

三维 X-Y 模型的滞后标度和动态相变行为

邵元智 钟伟荣 林光明

(中山大学物理系 广州 510275)

(2002 年 5 月 2 日收到 2002 年 8 月 4 日收到修改稿)

采用 Monte Carlo 方法对 3D X-Y 模型进行数值模拟计算,研究了在非线性外场驱动下 3D X-Y 模型的滞后标度和动态相变.得出了滞后标度关系为 $\text{Area} \sim h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$,其中 $\alpha = 0.57, \beta = 0.34, \gamma = 0.90$.发现其动态相变行为在一定的临界参数条件下,初始短周期(周期数 $PN \leq 10$)内的结果具有与 Ising 模型类似的对称性破缺,但在长周期内($PN \geq 200$)的结果则明显区别于 Ising 模型而与 Heisenberg 模型相近,也即无稳定动态有序铁磁相的存在.

关键词: X-Y 模型, 滞后标度, 动态相变, Monte Carlo 方法

PACC: 7510H

1. 引 言

近年来关于 $O(n)$ 自旋体系的研究一直是理论物理和凝聚态相变理论的研究热点,其中以 Ising 模型($n = 1$)最为引人注目,也是研究得最彻底的模型.迄今,有关 Ising 模型的动态响应^[1,2],动态相变的滞后行为及其标度^[3,4],非平衡动态相变问题^[5-10,22]等都有较为明确的表述. Heisenberg 模型($n = 3$)的临界耦合及临界指数^[11-16],物理学家们也做出了精确的确定,对引入单轴磁晶各向异性和随机各向异性的 3D Heisenberg 模型的磁滞标度关系^[9,15,16],近年也有突破性进展.对于介于以上两者之间的 X-Y 模型($n = 2$),在 1990 年前后, Hasenbush^[17], Janke^[18], Gottlob^[19]等人分别用 Monte Carlo 方法进行模拟计算,得出了 3D X-Y 模型的临界耦合及临界指数,相对而言,有关 X-Y 模型其他方面的研究与前二种模型比较则少见报道.本文采用 Monte Carlo 方法对 3D X-Y 模型在非线性外场驱动下的滞后标度和动态相变进行了模拟计算,得出了 3D X-Y 模型的滞后标度关系,并考察了外场幅度 h_0 , 频率 ω 和温度 T 在初始短周期内($PN \leq 10$)和长周期内($PN \geq 200$)对体系对称性破缺的影响.

2. 理论与模型

考虑系统受周期性驱动外磁场 $H = h_0 \sin(\omega t)$ 的作用,系统的 Hamiltonian 由以下二项组成:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - gu \sum_i (H \cdot S_i) \quad (1a)$$

其中

$$S_i \cdot S_j = aS_i^x S_j^x + bS_i^y S_j^y + cS_i^z S_j^z. \quad (1b)$$

(1a)式等号右边第一项为自旋交换作用能项,第二项为驱动外场与自旋作用能项.符号 S_i, S_j 分别代表阵点 i, j 的自旋, g 为朗德因子, u 为磁矩,交换作用常数 J 取值为 J_{NN} 和 J_{NNN} ,分别代表 i 阵点与最近邻(NN)间和次近邻(NNN)间的选取的相互作用强度参数,取决于 J_{NN} 还是 J_{NNN} 被选取, $\sum_{\langle i,j \rangle} (\)$ 代表最近邻(NN)间求和及次近邻(NNN)间求和.自旋交换各向异性常数为 a, b, c .当 $a = b = c = 1$ (1a) 式为典型 Heisenberg 模型;当 $a = b = 0, c = 1$ (1a) 式为典型 Ising 模型;当 $a = b = 1, c = 0$ 则为平面 X-Y 模型,正是本文所采用的模型.

在模拟计算中,我们采用如下关系式来计算 J_{NN} 值^[20]:

$$\frac{kT_c}{J_{NN}} = \frac{5}{96} (R - 1) [11S(S + 1) - 1], \quad (2)$$

式中 R 为最近邻数, J_{NNN} 随阵点间距离呈指数下降,

* 广东省自然科学基金(批准号 990213)资助的课题.

通常取值在 $0.1-0.25J_{NN}$, 本文中选取 $J_{NNV} = 0.2J_{NN}^{[20]}$.

