



Дальневосточный
федеральный
университет

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

П.Д.Андрющенко

PitAndMind@gmail.ru

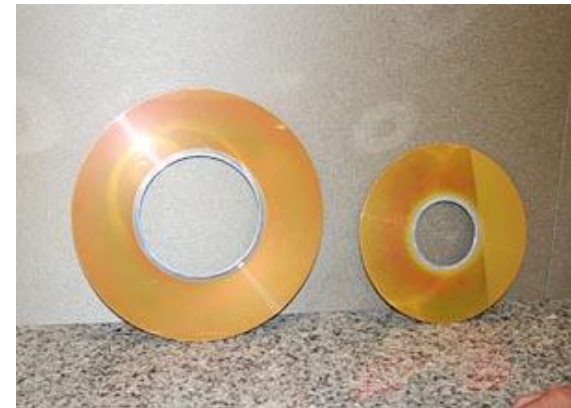
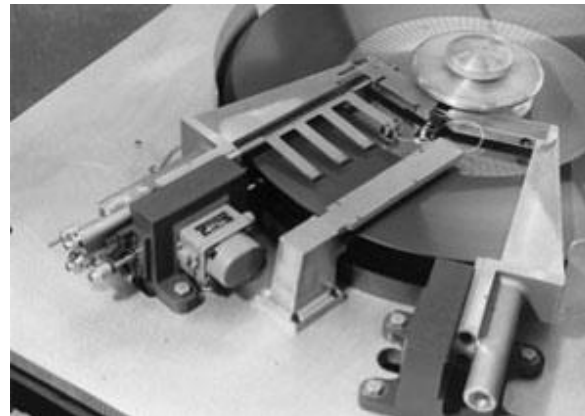
Дальневосточный Федеральный Университет, Школа Естественных Наук,
кафедра компьютерной безопасности, г. Владивосток, ул. Суханова 8, 690950

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 избытка, внешнего магнитного поля и обменного

интеграла [1]

Статистическая сумма $Z = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad \beta \equiv \frac{1}{k_B T}$

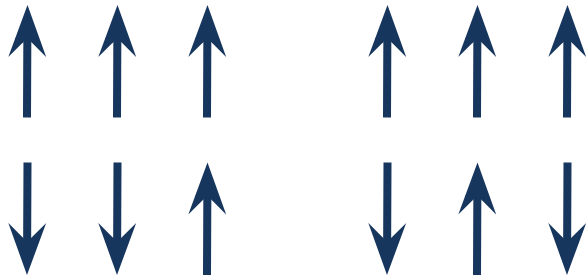
- Совокупность элементов, по которым происходит протекание, называется перколяционным кластером. Будучи по своей природе связным случайным графом, в зависимости от конкретной реализации он может иметь различную форму. Поэтому принято характеризовать его общий размер. Порогом протекания называется количество 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.

