급냉된 2차원 Ising 계의 축척거동에 대한 엔트로피의 변화

개 요

2차원 Ising 계가 최인접 스핀쌍 교환을 갖고 비평형 상분리를 할 때 보이는 구조함수의 축척거동을 조사했다. 이때 입자들의 운동량 전달에 대한 요동의 복잡성을 측정하기 위하여 구조함수의 Shannon 엔트로피를 사용했다. 축척된 구조함수의 엔트로피와 비축척구조함수의 엔트로피의 관계는 시간진화의 마지막 단계에서 근사적으로 선형성을 보이는 것을 발견했다.

1 서 론

최근에 상분리 기구(mechanism)에 대한 연구가 실제실험으로, 전산실험으로, 또 이론적 접근으로 다양하게 진행되고 있다.[1, 2, 3, 4] 그러나 비평형하의 상분리 기구에 대한 기본적인 연구는 아직 미흡하다고 생각된다. 여태까지의 이성분계에 대한 1차 비평형 상전이는 주로 최인접 입자의 상호 교환을 이용하는 동역학 모형을 전산실험하여 연구되어 왔다. (A, B) 입자계에 대한 이러한 조사를 위하여 본 논문에서는 최인접 입자 상호교환 동역학 모형을 사용한다. 이 모형에서는 개개의 입자는 미세평형조건(*detailed balance condition*)을 만족하면서 움직이는데 이 조건은 계가 최종적으로 열적 평형상태에 도달하도록 해준다. 또 평형상태의 입자분포를 결정짓는 해밀토니안으로 일반화된 Ising Hamiltonian을 사용한다.

이 실험에서 20%의 A입자를 가지는 계를 완전 무질서 입자배열 상태에 해당하는 무한온도로 부터 임계온도 T_c의 0.59배(0.59T_c)까지 순간적으로 급냉시킨다. 고온에서 단일 상 영역에 있던 계가 상 공존곡선의 아래쪽온도로 급냉되면 점차적으로 두개의 상이 공존하는 평형상태로 시간진화를 하게된다. 계가 열적으로 유도된 이러한 시간진화를 함에 따라 입자밀도의 공간적인 주기적 요동(spatial periodic fluctuation)이 나타난다. 계가 두개의 상으로 분리진화 함에 따라 요동의 파장이 길어지게 되는데 이것이 구조함수 대 파장(또는 파수) 곡선에 반영되어 나타난다.

이성분계가 두개의 상으로 비평형 상분리되는 후반부에서 구조함수가 동역학적 축척거동을 보인다는 것이 실제실험과 전산실험으로 알려져 있다. 우리는 구조함수의 축척을 재정의 하고 이 구조함수들 간의 축척의 정도를 정량화 하고자 한다. 또한 구조함수가 축척거동을 보일 때, 구조함수에 어떤 특성이 있는가 알아보기 위해서 구조함수의 변화특성을 나타내는 Shannon Entropy의 변화에 초점을 둔다. 이 엔트로피는 소수입자인 A 입자가 공간에서 반복되는 주기의 복잡성을 나타낸다.[5, 6, 7]

2 구조함수와 Shannon Entropy

2.1 구조함수

먼저 체적 $V = L^d$ 인 길이 L 의 d 차원 격자배열을 고려하자. 이러한 격자배열은 주기적 경계조건을 만족시키고 격자위치는 $\vec{x} \equiv (x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_d)$, $x_i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ L-1$ 로 주어진다. N_A개의 고려할 A입자가 격자점의 일부에 무질서하게 분포되어 있고, A입자가 위치하지 않는 모든 격자점은 빛을 산란시키지 못하는 비어있는 격자로 가정한다. 빛이 확률진폭 $c(\vec{x})/\sqrt{N_A}$ 로서 $\vec{x}$ 의 위치에 있는 A입자에 들어와서 확률진폭 $\exp(i2\pi\vec{k}\cdot\vec{x})/\sqrt{V}$ 로서 A입자에 $\vec{k} \equiv \vec{n}/L$만큼의 운동량을 전달하고 산란된다고 가정하자. 여기서 $\vec{n} \equiv (n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_d)$, $n_i = 0, 1, 2, \cdots, L-1$ 이며 $c(\vec{x})$는 A입자가 위치한 곳에서는 1, 그렇지 않으면 0이 된다. 그러면 위치 $\vec{x}$에 있는 A입자에 빛이 들어와서 운동량전달 $\vec{k}$를 주게되는 확률진폭은 $P_a(\vec{x},\vec{k}) = (c(\vec{x})/\sqrt{N_A})(\exp(i2\pi\vec{k}\cdot\vec{x})/\sqrt{V})$가 된다. 빛이 계에 들어와서 $\vec{k}$를 주고 산란되 는 확률진폭 $P_a(\vec{k})$ 는 $P_a(\vec{k})$=$\sum_{\vec{x}} P_a(\vec{x},\vec{k})$ 이며 확률은

$$
\begin{aligned}
P(\vec{k}) &= P_a(\vec{k})P_a^*(\vec{k}) \\
&= \frac{1}{V}\sum_{x_i,\Delta x_i}\left[\frac{1}{N_A}c(\vec{x})c(\vec{x}+\Delta\vec{x})\right]\exp(i2\pi\vec{k}\cdot\Delta\vec{x})
\end{aligned}
$$

