Исследование эффектов «старения» и нарушения флуктуационно-диссипативной теоремы в двумерной XY модели методами Монте-Карло

Попов И.С., **Алексеев С.В.**, **Прудников П.В.**, **Прудников В.В.**

Кафедра теоретической физики

Омский государственный университет имени Ф.М.Достоевского

Эффекты старения

Эффекты старения – эффекты замедления релаксационных процессов с увеличением возраста системы.

$$F = F(t, t_w) \qquad (1)$$

t – время наблюдения;

t_w − время ожидания («возраст» образца);

При $t < t_w$: $$F = F(t, t_w) = F(t - t_w) \qquad (2)$$

При $t > t_w$: $$F = F(t, t_w) \qquad (3)$$

Двумерная XY-модель

Гамильтониан однородной модели:

$$H = -J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \vec{S}_j \qquad (4а)$$

$$H = -J \sum_{<i,j>} \cos(\varphi_i - \varphi_j) \qquad (4б)$$

Гамильтониан структурно неупорядоченной модели:

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j \vec{S}_i \vec{S}_j \qquad (5а)$$

$$H = -J \sum_{<i,j>} p_i p_j \cos(\varphi_i - \varphi_j) \qquad (5б)$$

где $\vec{S}_i$ − спин в i-м узле;

φ_i − фаза i-го спина;

p_i − число заполнения i-го узла (1 – есть спин, 0 - дефект);

Термодинамика двумерной XY-модели

Основной вклад в термодинамику дают:

1)Спиновые волны [1].

2)Топологические особенности − вихри [2,3].

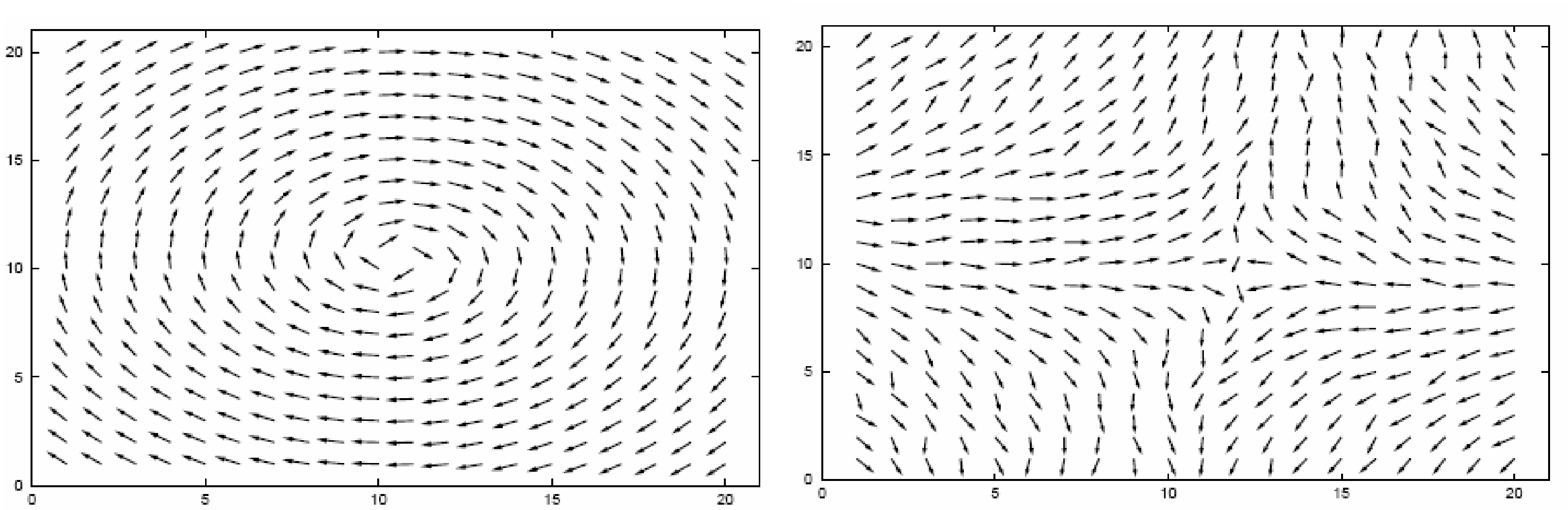

Рис.1. Вихри с топологическим зарядом m=+1 (слева) и m=−1 (справа).

---

[1] Березинский В.Л. // ЖЭТФ. - 1970.

[2] Kosterlitz J.M., Thouless D. J. // J. Phys. C: Solid State Phys. - 1973.

[3] Коршунов С.Е. // УФН. 2006.

Фазовый переход Березинского-Костерлица-Таулесса

Корреляционная функция [1]: $C(\vec{r}) = < \exp(i(\varphi_{\vec{j}+\vec{r}} - \varphi_{\vec{j}})) >$ (10)

T < T$_{KT}$: $C(\vec{r}) \sim |\vec{r}|^{-\eta(T)}$ (11)

T > T$_{KT}$: $C(\vec{r}) \sim \exp\left(-|\vec{r}|/\xi\right)$ (12)

Температура фазового перехода T$_{KT}$ [4]:

p=1,0: T$_{KT}$ = 0,893(5);

p=0,9: T$_{KT}$ = 0,681(9);

p=0,8: T$_{KT}$ = 0,485(5);

[1] Березинский В.Л. // ЖЭТФ. - 1970.

[4] Прудников В.В., Прудников П.В., Алексеев С.В. // Вестн. Ом. ун-та. 2010. № 4. С. 70-75.

Динамика XY-модели

В данной работе методами компьютерного моделирования исследуются неравновесная динамика двумерной XY-модели при температурах $T \leq T_{KT}$ посредством расчета временных зависимостей характеристик системы при реализации алгоритма Метрополиса [5]:

1) Формируем начальную конфигурацию.
2) Производим случайное пробное изменение в начальной конфигурации.
3) Вычисляем ΔE – изменение энергии системы, обусловленное пробным изменением начальной конфигурации.
4) Если $\Delta E \leq 0$, то принимаем новую конфигурацию.
5) Если $\Delta E > 0$, то вычисляем вероятность перехода $W = \exp(-\Delta E/T)$.
6) Генерируем случайное число r в интервале (0,1).
7) Если $r \leq W$, то принимаем конфигурацию, в противном случае сохраняем предыдущую конфигурацию.
8) Определяем требуемые значения физических величин.
9) Повторяем пункты 2-8 для получения достаточного числа конфигураций.

За один шаг по времени принимается шаг Монте-Карло на спин (MKS/s), за время которого каждому спину системы была дана возможность изменить своё состояние.

---

[5] Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Journal of Chemical Physics. - 1953. - V. 21. - N. 6. -P. 1087–1092, 1953.

Автокорреляционная функция (АКФ)

В данной работе исследование эффектов старения в производится на основе анализа временного поведения АКФ системы:

Для упорядоченной системы:

$$A(t,t') = \frac{1}{N}\sum_i < \vec{S}_i(t)\vec{S}_i(t') > \qquad (12а)$$

Для структурно неупорядоченной системы:

$$A(t,t') = \frac{1}{pN}\sum_i [< p_i\vec{S}_i(t)\vec{S}_i(t') >] \qquad (12б)$$

<…> − статистическое усреднение;

[…] – усреднение по различным примесным конфигурациям;

Исследование двухвременной зависимости автокорреляционной функции

Рассматривалась плоская решетка, содержащая $N=L^2$ узлов с линейным размером $L=256$.

Для однородных исследовались эффекты старения для различных температур для трех значений времени ожидания: t_w =100, 500 и 1000 MCS/s.

Для структурно неупорядоченных систем использовались большие времена ожидания.

Системе задавался старт из начального упорядоченного состояния и состояния с малым значением намагниченности.

Для каждой температуры T и каждого времени ожидания t_w проводилось усреднение получаемых временных зависимостей:

1)по 1000 статистическим прогонкам для системы без дефектов.

2)по 200 примесным конфигурациям, каждая из которых усреднялась по 25 статистическим прогонкам для неупорядоченной системы.

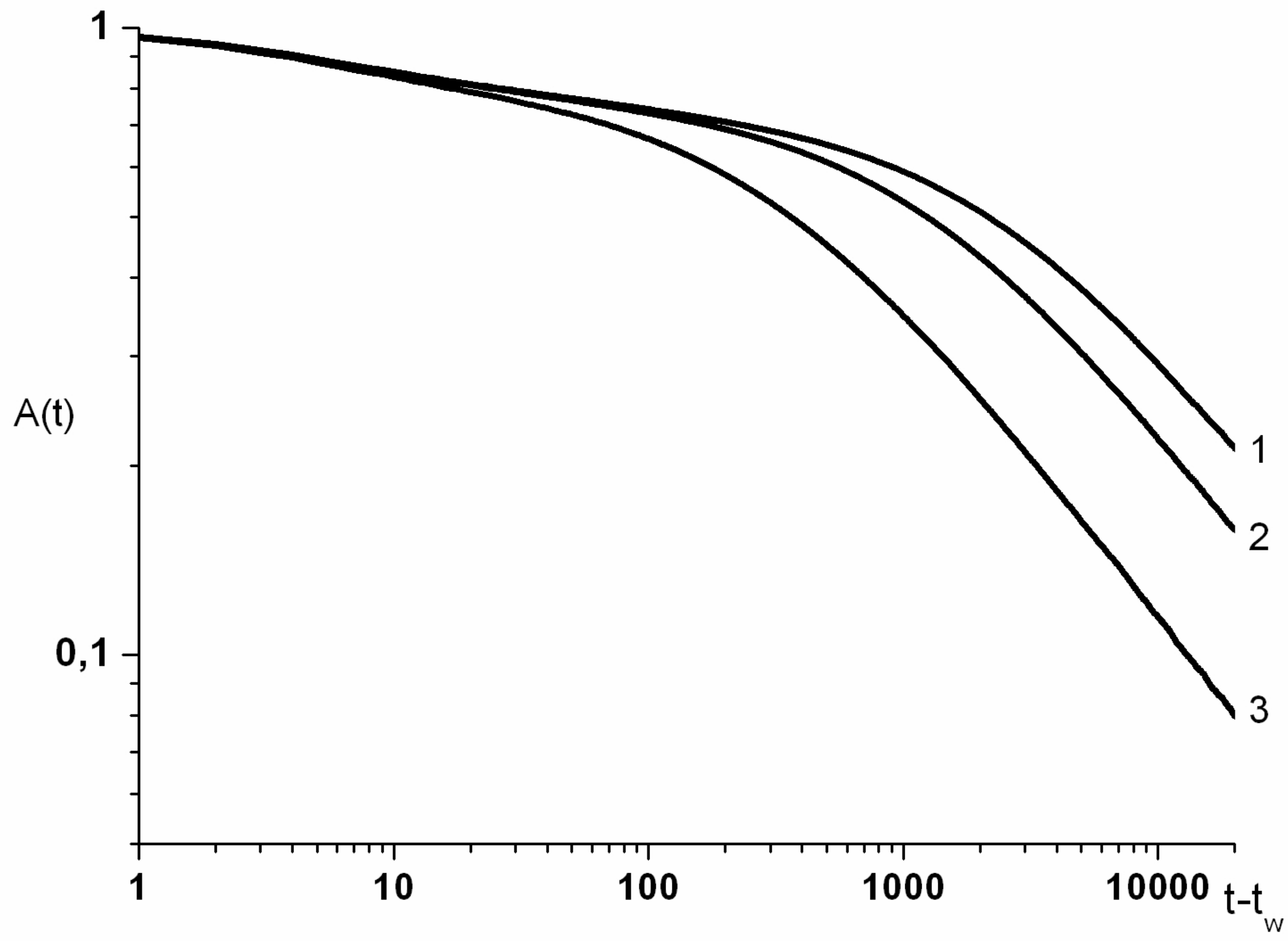

**Рис. 2. Временная зависимость автокорреляционной функции упорядоченной системы из начального состояния с малой намагниченностью при температуре T=0,5:
1 - tw=1000, 2 - tw=500, 3 - tw=100.**