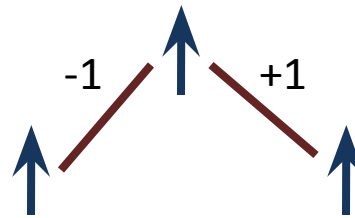
Используемые определения

Вырождение

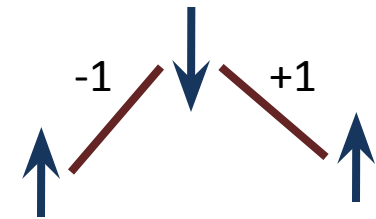


$$M = 4 - 2 = 2$$

Фрустрация



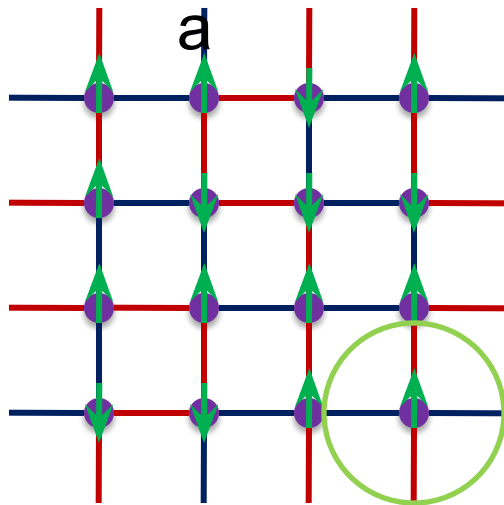
$$E = -1 + 1 = 0$$



$$E = 1 - 1 = 0$$

Модель Изинга

Схем



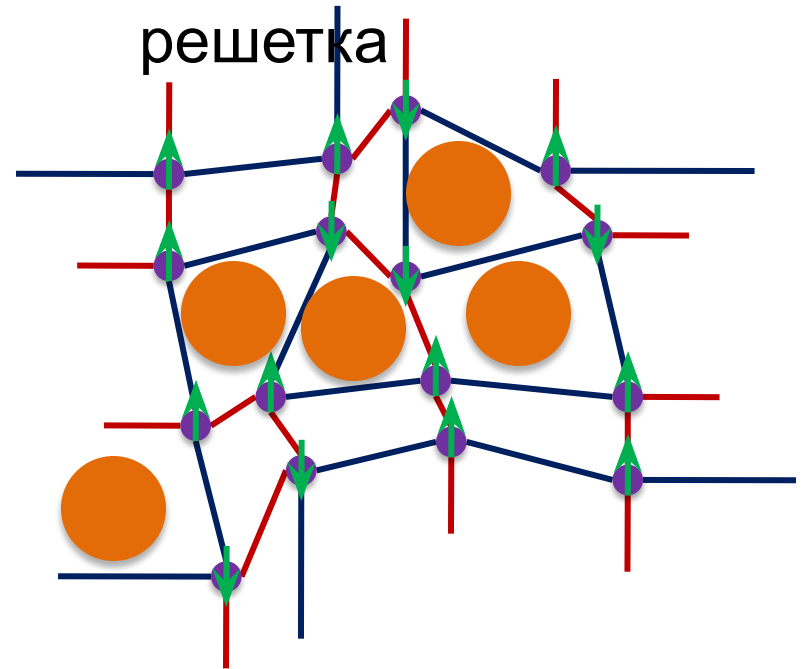
— +1
— -1

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

● Атомы основной
решетки
● Атомы примеси



Реальная
решетка



Фрустрированная модель спинового стекла на простой квадратной решетке со спинами Изинга

