

На правах рукописи

АТАЕВА ГУЛЬКИЗ ЯНВАРОВНА

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И
КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В МОДЕЛЯХ ПОТТСА
С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ МЕТОДАМИ
МОНТЕ-КАРЛО**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: Член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор
Муртазаев Акай Курбанович

Махачкала, 2013

Оглавление.

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА I. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

§1.1.Стандартные методы Монте-Карло.....	22
§1.2.Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло.....	29
§1.3.Конфигурационное усреднение.....	34

ГЛАВА II. ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА С ЧИСЛОМ

СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 3$.

§2.1.Введение.....	47
§2.2.Результаты экспериментальных и теоретических исследований трехмерной модели Поттса $q=3$ с немагнитными примесями.....	53
2.2.1. Результаты лабораторных экспериментов.....	53
2.3.2. Результаты теоретических исследований.....	56
§2.3.Гипотеза конечно-размерного скейлинга	58
§2.4.Критическое поведение трехмерной разбавленной модели Поттса $q=3$ на простой кубической решетке. Результаты численного эксперимента.....	66

ГЛАВА III. ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА С ЧИСЛОМ

СОСТОЯНИЙ СПИНА $q=4$.

§3.1. Введение.....	91
§3.2. Результаты экспериментальных и теоретических исследований трехмерной модели Поттса $q=4$ с немагнитными примесями.....	95
3.2.1. Результаты лабораторных экспериментов.....	95
§3.3. Критическое поведение трехмерной разбавленной модели Поттса $q=4$ на простой кубической решетке.....	99
3.2.1. Результаты численного эксперимента.....	99
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	113
БИБЛИОГРАФИЯ.....	117

ВВЕДЕНИЕ.

Фазовый переход - это сложное и многогранное явление. Существенный прогресс в качественном понимании непрерывных фазовых переходов, а так же в их количественном описании произошел благодаря теории Л.Д. Ландау и флуктуационной теории фазовых переходов [1]. Внедрение идей ренормализационной группы и ϵ - разложения [2-4], предложенные Вильсоном, а так же гипотезы скейлинга [1,5], основы которой были заложены в 60-х годах сделало возможным количественный расчет критических параметров.

В построении общей микроскопической теории фазовых переходов важную роль играют точные аналитические решения, которые получены для весьма ограниченного числа решеточных моделей. В 1944 году Л. Онсагером [6] было найдено точное решение для 2d модели Изинга. Полученные им результаты резко отличались от результатов предсказываемых теорией Ландау. Эксперименты на различных физических объектах так же показывали отличие критического поведения от результатов теории Ландау. Точное аналитическое решение имеют и некоторые другие модели [7]. В последние годы был разработан ряд интересных методов и подходов для решения некоторых низкоразмерных систем [8].

В определенный период, казалось, что современная теория фазовых переходов и статических критических явлений построена и практически полностью завершила свое развитие. До последних лет доминировало мнение, что в теории фазовых переходов едва ли можно ожидать новых качественных прорывов, и все что остается – это все большее уточнение значений критических индексов. Но теоретические, численные и экспериментальные исследования критических явлений в системах с замороженным беспорядком убедительно показывают, что наблюдаемые

явления выходят далеко за рамки современной флуктуационной теории фазовых переходов. И, по-видимому, сегодняшний этап характеризуется отсутствием достаточного количества надёжно установленных научных фактов о характере и особенностях критического поведения неупорядоченных систем с замороженным беспорядком [9].

При описании критических явлений в спиновых системах наиболее часто используемыми моделями являются модели первого приближения: модель Изинга, модель Гейзенберга, модель Поттса, XY-модель, и их различные модификации.

На основе этих моделей с помощью теоретических методов проведены исследования на различных типах решеток и пространственной размерности d . Получена обширная информация о критическом поведении различных термодинамических и физических параметров в широком диапазоне температур и других физических параметров.

Исследования выполнены на решетках различного типа и пространственной размерности, а также при варьировании большого количества различных параметров.

В последние годы методами вычислительной физики (ВФ) успешно исследуется и критическая область с вычислением значений критических индексов (КИ) и критических амплитуд (КА), при этом достигаемая точность не только не уступает, но и зачастую превосходит лучшие результаты других методов [10, 11 12]. Необходимо отметить, что столь широкий спектр результатов был получен, с одной стороны, увеличением вычислительных мощностей современных ЭВМ, а с другой, на основе разработки мощных современных алгоритмов метода Монте-Карло (МК), специально разработанных для исследования критической области [13-16], гистограммных методов анализа данных [17] и на основе теории конечно - размерного скейлинга (КРС) для расчёта критических параметров [18-21].

Первоначально при изучении фазовых переходов второго рода обычно предполагалось, что рассматриваемые системы являются идеально однородными. В реальных образцах, однако, всегда присутствуют какие-либо дефекты, примеси и другие магнитные и структурные неоднородности. Поэтому, проблема влияния примесей и дефектов структуры на критическое поведение является важной как с теоретической, так и с практической точек зрения.

С другой стороны, центральной концепцией теории фазовых переходов и критических явлений является принцип универсальности, т.е. независимость термодинамических характеристик различных систем при фазовых переходах от различий в значениях мелкомасштабных параметров и разделение всех систем на не большое число классов универсальности в зависимости от пространственной размерности системы и симметрии его параметра порядка. В случае неупорядоченных систем до сих пор остался невыясненным вопрос: являются ли такие характеристики критического поведения как безразмерные амплитуды взаимодействия флуктуаций параметра порядка и критические показатели универсальными, т.е. независимыми от концентрации дефектов структуры вплоть до порога перколяции, или существует линия фиксированных точек для значений амплитуд взаимодействия, определяющая непрерывное изменение критических показателей с концентрацией?

Современная теория классифицирует примеси, в зависимости от их распределения, в основном на расплавленные, замороженные, коррелированные и градиентные [22]. Примеси называют расплавленными, если они находятся в термодинамическом равновесии с исходным веществом. Примеси называют замороженными, если их можно рассматривать как фиксированные в некоторых положениях с распределением, обусловленным способом их внедрения в исходное вещество. Исследования показали, влияние замороженных дефектов,

проявляющееся как случайное возмущение локальной температуры приводит к смене режима критического поведения, описываемого новым набором критических индексов. Это связано с тем, что присутствие точечных дефектов вызывает нарушение трансляционной инвариантности системы, что приводит к рассеянию критических флуктуаций на дефектах структуры и дополнительному взаимодействию флуктуаций параметра порядка посредством поля дефектов. В работе [23] сформулирован критерий, определяющий существенность влияния замороженных примесей на критические явления, называемый обычно критерием Харриса. Согласно этому критерию слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда критический индекс теплоемкости соответствующей чистой системы положителен, $\alpha > 0$ (то есть, теплоемкость в точке перехода является расходящейся). В противоположном случае, когда $\alpha < 0$ (то есть теплоемкость конечна в точке перехода), слабый беспорядок не влияет на критическое поведение. Это можно объяснить тем, что теплоемкость – линейный отклик на возмущение температуры. Если $\alpha > 0$, то при $T \rightarrow T_c$ отклик неограниченно возрастает. При этом естественно ожидать существенное влияние примесей на критическое поведение. В соответствии с этим присутствие замороженных точечных дефектов (например, примеси немагнитных атомов в ферро- или антиферромагнитных материалах) изменяет критические свойства систем, теплоёмкость которых в однородном состоянии испытывает расходимость в критической точке с показателем $\alpha > 0$. Как показали исследования [24-27] данному критерию удовлетворяют системы, гамильтониан которых изоморфен модели Изинга.

Отметим также, что в маргинальной ситуации, когда критический индекс теплоемкости чистой системы $\alpha = 0$ влияние беспорядка, вносимого присутствием примесей, меняет логарифмическую расходимость теплоемкости на двойную логарифмическую [9]. В качестве примера

подобных чистых спиновых систем, для которых критический индекс теплоемкости α равен нулю, можно привести, четырехмерную модель ϕ^4 и двумерную модель Изинга. Однако вычисления показывают, что во всех подобных случаях, если теплоемкость чистой системы является логарифмически расходящейся в критической точке, то наличие слабого беспорядка оказывается существенным для критического поведения [9].

Ренормгрупповой подход с использованием ε – разложения позволил получить значения критических индексов для неупорядоченных систем [28-30]. Вследствие плохой сходимости рядов ε – разложения для систем содержащих замороженные примеси был применён теоретико-полевой подход непосредственно в пространстве $d=3$ [25,26,31], что позволило получить критические индексы в высоких порядках теории возмущений. С рекордной точностью в пятипетлевом приближении для слабонеупорядоченных систем критические индексы были получены в работе [32].

Экспериментальные исследования [33] показали хорошее согласие теоретических результатов для слабонеупорядоченных систем с беспорядком типа случайная температура с опытными данными. Однако по-прежнему многие вопросы здесь остаются открытыми. В частности меняется ли значения критических показателей в зависимости от концентрации примеси и возникает ли новая перколяционная фиксированная точка в системах с большой концентрацией примесных атомов. Однозначного ответа на данные вопросы пока не существует.

Таким образом, обращение к надежным и математически строго обоснованным различным вариантам метода Монте-Карло, в том числе и к мощным кластерным алгоритмам метода Монте-Карло [13-16, 34-43] является обоснованным и актуальным. Важным достоинством этих методов является то, что в ходе эксперимента все параметры исследуемой неупорядоченной системы находятся под строгим контролем

исследователя и, что особенно важно, количество и распределение примесей по образцу. Результаты, полученные этими методами, к настоящему времени не уступают по точности лучшим данным других методов, а иногда и превосходят их [42].

Сопоставление результатов компьютерного моделирования неупорядоченных систем с результатами ренормгруппового подхода позволяет проверить предсказание теории, а также выявить новые эффекты влияния замороженного беспорядка в области сильной неупорядоченности системы, недоступной для аналитического подхода.

Следует отметить, что использование методов вычислительной физики требует создания довольно больших и сложных программ для ЭВМ, а также проведение большой предварительной методической работы. Почти все программы весьма специфичны, требуют от программиста большого опыта и внимательности и, как правило, не могут быть использованы для решения различных задач. Тем не менее, следует признать более чем оправданными те значительные усилия, которые затрачиваются на создания и отладку подобных программ: в результате удается оценить, в какой мере обоснованы те или иные микроскопические модели, теоретические методы и эмпирические аппроксимации [44].

Остановимся поподробнее на модели Поттса т.к. она используется для описания широкого ряда объектов и явлений в статистической механике и физике конденсированных сред и имеющую также приложения к задачам оптимизации. Модель Поттса представляет собой естественное обобщение модели Изинга. В модели Поттса каждый узел может находиться в одном из $q \geq 2$ состояний, а энергия парного взаимодействия принимает одно значение, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (безразлично в каких именно), и равно нулю, если

они находятся в разных состояниях (опять же все равно в каких именно). С учетом этих особенностей гамильтониан модели Поттса с примесями может быть представлен в виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j) - H_0 \sum_i \rho_i \delta(S_i, q), \quad S_i = 1, 2, 3, \dots, q \quad (1)$$

Теоретическое исследование данной модели чрезвычайно затруднено, в то время как различные подходы, основанные на методе Монте-Карло, являются весьма мощными средствами для получения численных данных о поведении такой неупорядоченной системы. Следует также отметить, что исследуемые модели описывают критическое поведение множества реальных физических систем. Это позволяет сравнивать результаты исследования методами МК не только с теоретическими предсказаниями, но и с данными лабораторных экспериментов.

В данной работе рассматриваются некоторые вопросы теории статических критических явлений и фазовых переходов в моделях с замороженными немагнитными примесями. Объектами исследования является трехмерная модель Поттса с числом состояний $q=3$ и $q=4$ с замороженными немагнитными примесями. В рамках этой модели методами МК проведены исследования статических критических свойств как в однородном случае $p=1.0$, так и с концентрацией спинов $p=0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$.

Целью работы является исследование статических критических свойств трехмерных спиновых решеточных моделей с замороженными немагнитными примесями кластерными алгоритмами метода Монте-Карло. В рамках данного исследования решались следующие основные задачи:

1 Исследование методом Монте-Карло критических свойств трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ в широкой области концентрации немагнитных примесей.

2 Определение типа фазовых переходов происходящих в системе в зависимости от концентрации немагнитных примесей. Определение закономерности влияния концентрации немагнитных примесей на характер и особенности критического поведения трехмерной модели Поттса с $q=3$.

3 Исследование высокоэффективным алгоритмом Вольфа метода Монте-Карло статических критических свойств трехмерной модели Поттса с $q=4$ с замороженным беспорядком в виде немагнитных примесей.

4 Определение типа фазового перехода и влияния концентрации немагнитных примесей на фазовые переходы в модели Поттса с $q=4$. Исследование статических критических свойств этой модели.

5 Определение классов универсальности критического поведения трехмерных спиновых систем с замороженным беспорядком и зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей. Сопоставление полученных значений критических параметров с теоретическими и экспериментальными результатами.

Практическая ценность работы.

Полученные в диссертации результаты по исследованию статических критических свойств трехмерных спиновых систем с замороженными немагнитными примесями представляют интерес для дальнейших исследований в теории магнетизма, физики фазовых переходов и статистической теории твердых тел. Разработанный комплекс программ для ЭВМ формирует базу, на основе которой возможны

высокоточные исследования статических критических явлений в сложных спиновых системах с немагнитными примесями.

Обобщение одно-кластерного алгоритма Вольфа для исследования неупорядоченных систем показало, что кластерные алгоритмы являются ценным инструментами при исследовании спиновых систем с беспорядком, и позволяют определять с высокой степенью точности критические параметры системы.

Научную новизну и значимость диссертации определяют **основные положения**, которые автор выносит на защиту:

1. Исследование статических критических и термодинамических свойств трехмерной модели Поттса с $q=3$ с замороженными немагнитными примесями, распределенными каноническим способом, используя высокоэффективные алгоритмы метода Монте-Карло.

2. Определение закономерностей изменения критического поведения в зависимости от концентрации примесей и размеров системы трехмерной модели Поттса с $q=3$ с замороженным беспорядком. Расчет основных статических критических индексов теплоемкости α , намагниченности β , восприимчивости γ , критического индекса радиуса корреляции ν при концентрации спинов $p = 1.0; 0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$.

3. Доказательство изменения рода фазового перехода в $3d$ модели Поттса с $q=3$ при внесении немагнитных примесей.

4. Исследование в широком диапазоне температур кластерными алгоритмами метода Монте-Карло критических и термодинамических свойств трехмерной разбавленной модели Поттса с состоянием спина $q=3$. Определение закономерностей изменения критических свойств $3d$

модели Поттса с $q=4$ в зависимости от концентрации немагнитных примесей.

5. Расчет основных статических критических индексов для модели Поттса с $q=4$ в сильно разбавленном режиме.

6. Сложный комплекс компьютерных программ для ЭВМ, позволяющий исследовать статическое критическое поведение спиновых систем с замороженным беспорядком.

7. Разработка методики исследования методом Монте-Карло критического поведения сложных спиновых систем с замороженным немагнитным беспорядком.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях, симпозиумах, семинарах: Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала: 2007, 2009, 2012; 12-ом международном симпозиуме «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-12, Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 17-22 сентября 2009; V-й международной конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук». Томск, 2009; Региональной школе-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике, физике и химии. Уфа, 2009; Международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2010; XXXIII Международной зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка-2010». Екатеринбург, 2010; 13-ом международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-13. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2010; 14-ом международном симпозиуме «Упорядочение в минералах и сплавах» ОМА-14. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2011;

Moscow International Symposium on Magnetism «MISM». Moscow, 2011; Международной конференции «Инноватика-2011». Махачкала, 2011; V Всероссийская конференция «Физическая электроника» (Махачкала, 2008, 2010, 2012); XXI Международная конференция «Новое в магнетизме и магнитных материалах» (Москва, 2009, 2012 гг.); II Всероссийская школа-семинар молодых ученых, посвященной 55-летию создания Института физики и 105 – летию со дня рождения чл.-корр. АН СССР Х.И. Амирханова, (Махачкала, 2012 г).

Публикации.

1. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование критического поведения трехмерной слабо разбавленной модели Поттса методом Монте-Карло // Известия РАН. Серия физическая. 2007. Т.71, №5. С.630-631.
2. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса // ФТТ. 2008. Т.50, вып.4. С.703-708.
3. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Абуев Я.К. Фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса // Вестник Дагестанского научного центра. 2008. №32. С.5-11.
4. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Ya. Investigation of the Critical Properties in the 3D Site-Diluted Potts Model // Diffusion and Defect Data Pt.B: Solid State Phenomena. 2009. Vol. 152-153. P. 571-574.
5. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Особенности фазовых переходов в трехмерных разбавленных структурах, описываемых моделью Поттса // ЖЭТФ. 2009. Т.136, вып.3. С.516-520.

6. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Особенности фазовых переходов в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ // Известия РАН. Серия физическая. 2010. Т.74, №5. С.720-721.
7. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Муртазаева А.А. Исследование фазовых переходов в трехмерной примесной модели Поттса методами вычислительной физики // Вестник Дагестанского научного центра. 2010. №36. С. 5-8.
8. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ // Известия РАН. Серия физическая. 2011. Т.75, №5. С.723-725.
9. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Ya. Phase Transitions in 3D Site-Diluted Potts Model with Spin States $q=4$ // Diffusion and Defect Data Pt.B: Solid State Phenomena. 2011. Vol. 168-169. P. 357-360
10. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Шахмарданова Р.Н., Азнаурова Г. Я. Критическое поведение 3D модели Изинга с замороженным беспорядком // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2004. С.87-88.
11. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование критического поведения трехмерной разбавленной модели Поттса методом Монте-Карло // Сборник трудов международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-9, V. II. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2006. С.39-40.
12. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной модели Поттса // Сборник трудов международного

- симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-10, V. II. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2007. С.206-208.
13. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Казимов Ф.К. Компьютерное моделирование фазовых превращений в 3D слабо разбавленной модели Поттса // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2007. С.64-66.
14. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной модели Поттса // Сборник трудов международного симпозиума «Упорядочение в Минералах и Сплавах» ОМА-11, Т. II. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2008. С.77-79.
15. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Ya. Investigation of the critical properties in the 3D site-diluted Potts model // MISIM-2008: Book of Abstracts. Moscow, 2008. P. 527-528.
16. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса // Материалы V Всероссийской конференции по физической электронике – ФЭ – 2008. С.258-260.
17. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование влияния замороженного беспорядка на фазовые переходы и критические явления в 3D разбавленной модели Поттса методом Монте-Карло // Труды V Международной конференции студентов и молодых ученых, Томск, 2008. С. 69-70.
18. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Особенности фазовых переходов в трехмерной модели Поттса с замороженным беспорядком // Сборник трудов XXI международной конференции «Новое в магнетизме и магнитных материалах». Москва, 2009. С.758-760.

19. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Муртазаева А.А. Исследование критических явлений моделей разбавленных магнетиков методами Монте-Карло // Сборник трудов международной конференции «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах». Махачкала, 2009. С.49-51.
20. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Особенности фазовых переходов трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ // Сборник трудов международного симпозиума «Упорядочение в Минералах и Сплавах» ОМА-12, Т. II. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2009. С.68-70.
21. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Фазовые переходы и критические явления в трехмерных разбавленных магнетиках // Минералогическая интервенция в микро - и наномир. Материалы Международного минералогического семинара. Сыктывкар, Республика Коми, Россия, 2009. С.83-85.
22. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Абуев Я.К. Исследование фазовых переходов в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ // Межвузовский сборник научных трудов «Структурные и динамические эффекты в упорядоченных средах». Уфа, 2009. С.7-12.
23. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Y. Investigation of thermodynamical and critical properties in the $4Q$ site-diluted Potts model // Abstracts book EASTMAG-2010. Ekaterinburg, 2010. P.107.
24. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $Q=4$ // Сборник трудов международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-13, V. II. Ростов-на-Дону - пос. Лоо, 2010. С.35-37.

25. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Ya. The investigation of phase transition in the three-dimensional site-diluted Potts model // MISM-2011: Book of Abstracts. Moscow, 2011. P. 193.
26. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Компьютерное моделирование фазовых переходов и критического поведения четырехвершинной модели Поттса // Сборник трудов международной конференции «Инноватика-2011». Ульяновск, 2011. С.22-23.
27. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я., Абуев Я.К. Исследование фазовых переходов и критического поведения двумерной модели Поттса на треугольной решетке // Сборник трудов международной конференции «Инноватика-2011». Ульяновск, 2011. С.22-23.
28. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса при $q=3$ на треугольной решетке // ФНТ (принята в печать).
29. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Гистограммный анализ данных для трехмерной разбавленной ферромагнитной модели Поттса // Кристаллическое и твердое некристаллическое состояние минерального вещества. Материалы минералогического семинара с международным участием. Институт геологии Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, 2012. С.12-13.
30. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Исследование фазовых переходов в двумерной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке методами Монте-Карло // Сборник трудов II Всероссийской школы-семинара молодых ученых «Физика фазовых переходов», посвященной 55-летию создания Института физики и 105-летию со дня рождения члена корреспондента АН СССР Х.И. Амирханова. Махачкала, 2012. С.177-179.
31. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Исследование фазовых переходов в $2D$ ферромагнитной модели Поттса при $q=3$ на треугольной

решетке // Сборник трудов XXII международной конференции «Новое в магнетизме и магнитных материалах». Астрахань, 2012. С.667-669.

32. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Компьютерное моделирование фазовых переходов в двумерных структурах описываемых антиферромагнитной моделью Поттса на треугольной решетке // Материалы VII Всероссийской конференции «Физическая электроника». Махачкала, 2012. С.169-171.
33. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Критические свойства двумерной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке // Материалы VII Всероссийской конференции «Физическая электроника». Махачкала, 2012. С.235-237.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, и списка цитированной литературы.

В главе I дано изложение классического метода Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю.

В разделе 1.1 рассмотрен стандартный метод Монте-Карло применительно к каноническому ансамблю.

В разделе 1.2. дано описание кластерных алгоритмов метода Монте-Карло (одно-кластерный алгоритм Вольфа и много кластерный алгоритм Свендсена-Янга) эти алгоритмы, в отличие от стандартного, основаны на перевороте кластеров, содержащих большое количество спинов, что позволяет преодолеть проблему критического замедления, возникающую при использовании алгоритма Метрополиса.

В разделе 1.3 рассматриваются конфигурационное усреднение в системах с беспорядком, а также в разделе рассматриваются вопросы, связанные с оценкой погрешности метода Монте-Карло.

В главе II с использованием одно-кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло исследуются статические критические и термодинамические свойства трехмерной модели Поттса при $q=3$ с замороженными немагнитными примесями.