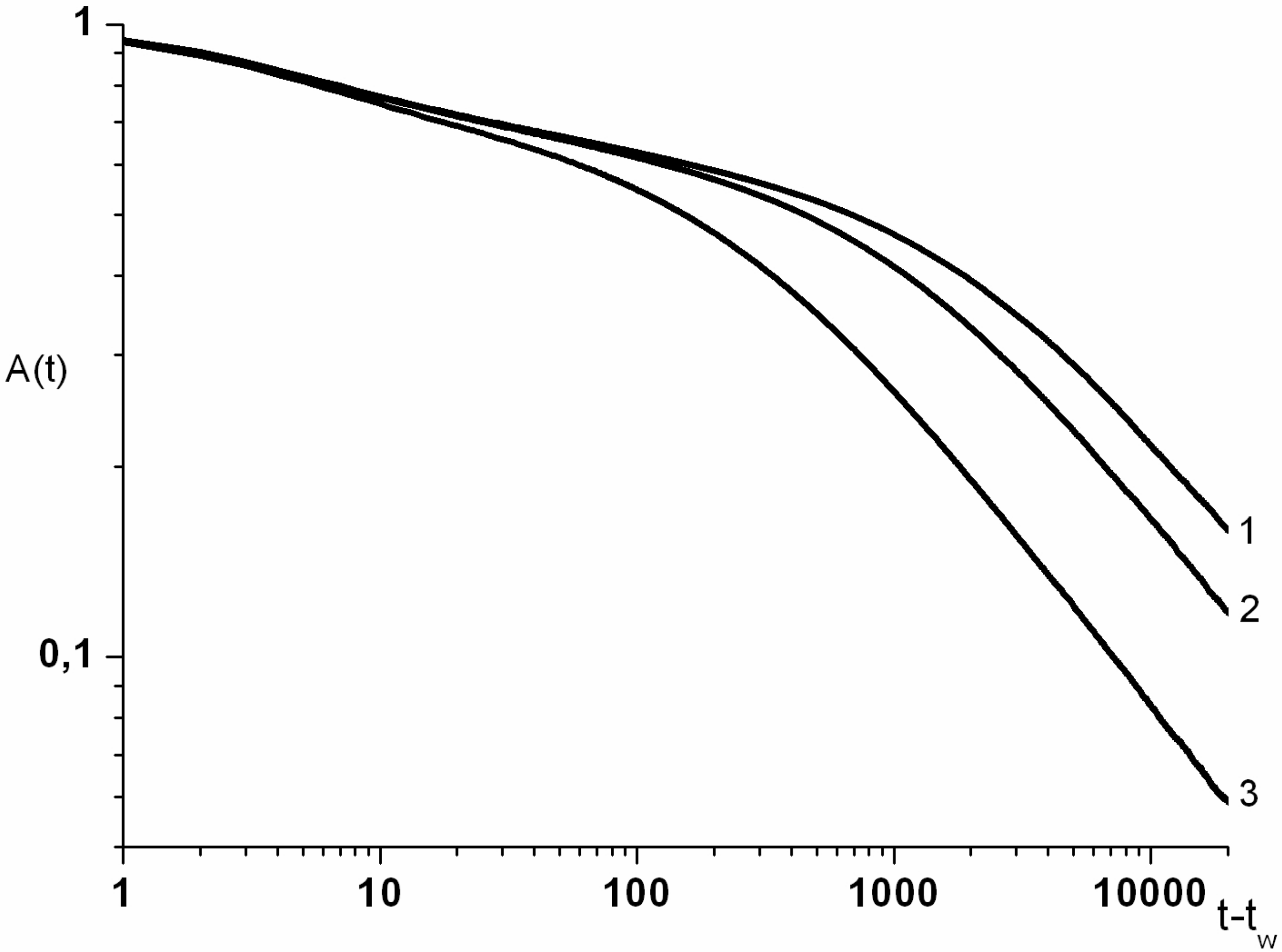

**Рис. 3. Временная зависимость автокорреляционной функции упорядоченной системы из начального состояния с малой намагниченностью при температуре T=0,7:
1 - tw=1000, 2 - tw=500, 3 - tw=100.**

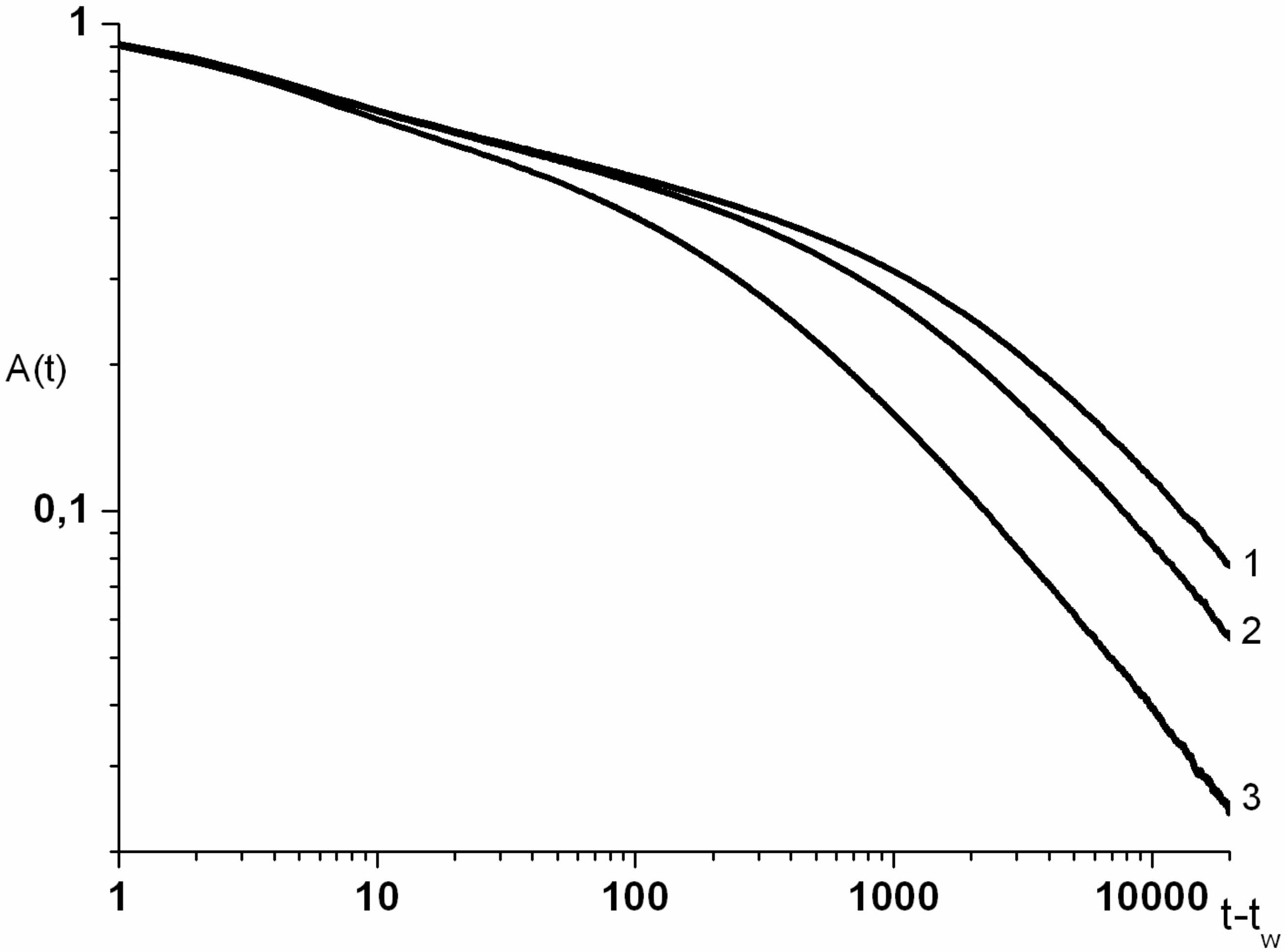

Рис. 4. Временная зависимость автокорреляционной функции упорядоченной системы из начального состояния с малой намагниченностью при температуре T=0,89:
1 - tw=1000, 2 - tw=500, 3 - tw=100.

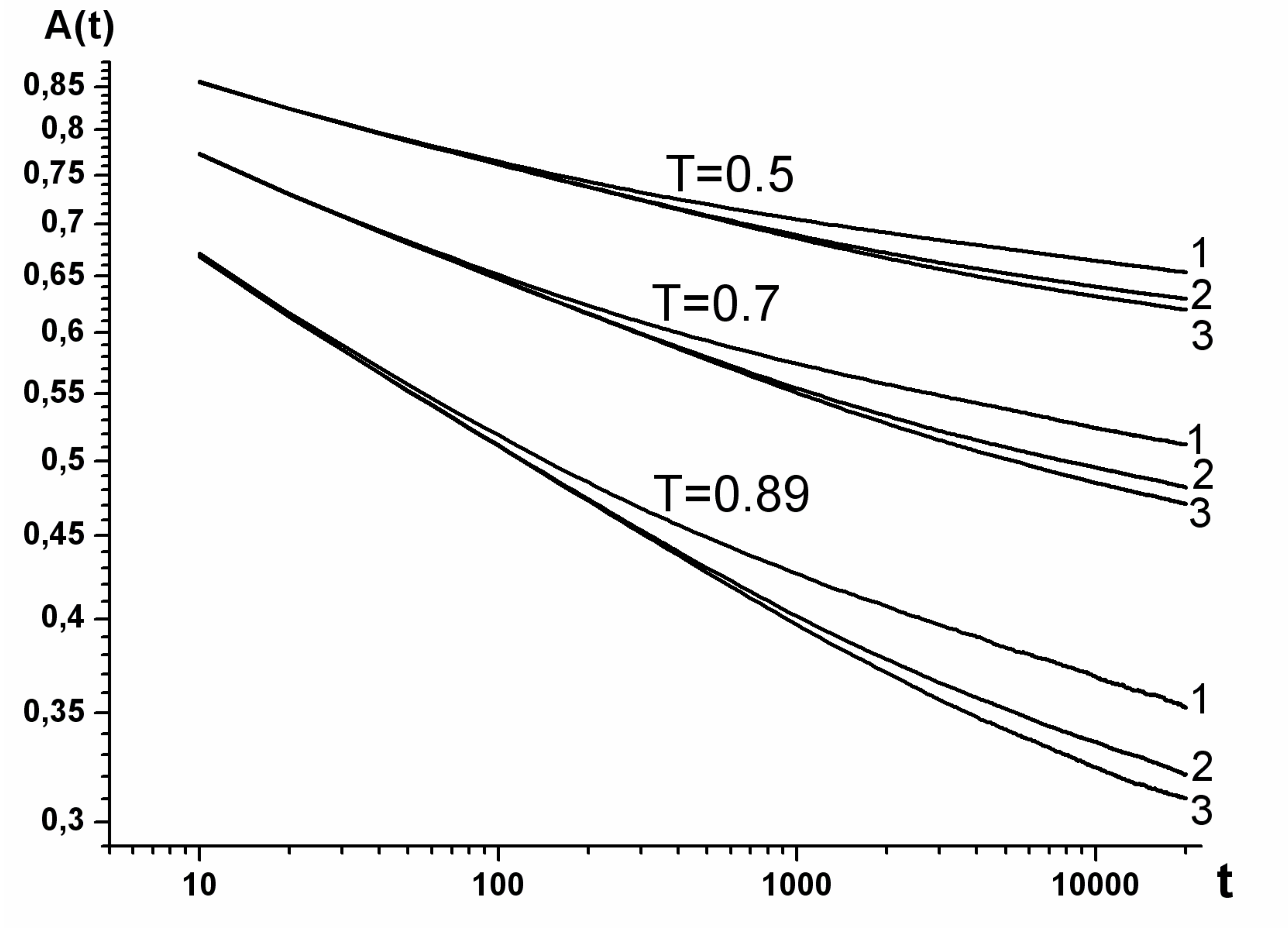

Рис. 5. Временная зависимость автокорреляционной функции упорядоченной системы из начального упорядоченного состояния: 1 - tw=100, 2 - tw=500, 3 - tw=1000.