采用随机初始化(热无序)或有序初始化两种模拟计算初始条件不影响最终的计算结果, 但会影响到达系统平衡的时间, 前者较后者具有更高的计算效率. 因此, 本文采用随机初始化初始条件. 此外, 采用周期性边界条件以消除边界效应对模拟计算结果的影响, 模拟点阵为 3 维, 大小为 N^3 , 选取 $N = 60$, 依次重复对整个点阵的每个阵点扫描, 扫描次数用 Monte Carlo Step (MCS) 来表示. 阵点自旋翻转更新判据采用 Metropolis 准则. 相关宏观磁性参量的平均为独立 10 次模拟之后的平均, 其中每次独立模拟扫描数达 10000MCS, 以确保达到平衡.

回线面积定义为

$$\text{Area} = \oint m(t) dh(t). \quad (3)$$

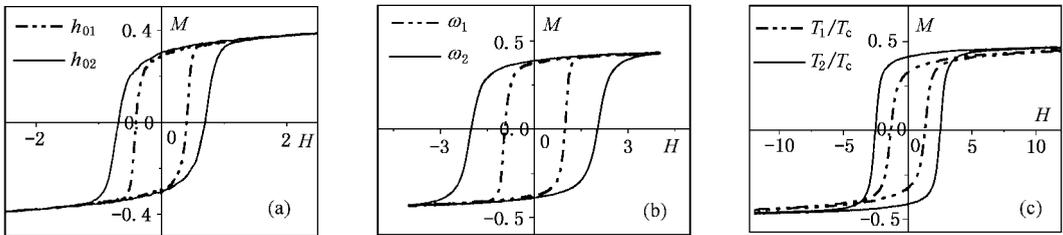


图 1 不同 $h_0, \omega, T/T_c$ 值下的磁滞回线 (a) $h_{01} = 1.0, h_{02} = 4.0$ (b) $\omega_1 = 2, \omega_2 = 20$ (c) $T_1/T_c = 0.8, T_2/T_c = 0.5$

根据大量类似于图 1 所示的磁滞回线面积 Area 与磁场幅度 h_0 , 磁场频率 ω 以及约化温度 T/T_c 的系统结果, 拟合出它们之间按

$$\text{Area} \sim h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma \quad (6)$$

所示的指数标度关系的标度指数 α, β, γ . 并与以往

体系的动态序参量 Q 定义为在外场变化的一个周期内磁化强度 $m(t)$ 对时间的平均, 即

$$Q = \frac{\omega}{2\pi} \oint m(t) dt, \quad (4)$$

其中序参量(磁化强度) $m(t)$ 为对点阵整体自旋的平均

$$m = \frac{1}{N} \sum_i S_i / N^3. \quad (5)$$

3. 模拟结果

3.1. 3D X-Y 模型动态相变的滞后标度

图 1 给出了在不同驱动外场振幅 h_0 , 频率 ω 和体系约化温度 T/T_c 下的典型磁滞回线图.

报道的 3D Ising 和 Heisenberg 模型的相应标度指数比较, 见表 1.

同以往的结果比较, X-Y 模型的标度指数 α 介于 Ising 模型和 Heisenberg 模型的 α 指数之间.

表 1 3D (α_n) 自旋体系的滞后标度指数

模型/作者	α	β	γ	标度关系式
3D Ising/Acharyya ^[4]	0.67 ± 0.08	0.45 ± 0.08	1.98 ± 0.1	$h_0^\alpha \omega^\beta T^{-\gamma}$
3D Heisenberg/Shao ^[16]	0.45 ± 0.05	0.43 ± 0.05	1.12 ± 0.1	$h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$
3D X-Y/本文结果	0.57 ± 0.02	0.34 ± 0.02	0.90 ± 0.02	$h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$

3.2. 动态相变及对称性破缺

分别考察初始阶段短周期(周期数 $PN \leq 8$) 和长周期($PN \geq 200$) 内的 3D X-Y 模型在外场驱动下的动态行为, 确定相应的临界参数 h_{0c}, ω_c, T 及其变化规律. 在不同驱动外场振幅 h_0 , 频率 ω 及体系约化温度 T/T_c 下的序参量随时间的演化及其相应磁

滞回线如图 2 所示. 在低 h_0 、低 T/T_c 和高 ω 时, 出现了对称性破缺, 表明经过动态相变, 有动态有序(铁磁)相的产生.