Модель Изинга

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

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

J_{ij} - обменный интеграл

h - внешнее магнитное поле

[2] Гинзбург С. Л., Необратимые явления в спиновых стеклах, М., 1989

Модель Изинга

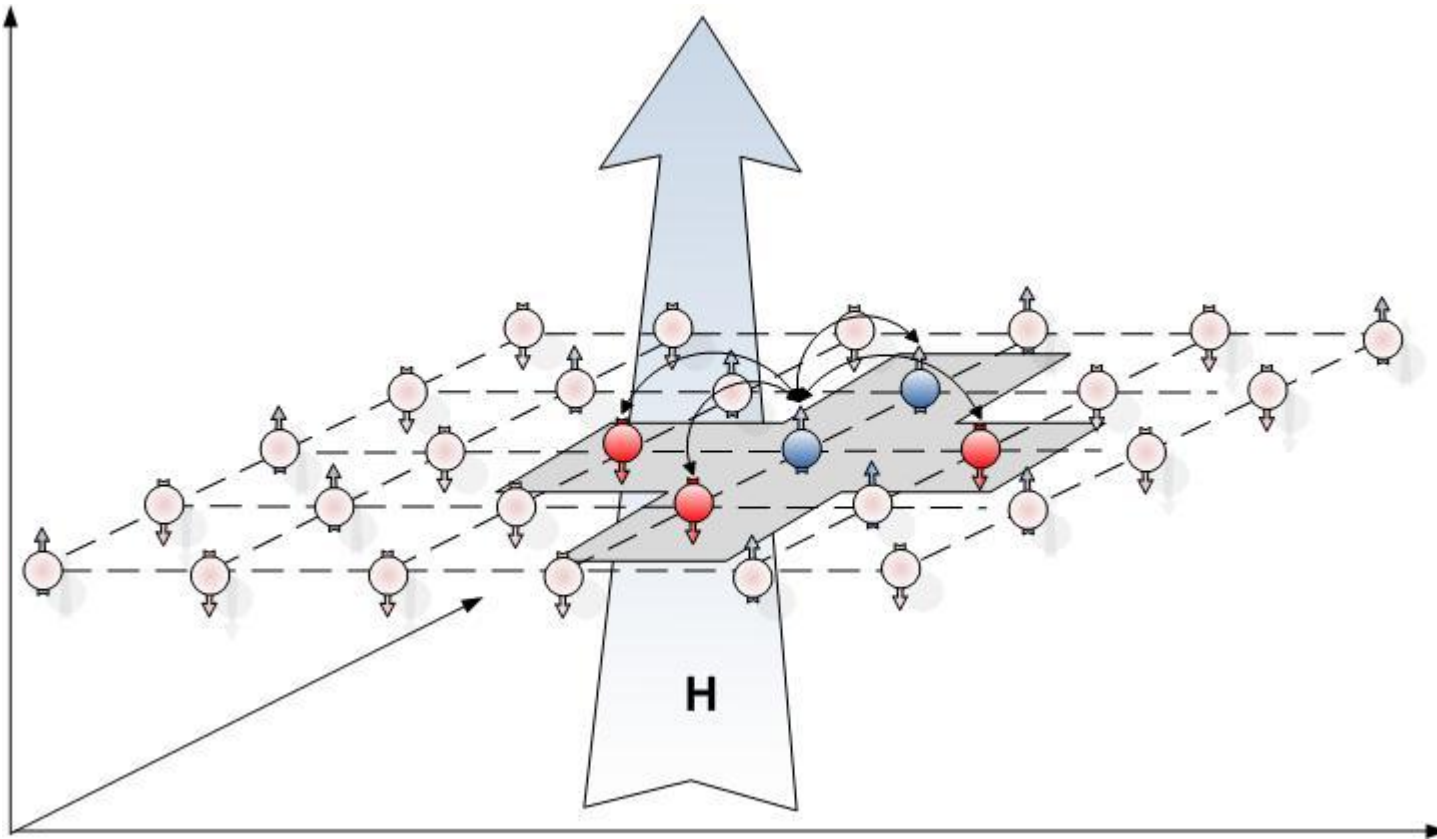
При этом вероятность любой из возможных конфигураций задается **распределением Гиббса**.

