

Дальневосточный федеральный университет

Школа Естественных наук К вопросу о фазовом переходе парамагнетик-спиновое стекло в модели Изинга

П.Д.Андрющенко

PitAndMind@gmail.ru

Дальневосточный Федеральный Университет, Школа Естественных Наук, кафедра компьютерной безопасности, г. Владивосток, ул. Суханова 8, 690950

К.Н.Нефедев

knefedev@phys.dvgu.ru

Дальневосточный Федеральный Университет, Школа Естественных Наук, кафедра компьютерных систем, г. Владивосток, ул. Суханова 8, 690950

Актуальность

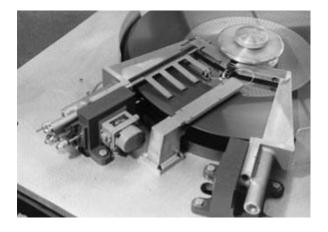














Используемые определения

Конфигурация - магнитное состояние системы спинов, которое характеризуется уникальным распределением магнитных моментов по направлениям в пространстве Вырождение - существование различных конфигураций системы, для которых некоторая физическая величина принимает одинаковые значения.

Фрустрация - (от лат. frustratio

– неудовлетворённость) наличие фрустраций в системе характеризуется наличием спинов, для которых основное состояние (ground state) не достижимо даже при T=0

Используемые определения

Спиновое стекло - магнитная фаза, в которую магнетик переходит ниже определённой критической температуры (температура замерзания T_f). В данной фазе наблюдается термодинамическое неравновесное метастабильное магнитное состояние, характеризующееся «замороженным» пространственным распределением ориентации спиновых магнитных моментов Распределение Гиббса – закон распределения вероятностей всех возможных конфигураций статистического ансамбля. Вероятность конфигурации есть функция температуры, спинового

• Совокупность элементов, по которым происходит протекание, называется перколяционным кластером. Будучи по своей природе связным случайным графом, в зависимости от конкретной реализации он может иметь различную форму. Поэтому принято характеризовать его общий размер. Порогом протекания называется количество элементов перколяционного кластера, отнесенное к общему количеству элементов рассматриваемой среды.

R = n/N

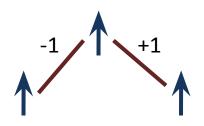
• Ввиду случайного характера переключений состояний элементов среды, в конечной системе чётко определенного порога (размера критического кластера) не существует, а имеется так называемая критическая область значений, в которую попадают значения порога перколяции, полученные в результате различных случайных реализаций.

Используемые определения

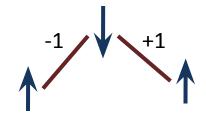
Вырождение

$$M = 4 - 2 = 2$$

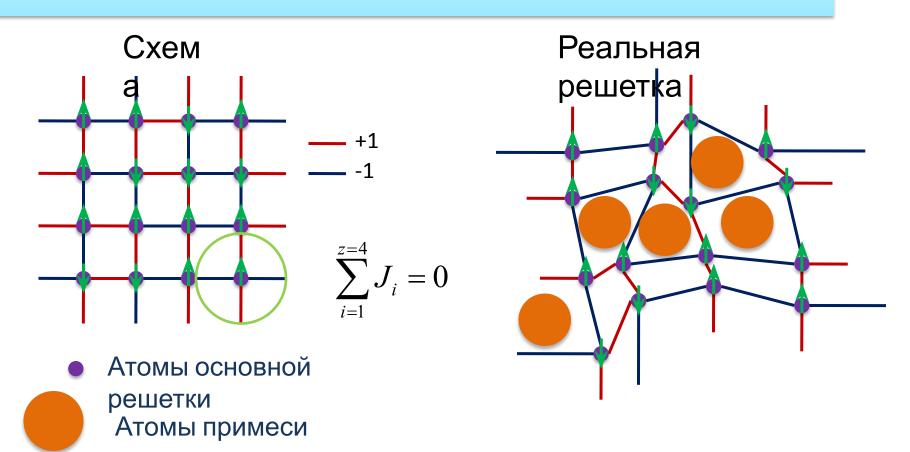
Фрустрация



$$E = -1 + 1 = 0$$



$$E = 1 - 1 = 0$$



Фрустрированная модель спинового стекла на простой квадратной решетке со спинами Изинга

Система описывается с помощью функционала энергии, называющегося гамильтонианом, который ассоциирует каждую уникальную конфигурацию системы с конкретным значением энергии

$$H = -\sum_{i \neq j} J_{ij} S_i S_j + h \sum_i S_i$$
 [2]