Табл. 1. Показатели АКФ для асимптотических временных интервалов для структурно однородной системы, эволюционировавшей из начального упорядоченного состояния

T/J	η	t_w=100		t_w=500		t_w=1000	
		[0;60]	[1000;10000]	[0;60]	[1000;10000]	[0;100]	[10000;20000]
0,1	0,0161(6)	0,0093(2)	0,0045(1)	0,0097(1)	0,0044(1)	0,0096(2)	0,0048(1)
0,2	0,0334(5)	0,0185(4)	0,0091(1)	0,0197(3)	0,0093(1)	0,0190(3)	0,0093(1)
0,3	0,0522(4)	0,0279(6)	0,0139(1)	0,0296(5)	0,0139(1)	0,0287(4)	0,0152(1)
0,4	0,0716(6)	0,0379(8)	0,0193(1)	0,0400(6)	0,0203(1)	0,0389(5)	0,0206(1)
0,5	0,0938(7)	0,0486(9)	0,0250(1)	0,0512(8)	0,0245(1)	0,0499(6)	0,0263(1)
0,6	0,1163(10)	0,0603(10)	0,0313(1)	0,0635(9)	0,0322(1)	0,0620(6)	0,0356(1)
0,7	0,1456(11)	0,0738(13)	0,0388(1)	0,0774(10)	0,0397(1)	0,0759(7)	0,0425(1)
0,8	0,1805(10)	0,0903(12)	0,0477(8)	0,0948(12)	0,0483(1)	0,0931(8)	0,0534(1)
0,89	0,2480(4)	0,1112(15)	0,0623(9)	0,1176(40)	0,0649(2)	0,1164(9)	0,0597(2)

Табл. 2. Показатели АКФ для различных асимптотических временных интервалов для структурно однородной системы, эволюционировавшей из начального состояния с малой намагниченностью

T/J	tw=100		tw=500		tw=1000	
	[0,50]	[5000,20000]	[0,50]	[5000,20000]	[0,100]	[5000,20000]
0,1	0,039(1)	0,549(1)	0,023(2)	0,492(8)	0,020(1)	0,44(61)
0,2	0,062(1)	0,580(5)	0,041(8)	0,521(1)	0,039(3)	0,46(59)
0,3	0,084(4)	0,584(5)	0,057(8)	0,46(32)	0,057(5)	0,52(06)
0,4	0,106(8)	0,578(5)	0,080(9)	0,51(77)	0,063(1)	0,47(91)
0,5	0,126(4)	0,580(4)	0,095(5)	0,53(25)	0,081(7)	0,48(12)
0,6	0,151(1)	0,594(2)	0,110(7)	0,53(78)	0,100(1)	0,49(68)
0,7	0,180(6)	0,583(8)	0,130(8)	0,53(99)	0,117(5)	0,49(29)
0,8	0,217(5)	0,580(4)	0,160(7)	0,54(91)	0,141(8)	0,49(75)
0,89	0,271(3)	0,756(1)	0,199(4)	0,68(92)	0,182(4)	0,63(28)

Табл. 3. Показатели АКФ для асимптотических временных интервалов для структурно однородной системы, эволюционировавшей из начального состояния с малой намагниченностью, построенные в координатах корреляционной длины ξ~t/ln(t)

T/J	tw=100		tw=500		tw=1000	
	[0,60]	[1000,20000]	[0,60]	[5000,20000]	[0,100]	[1000,20000]
0,1	0,022(4)	0,430(8)	0,015(1)	0,432(3)	0,013(9)	0,397(9)
0,2	0,041(2)	0,461(3)	0,026(5)	0,457(8)	0,024(6)	0,41(54)
0,3	0,049(9)	0,473(1)	0,038(5)	0,464(3)	0,035(1)	0,41(32)
0,4	0,064(1)	0,484(1)	0,050(9)	0,461(8)	0,046(4)	0,42(73)
0,5	0,087(3)	0,492(1)	0,062(6)	0,475(1)	0,058(4)	0,42(92)
0,6	0,096(1)	0,499(3)	0,078(1)	0,479(7)	0,071(6)	0,44(32)
0,7	0,121(1)	0,503(2)	0,095(7)	0,481(6)	0,086(8)	0,44(23)
0,8	0,148(1)	0,514(9)	0,117(3)	0,489(8)	0,106(5)	0,44(37)
0,89	0,184(1)	0,612(3)	0,146(9)	0,614(7)	0,135(7)	0,56(44)

Скейлинговая зависимость автокорреляционной функции от корреляционной длины

Автокорреляционная функция структурно однородной модели обладает следующей скейлинговой зависимостью от корреляционной длины $\xi \sim t/\ln(t)$ [5]:

$$A(t,t_w) = \frac{1}{(t-t_w)^{\eta(T)/2}}\,\Phi\left(\frac{\xi(t)}{\xi(t_w)}\right) \qquad (14)$$

$\eta(T)=T/2\pi\rho_S$ – показатель спада корреляционной функции;

$$\Phi\left(\frac{\xi(t)}{\xi(t_w)}\right) = A(t,t_w)(t-t_w)^{\eta(T)/2} \qquad (14')$$

---

[5] Berthier L., Peter C. W. Holdsworth and Mauro Sellitto. // J. Phys. A: Math. Gen. 34 (2001) 1805–1824.

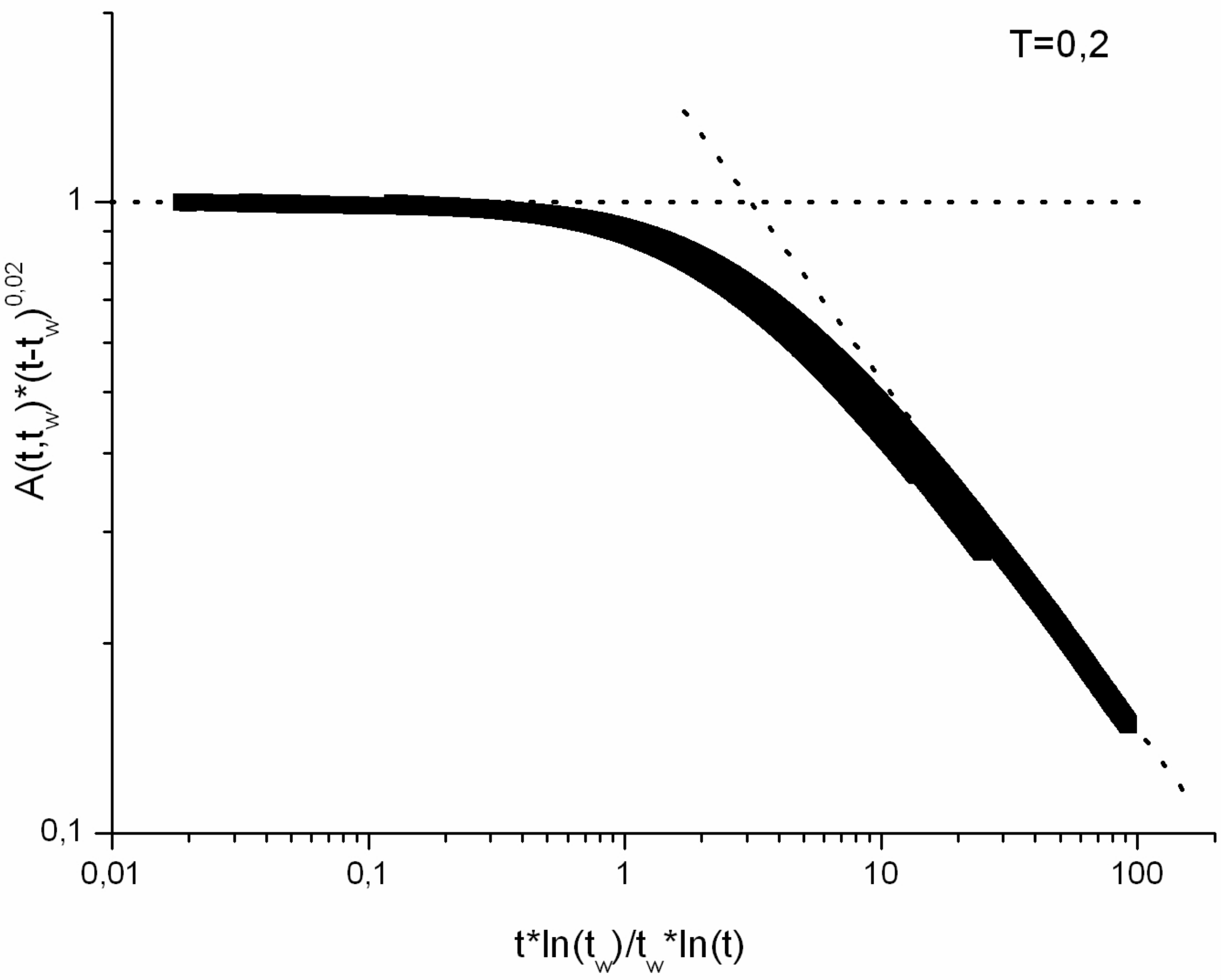

Рис. 6. Скейлинговая функция Ф при T=0,2.

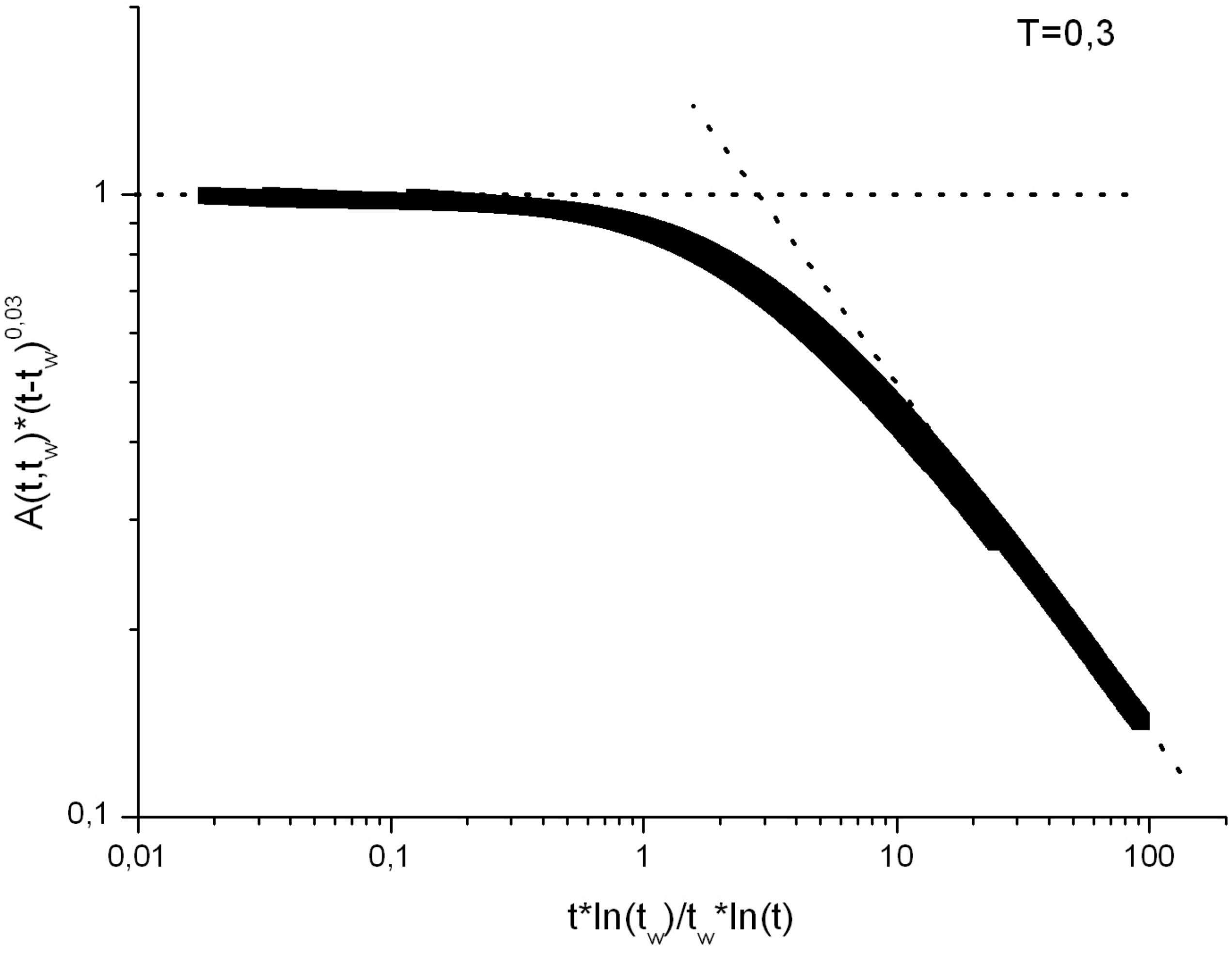

Рис. 7. Скейлинговая функция Ф при Т=0,3.