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

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

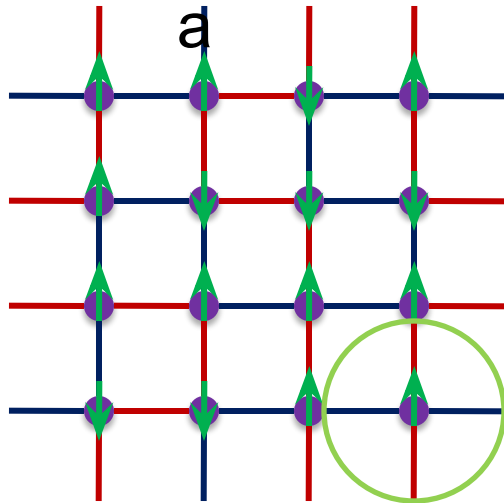
$$\sum_{i=1}^{z=4} J_i = 0$$

Модель Изинга



Модель Изинга

Схем



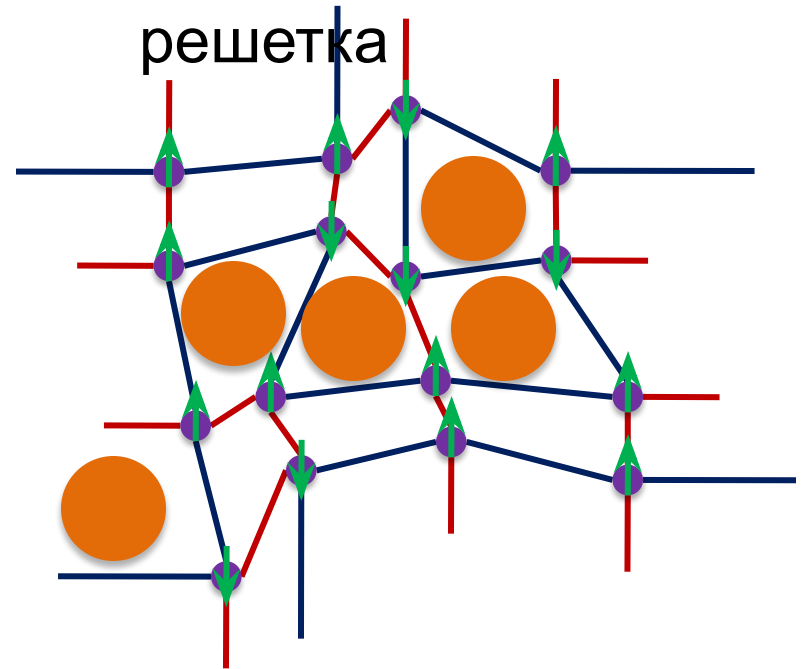
— +1
— -1

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

● Атомы основной
решетки
● Атомы примеси



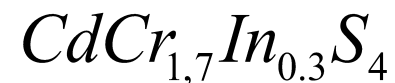
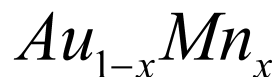
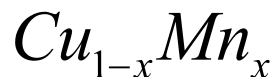
Реальная
решетка



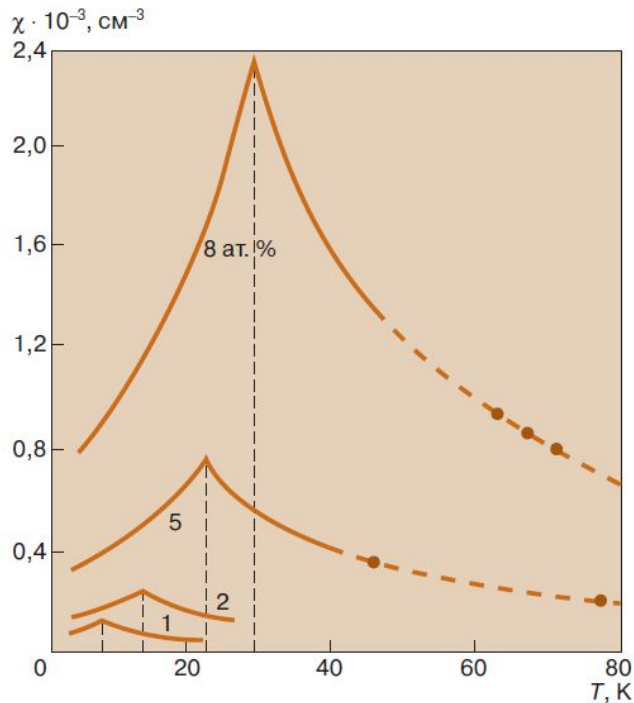
Фрустрированная модель спинового стекла на простой квадратной решетке со спинами Изинга

Спиновое стекло

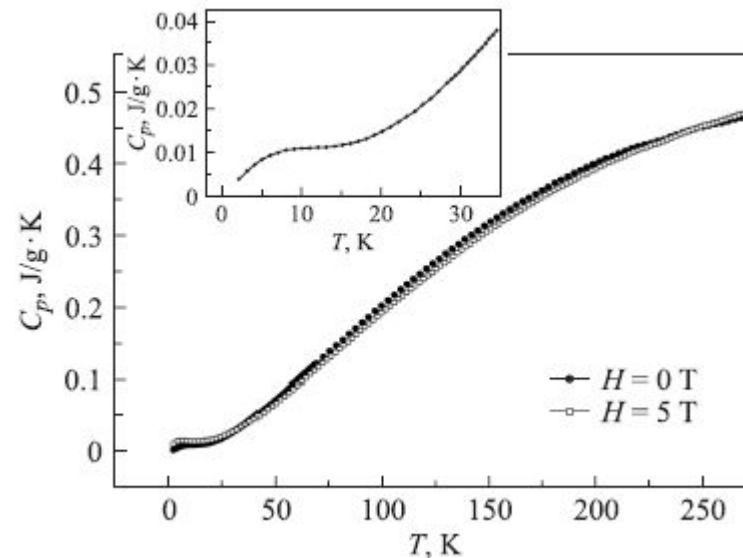
СПИНОВОЕ СТЕКЛО - магнетик, в котором ниже определённой температуры (температура замерзания T_f) возникает термодинамическое неравновесное метастабильное магнитное состояние, которое характеризуется «замороженным» (отсутствуют термодинамические флуктуации) пространственным распределением ориентации спиновых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