 \mathbf{J}_{ij} - обменный интеграл

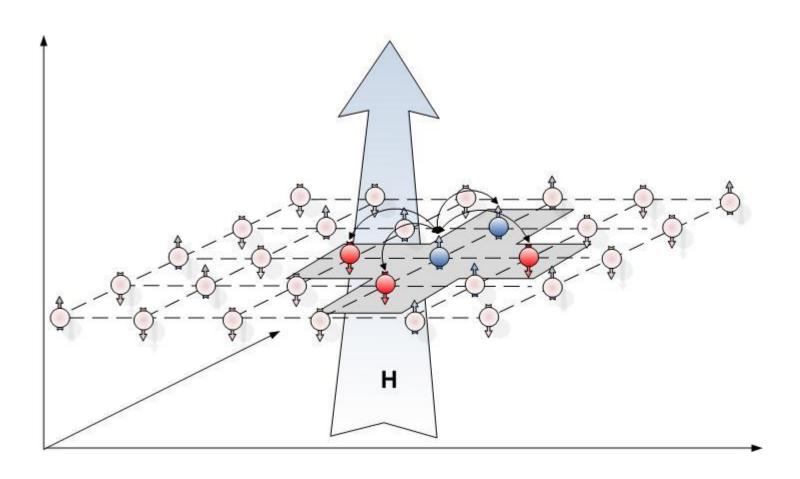
h - внешнее магнитное поле

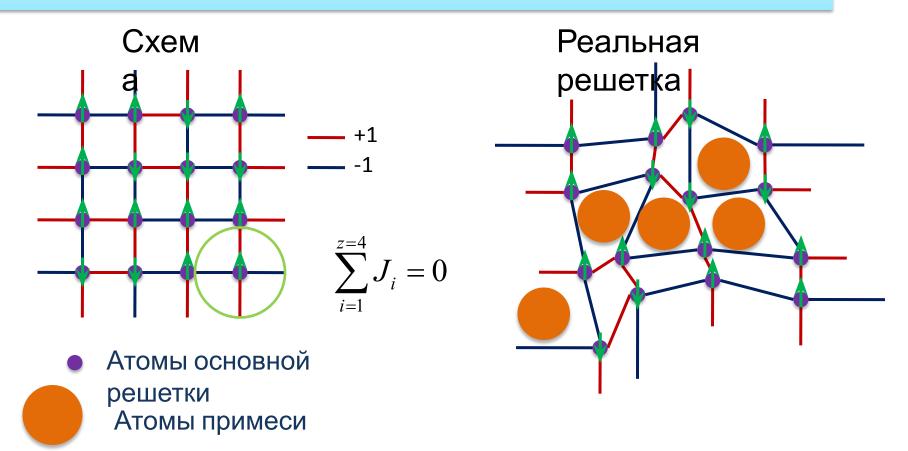
При этом вероятность любой из возможных конфигураций задается распределением Гиббса.

$$P(X = x) = \frac{1}{Z(\beta)} \exp(-\beta E'(x))$$

В нашей модели каждый спин взаимодействует только с ближайшими z = 4 соседями посредством прямого ферромагнитного или антиферромагнитного обменного взаимодействия, распределенного случайным образом в узлах решетки, с условием, что

$$\sum_{i=1}^{z=4} J_i = 0$$





Фрустрированная модель спинового стекла на простой квадратной решетке со спинами Изинга

Спиновое стекло

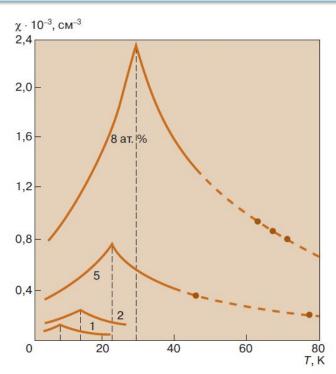
СПИНОВОЕ СТЕКЛО - магнетик, в котором ниже определённой температуры (температура замерзания Тf) возникает термодинамическое неравновесное метастабильное магнитное состояние, которое характеризуется «замороженным» (отсутствуют термодинамические флуктуации) пространственным распределением ориентации спиновых магнитных моментов СuCo AgMn

