Письма в ЖЭТФ, том 102, вып. 1, с. 56 – 59

Коротковременная динамика трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга

В. А. Мутайламов[+1)], А. К. Муртазаев[+*]

[+]Институт физики ДНЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия

[*]Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 3 июня 2015 г.

После переработки 9 июня 2015 г.

С ипользованием метода коротковременной динамики изучена критическая релаксация из низкотемпературного упорядоченного состояния трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на простой кубической решетке. Исследованы частицы с периодическими граничными условиями, содержащие $N = 262\,144$ спинов. Вычисления проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло. Получены значения статических критических индексов намагниченности и радиуса корреляции. Рассчитана величина динамического критического индекса для исследованной модели.

DOI: 10.7868/S0370274X15130111

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 проведенными 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 A (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 имеет место только в состоянии термодинамического равновесия. Однако было показано, что для некоторых динамических систем оно может реализовываться на ранних этапах их временной эволюции из высокотемпературного неупорядоченного состояния в состояние, соответствующее температуре фазового перехода [7]. Такое поведение реализуется по истечении 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].

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

$$M^{(k)}(t,\tau,L,m_0) =$$

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

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 ($\tau = 0$), в предположении в уравнении (1) $b = t^{1/z}$ для систем с достаточно большими линейными размерами L теория предсказывает степенное поведение намагниченности в коротковременном режиме:

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

[1)]e-mail: vadim.mut@mail.ru

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

$$\partial_\tau \ln M(t,\tau)\big|_{\tau=0} \sim t^{-c_{l1}}, \quad c_{l1} = \frac{1}{\nu z}. \qquad (3)$$

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

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

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, дают возможность найти величину T_c по их отклонению от прямой линии в двойном логарифмическом масштабе.

Нами с использованием данного метода исследована критическая релаксация из низкотемпературного упорядоченного состояния трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на простой кубической решетке. Данная модель была впервые предложена Вильяном [8] в двумерном случае на квадратной решетке для описания спиновых стекол. В дальнейшем она была обобщена для трехмерного случая Бланкштейном [9]. Схематически эта модель приведена на рис. 1.

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 таких систем.

Гамильтониан фрустрированной модели Изинга может быть представлен в виде

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

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 [8].

Исследовалась частица кубической формы с периодическими граничными условиями, содержащая $L \times L \times L$ элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Рассматривалась система с линейным размером $L = 64$, содержащая

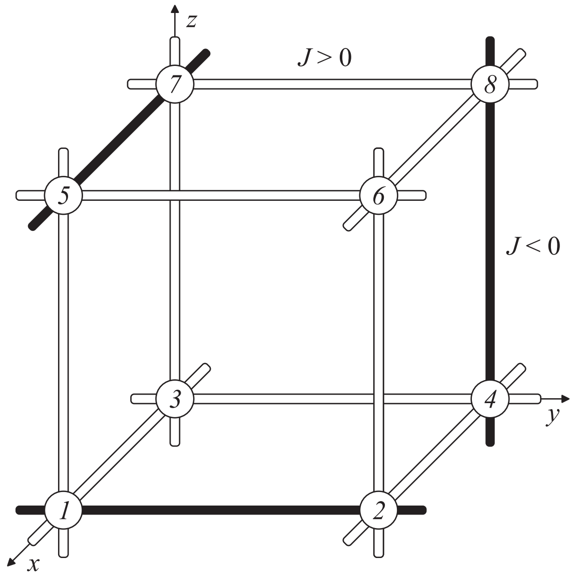

Рис. 1. Полностью фрустрированная модель Изинга на простой кубической решетке. Белым цветом отмечены ферромагнитные связи ($J > 0$), черным – антиферромагнитные ($J < 0$)

$N = 262\,144$ спинов. Данная величина L была выбрана как минимально необходимая для того, чтобы исключить влияние конечных размеров на получаемый результат [1].

Вычисления проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло. Релаксация системы осуществлялась из начального низкотемпературного полностью упорядоченного состояния со стартовым значением намагниченности $m_0 = 1$ в течение времени $t_{\max} = 1000$. В качестве единицы "времени" брался один Монте-Карло шаг на спин. Релаксационные зависимости вычислялись 50 000 раз. Полученные данные усреднялись между собой.

Критические температуры определялись 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. При определении T_c анализировались кривые намагниченности с шагом $\Delta T = 0.0001$ в единицах обменного интеграла $k_b T/|J|$.

Логарифмическая производная в точке фазового перехода вычислялась аппроксимацией методом наименьших квадратов по трем зависимостям намагниченности от времени, построенным при температурах $T_c - 0.01$, T_c и $T_c + 0.01$. На рис. 2 эти кривые приведены в двойном логарифмическом масштабе в

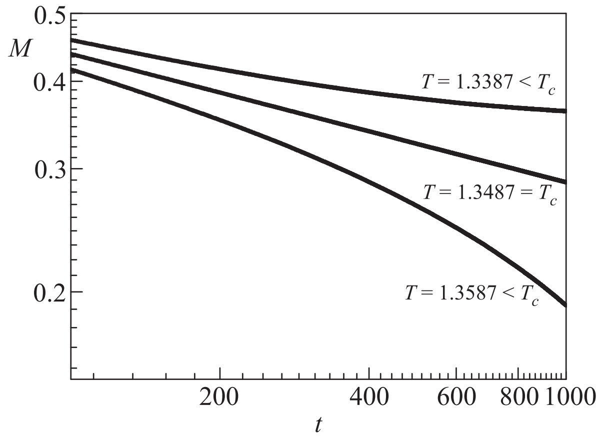

Рис. 2. Зависимости намагниченности от времени при трех значениях температуры

интервале времени $t = [100; 1000]$ (здесь и далее все величины приводятся в условных единицах). Рисунок наглядно демонстрирует влияние температуры на поведение кривой намагниченности.