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 $5 T$. На вставке показана низкотемпературная область при $H = 0 T$ [4]

[3] Г. А. Петраковский, [Спиновые стекла](#), Соросовский образовательный журнал, т. 7, №9, 2001

[4] Г. А. Петраковский, Состояние спинового стекла в $SmFeTi_2O_7$, Физика твердого тела, 2011, том 53, вып. 9

Алгоритм

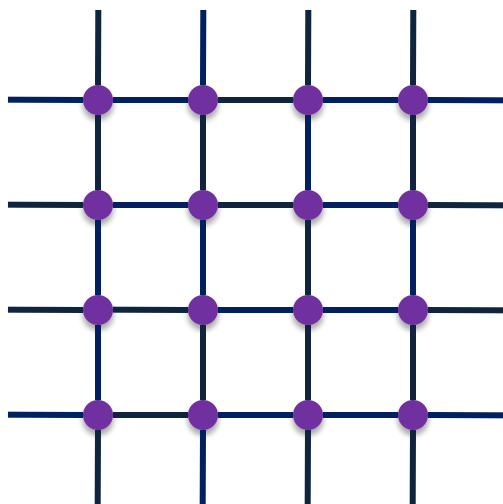
Разработан программный инструментарий для моделирования динамики физических величин, характеризующих систему с заданным (в т.ч. знакопеременным) короткодействующим взаимодействием, а также исследования фазовых переходов в системах с разными значениями обменного интеграла (ферромагнетик, антиферромагнетик,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

Алгоритм реализует схему Монте – Карло.

Алгоритм

1. Создание решетки

Линейный размер = n



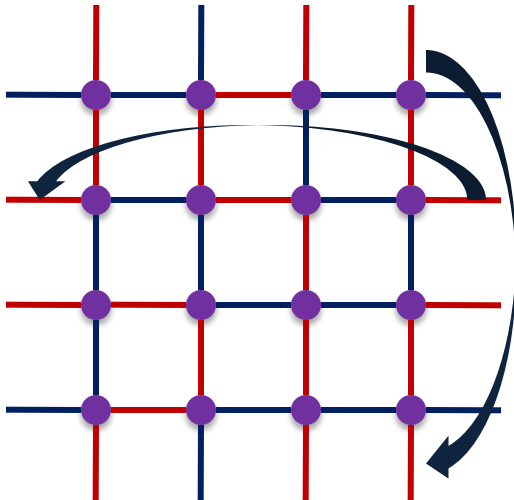
1.1 Создание массива с магнитными моментами (спинами) n^2

1.2 Создание массива со связями $2n^2$

1.2 Создание массива энергий n^2

Алгоритм

2. Создание фрустраций



Задача: Сделать решетку фрустрированной (для спинового стекла)

Сложность заключается в том, что необходимо соблюсти граничные условия

	1,6	2,6	3,6	4,6	5,6	6,6	
6,1	1,1	2,1	3,1	4,1	5,1	6,1	1,1
6,2	1,2	2,2	3,2	4,2	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) конструируются без ошибок

В более крупных системах возникают ошибки (порядка 0,5%)

Алгоритм

3. Монте-Карло

При моделировании возможно задать количество Монте-Карло проходов

Каждый Монте-Карло **проход** состоит:

1. Случайным образом генерируем число от 1 до n^2 . Выбранное число соответствует порядковому номеру атома в решетке.
2. Считаем его энергию E_1 , записываем. Затем переворачиваем его магнитный момент и считаем энергию E_2 .
3. Сравниваем энергии E_1 и E_2 . Если $E_1 > E_2$, то вероятность того, что спин перевернется из исходного состояния $P = 1$, если же $E_1 < E_2$, то вероятность высчитывается по формуле:
$$P = e^{-\frac{E_2 - E_1}{T}}$$
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.