이다. 여기서 $\vec{x}$의 성분, x_i 에 대한 합은 0부터 $L-1$까지 이고 Δx_i에 대한 합은 $-x_i$부터 $L-1-x_i$까지이다. 주기적 경계조건을 고려하면 $\Delta x_i < 0$인 경우에 Δx_i대신에 $\Delta x_i + L$ 로 재 정의 할 수 있고 이때는 Δx_i는 0부터 $L-1$까지의 값을 가진다. 그러면 $\vec{x}$를 $\vec{x}'$으로 $\Delta\vec{x}$를 $\vec{x}$로 재표기하여

$$
P(\vec{k}) = \frac{1}{V}\sum_{0<=x_i<=L-1}\rho_A(\vec{x})\exp(i2pi\vec{k}\cdot\vec{x}) \tag{1}
$$

이다. 여기서 $\rho_A(\vec{x})$는 $\vec{x}$에서의 A입자의 밀도함수로서

$$
\rho_A(\vec{x}) =< c(0)c(\vec{x}) >\equiv \frac{1}{N_A}\sum_{0<=x_i'<=L-1} c(\vec{x}')c(\vec{x}'+\vec{x}) \tag{2}
$$

이고, $\vec{x}$는 $\vec{x}'$의 위치를 원점으로 하는 새로운 좌표로써 주어진다. 그리고 이때의 쌍상관함수(pair correlation function) $G(\vec{x}) \equiv (1/N_A) < c(0)c(\vec{x}) >$는 $\vec{x}$만큼 떨어져 있는 A입자쌍 을 발견할 확률로 해석된다.

지금 $< c(0)c(\vec{x}) >$의 평균을 A입자의 평균밀도로 정의하면

$$
\begin{aligned}
\bar{\rho}_A &\equiv \overline{< c(0)c(\vec{x}) >} \\
&\equiv \frac{1}{V}\sum_{\vec{x}} < c(0)c(\vec{x}) > \\
&= \frac{N_A}{V}
\end{aligned} \tag{3}
$$

로 쓸 수 있다. $\Delta\rho_A(\vec{x}) \equiv \rho_A(\vec{x}) - \bar{\rho}_A$는 $\vec{x}$만 큼 떨어진 곳에서의 A입자의 평균밀도로 부터의 밀도요동을 나타낸다. $\vec{k} \equiv \vec{n}/L$로 두고 식(1)을 $\Delta\rho_A(\vec{x})$를 이용

하여 다시 쓰면

$$P'(\vec{n}/L) = \sum_{\vec{x}} \Delta\rho_A(\vec{x}) \exp(i2\pi(\vec{n}/L)\cdot\vec{x}) \tag{4}$$

이 되고 이때의 $P'(\vec{n}/L)$은 $\vec{n} \neq 0$이면 $P(\vec{n}/L)$과 같고 $\vec{n} = 0$ 이면 0이된다. 위의 식을 퓨우리에 변환하여 다음을 얻는다.

$$\begin{aligned}\Delta\rho_A(\vec{x}) &= \sum_{\vec{n}\neq 0} P(\vec{n}/L)\exp(-i2\pi(\vec{n}/L)\cdot\vec{x}) \\ &= \sum_{\vec{n}\neq 0} P_r(\vec{n}/L)\bar{\rho}_B \cos(2\pi(\vec{n}/L)\cdot\vec{x}) \end{aligned} \tag{5}$$

