



FaMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba

GTMC
Grupo de Teoría
de la Materia Condensada



Dinámica de tiempos cortos y criticalidad de no-equilibrio

Ezequiel Ferrero

Non-equilibrium Characterization of Spinodal Points
using Short Time Dynamics

Ernesto S. Loscar, Ezequiel E. Ferrero, Tomás S. Grigera, Sergio A. Cannas

JCP, vol 151, n°3, en prensa (2009)

Menú:

I – Introducción

- Transiciones de 2° orden, puntos críticos. scaling

II – Short Time Dynamics (STD)

- Forma de scaling

- M , $M^{(2)}$, $d(\ln(M))$,...

- 3D-Ising-T, 2D-Heisenberg(anisotrópico)-T, ...

III- Spinodales con STD

- Transiciones de 1° orden, puntos spinodales.

- 2D-Ising-H, 2D-Potts-T

IV- Repaso

A modo de introducción....

En sistemas many-body
es difícil resolver las ecuaciones de movimiento



imposible

Física estadística

-Equilibrio

Teorías de ensamble

-No-equilibrio

e .g. Ecuaciones de **Langevin**
Dinámica de Monte Carlo

el paradigma.....

Ising model

$$-H / kT = K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i \quad s_i = \pm 1$$

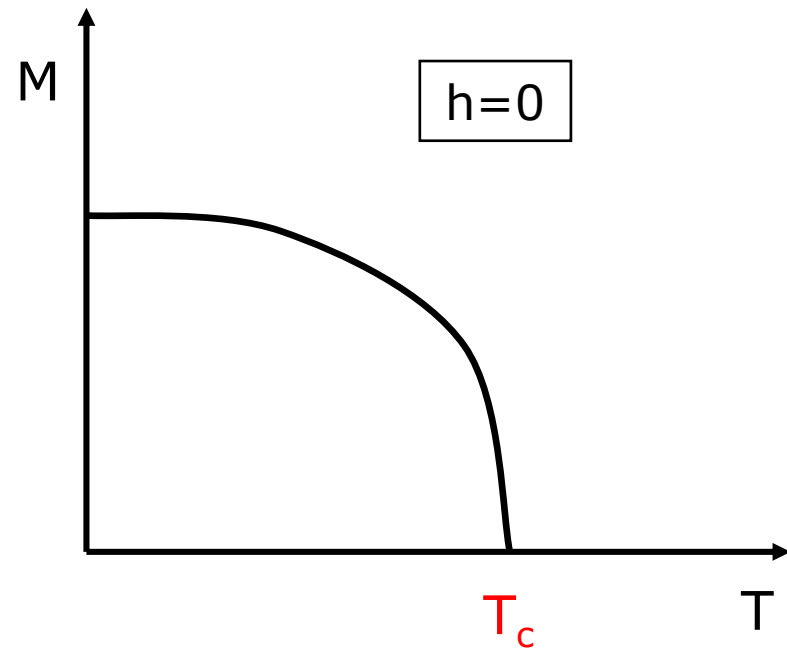
$$M = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_i s_i \right\rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\{s_i\}} \frac{1}{L^d} \sum_i s_i e^{-H/kT}$$

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-H/kT}$$

$$M \sim (-\tau)^\beta \quad T \rightarrow T_c^-$$

temperatura
reducida

$$\tau = (T - T_c) / T_c$$



Características de transiciones de fase de 2° orden

- Forma de escala Hoenberg&Halperin, Rev. Mod Phys B 49, 435 (1977)

$$M(\tau) = b^{-\beta/\nu} M(b^{1/\nu} \tau) \quad \longrightarrow \quad \text{ley de potencia}$$

Representa autosimilaridad

β, ν son exponentes críticos

- Universalidad

Funciones de escala y exponentes críticos dependen solo de las simetrías y la dimensión espacial.

Origen físico:

longitud de correlación divergente, fluctuaciones

Dinámica

$$\{S_i(0)\} \rightarrow \{S_i(t)\} \rightarrow \textit{equilibrio}$$

Forma de escala dinámica

$$M(t, \tau) = b^{-\beta/\nu} M(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau)$$

z: exponente dinámico.

Tang&Landau PRB **36**, 567 (1987)

Wansleben&Landau PRB **43**, 6006 (1991)

condición: **t suficientemente grande**, independencia de C.I.

Origen físico:

longitud de correlación **divergente** y

tiempo de correlación **divergente**

Tradicionalmente → scaling sólo en régimen de tiempos largos.

Dinámica de tiempos cortos

¿Hay algún comportamiento de escala en el régimen de tiempos cortos?

Respuesta: SI

Teoría: scaling dinámico a tiempos cortos (macroscópicos) para el modelo $O(N)$ vectorial. Técnicas de grupo de renormalización.

H.K. Janssen, B. Schaub, B. Schmittmann: *Z. Phys. B* **73**, 539 (1989)

(Prudnikov et al. *Jour. Exp. Theor. Physics* **106**, 1095 (2008))

Experimentos: spin glasses, otros...

Granberg et al. *PRB* **35**, 2075 (1987)

Simulaciones: Ising model

Staufer *Physica A* **186**, 197 (1992)

Ito, *Physica A* **196**, 591 (1993)

Importante:

- tiempos cortos **macroscópicos** $t > t_{mic}$
- condiciones iniciales **no despreciables**

Proceso dinámico **lejos del equilibrio**

$$\text{e.g. } (t = 0, T = \infty) \rightarrow (t > 0, T = T_C)$$

dinámica de **Langevin**

dinámica de **Monte Carlo**

scaling dinámico

$$M(t, \tau, m_0) = b^{-\beta/\nu} M(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{x_0}m_0)$$

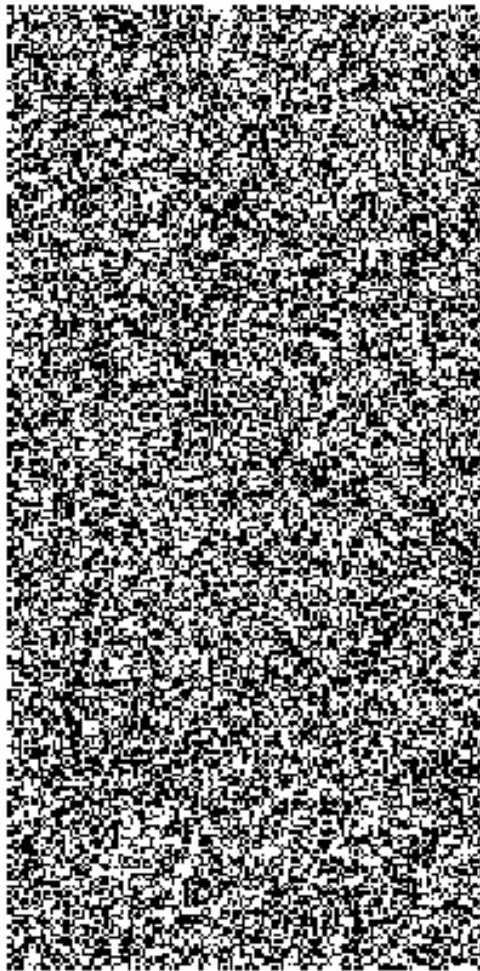
X_0 : “nuevo” exponente crítico, independiente

Origen físico:

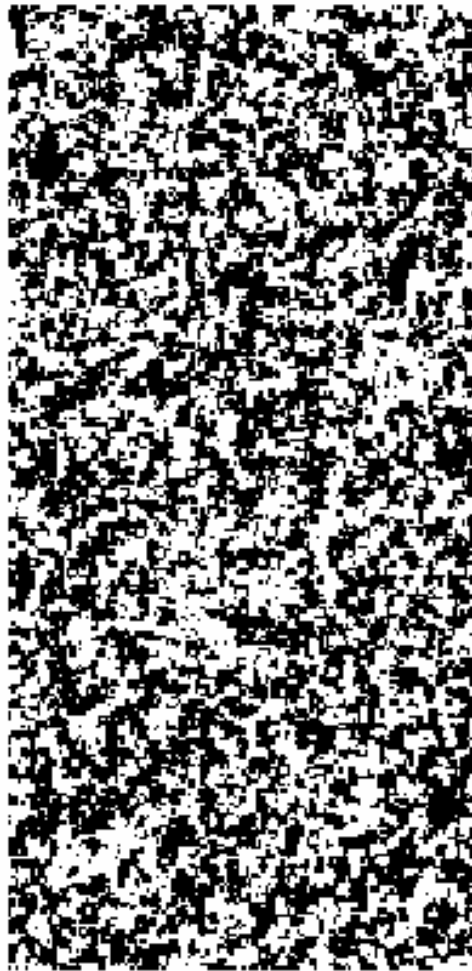
tiempo de correlación **divergente**

Autosimilaridad en la dirección del tiempo, Ising model

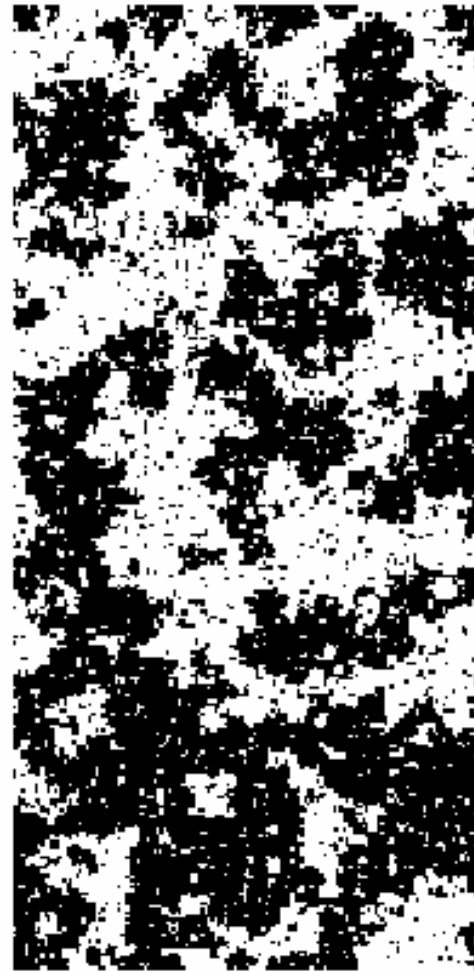
$$\tau = T_c$$



$t = 0$



$t = 2$



$t = 100$ (MCS)

En general tenemos la forma de escala para el **k-ésimo momento**

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0)$$

en el caso $k=1$, $L \rightarrow \infty$, $\tau = 0$, m_0 pequeño, $b = t^{1/z}$

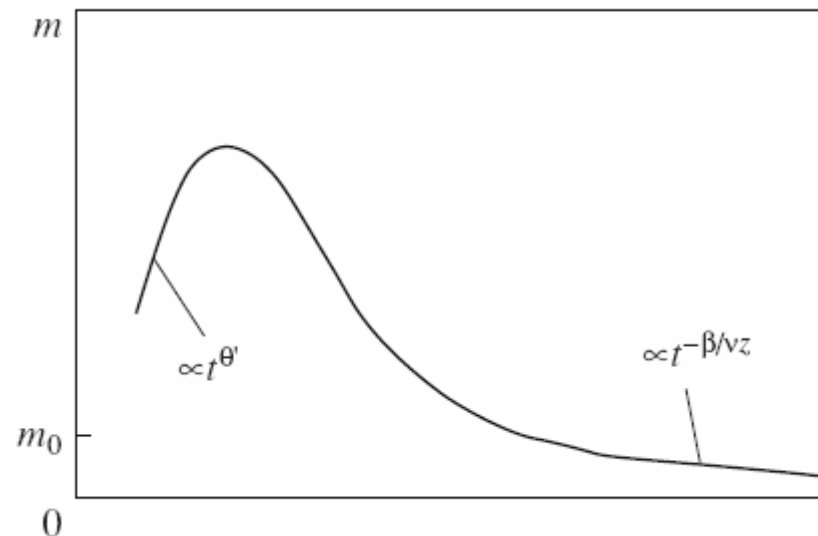
queda: $M(t, m_0) = t^{-\beta/\nu z} M(1, t^{x_0/z} m_0) \Rightarrow M(t) \sim t^\theta$, $\theta = (x_0 - \beta/\nu)/z$

En la mayoría de los casos

$$\theta > 0$$

¡Inicialmente la magnetización crece!

Janssen et al (1989)



Si L finito
 e^{-t/ξ_t}



scaling Dinámico partiendo de un estado desordenado

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0)$$

de aquí se deducen:

$$M(t, \tau, m_0) \sim m_0 t^\theta F(t^{1/\nu z} \tau) \Rightarrow M(t) \sim t^\theta \quad \theta = \frac{(x_0 - \beta/\nu)}{z}$$

$$\text{derivando} \Rightarrow \partial_\tau \ln M(t, \tau, m_0)|_{\tau=0} \sim t^{+1/\nu z}$$

$$M^{(2)}(t) \sim t^{-2\beta/\nu z} M^{(2)}(1, t^{-1/z} L) \Rightarrow M^{(2)}(t) \sim t^{c_2}, \quad c_2 = \frac{(d - 2\beta/\nu)}{z}$$

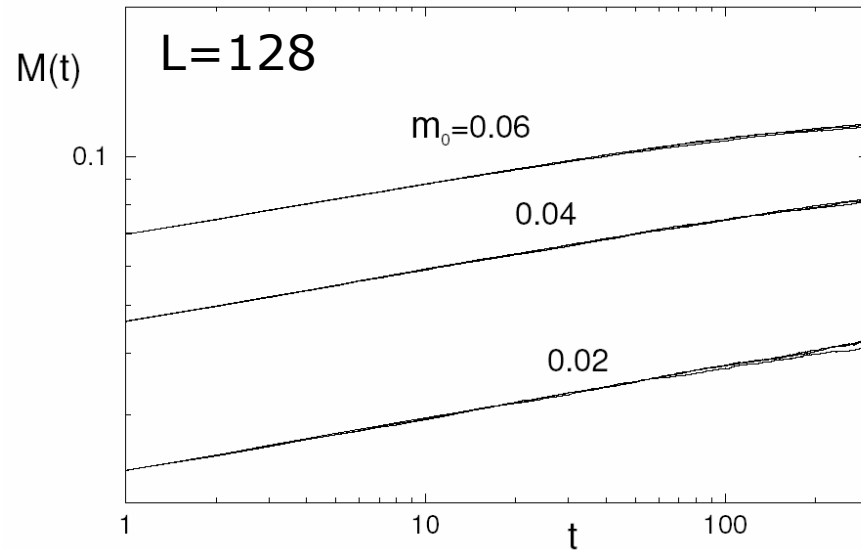
$$A(t) = \frac{1}{L^d} \sum_i \langle S_i(t) S_i(0) \rangle \sim t^{-c_a}, \quad c_a = \frac{d}{z} - \theta$$

Determino la temperatura crítica y θ , $1/\nu z$, c_2 and c_a

de donde extraigo θ , $1/\nu$, β/ν and z .

Ising 3D

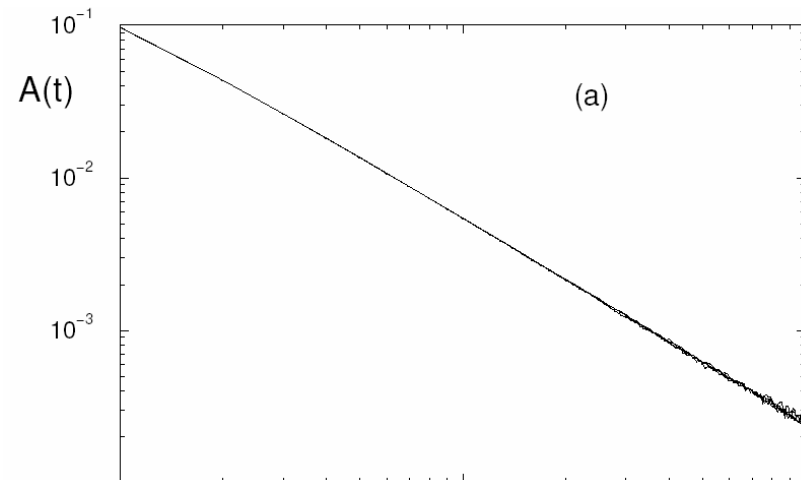
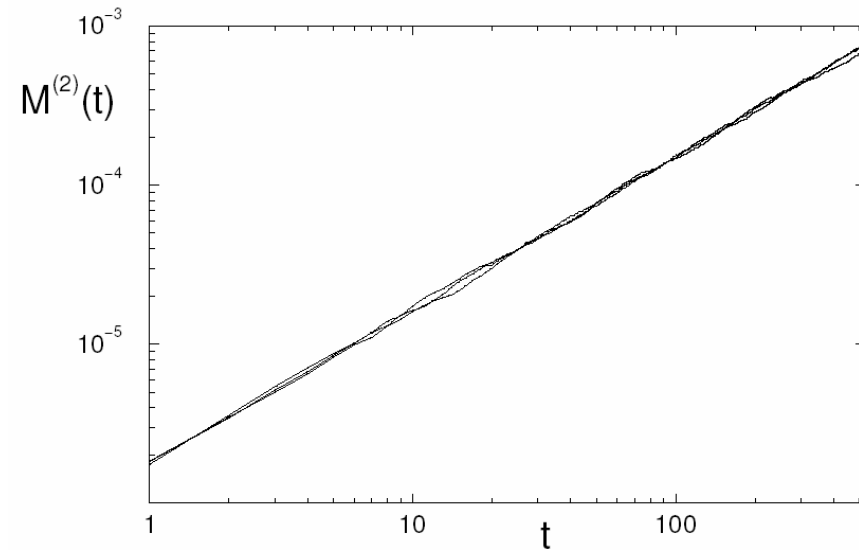
robado de Jaster et al. J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 1395 (1999)



| | | | | |
|----------|----------|------------|-----------|-----------|
| m_0 | 0 | 0.02 | 0.04 | 0.06 |
| θ | 0.108(2) | 0.1059(20) | 0.1035(4) | 0.1014(5) |

