

Компьютерное моделирование полуограниченной модели Изинга

С.В. Белим¹
belimsv@omsu.ru

И.В. Бычков²
bychkov@csu.ru

Ю.С. Ракицкий¹
yrakitsky@gmail.com

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

²Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Аннотация

Моделируется критическое поведение полуограниченной модели Изинга. Строится фазовая диаграмма системы. Для поверхностного фазового перехода получены критическая температура и критические индексы. Показана возможность существования новой фазы.

Введение

В последнее время наблюдается достаточно высокий интерес к явлениям поверхностного магнетизма, связанных с упорядочением спинов на поверхности в области ферромагнитного фазового перехода. В рамках теории среднего поля [1] было показано, что при отрицательных значениях поверхностной магнитной энергии фазовый переход на поверхности наблюдается выше точки Кюри. Намагниченность, при этом, убывает вглубь образца по экспоненциальному закону. Фазовой диаграммой полуограниченных систем [2] включает три фазы: неупорядоченную (SD/BD), поверхностно-упорядоченную объемно-неупорядоченную (SO/BD) и поверхностно-упорядоченную объемно-упорядоченную (SO/BO). В итоге на фазовой диаграмме присутствует три линии фазовых переходов, пересекающиеся в трикритической точке. Переход из SD/BD в SO/BD носит название поверхностного (surface) фазового перехода, из SO/BD в SO/BO - экстраординарного (extraordinary) фазового перехода, из SD/BD в SO/BO - обычного (ordinary) или объемного фазового перехода. Фазовый переход в трикритической точке пересечения трех линий фазовых переходов принято называть специальным (special) [3]. Вид фазовой диаграммы представлен на рисунке 1.

В работе [4] экспериментально для ферромагнитных материалов $SrFe_{12}O_{19}$ и $SrFe_{10.2}Al_{1.8}O_{19}$ была показана возможность состояния, в котором температуры объемного перехода превышает температуру поверхностного перехода. Как следствие, на фазовой диаграмме должна присутствовать объемно-упорядоченная поверхностно-неупорядоченная фаза (SD/BO). На сегодняшний день отсутствуют теоретические описания данной фазы и фазовых переходов, связанных с ней.

1 Описание системы

Гамильтониан полуограниченной модели Изинга имеет следующий вид:

$$H = J_B \sum S_i S_j + J_S \sum S_i S_j,$$

Copyright © by the paper's authors. Copying permitted for private and academic purposes.

In: Sergey V. Belim, Nadezda F. Bogachenko (eds.): Proceedings of the Workshop on Data Analysis and Modelling (DAM 2016), Omsk, Russia, October 2016, published at <http://ceur-ws.org>

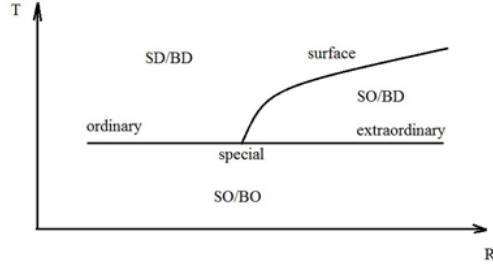


Рис. 1: Фазовая диаграмма полуограниченной системы, построенная на основе теории среднего поля и компьютерных экспериментов.

где S_i – значения спина в i -ом узле ($+1/2$ или $-1/2$). Суммирование осуществляется только по ближайшим соседям. Вторая сумма включает в себя только поверхностные спины, первая сумма – все остальные. Поверхностный (J_S) и объемный (J_B) обменные интегралы в большинстве реальных систем имеют различные значения. Причем J_S может иметь значения как больше, так и меньше J_B .

В данной работе изучались трехмерные системы с кубической решеткой линейных размером $L \times L \times 2L$ методом Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса. Плоскость свободной границы задавалась уравнением $z = 0$, система располагалась в полупространстве $z \geq 0$. Использовались периодические граничные условия. Для спинов, расположенных в плоскости $z = 2L$ соседними считались спины в плоскости $z = L$. Для определения температуры фазового перехода и критических индексов использовалась теория конечно размерного скейлинга.

