

Методы численного моделирования актуальных задач,  
г. Таруса, 2009



*Численное исследование влияния  
протяженных дефектов структуры на  
критическое поведение трехмерных систем  
методом коротковременной динамики*

Прудников Павел Владимирович

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



# Содержание

- Влияние дефектов структуры на критическое поведение.
- Дефекты с дальнедействующей пространственной корреляцией.
- Неравновесная коротко-временная критическая динамика неупорядоченных систем.

# Виды дефектов



$$H = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} \sum_i^p [(\nabla \phi_i)^2] + \tau_0 \phi_i^2 + \mathbf{V}(\mathbf{x}) \phi_i^2 \right] + \frac{g_0}{4!} (\sum_i^p \phi_i^2)^2$$

$$\langle\langle V(x) \rangle\rangle = 0 \quad \langle\langle V(x)V(y) \rangle\rangle \sim \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$

однородные системы

$$u(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0$$

точечные дефекты

$$u(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = v \delta^d(\mathbf{x} - \mathbf{y}),$$

$$v \sim V^2 c_{imp}$$

изотропная дальнедействующая корреляция

$$u(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sim |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-a}$$



# Влияние беспорядка

Свободная энергия  $F$  неупорядоченной системы

$$\exp(-F/kT) = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-H_0 - \frac{1}{2} \int d^d x V(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{x})\right),$$

$$\exp\left(-\frac{1}{2} \int d^d V(x) \phi^2(x)\right) = 1 - \frac{1}{2} \int d^d x V(x) \phi^2(x) + \frac{1}{8} \int d^d x d^d y V(x) \phi^2(x) V(y) \phi^2(y) + \dots$$

$$\langle\langle F/kT \rangle\rangle = (F_0/kT) - \frac{1}{8} \int d^d x d^d y \langle\langle V(\mathbf{x}) V(\mathbf{y}) \rangle\rangle \langle \phi^2(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{y}) \rangle_0 + \dots$$

где  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  усреднение по примесным конфигурациям,

$\langle \dots \rangle_0$  статистическое усреднение с  $H_0$  однородной системы.

# Влияние беспорядка

$$C = \frac{d^2(F_0/kT)}{dT^2} = \int d^d x d^d y \langle \phi^2(x) \phi^2(y) \rangle_0 \sim \tau^{-\alpha}, \quad \tau \sim \frac{T - T_c}{T_c},$$

$$F_0 \sim \tau^{2-\alpha}, \quad \langle \phi^2(\mathbf{x}) \phi^2(\mathbf{y}) \rangle_0 = \tau^{-\alpha+d\nu} G\left(\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{\xi}\right),$$

$$\langle\langle F/kT \rangle\rangle = \tau^{2-\alpha} A + \frac{\tau^{-\alpha+d\nu}}{8} \int d^d x \mathbf{u}(\mathbf{x}) G\left(\frac{x}{\xi}\right) = \tau^{2-\alpha} (A + B\tau^{-\varphi}).$$

# Влияние беспорядка

на термодинамические характеристики определяется показателем "кроссовера"  $\varphi$

Своб. энергия  $\langle\langle F/kT \rangle\rangle = \tau^{2-\alpha}(A + B\tau^{-\varphi})$

- $\varphi > 0$  беспорядок **существенен**,  
новый тип критического поведения;
- $\varphi < 0$  беспорядок **несущественен**,  
критическое поведение системы характеризуется показателями однородной системы.

# Критерий Харриса

Для точечных дефектов

$$\int d^d x u(\mathbf{x}) G(x/\xi) \sim \text{const} \quad \rightarrow \quad \varphi = \alpha$$

Воздействие существенно

$$\varphi = 2 - d\nu_0 = \alpha_0 > 0$$

Модель	Изинга	XУ	Гейзенберга
P	1	2	3
$\alpha_0$ (МС)	0.1109(15)	-0.0148(15)	-0.1339(33)
$\alpha_0$ (TFD)	0.1091(24)	-0.011(4)	-0.122(10)
$\alpha_0$ (EXP)	0.1099(7)	-0.01056(38)	-0.135(20)

# Расширенный критерий

Для дефектов с дальнедействующей корреляцией

$$u(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \sim |\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-a}$$

$$\int d^d x u(\mathbf{x}) G(x/\xi) \sim \tau^{(a-d)\nu} \quad \varphi = 2 - a\nu_0 > 0$$

$$u(k) = v_0 + w_0 k^{a-d} \quad a < d$$

$a = 1$  плоские дефекты;

$a = 2$  линейные дефекты с произвольной ориентацией;

$2 < a < 3$  перколяционный кластер, примесные  
фрактальные структуры.