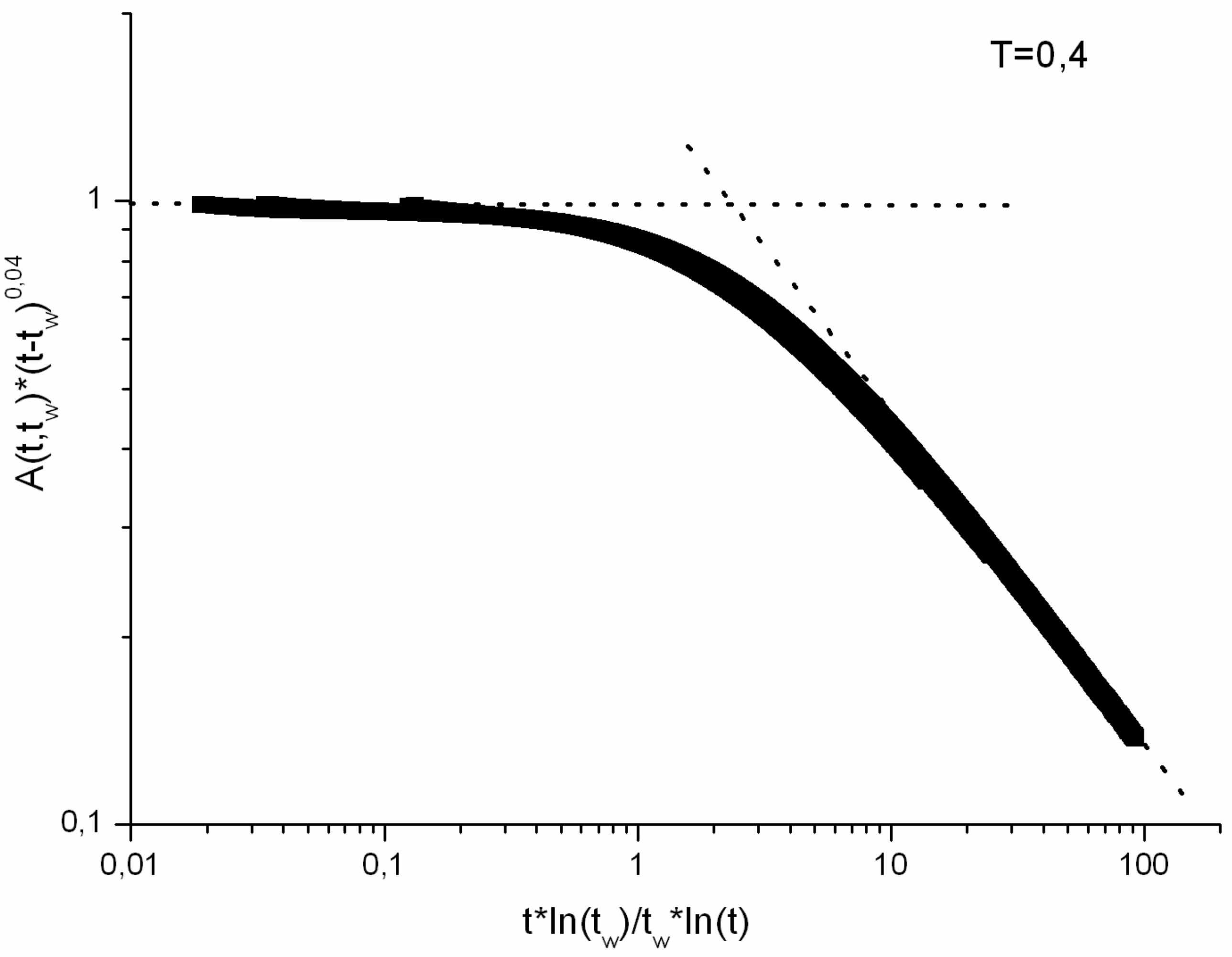

Рис. 8. Скейлинговая функция Φ при T=0,4.

Табл.4. Значения показателя λ скейлинговой зависимости автокорреляционной функции от корреляционной длины

T/J	η [6]	λ
0,1	0,01	0,5216(3)
0,2	0,02	0,5428(5)
0,3	0,03	0,5384(9)
0,4	0,04	0,5267(4)
0,5	0,05	0,5188(9)
0,6	0,06	0,5200(8)
0,7	0,07	0,4983(8)
0,8	0,09	0,4812(9)
0,89	0,11	0,6151(3)

$\Phi(x) = 1$ при малых значениях x;

$\Phi(x) \sim x^{-\lambda}$ при больших x;

Результат $\lambda(0{,}3)= 0{,}5384(9)$ в пределах статистической погрешности совпадает результатом работы [5], где было получено $\lambda(T/J=0{,}3)=0{,}54$.

---

[5] Berthier L., Peter C. W. Holdsworth and Mauro Sellitto. // J. Phys. A: Math. Gen. 34 (2001) 1805–1824.

[6] Прудников В.В., Прудников П.В., Алексеев С.В. // Вестн. Ом. ун-та. 2010. № 2. С. 53-56.

Дефекты структуры

Большинство реальных систем содержат дефекты структуры, которые могут оказывать заметное влияние на поведение системы, в том числе и вблизи температуры фазового перехода.

Согласно критерию Харриса [7] предсказывается, что в двумерной XY-модели влияние дефектов структуры должно быть несущественным близи критической температуры T_{KT}.

---

[7] Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models.// J. Phys. C. 1974. V. 7. P. 1671.

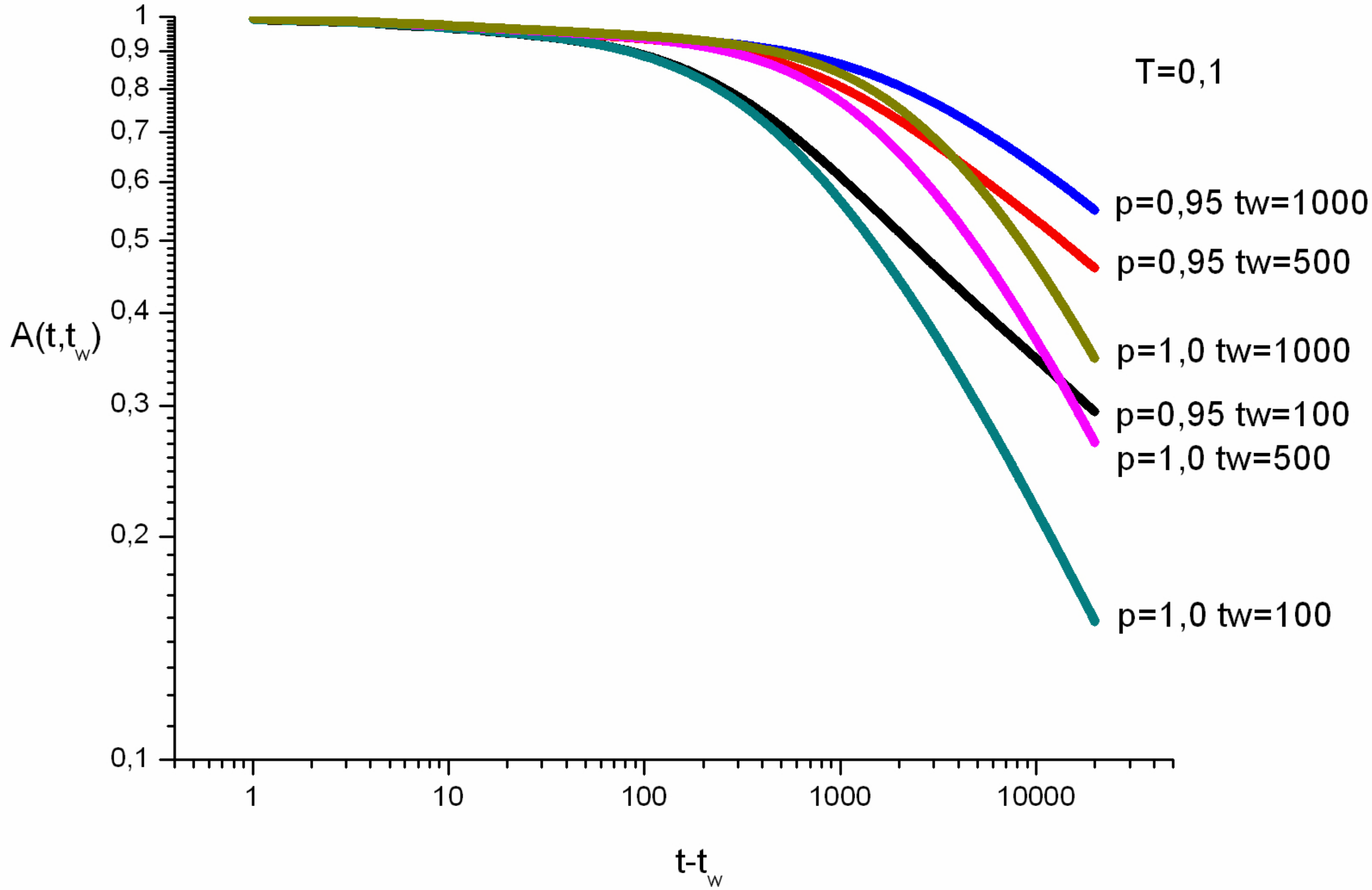

Рис. 9. Сравнительный график временной зависимости автокорреляционной функции для системы с дефектами и системы при старте из состояния с малой намагниченностью при T=0,1.

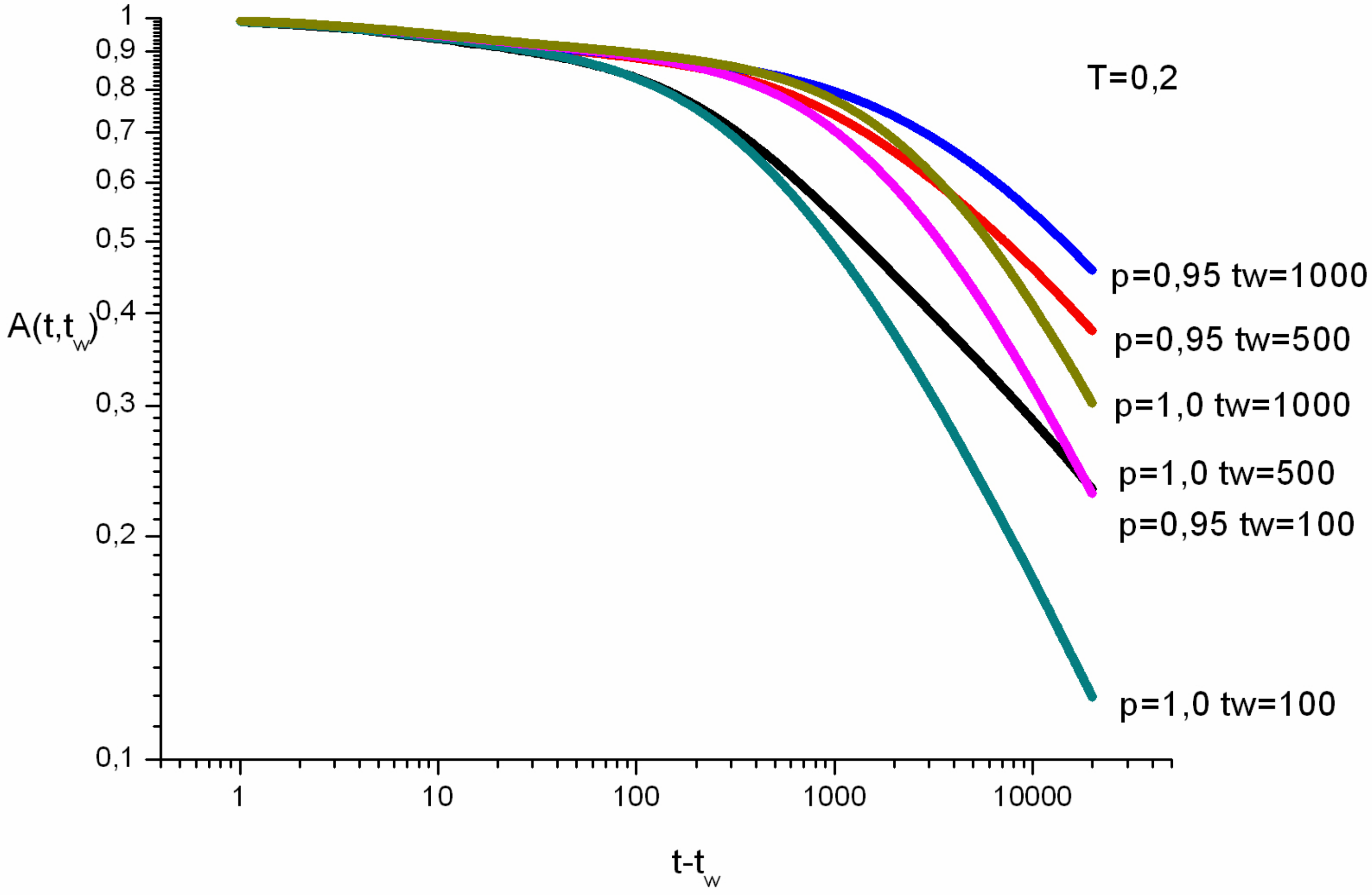

Рис. 10. Сравнительный график временной зависимости автокорреляционной функции для системы с дефектами и системы при старте из состояния с малой намагниченностью при T=0,2.

