

УДК 531.19:537.621

Выполнение гипотез динамического и статического скейлинга для изинговского наномангнетика

Ж.В. Дзюба, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (Абакан, Россия)

Fulfillment of Dynamic and Static Scaling Hypotheses for an Ising Nanomagnet

Zh.V. Dzyuba, V.N. Udodov

Katanov Khakass State University (Abakan, Russia)

Представлены результаты компьютерного моделирования обобщенной модели Изинга квазиодномерного наномангнетика при фазовом переходе антиферромагнетик — ферромагнетик с периодическими граничными условиями методом Монте-Карло. Используя значения критической температуры, а также значения критических индексов, авторы проверили соотношение динамического скейлинга изинговского наномангнетика, а именно выполнения соотношения $Y = \nu^* z$ и статического скейлинга $d\nu = 2 - \alpha$. Для линейной системы (кластера) конечного размера построены температурные зависимости кинетического критического индекса $Y(T)$ и произведения динамического критического индекса на индекс корреляционной длины $\nu^* z(T)$. Описано влияние энергии взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия на выполнение гипотез динамического и статического скейлинга. Найдены параметры, при которых соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется вблизи критической области. Показано, что гипотеза статического скейлинга в рамках модели одномерного изинговского мангнетика вблизи критической области нарушается для средних значений индексов при любом типе взаимодействия, однако в пределах погрешности расчета при некоторых температурах соотношение $\nu + \alpha = 2$ выполняется. Полученные результаты сопоставлены со значениями для модели Изинга с граничными условиями «оборванные концы».

Ключевые слова: ферромагнетик, динамический скейлинг, статический скейлинг, критические индексы, одномерный мангнетик, модель Изинга.

DOI 10.14258/izvasu(2017)4-04

Согласно масштабной теории флуктуации параметры порядка вблизи критической точки велики, а их взаимодействие целиком определяет характер возникающих аномалий. Бакингом, Вайдомом,

The paper presents the results of computer simulation of the generalized Ising model of a quasi-one-dimensional nanomagnet by the Monte Carlo method. The simulation is performed for antiferromagnet-ferromagnet phase transition with periodic boundary conditions. The dynamic scaling ratio $Y = \nu^* z$ and the static scaling relation $d\nu = 2 - \alpha$ have been verified for the Ising nanomagnet using values of the critical temperature, as well as values of the critical exponents. Temperature dependences of the kinetic critical index and the product of the dynamic critical index $Y(T)$ on the correlation length index of the $\nu^* z(T)$ are constructed for a linear system (cluster) of finite size. The influence of interaction energy of the second, third neighbors, and four-particle interaction on the fulfillment of dynamic and static scaling hypotheses is described. Parameters are found for the dynamic scaling ratio near the critical region to be within the errors. It is shown that the static scaling hypothesis within the framework of the one-dimensional Ising magnet model near the critical region is violated for any type of interaction. However, the relation $\nu + \alpha = 2$ is satisfied within the errors for some temperatures. The obtained results are compared with the values for the Ising model with the «dangling ends» boundary conditions.

Key words: ferromagnet, dynamic scaling, static scaling, critical index, one-dimensional magnet, Ising model.

Покровским и Паташинским [1–4] почти одновременно были сформулированы идеи, составившие основу современных представлений о структуре вещества в окрестности критической точки — масштабная

гипотеза, гипотеза подобия (scaling). Амплитуда флуктуаций в областях $V \propto r_c^3$ порядка средних значений плотности. Радиус корреляции r_c — характерный масштаб в системе, значительно превосходящий радиус действия межмолекулярных сил. Используя выражение для свободной энергии, приходим к выводу, что поведение равновесных свойств системы описывается простыми степенными законами. Известны соотношения между показателями $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ [5], $\alpha + \beta(1 + \delta) = 2$, $d\nu = 2 - \alpha$ [6]. Существует строгое термодинамическое доказательство двух неравенств, частным случаем которых являются предыдущие равенства. Это неравенство Рашбрука [7] $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$ и Гриффитса [8] $\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2$. В теории однородного самосогласованного поля Гиббса — Вейса Ландау соотношения подобия выполняются, в рамках данных теорий значения индексов (для ФП 2-го рода): $\alpha=0, \beta=1/2, \gamma=1, \delta=3$ [6]. Совсем недавно в работе [9] автор показал, что соотношения Эссама — Фишера и Рашбрука (1963), которые соединяют равновесные критические индексы восприимчивости, удельной теплоемкости