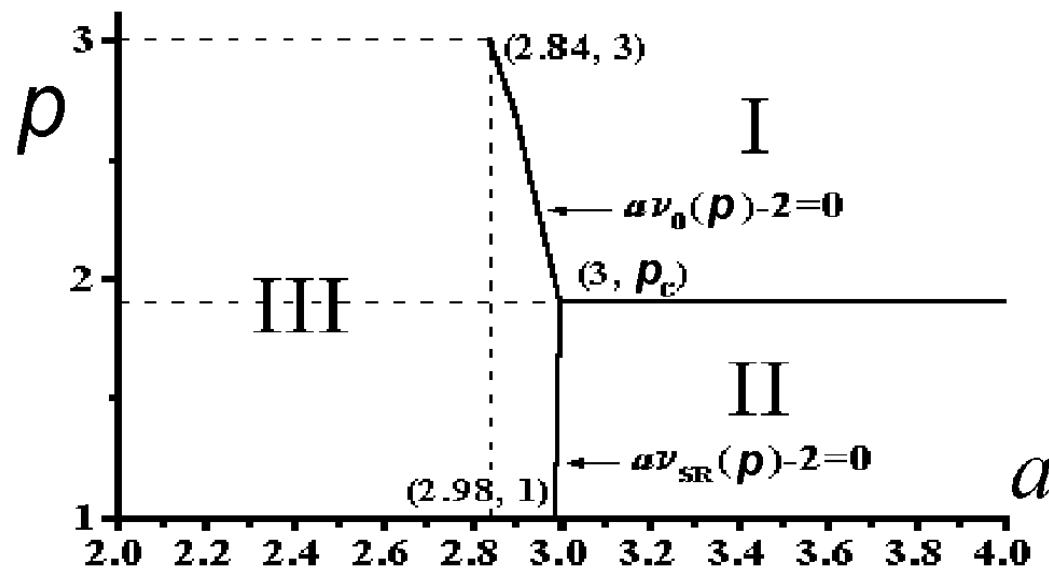


# Фазовая диаграмма

I - однородные системы

II - неупорядоченные с точечными дефектами

III - неупорядоченные с протяженными дефектами



Prudnikov<sup>2</sup>, et.al., Phys.Rev.B, 2000

# Неупорядоченная модель

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

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

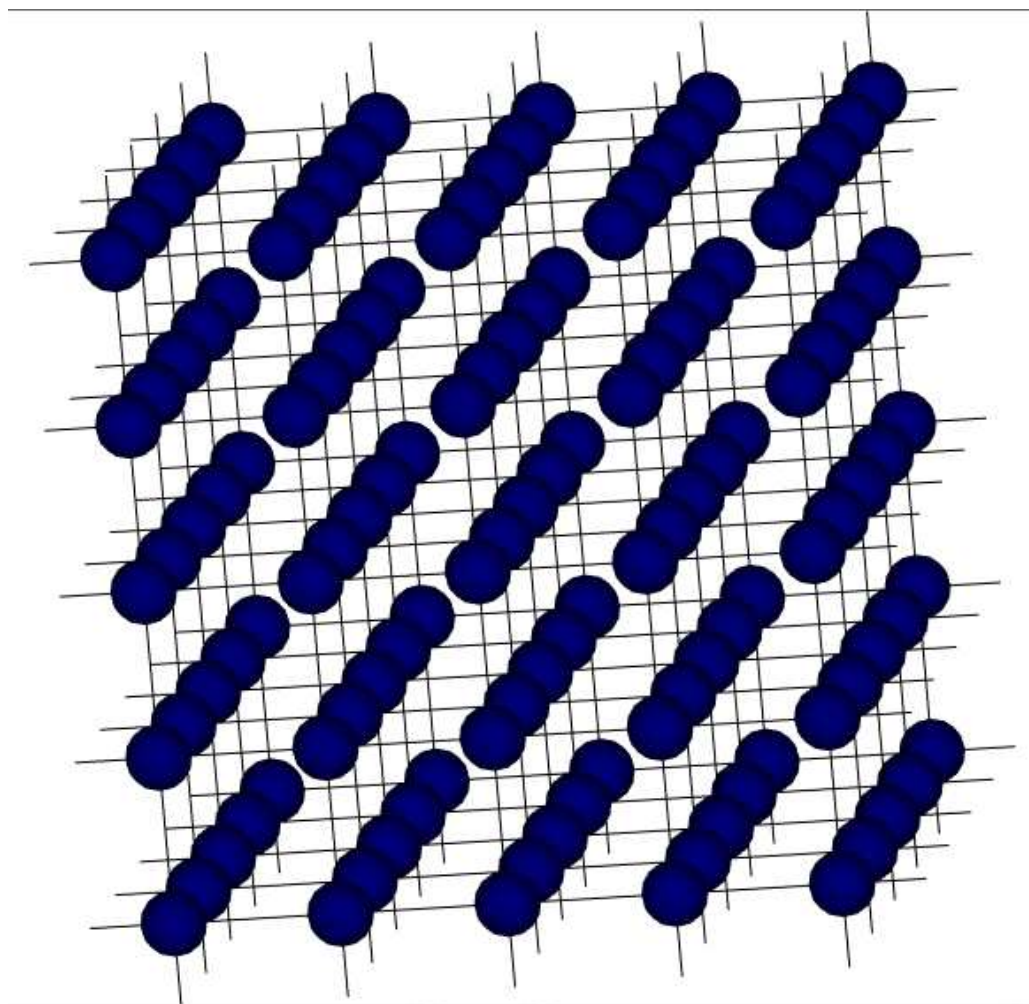
# Распределение дефектов

$a = 2$  линейные дефекты с произвольной ориентацией

- Из заполненной спинами кубической решетки удаляются линии спинов, параллельные осям координат, до достижения заданной концентрации спинов  $p$  в образце,
- Число удаляемых линий в каждом из трех направлений поддерживается равным,
- При распределении дефектов накладывается условие непересекаемости этих линий дефектов.