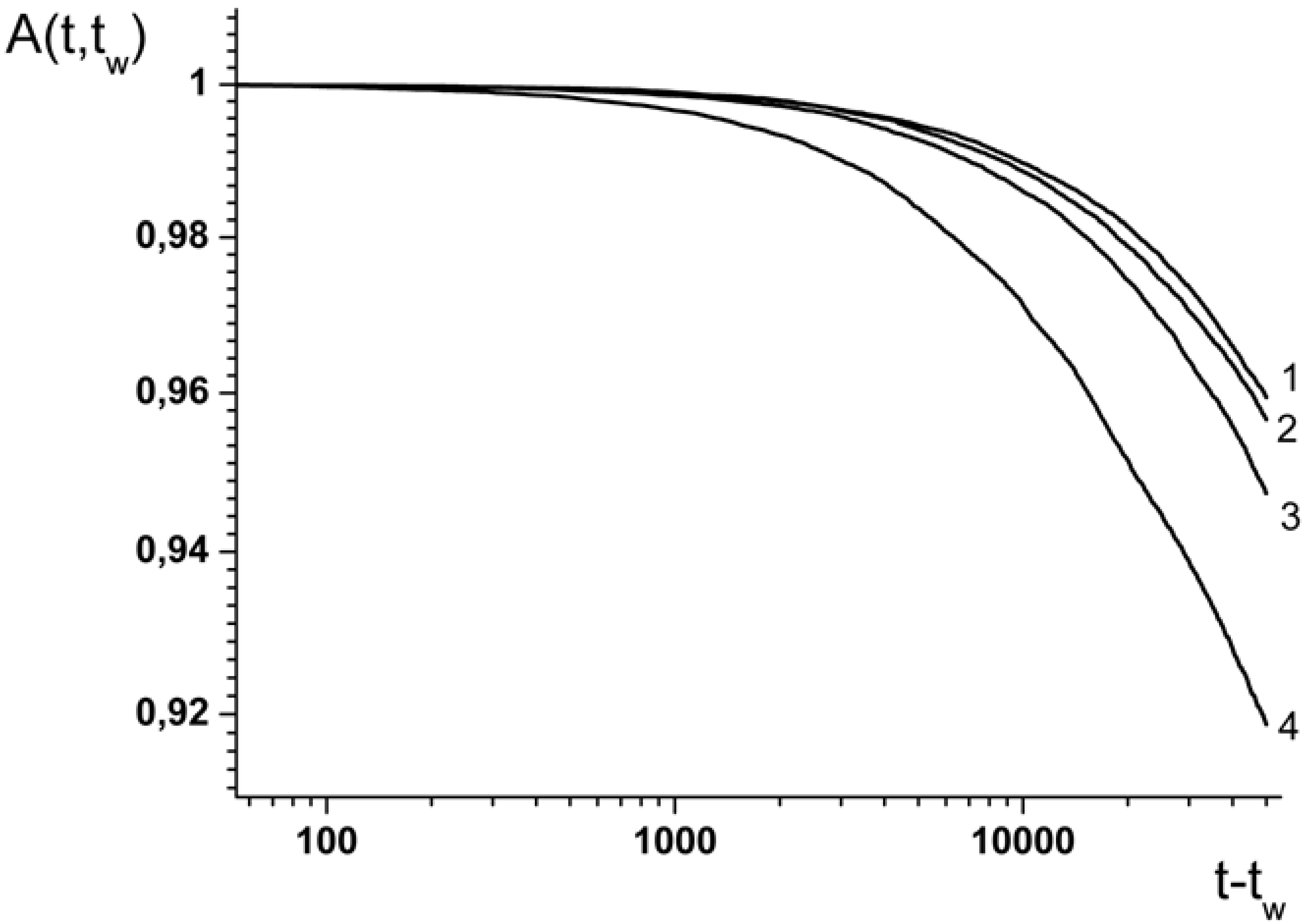

Рис. 11. **Поведение автокорреляционной функции при старте из начального упорядоченного состояния при температуре T=0.4, времени ожидания t_w=10000 MCS/s и различных спиновых концентрациях:**

1 – p=0.8,

2 – p=0.85,

3 – p=0.9,

4 – p=0.95.

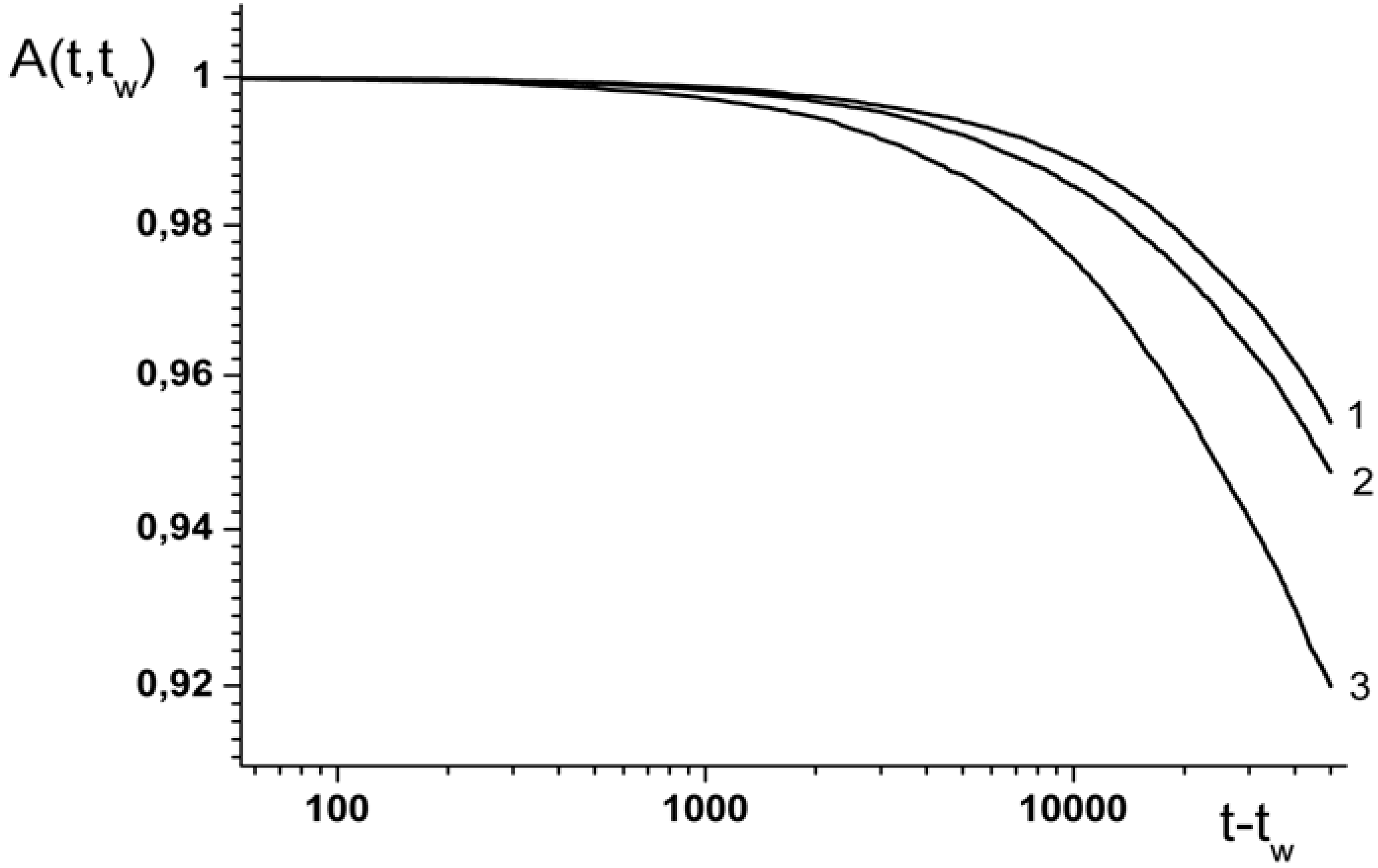

Рис. 12. **Поведение автокорреляционной функции при старте из начального упорядоченного состояния при температуре T=0.4, времени наблюдения $t\text{-}t_w$ =50000 MCS/s, спиновой концентрации p=0.9 и различных временах ожидания:**

1 - t_w=1000,

2 - t_w=10000,

3 - t_w=50000 MCS/s.

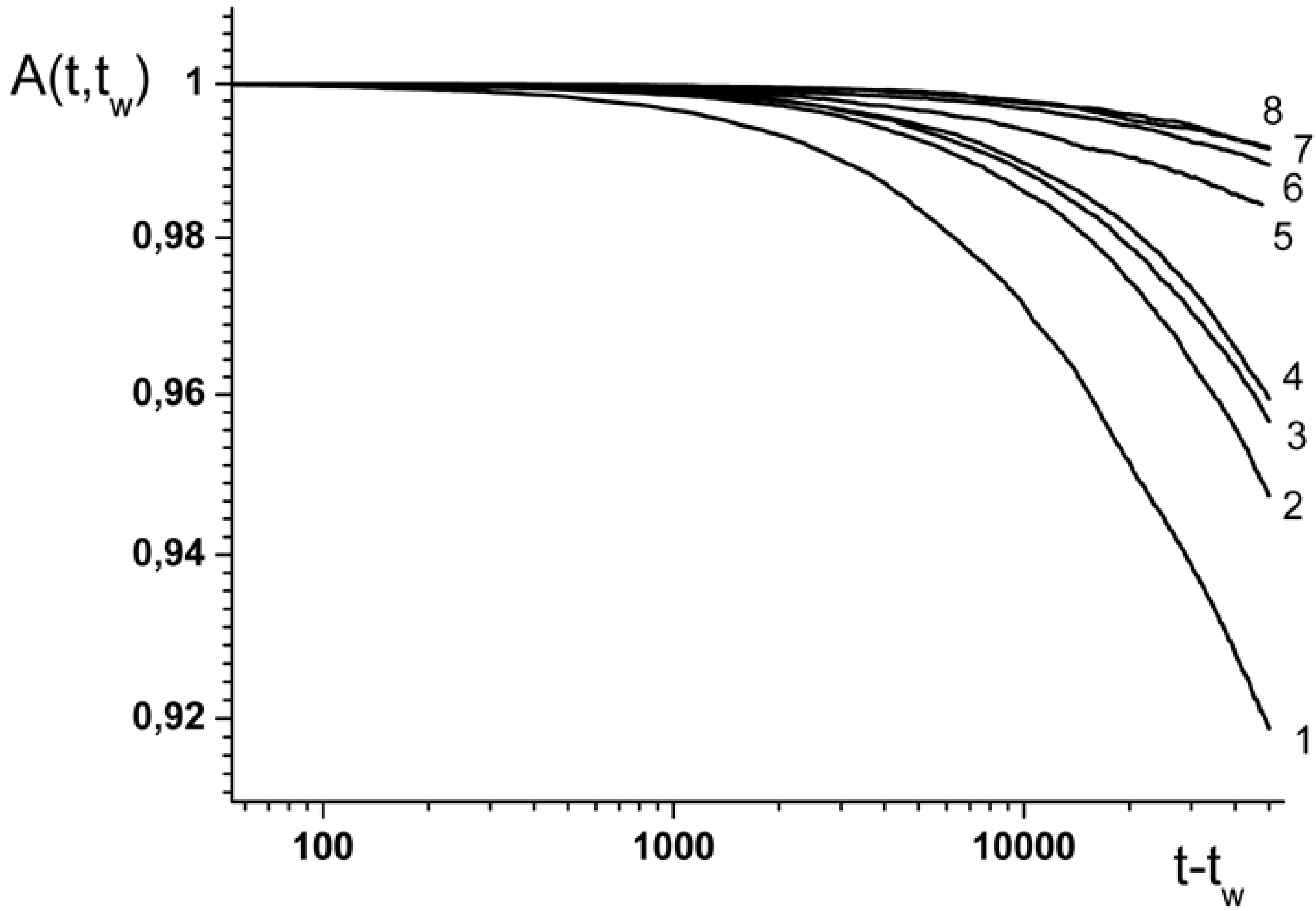

Рис. 13. Поведение автокорреляционной функции при старте из начального упорядоченного состояния при t_w =10000 MCS/s для различных спиновых концентраций и температур:

1 - p=0.95; 2 - p=0.9; 3 - p=0.85; 4 - p=0.8 при T/J=0.4;
5 - p=0.95; 6 - p=0.9; 7 - p=0.85; 8 - p=0.8 при T/J=0.1.

Табл. 5. Показатели АКФ для различных асимптотических временных интервалов для системы из начального состояния с малой намагниченностью для случая концентрации спинов p=0,95

T/J	$t_w=100$		$t_w=500$		$t_w=1000$	
	[0,60]	[1000,20000]	[0,60]	[5000,20000]	[0,100]	[1000,20000]
0,1	0,020(51)	0,2414(4)	0,014(03)	0,2099(2)	0,013(56)	0,1878(9)
0,2	0,040(81)	0,3008(9)	0,0277(4)	0,2672(4)	0,0260(8)	0,2414(4)

Табл. 6. Аналогичные показатели для АКФ, построенной в координатах корреляционной длины ξ~t/ln(t).