и параметра порядка (иные отношения, следующие из гипотезы подобия), действительны только в случае критической температуры $T_c > 0$ и $T \rightarrow T_c$. Для фазовых переходов с $T_c = 0$ отношения оказались другой формы. Экспериментаторы также стремятся получить сведения об асимптотических законах, по которым изменяются физические величины вблизи особой точки [10, 11]. Цель данной работы — проверить выполнение соотношений динамического и статического скейлинга для конечного одномерного изинговского магнетика вблизи фазового перехода.

Для качественного описания динамических и статических характеристик системы используется модель Изинга, спины которой размещены на одномерной цепочке. В модели учитывается взаимодействие ближайших, вторых, третьих соседей, четырехчастичное взаимодействие и рассматривались периодические граничные условия (ПГУ), т.е. цепочка замкнута в кольцо. Таким образом, мы получили оригинальное выражение для энергии одномерного магнетика с ПГУ в безразмерных единицах [12]:

$$E = \frac{e}{|j_1|} = -H \sum_{i=1}^N S_i \pm \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + S_N S_1 \right) - J_2 \left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} + \sum_{i=1}^2 S_{N-2+i} S_i \right) - J_3 \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} + \sum_{i=1}^3 S_{N-3+i} S_i \right) - J_{1-4} \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+1} S_{i+2} S_{i+3} + S_{N-2} S_{N-1} S_N S_1 + S_{N-1} S_N S_1 S_2 + S_N S_1 S_2 S_3 \right), \quad (1)$$

где J_2 и J_3 — энергии взаимодействия вторых и третьих соседей соответственно; J_{1-4} — энергия четырехчастичного взаимодействия; H — напряжённость внешнего магнитного поля; N — количество атомов (узлов); i — номер узла, а S_i — некоторая величина (безразмерный магнитный момент на узле), принимающая значение $+1$ или -1 . Если магнитный момент i -го атома сонаправлен с выбранным направлением, то S_i равно $+1$, если нет, то -1 .

Как известно, для конечных систем границы критической области можно определить путем расчета корреляционной длины. Так была рассчитана критическая температура для конечных систем при учете энергии взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия [12]. Используя значения критической температуры, а также значения критических индексов, мы проверили следующее соотношение динамического скейлинга [13]:

$$Y = z \nu. \quad (2)$$

Зависимость от внешнего магнитного поля была рассмотрена в работе [14]. Рассмотрим температурную зависимость правой и левой частей соотношения (2) для цепочки из 8 узлов для разных значений энергий взаимодействия. На одном рисунке были построены две функции $Y(T)$ и $z^* \nu(T)$ (рис. 1). Чем ближе кривые друг к другу, тем лучше выполняется соотношение, а пересечение кривых означает

выполнение гипотезы динамического скейлинга. Интересный результат получен в нулевом магнитном поле для энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0,5$ и $J_2 = 1$ (см. рис. 1). Увеличение энергии взаимодействия вторых соседей уменьшает значения индексов, вместе с тем соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется только в случае (б).

На рисунке 1б для системы из восьми узлов и нулевого поля имеются три точки пересечения кривых кинетического критического индекса Y и произведения $\nu^* z$, в которых соотношение выполняется строго при температурах $T = 1,09$, $T = 1,49$ и $T = 1,69$. При учете взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,1$ соотношение динамического скейлинга нарушается слабее, чем при учете четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0,1$ (см. рис. 2).