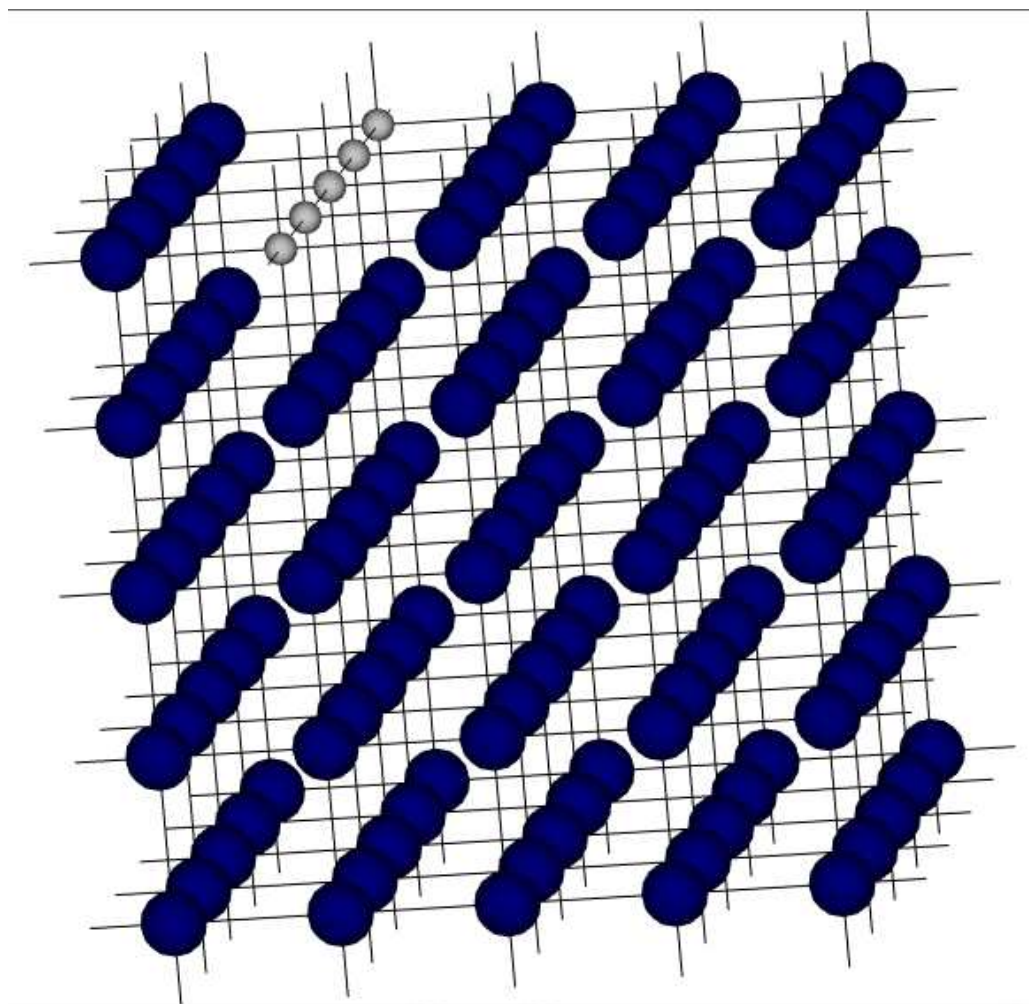


# Дефекты структуры



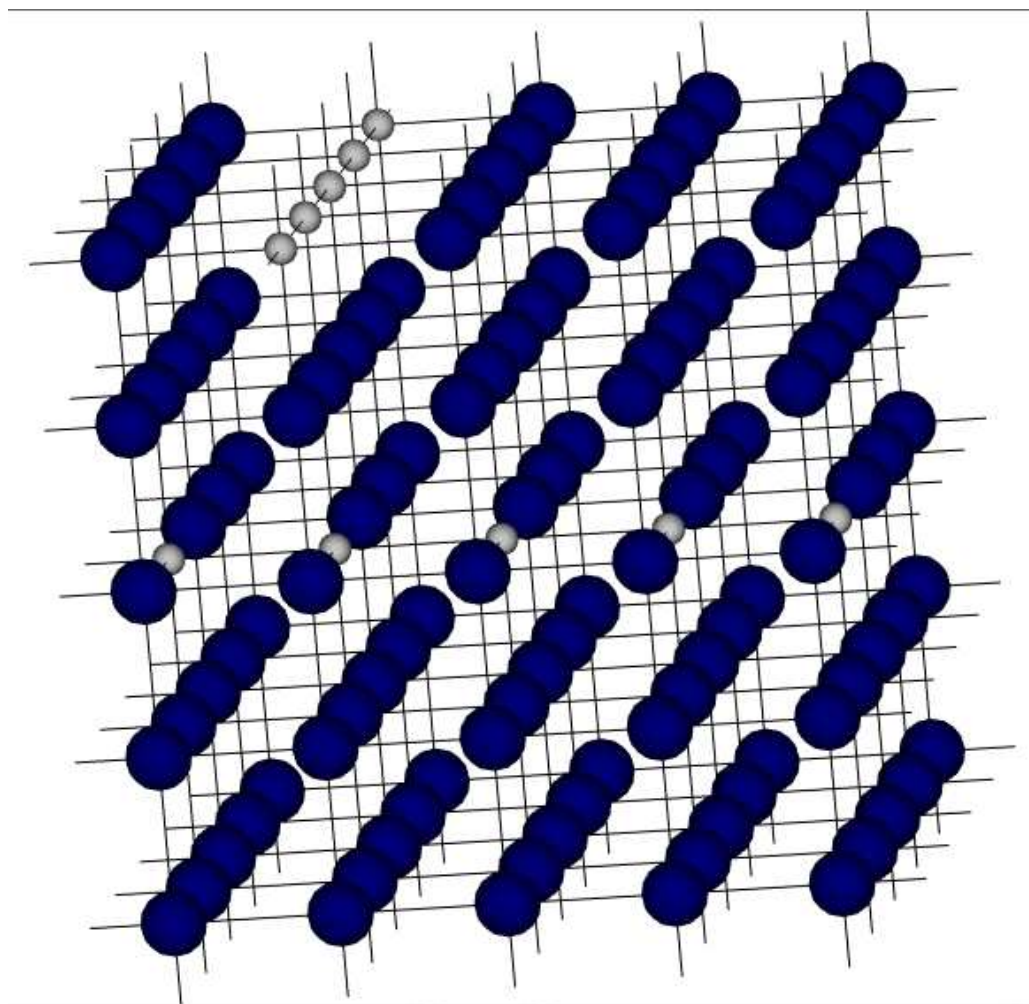


# Дефекты структуры





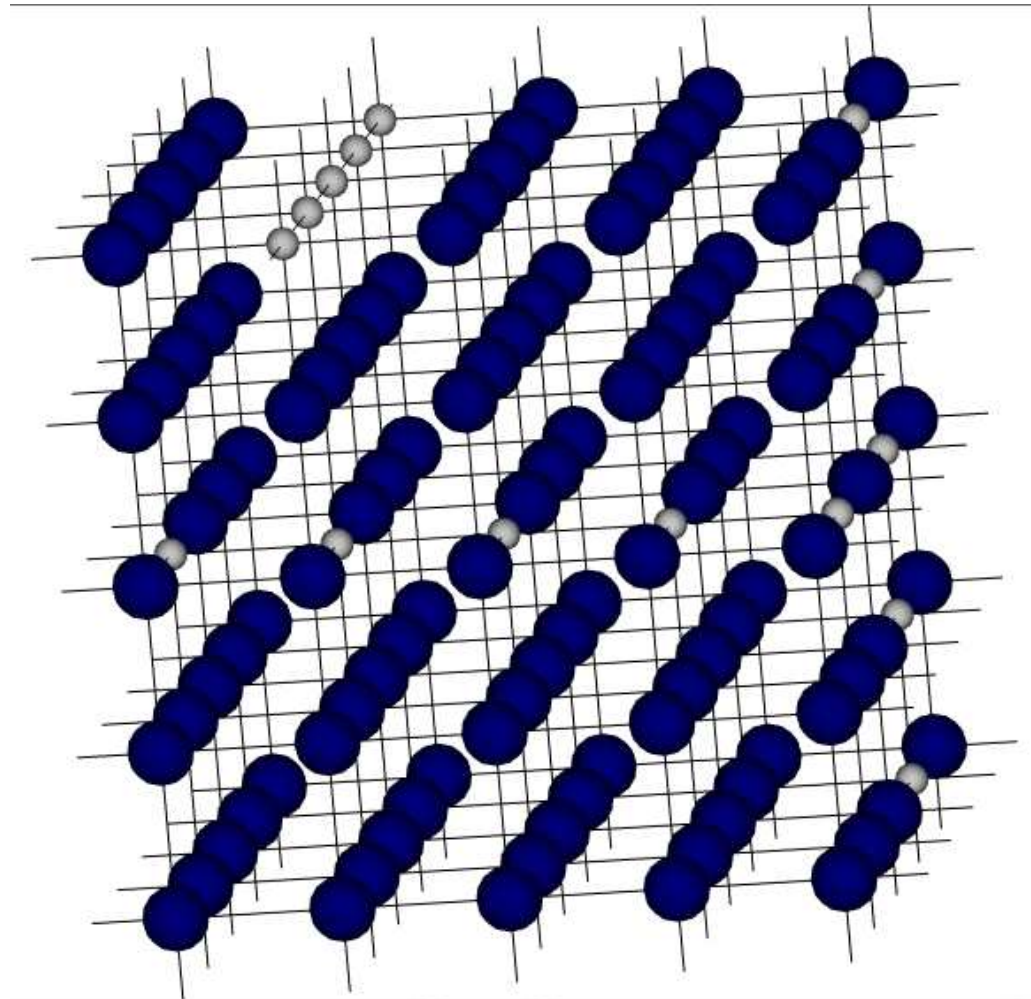
# Дефекты структуры



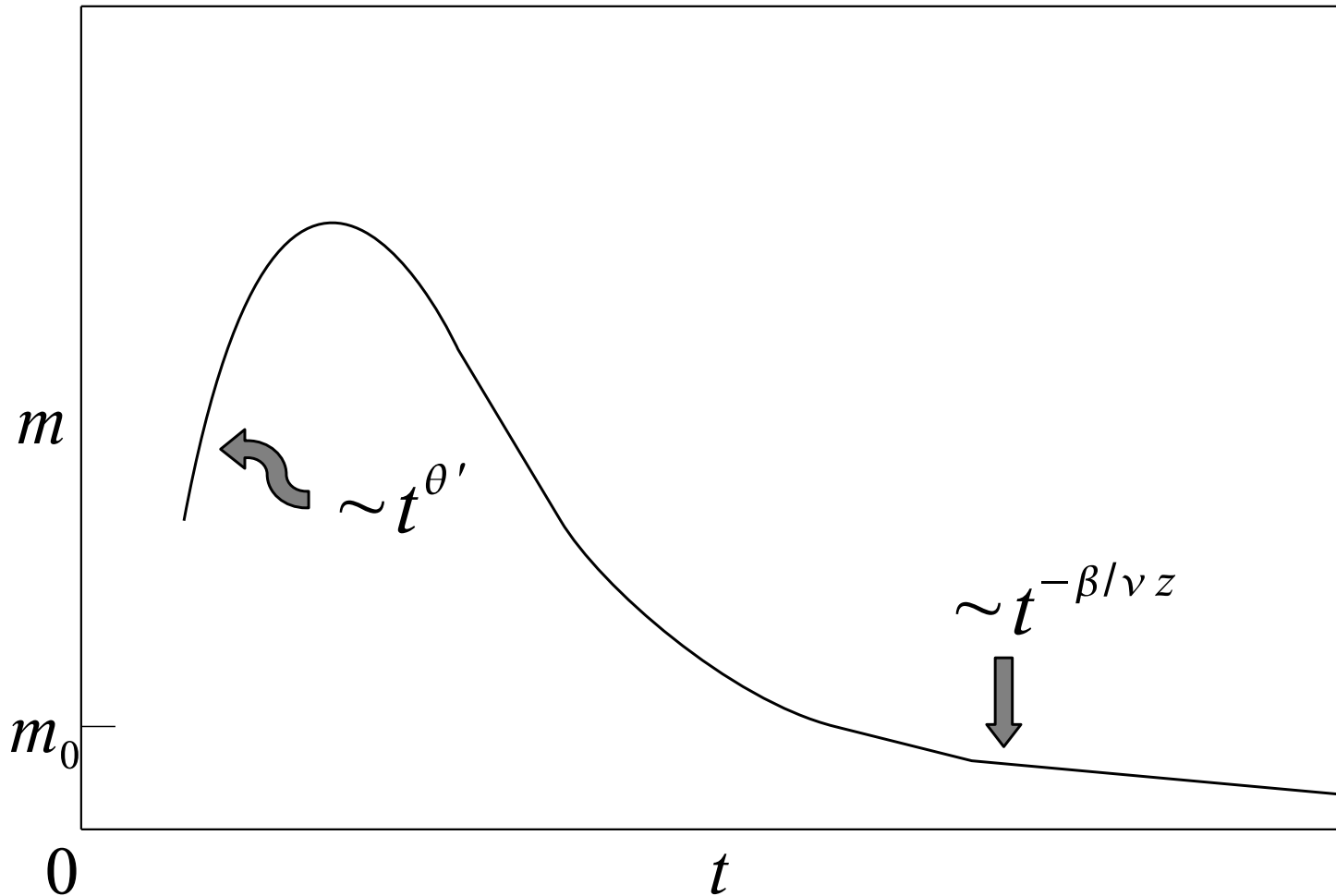




# Дефекты структуры



# 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  $m_0 = 1$**

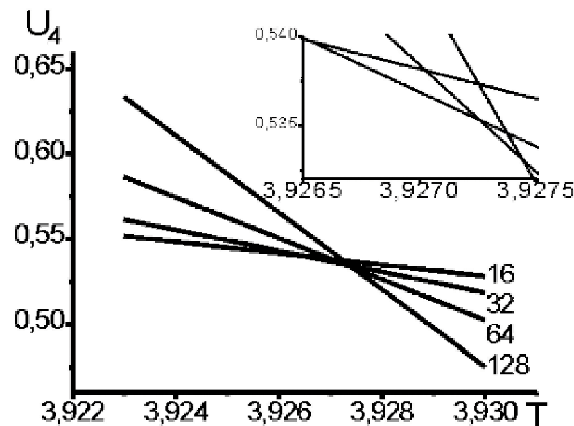
$$M(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} M(1, t^{1/\nu z} \tau) \sim t^{-\beta/\nu z} \left(1 + at^{1/\nu z} \tau + O(\tau^2)\right),$$