В разделе 2.1 рассматривается трехмерная модель Поттса с числом состояния $q=3$ с замороженным беспорядком.

В разделе 2.2 подробно изложены основные положения теории конечно-размерного скейлинга. Даются особенности определения статических критических индексов и критических температур.

Раздел 2.3 посвящен обсуждению результатов экспериментальных и теоретических исследований трехмерной модели Поттса разбавленной немагнитными примесями.

В разделе 2.4 представлены результаты исследования статических критических и термодинамических свойств трехмерной модели Поттса при $q=3$ с немагнитными примесями.

В главе III одно-кластерным алгоритмом Вольфа метода Монте-Карло исследуется критическое и термодинамическое поведение трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояния $q=4$.

В разделе 3.1 рассматривается трехмерная модель Поттса с числом состояния $q=4$ с замороженными немагнитными примесями.

В разделе 3.2 дается обзор результатов исследований неупорядоченной модели Поттса $q=4$ имеющихся на сегодняшний день.

В разделе 3.4 представлены результаты исследования критического поведения трехмерной модели Поттса при $q=4$ с замороженными немагнитными примесями.

В заключении представлены обобщающие выводы по результатам диссертационной работы.

ГЛАВА 1. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА.

§ 1.1. Стандартный метод Монте-Карло

Методом Монте-Карло принято называть такой численный метод, в котором решение полностью детерминированной задачи заменяется приближенным решением, основанным на введении стохастических элементов, отсутствующих в исходной задаче [45].

В настоящее время в статистической физике удалось получить точное решение для весьма ограниченного числа моделей, описывающих фазовый переход второго рода [7]. Большинство из этих моделей являются простейшими моделями первого приближения. Многие теоретические приближения, также как метод молекулярного поля [46] не адекватно описывают критические явления и вблизи T_c не работают. Большинство результатов полученных в области теории фазовых переходов и критических явлений были получены на основе высоко- и низкотемпературных разложений, ε - разложения и некоторых других [1-4, 46]. В последние годы, среди методов вычислительной физики все более важную и значительную роль играют методы Монте-Карло. Отметим, что название самого метода “Монте-Карло” возникло из-за случайного или вероятностного характера метода и от названия известного казино в Монако.

В 1953 году Метрополис и другие [47] применили метод Монте-Карло в каноническом ансамбле для расчета уравнения состояния двумерной модели-системы твердых дисков. В дальнейшем этот метод начали широко применять на практике. Вуд и др. распространили этот метод на трехмерные системы с гладким меж частичным потенциалом Леннарда-Джонса [48]. В настоящее время метод МК и различные его разновидности, такие как кинетический, квантовый, кластерный,

многосеточный и другие используется для решения задач физики, математики, химии, биологии, астрономии, экономики, социологии и т.д. Метод МК применяется к системам, для которых сделано предположение о взаимодействии между частицами системы. Следует отметить, что точность результатов полученных методом МК в значительной мере зависит от имеющегося в распоряжении машинного времени.

Погрешность вычислений в методе МК пропорциональна $\sqrt{D/N}$, где D – некоторая постоянная, N -число МК испытаний, которое контролируется в рамках самого метода.

В методе МК моделируемая система подвергается случайному блужданию по конфигурационному пространству. Любую равновесную термодинамическую характеристику системы можно вычислить усреднением по каноническому конфигурационному ансамблю. Последовательность различных конфигураций, реализуемых в методе МК, можно рассмотреть и как временную эволюцию системы. Такой динамический аспект метода МК очень важен.

Во-первых, это связано с интерпретацией и расчетом “статистических ошибок” метода. В общем случае, применение метода Монте-Карло к ансамблю находящемуся в произвольном состоянии, обеспечивает релаксацию ансамбля в состояние теплового равновесия. Динамическая интерпретация этого процесса позволяет понять, почему в некоторых случаях время релаксации может быть очень большим.

Во-вторых, появляется возможность исследования величин, зависящих от времени и динамических критических явлений, и, следовательно, значительно расширяет область применения методов МК.

Рассмотрим особенности стандартного метода МК, при исследовании критических явлений в спиновых системах. При

изложении материала будем придерживаться “магнитной” терминологии и опираться на модель Изинга и Гейзенберга. Модель Изинга является наглядным примером дискретной спиновой системы, а модель Гейзенберга – примером непрерывной спиновой системы. При изложении материала будем придерживаться работы [49].

Рассмотрим систему из N классических частиц в объеме V , при заданной температуре T . Каждая частица, помеченная индексом i , будет описываться множеством динамических переменных $\{\alpha_i\}$. Например, применительно к модели Гейзенберга $\{\alpha_i\}$ есть единичный вектор $\vec{S}_i$, ориентированный в направлении магнитного момента. Обозначим через $\vec{x} = \vec{x}(\{\alpha_i\})$ точку фазового пространства или конфигурацию системы. Взаимодействия между частицами системы описываются гамильтонианом $H_N(\vec{x})$. Тогда термодинамические средние наблюдаемой величины $A(\vec{x})$ можно представить в виде:

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\vec{x} A(\vec{x}) \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}{\int d\vec{x} \exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)}, \quad (1.1)$$

где интеграл берется по всему фазовому пространству. Если множество $\{\alpha_i\}$ принимает дискретные значения, то среднее $A(\vec{x})$ вычисляется как:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_k A(\vec{x}_k) \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}{\sum_k \exp(-H_N(\vec{x}_k)/k_B T)}, \quad (1.2)$$

Интегралы типа (1.1), можно вычислить стандартными способами, или напрямую случайным образом выбирая точки $\vec{x}_v$ в фазовом пространстве [45]. Однако эти способы не подходят для задач статистической физики, т.к. подынтегральное выражение $\exp(-H_N(\vec{x})/k_B T)$ может изменяться на многие порядки, особенно при температурах интересных на практике. Вариант метода МК,

использованный Метрополисом и др. в [47], основан на идее “существенной выборки”. В этом случае точки фазового пространства выбираются не случайно, а в соответствии с доминирующим вкладом в сумму (1.1). Это означает выбор состояний $\vec{x}_\nu$ в соответствии с некоторой плотностью вероятности $P(\vec{x}_\nu)$:

$$P(\vec{x}_\nu) = \frac{\exp(-H_N(\vec{x}_\nu)/k_B T)}{\sum_{\nu=1} \exp(-H(\vec{x}_\nu)/k_B T)}. \quad (1.3)$$

Тогда Монте-Карло оценка $\bar{A}$ для среднего $\langle A \rangle$ будет

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{\sum_{\nu=1}^M A(\vec{x}_\nu) P^{-1}(\vec{x}_\nu) \exp(-H_N(\vec{x}_\nu)/k_B T)}{\sum_{\nu=1}^M P^{-1}(\vec{x}_\nu) \exp(-H_N(\vec{x}_\nu)/k_B T)}. \quad (1.4)$$

Очевидно, что самый естественный способ выбора $P(\vec{x}_\nu)$ состоит в отборе конфигураций пропорционально больцмановскому фактору

$$P(\vec{x}_\nu) = P_{eq}(\vec{x}) \sim \exp(-H_N(\vec{x}_\nu)/k_B T), \quad (1.5)$$

при котором (1.4) превращается в среднее арифметическое

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{\nu=1}^M A(\vec{x}_\nu), \quad (1.6)$$

где M -общее число состояний выработанных в Монте-Карло процессе. Но в реальных случаях точное выражение для $P_{eq}(\vec{x}_\nu)$ неизвестно. Можно организовать случайное блуждание $\{\vec{x}_\nu\}$ в фазовом пространстве с помощью марковского процесса так, чтобы $P(\{\vec{x}_\nu\})$ сходилось к $P_{eq}(\{\vec{x}_\nu\})$ при $M \rightarrow \infty$. Этот процесс определяется переходными вероятностями $W(\vec{x}_\nu \rightarrow \vec{x}_{\nu'})$ из состояния $\vec{x}_\nu$ в состояние $\vec{x}_{\nu'}$. Для того,

чтобы марковский процесс обладал свойством сходимости $P(\{\vec{x}_v\})$ к $P_{eq}(\{\vec{x}_v\})$ достаточно выполнение принципа детального равновесия:

$$P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}) \cdot W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v). \quad (1.7)$$

Сами переходные вероятности $W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})$ должны удовлетворять следующим условиям:

$$1. \sum_{v'} W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = 1, \quad \text{для всех } v, \quad (1.8)$$

$$2. \quad W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) > 0, \quad (1.9)$$

$$3. \sum_v P_{eq}(\vec{x}_v) \cdot W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = P_{eq}(\vec{x}_{v'}), \quad \text{для всех } v'. \quad (1.10)$$

Выполнение уравнения (1.7) при соблюдении условий (1.8) - (1.10) означает, что отношение переходных вероятностей зависит только от изменения энергии $\delta H = H_N(\vec{x}_{v'}) - H_N(\vec{x}_v)$ при переходе из состояния $\vec{x}_v$ в состояние $\vec{x}_{v'}$

$$\frac{W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'})}{W(\vec{x}_{v'} \rightarrow \vec{x}_v)} = \exp(-\delta H / k_B T). \quad (1.11)$$

Выражение (1.11) все еще оставляет произвол в выборе W . На практике чаще всего используются две функции [45]:

$$W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau} \exp(-\delta H / k_B T), & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau}, & \delta H \leq 0 \end{cases}, \quad (1.12)$$

или

$$W(\vec{x}_v \rightarrow \vec{x}_{v'}) = \frac{1}{2\tau} \left(1 - \tanh \left(\frac{\delta H}{2k_B T} \right) \right) = \frac{1}{\tau} \frac{\exp(-\delta H / k_B T)}{(1 + \exp(-\delta H / k_B T))}, \quad (1.13)$$

где τ – произвольный параметр.

Рассмотрим несколько вопросов связанных с практической реализацией схемы (1.12, 1.13) и перехода из состояния ν в состояние ν' .

В методе МК переход от одной последовательной конфигурации ν к другой ν' сильно зависит от исследуемой модели. Для модели с дискретными степенями свободы переход в новую конфигурацию заключается в выборе одного из возможных состояний для одной из переменных. Например, для модели Изинга $\alpha_{\nu} \rightarrow -\alpha_{\nu}$, а для модели Поттса с q состоянием узла $\alpha_{\nu} \rightarrow \alpha_{\nu_1}, \alpha_{\nu} \rightarrow \alpha_{\nu_2}, \alpha_{\nu} \rightarrow \alpha_{\nu_3}, \dots, \alpha_{\nu} \rightarrow \alpha_{\nu_q}$. В моделях с непрерывной симметрией, таких как XY - модель, или классическая модель Гейзенберга, конфигурационное пространство $\{\alpha_{\nu}\}$ представляет собой совокупность ориентаций единичных векторов (спинов). Для модели Гейзенберга мы имеем $\alpha_{\nu} \equiv (\theta, \varphi)$. В этом случае один шаг Марковской цепи заключается в попытке поворота какого-либо спина, закрепленного в узле решетки, на некоторый случайный угол. Выбор спина для поворота осуществляется либо случайным образом, либо последовательно перебираются все спины. Если при последовательном выборе, каждый спин подвергался испытанию один раз, а при случайном выборе сделано N испытаний (N – число спинов в системе), то говорят, что выполнен один Монте-Карло шаг на спин (МКшаг/спин). Для выбора в пространстве нового случайного направления используются формулы

$$\cos\theta = 2\xi_1 - 1, \quad \varphi = 2\pi \cdot \xi_2, \quad (1.14)$$

где $0 \leq \theta < \pi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, θ и φ - углы в сферической системе координат; ξ_1 и ξ_2 – случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0, 1)$. Для XY модели выбор нового направления осуществляется на плоскости $\varphi = 2\pi\xi_1$. Часто целесообразно выбирать новую степень свободы не полностью случайным образом, а из

интервала вблизи предыдущего значения. Этот интервал затем может быть подобран таким образом, чтобы средняя скорость переходов, была оптимальной. Тогда,

$$\varphi'_{\nu} = \varphi_{\nu} + \Delta\varphi (2\xi - 1), \quad (1.15)$$

Иногда бывает необходимо выбирать точки в фазовом пространстве неравномерно в соответствии с определенной закономерностью. Для решения проблем такого рода конструируется алгоритм, который генерирует $\varphi_{\nu'}$ пропорционально распределению вероятности $P(\varphi_{\nu}) \sim \exp[-V(\varphi_i)/k_B T]$. Невозможно описать все варианты перехода из $\vec{x}_{\nu}$ в $\vec{x}_{\nu'}$. Гибкость метода МК позволяет определить последовательность конфигураций в зависимости от типа задачи и применять его к самым разным проблемам.

Большое значение имеет вопрос выбора начальной конфигурации системы, так как этот вопрос важен с точки зрения эффективности расчетов и статистических ошибок метода МК. Обычно задают случайную начальную конфигурацию, или упорядоченную по какому-либо принципу. Выбор начальной конфигурации может в значительной мере влиять на времена релаксации моделируемых систем. Этот вопрос становится особенно актуальным для неупорядоченных систем, где конфигурации почти «заморожены», например, для спиновых стекол или моделей, которые претерпевают фазовый переход без появления дальнего порядка, но с расходящейся восприимчивостью (XY–модель) [45]. Поэтому, наличие предварительной информации о статистических свойствах изучаемой модели может значительно облегчить решение вопроса о выборе начальной конфигурации. Хотя, в принципе, при наличии неограниченного “машинного времени”, можно задать любую начальную конфигурацию.

§ 1.2. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло

Многочисленные исследования, выполненные методами МК, убедительно показали, что эти методы являются ценным инструментом для изучения классических систем [10,42]. Однако вблизи критической точки эффективность этого метода резко падает, и мы сталкиваемся с проблемой так называемого «критического замедления». Критическое замедление, вероятно, есть наиболее серьезный источник трудностей при исследовании фазовых переходов и критических явлений методами МК.

Согласно современным представлениям теории фазовых переходов и критических явлений, время релаксации системы в точке фазового перехода T_c расходится как [1, 4]:

$$\tau \sim \xi^z, \quad (1.21)$$

где ξ – есть корреляционная длина $\xi \sim (T/T_c - 1)^{-\nu}$, z – динамический критический индекс.

Для большинства моделей характерное значение $z \approx 2$ [1, 4]. Таким образом, при $T \rightarrow T_c$ время релаксации системы очень быстро растет. Увеличение времени релаксации ($\tau \rightarrow \infty$) делает описанный выше стандартный алгоритм метода МК не эффективным вблизи точек фазовых переходов второго рода. Эта неэффективность обусловлена тем, что в алгоритме Метрополиса, Монте-Карло испытание заключается в попытке переворота одного спина, тогда как эффекты, связанные с фазовыми переходами обусловлены флуктуациями спиновых кластеров больших размеров. Для систем с конечными размерами, используемых при компьютерном моделировании, размеры спиновых кластеров ограничены размерами самой системы L [11]. В этом случае при $T = T_c$:

$$\tau \sim L^z. \quad (1.22)$$

В последние годы предложен ряд новых алгоритмов для метода МК, позволяющих в той или иной мере преодолеть проблему критического замедления. К ним можно отнести: оверрелаксационные (over-relaxation) [50], кластерные алгоритмы [13-16]. Среди последних наибольшую популярность завоевали различные варианты, основанные на идеях перколяционных переходов [13]. Имеется и ряд других подходов, в которых используются и различные гибридные алгоритмы, направленные на преодоление конкретных частных проблем. Например, в [51] предложен вариант (Replica Monte Carlo Method), предназначенный для повышения эффективности кластерных алгоритмов применительно к системам с «фрустрациями», а в [52] для применения при изучении моделей спиновых стекол. Этот алгоритм был применен к изинговским спиновым стеклам размерностью пространства $d = 2, 3$ и 4 [53, 54].

Следует отметить, что некоторые алгоритмы являются неэргодичными (Replica Monte Carlo method), а некоторые соответствуют микроканоническому ансамблю (over-relaxation) и их необходимо использовать в сочетании с другими алгоритмами, например, с алгоритмом Метрополиса [47].

Стандартный алгоритм Метрополиса, основанный на перевороте одного спина, совершает маленькие шаги в конфигурационном пространстве (рис 1.1). Состояния оказываются сильно коррелированными между собой (т.е. новое состояние системы сильно зависит от предыдущего и приходится делать большое количество Монте-Карло шагов, чтобы система «забыла» свое состояние).

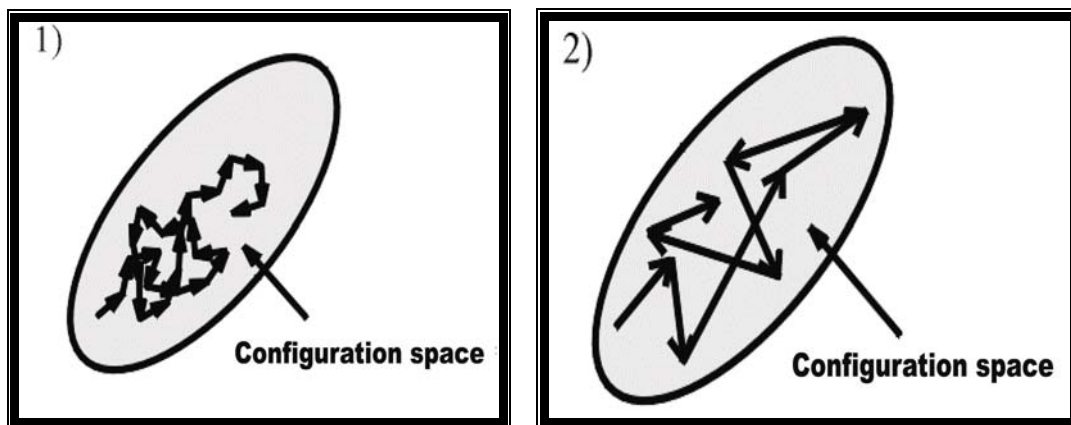


Рис. 1.1. Перемещения системы в конфигурационном пространстве при Монте-Карло моделировании;

- 1) Стандартный алгоритм, основанный на перевороте одного спина.
- 2) Кластерные алгоритмы, основанные на перевороте кластеров.

Система долго переходит в состояние равновесия. Это особенно сильно проявляется на больших решетках и вблизи критической точки, что делает стандартный алгоритм неэффективным при изучении критических свойств. В отличие от стандартного, кластерные алгоритмы основаны на перевороте кластеров, содержащих много спинов, система совершает большие скачки в фазовом пространстве (рис. 1.1) (соседние состояния в марковской цепи становятся слабо коррелированными) и время релаксации системы значительно уменьшается. Среди всех новых алгоритмов своей эффективностью выделяются два: многокластерный алгоритм Свендсена-Янга (Swendgen-Wang) [14] и однокластерный алгоритм Вольфа (Wolff) [13, 14]. Коротко рассмотрим их суть.

Алгоритм Свендсена – Янга основан на двух преобразованиях:

- 1) спиновая конфигурация заменяется конфигурацией связей;
- 2) конфигурация связей используется, чтобы сконструировать новую конфигурацию спинов.

Оба этих этапа основаны на использовании случайных чисел.

Связи между ближайшими соседями S_i выбранного спина S_j устанавливаются с вероятностью $P = 1 - \exp(-2K)$, где $K = J/k_B T$, если S_j имеет то же самое значение, что и S_i . Если соседние спины S_i и S_j имеют разные значения, между ними связь не устанавливается, и они одному кластеру принадлежат, не могут. В пределах одного кластера все спины имеют одинаковое значение. Таким образом, вся система разбивается на множество кластеров, содержащих одинаково направленные спины. Затем каждый из кластеров переворачивается с вероятностью $p_{flip} = 1/2$.

Алгоритм особенно эффективен при векторизации расчетов и для больших решеток. О высокой эффективности алгоритма говорят и значения z , полученные для модели Изинга (таблица 1.1).

Одно-кластерный алгоритм Вольфа [13] отличается от рассмотренного двумя особенностями:

1. Вокруг выбранного спина S_i как и в алгоритме Свендсена - Янга формируется кластер, после просмотра всех ближайших соседей спина S_i с вероятностью $P = 1 - \exp(-2K)$ в кластер включаются ближайшие соседи последнего вошедшего в кластер на предыдущем шаге спина S_j , имеющие такое же значение спина, эта процедура продолжается до тех пор, пока не будут просмотрены все ближайшие соседи вошедших в кластер спинов или достигнуты границы системы;
2. Полученный кластер переворачивается с вероятностью $p_{flip} = 1$.

Применения этого алгоритма к моделям с непрерывной симметрией рассмотрены в [13].

В таблице 1.1 даны значения критического индекса z , характеризующего эффективность алгоритма (следует отличать его от индекса z , характеризующего критическую динамику), определенные из времен релаксаций различных термодинамических переменных (энергии

E , намагниченности m и восприимчивости χ) для двух- и трехмерной модели Изинга.

Таблица 1.1. Значения критического индекса z модели Изинга для различных алгоритмов.

Алгоритм	$d = 2$	$d = 3$	Переменная	Работа
Метрополиса	2.16	2.03	E и m	[95,96]
Свендсена-Янга	0.27	0.50	E	[97]
	0.20	0.50	χ	
Вольфа	0.26	0.28	E	[97]
	0.13	0.14	χ	

Оба эти алгоритма эргодичны и не локальны. Несмотря на то, что, на практике они широко используются, все еще остается ряд вопросов, связанных с эффективностью этих алгоритмов как при сравнении между собой, так и применительно к тем или иным моделям. Например, в [55] отмечалось, что главная причина более высокой эффективности алгоритма Вольфа заключается в том, что средний размер переворачиваемого кластера больше, чем в случае алгоритма Свендсена-Янга. Также отметим, что до последнего времени эти алгоритмы в основном использовались при исследовании однородных систем (таких как модель Изинга, Гейзенберга, ХУ – модель, модели Поттса и т.д.) в отсутствии структурного беспорядка. Исследованию неупорядоченных моделей с замороженными немагнитными примесями, из-за возникающих различных трудностей, уделялось слишком мало внимания.

§ 1.3. Конфигурационное усреднение.

Главная проблема при решении статистических задач в спиновых системах с беспорядком состоит в том, что этот беспорядок является замороженным. Формально все результаты для наблюдаемых физических величин в таких системах должны зависеть от полной матрицы спин-спиновых взаимодействий J_{ij} , то есть они должны определяться макроскопическим числом параметров. Очевидно, что наблюдаемые физические величины должны зависеть от некоторых общих, то есть усредненных характеристик по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженного беспорядка. Здесь мы приходим к понятию **самоусреднения**.

