

Компьютерное моделирование модели Изинга с дальнедействующим взаимодействием

С.В. Белим
belimsv@omsu.ru

И.Б. Ларионов
me@g0gi.ch

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

Аннотация

В статье моделируется критическое поведение трехмерной модели Изинга с дальнедействующим взаимодействием. Рассмотрен случай дальнедействующих сил, убывающих по степенному закону. Вычислены зависимости критической температуры и критических индексов от параметров дальнего действия. Критическая температура подчиняется линейному закону. Показано, что дальнедействующие эффекты доминируют для больших систем.

Введение

При исследовании классической трехмерной модели Изинга учитывается взаимодействие только между ближайшими соседями, при этом обменный интеграл считается постоянной величиной. Данное приближение оправдано в силу того, что в реальных ферромагнитных системах обменный интеграл убывает по экспоненциальному закону. Однако в ряде веществ вблизи линии фазового перехода экспериментально обнаружено поведение термодинамических функций, существенно отклоняющееся от предсказываемого на основе модели Изинга. Это отклонение может быть объяснено более медленным убыванием обменного интеграла с расстоянием [1, 2, 3, 4, 5]. При этом необходимо учитывать не только взаимодействие между ближайшими спинами, но и со следующими за ближайшими [2, 6]. Взаимодействие, связанное с медленным убыванием обменного интеграла с расстоянием, принято называть дальнедействующим. В рамках модели Изинга дальнедействующее взаимодействие может быть аппроксимировано степенной функцией [7]:

$$J(r) \sim \frac{1}{r^{D+\sigma}},$$

где D – размерность системы, σ – параметр дальнего действия.

В статье [2] исследовано магнитное критическое поведение EuO . Экспериментально получены критические индексы $\gamma = 1.29 \pm 0.01$ и $\beta = 0.368 \pm 0.005$. Также в данной статье вычислено отношение обменного интеграла соседей, следующих за ближайшими J_2 , к обменному интегралу ближайших соседей J_1 : $J_2 = (0.5 \pm 0.2)J_1$. В статье [1] измерены критические индексы ферромагнитного фазового перехода для сплава $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$ ($\gamma = 1.351 \pm 0.009$, $\beta = 0.321 \pm 0.002$). Аналогичные эксперименты для $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ ($0.2 \leq x \leq 0.3$) [3] привели к значениям критических индексов $0.43 \leq \beta \leq 0.46$, $1.39 \leq \gamma \leq 1.43$. Эффекты дальнего действия также экспериментально были обнаружены в $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$ [4] и $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ ($0 \leq x \leq 16$) [5]. В обоих случаях критические индексы имеют близкие значения $\gamma = 1.366$, $\beta = 0.501$.

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>

Критическое поведение трехмерной модели Изинга с эффектами дальнего действия было исследовано методами ренорм-группы в рамках ε -разложения [7, 8, 9]. Также было осуществлено компьютерное моделирование одномерных и двумерных систем [10, 11, 12]. Во всех этих работах было показано, что эффекты дальнего действия оказывают существенное влияние при значениях параметра $\sigma < 2$.

Модель Изинга с эффектами дальнего действия исследована непосредственно в трехмерном пространстве в рамках теоретико-полевого подхода в статьях [13, 14, 15, 16, 17]. В работах [18, 19] осуществлено компьютерное моделирование двумерной модели Изинга с эффектами дальнего действия. Авторы делают вывод об эквивалентности критического поведения рассматриваемой системы классической модели Изинга размерности $d = 4 + D - 2\sigma$. В статье [20] проведено компьютерное моделирование двумерной модели Изинга со случайными дальнедействующими связями.

Целью данной работы ставится компьютерное моделирование критического поведения вблизи линии фазового перехода второго рода трехмерной модели Изинга с дальнедействующим взаимодействием.

1 Описание системы

Для исследования модели Изинга с эффектами дальнего действия запишем ее гамильтониан:

$$H = J \sum_n S_i S_j + \frac{bJ}{r^{D+\sigma}} \sum_{nn} S_i S_j$$

Здесь S_i – значение спина ($+1/2$ или $-1/2$), J – значение обменного интеграла, b – относительная интенсивность дальнего действия, σ – параметр дальнего действия, характеризующий быстроту убывания энергии взаимодействия с расстоянием, D – размерность системы, в дальнейшем $D = 3$. В первом слагаемом суммирование осуществляется только по ближайшим соседям (n), во втором слагаемом, кроме ближайший соседей, учитываются также спины, расположенные внутри сферы радиусом $2a$ (nn), где a – постоянная решетки.

Компьютерное моделирование осуществлялось с помощью алгоритма Метрополиса. Рассматривались системы с простой кубической решеткой размером $L \times L \times L$. Накладывались стандартные периодические граничные условия.

Для определения температуры фазового перехода использовались кумулянты Биндера четвертого порядка [21]:

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

Угловые скобки использованы для обозначения средней величины по различным конфигурациям системы, m – магнитный момент системы. Согласно теории конечно размерного скейлинга [17] все кумулянты систем с различными линейными размерами L пересекаются в одной точке, соответствующей критической температуре T_c .

