Численное моделирование фазовых переходов в магнетиках

А. А. Бирюков[a], Я. В. Дегтярева[a]

[a] Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королёва, 443086, Московское шоссе, 34, Самара, Россия

Аннотация

Рассмотрены двумерные и трехмерные модели Изинга, в которых каждый спин взаимодействует как с соседними спинами, так и с дальними. Величина интенсивности взаимодействия между спинами полагается убывающей с расстоянием по степенному закону $r^{-d-\sigma}$, где d – размерность решетки, σ – феноменологический параметр. Исследования проведены методом Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса с применением техники параллельных вычислений. На основе численного моделирования найдена зависимость температуры фазового перехода в магнетике от параметра σ. Показано, что при возрастании σ температура фазового перехода убывает.

Ключевые слова: Численное моделирование; Метод Монте-Карло; Модель Изинга; Фазовый переход; Температура фазового перехода

Введение

Задача описания магнитных свойств вещества и фазовых переходов между парамагнитным и ферромагнитным состояниями имеет давнюю историю и продолжает активно развиваться в настоящее время. Э. Изинг в 1924 году предложил модель магнетика как системы попарно взаимодействующих спинов, описал ее магнитные свойства для одномерной цепочки и доказал отсутствие фазового перехода [1]. В 1944 году Л. Онсагером [2] впервые была рассмотрена двумерная модель Изинга, для которой он доказал существование фазового перехода и вычислил его температуру. В 1952 году Чж. Янг определил спонтанную намагниченность в двумерной модели Изинга [3]. Однако попытки исследовать аналитическими методами трехмерную модель Изинга, а также двумерную модель с учетом действия внешнего магнитного поля оказались безуспешны, что привело к разработке и развитию численных методов ее исследования. Использование методов компьютерного моделирования позволило изучать критическое поведение систем практически любой сложности и при различных внешних условиях [4]. Так, были проведены исследования двумерных и трехмерных моделей Изинга с различными конфигурациями решеток (треугольных, простых кубических, гексагональных, пентагональных) во внешнем магнитном поле [5], при наличии дефектов [6, 7].

В работах [8, 9] были построены численными методами фазовые диаграммы равновесия между парамагнитным и ферромагнитным состояниями, в модели Изинга на простой кубической решетке с учетом взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей. В работе [10] рассмотрены обменные взаимодействия в различных конфигурациях двумерных решеток, включая вторые ближайшие спины, и доказывается, что добавление дальних взаимодействий увеличивает температуру фазового перехода.

Для учета дальних взаимодействий в модели Изинга М. Фишер [11] предложил интенсивность взаимодействия между спинами рассматривать убывающей с расстоянием по степенному закону:

$$J \propto r^{-d-\sigma},$$

где d – размерность решетки, σ — параметр взаимодействия, r – расстояние между спинами.

Параметр взаимодействия σ существенно влияет на значения критических показателей фазового перехода в модели Изинга. Например, было показано [12, 13], что с увеличением параметра σ критические индексы двумерной модели приближаются к значениям, предсказанным ренорм-групповым анализом для двумерной модели Изинга с взаимодействием между ближайшими спинами.

В данной работе на основе метода Монте-Карло определены температуры фазового перехода между парамагнитным и ферромагнитным состояниями в двумерной и трехмерной моделях Изинга с дальними взаимодействиями для различных значений параметра σ. Предложен вид аналитической функции, аппроксимирующей зависимость между критической температурой и параметром σ.

1. Модели Изинга с дальним взаимодействием

Рассмотрим модели Изинга, которые описываются простыми квадратными или кубическими решетками (все ребра которых имеют одинаковую длину равную единице) с периодическими граничными условиями. В каждом узле решетки находятся спины, принимающие одно из двух возможных значений: +1 или -1. Для описания положения каждого спина введем прямоугольную систему координат, оси которой x, y, z направлены параллельно сторонам решетки.

