

二维 XY 模型始于有序初态的 aging 现象

赵晓雨

重庆文理学院技术师范学院, 重庆 402160

摘要 应用蒙特卡罗数值模拟方法,对二维 XY 模型始于有序初态的 aging 现象展开研究。模拟温度设在临界温度附近,模拟的物理量为双时自关联函数 $A(t, t')$ 。其难度在于对从有序初态开始的动力学过程,解析研究滞后于数值研究,因此对标度形式的推论成为热点。数值研究发现,非平衡态下的二维 XY 系统的自关联函数与空间关联长度之比 $\xi(t)/\xi(t')$ 相关,在相变点附近具有标度行为,证实系统处于 aging 过程。更重要的是通过对双时自关联函数仔细的动力学标度分析,得到了与以往文献相比更为可信的标度形式。用数值方法证实了这种标度形式不仅在低温下成立,在临界温度附近也成立。因为与其他文献相比,本研究的模拟温度更接近临界点,并在这样的动力学标度下得到了正确的临界指数,说明本研究的实验数据是自治和可信的,同时观察到不同等待时间下模拟实验数据的 collapse 现象。

关键词 蒙特卡罗;aging 现象;动力学标度

中图分类号 O414

文献标识码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2011.11.009

Aging Phenomenon of 2D XY Model Starting from an Ordered Initial State

ZHAO Xiaoyu

College of Technological Teachers, Chongqing University of Arts and Sciences, Chongqing 402160, China

Abstract With Monte Carlo simulation method, the aging phenomenon of the 2D XY model is numerically studied. Starting from an ordered initial state, the system is suddenly quenched to critical temperature T_c . The two-time autocorrelation function $A(t, t')$ is measured. For a dynamic process with an ordered initial state, the difficult problem is that accurate analysis is lagging behind the Monte Carlo simulation study. So many activities have been devoted to dynamic scaling form. According to the numerical experimental data of 2D XY non-equilibrium system, the relation between $A(t, t')$ and ratio of spatial correlation length is detected. The aging phenomenon exhibits a dynamic scaling behavior induced by the time correlation. The aging phenomenon is characterized by the dynamic scale invariance. The aging phenomenon of 2D XY model is confirmed. Especially, the correction of scaling behavior is numerically verified, the form of dynamic scaling of $A(t, t')$ is more creditable than existing literatures. For a dynamic process starting from an ordered initial state, the scaling form assumption fits the numerical data well. The scaling form holds not only at lower temperatures but also around T_c . This is because of the simulation temperature is close to the critical temperature. Based on the dynamic scaling, the experimental data indicate that more accurate values of the critical exponents can be obtained. In addition, the data collapse phenomenon is observed.

Keywords Monte Carlo simulation; aging phenomenon; dynamic scale

0 引言

过去 20 多年对远离平衡态动力学过程的研究非常活跃,从玻璃类系统到复杂无序系统,其中 aging 行为就是主要的研究内容之一^[1-10]。aging 行为是一个极其缓慢的动力学过程,其动力学特征可由双时物理量如自关联函数 $A(t, t')$ 揭示。在一个很大的温度范围(0— T_c , T_c 为临界温度)内,aging 现象的特征其实就是一种动力学标度变换不变性。近年来,

铁磁系统连续相变点附近的 aging 现象引起了人们的高度关注,该情形下的 aging 现象是一种由长程时间关联引起的动力学标度行为,具有普适性。

在二阶相变点,aging 现象的幂次行为研究已比较清楚。但在 Kosterlitz-Thouless(KT)相变点,由于涡旋导致的临界慢化常会引发一个强烈的标度修正,使 aging 现象的观测和标度函数的得出变得困难。经历 KT 相变的一个典型代表就是

收稿日期:2011-01-29;修回日期:2011-02-28

基金项目:重庆市教委科学技术研究项目(KJ091212);重庆文理学院科技项目(Y2007YJ40)