Традиционный способ рассуждения о том, почему должно возникать самоусреднение, состоит в следующем. Гиббсовский подход к статическим коллективным явлениям предполагает статистическую независимость макроскопических образцов согласно короткодействующей природе взаимодействия между частицами. В согласии с этим подходом любая термодинамическая экстенсивная величина M , например, внутренняя энергия E , теплоемкость C , или восприимчивость χ , является **сильно самоусредняющейся**. Это значит, что квадрат относительной средней квадратичной флуктуации R_M величин подсистем ведет себя согласно

$$R_M = \frac{V_M}{[M]^2} \sim \frac{1}{n} \sim L^{-d}, \quad (1.31)$$

где квадратные скобки [...] означают конфигурационное усреднение по ансамблю неупорядоченных спиновых систем с различной реализацией замороженного беспорядка, $V_M = [M^2] - [M]^2$, n - число подсистем и L - линейный размер системы [38]. Однако в окрестности критической точки T_c статистическая независимость не имеет места, поскольку

корреляционная длина системы R_c может принимать произвольно большие значения $R_c \sim L$, и, таким образом, подсистемы нельзя рассматривать как независимые.

Понятие **слабого самоусреднения** отвечает случаю, когда существует число x_1 ($0 < x_1 < d$) такое, что R_M в критической области масштабируется согласно выражению [38]

$$R_M \sim L^{-x_1}. \quad (1.32)$$

Наоборот, если $R_M \rightarrow const \neq 0$, величина M называется **несамоусредняющейся** [38]. На основе эвристических аргументов предполагалось, что для неупорядоченных моделей далеко от критической области все экстенсивные переменные являются самоусредняющимися. Тем не менее, для величины M , масштабирующейся вблизи критической точки как L^ρ , сильное самоусреднение должно не выполняться. Тогда предполагается, что квадрат средней флуктуации будет масштабироваться как

$$R_M \sim L^{2\rho+\alpha/\nu}. \quad (1.33)$$

В работе [43] предполагается, если критический индекс теплоемкости неупорядоченных спиновых систем $\alpha_{random} < 0$ тогда квадрат относительной средней квадратичной флуктуации R_M масштабируется как

$$R_M \sim L^{\alpha/\nu}, \quad (1.34)$$

которое характерно для слабого самоусреднения.

Надежность Монте-Карло моделирования зависит от ответа на вопрос, улучшает ли статистику моделирований увеличение размера решетки. Если величина не самоусредняется, данные такого моделирования ненадежны.

Теоретические исследования, основанные на подходе ренормализационной группы, подтвердили сильное самоусреднение когда

линейный размер исследуемой системы на много больше корреляционной длины $L \gg R_c$. В отличие от этого, в специальных Монте-Карло исследованиях было найдено отсутствие самоусреднения в конечных системах в случае существенного беспорядка $\alpha_{pure} > 0$. Оказалось, что слабое самоусреднение реализуется только для несущественного беспорядка [56], что не согласуется с [43]. Монте-Карло моделирование, выполненное в работе [38], имело целью решить эту проблему. Было показано, что относительная флуктуация R_M стремится к постоянной величине при больших значениях L , которые не зависят от степени разбавления большого канонического типа. При каноническом типе разбавления [38] это не имеет места. Последний результат, авторы интерпретировали в работе [57] как очень медленное приближение R_M к своему универсальному асимптотическому значению, которое оценивается как $L^{\alpha/\nu}$, в случае трехмерной неупорядоченной модели Изинга с каноническим распределением замороженного беспорядка.

С целью определения переходной зоны между классами универсальности чистой и разбавленной модели Изинга изучали эволюцию самоусреднения от чистой модели к разбавленной трехмерной модели Изинга [58]. Было показано, что переходная зона гладко зависит от концентрации магнитных узлов p и не зависит от размера решетки L . Наоборот, величины критических показателей не зависят от концентрации и совпадают с данными работы [39]. Была сделана оценка универсального значения относительной флуктуации восприимчивости в пределе бесконечного объема: $R_M(\infty) = 0.155$.

Для неупорядоченных спиновых систем с замороженным беспорядком значения термодинамических параметров восприимчивости χ , намагниченности m и теплоемкости C для отдельно взятых примесных конфигураций с различным распределением

вмороженного беспорядка флуктуируют. Вопрос распределения этих термодинамических параметров по ансамблю неупорядоченных систем с различным распределением немагнитных примесей недостаточно исследован [38, 43]. В работе [38] было обнаружено, что беспорядок, реализованный каноническим способом (с фиксацией доли магнитных узлов), ведет к результатам, отличным от случая, когда беспорядок реализовался способом большого канонического типа. Причем исследованию вопроса распределений термодинамических параметров в спиновых системах, в которых беспорядок реализован большим каноническим способом посвящено большое количество работ [35, 37-39], в то время как исследование вопроса распределения термодинамических параметров в системах разбавленных каноническим способом в рамках единого методического подхода, насколько нам известно, не проводилось.

В связи с этим, для выяснения вопроса распределений термодинамических параметров по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией вмороженных немагнитных примесей нами рассматривалась $3d$ модель Поттса с линейным размером $L=20$ разбавленная немагнитными примесями каноническим способом при концентрации спинов $p=0.8$. На рисунке 1.2 представлены как равновесные значения восприимчивости χ_j полученные для различных примесных конфигураций j данной модели, $1 \leq j \leq N_s$, где N_s – общее число различных примесных конфигураций, так и усредненные значения $[\chi_j]$, по соответствующим примесным конфигурациям j для концентрации спинов $p=0.8$. Видно, что флуктуация усредненной восприимчивости $[\chi_j]$ в слабо разбавленном режиме становится незначительной после 60-80 реализаций примесных конфигураций j . Очевидно, для исследуемых нами неупорядоченных систем с каноническим распределением примесей использованное нами для

усреднения количество примесных конфигураций позволяет достичь асимптотический критический режим.

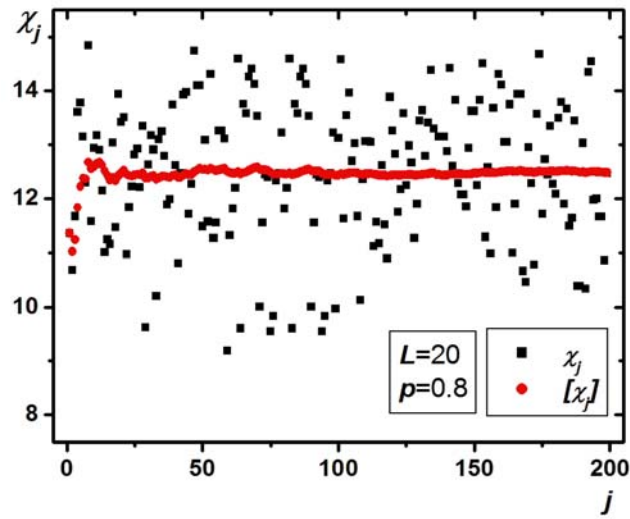


Рис. 1.2. Распределение восприимчивости χ_j по различным примесным конфигурациям разбавленной $3d$ модели Поттса с $L=20$ при $p=0.8$ и $T=T_c$.

Так же надежность результатов, полученных методами Монте-Карло, зависит от точности самого метода и от того, насколько исследуемая модель соответствует реальной системе. Последнее зависит от того, правильно ли описано взаимодействие частиц друг с другом, как учитывается характерное для реальной системы неупорядоченность, обусловленная примесями и т.д. При анализе точности метода Монте-Карло следует различать **статистическую** погрешность, обусловленную конечностью числа испытаний (цепи Маркова), и **систематическую** погрешность, обусловленную конечностью числа частиц в моделируемой системе, периодическими граничными условиями и приближениями при подсчете термодинамических характеристик системы [59, 60].

Поэтому при анализе погрешностей реализации необходимо учесть следующие факторы:

1. При работе в каноническом ансамбле число частиц в объеме ячейки V фиксируется и таким образом исключается возможность флуктуации числа частиц в объеме V .
2. При подсчете энергии взаимодействия методом ближайшего образа не учитываются взаимодействия на расстояниях больших $\pm L/2$ по каждой оси.
3. Периодические граничные условия вносят в систему нефизические корреляции на больших расстояниях.

Систематические ошибки возникают, когда радиус корреляции становится больше линейных размеров системы, т.е. при приближении к точке фазового перехода. Однако, использование теории конечно-размерного скейлинга вблизи T_c позволяет хорошо снимать эффекты конечных размеров, и соответственно уменьшить связанные с ними систематические ошибки.

Конечность марковской цепи, и связанная с ней статистическая погрешность, – одно из основных ограничений метода Монте-Карло. Время наблюдения, в принципе, должно быть бесконечным, что, естественно, невозможно реализовать. При проведении численного эксперимента неизбежно возникает вопрос: что лучше, считать небольшую систему и набрать большую статистику, или считать большую систему, но с малой статистикой?

При выборе размеров моделируемой системы необходимо учитывать большое количество различных часто взаимоисключающих факторов. И этот выбор зависит от исследуемой модели, изучаемых термодинамических параметров, близости к критической области, типа компьютера, на котором проводятся расчеты, способа программирования, и целого ряда других факторов. Очевидно, что все это требует от исследователя осторожности и большого опыта.

Рассмотрим более подробно статистическую погрешность. Предположим, что мы провели M последовательных наблюдений некоторой величины A :

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{v=1}^M A(x_v). \quad (1.35)$$

Статистическая ошибка δA этой величины $\bar{A}$ может быть представлена в следующем виде:

$$\overline{\delta A^2} = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2], \quad (1.36)$$

Рассмотрим среднеквадратичную статистическую погрешность, возникающую при проведении M последовательных наблюдений величины $A_v \equiv A(X_v)$ [59]:

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{M} \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle = \\ &= \frac{1}{M^2} \left\langle \sum_{v=1}^M (A_v - \langle A \rangle)^2 \right\rangle + \frac{2}{M^2} \sum_{v_1=1}^M \sum_{v_2=v_1+1}^M (\langle A_{v_1} \cdot A_{v_2} \rangle - \langle A \rangle^2) \end{aligned} \quad (1.37)$$

Заменяя суммирование v_2 на $v_2 + v$ и, учитывая, что при тепловом равновесии имеется трансляционная инвариантность вдоль марковской цепи, уравнение (1.36) можно записать в следующем виде:

$$\langle \delta A^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] + \left\{ 1 + \frac{2}{M} \sum_{v=1}^M \left(1 - \frac{v}{M} \right) \phi_A^{(v)} \right\}, \quad (1.38)$$

где $\phi_A^{(v)}$ – автокорреляционная функция, которую можно задать в следующем виде:

$$\phi_A^{(v)} = \frac{\langle A_{v_1} \cdot A_{v_1+v} \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.39)$$

Этот результат можно интерпретировать ассоциировано со временем $t_\nu = \delta t \cdot \nu$, связанным с Монте-Карло процессом. Величина δt – интервал времени между двумя последовательными наблюдениями A_ν и $A_{\nu+1}$. И имеется возможность положить $\delta t = 1/N$, т.е. усреднение проводится после каждого Монте-Карло шага (или другими словами, после переворота каждого спина один раз в случае стандартного алгоритма Метрополиса). При этом легко показать, что последовательные состояния X_ν становятся сильно коррелированными при больших значениях N . Таким образом, более общим является выбор $\delta t = 1$ (соответствующему временной единице в 1 МК шаг на спин). Также вблизи критической температуры T_c часто более эффективным является выбор большего интервала времени, к примеру, $\delta t = 10$. Таким образом, заменяя $\varphi_A^{(\nu)}$ на $\varphi_A(t)$ (отмечая также инвариантность соотношений относительно выбора начала временного отсчета), можно записать:

$$\varphi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (1.40)$$

Заменяя в уравнении (1.39) суммирование интегрированием по времени, получим:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right] \left\{ 1 + 2 \int_0^{t_M} \frac{dt}{\delta t} \left(1 - \frac{t}{t_M} \right) \varphi_A(t) \right\}. \quad (1.41)$$

Тогда время релаксации τ_A можно определить как

$$\tau_A = \int_0^\infty \varphi_A(t) dt, \quad (1.42)$$

и, полагая, что время наблюдения $\tau_M \gg \tau_A$, уравнение (1.42) можно записать в следующем виде:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \cdot \left(1 + \frac{2\tau_A}{\delta t} \right). \quad (1.43)$$

Если время $\tau_A/\delta t \ll 1$, то $(1 + 2\tau_A/\delta t) \approx 1$ и

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \approx \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2], \quad (1.44)$$

если $\tau_A/\delta t \gg 1$, тогда

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \approx 2 \frac{\tau_A}{\tau_M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]. \quad (1.45)$$

Из этой формулы следует, что статистическая погрешность не зависит от выбора временного интервала δt , а зависит только от величины $n = \tau_M/(2\tau_A)$. За фиксированное время t_v выбор меньшего значения δt приводит к большому числу наблюдений, но не приводит к уменьшению статистической погрешности. Для уменьшения погрешности существенно лишь отношение времени релаксации τ_A к времени наблюдения за системой τ_M . Следовательно, оценка времени релаксации необходима для правильной оценки величины статистических ошибок. Из этих же соображений становится очевидным необходимость разработки алгоритмов, которые уменьшают критическое замедление около точки фазовых переходов или, при возможности, даже удаляют его полностью. Обычно, $\langle \delta A \rangle$ не равно значению $(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)/M$, полученному для простой выборки, а отличается от него на множитель $(1 + 2\tau_A/\delta t)$. Этот множитель обуславливает «статистическую неэффективность» метода.

Очевидно, что самый простой способ уменьшить статистическую погрешность, это увеличить число независимых (некоррелированных) испытаний. Но очень часто идти по этому пути невозможно из-за ограниченности вычислительных мощностей современных компьютеров. Другой способ воспользоваться зависимостью

погрешности от размеров моделируемой системы: если при увеличении размеров системы погрешность уменьшается достаточно быстро, то, возможно, имеет смысл исследовать систему с большими размерами, но с меньшей статистикой. С конечными размерами моделируемых систем связаны также и систематические ошибки метода Монте-Карло. Отметим также, что конечно-размерные эффекты возникают, когда радиус корреляции ξ становится больше линейных размеров системы L . В точке фазового перехода $\xi \rightarrow \infty$ и преодолеть проблему конечных размеров $L < \infty$ невозможно. Однако, использование идей конечно-размерного скейлинга [18–21] позволяет предсказывать свойства бесконечно больших систем исходя из данных, полученных для конечных систем.

При численном исследовании неупорядоченных статистических моделей необходимо проводить конфигурационное усреднение по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженного беспорядка. В такого рода исследованиях следует дополнительно учесть статистическую погрешность, обусловленную флуктуациями примесей в распределении по решетке. Данную статистическую ошибку определяют следующим образом

$$(\delta[\overline{A_x}])^2 = \frac{1}{(n-1)n} \sum_{x=1}^n (\overline{A_x} - [\overline{A_x}])^2, \quad (1.46)$$

где n - число неупорядоченных примесных конфигураций, квадратные скобки означают усреднение по ансамблю неупорядоченных примесных конфигураций с различной реализацией беспорядка. Таким образом, в неупорядоченных спиновых системах статистические ошибки обусловлены с одной стороны, конечностью числа Монте-Карло испытаний при термодинамическом усреднении, а с другой стороны флуктуациями примесей в распределении по решетке.

Другим основным моментом статистических ошибок является вопрос, как они зависят от линейных размеров моделируемых систем. Таким образом, для намагниченности m и энергии E можно показать, что среднеквадратичная статистическая погрешность обратно пропорциональна размерам системы $N = L^d$ [59]:

$$\langle (\delta m)^2 \rangle = \frac{2\tau_m}{\tau_M} \frac{k_B T \chi}{L^d}, \quad (1.47)$$

$$\langle (\delta E)^2 \rangle = \frac{2\tau_E}{\tau_M} \frac{k_B T^2 C}{L^d}, \quad (1.48)$$

Случай, когда среднеквадратичная погрешность меняется обратно пропорционально размерам системы принято называть **«сильным самоусреднением»**. И этот случай наблюдается только вдали от T_c , поскольку в T_c оно заменяется так называемым **«слабым самоусреднением»**.

Следовательно, в T_c , для систем с конечными размерами χ и C масштабируются как $\chi(T = T_c) \propto L^{\gamma/\nu}$, $C(T = T_c) \propto L^{\alpha/\nu}$, где α , γ и ν – статические критические индексы теплоемкости, восприимчивости и радиуса корреляции соответственно.

Тогда мы имеем [59]:

$$\langle (\delta m)^2 \rangle \propto \frac{1}{n} L^{\gamma/\nu-d}, \quad T = T_c, \quad (1.50)$$

$$\langle (\delta E)^2 \rangle \propto \frac{1}{n} L^{\alpha/\nu-d}, \quad T = T_c. \quad (1.51)$$

Ситуация сильно изменяется если мы рассматриваем ошибки величин, которых находим из флуктуационных соотношений, таких как, к примеру, теплоемкость C и восприимчивость χ . В этом случае можно записать [59]:

$$(k_B T \Delta \chi)^2 = \frac{1}{n} L^{2d} \left[\langle (\delta m)^4 \rangle - \langle (\delta m)^2 \rangle^2 \right], \quad (1.52)$$

$$(k_B T^2 \Delta C)^2 = \frac{1}{n} L^{2d} \left[\langle (\delta E)^4 \rangle - \langle (\delta E)^2 \rangle^2 \right]. \quad (1.53)$$

Так как вдали от T_c и δm и δE при достаточно больших L имеют гауссовское распределение, $\langle (\delta m)^4 \rangle = 3 \langle (\delta m)^2 \rangle^2$ и $\langle (\delta E)^4 \rangle = 3 \langle (\delta E)^2 \rangle^2$, уравнения (1.39 – 1.40) можно записать в следующем виде:

$$\sqrt{(k_B T \Delta \chi)^2} = \sqrt{\frac{2}{n} L^d \langle (\delta m)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} k_B T \Delta \chi}, \text{ т.е. } \sqrt{(\Delta \chi)^2} / \chi = \sqrt{2/n}, \quad (1.54)$$

$$\sqrt{(k_B T^2 \Delta C)^2} = \sqrt{\frac{2}{n} L^d \langle (\delta E)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{2}{n} k_B T^2 \Delta C}, \text{ т.е. } \sqrt{(\Delta C)^2} / C = \sqrt{2/n}. \quad (1.55)$$

Таким образом, мы видим, что относительная ошибка величин, определяемых из флуктуационных соотношений, не уменьшается совсем с повышением L , но становится небольшой только тогда, когда число статистически независимых состояний n становится большим. Этот случай называется «**плохим самоусреднением**» [59].

Из вышесказанного следует, что при проведении численного эксперимента исследователь должен обладать большим опытом и требуется значительная осторожность для недопущения различных непредсказуемых ошибок. Поэтому, чтобы исключить возможность каких-либо непредвиденных ошибок принимаются различные меры [45, 60]:

1. **Контрольные тесты.** Для контрольных тестов сначала прогоняют программу для системы, у которого есть точное аналитическое решение или же проверяют выполнения каких-либо тождеств для данной системы, которые известны аналитически. И, сравнивая

эти результаты с точными результатами, судят о точности данного метода.

2. **Сопоставление с предельными аналитическими выражениями.** В условиях слабой не идеальности справедливы строгие теории, основанные на разложениях по малому параметру; существуют также модельные задачи, имеющие точные решения. Сравнивая результаты Монте-Карло эксперимента с ними можно также оценить точность данного метода.

3. **Самосогласованность результатов.** Результаты расчета различных термодинамических характеристик системы по различным соотношениям должны быть согласованными друг с другом в пределах статистической погрешности.

Дублирование результатов. Результаты для одних и тех же модельных систем, полученные с помощью различных микроскопических ансамблей, должны дублировать друг друга.

ГЛАВА II. ИССЛЕДОВАНИЕ СТАТИЧЕСКИХ КРИТИЧЕСКИХ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА С НЕМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

§2.1. История модели Поттса.

Данную модель определил в 1952 г. Поттс [61] по предложению С. Домба. Изначально, проблема, предложенная Домбом, должна была относиться к модели Изинга как системе взаимодействующих спинов, которые могут быть как параллельны, так и антипараллельны. Затем должно быть проведено обобщение для системы спинов ограниченных на плоскости с равномерными направлениями заданных углами.

$$Q = \frac{2\pi n}{q}, n=0,1,\dots,q-1 \quad (2.1)$$

В наиболее общей форме взаимодействие ближайшего соседа зависит только от ближайшего относительного угла между двумя спинами. Это известно как система симметрии $Z(q)$, чей Гамильтониан читается как:

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J(Q)_{ij} \quad (2.2)$$

$$J(Q) = -\varepsilon_1 \cos(Q) \quad (2.3)$$

где функция $J(Q)$ -является 2π периодической и $Q_{ij} = Q_{ni} - Q_{nj}$ угол

Используя анализ Крамера-Ваннера (1941), Поттс сумел определить критическую точку этой модели на квадратной решетке для $q=2, q=3, q=4$. так как не было возможности расширить результаты до $q>4$, Поттс привел критическую точку для всех q следующей модели:

$$J(Q_{ij}) = \varepsilon_2 \delta_{Kr}(n_i, n_j) \quad (2.4)$$

$$\delta_{kr}(n_i, n_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } n_i = n_j \\ 0, & \text{если } n_i \neq n_j \end{cases}$$

Это так называемая стандартная модель или модель Ашкина-Теллера. Модель Поттса ферромагнитная, если $\varepsilon_2 > 0$, и антиферромагнитная если $\varepsilon_2 < 0$. Выражение (2.4) можно дополнительно сформулировать для отображения ее полной симметрии в q -1 размерном пространстве. Это будет выглядеть следующим образом:

$$\delta_{kr}(\alpha, \beta) = \frac{1}{q} [1 + (q-1)e^\alpha e^\beta] \quad (2.5)$$

где e^α , $\alpha=0,1,\dots,q-1$.

На рис.2.1. показано схематическое изображение модели Поттса с числом состояний спина q .

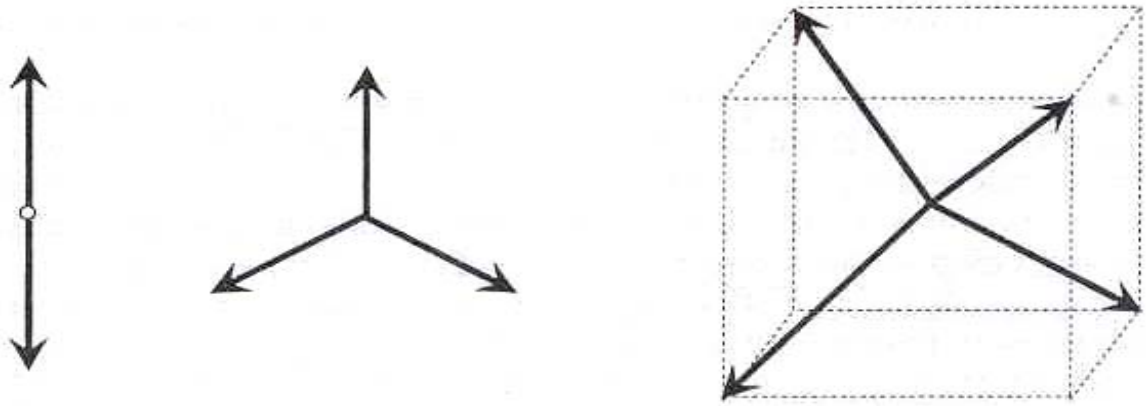


Рис.2.1. схематическое изображение модели Поттса с числом состояний спина q .

