \rightarrow T_c$:

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{1/n}, \quad (5)$$

и следовательно, по максимальному наклону кумулянтов, соответствующих различным L в пределе $L \rightarrow \infty$, вблизи точки их пересечения можно определить критический индекс корреляционной длины n .

Для уменьшения эффектов критического замедления обычно используют кластерные алгоритмы Вольфа [5] или Свендсена-Ванга [6]. Отличие этих алгоритмов заключается в том, что в случае однокластерного алгоритма Вольфа строится один кластер, который переворачивается с вероятностью, равной 1, а в случае многокластерного алгоритма Свендсена-Ванга система разбивается на множество кластеров, каждый из которых переворачивается с вероятностью $1/2$. В ходе дальнейших численных исследований было установлено, что в низкотемпературной области для сильно неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами кластерный алгоритм моделирования должен обязательно модифицироваться многокластерным алгоритмом Свендсена-Ванга.

На первом этапе для оценки значения критической температуры была рассчитана температурная зависимость восприимчивости $c = [\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2$ для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$. По положению максимума температурной зависимости восприимчивости на была оценена область значений критической температуры $T_c = 0.90$ J/кБ. Для уточнения значения критической температуры были рассчитаны температурные зависимости кумулянта Биндера и отношения χ/L для различных линейных размеров решетки $L = 32, 48, 64$, изображенные на рисунке 1.

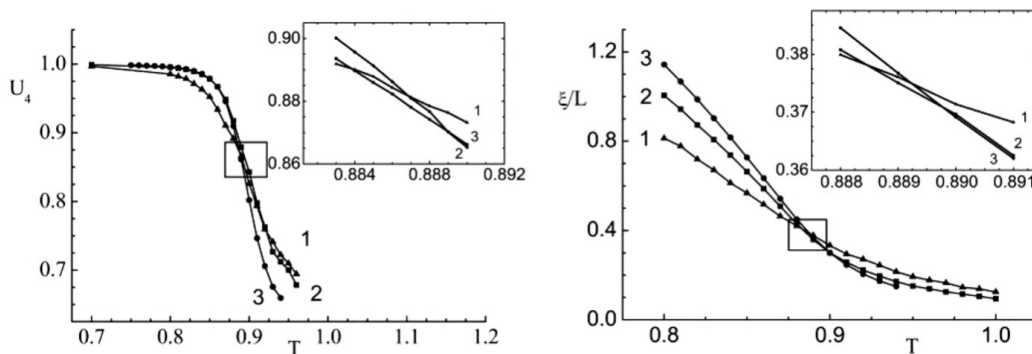


Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_4 и отношения χ/L от температуры для разных линейных размеров решетки $L=32$ (1), $L=48$ (2) и $L=64$ (3)

Эти кривые были получены усреднением по 1500 конфигурациям примеси для $L=32$, по 1100 для $L=48$ и по 300 для $L=64$, для каждой из которых усреднение проводилось по 25 прогонам. Для расчета одной конфигурации для системы с линейным размером $L=64$ на суперкомпьютерной вычислительной системе семейства СКИФ с использованием методов параллельного программирования требуется около 100 часов.

Через координату точки пересечения кривых $U_4(L, T)$ и $\chi/L(L, T)$, представленных на рис. 1, были определены значения критической температуры $T_c = 0,8867(50)$ и $T_c = 0,8891(13)$, соответственно. В качестве итогового значения критической температуры было взято среднее значение $T_c = 0,8879(50)$. Используя выражение (5), были получены значения критического индекса n для различных линейных размеров $L=32, 48, 64$ и для различных значений температуры выше критической. Известно, что фазовый переход второго рода может проявиться лишь в термодинамическом пределе, когда объем

системы и количество частиц в ней стремится к бесконечности. Таким образом, эффективное значение критического показателя может быть найдено при взятии предела $T \rightarrow T_c$ и $L \rightarrow \infty$. Реализация данной процедуры для представленной на рис. 2 зависимости $\nu(T, L)$ позволяет рассчитать асимптотическое значение индекса $\nu = 0,821$.

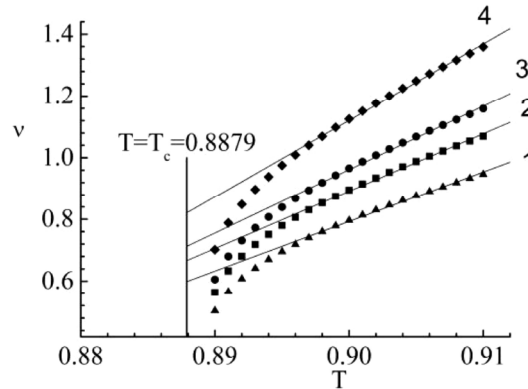


Рис. 2. Температурная зависимость показателя $\nu(T, L)$ $L=32$ (1), $L=48$ (2), $L=64$ (3) и $L=\infty$ (4)

В работе [7] для однородной трехмерной модели Гейзенберга было получено значение $\nu = 0,7048(30)$ и в работе [4] для трехмерной слабо неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами было получено значение $\nu = 0,770(74)$. Сравнивая полученное нами в этой работе значение ν со значениями, полученными в выше указанных работах, можно сделать вывод, что данные системы принадлежат к разным классам универсальности, то есть критические индексы, описывающие поведение данных систем в критической точке, меняются с изменением концентрации спинов.