T/J	$t_w=100$		$t_w=500$		$t_w=1000$	
	[0,50]	[5000,20000]	[0,50]	[5000,20000]	[0,100]	[5000,20000]
0,1	0,038(55)	0,2669(8)	0,0229(5)	0,2353(3)	0,0200(3)	0,2106(4)
0,2	0,063(67)	0,3373(2)	0,041(63)	0,2996(1)	0,039(37)	0,2706(8)

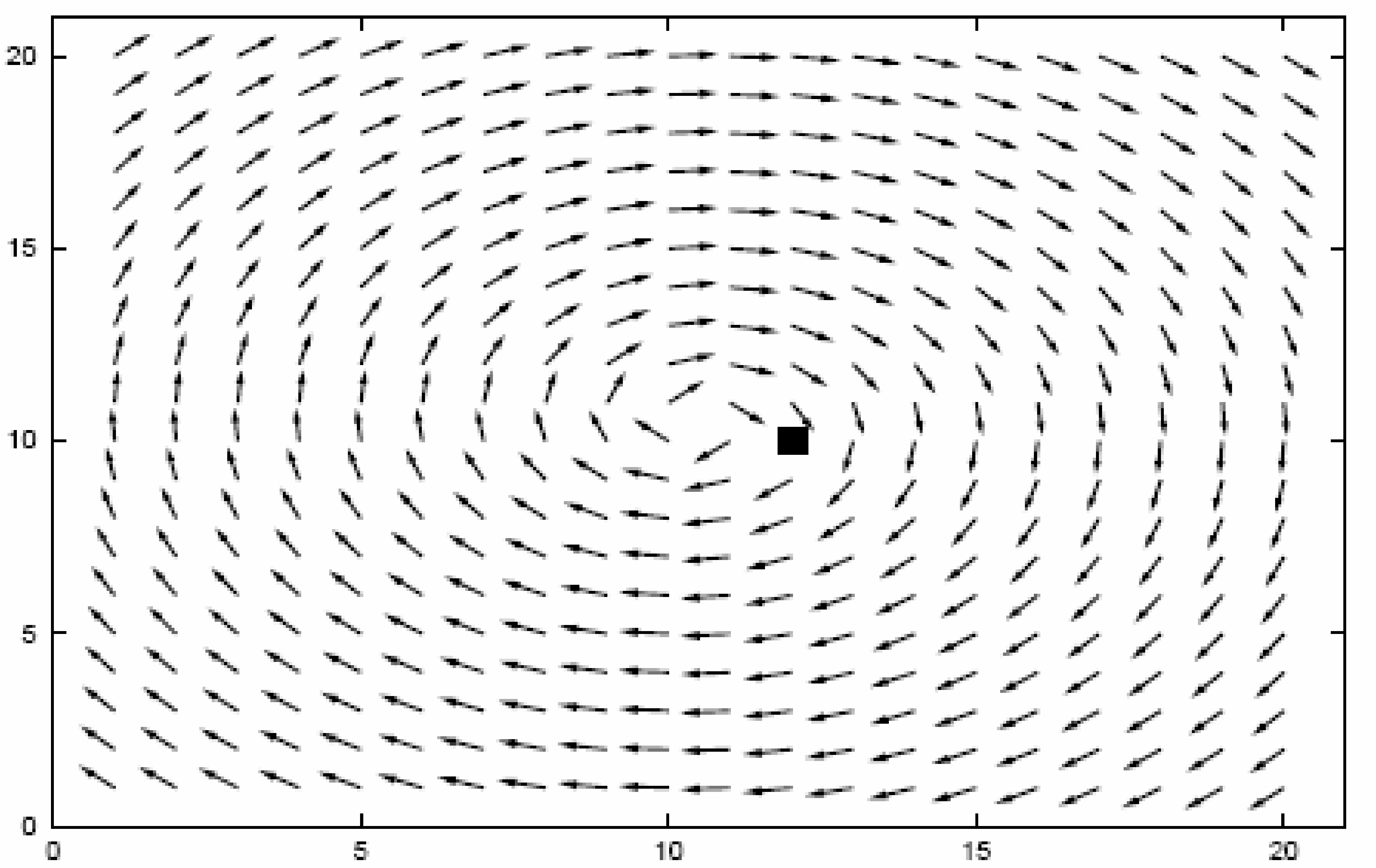

Рис. 14. Начальная конфигурация положения вихря и дефекта

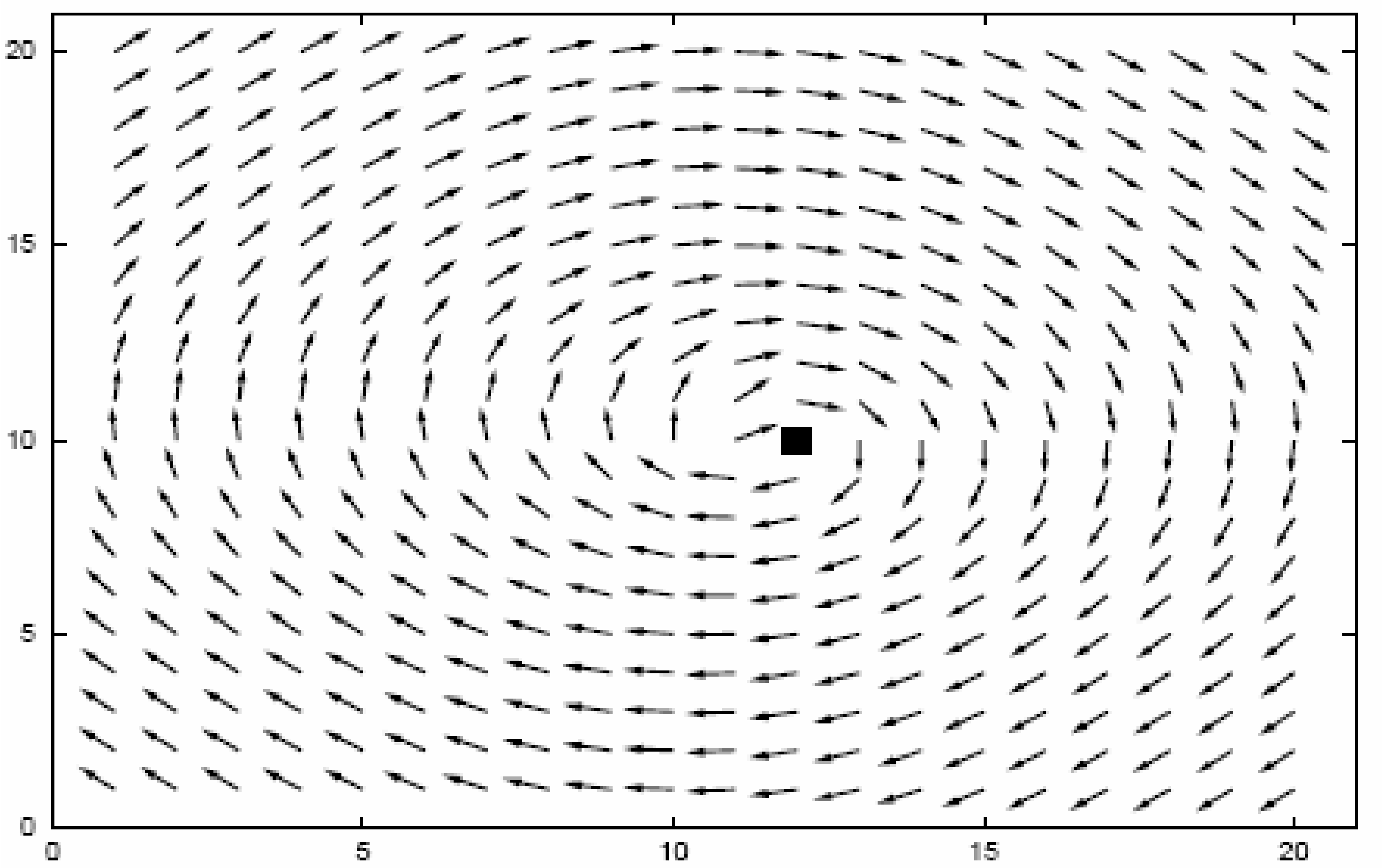

Рис. 15. Конфигурация спустя 70 MKS/s

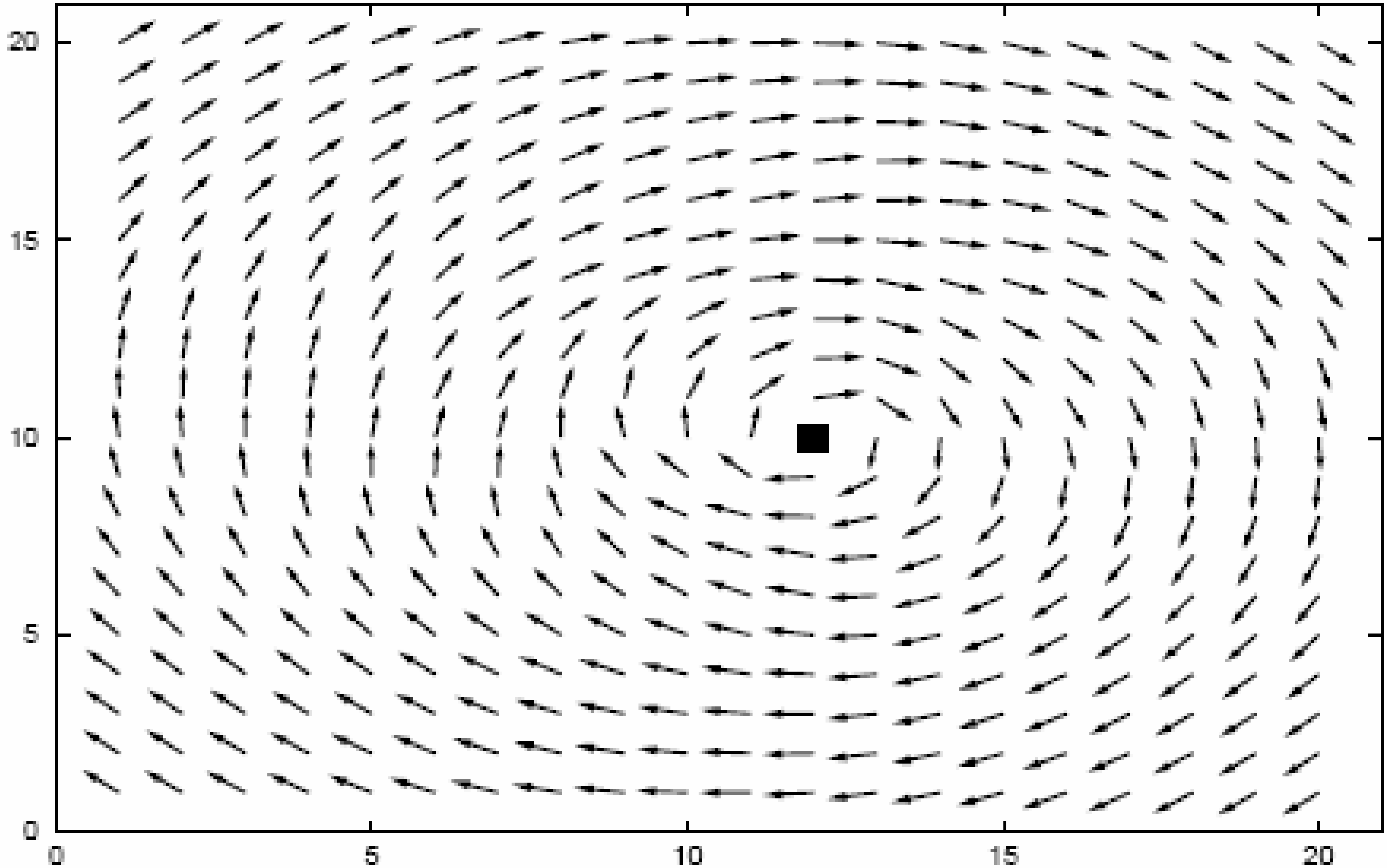

Рис. 16. Конфигурация спустя 150 MKS/s

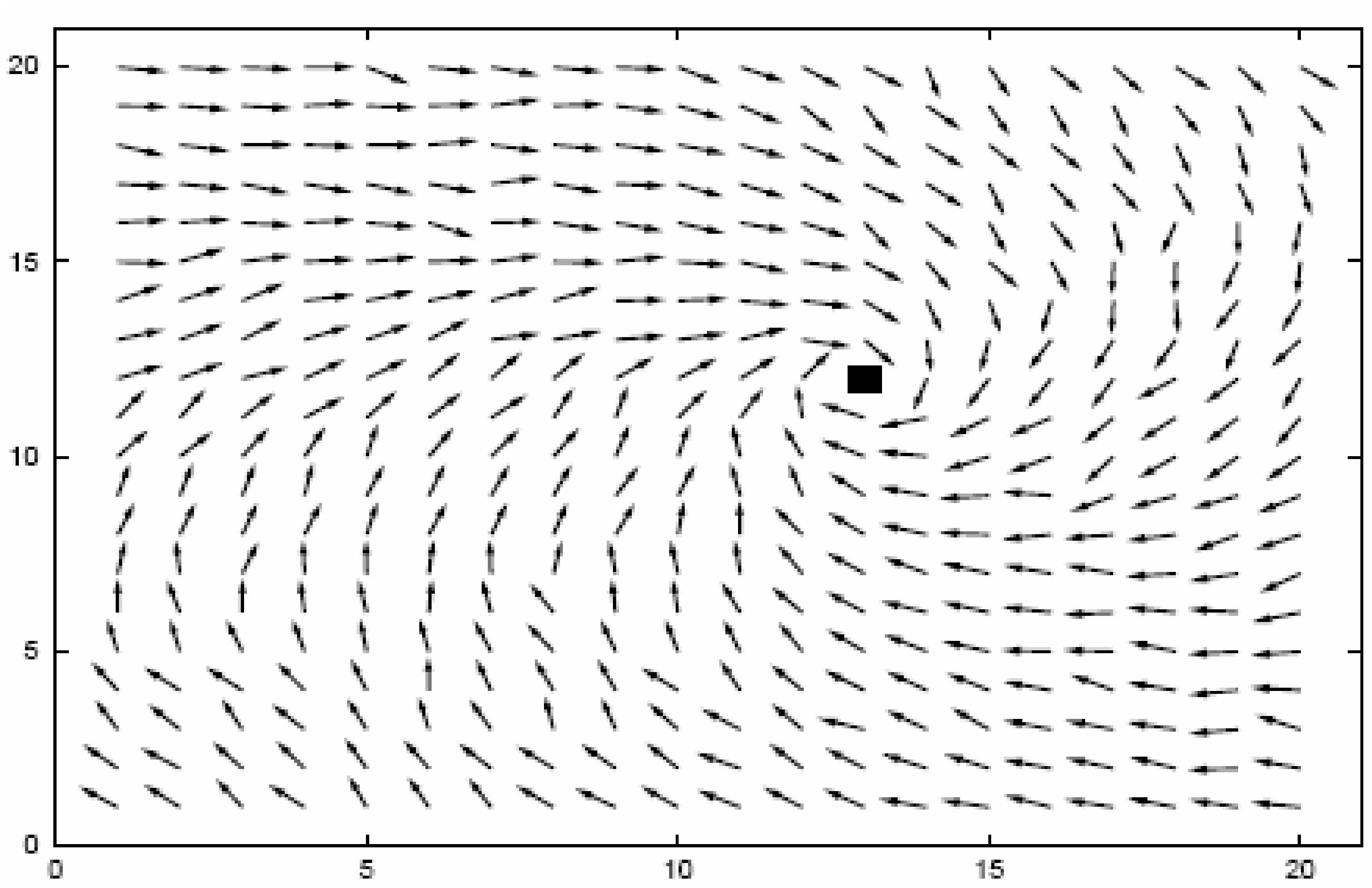

Рис. 17. Конфигурация спустя 200000 MKS/s

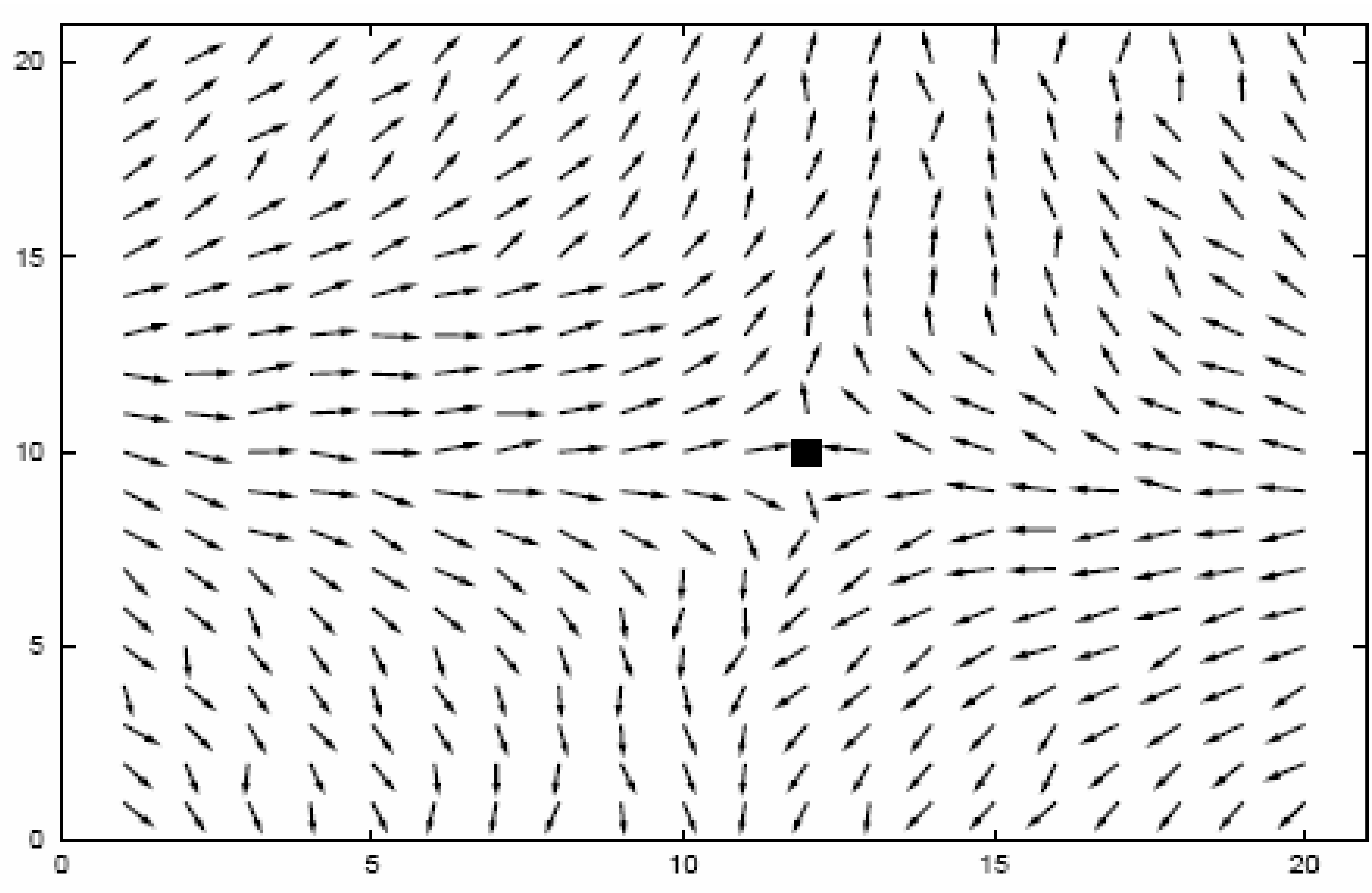

Рис. 18. Пиннинг антивихря

Флуктуационно-диссипативная теорема

Флуктуационно-диссипативная теорема – соотношение, устанавливающее связь между спектром флуктуаций физических величин в равновесной диссипативной среде и её обобщёнными восприимчивостями, т.е. параметрами, характеризующими её реакцию на внешнее воздействие [8].

$$R(t,t_w) = \frac{x(A(t,t_w))}{k_B T}\frac{\partial A(t,t_w)}{\partial t_w} \quad (15)$$