Для двумерной модели положение спинов определяется двумя целыми числами (i, j), принимающими значения 1, 2, 3 и т. д. Гамильтониан спина с координатами (i, j) определяется выражением:

$$H(S_{ij}) = \sum_{l=i-N}^{i+N} \sum_{m=j-N}^{j+N} \frac{J_0}{r_{lm}^{2+\sigma}} S_{ij} S_{lm}, \tag{1}$$

где $r_{lm} = \sqrt{(i-l)^2 + (j-m)^2}$ – расстояние между спинами S_{ij} и S_{lm}, J_0 – константа взаимодействия между спинами, $S_{ij} = \pm 1$ для всех i, j. Суммирование в выражении (1) проводится по всем точкам (l, m), находящимся в круге радиуса R с центром в спине с координатами (i, j), где

$$\sqrt{(l-i)^2 + (m-j)^2} \le R = N.$$

При этом исключается самодействие спина, то есть не могут одновременно выполняться равенства $l = i, m = j$. Интенсивность взаимодействия между спинами S_{ij} и S_{lm} J_{lm} убывает с расстоянием r_{lm} по степенному закону:

$$J_{lm} = \frac{J_0}{r_{lm}^{2+\sigma}} \tag{2}$$

Аналогично положение спина в трехмерной модели определяется тремя целыми числами i, j, k. Гамильтониан спина S_{ijk} с координатами $(i, j, k), i, j, k = 1, 2, 3\ldots$ принимает вид

$$H(S_{ijk}) = \sum_{l=i-N}^{i+N} \sum_{m=j-N}^{j+N} \sum_{n=k-N}^{k+N} \frac{J_0}{r_{lmn}^{3+\sigma}} S_{ijk} S_{lmn}, \tag{3}$$

где $r_{lmn} = \sqrt{(i-l)^2 + (j-m)^2 + (k-n)^2}$ – расстояние между спинами S_{ijk} и S_{lmn}. Аналогично случаю для двумерной модели суммирование осуществляется по всем точкам (l, m, n), находящимся в шаре радиуса R, где

$$\sqrt{(l-i)^2 + (m-j)^2 + (n-k)^2} \le R = N,$$

причем не могут одновременно выполняться равенства $l = i, m = j, n = k$. Интенсивность взаимодействия между спинами S_{ijk} и S_{lmn} J_{lmn}, убывает с расстоянием r_{lmn} по закону:

$$J_{lmn} = \frac{J_0}{r_{lmn}^{3+\sigma}}. \tag{4}$$

Суммирование в выражениях (1), (3) проводится по всем индексам l, m, n с учетом периодических граничных условий.

Среднее значение магнитного момента, приходящегося на один спин, соответственно для двумерной и трехмерной решеток определяется по формулам:

$$\langle M \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{i,j=1}^{L} S_{ij} Z^{-1} \exp\left(-\frac{1}{kT} H(S_{ij})\right), \tag{5}$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{L^3} \sum_{i,j,k=1}^{L} S_{ijk} Z^{-1} \exp\left(-\frac{1}{kT} H(S_{ijk})\right), \tag{6}$$

где

$$Z = \exp\left(-\frac{1}{kT} H(+1)\right) + \exp\left(-\frac{1}{kT} H(-1)\right) \tag{7}$$

– нормировочная константа, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура системы, L – линейный размер решетки, то есть число интервалов между спинами вдоль каждой оси x, y, z.

В предложенных моделях параметры J_0, L, N, σ являются феноменологическими, значения которых задаются. Введенный радиус R мы называем радиусом области взаимодействия спинов.

2. Исследование моделей Изинга численными методами

Вычисление $< M >$ и его зависимости от температуры T в рамках предложенных моделей аналитическими методами в соответствии с формулами (5) – (7) представляет значительные трудности. Для решения данной задачи предлагается использовать метод численного моделирования Монте-Карло.

Для численного исследования моделей Изинга по формулам (1) – (7) необходимо в этих выражениях перейти к безразмерным величинам. С этой целью расстояние между спинами мы измеряем в единицах расстояния между ближайшими спинами вдоль оси координат, энергию взаимодействия между спинами J – в единицах энергии взаимодействия меду ближайшими спинами J_0, величину kT приравниваем некому безразмерному параметру T, который будем считать приведенной температурой. Параметр N в формулах (1) – (5) выберем равным 10.