Для повышения скорости компьютерного эксперимента было осуществлено распараллеливание алгоритма Метрополиса для графического процессора с использованием технологии CUDA. Данный подход позволил одновременно запускать до 445 вычислительных потоков. Распараллеливание осуществлялось на этапе сбора статистических данных. Первоначально система приводилась в равновесное состояние на обычном процессоре. После этого вся трехмерная система разбивалась на одинаковые блоки, каждому из которых сопоставлялся свой вычислительный поток. В рамках одного потока производилась попытка переворота каждого из спинов в одном блоке. На первый взгляд такая процедура существенно отличается от классического алгоритма Метрополиса, в котором выбор переворачиваемого спина производится случайным образом. Однако с учетом того, что переключение между процессами подчиняется случайному закону с достаточно хорошими характеристиками, выбор следующего спина для переворота происходит произвольно. Причем получаемый таким образом генератор случайных чисел не является программно-предопределенным и воспроизводимым, что существенно сказывается на результатах в положительную сторону. Как хорошо известно, результаты компьютерное моделирования методом Монте-Карло существенно зависят от качества генератора псевдослучайных чисел. В силу того, что в нашей реализации используется генератор случайных чисел, близкий к истинно случайному, то возникает возможность уменьшить число шагов Монте-Карло на спин. Тестирование программы на обычной неограниченной модели Изинга показало, что спустя 100 000 итераций после установления равновесия поправки вносятся только в третий знак после запятой. Тогда как общепринятой для критических явлений является точность два знака после запятой. Большая точность не достижима ни в реальном эксперименте, ни в рамках теоретико-полевого подхода. В связи с чем можно ограничиться 100 000 шагов Монте-Карло на спин. Также компьютерные эксперименты с обычной моделью Изинга показали, что уже для систем размером $L = 50$ кумулянт Биндера изменяется от максимального значения $2/3$ до минимального нулевого значения в интервале температур шириной не более 0.1. Вследствие чего, для определения температуры с точностью до второго знака после запятой, достаточно ограничиться системами, размер которых не превышает $L = 50$. В контрольных компьютерных экспериментах для классической трехмерной модели Изинга, при описанных ограничениях, критическая температура локализовалась с высокой точностью.

Для наблюдения за поведением теплоемкости и восприимчивости в зависимости от температуры были использованы флуктуационные соотношения:

$$C = NK^2(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \chi = NK(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2),$$

$K = |J_B|/k_B T$, $N = L^3$ – число узлов, U – внутренняя энергия, m – намагниченность системы, угловые

скобки означают термодинамическое усреднение.

Критическая температура перехода определялась с помощью куммулянтов Биндера четвертого порядка:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{(3\langle m^2 \rangle)^2}.$$

Для систем с разными размерами L куммулянты пересекаются в критической точке. Отдельно вычислялись куммулянты Биндера для всей системы в целом (объемные куммулянты) и для двумерной решетки поверхностных спинов (поверхностные куммулянты). По точке пересечения объемных куммулянтов определялась температура объемного фазового перехода T_c , по точке пересечения поверхностных куммулянтов – температура поверхностного фазового перехода T_s .

Для определения статических критических индексов была использована теория конечноразмерного скейлинга. Согласно данной теории восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\chi \sim L^{(\gamma/\nu)}, \quad m \sim L^{(-\beta/\nu)}.$$

Для получения самих критических индексов исследовалось поведение восприимчивости от температуры, которое должно удовлетворять соотношению:

$$\chi \sim |T - T_c|^\gamma.$$

Далее вычислялся индекс ν , а из него находился индекс β .

Аналогичные вычисления, с теми же соотношениями, проводились для поверхностных спинов.

2 Результаты компьютерного моделирования

Компьютерный эксперимент проводился для систем с линейными размерами от $L = 25$ до $L = 50$ с шагом $L = 5$ с использованием вычислительного комплекса Tesla на графических процессорах. Количество шагов Монте-Карло на спин было равно 100 000. Значение отношения обменных интегралов $R = J_S/J_B$ пробегало значения от 0.1 до 1.8 с шагом 0.1. Для каждого значения R определялись критическая температура и критические индексы как фазового перехода на поверхности системы, так и в объеме системы. При значениях $R \geq 1$ были получены результаты, согласующиеся как с предсказаниями теоретико-полевого подхода [5, 6], так и с результатами компьютерного моделирования, полученные в других работах [7].