↑
extrapolación

parados en $K_c = 0.22166$



También vale.... “empírico”

scaling Dinámico partiendo de un estado ordenado

$$M^{(k)}(t, \tau, L) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L) \quad (\text{válida a tiempos largos, se asume válida también a tiempos cortos})$$

se deducen similarmente:

$$M(t, \tau) = t^{-\beta/\nu z} M(1, t^{1/\nu z} \tau) \Rightarrow M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}$$

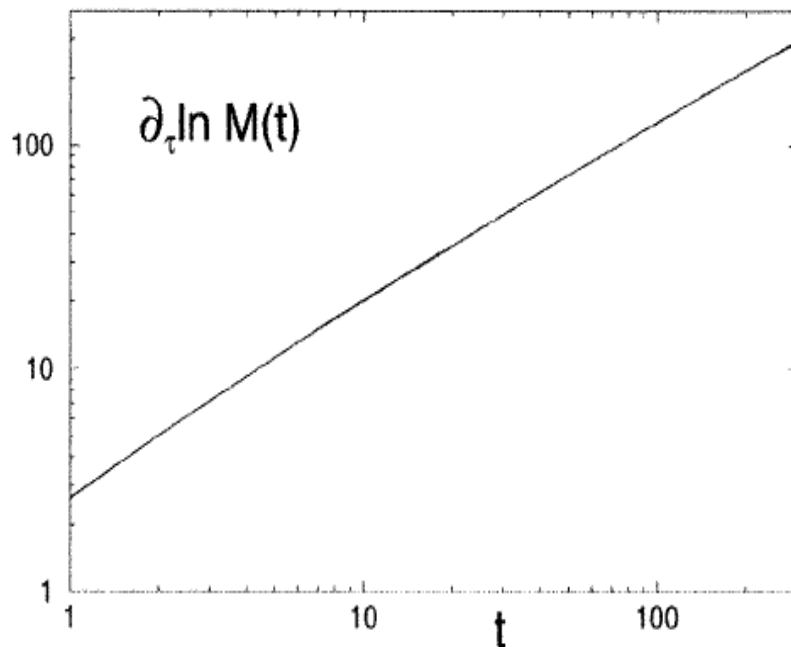
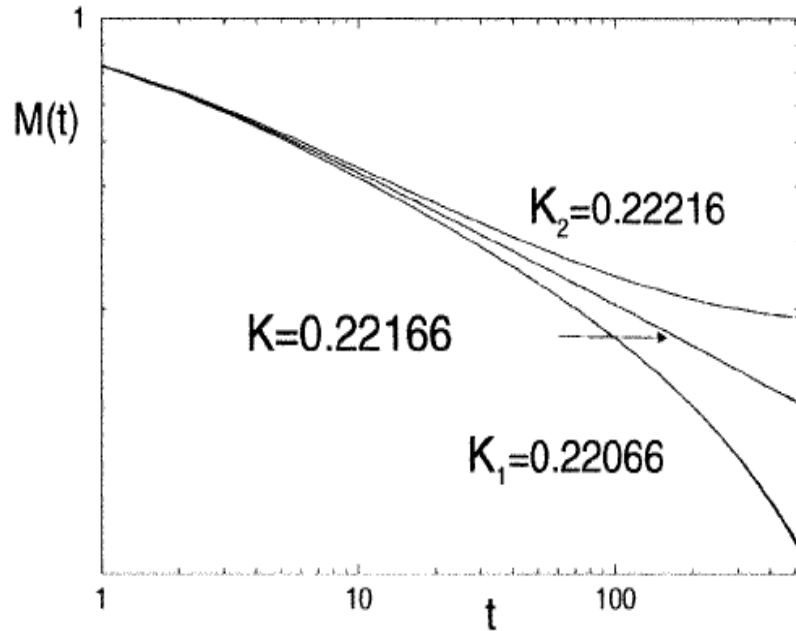
$$\Rightarrow \partial_\tau \ln M(t, \tau, m_0)|_{\tau=0} \sim t^{+1/\nu z}$$

Con M y $M(2)$ se construye el cumulante

$$\Rightarrow U(t) = \frac{M^{(2)}}{(M)^2} - 1 \sim t^{d/z}$$

es posible determinar la temperatura crítica y todos los exponentes críticos β , ν and z

en general, mejor calidad que partiendo de un estado desordenado

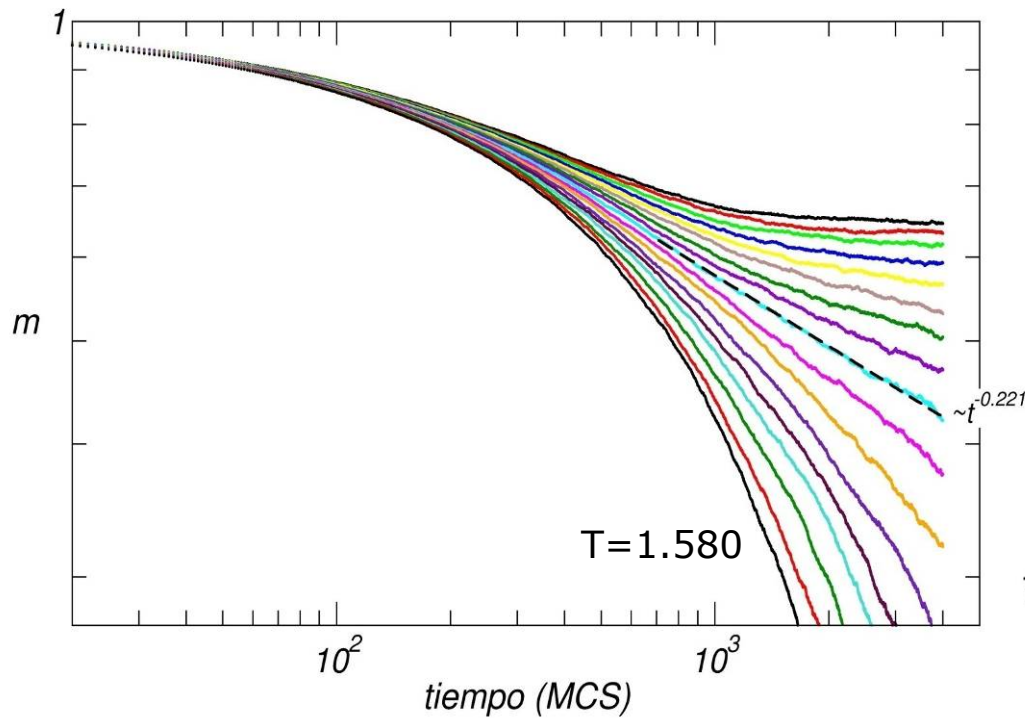


Jaster et al. J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 1395 (1999)

STD

| | |
|------------------------|---|
| $\theta = 0.108(2)$ | 0.104(3) [6] |
| $z = 2.042(6)$ | 2.04(3) [12], 2.032(4) [6] 2.04(1) [7], 2.05(2) [3] 2.04(2) [4] |
| $\beta/\nu = 0.517(2)$ | 0.518(7) [10], 0.5185(16) [16] 0.518 [13–15] |
| $\nu = 0.6327(20)$ | 0.6289(8) [10], 0.6250(25) [11] 0.6301(8) [16] 0.631 [13–15] |
| $\beta = 0.3273(17)$ | 0.3258(44) [10], 0.3267(10) [16] 0.327 [13–15] 0.3269(6) [17] |
| $K_c = 0.22170(4)$ | 0.2216595(26) [10] 0.2216546(10) [16] 0.2216544(3) [17] |

- [5] other STD
- [6-7] damage spreading
- [12] equilibrium dynamics
- [3-4] large-scale simulations in critical relaxation
- [13-15] analytic renormalization-group
- [10] numerical in equilibrium
- [16],[17] cluster algorithm
- [11] measuring interface energy