여기서$S \equiv \sum_{\vec{n}\neq 0} P'(\vec{n}, L)$, $P_r(\vec{n}/L) \equiv P(\vec{n}/L)/S$, $S = 1 - P(0) = 1 - \frac{N_A}{V} = \frac{N_B}{V} \equiv \bar{\rho}_B$로 두었다. 위의 식에서 $\sum_{\vec{n}} P(\vec{n}/L) = \sum_{\vec{n}\neq 0} P'(\vec{n}/L) + P(0) = 1$ 이고 $\sum_{\vec{n}\neq 0} P'(\vec{n}, L) \neq 1$ 을 고려했다. 이제 식(5)를 다음과 같이 해석할 수 있다. 우선 위치$\vec{x}$에 있는 A입자가 $\vec{n}$방향으로 사영된 위치를 가진다고 하자. 또, $\vec{n}$ 방향으로 사영된 A입자의 평균밀도로 부터의 요동이 주기 $L/|\vec{n}|$ 이고 진폭이 $\bar{\rho}_B$인 cosine함수로 요동하는 모우드(mode)를 $\vec{n}$종 밀도 요동($\vec{n}$-type density fluctuation)이라고 정의하자. 그러면 $P_r(\vec{n}/L)$ 을 $\vec{n}$ 종 밀도요동을 발견할 확률이라 할 수 있다. 이것은 $P(\vec{n}/L)$ 에서 $\vec{n} = 0$를 제외시키고 재규격화 시킨 것이다.

식(1)의 우변의 합에서 $\cos(2\pi n_i x_i/L) = \cos(2\pi(L - n_i)x_i/L)$ 이므로 임의의 $n_i' = L - n_i$ 에 대해 $P(\vec{n}/L) = P(\vec{n}'/L)$ 이 성립함에 유의하자. 따라서 $P(\vec{n}/L)$은 $0 \leq n_i \leq L/2$ 의 범위에서만 다른값을 가지게됨을 알 수 있다.

2.2 Shannon 엔트로피

문자 t로 표시되는 입자배열상태 t''로 부터 얻어지는 $P(\vec{k} = \vec{n}/L)$을 $P(\vec{k}; t)$ 라 하자. 이때 $P(\vec{k}; t)$의 Shannon 엔트로피 $H(t)$는[8]

$$H(t) = \sum_{\vec{k}} \log_2[1/P(\vec{k}; t)]P(\vec{k}; t) \tag{6}$$

와 같이 정의한다. 이것은 산란양상(scattering pattern)의 복잡성 또는 계 내에서 고려되는 입자(A입자)의 밀도요동의 양상의 복잡성으로 해석될 수 있다. 운동량 전달의 방향과 크기를 모두 고려하는 산란세기로서의 구조함수 $P(\vec{k})$는 실질적으로 심한 요동을 보이므로 적절한 평균을 취하여 이 요동을 감소시켜줄 필요가 있다. 기본격자 크기보다 충분히 큰 거리를 고려하는 경우에는 계의 구조함수가 등방적 분포를 이루게 될 것이므로 여기서는 다음과 같은 구조함수의 구각 평균(circular average)을 생각한다.

$$P(n/L; t) = \frac{1}{N_n} \sum_{\vec{n}'} P(\vec{n}'/L; t) / \sum_{n} P(n/L; t) \tag{7}$$

여기서 $\vec{n}'$에 대한 합은 $|\vec{n}| - 1/2) < |\vec{n}'| \leq |\vec{n}| + 1/2)$ 의 구각내에 있는 모든 $\vec{n}'$에 대한 합이며, N_n은 고려하는 구각내의 모든 격자점의 수이다. 여기서 얻

어지는 구각 평균된 구조함수(이하 간단히 구조함수)$P(k = n/L; t)$ 는 운동량 전달이 방향과 무관하게 그 크기만 k가 되는 빛의 산란세기로 해석 할 수 있고 동시에 n종 밀도요동의 확률이 된다. 그리고 이러한 구조함수 $P(n/L; t)$로 부터 얻어지는 엔트로피 $H(t)$는 역시 산란 또는 밀도요동 양상의 복잡성으로 해석할 수 있다.

3 전산실험의 방법과 분석

준비한 이성분계의 최인접 AB입자쌍의 수(N_{AB})가 초기상태의 N_{AB} 의 약 17.8%가 될 때 까지 시간진화시키면서, N_{AB}가 바로앞에 저장된 배열의 N_{AB}의 약 3.9%가 감소될 때 마다 다시 저장을 시켰다. 그 결과 44개의 배열이 저장 되었고 그것을 각각 0부터 43까지의 번호를 붙여 구분하였다. 저장된 각 배열중 t(0-43)번째 배열 즉, t''배열로 부터 퓨우리에 변환에 의해 그 배열의 구조함수$P(\vec{k} = \vec{n}/L\ ; t)$를 얻고 이를 다시 구각평균하여 구각평균된 구조함수 $P(k = n/L\ ; t)$를 얻는다. 그리고 $Lk = n$ 에 따른 $P(n/L\ ; t)$ 분포의 그림에서 요동을 줄이기 위하여, 초기상태는 동일하지만 이후의 전이확률을 결정해주는 난수(random number)를 다르게 준 실험을 18번을 반복하여 그것으로 부터 각 배열의 ensemble평균된 구조함수를 얻었다. 위에서 얻은 구조함수를 $\sum_{n=1}^{180} P(n/L\ ; t) = 1$로 규격화시키고, 그 규격화된 구조함수로서 다음과 같은 분석을 할 수 있다.