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

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

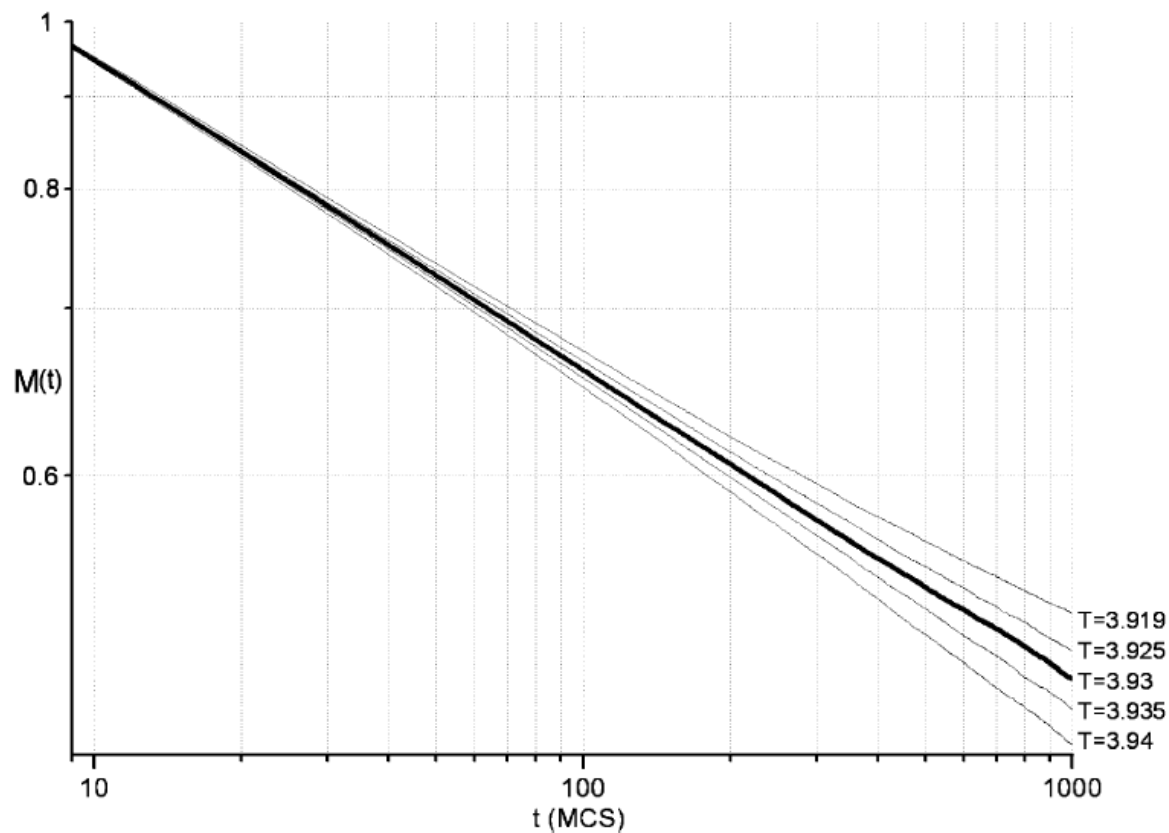
# Условия моделирования

- Система: 3D модель Изинга с линейными произвольно ориентированными дефектами
  - кубическая решетка с  $L = 128$
  - Спиновая концентрация  $p = 0.8$
  - Усреднение по 3 000 прим.конфигурациям;
  - Критическая температура  $T_c = 3.9281(1)$ ;



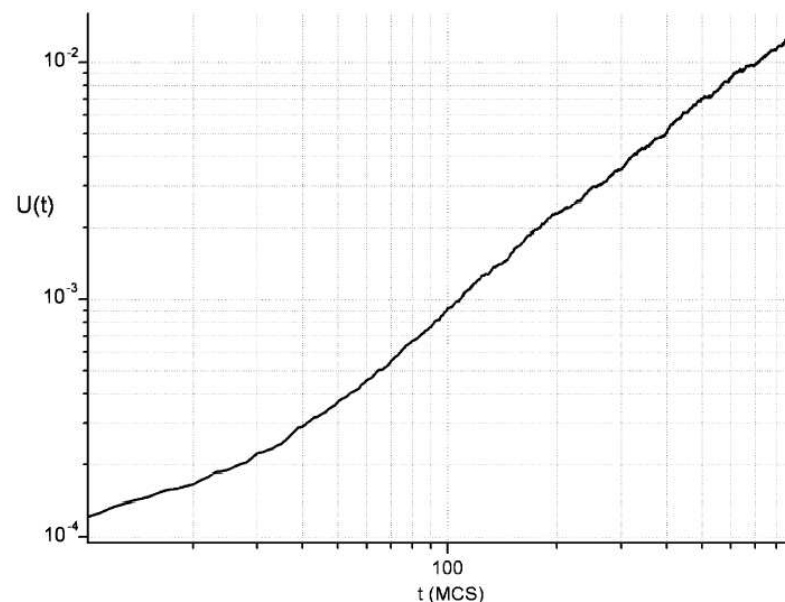
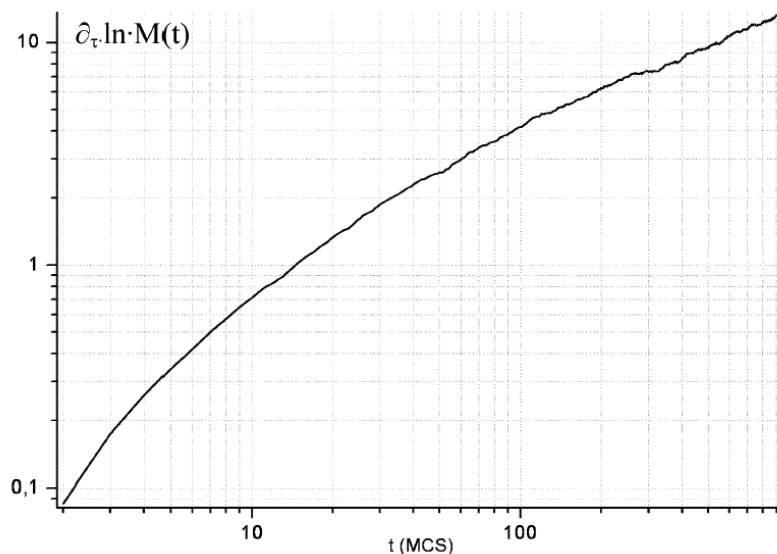
(a)

# Коротко-временная динамика модели Изинга



Временная зависимость намагниченности  $M(t)$  для  $L = 128$  и для различных значений температуры  $T$ .

# Коротко-временная динамика модели Изинга



Временные зависимости логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t, \tau) |_{\tau=0}$  и кумулянта  $U_2(t)$  для  $L = 128$  при критической температуре  $T_c = 3.9281$ .