Для расчета среднего значения магнитного момента по формулам (5) – (7) методом Монте-Карло с малой погрешностью необходимо рассматривать решетки с большим числом узлов и реализовывать большое число статистических испытаний. Однако в такой модели метод становится ресурсоемким, поскольку время счета экспоненциально возрастает с увеличением числа узлов и числа испытаний. Поэтому для исследования данной модели был разработан алгоритм Монте-Карло с применением техники параллельных вычислений. Решетка разбивалась на подобласти, и каждая подобласть обрабатывалась отдельным процессором. В основе такого подхода лежит свойство аддитивности магнитных моментов спинов решетки.

Численные значения среднего магнитного момента $< M >$ в зависимости от температуры T для двумерной модели для различных значений параметра σ представлены на рисунке 1. Маркеры на графиках (на рис.1 и на рис.2) представляют результаты численных расчетов. Анализ графиков показывает, что при увеличении параметра σ температура фазового перехода понижается.

На рисунке 2 представлены результаты численного моделирования зависимости магнитного момента $< M >$ от температуры T для трехмерной модели для различных значений параметра σ. Из анализа графиков следует, что температура фазового перехода изменилась по сравнению с двумерной моделью и с увеличением параметра σ она также убывает.

Непосредственно из анализа графиков конкретизировать вид зависимости температуры фазового перехода от параметра σ $T_c(\sigma)$ затруднительно. Поэтому для определения температуры фазового перехода и зависимости $T_c(\sigma)$ требуется применение специальных методов.

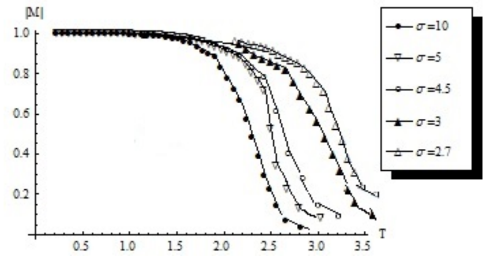

Рис. 1: Зависимость $< M >$ от T в двумерной модели для различных σ

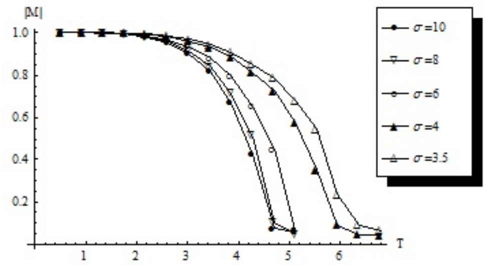

Рис. 2: Зависимость $< M >$ от T в трехмерной модели для различных σ

3. Определение температуры фазового перехода

Для определения температуры фазового перехода нами использовался метод кумулянтов четвертого порядка, предложенный К. Биндером и оказавшийся весьма эффективным [14], [15], [16], [17]. Его суть заключается в построении температурных зависимостей кумулянтов $U_N(T)$ четвертого порядка

$$U_L(T) = 1 - \frac{< M^4(T) >}{3 < M^2(T) >^2}, \tag{8}$$

для различных линейных размеров решетки L и нахождении T_c из общей точки пересечения графиков этих зависимостей.

На рисунке 3 представлены графики кумулянтов Биндера для двумерной (а) и трехмерной (б) решеток. Графики наглядно демонстрируют точку пересечения, которая определяет температуру фазового перехода.