AuFe CuMn AuMn

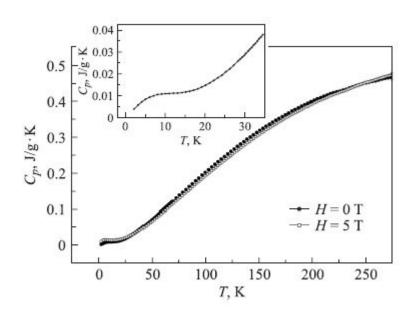
$$Cu_{1-x}Mn_x$$
 $CsNiFeF_6$

$$Au_{1-x}Mn_x$$
 $Eu_xSr_{1-x}S$ $CdCr_{1,7}In_{0.3}S_4$

Экспериментальные данные



Низкополевая магнитная восприимчивость $\chi(T)$ сплавов AuFe с концентрацией железа 1, 2, 5 и 8 ат. % [3]



Зависимость удельной теплоемкости от температуры в полях H = 0 и 5T. На вставке показана низкотем \mathfrak{p} турная область при H = 0 T [4]

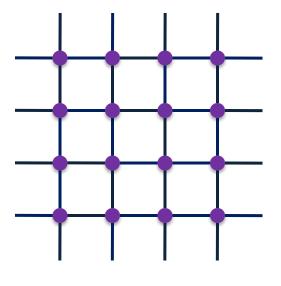
[3]Г. А. Петраковский, <u>Спиновые стекла</u>, Соросовский образовательный журнал, т. 7, №9, 2001

Разработан программный инструментарий для моделирования динамики физических величин, характеризующих систему с заданным (в т.ч. знакопеременным) короткодействующим взаимодействием, а также исследования фазовых переходов в системах с разными значениями обменного интеграла (ферромагнетик, антиферромагнетик, спиновое стекло).

Алгоритм реализует схему Монте – Карло.

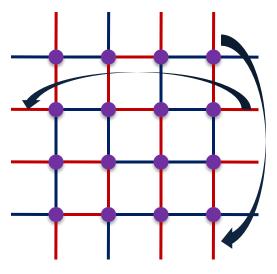
1. Создание решетки

Линейный размер = n



- 1.1 Создание массива с магнитными моментами(спинами) n^2
- 1.2 Создание массива со связям $2m^2$
- 1.2 Создание массива энергий n^2

2. Создание фрустраций



Задача: Сделать решетку фрустрированной (для спинового стекла)

Сложность заключается в том, что необходимо соблюсти граничные условия

J	1,6	26	3,6	4,6	5,6	6,6	2
6,1	1,1	2,1	3,1	4,1	5,1	6,1	1,1
6,2	1,2	22	3,2	42	5,2	6,2	1,2
6,3	1,3	2,3	3,3	4,3	5,3	6,3	1,3
6,4	1,4	2,4	3,4	4,4	5,4	6,4	1,4
6,5	1,5	2,5	3,5	4,5	5,5	6,5	1,5
6,6	1,6	2,6	3,6	4,6	5,6	6,6	1,6
	1,1	2,1	3,1	4,1	5,1	6,1	

$$\sum_{i=1}^{z=4} J_i = 0$$

Мелкие системы (порядка 5000 элементов) конструируюстя без ошибок

В более крупных системах возникают ошибки (порядка

3. Монте-Карло

При моделировании возможно задать количество Монте-Карло проходов

Каждый Монте-Карло проход состоит:

- 1.Случайным образом генерируем число от 1 до .Выбранное число соответствует порядковому номеру атома в решетке.
- 2. Считаем его энергию Е1, записываем. Затем переворачиваем его магнитный момент и считаем энергию Е2.
- 3. Сравниваем энергии Е1 и Е2. Если Е1>Е2, то вероятность того, что спин перевернется из исходного состояния Р = 1, если же E1<E2, то вероятность высчитывается по формуле: $P=e^{-T}$

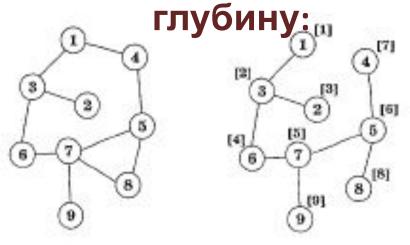
$$P = e^{-T}$$

- 4. Генерируем число S случайным образом от 0 до 1. Считаем, что спин перевернулся, если S > P. Иначе, спин остается в исходном состоянии.
- 5. Повторяем пункты 1-4 n^2 раз.

4. Расчет параметра порядка

Для разделения парамагнитной и спинстекольной фаз предлагается использовать параметр «порядка», который представляет собой отношение количества элементов, находящихся в максимальном кластере с заданной энергией -4 (-4 и -2) к общему числу элементов, т.е. порог протекания или порог перколяции. Легко видеть, что данная задача сходна с задачей обхода графа. Существуют несколько возможных алгоритмов обхода графа.