Полученные нами зависимости намагниченности, ее логарифмической производной и кумулянта Биндера от времени в критической точке в двойном логарифмическом масштабе в интервале времени $t = [1; 1000]$ представлены на рис. 3, 4 и 5

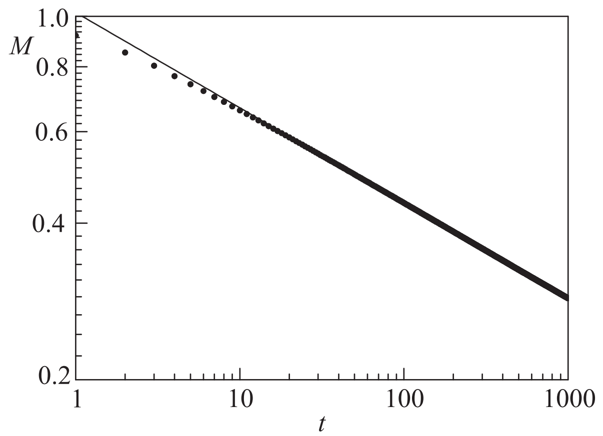

Рис. 3. Зависимость намагниченности от времени в точке фазового перехода

соответственно. Точками на рисунках показаны результаты моделирования, а сплошными линиями – их аппроксимации методом наименьших квадратов по формулам (2), (3) и (4). Анализ графиков показал, что степенное скейлинговое поведение исследованной системы реализуется с момента времени порядка $t = 100$. Поэтому аппроксимации всех кривых проводились в интервале времени $t = [200; 1000]$.

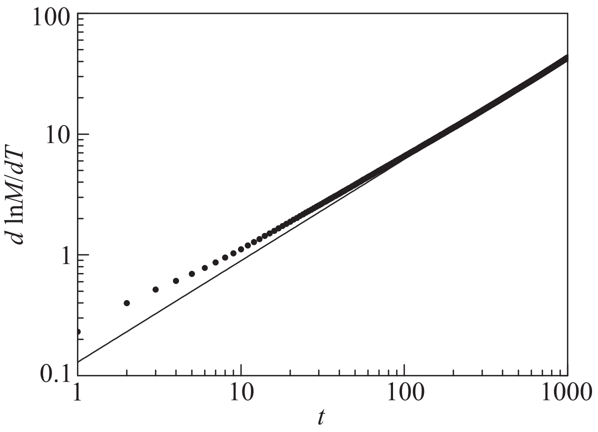

Рис. 4. Зависимость производной логарифма намагниченности от времени в точке фазового перехода

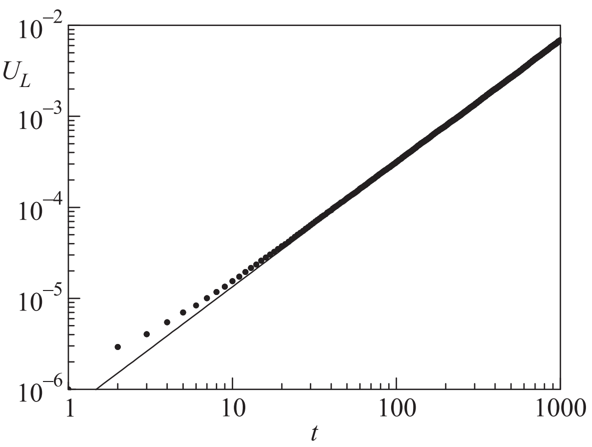

Рис. 5. Зависимость кумулянта Биндера от времени в точке фазового перехода

В таблице приведены полученные нами значения критической температуры, статических критических индексов намагниченности и радиуса корреляции и динамического критического индекса. Для сравнения там же приведены результаты работ [10–12], в которых исследовались статические критические свойства полностью фрустрированной модели Изинга. Как видно из таблицы, полученные нами для критической температуры и статических критических индексов результаты хорошо согласуются с данными этих работ. Значение динамического крити-

Критическая температура и критические индексы полностью фрустрированной модели Изинга

Параметр	Данная работа	[10]	[11]	[12]
T_c	1.3487(1)	1.344(2)	1.355(2)	1.347(1)
β	0.22(3)	0.21(2)	–	0.25(2)
ν	0.54(3)	0.55(2)	0.55(2)	0.56(2)
z	2.21(3)	–	–	–

ческого индекса близко к теоретически предсказанному для анизотропных магнетиков ($z = 2$, модель A [6]). Отметим, что величина динамического критического индекса для исследованной модели получена впервые.

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].

1. A. Jaster, J. Mainville, L. Schulke, and B. Zheng, 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, and V. Yu. Kolesnikov, Prog. Theor. Phys. **117**, 973 (2007).
4. V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, J. Mag. Magn. Mater. **325**, 122 (2013).
5. А. К. Муртазаев, В. А. Мутайламов, ЖЭТФ **143**, 695 (2013).
6. P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
7. H. K. Janssen, B. Schaub, and B. Schmittmanm, Z. Phys. B **73**, 539 (1989).
8. J. Villain, J. Phys. C: Sol. State Phys. **10**, 1717 (1977).
9. D. Blankschtein, M. Ma, and A. N. Berker, Phys. Rev. B **30**, 1362 (1984).
10. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. К. Рамазанов, ФТТ **47**, 1125 (2005).
11. H. T. Diep, P. Lallemand, and O. Nagai, J. Phys. C: Sol. State Phys. **18**, 1067 (1985).
12. L. W. Bernardi, K. Hukushima, and H. Takayama, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 1787 (1999).