作者简介:赵晓雨,副教授,研究方向为计算物理,电子邮箱zhaoxiaoyu_66@163.com

XY 模型。2000 年,Bray 等^[11]对 XY 模型始于无序态的动力学过程进行了研究,提出了标度的对数修正;2003 年,Zheng 等^[12]对此过程进行了更进一步的研究;始于无序态的标度对数修正已被理论和数值实验所证实,但并没有对 aging 现象进行深入的研究。2004 年,Picone 等^[14]和 Abriet 等^[13]研究了 aging 现象,试图利用自旋波近似或类似的假定来阐明标度的修正。Abriet 等^[13]对二维 XY 模型从无序和有序两种不同的初始态出发的演化过程进行了数值研究,分别给出了假定的标度形式,在低温下这些假设与数值实验数据吻合,但其模拟的温度偏离临界点较大。2007 年,雷晓蔚等^[7]在临界温度附近对二维 XY 模型从无序态开始的动力学过程进行了数值研究,结果表明,在宏观短时区域确实存在 aging 现象,特别指出标度行为存在强的对数修正,给出的标度修正与 Abriet 等^[13]低温下的修正形式不同。然而对于从有序态开始的动力学过程详细的报道比较少,因为其蒙特卡罗(Monte Carlo,MC)数值研究先于解析研究开展,对标度形式的推论没有理论上的印证。2003 年,Zheng 等^[12]对始于有序态的动力学过程进行了数值研究,发现标度的幂次修正也相当强烈。2004 年,Abriet 等^[13]给出的始于有序初态的标度修正形式,仍然是在低温下获得的,数值实验的温度与临界温度 T_c 相差较大,有必要在 T_c 附近对动力学标度形式的修正进行仔细的研究。

本文将通过测量自关联函数 $A(t, t')$, 研究从完全有序相演化到 T_c 附近的动力学过程,证实确实存在 aging 现象,更重要的是对动力学标度形式的修正进行较为仔细的讨论,得到更合理、更接近临界温度的标度形式。当然,这个问题还需要更多的数值研究和理论证实。

1 模型和标度形式

可以描述薄膜和氦的超流状态临界特性的 XY 模型的哈密顿量 H 为

$$-\frac{1}{kT}H = K \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1)$$

式中, $K = J/kT$ 为约化耦合常数, J 为相互作用常数; $\mathbf{S}_i = (S_{ix}, S_{iy})$, $\mathbf{S}_j = (S_{jx}, S_{jy})$ 为格点 i, j 上的平面单位矢量,且 $S_{ix}^2 + S_{iy}^2 = 1$, $S_{jx}^2 + S_{jy}^2 = 1$; 求和是对所有最近邻求和; T 为温度,无量纲,在低于临界温度 T_c 时,系统仍处在临界状态。且 KT 相变的温度 T_{KT} 取 0.89—0.90^[14-15]。

定义二维系统的双时自关联函数如下:

$$A(t, t') = \frac{1}{L^2} \langle \sum_i \mathbf{S}_i(t') \cdot \mathbf{S}_i(t) \rangle \quad (2)$$

其中, t 为观察时间,为一个微观长宏观短的时间, MCS(蒙特卡罗步); t' 为等待时间 MCS, $t > t'$; L 为格点尺寸; 符号 $\langle \rangle$ 表示对微观初始态和随机数的统计平均。在平衡态,由于平移不变性, $A(t, t')$ 仅与时间之差 $t-t'$ 有关; 在非平衡态,由于存在 aging 行为, $A(t, t')$ 将依赖于时间之比 t/t' 以及可能的标度修正。

文献[13]讨论了 T 为 0.1—0.7 低温情形下, $A(t, t')$ 标度行为的修正,文中假设从有序初态出发的自关联函数的标度行为

$$A(t, t') = \frac{1}{(t-t')^{\eta/T_2}} \left[\frac{(1+\lambda)^2}{4\lambda} \right]^{\eta(T)/4} \quad (3)$$

其中, $\lambda = t/t'$, η 为静态指数。在此, 本文将通过数值研究指出, 这一假设并不成立。事实上在文献[13]中也只得出了 $T=0.3$ 时的自关联函数图, 该温度与临界温度 0.89 相差太远。关于文献[13]无序初态的情形, 文献[7]提出了异议。

通过仔细的标度分析, 对 aging 问题, 无论什么初态, 自关联函数在临界区域都应该遵守以下形式:

$$A(t, t') = (\xi(t'))^{-\eta} F[\xi(t)/\xi(t')] \quad (4)$$

一般而言, 当 $t \rightarrow \infty$, 非平衡空间关联长度 $\xi(t) \propto t^{1/z}$, z 为动力学指数, $A(t, t')$ 作为 t 和 t' 的函数, 经标度变换后, $A(t, t') \approx (t')^{-\eta} F[\xi(t)/\xi(t')]$ 。即, 除标度因子 $t'^{-\eta}$ 外, $A(t, t')$ 只与 t 和 t' 时刻的空间关联长度的比值 $\xi(t)/\xi(t')$ 相关, 这便为 aging 现象。而事实上 t 不能达到无穷, 所以存在修正, 例如, $\xi(t) \propto [t/(1+c/t^b)]^{1/z}$ 或者 $\xi(t) \propto t^{1/z}(1+c/t^b)$ 。