$$\chi(t,t_w) \equiv \int_{t_w}^{t} dt'\, R(t,t') \quad (18)$$

$$R(t,t_w) \equiv \frac{1}{V}\int d^2x \left.\frac{\partial\langle\phi(x,t)\rangle}{\partial h(x,t_w)}\right|_{h=0} \quad (16)$$

$$\chi\left(t,t_w\right) = \frac{1}{h^2 N}\sum_{i=1}^{N}\overline{<\vec{h}_i\vec{S}_i>} \quad (19)$$

$$X(t,t_w) = \frac{TR(t,t_w)}{\partial A(t,t_w)/\partial t_w} \quad (17)$$

где черта над выражением – усреднение по распределениям случайных полей h;

Проводилось усреднение получаемых временных зависимостей автокорреляционной функции и восприимчивости по 2000 реализаций случайных полей для каждого из выбранных значений времени ожидания t_w.

---

[8] Зубарев. Д.Н., Морозов В.Г., Рёпке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. В 2 т. Т.I. – М.: Физико-математическая литература, 2002.

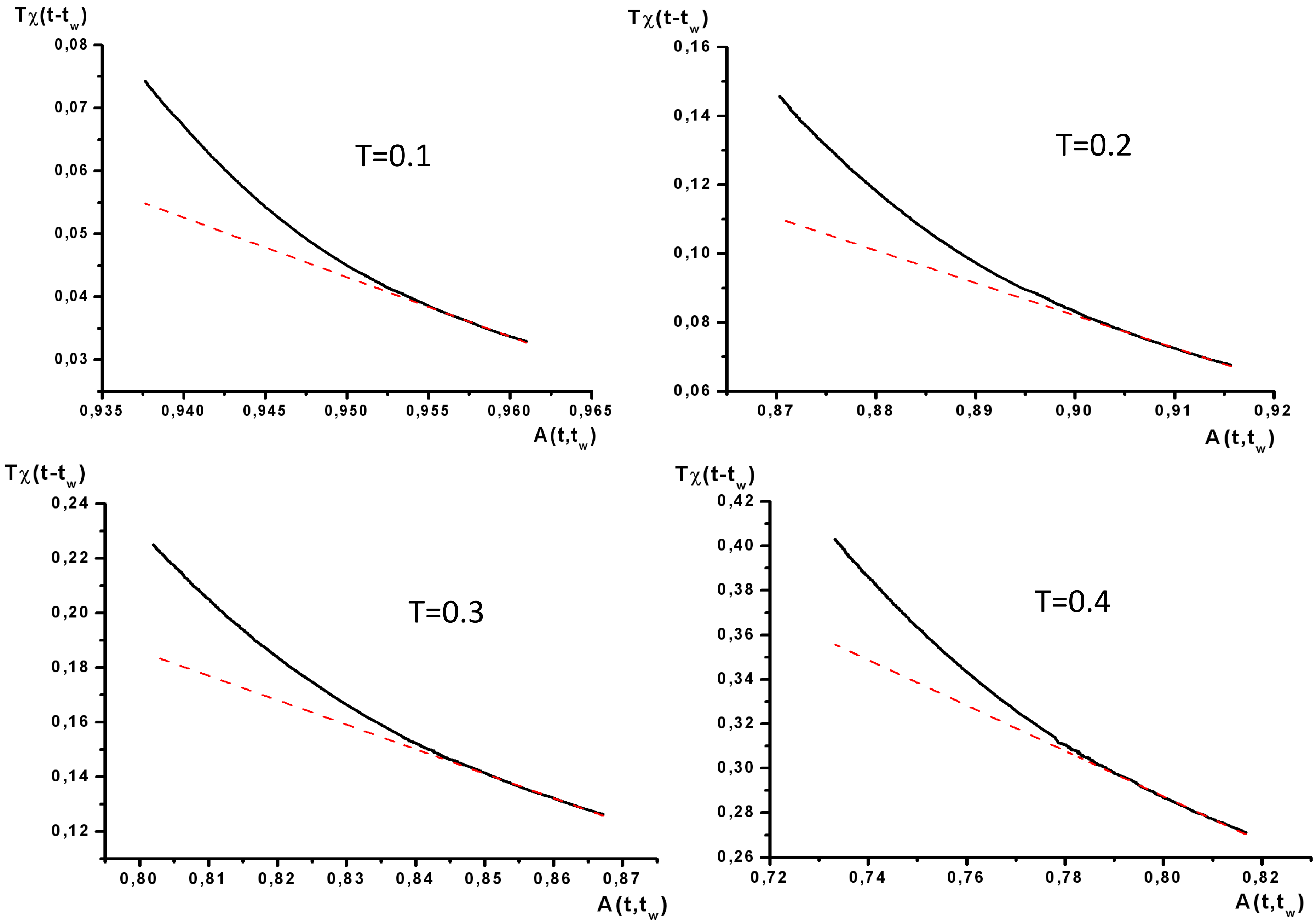

Рис. 19. Графики зависимости флуктуационно-диссипативного отношения для различных температур при старте системы из начального упорядоченного состояния