Была найдена энергия взаимодействия третьих соседей, при которой гипотеза динамического скейлинга выполняется вблизи критической области (см. рис. 3).

Так, при энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,5$ и $J_3 = 1$, кривые кинетического критического индекса Y и произведения $\nu^* z$ совпадают в пределах погрешности измерения в широком интервале температур от $[0,8; 2]$.

Аналогично было изучено влияние энергии четырехчастичного взаимодействия на выполнение гипотезы динамического скейлинга (см. рис. 4).

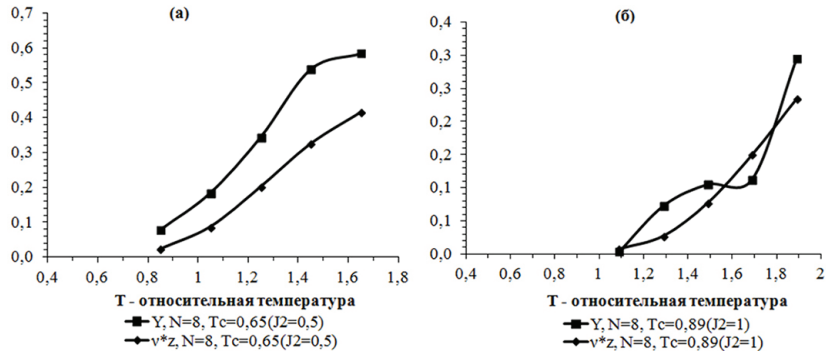


Рис. 1. Зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T для энергии взаимодействия вторых соседей: а) $J_2 = 0,5$; б) $J_2 = 1$; относительная погрешность 3–10%

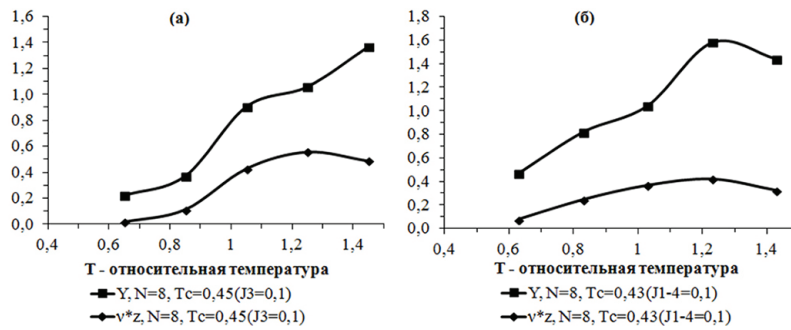


Рис. 2. Зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T и а) энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,1$; б) энергии четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0,1$; относительная погрешность 3–10%

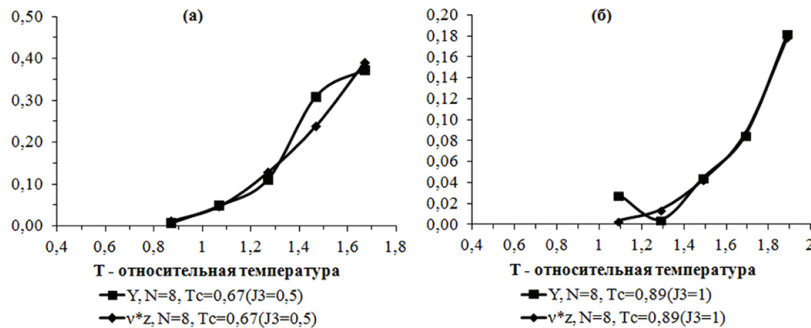


Рис. 3. Зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T для энергии взаимодействия третьих соседей а) $J_3 = 0,5$; б) $J_3 = 1$; относительная погрешность 3–10%