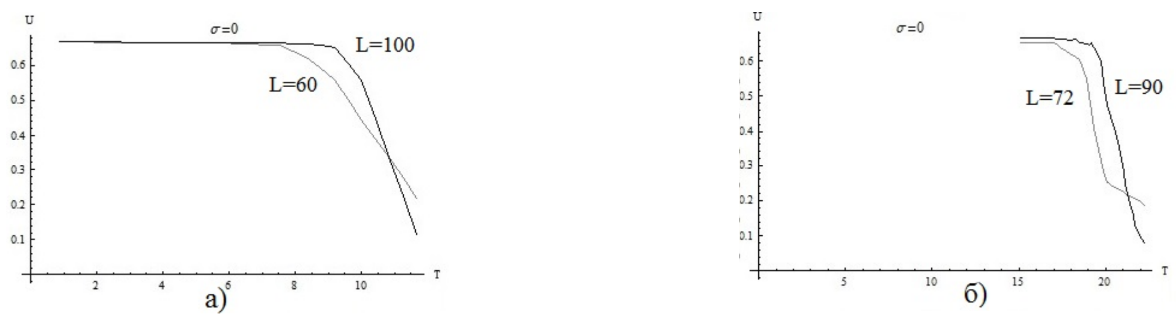

Рис. 3: Зависимость кумулянтов $U_N(T)$ от температуры для двумерных (а) и трехмерных (б) решеток

Значения критических температур при различных значениях параметра σ для двумерной и трехмерной моделей, полученных на основании численного моделирования, представлены на рисунках 4–5 точками. Из положения точек видно, что критические температуры в двумерном и трехмерном случаях убывают с увеличением значений параметра σ по экспоненциальному закону.

На основании результатов численного моделирования по методу наименьших квадратов были получены зависимости $T_c(\sigma)$ от параметра σ в аналитической форме. Эти функции имеют вид:

$$T_c(\sigma) = 2.233 + 8.672\exp(-0.73\sigma) \tag{9}$$

для двумерной модели и

$$T_c(\sigma) = 4.511 + 15.863\exp(-0.7\sigma) \tag{10}$$

для трехмерной модели. Графики этих функций на рисунках 4 – 5 изображены сплошным графиком.

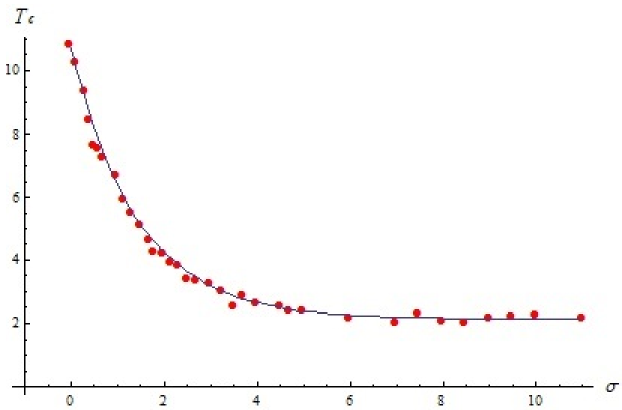

Рис. 4: Зависимость $T_c(\sigma)$ для двумерной модели Изинга

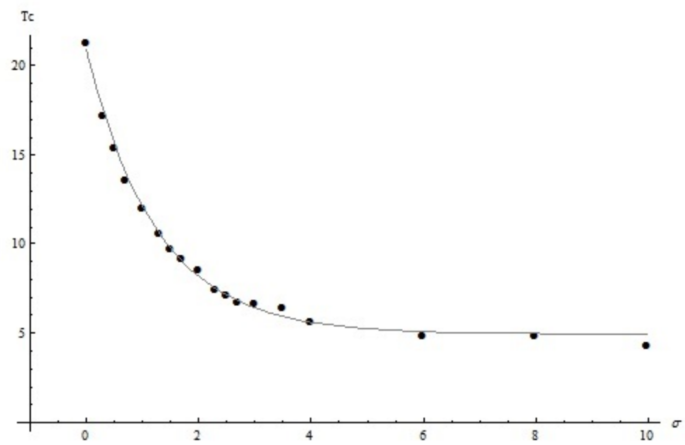

Рис. 5: Зависимость $T_c(\sigma)$ для трехмерной модели Изинга

Предложенные формулы (9), (10) можно записать в виде одного уравнения

$$T_c(\sigma) = A + B\exp(-c\sigma), \tag{11}$$

где $A = 2.233$, $B = 8.672$, $c = 0.73$ для двумерной модели и $A = 4.511$, $B = 15.863$, $c = 0.7$ для трехмерной модели.