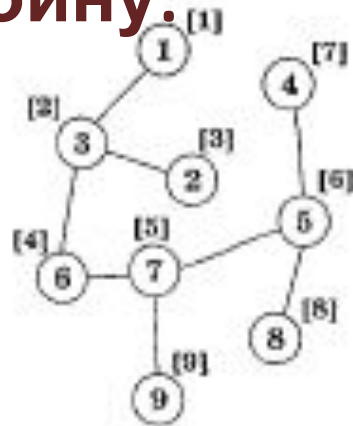
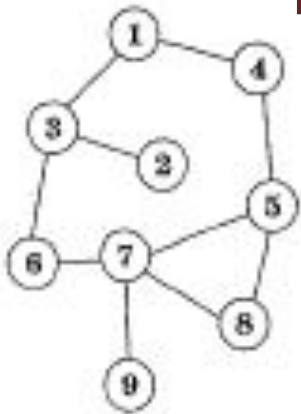
Алгоритм

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.

Алгоритм

4.1 Суть метода обхода в глубину:

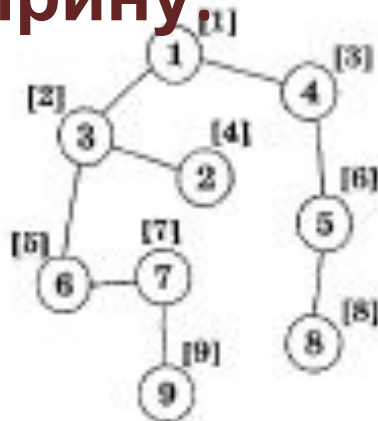
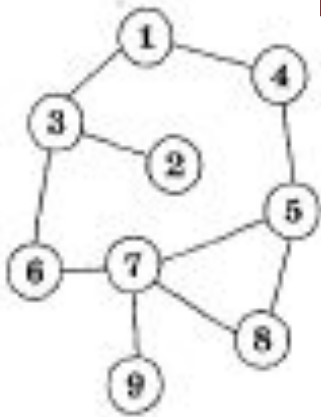


1. Поиск начинается с некоторой фиксированной вершины V_1
2. Рассматривается вершина V_2 , смежная с V_1 . Она выбирается.
3. Процесс повторяется с выбранной вершиной.

4. Если на очередном шаге мы работаем с вершиной V_n , и нет вершин, смежных с ней и не рассмотренных ранее, то возвращаемся из вершины V_n к вершине, которая была до нее. Если эта вершина V_1 , то процесс просмотра закончен

Алгоритм

4.2 Суть метода обхода в ширину:



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.

Алгоритм

5. Подсчет намагниченности, энергии.

Вывод.

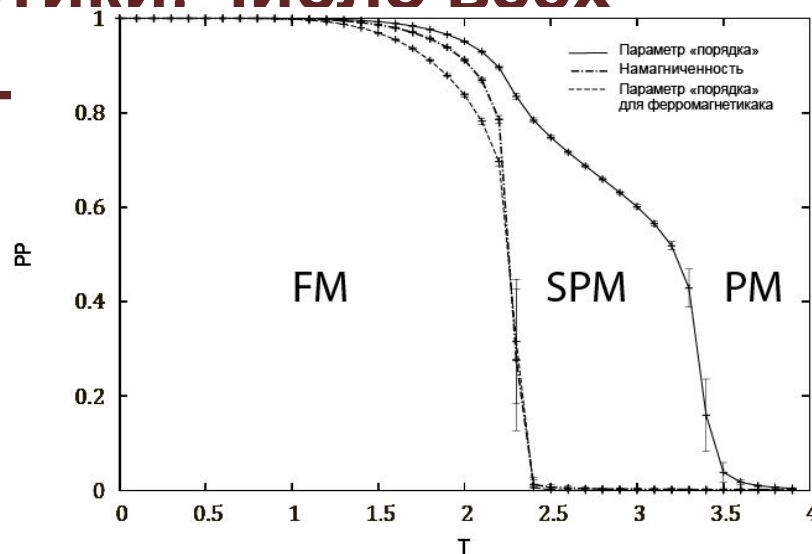
Намагниченность считается простым суммированием всех спинов.