图 3 给出了发生上述图动态相变的临界振幅 h_{0c} 和临界频率 ω_c 随温度、频率及振幅的变化关系. 驱动外场的临界振幅随外场频率的降低和系统约化温度的升高而显著下降, 而外场临界频率则随外场

振幅和约化温度的下降而单调下降. 图 3 的结果对于确定 3D X-Y 模型自旋体系的动态相变的临界特

征参量及其变化具有重要意义.

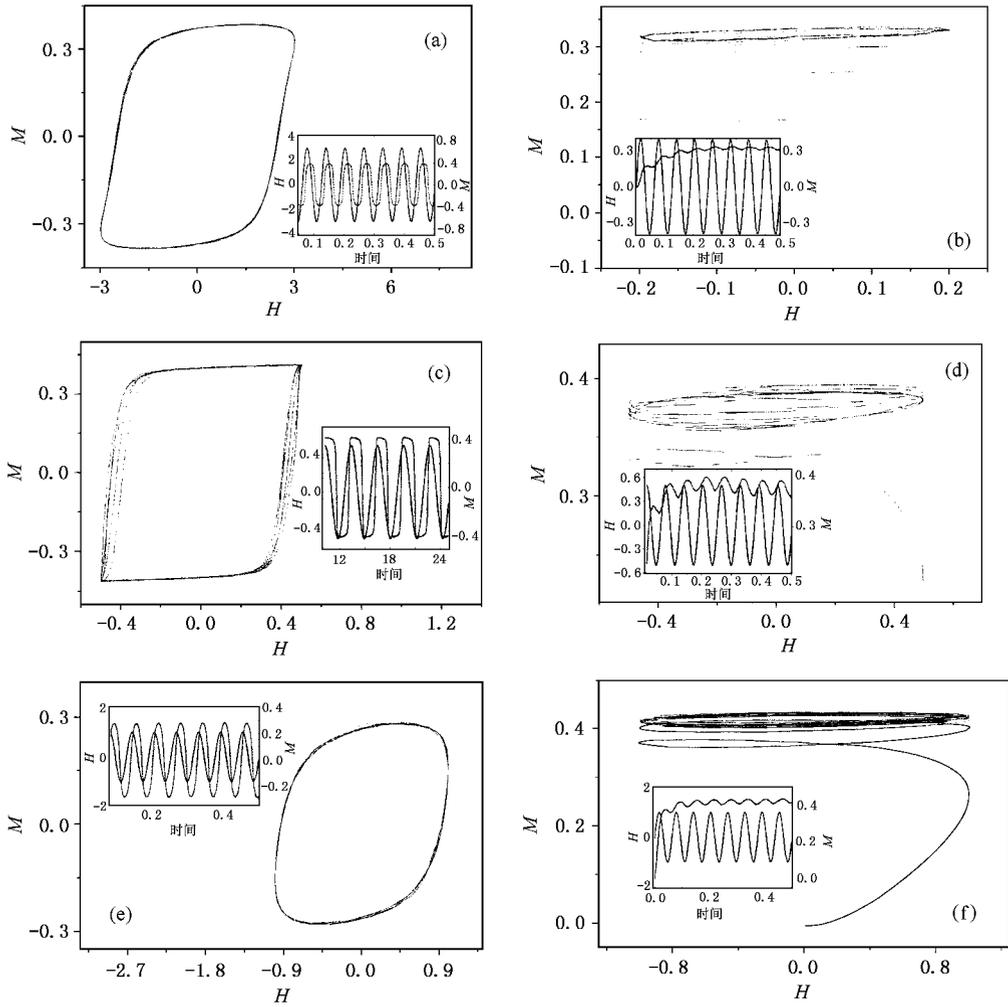


图 2 短周期内($PN \leq 10$)不同外场振幅 h_0 、频率 ω 和温度 T 下的磁滞回线及 $M-t$ 和 $H-t$ 关系曲线(内插图) (a) $h_0 = 3$ (b) $h_0 = 0.2, \omega = 100, T/T_c = 0.7$ (c) $\omega = 2$ (d) $\omega = 100, h_0 = 0.5, T/T_c = 0.5$ (e) $T/T_c = 0.8$ (f) $T/T_c = 0.4$ ($h_0 = 1.0, \omega = 100$)