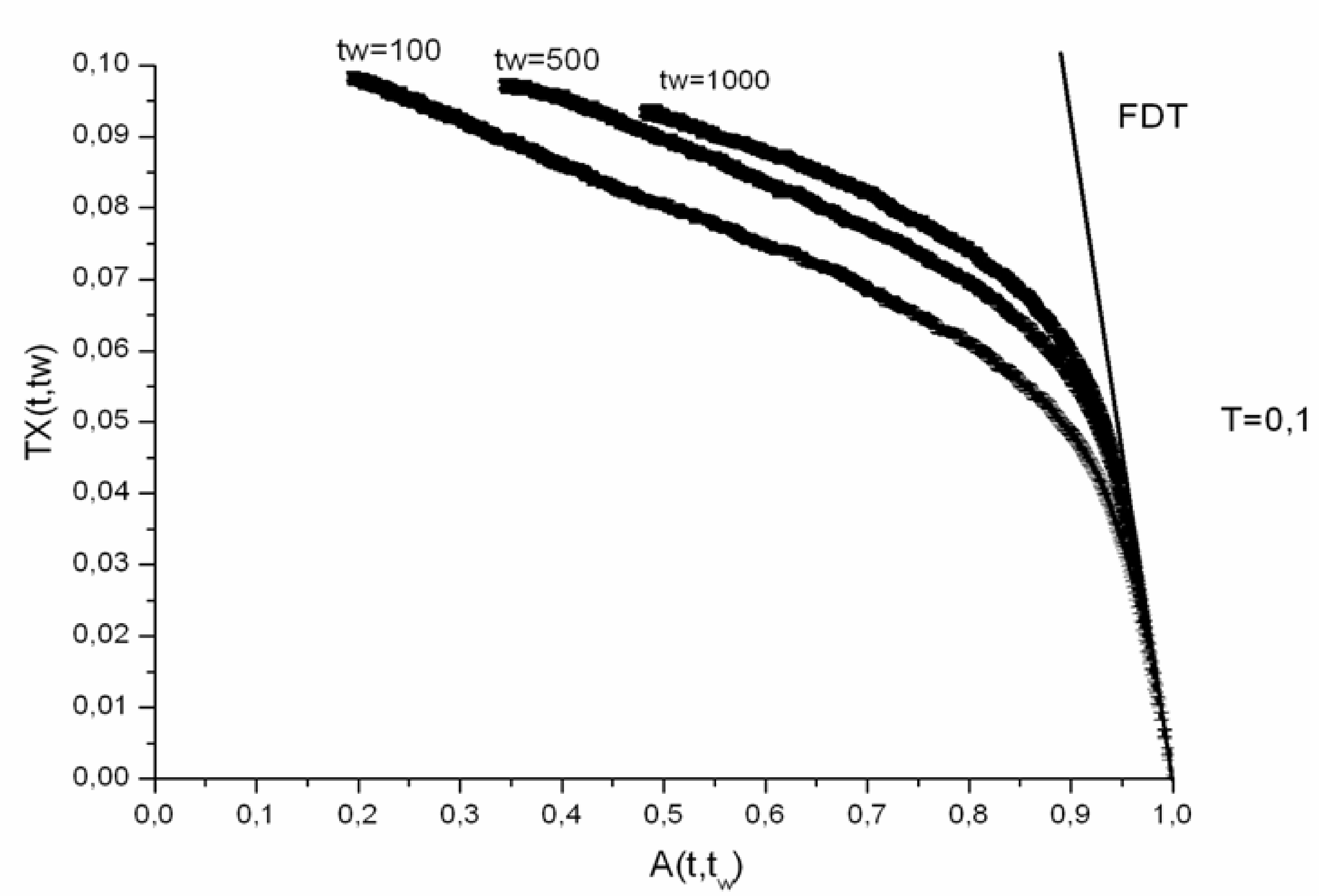

Рис. 20. Графики зависимости флуктуационно-диссипативного отношения для различных температур при старте системы из начального состояния с малой намагниченностью

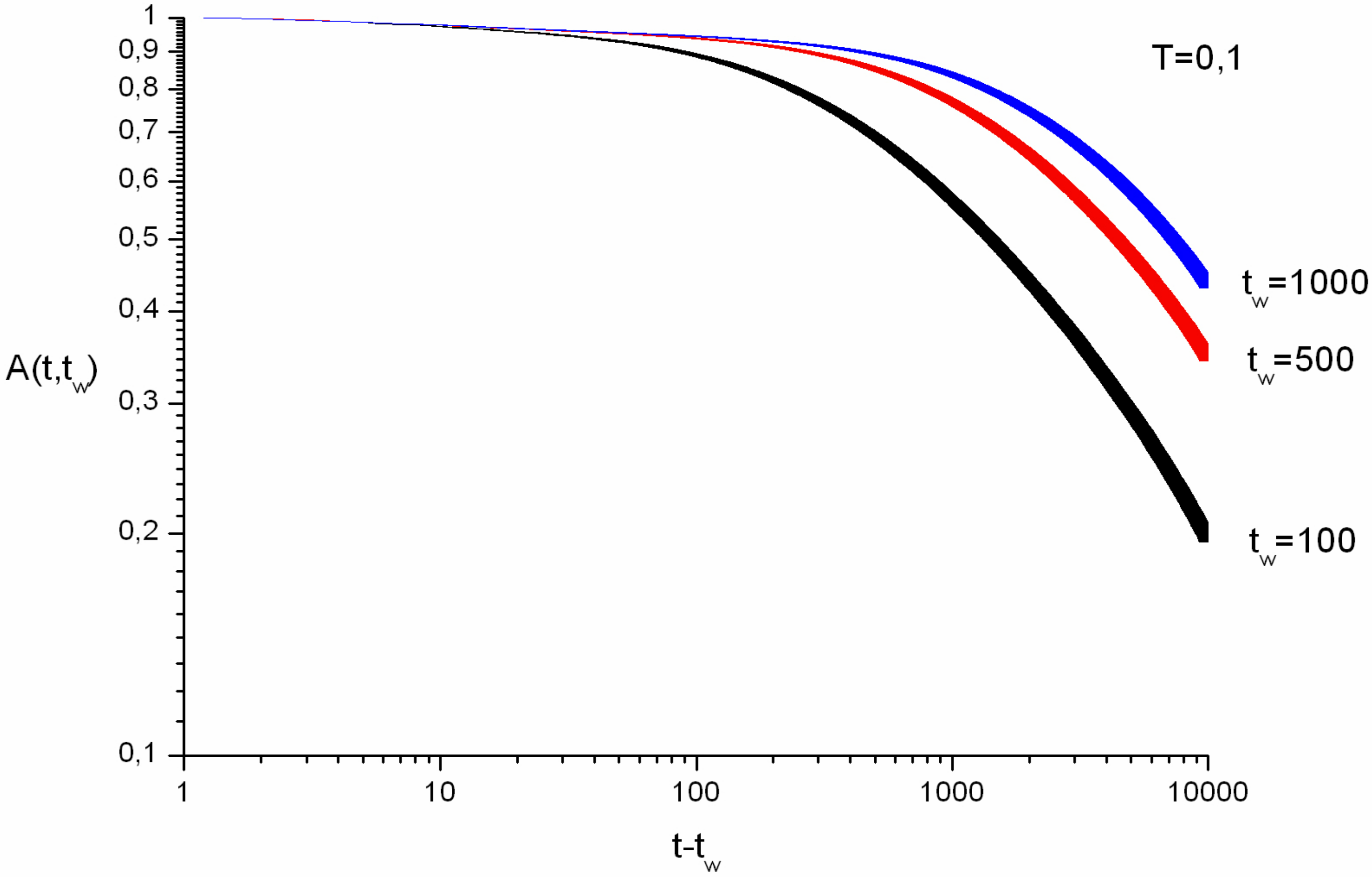

Рис. 21. Временная зависимость автокорреляционной функции в эксперименте по проверке ФДТ при старте системы из начального состояния с малой намагниченностью

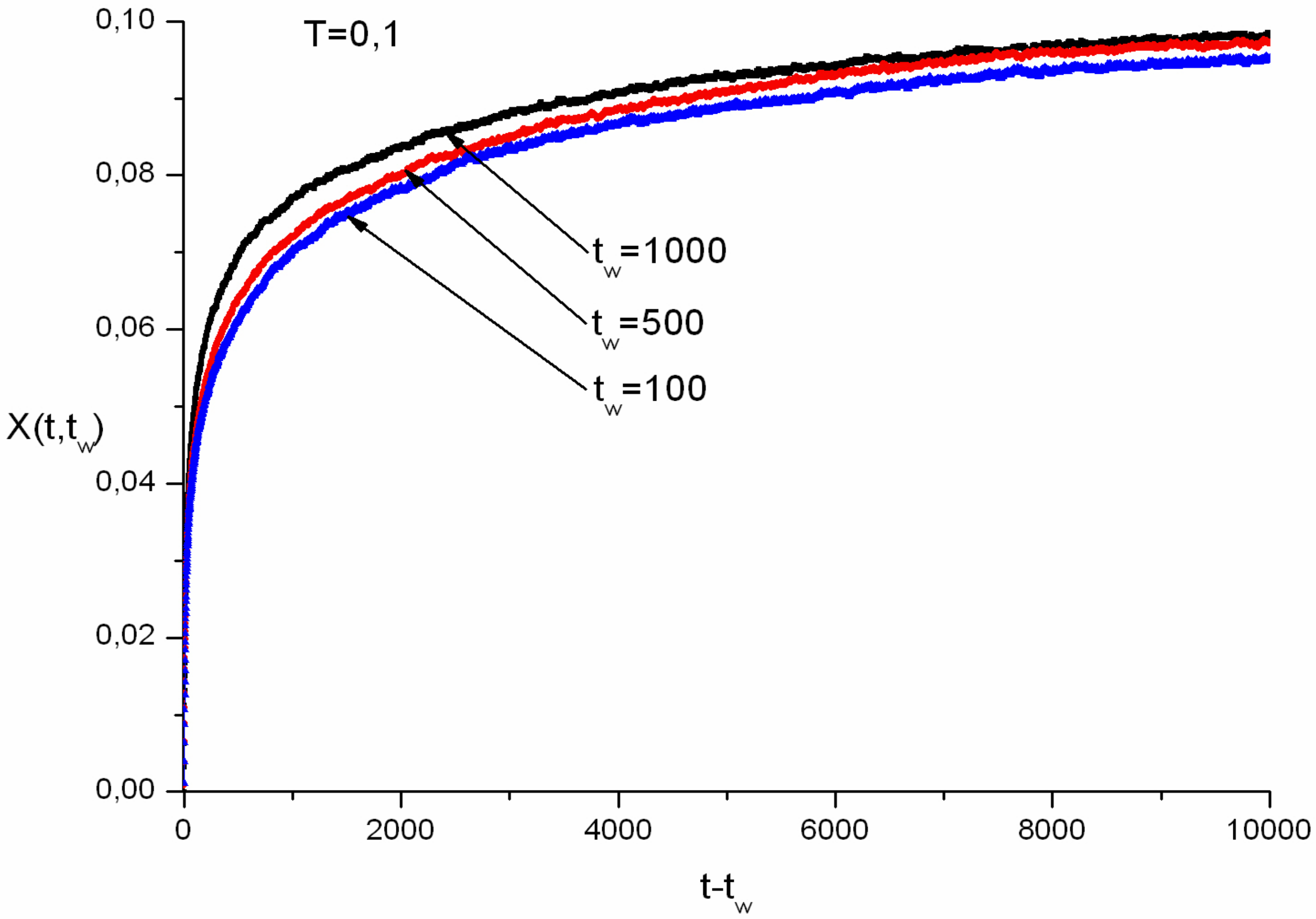

Рис. 22. Временная зависимость восприимчивости в эксперименте по проверке ФДТ при старте системы из начального состояния с малой намагниченностью

Табл. 6. Коэффициенты наклона параметрической зависимости восприимчивости и АКФ при старте системы из начального состояния с малой намагниченностью

t_w	Временной интервал	Коэффициент наклона **k**
100	[1000,10000]	0,058(3)
500	[2000,8000]	0,057(1)
1000	[3000,8000]	0,051(2)

$$\chi \sim -k(t_w)(t - t_w)$$

Выводы:

- В исследуемой системе наблюдаются эффекты старения и нарушения ФДТ.
- Сопоставление значений показателя $\eta(T)$ со значениями показателей временной зависимости автокорреляционной функции на разных временных этапах эволюции даёт хорошее согласие с результатами аналитических расчётов.
- Выявлена существенная разница в поведении эволюции системы из начального упорядоченного состояния и состояния с малой намагниченностью как для однородной системы, так и структурно неупорядоченной.
- Из вида скейлинговой зависимости $A(t,t_w)$ следует, что на начальном временном участке определяющую роль играют спин-волновые эффекты, а взаимодействие пар вихрь-антивихрь начинают сказываться на дальнем временном интервале. Этим и обусловлено столь существенное отличие поведения системы, стартовавшей из начального состояния с малым значением намагниченности.

- В поведении $A(t,t_w)$ для неупорядоченных систем из начального упорядоченного состояния было выделено наличие начального этапа замораживания. Наличие дефектов привело к существенному замедлению динамики релаксации.
- Влияние дефектов на динамику неупорядоченной системы из начального состояния с малой намагниченностью привело к существенному замедлению динамики релаксации на дальнем временном интервале.
- Влияние дефектов на динамику системы связано с пиннингом пар вихрь-антивихрь и замедлением спиновой диффузии.
- На основе измерения временной зависимости восприимчивости и автокорреляционной функции определена временная зависимость флуктуационно-диссипативного отношения для различных температур. Показано, что на временах $t - tw << tw$ выполняется ФДТ с отношением X(t,tw) = 1, в то время, как для $t\text{-}tw >> tw$ происходит нарушение ФДТ с отношением X(t,tw) > 1 для начального упорядоченного состояния и X(t,tw) < 1 для начального состояния с малой намагниченностью. Нарушение ФДТ явно связано с эффектами старения вследствие зависимости графиков полученных характеристик от времени ожидания t_w.

Термодинамика вихрей

Энергия одного вихря [3]: $E_V \approx \pi\rho_S \ln L$ (7)

ρ_S – модуль жесткости;

L – линейный размер системы;

Энтропия одного вихря: $S_V = \ln L^2 = 2\ln L$ (8)

Свободная энергия:

$$F_V = E_V - TS_V \approx (\pi\rho_S - 2T)\ln L \qquad (9)$$

При $T = T_{KT} = \pi\rho_S / 2$ величина $F_V = 0$.

---

[3] Коршунов С.Е. // УФН. 2006.