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

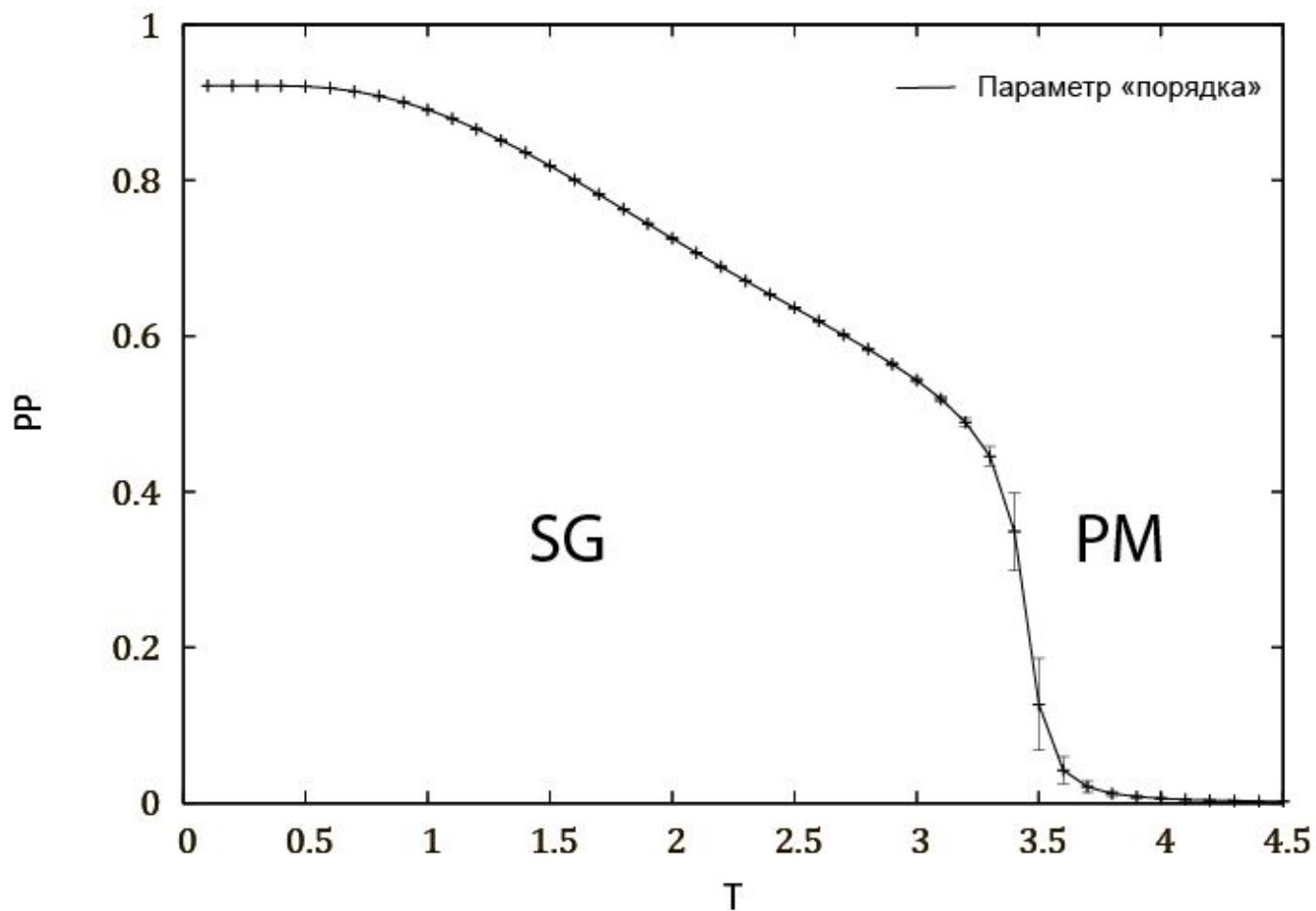
Результаты

1. Ферромагнетик 2D ПК 4 соседа
2. Подпись указать -4, M, (-4)+(-2), число МК проходов, размер системы, 1000x1000 характеристики. Число всех конфигурац



Результаты

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



- Зависимость пп от числа проходов МК

Сверхмасштабирование 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 ρ от T для заданного внешнего поля.
- 3) Планируется вычислить температурную зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости, в т.ч. в ZFC и FC режимах.

4)

Выводы

- 1) Разработан алгоритм, написана программа ЭВМ на языке C#.
- 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, суперпарамагнетик-парамагнетик.

Заключение

- 1) 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**