На рис.2.2. приведена фазовая диаграмма Модели Поттса, известно, что в чистой модели Поттса с $q > q_c(d)$ наблюдается ФП первого рода, а для $q < q_c(d)$ ФП второго рода, в частности $q_c(d=2)=4$, $q_c(d=3)=2.45$. Причем для $q_c(d=2)=4$ наблюдается ФП второго рода, а для $q_c(d=3)=2.45$ – слабо выраженный ФП первого рода [62, 63]. Внесение замороженных немагнитных примесей в чистую модель Поттса для случая $q > q_c(d)$,

смягчает ФП первого рода вплоть до ее смены на ФП второго рода [64]. В работах [65, 66] строго было доказано, что для низкоразмерных систем $d \leq 2$, описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$ наличие сколь угодно малой величины замороженного беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода.

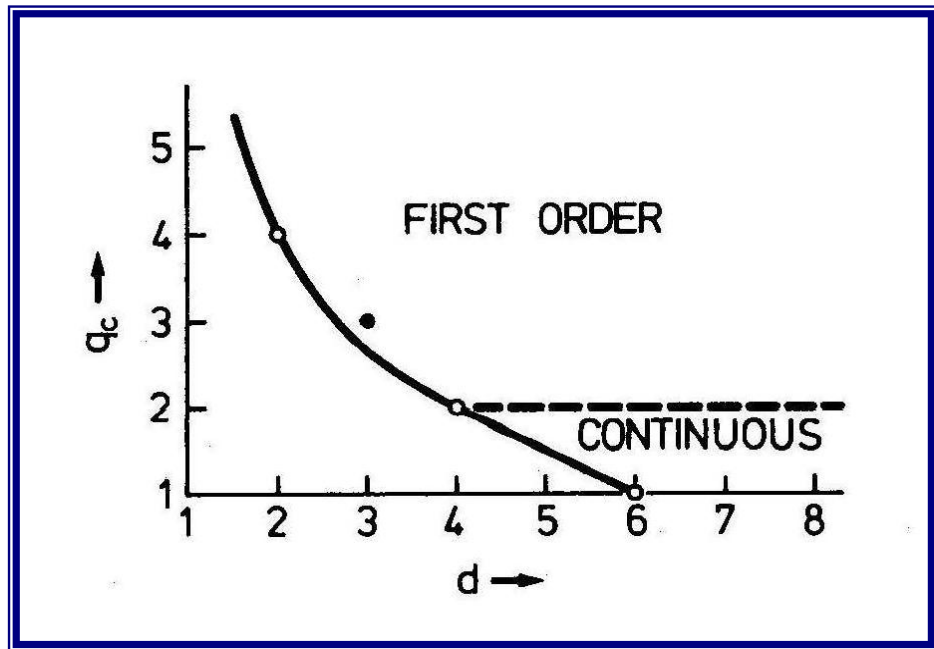


Рис.2.2. Фазовая диаграмма модели Поттса

При построении модели Поттса необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. Каждый узел в модели Поттса может находиться в одном из $q \geq 2$ состояний.
2. Энергия парного взаимодействия принимает одно значение, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (безразлично, в каких именно), и другое значение, если они находятся в разных состояниях (опять же все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей гамильтониан модели Поттса может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j) - H_0 \sum_i \rho_i \delta(S_i, q), \quad S_i = 1, 2, 3, \dots, q \quad (2.6)$$

где

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \quad (2.7)$$

где ρ_i - замороженные величины, которые могут так же, как и в модели Изинга с вмороженным беспорядком принимать два значения 0 и 1. Среднее значение $\langle \rho_i \rangle = p$ равно вероятности того, что узел i занят магнитным спином S_i .

Следует иметь в виду, что критическое поведение такой системы, различно при разных концентрациях спинов p . Система может перейти в магнитоупорядоченную фазу при понижении температуры лишь в том случае, если $p > p_c$, где p_c - критическая концентрация порога перколяции по узлам. Важно отметить, что лишь в этом случае существует бесконечный связный кластер. Критическая температура перехода из парамагнитной в ферромагнитную фазу $T_c(p)$ должна монотонно убывать с уменьшением концентрации магнитных атомов p . В [67] установлено, что для разбавленной ферромагнитной модели Поттса $T_c(p) \propto p - p_c$ между двумя спинами при соседних узлах i и j . Каждый узел решетки характеризуется единичным вектором направленным по одному из N -равномерно распределенных по углам направлений. В работе [68] исследуется трехмерная модель Поттса с $q=3$, где показано, что в этой модели наблюдается слабо выраженный фазовый переход первого рода.

При исследовании модели Поттса нами использовался однокластерный алгоритм Вольфа метода Монте-Карло. Данный алгоритм применительно к этой модели реализовался в следующем виде:

1. Три случайных числа задают координаты i, j, k узла на решетке.

Если в этом узле находится немагнитная примесь, то генерируются

новые случайные числа до тех пор, пока не будут сгенерированы координаты магнитного спина S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят магнитным спином, то с вероятностью

$$P = 1 - \exp(-K), \quad (2.8)$$

где $K = J/k_B T$, k_B - постоянная Больцмана, T - температура, активируется связь между S_i и S_j , если S_i и S_j имеют одинаковые значения при $J > 0$. Заметим, что в случае модели Поттса для выражения вероятности включения спина в кластер (2.8) показатель 2 в экспоненте характерный для соответствующей вероятности модели Изинга исчезает. Таким образом, можно утверждать, что модель Поттса с состоянием спина $q=2$ эквивалентна модели Изинга с точностью численного фактора 2 в обменной константе J .

3. Если связь между спинами S_i и S_j активируется, то спин в узле j включается в кластер. Следует отметить, что также как и для модели Изинга с примесями один и тот же спин может быть включен в кластер только один раз, тогда как проверен на включение в кластер несколько раз.
4. После проверки всех ближайших соседей выбранного спина i , первый, включенный в кластер спин, становится «центральным», и начинается процесс активации связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут проверены все ближайшие соседи всех вошедших в кластер спинов или достигнуты границы системы.
5. Все спины, между которыми установлена связь, образуют «кластер».
6. Полученный кластер переворачивается с вероятностью равной 1. Переворот кластера в случае модели Поттса означает

присвоение всем спинам вошедших в кластер новое значение спина S'_i , с равной вероятностью среди всех его состояний q которое отлично от старого значения S_i . Затем переходим к пункту 2.

Об эффективности однокластерного алгоритма Вольфа применительно к модели Поттса можно судить по критическому индексу z характеризующий эффективность используемого алгоритма. В частности исследование чистой двумерной модели Поттса с $q=3$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа показало, что критический индекс $z=0.60\pm0.02$, в то время как использование классического алгоритма Метрополиса дает значение $z\approx2$ [14].

По выше описанному алгоритму Вольфа [13] реализовывался марковский процесс, для систем с периодическими граничными условиями. При этом рассматривались кубические решетки с линейными размерами $L=20-44$. В самом начале вычислений все спины направлены вдоль оси z . Для приведения исследуемых систем в состояние термодинамического равновесия отсекался участок Марковской цепи длиной 3×10^6 МК шагов/спин (напомним 1 МК шаг/спин – это один переворот кластера), что превосходило в десять и более раз неравновесный участок даже вблизи критической точки T_c . Термодинамическое усреднение исследуемых параметров проводилось по марковской цепи длиной до 18×10^6 МК шагов/спин. Конфигурационное усреднение по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженных немагнитных примесей проводилось по 1000 примесным конфигурациям.

§ 2.2. Результаты экспериментальных и теоретических исследований трехмерной модели Поттса с немагнитными примесями

Поскольку нами исследуются критические свойства трехмерной модели Поттса с замороженными немагнитными примесями, в этом параграфе дадим обзор имеющихся результатов как экспериментальных исследований на материалах соответствующих данной модели Поттса, так и результатов теоретических исследований полученных к этому времени.

§ 2.2.1. Результаты лабораторных экспериментов.

Модель Поттса служит основой теоретического описания некоторых явлений, наблюдаемых в экспериментах. Ряд физических систем описывается гамильтонианами, имеющими те же свойства симметрии, что и модель Поттса, и, следовательно, принадлежащими к классу универсальности этой спиновой модели. Рассмотрим здесь некоторые из таких систем.

Адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита может описываться моделями решеточного газа Поттса. Такие физически адсорбированные пленки дают экспериментальную реализацию фазовых переходов в двухмерных системах. В работе [69] изучалась адсорбция криптона на графите, где центры адсорбции образуют треугольную решетку на базисной грани кристалла графита. Показано, что адсорбированные атомы (адатомы) криптона взаимодействуют попарно: потенциал взаимодействия положителен (неблагоприятен) и очень велик (в 350 раз больше глубины ямы E) для ближайших соседей и отрицателен (благоприятен) для остальных; при этом потенциал существенно короткодействующий. Такие свойства потенциала приводят к исключению ближайших соседей, вследствие чего моно слой криптона завершается, когда заполняется одна из подрешеток. Исходя из этих

свойств задача о криптонном решеточном газе авторы работы [69] аппроксимируют, используя свойство исключения ближайших соседей моделью решеточного газа Поттса и с помощью ренормгруппы получена фазовая диаграмма, хорошо описывающая экспериментальные данные по адсорбции.

В работе [70] вводится обобщение трехкомпонентной модели Поттса, в которой спиновые состояния связываются с направлениями в решетке. Такая ситуация реализуется при адсорбции азота на графитной подложке, имеющей гексагональную структуру. Используя теорию среднего поля, исследуются границы между фазами в этой модели. Следует отметить, что модель Поттса реализуется также в анизотропных ферромагнетиках кубической структуры [71]. В [72] измерялась намагниченность редкоземельного композитного материала $DyAl_2$ при температурах, меньших критической, в очень сильных магнитных полях. Было показано, что при низких температурах скачок намагниченности в этом материале составляет 25% ее полного значения. По мере того как приложенное поле поворачивается от направления [111] к [110], скачок намагниченности уменьшается, а затем фазовый переход становится переходом второго рода. Из результатов экспериментальных исследований следовало, что для трехмерной модели Поттса предсказания теории среднего поля [73], по крайней мере, качественно, верны.

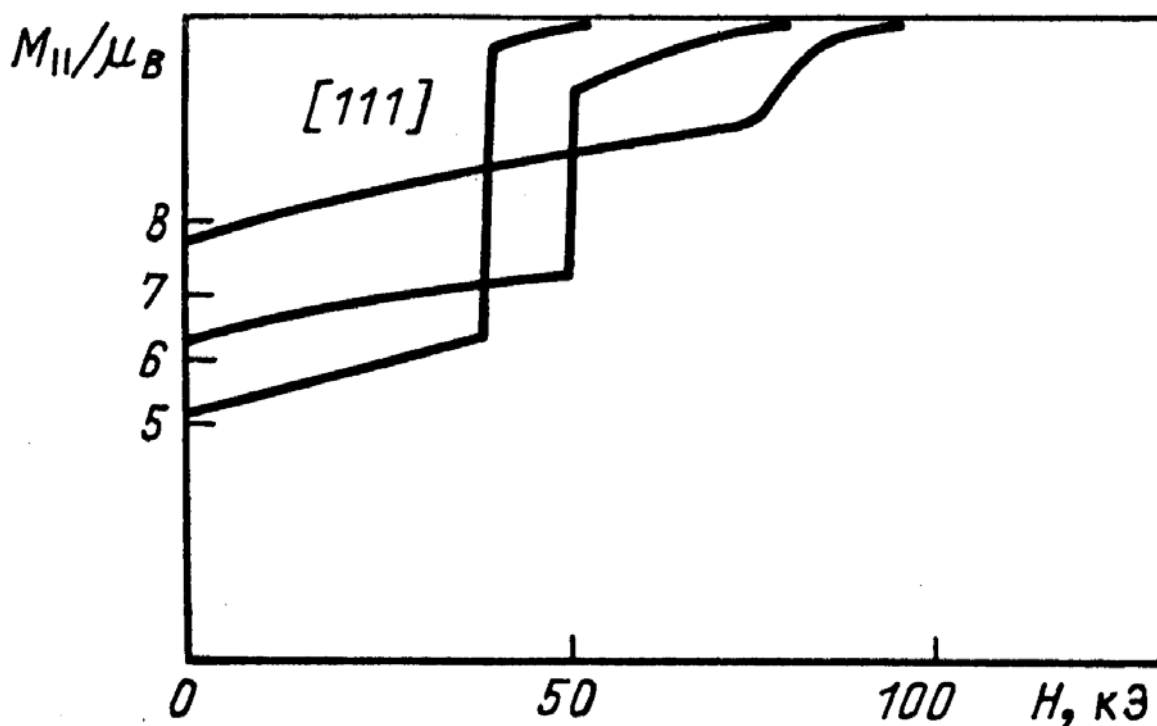


Рис. 2.3. Кривая намагниченности $DyAl_2$ при $T=4.2\text{ K}$.

Отметим также, что структурные фазовые переходы в некоторых материалах, в таких как $SrTiO_3$ [74], относятся к классу универсальности модели Поттса с $q=3$. Композитные материалы кристаллографической структуры $A15$, такие, как Nb_3Sn , являются сверхпроводниками, претерпевают структурный фазовый переход, при котором их кристаллографическая структура превращается из кубической в тетрагональную. Среди работ посвященных численному исследованию двумерной модели Поттса с $q=3$ и 4 в отсутствии структурного беспорядка можно отметить работы [75, 76], в которых показано универсальность отношения критических амплитуд восприимчивости.

Термодинамические свойства слабо конденсированных сред описываются замороженными решетчатыми системами. Простейшей моделью является разбавленная модель Поттса с вмороженными немагнитными примесями.

§2.2.2. Результаты теоретических исследований неупорядоченной модели Поттса

Ряд физических систем описывается гамильтонианами, имеющими те же свойства симметрии, что и модель Поттса, и, следовательно, принадлежащими классу универсальности этой спиновой модели. Поэтому в данном параграфе дадим обзор имеющихся результатов исследований неупорядоченной модели Поттса, полученных к настоящему моменту.

Исследования, проведенные на основе $3d$ модели Поттса с $q=4$, в которой беспорядок реализован в виде замороженных случайных ферромагнитных связей, выявило, что ниже концентрации ферромагнитных связей $p \approx 0.8$ наблюдается ФП второго рода, а выше – первого рода [64].

Что касается трехмерной модели Поттса с немагнитными примесями при $q=3$, то к настоящему времени критическое поведение этой модели с соблюдением единого методического подхода исследовано не достаточно полно, не установлен класс универсальности критического поведения, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей каноническим способом.

В [78] разбавленная модель Поттса в поперечном поле исследовалась методом ренормализационной группы теории среднего поля. Найдены критические поверхности в пространстве поле - температура - концентрация и некоторые критические показатели. Данные модели служат, в частности, основой описания слабо упорядоченных магнетиков, в которых атомы, обладающие магнитным моментом, случайным образом расположены среди немагнитных атомов решетки. В таких системах возникает фаза спинового стекла, где магнитные моменты примесей заморожены в фиксированных случайных направлениях, то есть когда имеется ближний порядок при отсутствии

дальнего [79]. Согласно многочисленным экспериментальным данным [80], фаза спинового стекла наблюдается при достаточно низких температурах в пределах от нескольких до десятков градусов и концентрациях магнитных примесей в пределах от долей процента до десятков процентов. Спины случайно распределенных магнитных атомов взаимодействуют между собой при помощи косвенного обменного взаимодействия через электроны проводимости, называемого взаимодействием Рудермана-Киттеля-Касуи-Иосиды (РККИ) [81].

Указанная концентрация примесей достаточно мала для того, чтобы: исключить прямой обмен (когда спины находятся в соседних узлах), но достаточно велика для того, чтобы взаимодействие между спинами примесей не было пренебрежимо (в отличие от систем Кондо).

Впервые метод теоретического описания систем данного типа на основе модели Изинга ($q=2$) был разработан в [82]. В ней предложено рассматривать спины на регулярной решетке меньшего размера, в которой каждый узел занят магнитным атомом. Поскольку взаимодействие РККИ - дальнедействующее и осциллирующее, то считается, что на регулярной решетке интенсивности парного обменного взаимодействия J_{ij} являются независимыми случайными величинами с плотностями вероятности $P_{ij}(J_{ij})$. Очевидно, что эквивалентную систему следует считать замороженной.

Подавляющее большинство исследователей ограничиваются гауссовой плотностью вероятности интенсивностей взаимодействия. В случае модели Изинга такую решетку обычно называют моделью Шеррингтона - Киркпатрика, поскольку решение для данной модельной задачи было получено ими в работе [83]. Распределение

$$P_{ij}(J) = c\delta(J - \bar{J}) + (1 - c)\delta(J + \bar{J}), \quad (2.9)$$

соответствует так называемой фрустрационной модели [84]. Параметр c - может описывать, например, концентрацию ферромагнитных связей. В

работе [85] изучена стохастическая модель Поттса, в которой число спиновых состояний различно в разных узлах. Обнаружено, что тип фазового перехода может меняться при изменении заселенности узлов.

§ 2.3. Гипотеза конечно-размерного скейлинга.

Гипотеза подобия или теория конечно-размерного скейлинга была предложена Фердинандом и Фишером и призвана учесть влияние конечных размеров системы на критические свойства [18-21]. Основные положения, заложенные в этой теории, сводятся к тому, чтобы экстраполировать результаты, полученные для системы с конечными размерами, к термодинамическому пределу $N = L^3 \rightarrow \infty$, и в последнее время широко используются [11,16,41,42]. Согласно этой теории свободная энергия достаточно большой системы с ПГУ при температуре T , близкой к критической температуре T_c бесконечной системы может быть представлена в виде:

$$F(T, L) \sim L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.10)$$

где $t = |T - T_c|/T_c$, $T_c = T_c(L = \infty)$ и ν - статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$).

Выражение для свободной энергии (2.10) после обобщения на случай неупорядоченных систем примет следующий вид [38,64]:

$$[F(T, L)] \sim L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.11)$$

где квадратные скобки [...] означают усреднение по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженного беспорядка.

При этом смещение «эффективной температуры» перехода с изменением размеров системы происходит в соответствии с выражением

$$\frac{k_B T_c(L)}{|J|} = \frac{k_B T_c}{|J|} + AL^{-1/\nu}, \quad (2.12)$$

где A – некоторая постоянная.

Соотношение (2.11) приводит к аналогичным зависимостям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящихся на один спин

$$C = [C_i(T, L)] \sim L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.13)$$

$$\chi = [\chi_i(T, L)] \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.14)$$

$$m = [m_i(T, L)] \sim L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (2.15)$$

можно также показать, что сингулярности термодинамических параметров имеют следующий вид простых степенных функций с дробными показателями [7]:

$$m_0 \sim (-t)^\beta \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.16)$$

$$m(H, T_c) \sim H^{1/\delta} \quad \text{при } H \rightarrow 0, \quad (2.17)$$

$$\chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.18)$$

$$\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.19)$$

$$\xi(0, T) \sim t^{-\nu} \quad \text{при } t \rightarrow 0^+, \quad (2.20)$$

$$\xi(0, T) \sim (-t)^{-\nu'} \quad \text{при } t \rightarrow 0^-, \quad (2.21)$$

где α , γ , γ' , β , ν и δ - статические критические индексы для системы с $L = \infty$, связанные соотношениями гиперскейлинга [7]:

$$2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma, \quad (2.22)$$

$$\gamma = \gamma' = \beta(\delta - 1), \quad (2.23)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (2.24)$$

$$\nu = \nu', \quad (2 - \eta)\nu = \gamma, \quad (2.25)$$

$$\delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta}. \quad (2.26)$$

Уравнения (2.12) - (2.15) хорошо воспроизводят критическое поведение бесконечно больших систем при $t \ll 1$ и $L \rightarrow \infty$.

Обратим внимание на то, что справедливость применения теории конечно-размерного скейлинга к чистым хорошо известным моделям было хорошо изучено в целом ряде работ [15, 16, 42]. Применимость теории КРС к спиновым системам с замороженным беспорядком изучено на весьма ограниченном числе неупорядоченных моделей [37, 38, 43]. К тому же в этих работах одни параметры рассчитываются на основе теории КРС, а другие с использованием соотношений гиперскейлинга. Обработка основных критических параметров для трехмерной модели Изинга разбавленной каноническим способом на основе теории КРС с соблюдением единой методики выполнено в работах [Муртазаева А.К., Бабаева А.Б., Азнауровой Г.Я.], а для моделей Поттса таких исследований до сих пор не было.

Из соотношений (2.14)-(2.15) следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим выражениям:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (2.27)$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}. \quad (2.28)$$

Эти соотношения были нами использованы для определения γ/ν и β/ν . В то же время, аналогичное выражение для теплоемкости не позволяет описывать наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работах [16, 41]. Для аппроксимации

температурной зависимости теплоемкости C от L как правило используют другие выражения, например [16, 41]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (2.29)$$

где A - некоторый коэффициент.

Значения критических температур $T_c(p)$ как для чистой трехмерной модели Изинга так и при наличии примесей аналитически неизвестны. Выражение (2.12) также малоприспособно для расчета критической температуры $T_c(p)$ фазового перехода из-за невысокой точности. На сегодняшний день значительно более высокоточным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [59]

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (2.30)$$

где угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают термодинамическое усреднение, m – намагниченность системы с линейным размером L . Для определения критической температуры T_c для спиновых систем с замороженным беспорядком необходимо определить температурную зависимость кумулянта $[U_L(T, p)]$ усредненного по примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка для нескольких размеров решетки ($L_1, L_2, \dots, L_n$). Критическая температура T_c определяется как значение температуры, при котором усредненное значение кумулянта не зависит от линейных размеров решетки

$$[U_{L_1}(T_c, p)] = [U_{L_2}(T_c, p)] = \dots = [U_{L_n}(T_c, p)]. \quad (2.31)$$

Этот метод позволяет определить T_c с большой точностью. Следует иметь в виду, что если в системе происходит фазовый переход первого рода, то в выражении (2.30) вместо намагниченности m необходимо использовать энергию системы E :

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle E^2(T, p; L) \rangle_L^2}. \quad (2.32)$$

Так же, применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными свойствами [14]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (2.33)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c(L)$, где V^* отлична от $2/3$, а минимальная величина $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p)$ расходится $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$.