# Процедура поправки к скейлингу

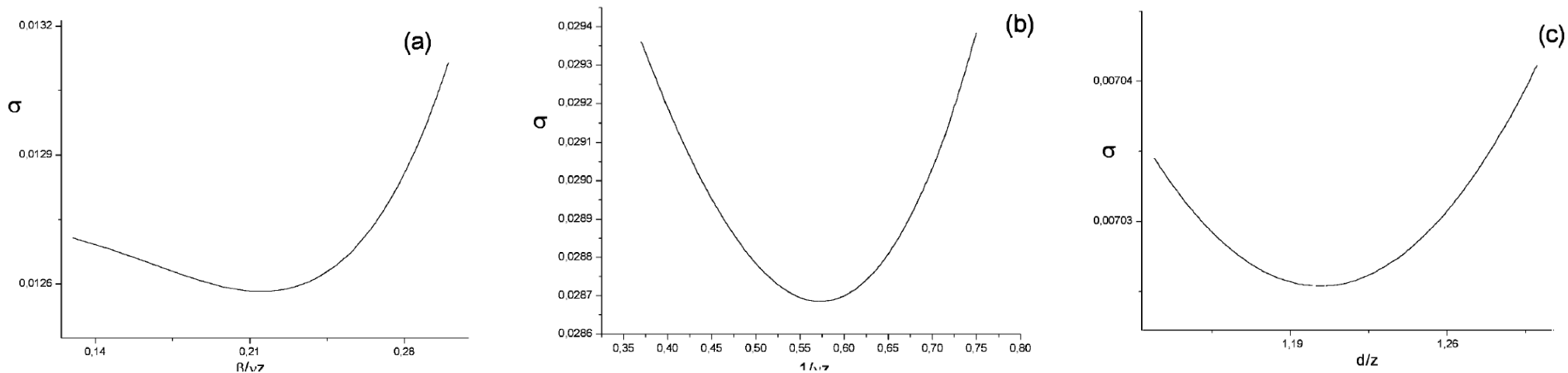
$$X(t) \sim t^\Delta \left(1 + A_x t^{-\omega/z}\right)$$

Значения критических показателей  $\Delta = \beta/\nu z, 1/\nu z, d/z$  и минимальные значения среднеквадратичного отклонения  $\sigma$  от линейного закона аппроксимации для различных значений показателя скейлинга  $\omega$ .

$\omega$	$\beta/\nu z$	$\sigma$	$1/\nu z$	$\sigma$	$d/z$	$\sigma$
0.7	0.2112	0.0100	0.556	0.0053	1.183	0.0100
0.8	0.2096	0.0088	0.559	0.0049	1.205	0.0100
0.9	0.2101	0.0093	0.553	0.0070	1.213	0.0099
1.0	0.2090	0.0095	0.558	0.0072	1.227	0.0098



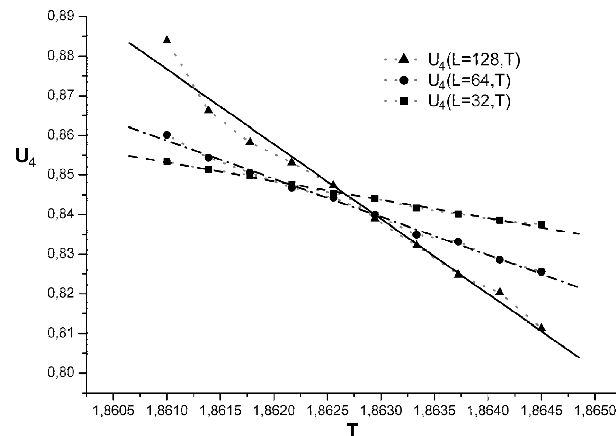
# Процедура поправки к скейлингу



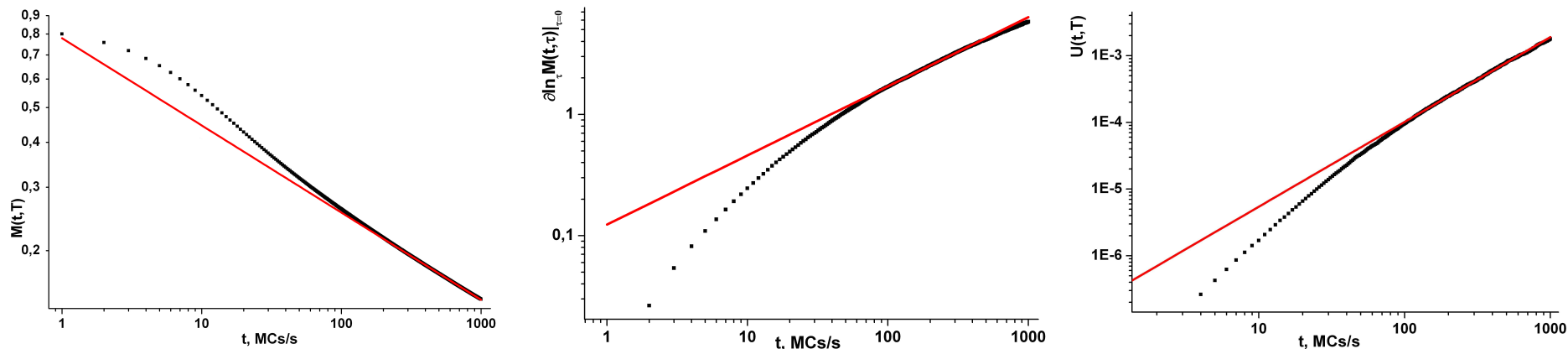
Зависимость среднеквадратичных погрешностей аппроксимации  $\sigma$  для временных зависимостей намагниченности  $M(t)$  **(a)**, логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t, \tau) |_{\tau=0}$  **(b)** и кумулянта  $U_2$  **(c)** как функции показателей  $\beta/\nu z$ ,  $1/\nu z$  and  $d/z$  для индекса поправки к скейлингу  $\omega = 0.8$ .

# Условия моделирования

- Система: 3D XY модель с линейными произвольно ориентированными дефектами
  - кубическая решетка с  $L = 128$
  - Спиновая концентрация  $p = 0.8$
  - Критическая температура  $T_c = 1.8626(5)$ ;
  - Усреднение по 3 000 прим.конфигурациям;



# Коротко-временная динамика XY модели

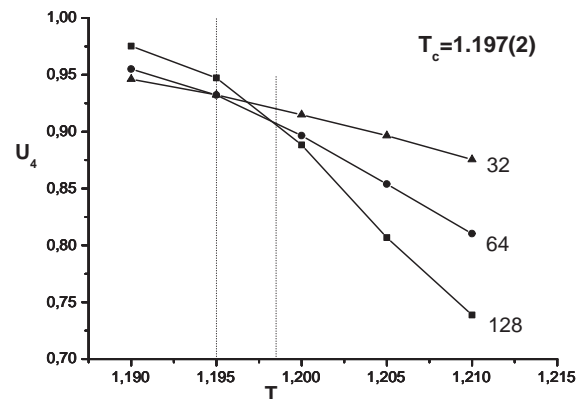


Временные зависимости намагниченности  $M(t)$ , логарифмической производной намагниченности  $\partial_{\tau} \ln M(t, \tau)$  и кумулянта  $U_2(t)$  для  $L = 128$  при критической температуре  $T_c = 1.8626(5)$ .