Намагниченность системы может быть определена как магнитный момент, приходящийся на один спин системы:

$$M = \frac{\langle m \rangle}{N},$$

где $N = L^3$ – количество спинов.

Для определения восприимчивости системы использовалось соотношение:

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

где $K = |J|/k_B T$, $N = L^3$ – число узлов, m – намагниченность системы, угловые скобки использованы для обозначения усреднения по различным конфигурациям.

Согласно теории конечно размерного скейлинга поведение восприимчивость вблизи критической температуры удовлетворяют соотношению:

Из этого соотношения может быть определено отношение критических индексов γ/ν . Критический индекс ν может быть вычислен из соотношения:

$$\frac{dU_4}{dT} \sim L^{-1/\nu}.$$

Остальные критические индексы вычисляются из скейлинговых соотношений:

$$\eta = \sigma - \frac{\gamma}{\nu}, \quad \beta = \frac{\nu}{2}(D - \sigma + \eta), \quad \alpha = \sigma - D\nu.$$

2 Результаты компьютерного моделирования

Компьютерное моделирование критического поведения осуществлялось для систем с линейными размерами от $L = 25$ до $L = 50$ с шагом $L=5$. Количество шагов Монте-Карло на спин $3 \cdot 10^5$. Для уточнения результатов в ряде случаев моделировались системы размером до $L = 90$. Для исследования свойств модели в вычислительном эксперименте варьировались два параметра – b и σ . Параметр σ изменялся в интервале от 1.5 до 2.0 с шагом 0.1. Параметр b принимал значения от 0.1 до 0.9 с шагом 0.1.

Вычисления выполнялись на графическом процессоре с использованием технологии CUDA. Первый набор итераций осуществлялся на обычном процессоре для приведения системы в равновесное состояние. После этого система разбивалась на блоки, каждый из которых обрабатывался в своем потоке на графическом процессоре. Общее количество потоков достигало 445. Данные от всех потоков собирались и обрабатывались совместно для получения статистических закономерностей.

Компьютерный эксперимент показал, что дальнедействующие силы оказывают существенное влияние на критическую температуру фазового перехода. Зависимость критической температуры от относительной интенсивности дальнедействующего взаимодействия b представлена на рисунке 1.

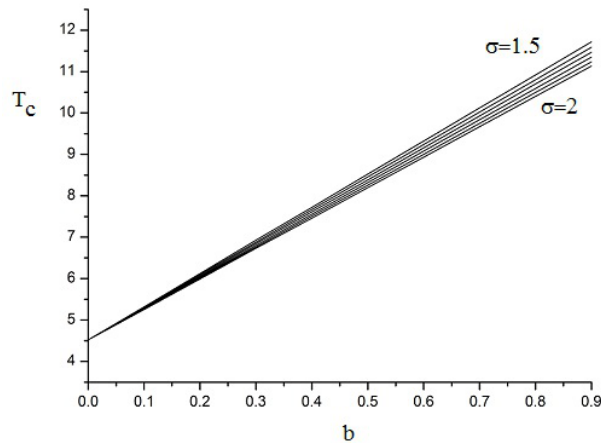


Рис. 1: Графики зависимости критической температуры от параметра интенсивности эффектов дальнего действия b при различных значениях параметра σ .

Линейная зависимость критической температуры от параметра b при всех значениях σ может быть объяснена ростом энергии необходимой для переворота одного спина за счет влияния соседей, следующих за ближайшими. Из графиков также видно, что значения критической температуры убывают с ростом σ при одном и том же b . Данный эффект объясняется, что с увеличением σ дальнедействующее взаимодействие быстрее убывает с расстоянием и влияние спинов, следующих за ближайшими, становится меньше. На рисунке 2 представлена зависимость тангенса угла наклона t графиков критических температур.

График, представленный на рисунке 2 может быть с высокой точностью аппроксимирован соотношением:

$$t = -(1.29 \pm 0.02)\sigma + (9.93 \pm 0.04).$$

Следовательно зависимость критической температуры от параметров дальнего действия имеет следующий вид:

$$T_c(b, \sigma) = (-(1.29 \pm 0.02)\sigma + (9.93 \pm 0.04))b + (4.52 \pm 0.01).$$

Следует отметить, что за пределами исследуемых интервалов b и σ возможны отклонения от полученной зависимости.

3 Заключение

Таким образом дальнедействующие силы, убывающие по степенному закону, существенно влияют на температуру фазового перехода. Значение критической температуры от обоих параметров дальнего действия носит линейный характер. Причем параметр b обеспечивает линейный рост критической температуры, а параметр σ приводит к линейному убыванию температуры.