按照这一思路, 对有序初态, 当 t 和 t' 有限时

$$\begin{aligned} A(t, t') &= t'^{-\eta} \cdot (1+c/t^b)^2 \cdot \frac{t^{-\eta/2} \cdot (1+c/t^b)}{t'^{-\eta/2} \cdot (1+c/t^b)} [1+c'/(t/t')^b] \\ &= t'^{-\eta} \cdot (1+c/t^b) (t/t')^{-\eta/2} \cdot [1+c'/c'/(t/t')^b] \end{aligned} \quad (5)$$

通常取 $b=1, b'=1$, 因此

$$A(t, t') = t'^{-\eta} \cdot (1+c/t^b) (t/t')^{-\eta/2} \cdot [1+(c/t'+c')/(t/t')] \quad (6)$$

其中, c, c' 是与 t, t' 无关的常数。 c 可从自关联函数 $A(t, t')_{t=0}$, 即 $A(t)$ 中测量, 因为 $A(t) \sim [\xi(t)]^{\eta/2}$, $c/t'+c'$ 可从自关联函数 $A(t, t')_{t=0}$ 中测量, c 也可以从不同 t' 的测量中得到。

2 模拟结果

本文模拟采用的是满足周期性边界条件的二维正方格点 XY 模型, 用 Metropolis 算法在相变点 0.89 处构造 MC 迭代过程。系统的初始为完全有序态, 然后淬火到临界点。选取等待时间 $t'=0, 20, 40, 80, 160, 320$ MCS 系列作分析, 观察时间 $t=10240, L=256$, 统计样本为 10000。

图 1 为双对数坐标下, $A(t, t')$ 随时间比值 t/t' 的演化曲线。显然, 图 1 中的曲线绝不是一个简单的幂次规律, 这种与幂次律的偏离既来自于对 $\xi(t)$ 的标度修正, 又来自于标度函数

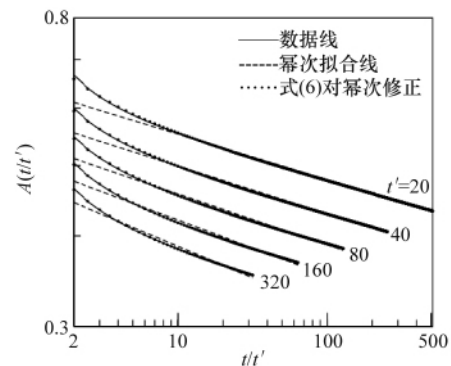


图 1 $A(t, t')$ 随 t/t' 的演化曲线
Fig. 1 Evolution curve of $A(t, t')$ as a function of t/t'

$F(x)$ 本身。圆点拟合比虚线与实验数据的符合更好,说明修正
是必须的。

为了对式(3)和式(6)进行验证,首先按照式(3)和式(6)对数据进行重新标度,即采用整体标度拟合法,将实验数据 $A(t, t')$ 分别乘以最佳标度因子 $(t-t')^{\eta/2}$ 和 $t'^{\eta/2}(1+c/t')$, 得到重新标定后的函数曲线,如图2、图3所示。由图2可见,不同 t' 对应的实验数据无法重叠在函数式(3)上,没有 data collapse 现象不支持这种标度行为,表明在相变点附近,低温下猜测的标度形式(3)不成立。由图3可见,曲线可以很好地吻合,具有明显的 data collapse 临界标度行为。这一结果表明标度形式(6)成立,这就是 aging 现象。

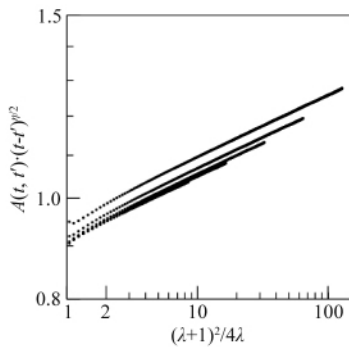


图2 将图1数据乘以最佳标度因子 $(t-t')^{\eta/2}$

Fig. 2 Data in Fig. 1 is multiplied by the scale factor $(t-t')^{\eta/2}$

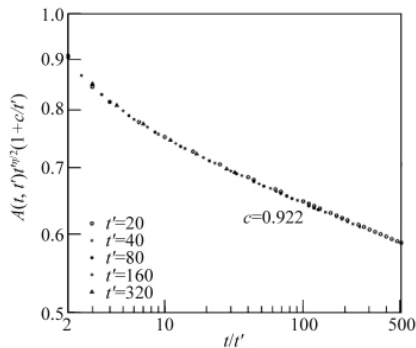


图3 将图1数据乘以最佳标度因子 $t'^{\eta/2}(1+c/t')$ 重新标度

Fig. 3 Data in Fig. 1 is multiplied by the scale factor $t'^{\eta/2}(1+c/t')$

另一方面,图1也测出了临界指数 $\eta/2z=0.0584$ (3),并且不同 t' 对应的指数在误差允许范围内相同。这个测得值与其他文献^[12,16]报道的非常吻合。同时又由图3测出, $c=0.922, c'=0.220, \eta/2=0.117$, 此时 η 与图1得到的一致。这些结果均表明,本文预测的标度形式(6)成立,即在二维 XY 模型相变点附近存在 aging 现象,但必须引入修正式(6)而非式(3)。