$n(= Lk)$ 과 $P(n/L\ ; t)$의 관계를 그린 그림1 에서는 특정 파수 k근처에서 구조함수 $P(n/L\ ; t)$가 정점을 이루고 그 정점이 시간진화에 따라 작은 파수 쪽으로 이동해 감을 볼 수 있다. 이 그림에서는 배열 5, 9, 13, 17, 21, 25, 29, 33, 37, 41번 의 10개의 구조함수의 분포를 나타내었는데, 배열 5번(N_{AB} =0.81962)부터 21번(N_{AB}=0.4337)까지를 점선으로, 25번(N_{AB} =0.3699)부터 41번(N_{AB}=0.19573)까지는 실선으로 하였다. 위와 똑같은 배열들(배열 5, 9, 13, 17, 21, 25, 29, 33, 37, 41번))에 대하여 축척인자를 $LK_1(t)$ 로 하여 구조함수 $P(n/L\ ; t)$를 축척시켜 $k/K_1(t)$ 와 $LK_1(t)P(n/L; t)$ 의 관계를 그린 것이 그림2 이다. 시간진화의 전반부(점선그림:배열 5, 9, 13, 17, 21)에서 구조함수의 겹쳐지는 정도가 시간진화의 후반부(실선그림:배열 25, 29, 33, 37, 41)에서 훨씬 좋다는 것 (즉, 축척이 잘 됨)을 알 수 있다. 축척된 구조함수의 엔트로피 $H_s(t) = H(t) - \log[LK_1(t)]$ 와 축척되지 않은 구조함수의 엔트로피 $H(t)$의 관계를 그린 그림3 에서는 축척의 정도가 작게 나타나는 시간진화의 전반부에서는 비선형성을 보이는 반면, 축척이 보다 잘 되는 후반부(배열14-43)로 가면서 근사적으로 선형성을 보이고 있음을 알 수 있다.

4 결 론

우리는 위에서 2차원 Ising 계에 최인접 입자 상호 교환 모형을 적용하여 급냉시에 나타나는 상전이 현상을 구조함수의 축척거동에 초점을 맞추어 조사 하

였다. 구조함수의 특성을 보이는 매개변수로서 엔트로피를 도입하여 축척된 구조함수의 엔트로피와 축척되지 않는 구조함수의 엔트로피의 관계를 그림으로 그렸다. 시간진화의 후반부(N_{AB}=0.57293의 배열14번 이후)로 갈수록 이 관계가 선형적으로 되어가는 것을 볼 수 있었다. 이로부터 다음의 유도가 가능하다.

우리가 고려한 축척은 시간진화에 따라 변화하는 여러 구조함수의 겹쳐짐을 조사한것으로, 이러한 구조함수의 겹쳐짐이 좋아진다는 사실은 곧 시간진화에 따르는 계의 morphology가 유사하다는 것을 보여준다고 생각된다. $H_s(t)$와 $H(t)$ 의 그림에서는 일견, 후반부에서 그 관계가 선형성에서 다소 벗어나는 이유는 실험의 격자수를 256×256으로 제한했기 때문으로 간주된다. 입자수를 더 크게 하고 회귀 분석을 통하여 그 거동을 더욱 상세하게 조사하는 것이 앞으로의 과제이다.

참고문헌

[1] J. D. Gunton, M. S. Miguel and P. S. Shani, in Phase Transition and Critical Phenomena, edited by C. Domb and J. L. Lebowitz, (Academic, New York, 1983), Vol. 8.

[2] K. Binder and D. Stauffer, Adv. Phys. 25, 343(1979); Phys. Rev. Lett. 33, 1006(1974).

[3] W. H. Zurek, Phys. Rev. A. 40, 4731(1983).

[4] J. H. Kim, K. C. Kim, S. C. Kim and S. D. Choi, J. Korean Phys. Soc. 24, 431(1991).

[5] M. Hennion, D. Ronzaud and P. Guyot, Acta Metall. 30, 599(1982).

[6] J. L. Lebowitz, J. Marrow and M. H. Kalos, Acta Metall. 30, 297(1982).

[7] C. Knobler and N. C. Wong, J. Phys. Chem. 85, 1972(1981).

[8] J. H. Kim, Ph.D. dissertation, Univ. of Michigan (1988).

[9] J. H. Kim, J. Y. Ryu, and S. D. Choi, Phys. Rev. B. 48, 836(1993-II)