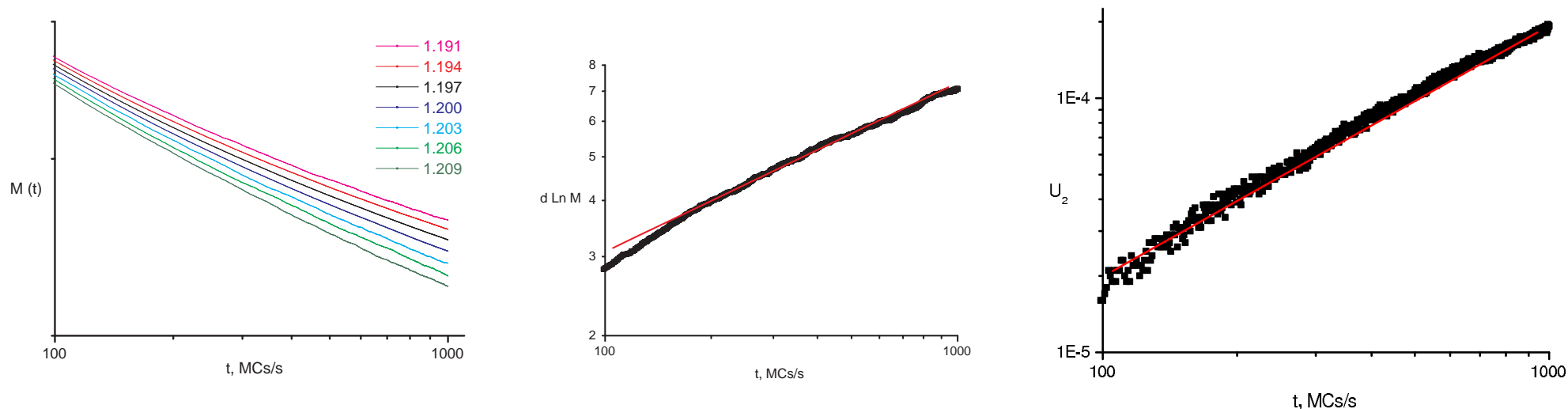


# Условия моделирования

- Система: 3D модель Гейзенберга с линейными произвольно ориентированными дефектами
  - кубическая решетка с  $L = 128$
  - Спиновая концентрация  $p = 0.8$
  - Усреднение по 350 прим.конфигурациям;
  - Критическая температура  $T_c = 1.197(2)$ ;



# Коротко-временная динамика модели Гейзенберга



Временные зависимости намагниченности  $M(t)$ , логарифмической производной намагниченности  $\partial_\tau \ln M(t, \tau)$  и кумулянта  $U_2(t)$  для  $L = 128$  при критической температуре  $T_c = 1.197(2)$ .

# Критические индексы

Модель	Компьютерное моделирование	Теоретико-полевые расчеты †
Изинга ‡	$z = 2.489(21),$ $\nu = 0.719(22),$ $\beta = 0.375(45),$	$z = 2.495,$ $\nu = 0.716,$ $\beta = 0.350.$
XУ ‡	$z = 2.364(7),$ $\nu = 0.778(26),$ $\beta = 0.37(30),$	$z = 2.365,$ $\nu = 0.760,$ $\beta = 0.366.$
Гейзенберга	$z = 3.01(92),$ $\nu = 0.87(33),$ $\beta = 0.314(54),$	$z = 2.264,$ $\nu = 0.798,$ $\beta = 0.362.$

† Prudnikov<sup>2</sup> et.al., Phys.Rev.B, 2000;

‡ Prudnikov<sup>2</sup> et.al., Progr.Theor.Phys., 2007.

# Коротко-временная динамика

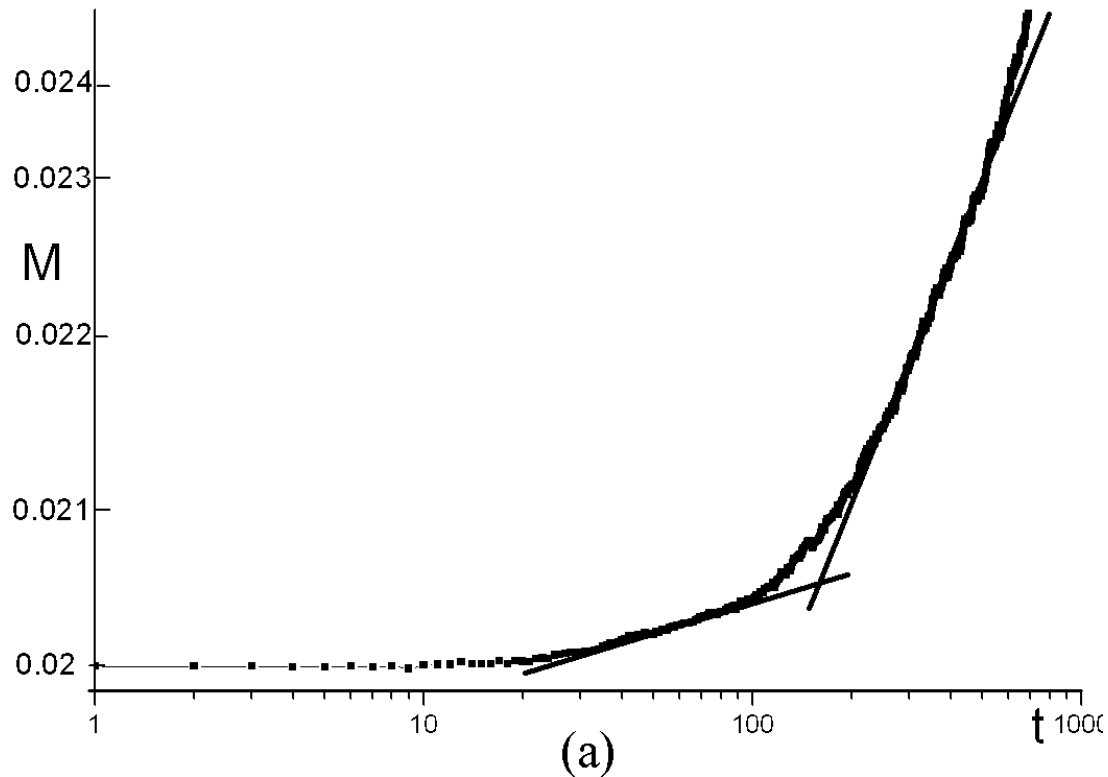
b) эволюция из неупорядоченного состояния  
 $m_0 = 0.01, 0.02, 0.03; 0.0001$