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ имеют четко выраженную точку пересечения.

Следует отметить, что наряду с точностью определения температуры фазового перехода большую роль при исследовании критических свойств неупорядоченных систем играет и точность определения критического индекса радиуса корреляции ν . В большинстве работ посвященных исследованию трехмерных моделей с замороженным беспорядком критический индекс ν определен из соотношений гиперскейлинга (2.22)-(2.26) приведенных нами выше. При вычислениях данного индекса исследователи традиционно сталкиваются с серьезной проблемой так, как определить ν с большой точностью задача очень сложная. С появлением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка положение существенно улучшилось. Биндер показал, что кумулянты в критической области при $T \rightarrow T_c$ имеют максимальный наклон, и зависимость максимума наклона от линейных размеров системы имеет вид [59]:

$$\left(\frac{dU_L(T, p)}{d\beta} \right)_{T=T_c} = AL^{1/\nu} (1 + BL^{-\omega}), \quad (2.34)$$

где $\beta = 1/T$ (обратная температура), A, B – некоторые постоянные, ω – универсальная постоянная коррекции к скейлингу, и, следовательно, по максимальному наклону кумулянтов, соответствующих различным значениям L в пределе $L \rightarrow \infty$, вблизи точки их пересечения можно определить критический индекс ν .

Необходимо также подчеркнуть, что критическую температуру $T_c(p)$ для неупорядоченных моделей наряду с высокоточным методом кумулянтов Биндера часто определяют по экспериментальным данным максимума восприимчивости. При данном размере решетки L можно считать «критическим» значение температуры $T^*(p, L)$, при котором значение восприимчивости $\chi(p, T, L)$ для данной примесной конфигурации максимально. В этом случае для конкретной примесной конфигурации затруднительно определить положение максимума с погрешностью, существенно меньшей, чем радиус сглаживания $t_r = (T - T_c)/T_c$ в критической области. Для определения $T_c(p)$ этим способом необходимо иметь данные для разных размеров решеток и определять следующий предел

$$T_c(p) = \lim_{L \rightarrow \infty} T^*(p, L). \quad (2.35)$$

Следует иметь в виду, что для реализаций примесных конфигураций с различным распределением замороженных немагнитных примесей значения температур $T^*(p, L)$, различаются. По ним можно определять усредненное значение температуры $[T^*(p, L)]$ двумя способами [40].

Первый способ. Необходимо сначала усреднить магнитную восприимчивость χ_i по примесным конфигурациям i с различной реализацией замороженного беспорядка:

$$\chi(T, p, L) = [\chi_i(T, p, L)] \equiv \frac{1}{N_L} \sum_{i=1}^{N_L} \chi_i(T, p, L), \quad (2.36)$$

где N_L – число примесных конфигураций с различным распределением замороженного беспорядка. В последующем необходимо определить $T_c(p, L)$ по максимуму усредненной восприимчивости $\chi(T, p, L)$ выражения (2.35).

Второй способ. Данный способ заключается в нахождении критической точки $T_{c_i}^*(p, L)$ для данного образца i и усреднении по примесным конфигурациям:

$$T_c(p, L) = [T_{c_i}(p, L)] \equiv \frac{1}{N_L} \sum_i^{N_L} T_{c_i}(p, L). \quad (2.37)$$

Заметим, что моделирование решеток с большими линейными размерами требует с одной стороны существенного увеличения компьютерного времени, а с другой увеличения объема вычислений для каждой примесной конфигурации, поэтому число примесных конфигураций зачастую не очень велико.

Нами первоначальная локализация критической температуры $T_c(p)$ трехмерной модели Поттса с немагнитными примесями осуществлялась по положению максимума температурной зависимости магнитной восприимчивости как для отдельно взятой примесной конфигурации, так и по положению максимума усредненной восприимчивости по ансамблю неупорядоченных примесных конфигураций с различным распределением немагнитных примесей. Затем для более точного определения $T_c(p, L)$ применялся высокоточный метод кумулянтов Биндера (2.30).

Для определения критического индекса радиуса корреляции ν нами выражение (2.34) использовалось наряду с другими методами, что позволяет сравнить различные методы между собой и оценить точность определения индекса.

В настоящее время на основе теории конечно-размерного скейлинга предложен целый ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции ν [15]. В соответствии с этой теорией производная по

обратной температуре от логарифма любой степени намагниченности может быть представлена в виде

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln \langle m^n \rangle) = \frac{1}{\langle m^n \rangle} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle m^n \rangle = \left(\frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - E \right), \quad (2.38)$$

которая имеет такие же скейлинговые свойства, как и выражение (2.34).

Кроме того, в точке фазового перехода выполняется соотношение

$$[V_n] = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (2.39)$$

где g_{V_n} -некоторая постоянная величина, зависящая от деталей гамильтониана и граничных условий, а в качестве V_n могут выступать:

$$V_1 = \frac{\langle mE \rangle}{\langle m \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.40)$$

$$V_2 = \frac{\langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.41)$$

$$V_3 = \frac{\langle m^3 E \rangle}{\langle m^3 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.42)$$

$$V_4 = \frac{\langle m^4 E \rangle}{\langle m^4 \rangle} - \langle E \rangle, \quad (2.43)$$

$$V_5 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[\langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (2.44)$$

$$V_6 = 4[m^3] - 3[m^4], \quad (2.45)$$

$$V_7 = 2[m^2] - [m^4], \quad (2.46)$$

$$V_8 = 3[m^2] - 2[m^3], \quad (2.47)$$

$$V_9 = (4[m] - [m^4]) / 3, \quad (2.48)$$

$$V_{10} = (3[m^3] - [m^3]) / 2, \quad (2.49)$$

$$V_{11} = 2[m] - 3[m^2], \quad (2.50)$$

где $[m^n] = \ln \frac{\partial \langle m^n \rangle}{\partial T}$, T – температура, $\beta = 1/T$.

2.4. Критическое поведение трехмерной модели

Поттса с немагнитными примесями при $q=3$ на простой кубической решетке.

Результаты численного эксперимента

Для наблюдения за температурным ходом энергии U , теплоемкости C , восприимчивости χ и размера кластера $N_{cluster}$ (т.е. среднего числа спинов, входящих в переворачиваемый кластер) трехмерной модели Поттса разбавленной немагнитными примесями каноническим способом на простой кубической решетке с микроскопическим гамильтонианом вида (2.6) при нулевом внешнем поле нами использовались следующие соотношения [10, 36, 38]:

$$U = [\langle U \rangle] = \frac{1}{N} [\langle H \rangle], \quad (2.51)$$

$$C = (NK^2) \left[\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right], \quad (2.52)$$

$$\chi = (NK) \left[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right], \quad (2.53)$$

$$N_{cluster} = [\langle N_{cluster} \rangle] = \left[\left\langle \sum_{i=1}^N \rho_i S_i \right\rangle \right], \quad S_i = \begin{cases} 1, & i \in Cluster \\ 0, & i \notin Cluster \end{cases}, \quad (2.54)$$

где $K = |J|/k_B T$, $N = pL^3$ – число магнитных узлов, угловые скобки $\langle \dots \rangle$ означают термодинамическое усреднение, а квадратные $[\dots]$ – конфигурационное. Флуктуационные соотношения (2.52-2.53) можно легко получить из флуктуационно-диссипативной теоремы.

В качестве намагниченности m для разбавленной модели Поттса использовалось следующее выражение [64]:

$$m = \frac{\left[q \left(\frac{N_{\max}}{N} \right) - 1 \right]}{q - 1}, \quad (2.55)$$

где $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, \dots, N_q\}$, N_1 – число спинов в состоянии $q=1$, N_2 – число спинов в состоянии $q=2$, N_3 – число спинов в состоянии $q=3$ и т.д., $N=pL^3$.

На рисунке 2.4 и 2.5 представлены характерные зависимости усредненных значений по примесным конфигурациям с различной реализацией замороженных немагнитных примесей теплоемкости C , и восприимчивости χ от температуры T для систем с концентрацией магнитных узлов $p=1.0, 0.95, 0.90, 0.80, 0.70, 0.65$. Здесь и далее погрешность данных не превышает размеры использованных символов на рисунках. Как видно из рисунка 2.4, наличие немагнитных примесей приводит к сглаживанию максимумов теплоемкости и их уменьшению с ростом концентрации немагнитных атомов c , где $c=1-p$, что является характерной чертой разбавленных трехмерных магнетиков [36]. Отметим также, что в критической области восприимчивость (рисунок 2.5) имеет ярко выраженные максимумы при всех значениях концентраций p .

На рисунке 2.6 и 2.7 приведены температурные зависимости намагниченности m и относительного среднего размера кластера N_{cl}/N в исследованном интервале концентрации спинов p . При моделировании определенный интерес представляет знание размера кластера N_{cl} который мы переворачиваем во время моделирования, и зависимость его от концентрации спинов p . Средний размер переворачиваемого кластера пропорционален радиусу корреляции и при низких температурах приближается к размерам исследуемой спиновой системы с концентрацией p и в кластер входят все спины исследуемой системы.

Как видно из рисунков 2.6 и 2.7, наблюдается монотонное уменьшение как намагниченности m , так и относительного среднего размера кластера N_{cl}/N с ростом температуры и смещение их спада в сторону низких температур с уменьшением концентрации спинов p .

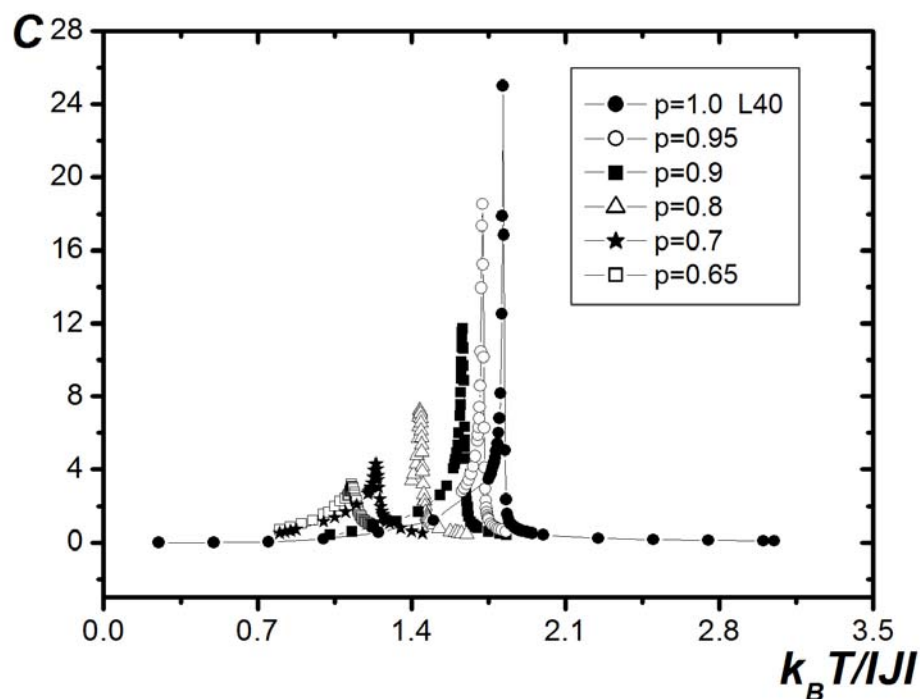


Рис. 2.4. Температурная зависимость теплоемкости C для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$.

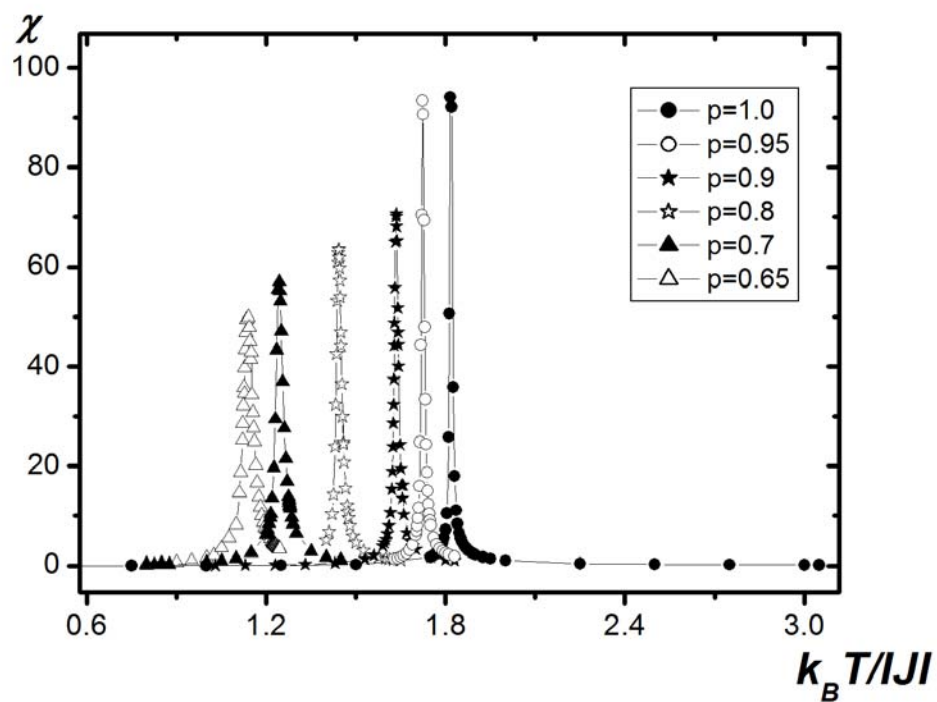


Рис. 2.5. Температурная зависимость восприимчивости χ для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$.

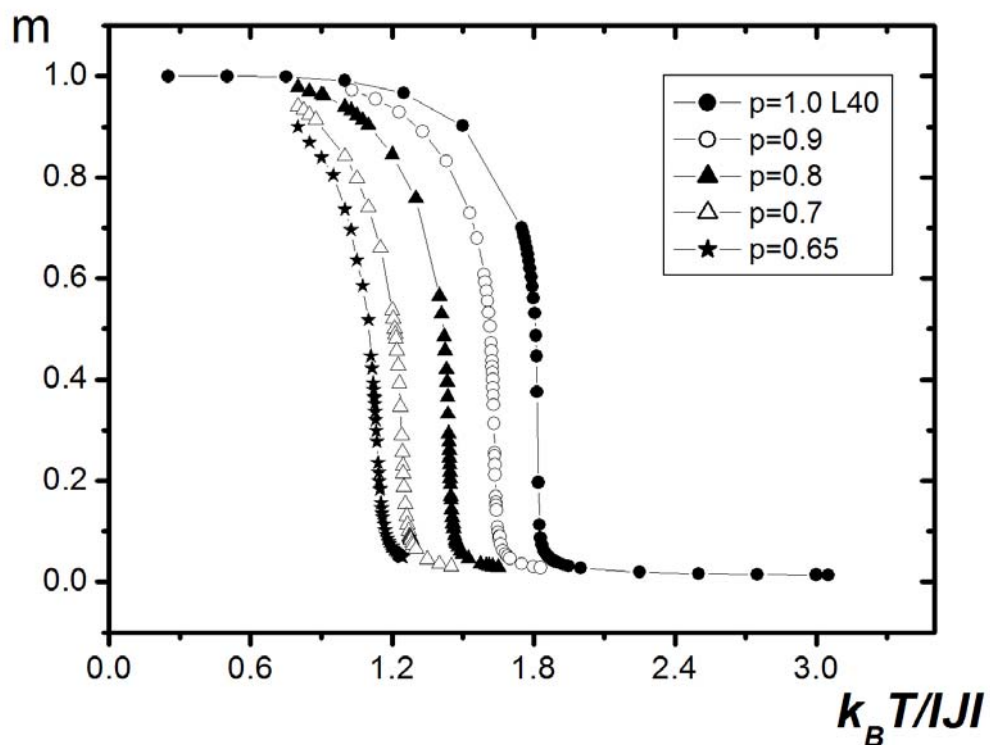


Рис. 2.6. Температурная зависимость намагниченности m для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$.

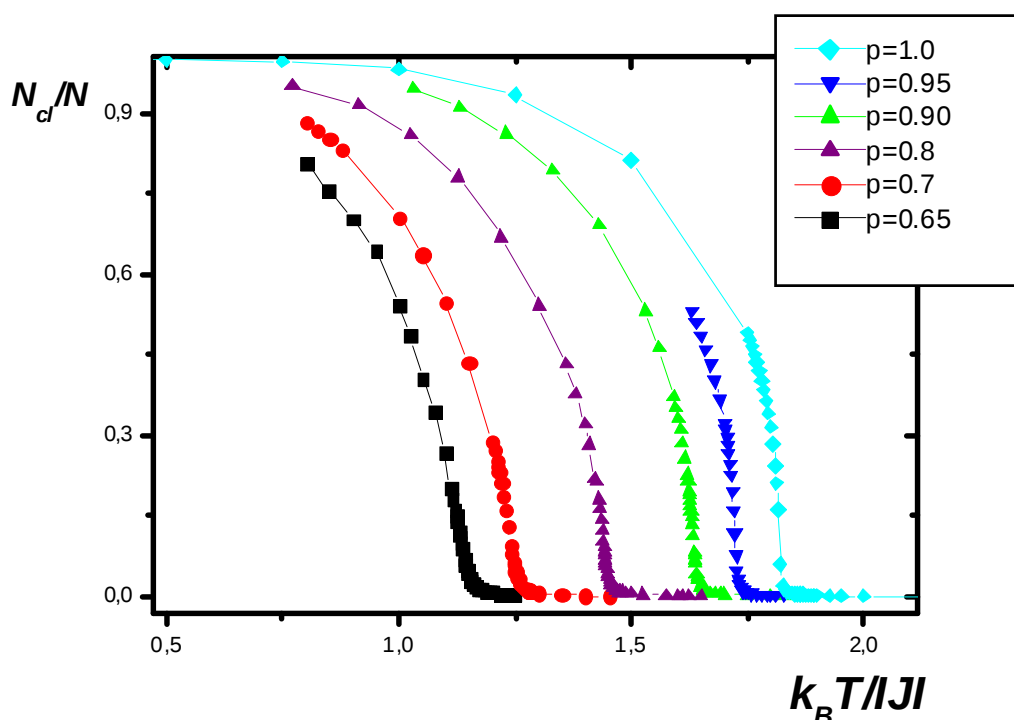


Рис. 2.7. Температурная зависимость относительного среднего размера кластера N_{cl}/N для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$.

Для определения критических параметров на основе теории КРС, в первую очередь необходимо определить критическую температуру. Определение критических температур с большей точностью для систем с разной концентрацией спинов, на основе единого методического подхода чрезвычайно важно для последующего расчета значений критических индексов. Как нами выше упоминалось согласно теории КРС усредненные кумулянты по ансамблю с различным распределением немагнитных примесей для спиновой системы с разными размерами L и с концентрацией спинов p пересекаются в точке фазового перехода T_c .

Определенные таким образом критические температуры приведены в таблице 2.1. Необходимо отметить, что с увеличением концентрации замороженных немагнитных примесей $c=1-p$ увеличивается погрешность

определения критической температуры, за счет увеличения флуктуаций в распределении примесей по решетке.

Характерные зависимости усредненных кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при концентрации спинов $p=1.0; 0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$ приведены на рисунках 2.8-2.17. Из рисунка 2.5 видно, что пики восприимчивости для систем с разными значениями концентраций p в пределах погрешности совпадают с критическими температурами $T_c(p)$, определенными методом кумулянтов Биндера, что говорит о высокой надежности определения критической температуры.

Для выяснения эффектов связанных с малостью исследуемых систем нами исследовались термодинамические зависимости для трехмерной модели Поттса с примесями в сильно разбавленном режиме при концентрации $p=0.65$ для систем с линейными размерами $L=20, 28, 36, 44$.