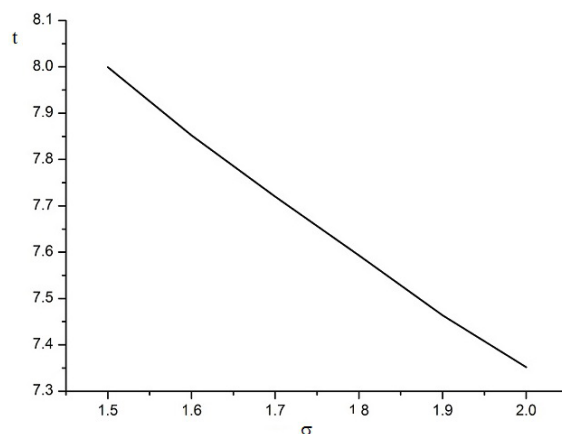


Рис. 2: График зависимости тангенса угла наклона прямой роста критической температуры t от параметра дальнего действия σ .

Список литературы

- [1] S. Mukherjee, P. Raychaudhuri, A.K. Nigman Critical behavior in $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_3$. *Phys. Rev. B.*, 61:8651–8653, 2000.
- [2] N. Menyuk, K. Dwight, T.B. Reed Critical Magnetic Properties and Exchange Interactions in EuO. *Phys.Rev. B.*, 3:1689–1698, 1971.
- [3] J. Mira, J. Rivas, M. Vazquez, J.M. Garcia-Beneytez, J. Arcas, R.D. Sanchez, M.A. Senaris-Rodriguez Critical exponents of the ferromagnetic-paramagnetic phase transition of $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ ($0.20 < x < 0.30$). *Phys.Rev. B.*, 59:123–126, 1999.
- [4] R. Cabassi, F. Bolzoni, A. Gauzzi, F. Licci Critical exponents and amplitudes of the ferromagnetic transition in $La_{0.1}Ba_{0.9}VS_3$. *Phys. Rev. B.*, 74:184425–184430, 2006.
- [5] A. Perumal, V. Srinivas Critical behavior of weak itinerant ferromagnet $Fe_{90-x}Mn_xZr_{10}$ ($0 < x < 16$) alloys. *Phys. Rev. B.*, 67:094418–094423, 2003.
- [6] J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin Critical exponents from field theory. *Phys. Rev. B.*, 21:3976–3998, 1980.
- [7] M.E. Fisher, S.-K. Ma, B.G. Nickel Critical Exponents for Long-Range Interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 29:917–920, 1972.
- [8] J. Honkonen Critical behaviour of the long-range $(\phi^2)^2$ model in the short-range limit. *J. Phys. A.*, 23(5):825–831, 1990.
- [9] E. Luijten, H. Mebingfeld Criticality in One Dimension with Inverse Square-Law Potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 86:5305–5308, 2001.
- [10] E. Bayong, H.T. Diep Effect of long-range interaction on the critical behavior of the continuous Ising model. *Phys. Rev. B.*, 59:11919–11924, 1999.
- [11] E. Luijten Test of renormalization predictions for universal finite-size scaling functions. *Phys. Rev. E.* 60:7558–7561, 1999.
- [12] E. Luijten, H.W.J. Blote Classical critical behavior of spin models with long-range interactions. *Phys. Rev. B.*, 56:8945–8958, 1997.
- [13] S.V. Belim Influence of long-range effects on the critical behavior of three-dimensional systems. *Jetp Lett.*, 77:112–114, 2003.

- [14] S.V. Belim Effect of long-range interactions on the critical behavior of three-dimensional disordered systems. *Jetp Lett.*, 77: 434–437, 2003.
- [15] S.V. Belim Critical dynamics of three-dimensional spin systems with long-range interactions. *J. Exp. Theor. Phys.* 98:745–749, 2004.
- [16] S.V. Belim Effect of elastic deformations on the critical behavior of disordered systems with long-range interactions. *J. Exp. Theor. Phys.*, 98:316–321, 2004.
- [17] S.V. Belim Effect of long-range interactions on the multicritical behavior of homogeneous systems. *J. Exp. Theor. Phys.*, 98:338–441, 2004.
- [18] T. Blanchard, M. Picco, M.A. Rajabpour Influence of long-range interactions on the critical behavior of the Ising model. *Europhysics Letters*, 101(5):56003(5), 2013.
- [19] M. Picco Critical behavior of the Ising model with long range interactions. *arXiv:1207.1018v1* .
- [20] X. Zhang, M.A. Novotny Critical behavior of ising models with random long-range (small-world) interactions. *Braz. J. Phys.*, 36(3):664–671, 2006.
- [21] Binder K. Critical Properties from Monte-Carlo Coarse-Graining and Renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 47:693–696, 1981.

Computer Simulation of Ising Model with Long-Range Interaction

Sergey V. Belim, Igor B. Larionov

Critical behavior of 3D Ising model with long-range interaction is simulated. The power law case for long-range forces is considered. Dependences of critical temperature and critical exponents from long-range parameters are calculated. Critical temperature changes under the linear law. Long-range effects dominate for big systems.