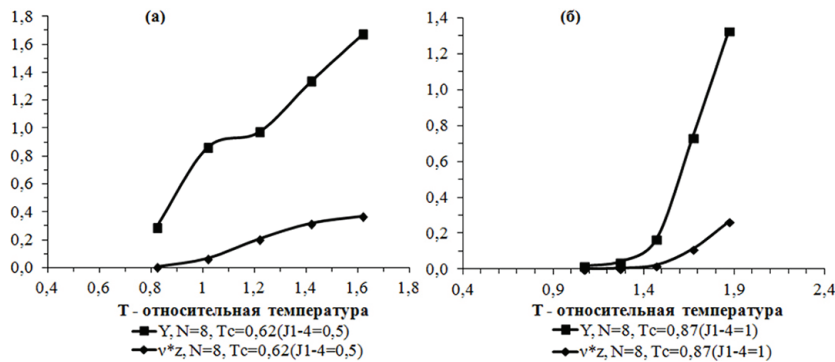


Рис. 4. Зависимости кинетического критического индекса Y и произведения v^*z от температуры T для энергии четырехчастичного взаимодействия и а) $J_{1-4} = 0,5$; б) $J_{1-4} = 1$; относительная погрешность 3–10%

Увеличение энергии четырехчастичного взаимодействия способствует выполнению соотношения (1). Так, при $J_{1-4} = 1$ вблизи критической области кривые кинетического критического индекса ν и произведения $\nu * z$ совпадают в пределах погрешности расчета (см. рис. 4 б).

Используя значения критической температуры, а также значения критических индексов, мы проверили следующее соотношение статического скейлинга [13]:

$$d\nu = 2 - \alpha, \quad (3)$$

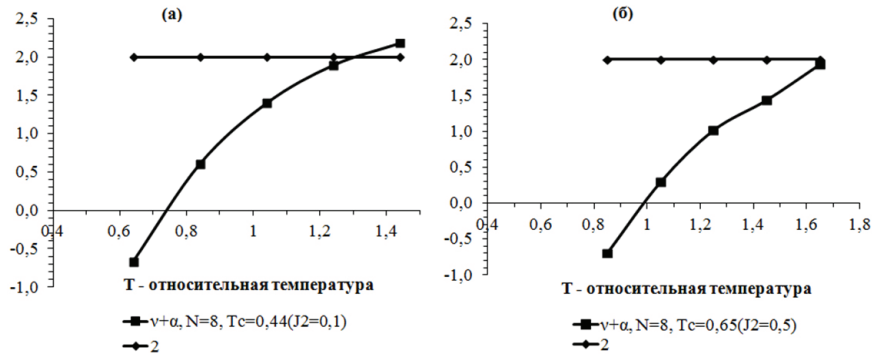


Рис. 5. Зависимость суммы критических индексов $\nu + \alpha$ вблизи критической температуре T_c для энергии взаимодействия вторых соседей: а) $J_2 = 0,1$; б) $J_2 = 0,5$; относительная погрешность 3–10%

При небольших значениях энергии взаимодействия вторых соседей существует точка пересечения (рис. 5), при температуре $T=1,24$. Также в пределах погрешности можно отметить, что гипотеза статического скейлинга выполняется в диапазоне температур от [1,2;1,4] при $J_2 = 0,1$ и при температуре $T=1,6$ с энергией взаимодействия $J_2 = 0,5$ (рис. 5 б).

Аналогично были исследовано влияние взаимодействия третьих соседей (рис. 6) и четырех-

где d — размерность пространства для одномерной цепочки $d = 1$; ν — критический индекс корреляционной длины; α — критический индекс теплоемкости.

Построим зависимость соотношения $\nu + \alpha = 2$ вблизи критической области для цепочки из восьми узлов. Будем учитывать разные значения энергий взаимодействия в нулевом магнитном поле. Были построены функции $\nu + \alpha(T)$ и прямая $y = 2$. Следовательно, чем ближе функция $\nu + \alpha(T)$ к двойке, тем лучше выполняется выражение (3).