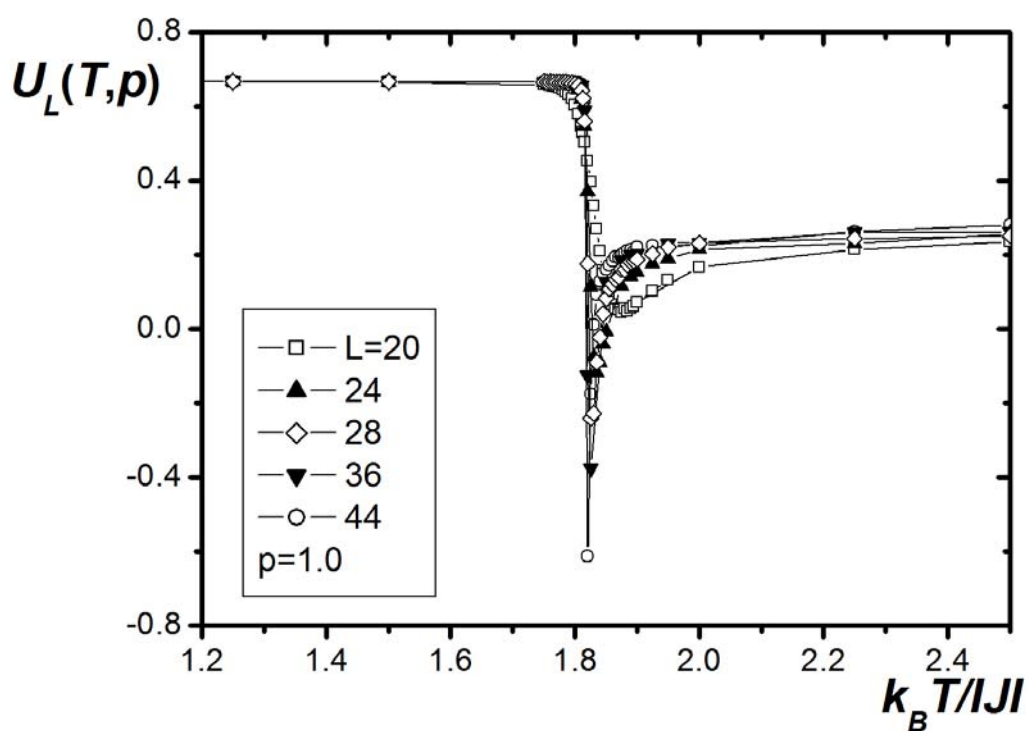


Рис.2.8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера

$U_L(T, p)$ для системы при $p=1.0$

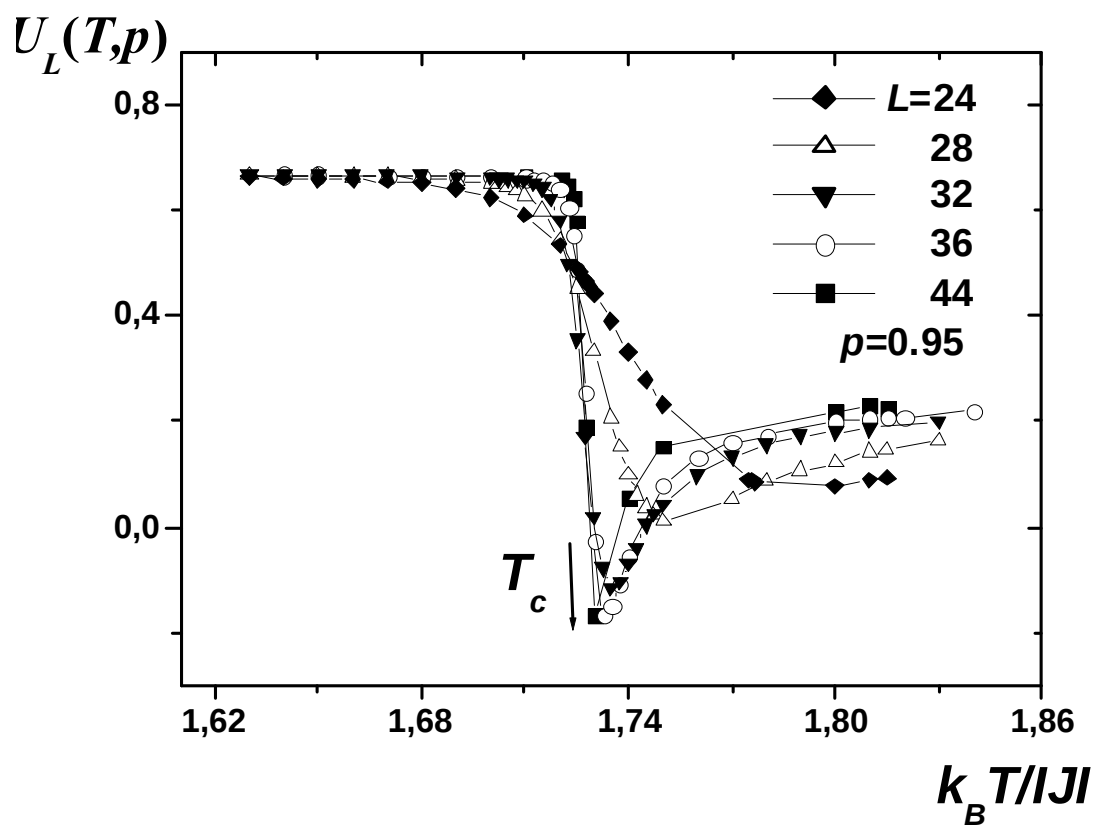


Рис.2.9. Температурная зависимость кумулянтов Биндера

$U_L(T, p)$ для системы при $p=0.95$

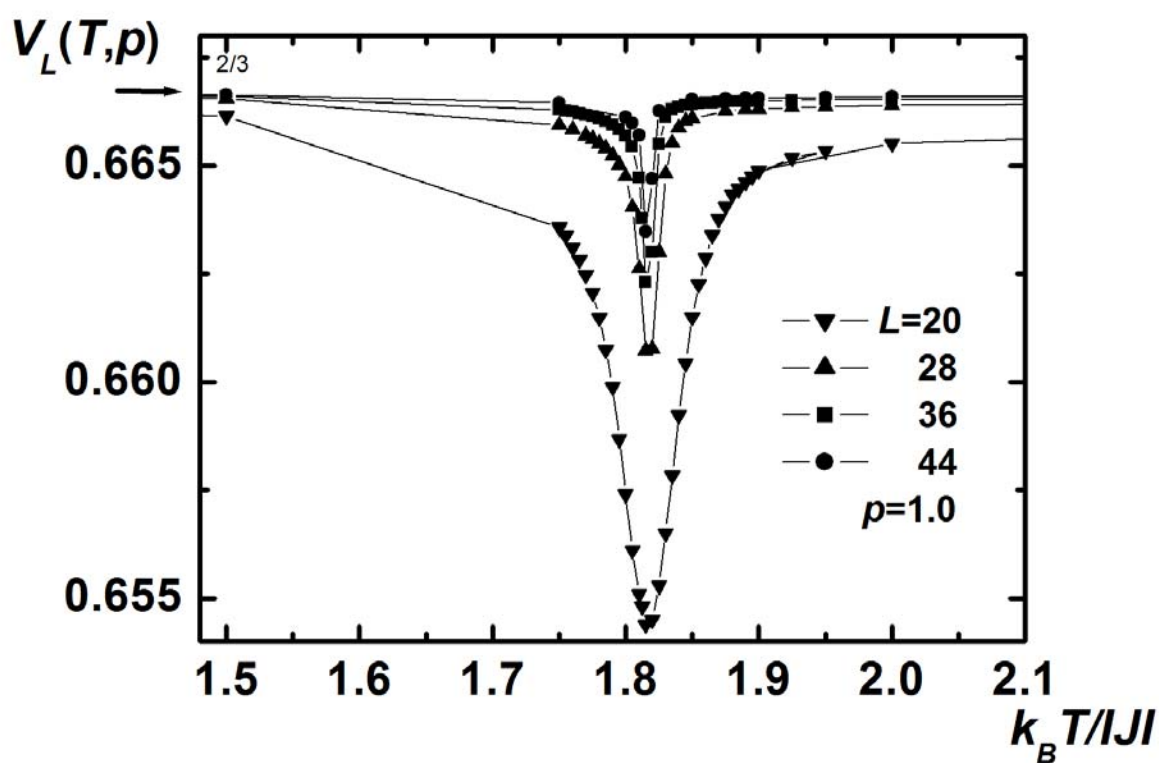


Рис.2.10. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для системы при $p=1.0$

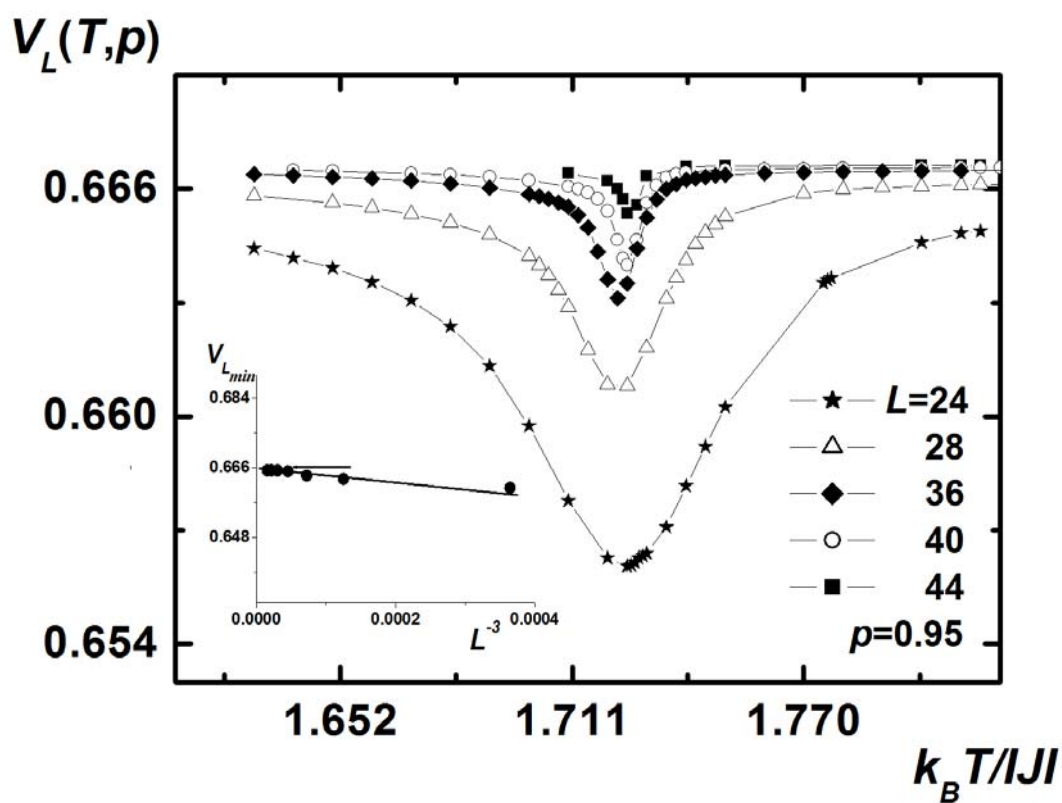


Рис.2.11. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для системы при $p=0.95$

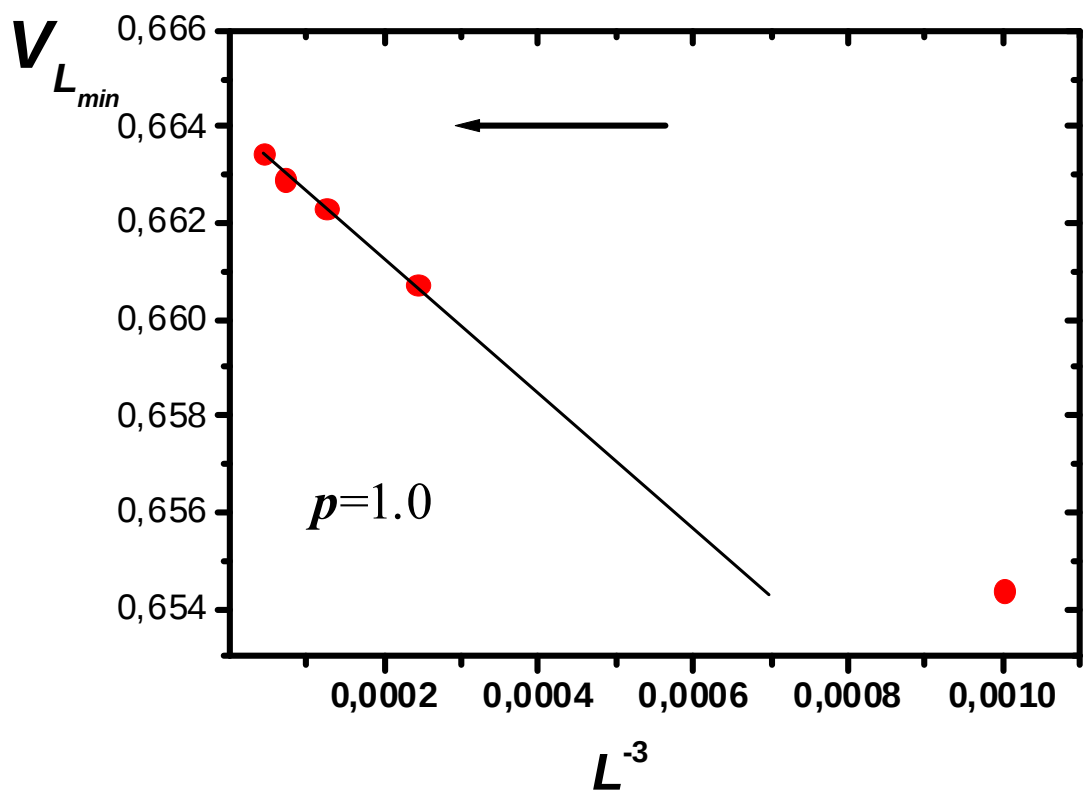


Рис.2.12. Зависимость кумулянтов Биндера $(V_L)_{min}$ от L для системы при $p=1.0$

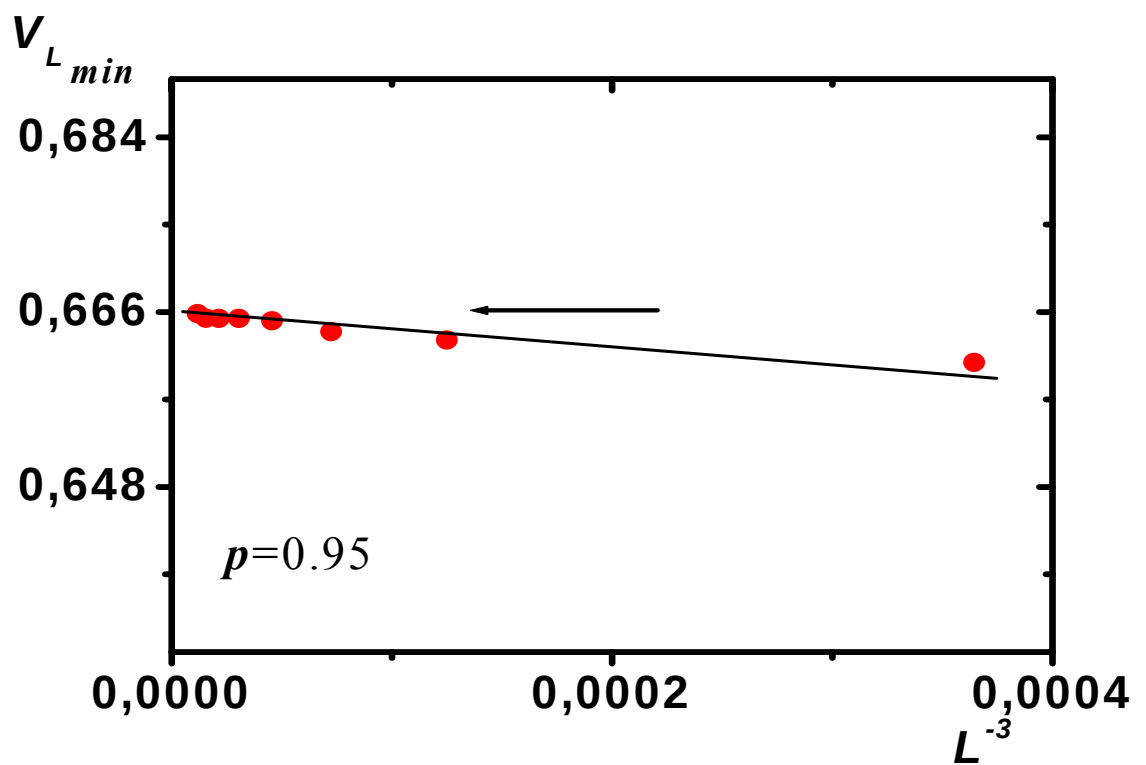


Рис.2.13. Зависимость кумулянтов Биндера $(V_L)_{min}$ от L для системы при $p=0.95$

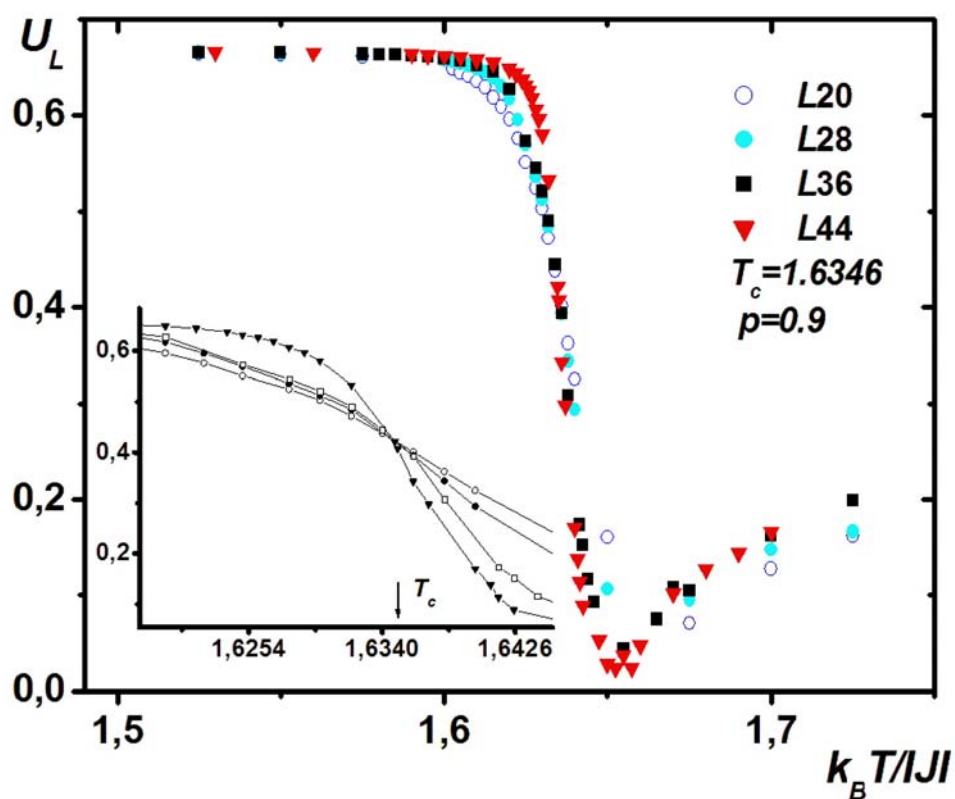


Рис.2.14. Температурная зависимость кумулянтов Биндера U_L (T, p) для системы при $p=0.90$

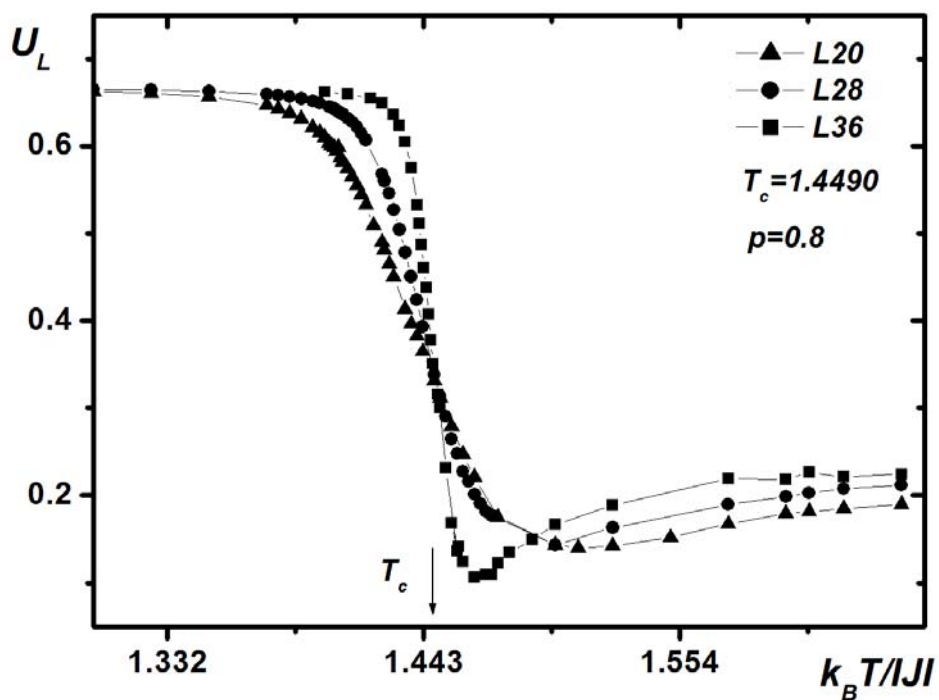


Рис.2.15. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для системы при $p=0.80$

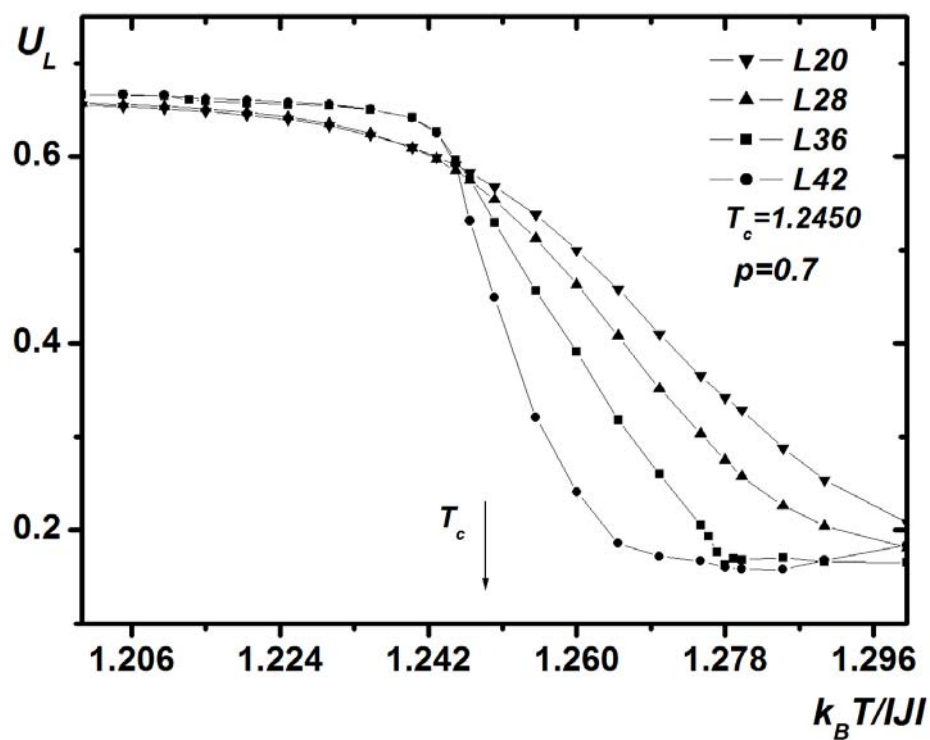


Рис.2.16. Температурная зависимость кумулянтов
Биндера $U_L(T, p)$ для системы при $p=0.70$

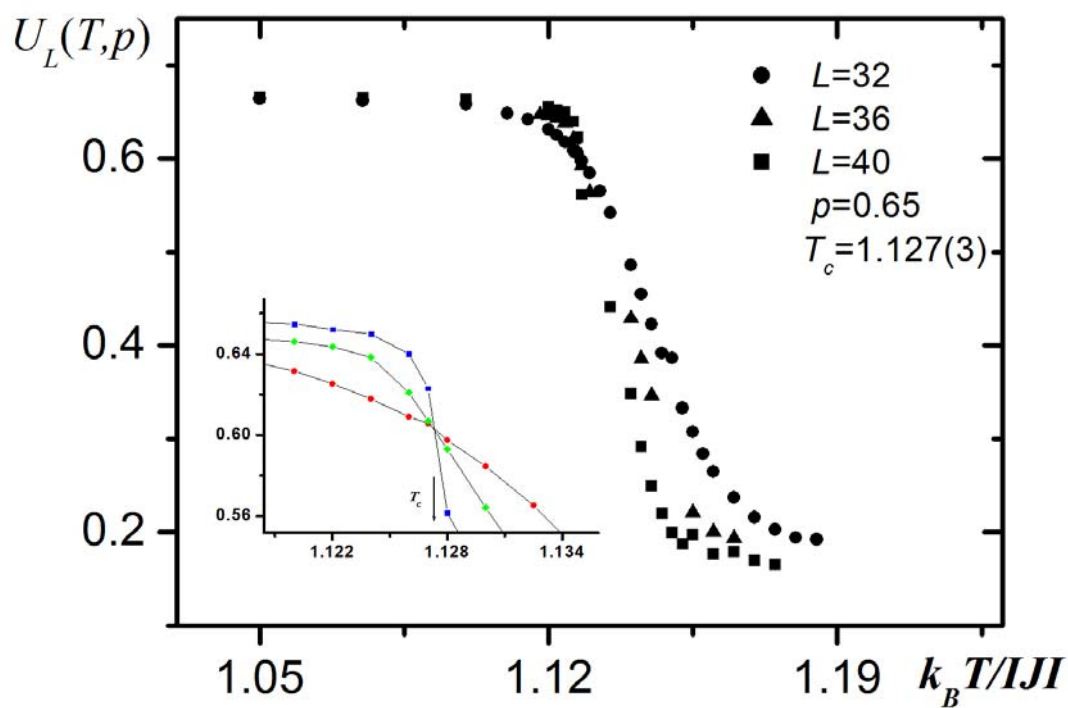


Рис. 2.17. Температурная зависимость кумулянтов
Биндера $U_L(T, p)$ для системы с $p=0.65$

На рисунке 2.18-2.19 представлены зависимости намагниченности m и относительного среднего размера переворачиваемого кластера N_{cl}/N для моделируемых систем при концентрации спинов $p=0.65$. Отметим монотонное уменьшение величины m и N_{cl}/N с повышением температуры и то, что эффекты, связанные с конечным числом спинов $N=pL^3$, такие как наличие остаточной намагниченности, в высокотемпературной фазе, сильно уменьшаются с ростом линейного размера исследуемой системы. В низкотемпературной области намагниченность практически не зависит от линейных размеров L неупорядоченной системы. Заметим, что при $T \ll T_c$ относительный средний размер переворачиваемого кластера одинаков для всех систем при фиксированной температуре (Рис. 2.19).