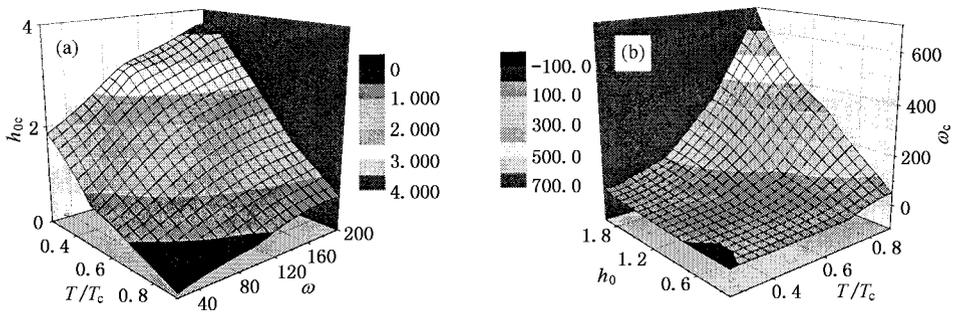


图 3 动态相变的临界振幅 h_{0c} (a) 和临界频率 ω_c (b) 随温度、频率和振幅的变化关系

对于中长周期($PN \geq 200$)3D X-Y 模型的自旋翻

转动力学行为, 图 4 结果表明, 随着自旋翻转演化周

期数的增加, 动态序参量 Q 单调下降. 从原有短周期下的对称性破缺态 ($Q \neq 0$) 最终达到对称态 ($Q = 0$) 此刻对应的的时间定义为临界弛豫时间 τ_c . 临界弛豫时间随温度降低显著增加, 呈现负的幂指数规律 $\tau_c = 25(T/T_c)^{-1.6}$.

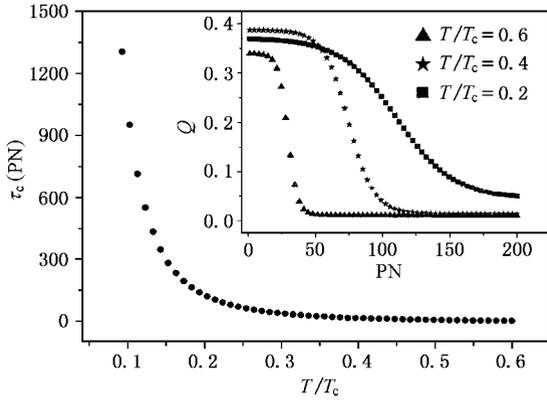


图 4 不同温度下的弛豫时间及 Q - PN 曲线(内插图)

4. 讨论与分析

有趣的是, 在标度关系 $\text{Area} \sim h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$ 中, 本文的模拟结果表明, $\alpha = 0.57$, 正好在 $\alpha_{\text{Ising}} = 0.67$ 与 $\alpha_{\text{Heisenberg}} = 0.45$ 之间, 并有

$$2\alpha_{XY} \cong \alpha_{\text{Ising}} + \alpha_{\text{Heisenberg}}$$

的关系. 目前, 还不清楚这纯粹是一种数值上的巧合, 还是由 X - Y ($n = 2$) 模型本身介于 Ising ($n = 1$) 模型与 Heisenberg ($n = 3$) 模型之间的物理内涵的一种表示, 进一步的深入研究是非常有意义的. 关于 X - Y

模型动态相变行为的转变特征, 本文的结果表明 X - Y 模型的动态相变行为区别于 Ising 模型, 而与 Heisenberg 模型更为接近, 即在很广的温度和外场变化区域下, 只要体系经历的时间足够长, 系统都会弛豫到无序的对称态^[21]. 从对称性破缺的类型来看, Ising 模型的自旋取向具有强各向异性, 属于离散性对称性破缺类型; 而 X - Y 模型与 Heisenberg 模型的自旋取向分别在 X - Y 平面和整个空间各向同性, 属于连续性对称性破缺类型, 与 Ising 模型的离散型对称性破缺形成鲜明对比. 由于是连续完全各向同性, 序参量也没有一个择优的方向, 发生对称性破缺是连续变化的, 体系从破缺到对称(从有序到无序)的转变就容易发生. 在初始周期内, 由于系统的弛豫时间跟不上外场的变化, 那么就有可能出现对称性破缺态. 当经过足够的弛豫时间后, 由于涨落的影响, 系统又会弛豫到更稳定的无序对称态.

5. 结 论

1. 三维 X - Y 模型的磁滞回线面积与驱动外磁场幅度 h_0 , 磁场频率 ω 与系统约化温度 T/T_c 在较广的范围内存在 $\text{Area} \sim h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$ 的滞后标度关系, 且 $\alpha = 0.57$, $\beta = 0.34$, $\gamma = 0.90$.