$D=5, N=100 \times 100$

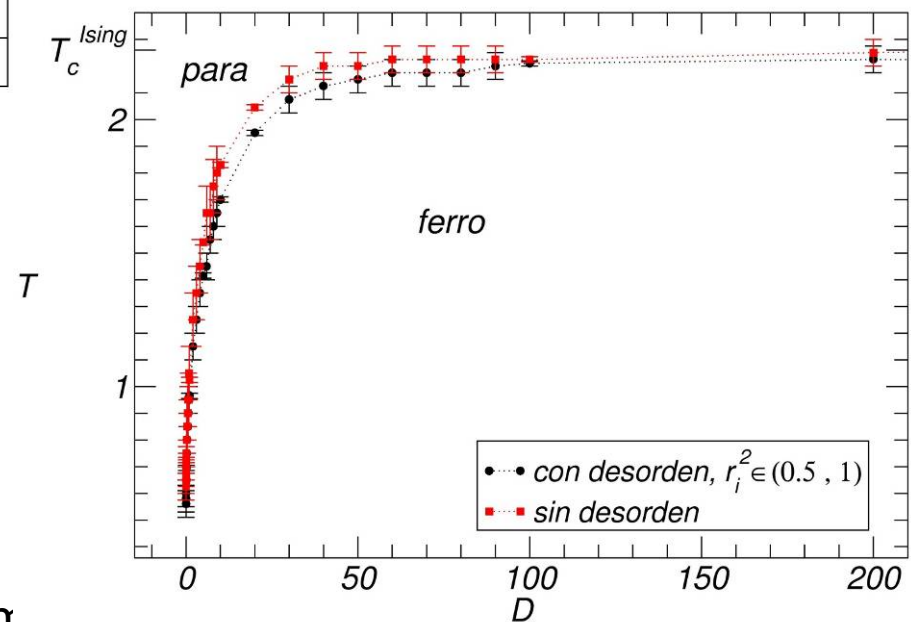
En este caso: $T_c=1.540$

Otros Ejemplos con STD: KT, FFXY, elastic lines, quenched disorder system

Heisenberg 2D con anisotropía perpendicular

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - D \sum_i (r_i S_i^z)^2$$

Diagrama de fases



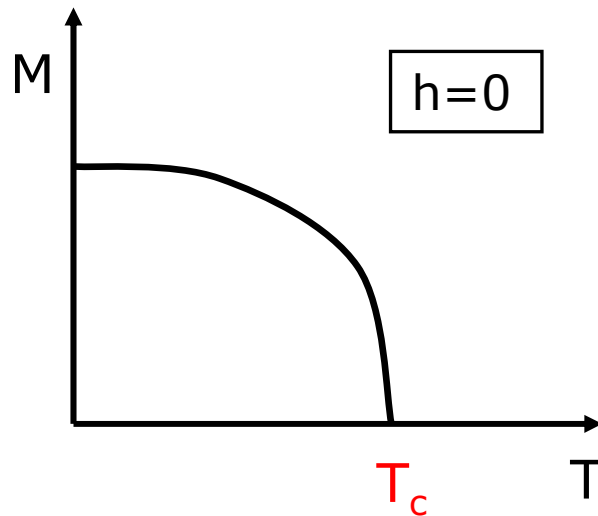
STD en puntos spinodales

¿Qué pasa en transiciones de fase de 1° orden?

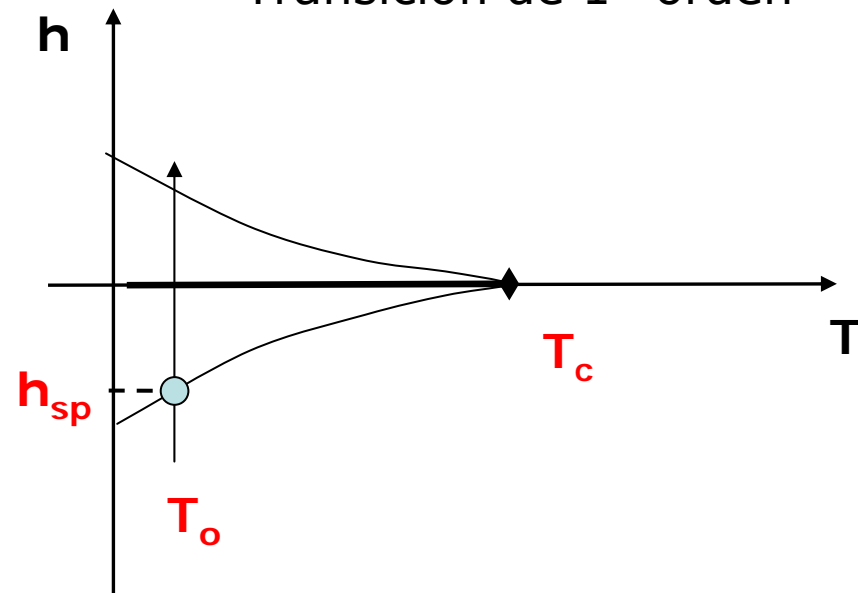
En general, no hay divergencias en T_t

¿Existe algún comportamiento de escala asociado a la transición? ¿y cerca?