4.1 Суть метода обхода в



- 1. Поиск начинается с некоторой фиксированной вершины V1
- 2. Рассматривается вершина V2, смежная с V1. Она выбирается.
- 3. Процесс повторяется с выбранной вершиной.
- 4. Если на очередном шаге мы работаем с вершиной Vn, и нет вершин, смежных с ней и не рассмотренных ранее, то возвращаемся из вершины Vn к вершине, которая была до нее. Если эта вершина V1, то процесс просмотра закончен

4.2 Суть метода обхода в



При поиске в ширину сначала рассматриваются все вершины, смежные со стартовой, то есть находящиеся от нее на расстоянии 1, затем вершины, находящиеся от старта на расстоянии 2, и т.д.

Такой порядок обхода обеспечивается благодаря тому, что создается очередь. Рассматривается первая вершина, в конец очереди записываются смежные с ней вершины, затем рассматривается следующая в очереди, добавляются ее смежные вершины в конец очереди и так до тех пор, пока есть вершины в очереди. Именно такой подход мы и реализовали в программе.

5.Подсчет намагниченности, энергии. Вывод.

Намагниченность считается простым суммированием всех спинов.

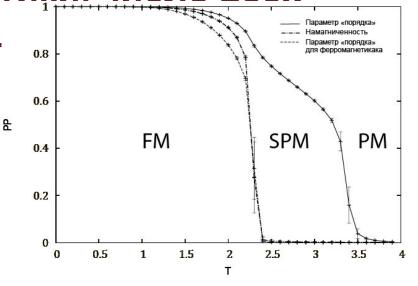
Общая энергия считается суммированием всех энергий спинов системы

Реализован вывод результатов непосредственно в консоль, а так же вывод усредненных значений параметра порядка, энергии и намагниченности в текстовый файл для дальнейшей обработки

Результаты

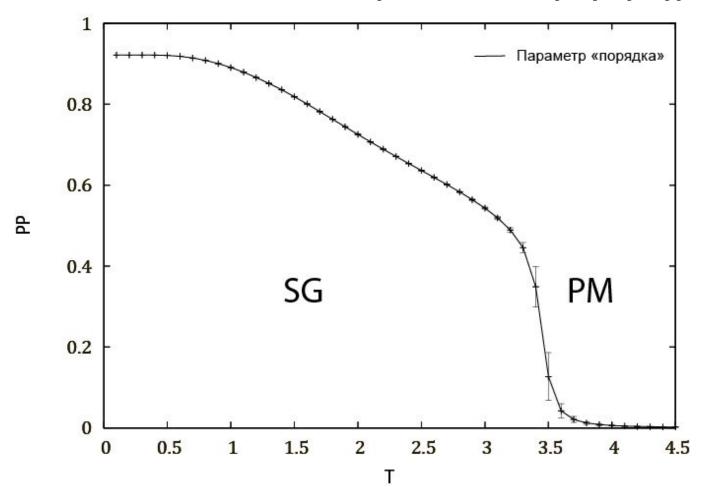
- 1. Ферромагнетик 2D ПК 4 соседа
- 2. Подпись указать -4, М, (-4)+(-2), число МК проходов, размер системы, 1000х1000 характеристики. число всех

конфигураь



Результаты

2. Спиновое стекло (подпись (-4)+(-2))



• Зависимость пп от числа проходов МК

Сверхмасшабирование и дальнейшее развитие исследований

- 1) Будет проведено распараллеливание алгоритма с целью увеличения числа частиц в системе и генерации большего числа конфигураций за МК проход.
- 2) Планируется рассчитать поведение исследуемых систем во внешнем магнитном поле, установить зависимость пп от Т для заданного внешнего поля.
- 3) Планируется вычислить температурную зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости, в т.ч. в ZFC и FC режимах.

Выводы

- 1) Разработан алгоритм, написана программа ЭВМ на языке С#.
- 2) Проведены численные эксперименты моделирующие поведение ферромагнетика, и спинового стекла на решетке Изинга.
- 3) Предложена схема вычисления параметра порядка. Установлена его температурная зависимость, а также критические температуры фазовых переходов в парамагнетик-спиновое стекло, суперпарамагнетк-парамагнетик.

Заключение

- Закон температурного спада предлагаемого параметра «порядка» (-4) для ферромагнитной фазы совпадает с законом температурного поведения намагниченности с критическим индексом 1/8 (Онсагер [])
- 2) Существование неаналитической функции в области перехода спиновое стекло-парамагнетик позволяет утвердительно ответить на вопрос о существовании фазового перехода PM-SG (PM-SPM)

• Спасибо за внимание