2. 3D X - Y 模型的动态相变行为区别于 Ising 模型, 而与 Heisenberg 模型更为接近, 经过有序—无序的动态转变, 最终达到完全对称的无序态, 即无稳定的动态有序相存在. 临界弛豫时间和温度具有 $\tau_c = 25(T/T_c)^{-1.6}$ 的关系.

[1] Sides S W, Rikvold P A and Novotny M A 1998 *Phys. Rev. E* **57** 6512
 [2] Thomas P B and Dhar D 1993 *J. Phys. A* **26** 3973
 [3] Zhong F, Liu X and Zhang J X 1995 *Phys. Rev. E* **52** 1399
 [4] Acharyya M and Chakrabarti B K 1995 *Phys. Rev. B* **52** 6550
 [5] Sides S W, Ramos R A, Rikvold P A and Novotny M A 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 5597
 [6] Acharyya M 1997 *Phys. Rev. E* **56** 1234
 [7] Acharyya M 1998 *Phys. Rev. E* **56** 174
 [8] Acharyya M 1998 *Phys. Rev. E* **56** 179
 [9] Shao Y Z, Lan T and Lin G M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 942 [in Chinese] 邵元智、蓝图、林光明 2001 物理学报 **50** 942
 [10] Acharyya M 1999 *Phys. Rev. E* **59** 218
 [11] Chen K, Ferrenberg A M and Landau D P 1993 *Phys. Rev. B* **84** 3249

[12] Holm C and Janke W 1993 *Phys. Rev. B* **48** 936
 [13] Holm C and Janke W 1993 *Phys. Lett. A* **173** 8
 [14] Fisch R 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5684
 [15] Shao Y Z, Lan T and Lin G M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 942 [in Chinese] 邵元智、蓝图、林光明 2001 物理学报 **50** 942
 [16] Shao Y Z, Shek C H and Lai J K 1999 *Phys. Stat. Sol. (b)* **214** R11
 [17] Hasenbush M and Meyer S 1990 *Phys. Lett. B* **241** 238
 [18] Janke W 1990 *Phys. Lett. A* **148** 306
 [19] Gottlob A P and Hansenbush M 1993 *Physica A* **201** 593
 [20] Shao Y Z, Lan T and He Z H 2001 *Acta Scientiarum Naturalium Universitatis Sunyatseni* **39** 30 [in Chinese] 邵元智、蓝图、何振辉 2000 中山大学学报(自然科学版) **39** 30
 [21] Shao Y Z et al *Chinese Physics Letter*, on pressing
 [22] Laabo B, Saber M, Benab A and Kerou M 1999 *Chin. Phys. J.* **8** 199

Hysteretic scaling and dynamical phase transition of three-dimension X - Y Model^{*}

Shao Yuan-Zhi Zhong Wei-Rong Lin Guang-Ming

(Department of Physics , Zhongshan University , Guangzhou 510275 , China)

(Received 2 May 2002 ; revised manuscript received 4 August 2002)

Abstract

We have studied in this paper by performing the Monte Carlo numerical simulation both the hysteretic scaling and the dynamical phase transition of a three-dimensional (3D) classical X - Y model driven by an sinusoidally oscillating external magnetic field. A scaling formula has been worked out which relates the hysteresis loop area with the amplitude h_0 and frequency ω of the external field as well as the reduced temperature T/T_c of the system in the form : $\text{Area} \sim h_0^\alpha \omega^\beta (1 - T/T_c)^\gamma$. The best-fit exponents are $\alpha = 0.57$, $\beta = 0.34$ and $\gamma = 0.9$. The 3D X - Y model also characterizes a distinctive discrepancy in dynamical transition feature after short and long term evolution of magnetization , respectively. Our simulation disclosed that the short-term evolution of magnetization (period number ≤ 10) attains the symmetry-breaking of system with a nonzero dynamical order parameter ($Q \neq 0$) at a either critical amplitude h_{0c} or frequency ω_c . The symmetry-breaking in short term , however , evolves steadily into a symmetric disorder state ($Q = 0$) after a longer term relaxation of system. The specific relaxation times at which the Q value becomes zero from nonzero increase evidently as the temperature of system drops.

Keywords : X - Y model , hysteretic scaling , dynamical phase transition , Monte Carlo simulation

PACC : 7510H

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province , China (Grant No. 990213).