В данной работе исследовалась релаксация намагниченности, которая при критической температуре характеризуется степенным законом $m(t) \sim t^{-b/nz}$. Для независимого определения динамического критического индекса z используется кумулянт второго порядка $U_2 = m^{(2)} / m^2 - 1$ со скейлинговой зависимостью $U_2(t) \sim t^{d/z}$, где d – размерность системы, z – динамический критический индекс, характеризующий асимптотическую зависимость времени релаксации системы и времени корреляции состояний от приведенной температуры по мере приближения к критической температуре $t_{rel}, t_{corr} \sim |T_c - T|^{-zn}$.

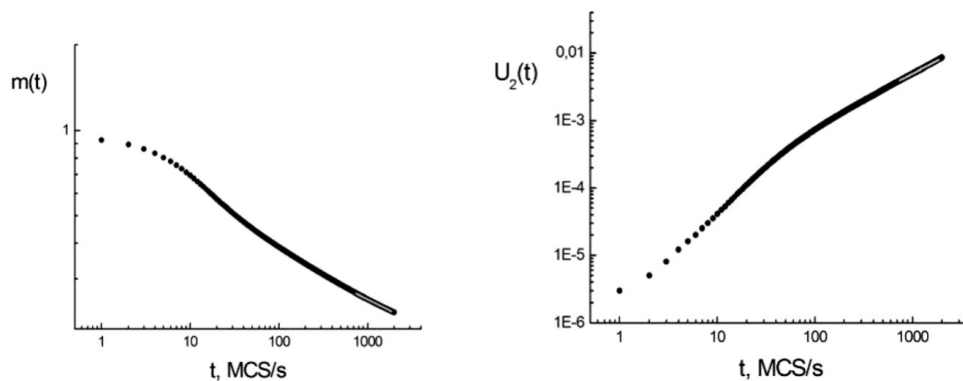


Рис. 3. Временная зависимость намагниченности $m(t)$ и кумулянта U_2 для системы с линейным размером решетки $L=64$ при $T = T_c = 0,8879$

На рис. 3 представлены временные зависимости намагниченности $m(t)$ и кумулянта U_2 . С помощью линейной аппроксимации на интервале [800; 1720] MCS/s были получены следующие значения показателей $b / nz = 0,157(3)$, $d / z = 0,769(13)$ и соответствующие

значения критических индексов $z = 3,903(66)$, $b/n = 0,611(16)$. Интервал, на котором были получены данные индексы, выбирался из минимума среднеквадратичной погрешности аппроксимации исследуемых величин, изображенных на рис. 4.

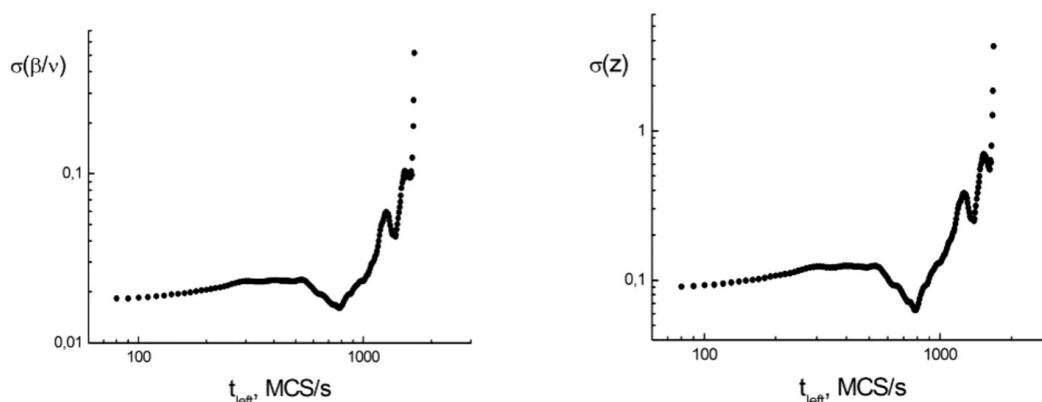


Рис. 4. Зависимость среднеквадратичной погрешности линейной аппроксимации для намагниченности $m(t)$ и кумулянта U_2 от выбора временного интервала $[t_{left}; 1720]$