При отношении обменных интегралов $R < 1$ обменное взаимодействие между поверхностными спинами имеет меньшую величину в сравнении с объемным обменным интегралом. В результате тепловое движение сильнее влияет на упорядоченность направлений спинов, что, в свою очередь, приводит к меньшей намагниченности поверхностного слоя по сравнению с объемной намагниченностью. В интервале значений $0.7 < R < 1$ для объемного фазового перехода критическая температура имеет значение $T_c = 4.51 \pm 0.01$, для перехода на поверхности $T_s = 4.48 \pm 0.01$. Причем данные значения температур перехода в пределах погрешности наблюдаются для всех R . Как видим, температура поверхностного перехода ниже температуры объемного перехода, что свидетельствует о наличии фазы SD/VO хоть и в очень узком интервале температур. Следует учитывать, что основной объем системы уже находится в ферромагнитной фазе и создает не нулевое внешнее магнитное поле. Поэтому поверхностный слой в данной фазе надо рассматривать как парамагнетик во внешнем магнитном поле, что существенно влияет на величину его намагниченности. По-видимому, этим и объясняется малое отличие температуры поверхностного перехода от температуры объемного перехода.

Поведение намагниченности вблизи поверхности может с высокой точностью быть аппроксимировано степенной функцией:

$$M(d) = M(0)d^\lambda.$$

где (d) – значение намагниченности на расстоянии d от свободной поверхности. Для $R = 0.8$ при $T = 4.51$ показатель степени $\lambda = 0.283 \pm 0.002$. Если состояние системы находится достаточно далеко от линий фазовых переходов, то система намагничена равномерно.

Расчет критических индексов при $0.7 < R < 1$ показал, что объемные критические индексы совпадают со значениями, наблюдаемыми для обычного фазового перехода. Этот результат является ожидаемым, так как тонкий поверхностный слой, толщиной в один спин, не может оказывать существенного влияния на существенно большее количество спинов в объеме системы. Уменьшение обменного взаимодействия

между поверхностными спинами приводит к заметному изменению поверхностных критических индексов. Так при $R = 1$ наблюдаются критические индексы, характерные для обычного фазового перехода с учетом погрешностей ($\beta_{ord}^s = 0.82 \pm 0.03$, $\gamma_{ord}^s = 0.74 \pm 0.02$). При значении $R = 0.7$ поверхностные критические индексы будут равны $\beta_{ord}^s = 1.29 \pm 0.04$, $\gamma_{ord}^s = 0.34 \pm 0.04$. Таким образом, как и следовало ожидать, изменение обменной энергии взаимодействия между спинами приводит к изменению режима критического поведения.

При $R < 1$ обменное взаимодействие между поверхностными спинами меньше, чем между объемными, что приводит к большему влиянию теплового движения и, как следствие, к меньшей упорядоченности направлений спинов. Физически данное явление должно наблюдаться как меньшая намагниченность поверхностного слоя по сравнению с объемной намагниченностью. Причем разупорядочивающее влияние поверхностного слоя должно сказываться и на близлежащих слоях, так как на каждый спин оказывают влияние все окружающие его спины. Компьютерный эксперимент подтвердил данные рассуждения. На рисунке 2 представлена зависимость магнитного момента на спин в зависимости от расстояния до поверхности при температуре объемного фазового перехода $T_c = 4.51$.

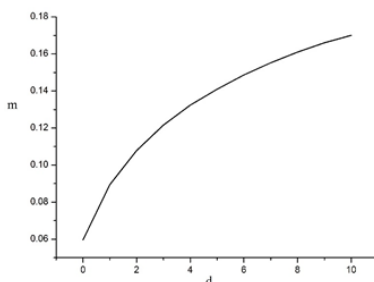


Рис. 2: Зависимость намагниченности m от расстояния до поверхности d для системы с $L = 50$ при $R = 0.8$.

Еще одно изменение режима фазового перехода происходит при $R < 0.7$. В этом случае определение температуры фазового перехода на поверхности системы T_s сталкивается с рядом трудностей. Для случая $R < 0.7$ отсутствует явная точка пересечения поверхностных кумулянтов Биндера. Учитывая общую тенденцию уменьшения значения поверхностных кумулянтов в точке пересечения при уменьшении R можно предположить, что при $R < 0.7$ поверхностные кумулянты пересекаются вблизи нуля, причем пересечения носят множественный характер на узком участке температур. Следует отметить, что температура объемного фазового перехода однозначно определяется по точке пересечения объемных кумулянтов Биндера при всех значениях R и остается равной $T = 4.51 \pm 0.02$. Также не зависят от R значения объемных критических индексов для объемного перехода.