Transición continua



Transición de 1° orden



Energía libre

$$f(h, T) = -k_B T \log(Z(h, T))$$

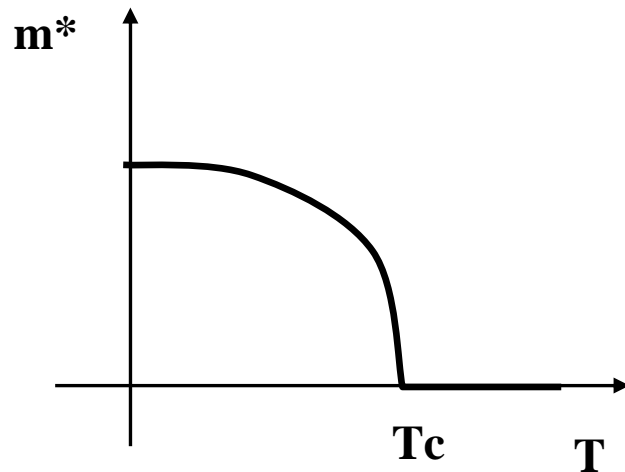
Energía libre **generalizada**

$$f_3(h, T, m)$$

equilibrio, $m=m^*$ minimiza f_3

$$f_3(h, T, m^*) = f(h, T)$$

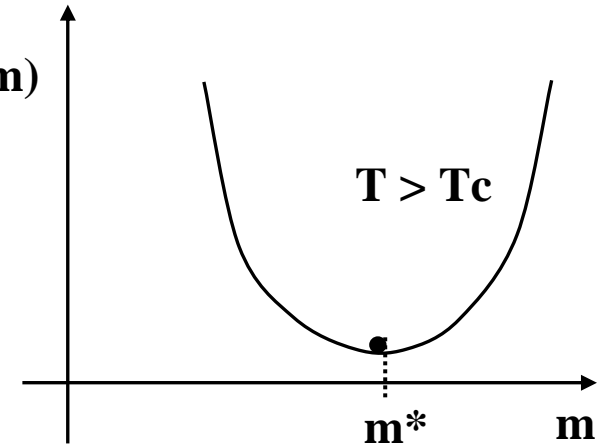
Transición continua



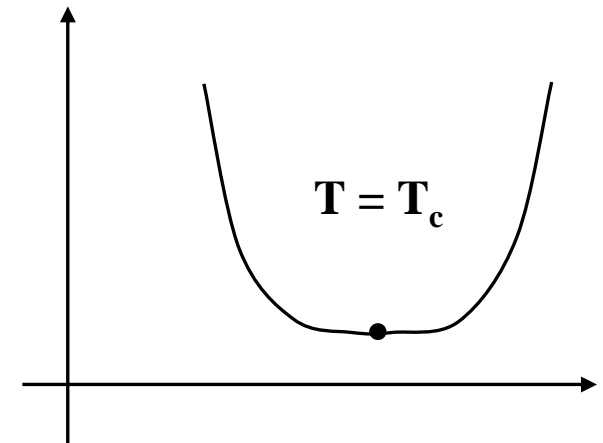
$$h = 0 \quad f_3(m)$$

$$f_3'(m^*) = 0$$

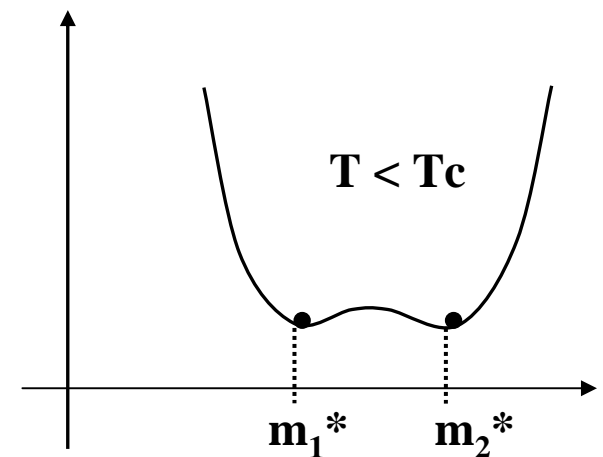
$$f_3''(m^*) > 0$$

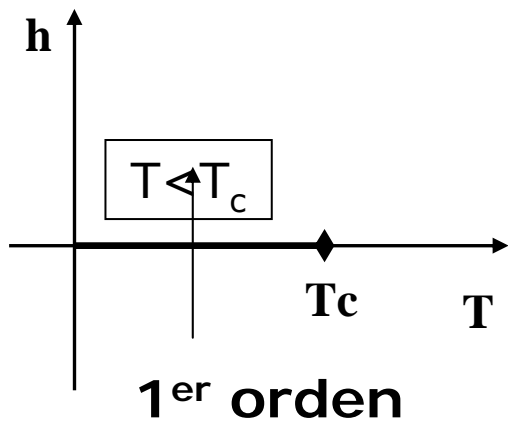


$$f_3''(m^*) = 0$$



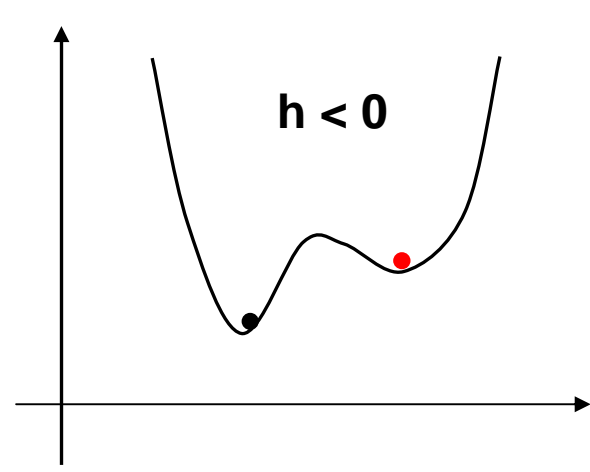
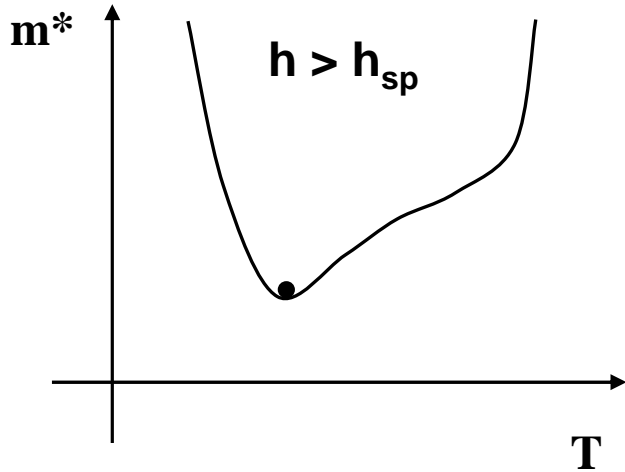
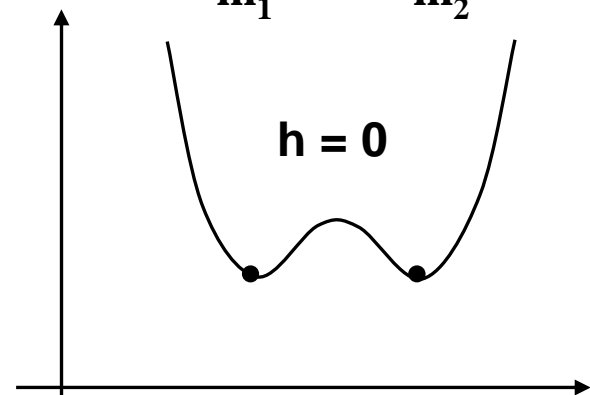
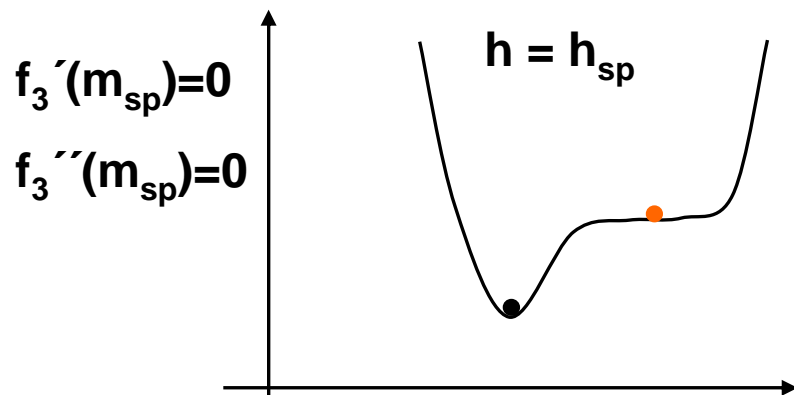
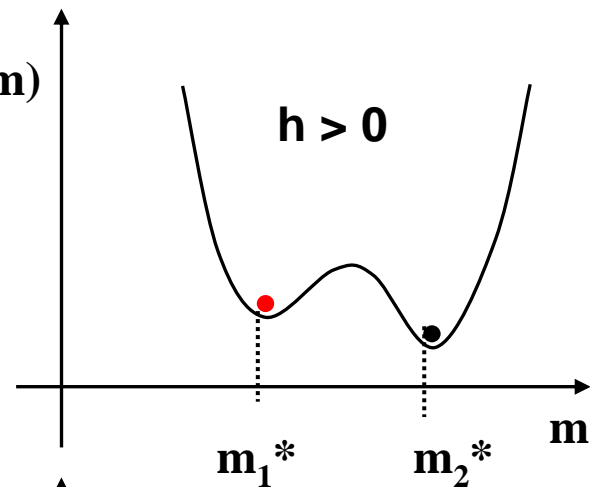
$$f_3''(m) < 0$$





Spinodal

$f_3'(m^*)=0$



Puntos spinodales en sistemas con interacciones de largo alcance

Spinodales Termodinámicas

Curie-Weiss-Ising model.

$$\mathcal{H}_{\text{CWI}} = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i$$

$$f_3(T, m, h) = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right] - \frac{J}{2} m^2 - hm,$$

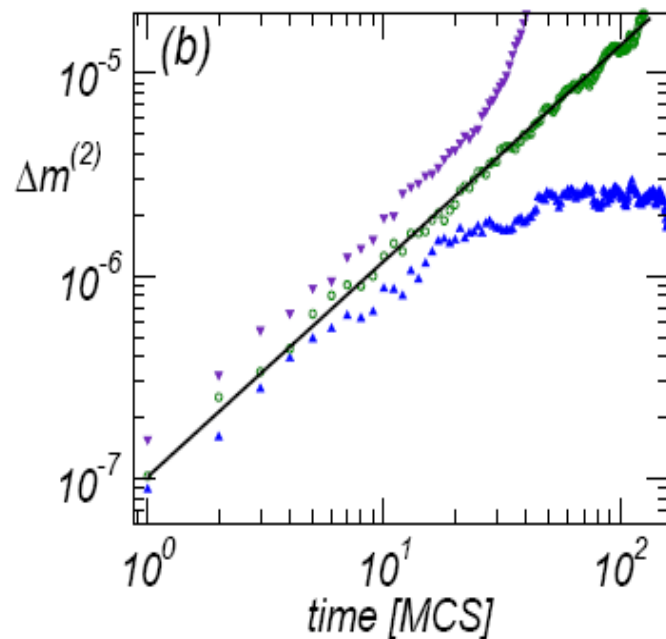
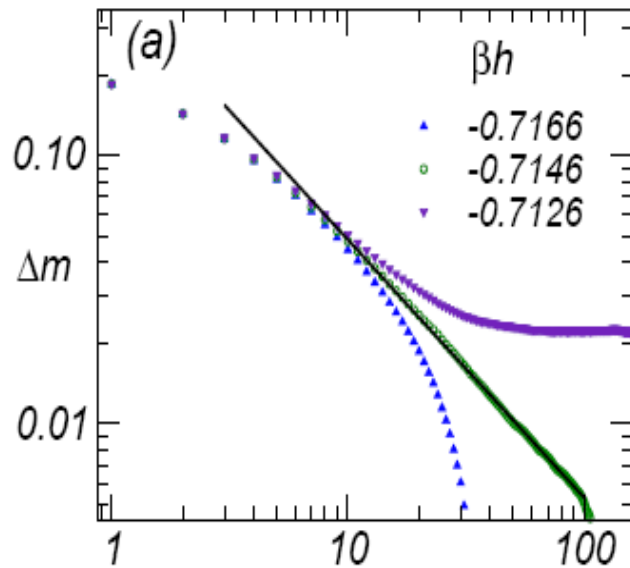
transición de 2° orden a $h = h_c = 0 \quad T_c = J$

transición de 1° orden para $h = 0 \quad T < T_c$

Partimos de un estado $m \approx 1 \quad (h \rightarrow \infty)$

y "quencheamos" a valores cercanos a $h = h_{sp}^{(-)}$

ahora pensamos $\tau = (h - h_{sp}^{(-)}) / h_{sp}^{(-)}$



Solucion exacta

$$m_{\text{sp}}^{(-)} = \sqrt{1 - \frac{T}{J}},$$

$$\beta h_{\text{sp}}^{(-)} = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{1 + m_{\text{sp}}^{(-)}}{1 - m_{\text{sp}}^{(-)}} \right] - \frac{m_{\text{sp}}^{(-)} J}{T}$$