3 结论

研究了二维 XY 模型从有序态出发到 KT 相变温度动力

学系统的 aging 现象。发现当 $1 \ll t' \ll t$ 时,非平衡态下的二维 XY 系统的自关联函数 $A(t, t')$ 与空间关联长度之比 $\xi(t)/\xi(t')$ 相关,在相变点附近具有标度行为,表明系统处于 aging 过程。用数值方法证实了标度形式 $A(t, t')=(\xi(t'))^{-\eta}F(\xi(t)/\xi(t'))$, 而 $F(x) \sim x^{-\eta/2}(1+c'/x^2)$, 整理后即式(6)。数据表明,在相变点附近,式(6)比式(3)更合理,因为通过式(6),得到正确的临界指数,并且观察到了不同等待时间 t' 下, $A(t, t')$ 数据的 collapse 现象。

参考文献 (References)

- [1] Calabrese P, Gambassi A. Aging in ferromagnetic systems at criticality near four dimensions[J]. *Phys Rev E*, 2002, 65(6): 66120-66125.
- [2] Montanari A. Aging dynamics of heterogeneous spin models[J]. *Phys Rev B*, 2003, 68(22): 224429-224448.
- [3] Henkel M, Pleimling M. Local scale invariance as dynamical space-time symmetry in phase-ordering kinetics [J]. *Phys Rev E*, 2003, 68(6): 65101-65104.
- [4] Picone A, Henkel M. Local scale-invariance and ageing in noisy system [J]. *Nucl Phys B*, 2004, 688(3): 217-265.
- [5] Schehr G, Paul R. Universal aging properties at a disordered critical point[J]. *Phys Rev E*, 2005, 72(1): 161005-161011.
- [6] 雷晓蔚. 二维 Ising 和 XY 模型的老化现象研究 [J]. 浙江大学学报: 理学版, 2007, 34(2): 168-171.
Lei Xiaowei. *Journal of Zhejiang University: Science Edition*, 2007, 34(2): 168-171.
- [7] 雷晓蔚, 郑波, 应和平. 二维自旋系统 aging 现象的数值模拟研究[J]. 物理学报, 2007, 56(3): 1713-1718.
Lei Xiaowei, Zheng Bo, Ying Heping. *Acta Physica Sinica*, 2007, 56(3): 1713-1718.
- [8] Martinez V A, Bryant G, Megen W V. Slow dynamics and aging of a colloidal hard sphere glass [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, 101(13): 135702-135705.
- [9] Amir A, Oreg Y, Imry Y. Slow relaxations and aging in the electron glass [J]. *Phys Rev Lett*, 2009, 103(12): 126403-126406.
- [10] Richert R. Physical aging and heterogeneous dynamics [J]. *Phys Rev Lett*, 2010, 104(8): 85702-85705.
- [11] Bray A J, Briant A J, Jervis D K. Breakdown of scaling in the nonequilibrium critical dynamics of the two-dimensional XY model[J]. *Phys Rev Lett*, 2000, 84(7): 1503-1506.
- [12] Zheng B, Ren F, Ren H. Correction to scaling in two-dimensional dynamic XY and fully frustrated XY models [J]. *Phys Rev E*, 2003, 68(4): 46120-46128.
- [13] Abriet S, Karevski D. Off equilibrium dynamics in the 2d-XY system[J]. *Eur Phys J B*, 2004, 37(1): 47-53.
- [14] Zheng B, Schulz M, Trimper S. Deterministic equations of motion and dynamic critical phenomena[J]. *Phys Rev Lett*, 1999, 82(9): 1891-1894.
- [15] Tomita Y, Okabe Y. Probability-changing cluster algorithm for two-dimensional XY and clock models [J]. *Phys Rev B*, 2002, 65(18): 184405-184409.
- [16] Ramirez S G, José J V. Critical exponents of the fully frustrated two-dimensional XY model[J]. *Phys Rev B*, 1994, 49(14): 9567-9582.

(责任编辑 刘志远)