Не смотря на трудности с определением температуры перехода следует отметить, что фазовый переход на поверхности системы при $R < 0.7$ носит непрерывный характер, что можно увидеть из графика зависимости намагниченности от температуры при $R = 0.5$, представленной на рисунке 3.

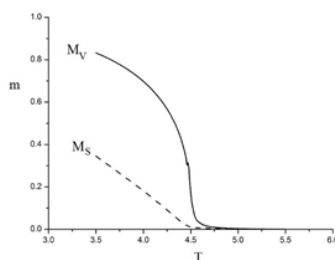


Рис. 3: Зависимость поверхностной и объемной намагниченностей от температуры для случая $R = 0.5$ $L = 50$. M_S — поверхностная намагниченность, M_B — объемная намагниченность.

Трудности локализации температуры граничного перехода приводят к невозможности определения критических индексов традиционными методами. Однако рост намагниченности имеет линейный характер.

Исходя из этого, можно утверждать, что поверхностный индекс $\beta^s = 1$. Линейная зависимость поверхностной намагниченности от температуры наблюдается для всех значений $R < 0.7$.

Отдельно необходимо рассмотреть зависимость поверхностной восприимчивости от температуры для случая $R < 0.7$, типичное поведение которого представлено на рисунке 4 для случая $R = 0.3$.

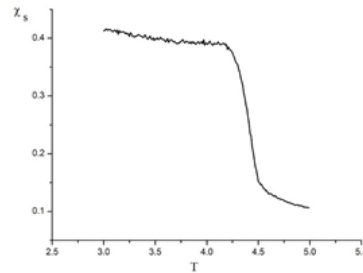


Рис. 4: Зависимость поверхностной восприимчивости от температуры для случая $R = 0.3$ $L = 50$.

Как видим на графике отсутствует типичный пик, соответствующий фазовому переходу второго рода, и наблюдавшийся для случая $R \leq 0.7$. Зависимость поверхностной восприимчивости от температуры носит ступенчатый характер. Причем высота «ступеньки» не зависит от линейных размеров системы и определяется только значением R . Таким образом, по-видимому, мы имеем дело с новым видом непрерывного фазового перехода, поведение термодинамических функций которого отлично от типичных зависимостей, наблюдаемых при фазовом переходе второго рода.

Работа проведена при финансовой поддержке РФФИ, грант N 15-32-51248.

Список литературы

- [1] M.I. Kaganov, A.M. Omel'yanchuk, Phenomenological theory of phase transition in a thin ferromagnetic plate. *Sov. Phys. JETP*, 34:895–899,1971.
- [2] H.W. Diehl The Theory of Boundary Critical Phenomena. *J. Mod. Phys. B.*, 11:3503–3523 , 1997.
- [3] T.C. Lubensky, H. Rubin Critical phenomena in semi-infinite systems. II. Mean-field theory. *Phys. Rev. B.*, 12:3885–3901, 1975.
- [4] A.S. Kamzin, L.A. Grigor'ev Mossbauer study of surface magnetic properties of the antiferromagnet Fe3B06 near the Neel temperature. *JETP Lett.*, 57(9):552–556 ,1993.
- [5] S.V. Belim Critical behavior of disordered systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 103:611–623, , 2006.
- [6] S.V. Belim Multicritical behavior of systems with a free surface. *J. Exp. Theor. Phys.*, 106: 773–780, 2008.
- [7] D.P. Landau, K. Binder Monte Carlo study of surface phase transitions in the three-dimensional Ising model. *Phys. Rev. B.*, 41:4633–4645, 1990.

Computer Simulation of Semi Infnit Ising Model

Sergey V. Belim, Igor V. Bychkov, Yuriy S. Rakickiy

Critical behavior of semi infnit Ising model is simulated. The phase diagramm of system is construct. Critical temperature and critical exponents are calculated for surface phase transition. The possibility of a new phase is shown.