Были исследованы эффекты старения, проявляющиеся в двухвременной зависимости корреляционной функции и функции отклика от времени приготовления образца t_w и времени наблюдения $t-t_w$, а также в нарушении флуктуационно-диссипативного отношения, которое связывает динамическую функцию отклика $R(t, t_w)$ и корреляционную функцию $C(t, t_w)$:

$$R(t, t_w) = \frac{X(t, t_w)}{kT} \frac{\partial C(t, t_w)}{\partial t_w}, \tag{6}$$

где $X(t, t_w)$ – флуктуационно-диссипативное отношение. В состоянии равновесия $X(t, t_w)=1$. Характеристика неравновесного поведения систем с медленной динамикой $X_{inf} = \lim_{t_w \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} X(t, t_w)$.

Главной особенностью неравновесного поведения систем с медленной динамикой является нарушение трансляционной инвариантности во времени за счет долговременного влияния неравновесных начальных состояний таких систем. Это находит проявление прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как: корреляционные функции и функции отклика.

В таких системах наблюдаются свойства старения и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы [8].

Под процессом старения материалов понимают явление роста времени релаксации системы к состоянию равновесия с увеличением «возраста» материала, т.е. времени, прошедшего после приготовления образца [9]. Явление старения проявляется математически прежде всего в двухвременных характеристиках системы, таких как: корреляционные функции и функции отклика. При неравновесных процессах эти функции зависят от двух переменных временной природы: t и t_w , при $t > t_w$, и не только от их разницы, но и от каждой в отдельности. Причем эта зависимость сохраняется и при достаточно больших временах наблюдения t . Временная переменная t_w характеризует возраст образца, т.е. время, прошедшее после его приготовления, и называется временем ожидания. При явлении старения процесс релаксации системы как функции времени наблюдения t замедляется тем больше, чем больше возраст образца, т.е. с увеличением времени ожидания t_w .

В работе осуществлялся расчет автокорреляционной функции $A(t, t_w)$:

$$A(t, t_w) = \left[\left\langle \frac{1}{pL^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \mathbf{r}_i(t) \mathbf{r}_i(t_w) \right\rangle \right] - [\langle m(t_w) \rangle] \cdot [\langle m(t) \rangle], \tag{7}$$

представленной на рис. 5, и магнитной восприимчивости $c(t, t_w)$

$$c(t, t_w) = \left\langle \frac{1}{h^2 p L^3} \sum_{i=1}^{pL^3} \mathbf{r}_i(t) \mathbf{r}_i(t_w) \right\rangle, \quad (8)$$

черта означает усреднение по реализациям магнитного поля на решётке. Для вычисления $c(t, t_w)$ в момент времени t_w к гамильтониану добавлялось возмущение $\sum_i \mathbf{r}_i(t) \mathbf{r}_i(t_w)$, где магнитное поле случайно задавалось в узлах решётки с бимодальным распределением $\pm h$ для каждой оси.

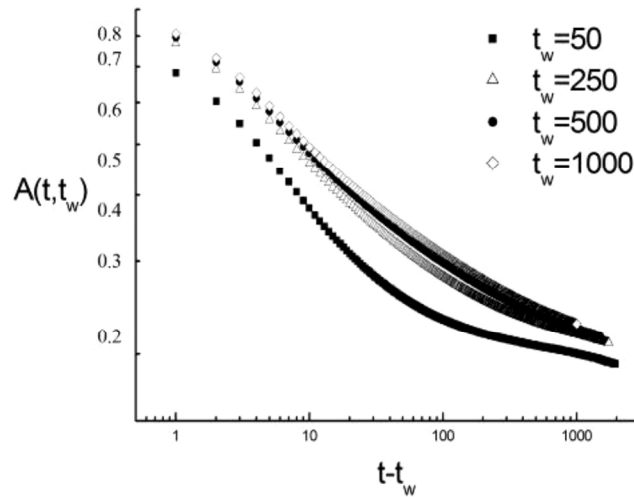


Рис. 5. Поведение автокорреляционной функции $A(t, t_w)$ для различных времен ожидания t_w

Был осуществлен расчет флуктуационно-диссипативного отношения для различных времен ожидания t_w для сильно неупорядоченной системы (рис. 6).