Заметим, что в предложенной модели относительное изменение интенсивности взаимодействия $J(R)$ между спинами, расположенными на расстоянии R, и спинами на расстоянии $R = 1$ представляется выражением

$$\delta = \frac{J(R)}{J_0} = \frac{1}{R^{(d+\sigma)}}, \tag{12}$$

то есть, при малых σ константа взаимодействия $J(R)$ между спинами для определенного значения R имеет большее значение, чем при больших σ.

На основании (12) построим зависимость σ от R и δ как функцию $\sigma(R, \delta)$

$$\sigma = -\left(d + \frac{\ln\delta}{\ln R}\right). \tag{13}$$

Формула (13) определят значение σ, при котором $J(R) = \delta J_0$ при выбранных значениях R и δ.

Мы полагаем, что при $\delta = 10^{-d}$, где d – размерность решетки, интенсивность взаимодействия между спинами можно учитывать до расстояния между ними R_k, при котором $J(R_k) = 10^{-d}J_0$, то есть можно считать $J(R_k + 1) = 0$. Последнее означает, что мы полагаем существование взаимодействия между спином и его окружением только в пределах окружности (или сферы) радиуса R_k. В предложенной модели данное условие будет выполняться, если в соответствии с выражением (13) σ брать в виде σ_k

$$\sigma_k = -\left(d + \frac{-d \ln 10}{\ln R_k}\right), \tag{14}$$

где k может принимать значения $2, 3, \ldots, 10$. Таким образом, в модели формулой (14) устанавливается соответствие между параметром σ_k и неким выбранном радиусом области взаимодействия спинов R_k.

Подставляя выражение для σ_k определяемое уравнением (14) в выражение (11), получим формулу, которая определяет зависимость температуры фазового перехода T_c от радиуса области взаимодействия спинов R_k, т.е. $T_c(R_k)$, как для двумерной, так и для трехмерной моделей

$$T_c(R_k) = A + B \exp\left[-cd\left(\frac{\ln 10}{\ln R_k} - 1\right)\right], \tag{15}$$

где A, B, c – коэффициенты, которые конкретизируются в соответствии с выражениями (9), (10) для двумерной или трехмерной моделей.

Зависимость логарифма критической температуры $\ln T_c$ от радиусов области взаимодействия R_k в соответствии с уравнением (15) представлена точками на рисунке 6.

Рис. 6: Зависимость критической температуры от R_k для двумерной (а) и трехмерной (б) моделей Изинга

Точки на рисунке 6 представляют результаты численного моделирования фазового перехода для двумерной (а) и трехмерной (б) моделей Изинга с дальними взаимодействиями. Для наглядности зависимость температуры фазового перехода от радиуса области взаимодействия между спинами можно аппроксимировать непрерывной кривой, уравнение которой определяется выражением, полученным на основании (15) с условием, что R_k заменяется на R, принимающий непрерывные значения.

$$\ln T_c(R) = \ln\left[A + B \exp\left[-cd\left(\frac{\ln 10}{\ln R} - 1\right)\right]\right], \tag{16}$$

Из графиков, представленных на рисунке 6, видно, что критическая температура возрастает с увеличением радиуса R_k области взаимодействия спинов, приближаясь к некоторому предельному значению при больших R_k.

Заметим, что данные графики качественно совпадают с графиками, полученными ранее в работах [18]–[19], где исследовалась модель Изинга с иной формой взаимодействия между спинами.

Заключение

На основании численного моделирования фазовых переходов в магнетиках была выявлена зависимость температуры фазового перехода от характера взаимодействия между спинами. Температура возрастает с увеличением радиуса области взаимодействия спинов. Однако существует насыщение увеличения значений температуры фазового перехода от дальности взаимодействия.