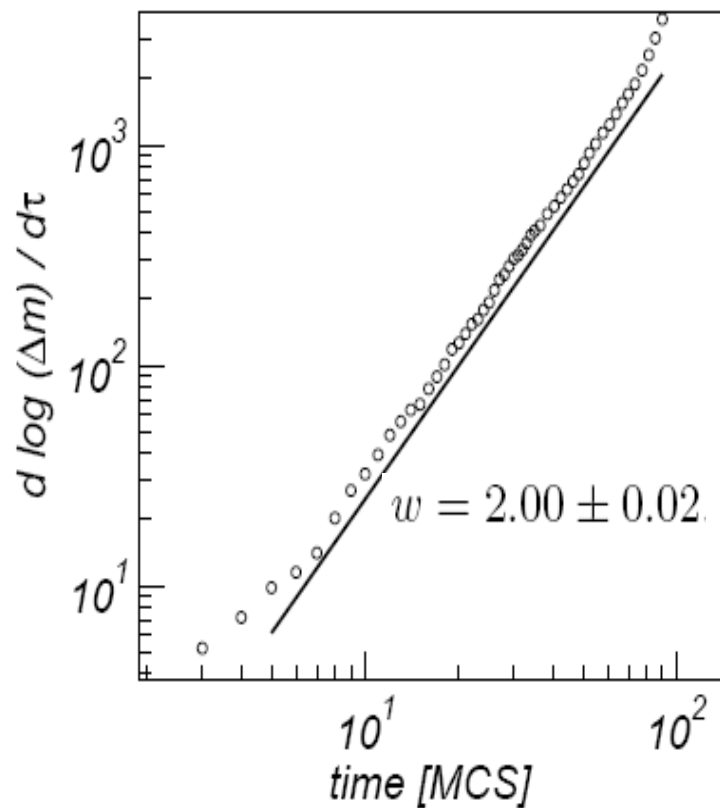
para $T = \frac{4}{9} T_c$

resultan $\beta h_{\text{sp}}^{(-)} \cong -0.714627$

$$m_{\text{sp}}^{(-)} \cong 0.745356$$

$$\Delta m \sim t^{-x} \quad x = 0.98 \pm 0.02$$

$$\Delta m^{(2)} \sim t^y \quad y = 1.03 \pm 0.02$$



$$\chi_T \sim (h - h_{\text{sp}}^{(-)})^{-1/2}$$

$$C_h \sim (h - h_{\text{sp}}^{(-)})^{-1/2}$$

$$\Delta m \sim (h - h_{\text{sp}}^{(-)})^{1/2}$$

obtenemos

(asumiendo, $d_c = 6$)

$$\beta = 0.49 \pm 0.01,$$

$$z = 2.01 \pm 0.03.$$

$$\nu = 0.249 \pm 0.004.$$

Coinciden con los teóricos (idénticos a Campo Medio)

$$\beta = 1/2, \quad \nu = 1/4 \quad \alpha = 1/2,$$

$$\gamma = 1/2, \quad \delta = 2,$$

Rushbrooke: $\alpha + 2\beta + \gamma = 2,$

Widom: $\gamma = \beta(\delta - 1).$

Josephson: $\nu d = 2 - \alpha$ $\left[\begin{array}{l} d_c = 6 \end{array} \right]$

Fisher: $\gamma = \nu(2 - \eta)$ $\left[\begin{array}{l} \eta = 0 \end{array} \right]$

Puntos spinodales en sistemas con interacciones de corto alcance

Pseudospinodal

Modelo de Potts de q estados

$$H = -J \sum_{nn} \delta(s_i, s_j) \quad J > 0 \quad k_B = J = 1$$

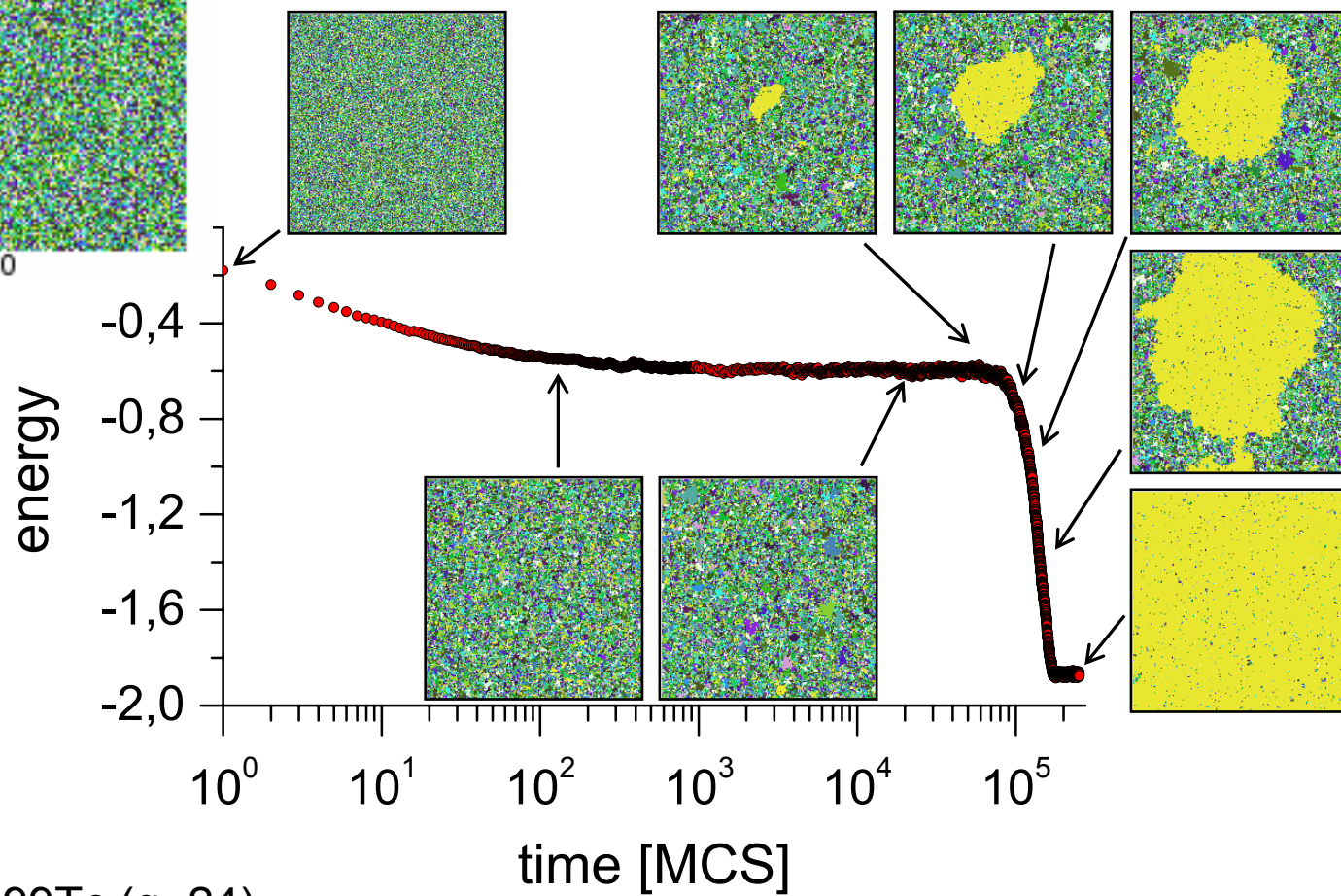
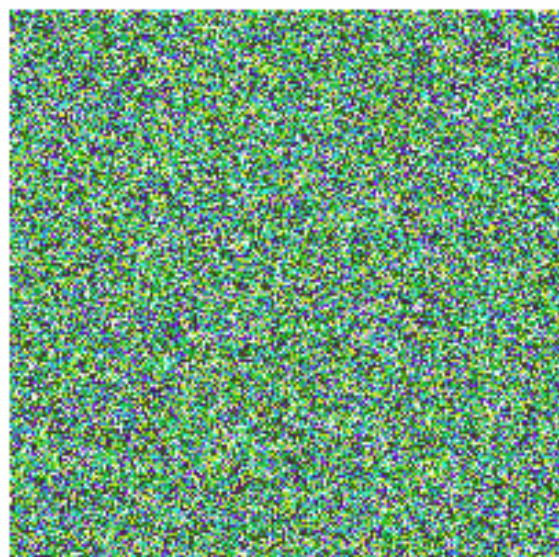
$$s_i = 1, \dots, q \quad \delta(s, s') \begin{cases} 1 & \text{if } s = s' \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- 2D →
- transición de 2° orden para $q = 2, 3, 4$
 - transición de 1° orden para $q \geq 5$