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

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

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

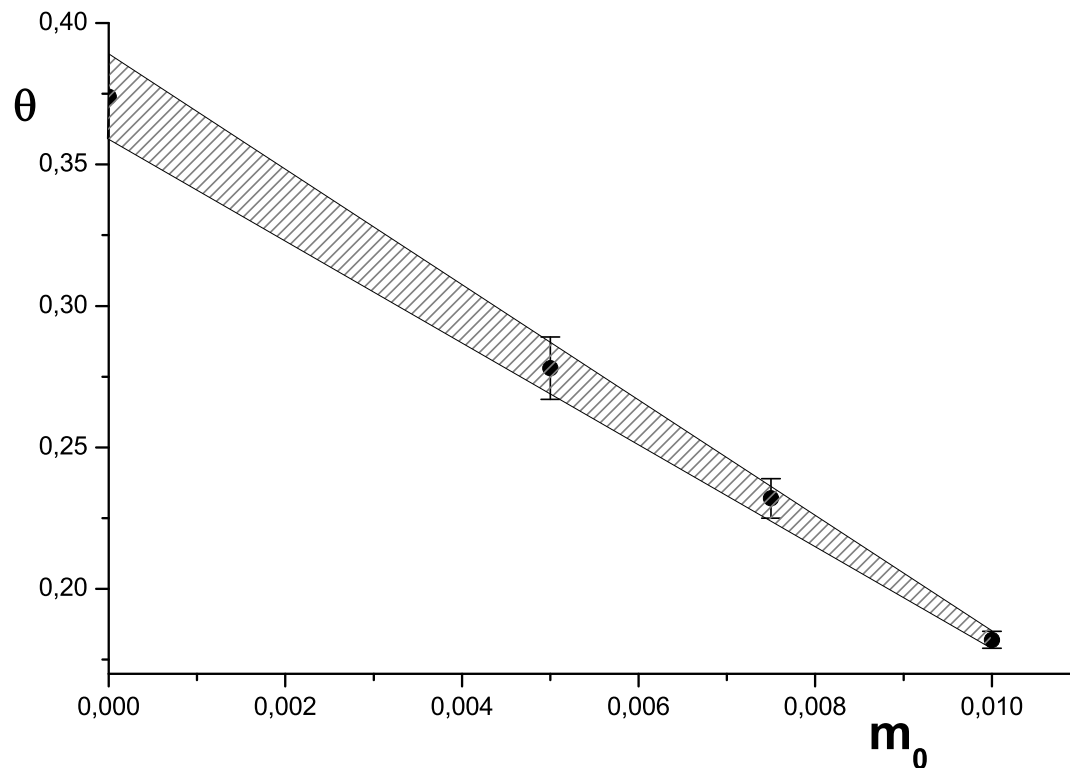
# Коротко-временная динамика



Временная эволюция намагниченности  $M(t)$  для  $L = 128$  и для начальной намагниченности  $m_0 = 0.02$  при критической температуре  $T_c = 3.9281$ .

# Экстраполяция индекса $\theta$

$m_0 = 0.01; 0.0075; 0.005.$



Экстраполяция индекса  $\theta$  для  $m \rightarrow 0$ .



# Критические индексы модели Изинга

	$\theta$	$c_2$	$c_a$	$z$	$\beta/\nu$	$x_0$
$t \in [10, 70]$						
$m_0 = 0.02$	0.086(12)	0.964(28)	1.384(26)			
$m_0 = 0.001$	0.099(9)	0.973(19)	1.364(23)			
$m_0 = 0$	0.101(10)	0.975(23)	1.363(26)	2.049(27)	0.501(27)	0.708(34)
$t \in [100, 650]$						
$m_0 = 0.02$	0.152(12)	0.812(21)	1.103(16)			
$m_0 = 0.001$	0.149(10)	0.804(19)	1.047(12)			
$m_0 = 0$	0.149(11)	0.801(20)	1.043(14)	2.517(32)	0.492(28)	0.867(37)
<b>TFD</b>				2.495	0.489	
<b>pure (Zheng B.)</b>	0.108(2)	0.970(11)	1.362(19)	2.041(18)	0.510(14)	0.730(25)

Prudnikov V.V., Prudnikov P.V., Zheng B. et al., Progr.Theor. Phys., 2007.



# Критические индексы многокомпонентных систем

	XY-модель		модель Гейзенберга	
	CM	TFD	CM	TFD
$\theta$	0.374(14)		0.477(18)	
$z$	2.355(53)	2.365	2.95(65)	2.264
$\beta/\nu$	0.534(35)	0.481	0.472(65)	0.482



# Выводы

- Эффекты корреляции приводят к новому типу критического поведения не только для изингоподобных систем, но и для систем с многокомпонентным параметром порядка,
- Наблюдается хорошее согласие полученных значений динамического и статических критических индексов с результатами проведенных ранее теоретико-полевых ренормгрупповых расчетов.

## Алгоритм Вольфа для $n$ -компонентных систем

1. Выбирается случайный единичный вектор  $\vec{r}$ ;
2. Выбирается случайным образом спин в решетке  $\vec{s}_1$  (центральный). Выбранный спин зеркально отражается в плоскости перпендикулярной направлению  $\vec{r}$ :  $\vec{s}_i = \vec{s}_i - 2(\vec{s}_i \vec{r}) \vec{r}$ ;
3. Рассматриваются ближайшие "соседи" центрального спина. Спин считается сонаправленным, если он лежит по одну сторону от плоскости перпендикулярной направлению  $\vec{r}$  с вектором  $\vec{s}_1$ , т.е. если  $(\vec{s}_1 \vec{r})(\vec{s}_2 \vec{r}) > 0$ ;

## Алгоритм Вольфа для $n$ -компонентных систем



4. Такой спин переворачивается с вероятностью  $1 - \exp\left(-\frac{2J(\vec{s}_1 \vec{r})(\vec{s}_2 \vec{r})}{T}\right)$ , а его координаты запоминаются в стеке;
5. После проверки всех соседних узлов, спин, координата которого были загружены в стек последними, выбирается центральным и снова выполняется пункт 3;
6. Процедура переворота спинов заканчивается тогда, когда стек становится пустым. Этот процесс называется переворотом кластера, а все перевернутые спины считаются принадлежащими кластеру Вольфа.