Литература

[1] Ising, E. Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetimus. Hamburg, 1924.
[2] Onsager, L. Crystalstatistics. A two-dimensional model with order-disorder transitions // PhysRev, 1944.
[3] Yang, C. N. The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model // PhysRev. – 1952. – V. 85. – P. 808–816.
[4] Binder, K. Monte Carlo simulation in statistical physics. / K. Binder, D. W. Heermann. – M: Fizmatlit, 1995.
[5] Biryukov, A. A. Computer simulation of the Ising model in the external magnetic field / A. A. Biryukov, Y. V. Degtyarova, M. A. Shleenkov // Vestnik molodyh uchenyh i specialistov SamGU. – 2012. – Vol. 1. – P. 78–82.
[6] Murtazaev, A. K. Critical behavior of the three-dimensional Ising model with the quenched disorder in the cubic lattice / A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, A. B. Babaev // GTEF. – 2004. – Vol. 126. – P. 1377–1383.
[7] Prudnikov, V. V. Computer simulation of the critical behavior of the three-dimentional disordered Ising model / V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. N. Vakilov, A. S. Krinitsin // GTEF. – 2007. – Vol. 132, no 2(8). – P. 417–425.
[8] Rosana dos Anjos, A. Three-dimensional Ising model with nearest- and next-nearest-neighbor interactions / Rosana A. dos Anjos, J. Roberto Viana, J. Ricardo de Sousa, J. A. Plascak// PhysRev E. – 2007. – Vol. 76(022103).
[9] Emilio, N.M. Cirillo. Critical behavior of the three-dimensional Ising model with nearest-neighbor, next-nearest-neighbor, and plaquette interactions / Emilio N.M. Cirillo, G. Gonnella, A. Pelizzola // PhysRev E. – 1997. – Vol. 55(1). – R17–R20.
[10] Ramirez-Pastor, A.J. Ising lattices with $\pm J$ second-nearest-neighbor interactions / A.J. Ramirez-Pastor, F. Nieto // PhysRev. – 1997. – Vol. 55(21). – P. 14323–14329.

[11] Fisher, M. E. Critical exponents for long-range interactions / M. E. Fisher, Sh. Ma, B. G. Nickel // PhysRevLett. – 1972. – Vol. 29. no. 14. – P. 917–920.
[12] Picco, M. Critical behavior of the Ising model with long range interactions // – 2012. – arXiv:1207.1018v1.
[13] Blanchard, T. Influence of long-range interactions on the critical behavior of the Ising model / T. Blanchard, M. Picco, M. A. Rajapbour. // – 2013. – arXiv:1211.6758v3.
[14] Murtazaev, A. K. Cluster Monte Carlo algorithms, finite-size scaling and critical exponents of the complex lattice models // A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, M. A. Magomedov// GTEF. – 2001. – Vol. 120, no 6. – P. 1535–1543.
[15] Loison, D. Monte-Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians $H = J\sum(S_i S_j)^3$ // Phys. Lett. A. – 1999. – Vol. 257. – P. 83–87.
[16] Kamilov, I. K. Monte Carlo studies of phase transitions and critical phenomena / I. K. Kamilov, A. K. Murtazaev, Kh. A. Aliev// UFN. – 1999. – Vol. 169, no 7. – P. 773–795.
[17] Binder, K. Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization // Phys Rev Lett. – 1981. – Vol. 47. no 9. – P. 693–696.
[18] Biryukov, A. A. Ising model with long-range interactions in the external magnetic field / A. A. Biryukov, Y. V. Degtyarova // XII Vserossiyskiy molodejniy Samarskiy konkurs-konferenciya nauchnyh rabot po optike i lasernoy fisike: sbornik konkursnyh dokladov (Samara, 12–15 noyabrya 2014). – 2014. – M.: Federalnoe gosudarstvennoe budjetnoe uchrejdenie nauki Fizicheskiy institut im. P. N. Lebedeva RAN. – P. 49–54.
[19] Biryukov, A. A. Influence of long-range interactions on the critical temperature of the Ising model phase transition / A. A. Biryukov, Y. V. Degtyarova // The XXII International Workshop High Energy Physics and Quantum Field Theory. – 2015. – Тезисы трудов конференции QFTHEP 2015.