частичного взаимодействия на выполнение гипотезы статического скейлинга вблизи критической температуры (см. рис. 7). Гипотеза выполняется при энергии взаимодействия третьих соседей, равной $J_3 = 0,1$. На графике существует точка пересечения кривых (рис. 6) при температуре $T = 1,25$ и энергии, равной $J_3 = 0,5$ при относительной температуре $T = 1,67$.

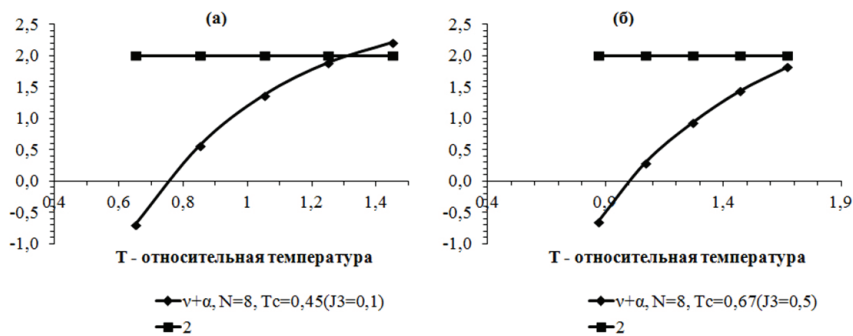


Рис. 6. Зависимость суммы критических индексов $\nu + \alpha$ вблизи критической температуры T_c а) энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,1$; б) энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0,5$; относительная погрешность 3–10%

При приближении к критической области гипотеза статического скейлинга (2) нарушается при любом типе взаимодействия. Существуют температуры, при которых гипотеза выполняется, при учете четырехчастичного взаимодействия $T = 1,23$ и $T = 1,62$,

соответственно при $J_{1-4} = 0,1$ и $J_{1-4} = 0,5$ (см. рис. 7). Увеличение энергии взаимодействия вторых, третьих соседей и четырехчастичного взаимодействия способствуют еще большему нарушению гипотезы статического скейлинга (2).

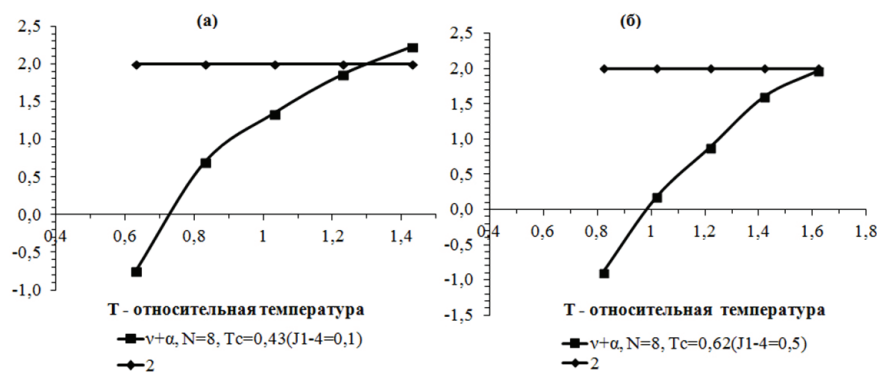


Рис. 7. Зависимость суммы критических индексов $\nu + \alpha$ вблизи критической температуры T :
 а) энергии четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0,1$;
 б) энергии четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0,5$; относительная погрешность 3–10%

Таким образом, показано, как энергии взаимодействия вторых J_2 , третьих соседей J_3 , четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} влияют на выполнение гипотезы динамического скейлинга для изинговского наноматериала, а именно на выполнение соотношений $Y = \nu * z$ и $d\nu = 2 - \alpha$. Найдены параметры, при которых соотношение динамического скейлинга в пределах погрешности выполняется при энергии взаимодействия вторых $J_2 = 1$ и третьих $J_3 = 0,5$, $J_3 = 1$ соседей в нулевом магнитном поле.