$$\frac{k_B T_c}{J} = [\ln(1 + \sqrt{q})]^{-1}$$

T. Kihara, Y. Midzuno, T. Shizume, *J. Phys. Soc. Japan.* **9**, 681 (1954).

Para $q > 4$ quencheando de $T \sim \infty$ a $T < T_t$



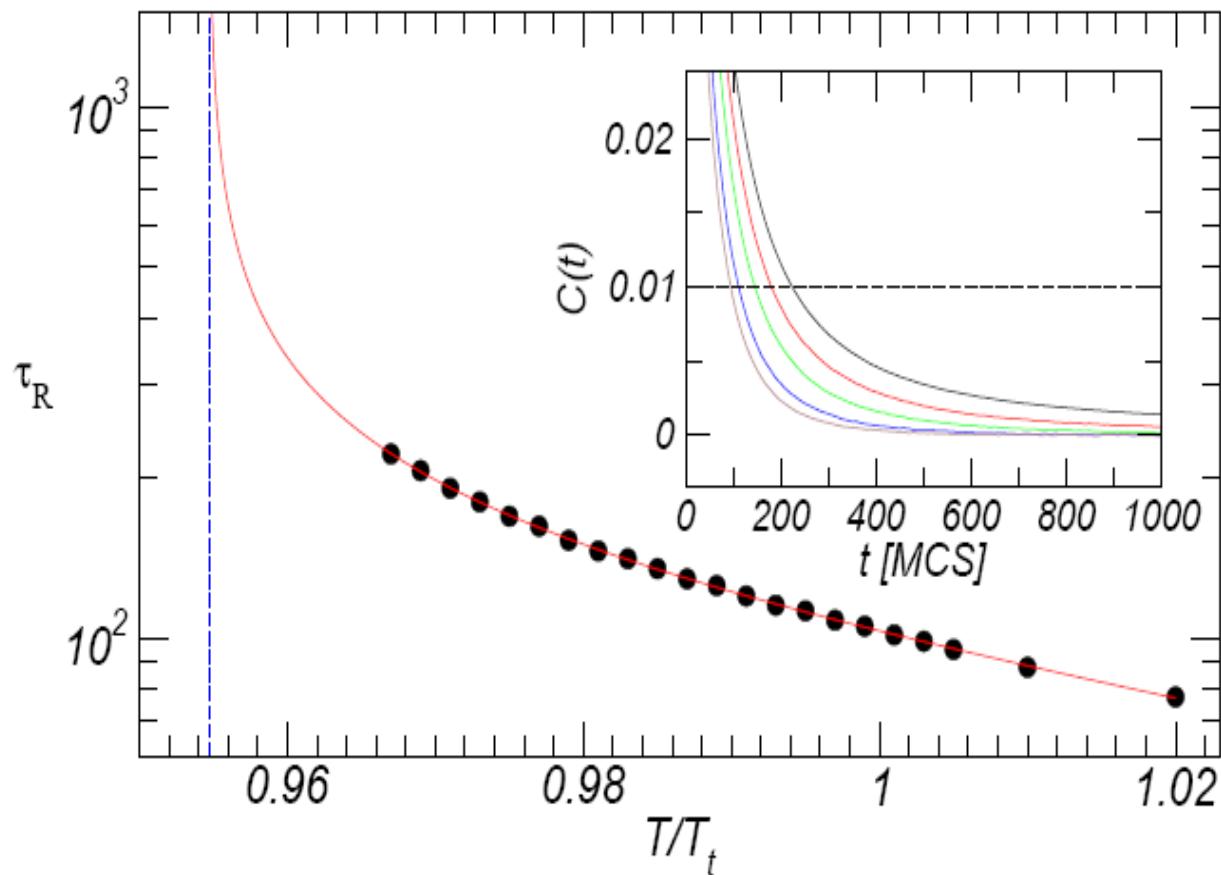
L=200 T=0.99T_c (q=24)

Correlaciones a dos tiempos \longrightarrow Tiempo de relajación

$$C(t_1, t_2) = \frac{q}{q-1} \left\langle \frac{1}{N} \sum_i^N \delta(\sigma_i(t_1), \sigma_i(t_2)) - \frac{1}{q} \right\rangle$$

$$t \equiv t_2 - t_1$$

$L=1000, q=96$



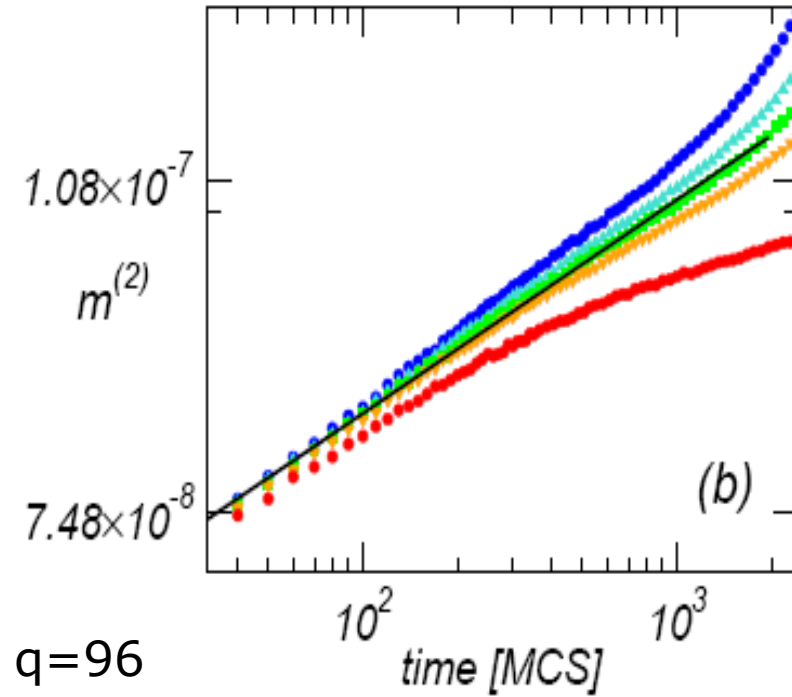
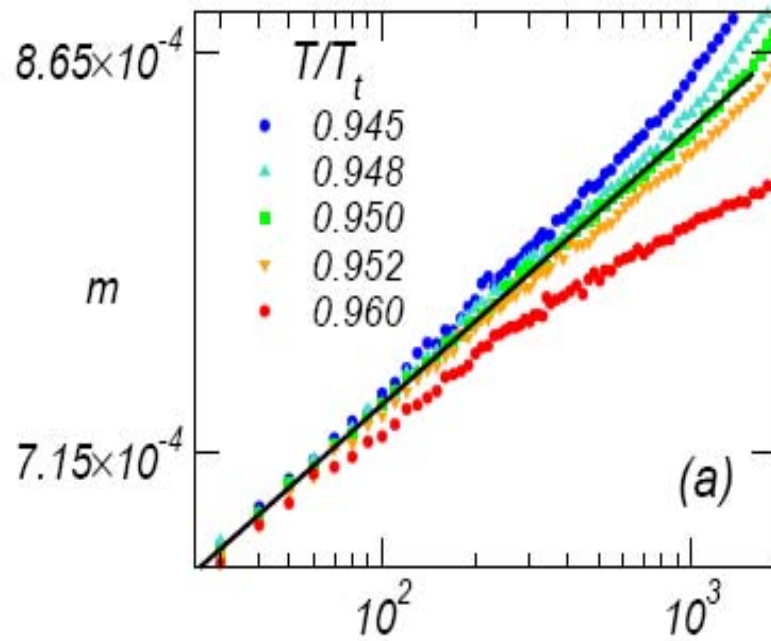
obtenemos:

$$\tau_R = A \left(\frac{T - T^*}{T_t} \right)^{-b}$$

$$T^* = 0.95 \pm 0.01$$

pseudospinodal

Sobreenfriado, $m_0 \sim 0$



$L=480, q=96$

$$T_{sp}^{(-)} = (0.950 \pm 0.002)T_t \quad \text{☺}$$

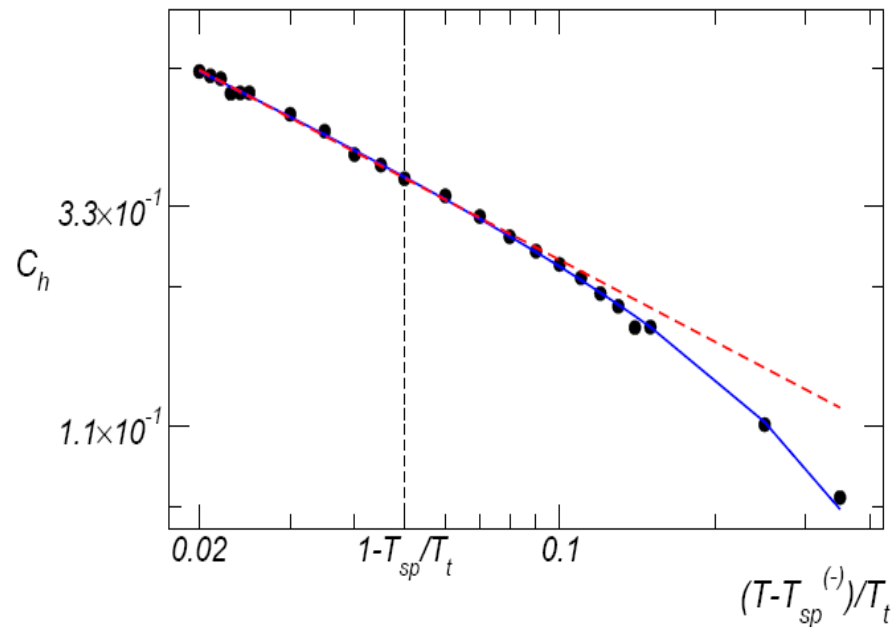
exponentes...