На рисунке 2.20 представлена температурная зависимость восприимчивости χ для сильно разбавленной трехмерной модели Поттса при концентрации спинов $p=0.65$ для систем с линейными размерами $L=32, 36, 40$. Как видно из рисунка 2.20, для восприимчивости χ , при сильном разбавлении для систем всех исследованных нами размеров наблюдаются хорошо выраженные максимумы и положение максимумов для систем с разным числом спинов в пределах погрешности, приходится на одну и ту же температуру. Отсутствие смещение пиков восприимчивости (рис. 2.20) с изменением числа спинов $N=pL^3$ в системе и достаточно хорошее совпадение их по температуре свидетельствует о достижении асимптотического режима по N .

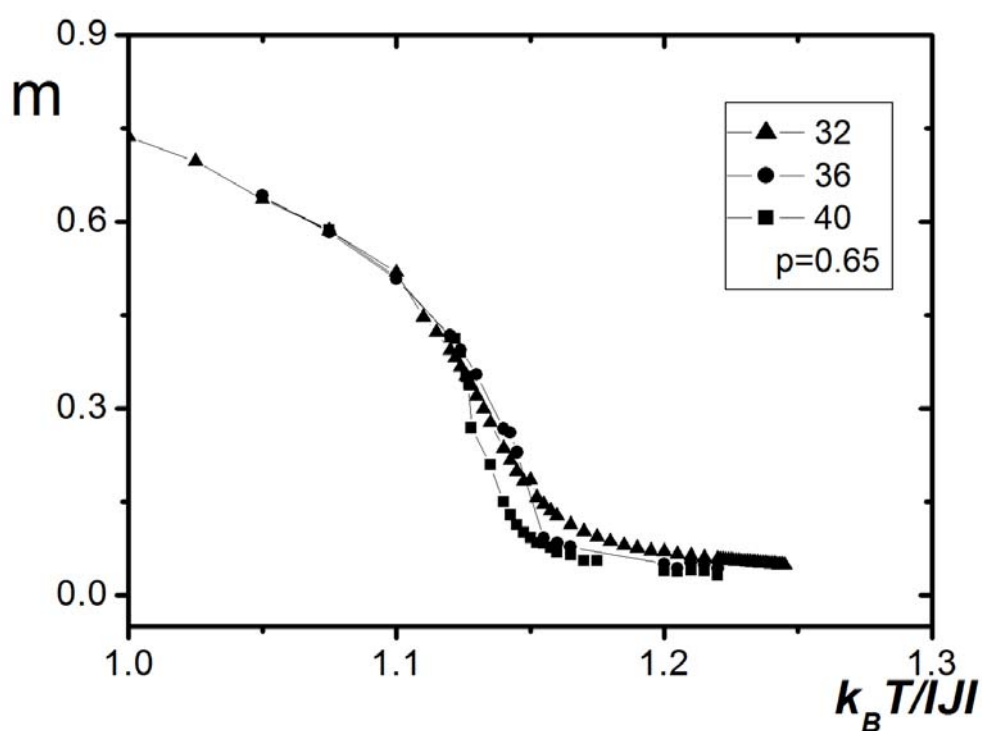


Рис. 2.18. Температурная зависимость намагниченности m для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.65$.

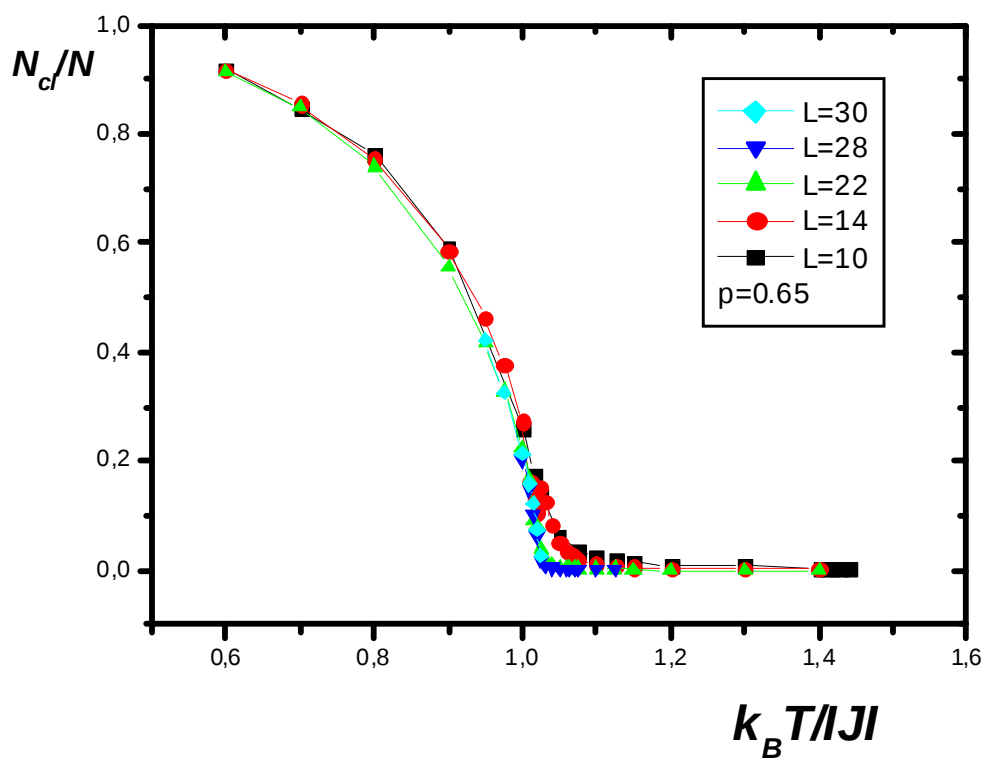


Рис. 2.19. Температурная зависимость относительного среднего размера кластера N_{cl}/N для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.65$.

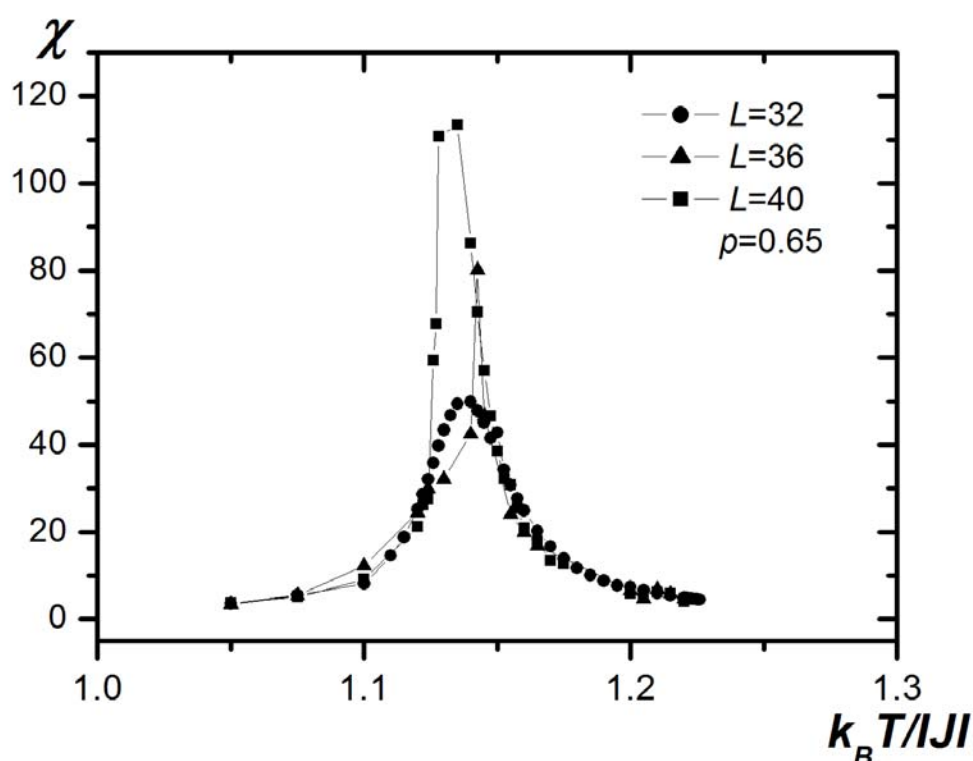


Рис. 2.20. Температурная зависимость восприимчивости χ для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.65$.

Для определения критического индекса радиуса корреляции ν для трехмерной неупорядоченной модели Поттса в исследованном интервале концентраций спинов p мы воспользовались выражениями (2.40)-(2.43). Зависимости значений V_n для концентрации спинов $p=0.90$; 0.80 приведены на рисунках 2.21 - 2.22. Как видно из этих рисунков точки хорошо ложатся на прямую для всех значений V_n полученных из выражений (2.40)-(2.43) и имеется возможность определить критический индекс ν с достаточно высокой точностью для всех исследованных систем с концентрацией p . Окончательное значение индекса ν нами определялось усреднением полученных показателей по первым четырем выражениям (2.40)-(2.43). Полученные таким образом на основе применения скейлинговых выражений (2.40)-(2.43) значения критических индексов ν в зависимости от p приведены в таблице 2.1.

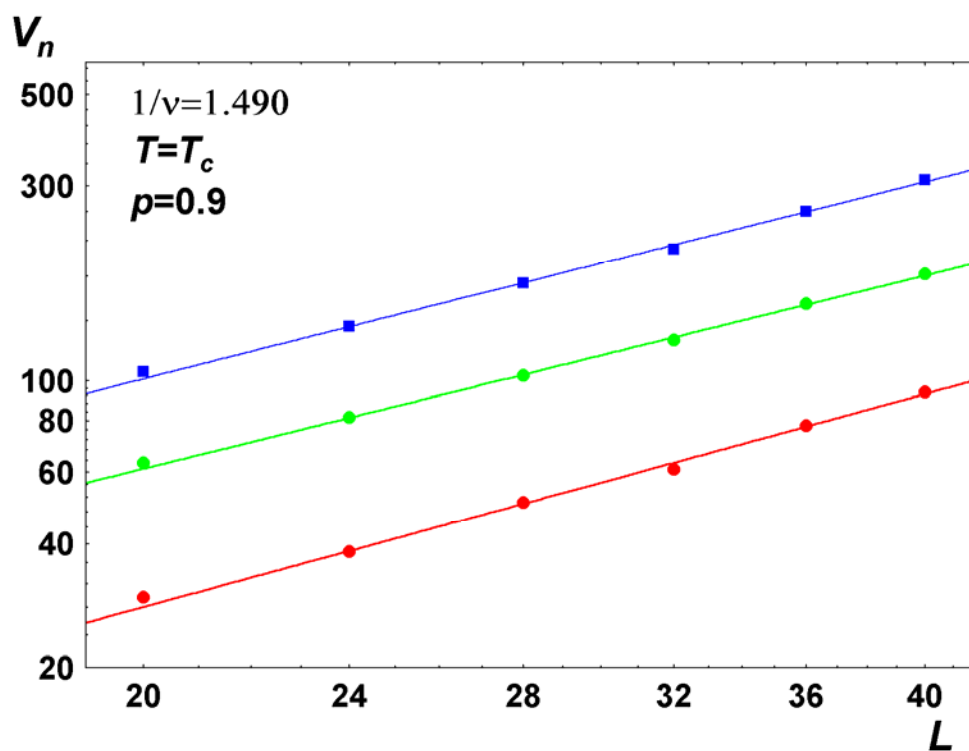


Рис. 2.21. Зависимость V_n от линейных размеров системы L для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.90$ и $T=T_c$.

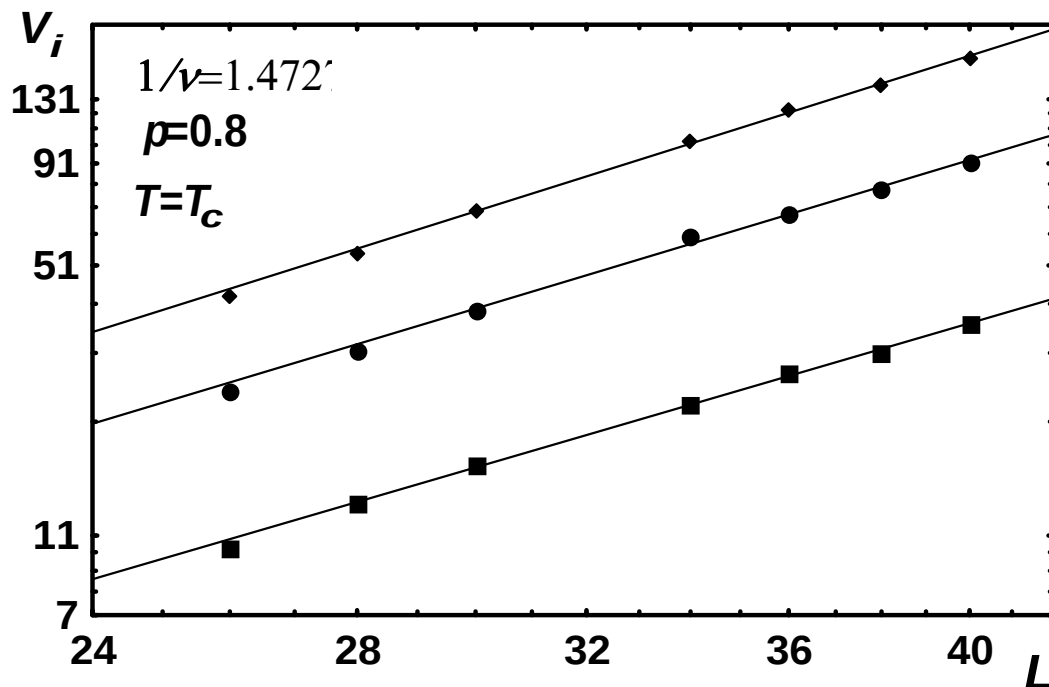


Рис. 2.22. Зависимость V_i от линейных размеров системы L для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.80$ и $T=T_c$.

Анализ наших данных, выполненный на основе соотношений (2.27-2.29) с использованием нелинейного метода наименьших квадратов позволил определить значения γ/ν , β/ν и α/ν для всех значений концентраций p . Для этого строились в двойном логарифмическом масштабе зависимости восприимчивости χ (Рис. 2.23 - 2.24), намагниченности m (Рис. 2.25 - 2.26), теплоемкости C (Рис. 2.27 - 2.28) от линейных размеров системы L при $T(p)=T_c(p)$. Затем, используя значения ν , полученные в рамках данного исследования на основе выражений (2.40-2.43) определялись α , β и γ . Следует отметить, что во многих численных исследованиях неупорядоченных систем, эти индексы в основном определялись, используя критический индекс ν , полученный из гиперскейлинговых соотношений (2.22-2.26). Как видно из рисунков 2.23-2.28, полученные данные как для восприимчивости (Рис. 2.23 - 2.24) так и для намагниченности m (Рис. 2.25 - 2.26) в слабо разбавленном режиме $p \geq 0.8$ не отклоняются от прямой даже при малых значениях L , хотя для ряда систем в сильно разбавленном режиме $p < 0.8$ наблюдается незначительное отклонение. При исследовании таких систем часто возникает вопрос о достижении режима асимптотического критического поведения. Очевидно, что для восприимчивости использованное нами для усреднения количество примесных конфигураций и размеры $L \geq 20$ изучаемых систем позволяют достичь асимптотический критический режим. Соблюдение этих условий обеспечивалось и для всех других изученных систем.

Как мы уже отметили, при обработке данных по теплоемкости на практике используется выражение (2.29), а не (2.13). Из наших данных для теплоемкости видно, что зависимость $C(L)$ для всех значений концентраций p в двойном логарифмическом масштабе не является линейной (рис. 2.27-2.28).

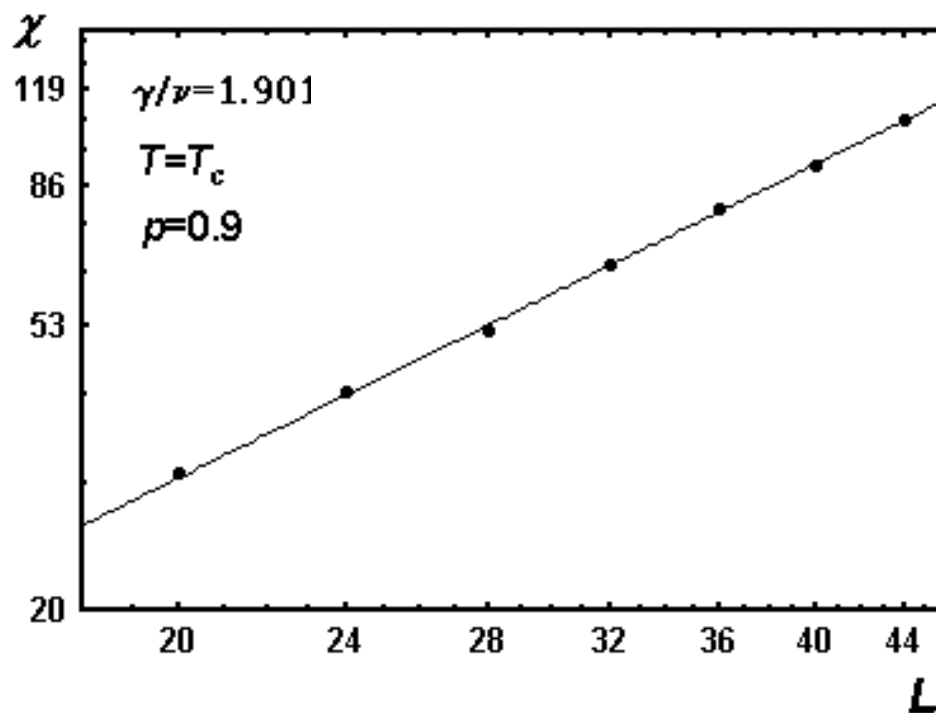


Рис. 2.23. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.90$.

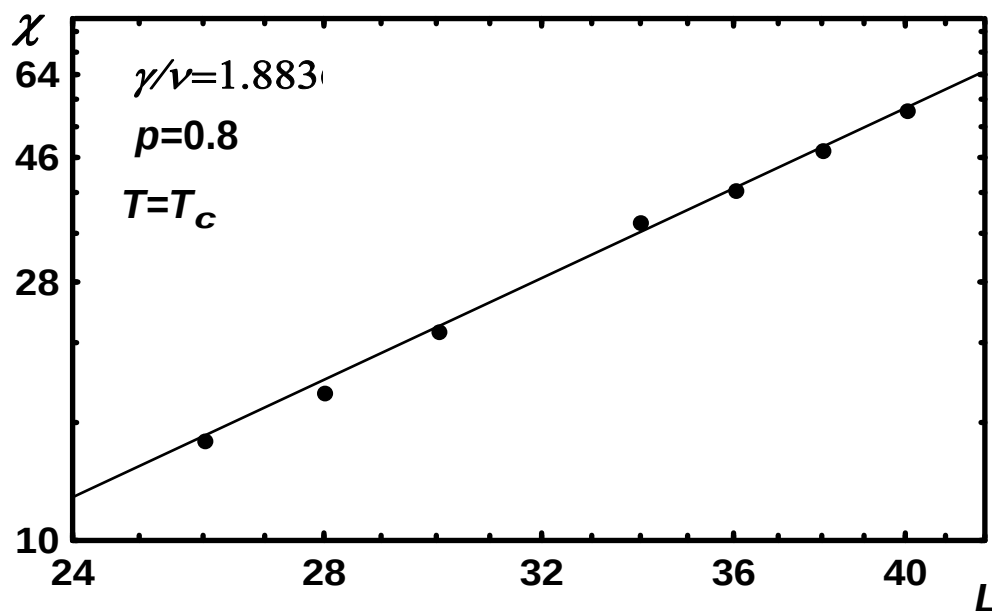


Рис. 2.24. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.80$.

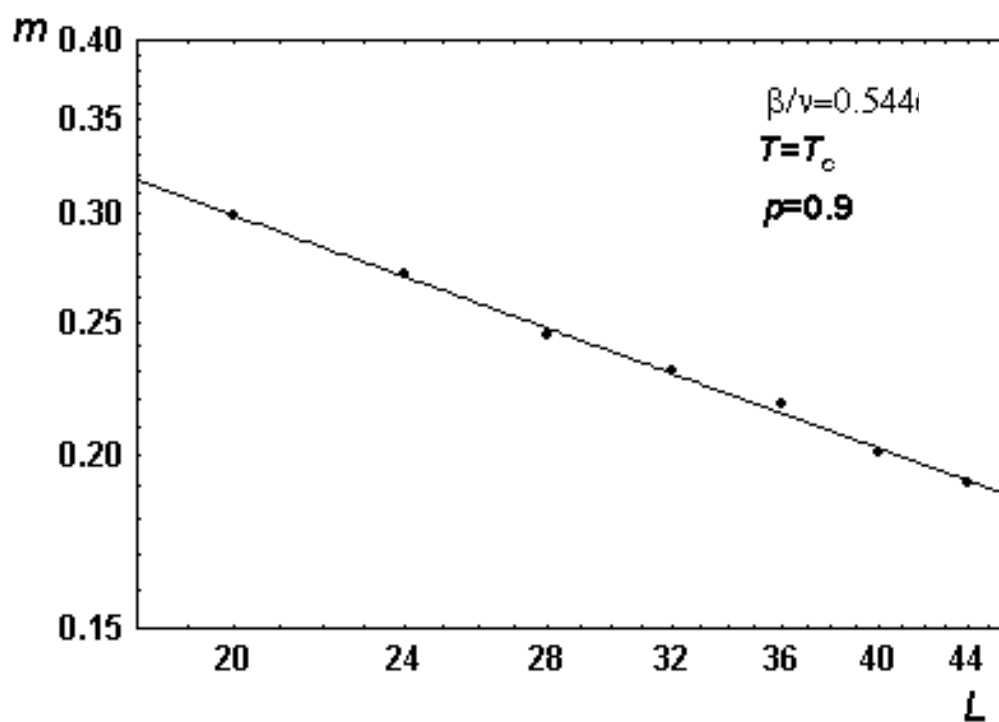


Рис. 2.25. Зависимость намагниченности m от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.90$.