Сравним наши результаты (с ПГУ) с моделью при граничных условиях «оборванные концы» при фазовом переходе ферромагнетик — антиферромагнетик. Д.В. Спирин [15] отмечает, что гипотеза статического и динамического скейлинга в рамках модели одномерного изинговского магнетика нарушается при всех рассмотренных внутрицепочечных взаимодействиях и магнитном поле. Лишь в термодинамическом пределе при ненулевом взаимодействии вторых соседей и четырехчастичном взаимо-

действии гипотеза динамического скейлинга выполняется в пределах погрешности расчета. Е.В. Шабунин [16] отмечено, что для перехода из антиферромагнитного в ферромагнитное состояние гипотеза динамического скейлинга неприменима к малым низкоразмерным магнитным системам. Отсюда можно сделать вывод, что гипотеза динамического скейлинга наиболее точно выполняется в обобщенной модели Изинга квазиодномерного наноматериала при фазовом переходе антиферромагнетик — ферромагнетик с периодическими граничными условиями в нулевом магнитном поле при учете энергии взаимодействия вторых и третьих соседей.

Гипотеза статического скейлинга в рамках модели одномерного изинговского магнетика с ПГУ вблизи критической области нарушается для средних значений индексов при любом типе взаимодействия, однако в пределах погрешности при некоторых температурах соотношение $\nu + \alpha = 2$ выполняется.

Библиографический список

1. Green M. S. and Sengers J. V., Eds. Critical Phenomena: Proceedings of a Conference. — Washington, 1965.
2. Widom B. Equation of State in the Neighborhood of the Critical Point // Journal of Chemical Physics. — 1965. Vol. 43.
3. Kadanoff L.P. Scaling laws for Ising models near T_c // Physics. — 1966. — Vol. 2, No. 6.
4. Паташинский А.З., Покровский В.Л. О поведении упорядочивающихся систем вблизи точек фазового перехода // ЖЭТФ. — 1966. — Т. 50. № 2.
5. Essam J.W. and Fisher M.E. Pade Approximant Studies of the Lattice Gas and Ising Ferromagnet below the Critical Point // Journal of Chemical Physics. — 1963. Vol. 38 [Electronic resource]. URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1733766>.
6. Покровский В.Л. Гипотеза подобия в теории фазовых переходов // УФН. — 1968. — Т.94, № 1.
7. Rushbrooke G.S. On the Thermodynamics of the Critical Region for the Ising Problem // The Journal of Chemical Physics. — 1963. Volume 39, Issue 3 [Electronic resource]. URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1734338>.
8. Griffiths R. B. Ferromagnets and simple fluids near critical points: some thermodynamical inequalities // The Journal of Chemical Physics. — 1965. — Vol. 43.
9. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures // World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — Vol. 5. DOI: 10.4236/wjcmp.2015.52008.

10. Lipa J. A., Nissen J. A., Stricker D. A., Swanson D. R., and Chui T. C. P. Specific heat of liquid helium in zero gravity near the lambda point // *Phys. Rev.* — 2003. — В 68.
11. Levi B.G. A complex symmetry arises at a spin chain's quantum critical point // *Physics Today.* — 2010. — Volume 63, Issue 13 [Electronic resource]. URL: <http://doi.org/10.1063/1.3366227>.
12. Дзюба Ж.В., Удодов В.Н., Спирин Д.В. Влияние взаимодействия ближайших соседей на индекс корреляционной длины квазиодномерного изинговского ферромагнетика, замкнутого в кольцо // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения.* — 2016. — Т. 13, №4.
13. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике.— М., 1990. — Ч. 1.
14. Дзюба Ж.В., Спирин Д.В., Удодов В.Н. Влияние внешнего магнитного поля и многочастичного взаимодействия на выполнение гипотезы динамического скейлинга изинговского наномангнетика // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения.* — 2016. — Т. 16, №1.
15. Спирин Д.В. Особенности критической динамики изинговских наноразмерных магнетиков : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Томск, 2008.
16. Шабунина Е.В. Фазовые диаграммы и критические индексы одномерного изинговского магнетика : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Томск, 2013.