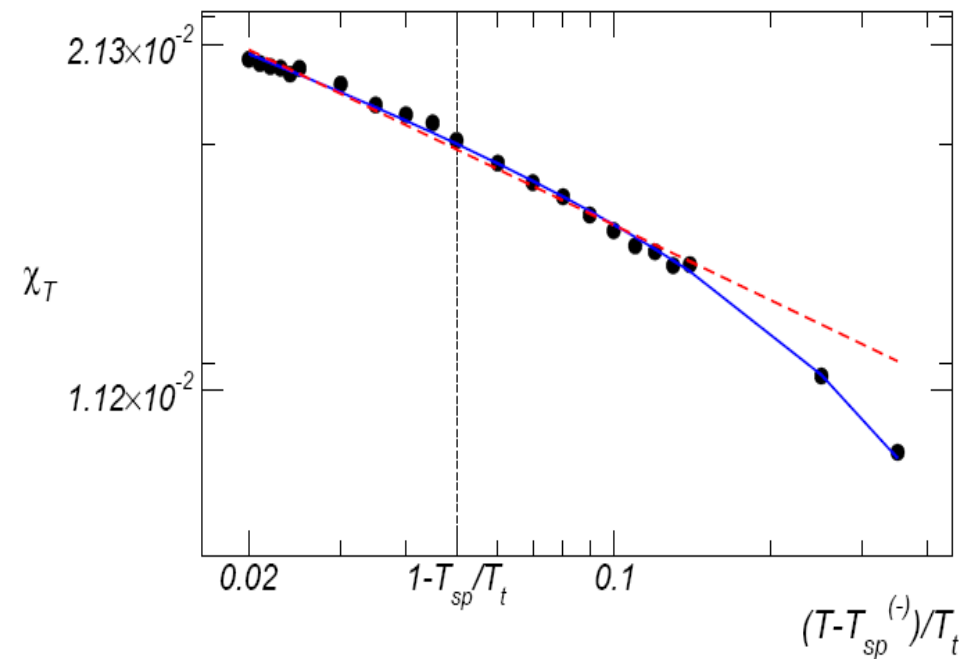
no mucho para decir por ahora

Usando $T_{sp}^{(-)} = (0.950 \pm 0.002)T_t$

Calor específico



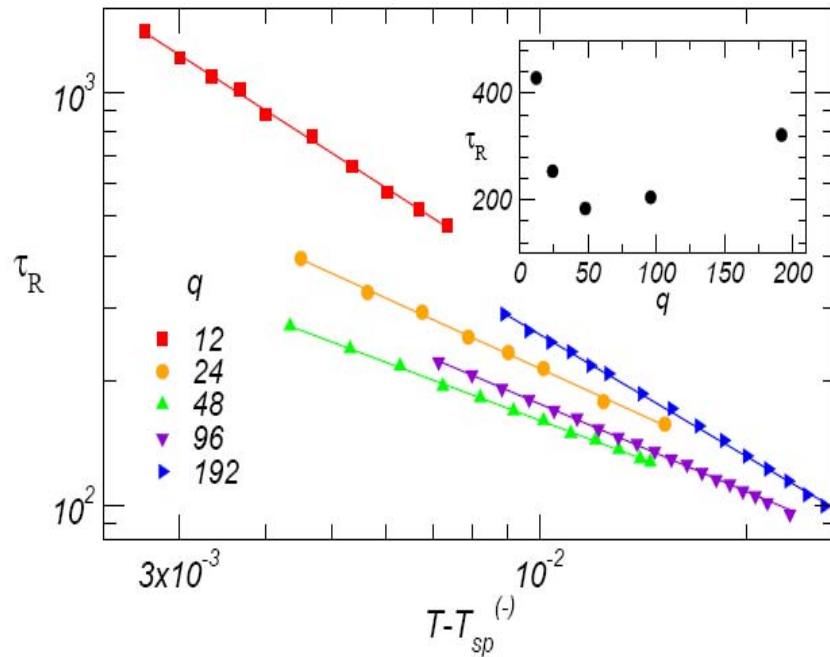
Susceptibilidad



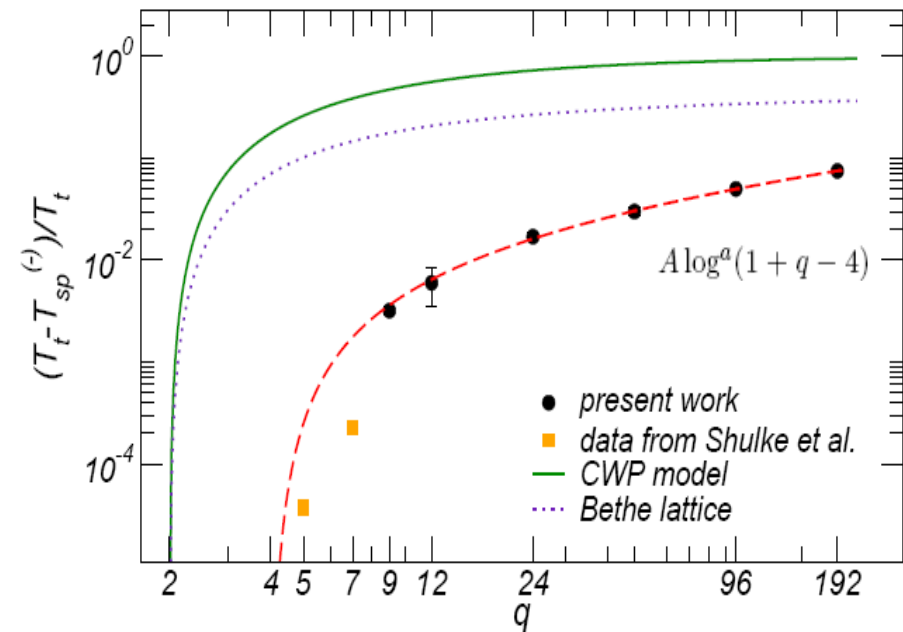
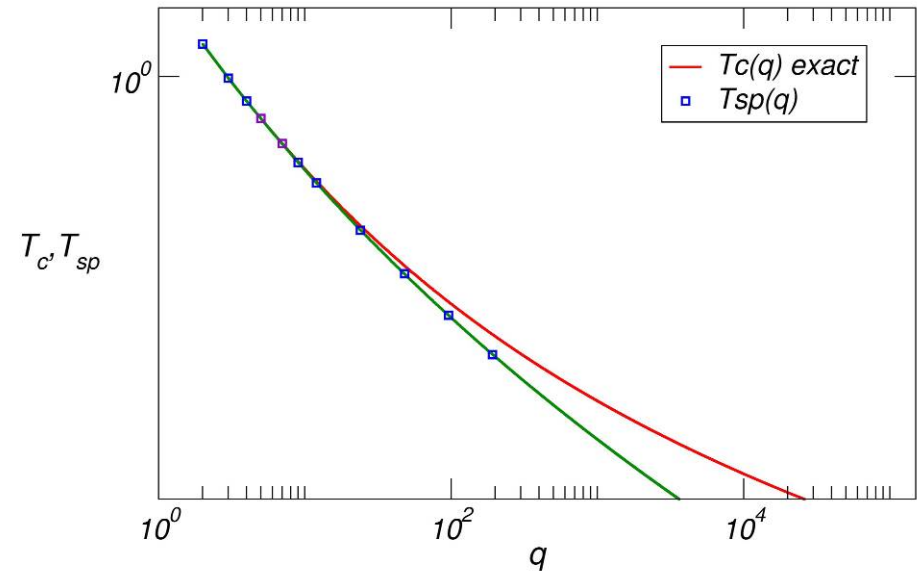
Calculados por fluctuaciones sobre el plateau de metaestabilidad

“divergen” como ley de potencia en la spinodal

Repetimos para varios q



| q | T_{sp} |
|-----|--------------------------|
| 12 | $(0.995 \pm 0.0025)T_c$ |
| 24 | $(0.9830 \pm 0.0015)T_c$ |
| 48 | $(0.9675 \pm 0.0025)T_c$ |
| 96 | $(0.9500 \pm 0.0025)T_c$ |
| 192 | $(0.930 \pm 0.0025)T_c$ |



Repaso

- Existe un comportamiento de scaling en dinámica crítica de no-equilibrio
- Tenemos un método sistemático para calcular puntos críticos y exponentes críticos a partir del scaling a tiempos cortos. STD.
- Es posible definir puntos spinodales a partir del STD

Pregunta:

¿Cómo hace el sistema para saber que se encuentra parado en un lugar en donde va a tener un tiempo de correlación divergente, en los primeros pasos de la dinámica?

“Short-time dynamic approach to the equilibrium state predicting the future ...” (B. Zheng)