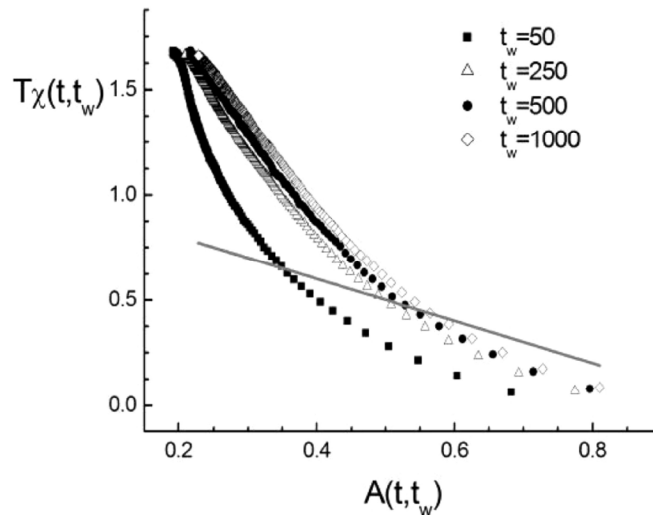


Рис. 6. Расчет флуктуационно-диссипативного отношения для различных времен ожидания t_w для сильно неупорядоченной системы

Показано, что в неравновесном поведении модели Гейзенберга с линейными дефектами наблюдаются эффекты старения. Проведен расчет флуктуационно-диссипативного отношения $X_{inf}=3,38(30)$. Полученное значение X_{inf} в неравновесном режиме для неупорядоченной модели Гейзенберга с линейными дефектами носит универсальный характер.

Список литературы

1. Hohenberg P.C., Halperin B.I. // *Rev. Mod. Phys.*, 1977, V. 49. – P. 435.
2. Weinrib A., Halperin B.I. // *Phys. Rev. B.*, 1983, V. 27. – P. 413.
3. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. // *Phys. Rev. B.*, 2000, V. 62. – P. 8777.
4. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. // *Progr. Theor. Phys.*, 2012, V. 127, №. 3. – P. 369-382.
5. Wolf U. // *Phys. Rev. Lett.*, 1989, V. 62. – P. 361.
6. Swendsen R.H., Wang J.S. // *Phys. Rev. Lett.*, 1987, V. 58. – P. 86.
7. Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P. // *Phys. Rev. B.*, 1993, V. 48. – P. 3249.
8. Calabrese P., Gambassi A. Ageing properties of critical systems // *J. Phys. A.*, 2005, V. 38. – P. R133.
9. Struik L.C.E. *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials.* – Amsterdam: Elsevier, 1978.

Prudnikov P.V. – doctor of physical-mathematical sciences

E-mail: prudnikp@univer.omsk.su

Medvedeva M.A. – post-graduate student

E-mail: mmed@mail.ru

Omsk State University

The organization address: 644077, Russia, Omsk, st. Prospect Mira, 55-A

Shakirzyanov F.R. – assistant

E-mail: faritbox@mail.ru

Kazan State University of Architecture and Engineering

The organization address: 420043, Russia, Kazan, st. Zelenaya, 1

Monte-Carlo simulation of the non-equilibrium critical dynamics of the disordered systems with long-range correlated disorder

Resume

Monte Carlo simulation of the critical behavior of the strong disordered Heisenberg model was carried out. Statical and dynamical exponents were calculated when system started from ordered initial non-equilibrium state.

Ageing phenomena and fluctuation-dissipation deviation were investigated. Ageing phenomena developed in two-time dependence of correlation and response functions of «age» of the system t_w and observe time t_{-tw} .

Research showed that these systems belong to different universality classes, that is, the critical exponents describing the behavior of these systems at a critical point, vary with the concentration of spins.

In this paper was implemented the calculation of the autocorrelation function. Found that, in a non-equilibrium behavior of the Heisenberg model with linear defects observed effects of aging. The value obtained in the nonequilibrium regime for a disordered Heisenberg model with linear defects is universal.

Keywords: Monte-Carlo methods, disordered systems, short-time dynamics, Heisenberg models, long-range correlated defects.

References

1. Hohenberg P.C., Halperin B.I. // *Rev. Mod. Phys.*, 1977, V. 49. – P. 435.
2. Weinrib A., Halperin B.I. // *Phys. Rev. B.*, 1983, V. 27. – P. 413.
3. Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Fedorenko A.A. // *Phys. Rev. B.*, 2000, V. 62. – P. 8777.
4. Prudnikov P.V., Medvedeva M.A. // *Progr. Theor. Phys.*, 2012, V. 127, №. 3. – P. 369-382.
5. Wolf U. // *Phys. Rev. Lett.*, 1989, V. 62. – P. 361.
6. Swendsen R.H., Wang J.S. // *Phys. Rev. Lett.*, 1987, V. 58. – P. 86.
7. Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P. // *Phys. Rev. B.*, 1993, V. 48. – P. 3249.
8. Calabrese P., Gambassi A. Ageing properties of critical systems // *J. Phys. A.*, 2005, V. 38. – P. R133.
9. Struik L.C.E. *Physical Aging in Amorphous Polymers and Other Materials.* – Amsterdam: Elsevier, 1978.