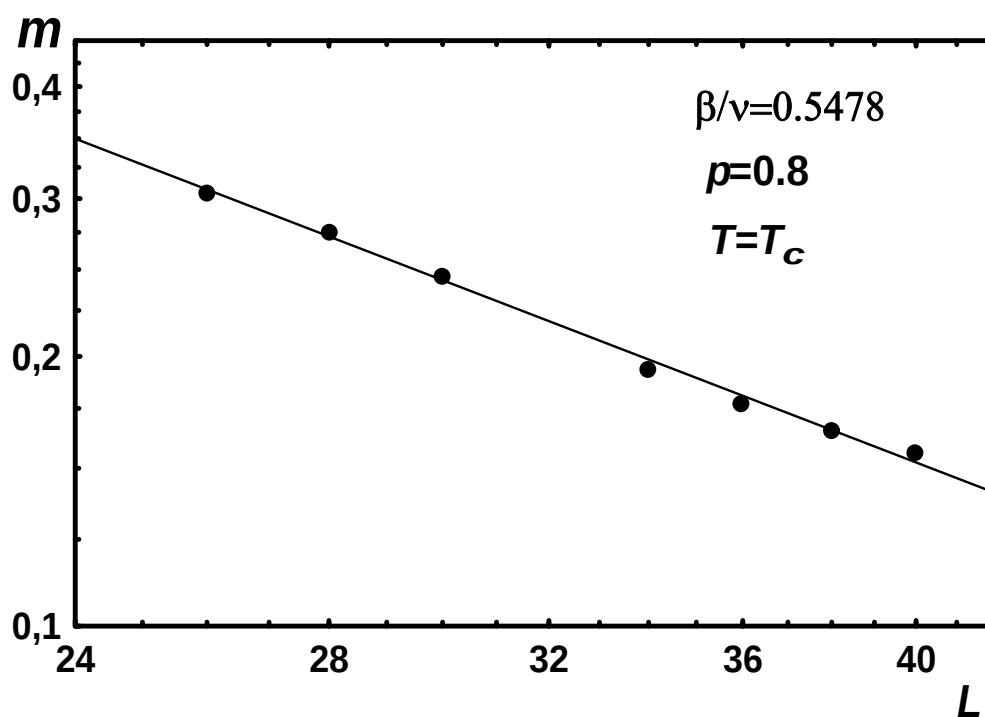


Рис. 2.26. Зависимость намагниченности m от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.80$.

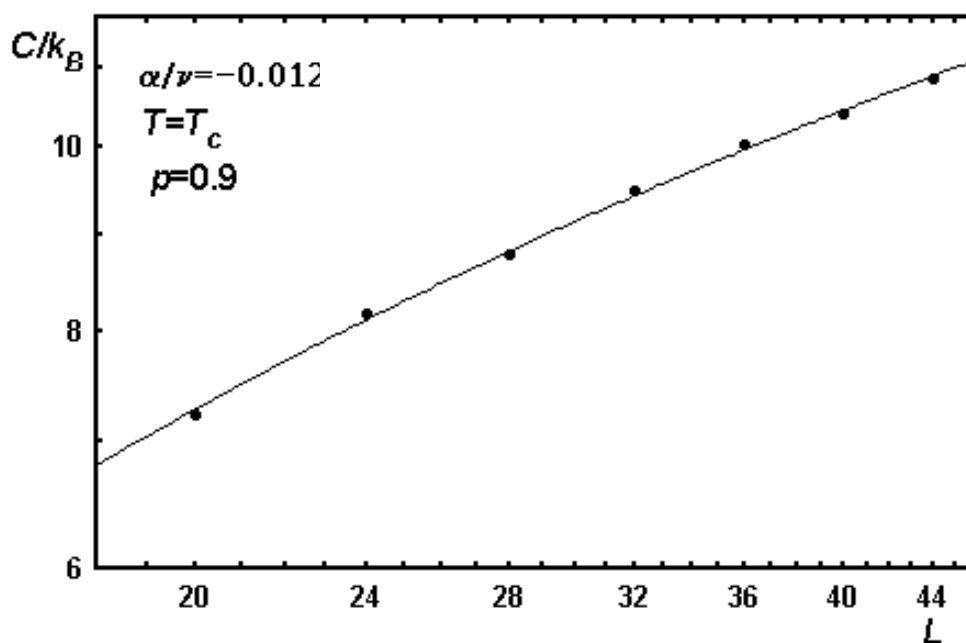


Рис. 2.27. Зависимость теплоемкости C от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.90$.

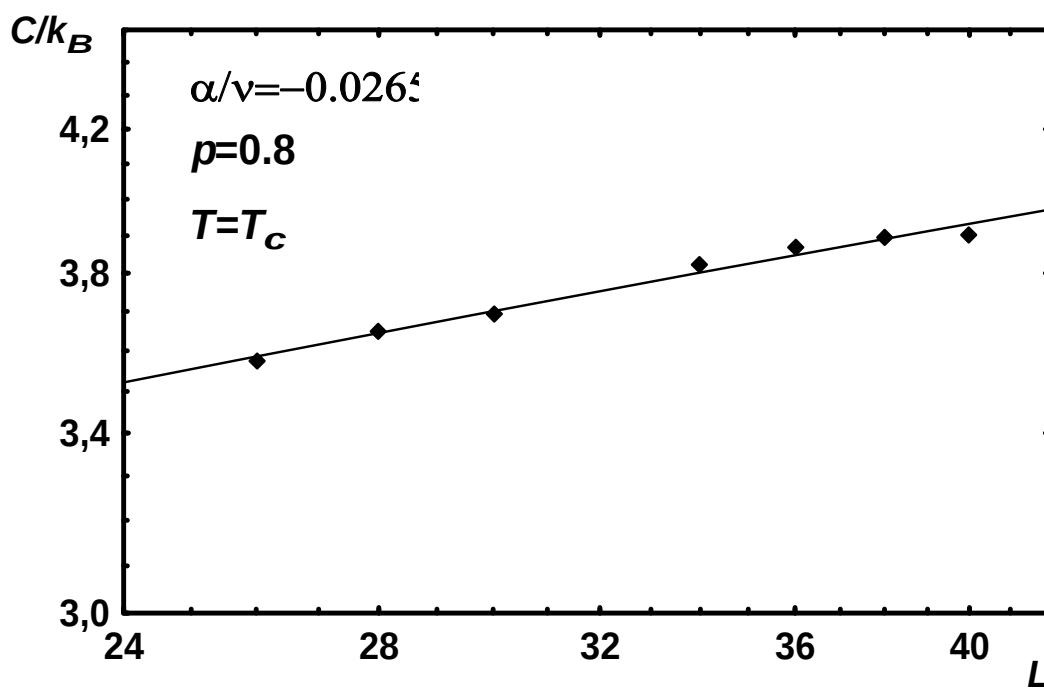


Рис. 2.28. Зависимость теплоемкости C от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.80$.

Таким образом, значения критических индексов для различных значений p , полученные при соответствующем значении индекса радиуса корреляции $\nu(p)$, представлены в таблице 2.1.

Таблица 2.1.

Критические индексы трехмерной модели Поттса $q=3$ с замороженными немагнитными примесями, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга.

p	$k_B T_c / J $	ν	α	γ	β	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
0.95	1.724	0.669(9)	-0.001(2)	1.273(5)	0.364(6)	2.000
0.9	1.634(2)	0.671(9)	-0.008(5)	1.275(5)	0.365(7)	1.997
0.8	1.449(2)	0.679(9)	-0.018(6)	1.279(5)	0.372(7)	2.005
0.7	1.245(3)	0.684(9)	-0.025(9)	1.281(6)	0.374(8)	2.004
0.65	1.127(3)	0.688(9)	-0.027(9)	1.284(6)	0.376(8)	2.009

Согласно теории конечно-размерного скейлинга выражения (2.13)-(2.15) снимают все эффекты, связанные с малостью моделируемой системы. При правильно вычисленных значениях критических параметров, зависимости для намагниченности m , восприимчивости χ , и теплоемкости C от скейлинговой переменной $y = tL^{1/\nu}$ после масштабирования выражениями (2.13)-(2.15) должны укладываться на одну кривую. Можно утверждать и обратное, если при варьировании критических параметров данные для всех систем укладываются на одну кривую, то параметры точки фазового перехода определены правильно [45].

Для проверки справедливости выражений (2.13)-(2.15) для сильно неупорядоченной трехмерной модели Поттса при концентрации спинов $p=0.9$ нами были построены скейлинговые функции для намагниченности (Рис. 2.29) и восприимчивости (Рис. 2.30). При этом в качестве критической температуры T_c была взята температура фазового перехода определенная методом кумулянтов Биндера, в частности, для проверенной нами неупорядоченной спиновой системы при $p=0.9$ $T_c=1.634(2)$. Как видно из рисунков 2.29 и 2.30 все данные в пределах погрешности укладываются на одну кривую. Важно отметить, что в низкотемпературной области конфигурационное усреднение нами осуществлялось по 100-200 различным примесным конфигурациям, в то время как в критической области для конфигурационного усреднения использовалось около 1000 примесных конфигураций. Для восприимчивости во всем температурном интервале (Рис.2.30) все данные достаточно хорошо укладываются на одну кривую.

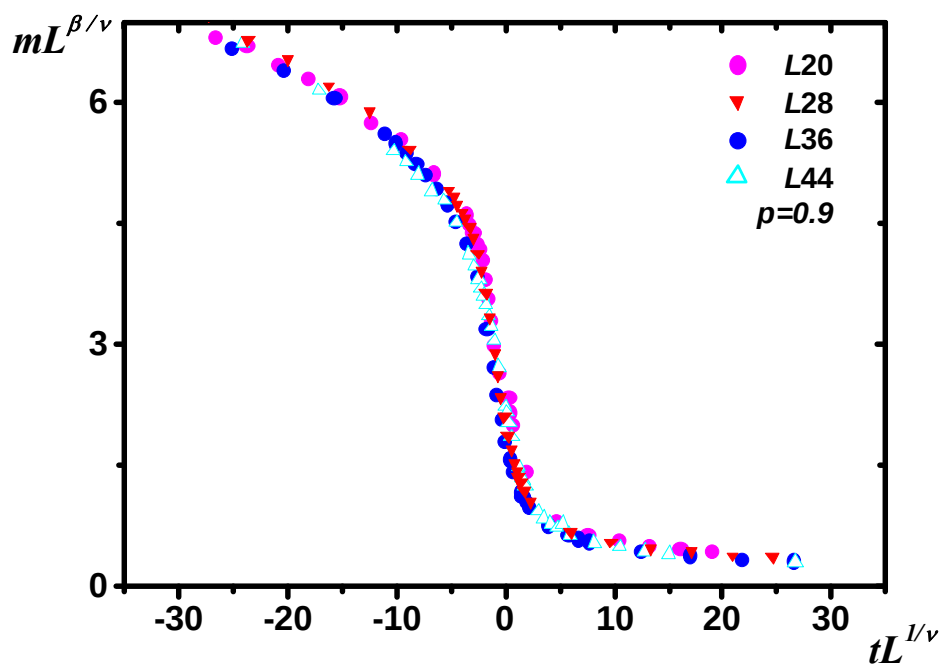


Рис. 2.29. Конечно-размерное масштабирование намагниченности m разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.90$.

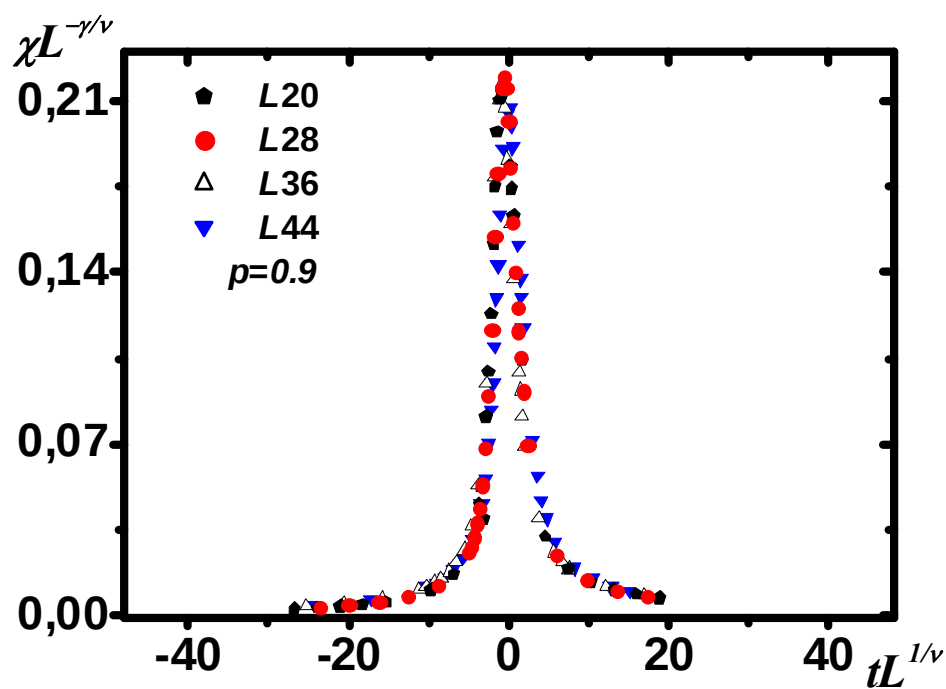


Рис. 2.30. Конечно-размерное масштабирование восприимчивости χ разбавленной трехмерной модели Поттса $q=3$ при $p=0.90$.

Как видно из таблицы 2.1 численные значения критических индексов, полученные на основе одно-кластерного алгоритма Вольфа метода МК, при исследовании примесной трехмерной системы свидетельствуют о том, что в рассмотренном интервале концентраций p критические индексы достаточно хорошо согласуются друг с другом в пределах погрешности численного эксперимента для различных спиновых концентраций $p=0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$ и удовлетворяют скейлинговым соотношениям. Результаты для критического индекса радиуса корреляции ν для трехмерной модели Поттса с состоянием $q=3$ при концентрациях спинов $p=0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$ удовлетворяют так же соотношению $\nu \geq 2/d \approx 0.667$, полученному в работе [86] для неупорядоченных d мерных систем, и близки к значению $0.690(5)$, полученному в работе [87] для трехмерной неупорядоченной модели Поттса с $q=3$, в которой немагнитные примеси внесены большим каноническим способом.

Таким образом, полученные значения критических индексов в результате тщательных исследований, проведенных с соблюдением единой методики, на трехмерной разбавленной модели Поттса с немагнитными примесями (распределенные каноническим способом) в широком интервале разбавлений $c=1-p$ свидетельствуют:

- 1) При концентрациях спинов $p=0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$ в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$ наблюдается фазовый переход второго рода, причем для чистой модели Поттса ($p=1.0$) наблюдается поведение характерное фазовому переходу первого рода.
- 2) Данные представленные в таблице свидетельствуют о том что, численные значения критических индексов, рассчитанные в области фазового перехода второго рода, в пределах погрешности численного эксперимента достаточно хорошо согласуются друг с другом и подтверждают универсальность критического поведения трехмерных разбавленных систем.

Для выяснения вопроса распределений термодинамических параметров по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженных немагнитных примесей нами рассматривалась $3d$ модель Поттса с линейным размером $L=40$ разбавленная немагнитными примесями каноническим способом в сильно разбавленном режиме $p=0.65$. На рисунках 2.31-2.32 представлены как равновесные значения восприимчивости χ_j и намагниченности m_j полученные для различных примесных конфигураций j данной модели, $1 \leq j \leq N_s$, где N_s – общее число различных примесных конфигураций, так и усредненные значения $[\chi_j]$, $[m_j]$ по соответствующим примесным конфигурациям j для концентрации спинов $p=0.65$. Из рисунка 2.31 видно, что флуктуация усредненной восприимчивости $[\chi_j]$ в слабо разбавленном режиме становится незначительной после 50-70 реализаций примесных конфигураций j . Для намагниченности (рис. 2.32) по различным примесным конфигурациям характерно сравнительно небольшой разброс данных и флуктуация усредненной намагниченности практически исчезает после 40-50 реализаций. Очевидно, для исследуемых нами неупорядоченных систем с каноническим распределением примесей использованное нами для усреднения количество примесных конфигураций позволяет достичь асимптотический критический режим.

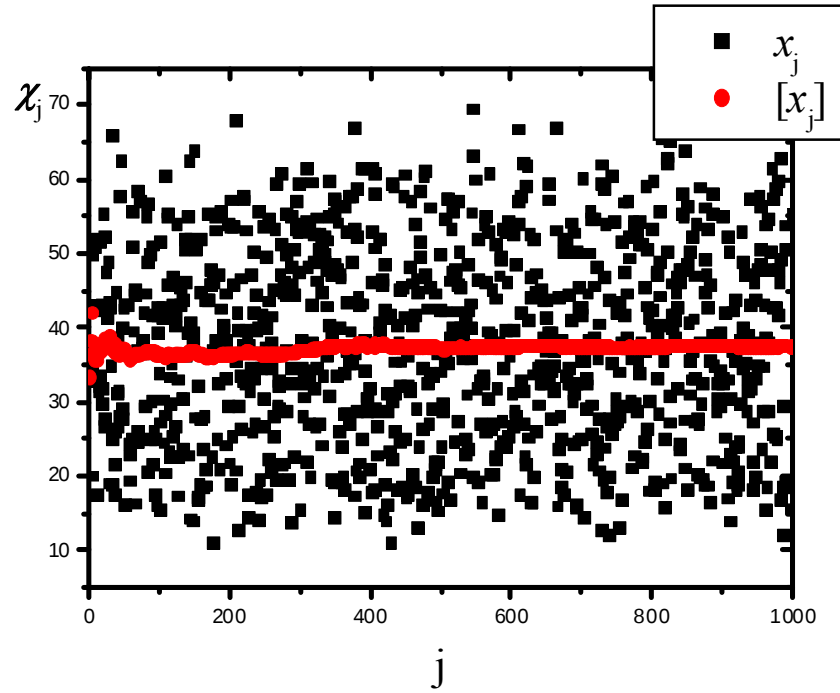


Рис. 2.31. Распределение восприимчивости χ_j по различным примесным конфигурациям разбавленной $3d$ модели Поттса с $L=40$ при $p=0.65$ и $T=T_c$.

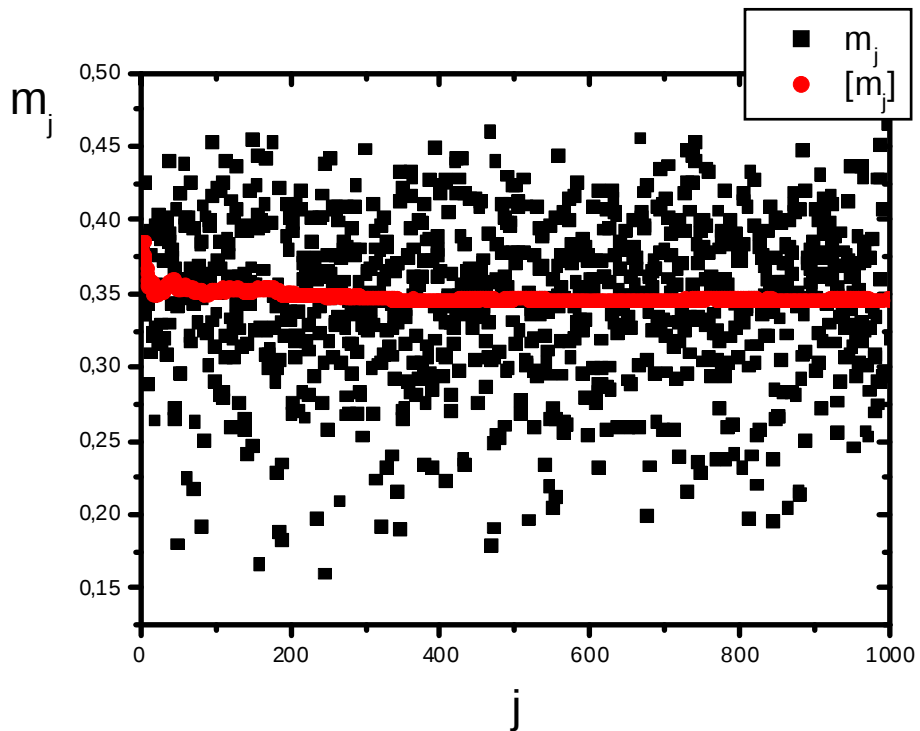


Рис. 2.32. Распределение намагниченности m_j по различным примесным конфигурациям разбавленной $3d$ модели Поттса с $L=40$ при $p=0.65$ и $T=T_c$.

ГЛАВА III. ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕХМЕРНОЙ РАЗБАВЛЕННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q=4$.

§ 3.1. Модель Поттса при $q=4$ с замороженными немагнитными примесями

Изучение тепловых и критических свойств магнитных материалов, содержащих примеси и другие дефекты структуры, представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [4]. Это обусловлено тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержат примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых проявляется в их тепловых и магнитных характеристиках и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при фазовых переходах (ФП).

В связи с этим существует серьезная необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты структуры влияют на поведение различных систем при ФП. На основе эвристических аргументов был сформулирован критерий, называемый, обычно, критерием Харриса [23], определяющий существенность влияния замороженных немагнитных примесей на критическое поведение. Согласно этому критерию, слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда теплоемкость соответствующей чистой системы испытывает расходимость в критической точке. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга.

В отличие от трехмерной разбавленной модели Изинга весьма запутанной остается ситуация с трехмерной моделью Поттса с числом состояний спина $q=4$, в которой замороженный беспорядок внесен в виде немагнитных примесей. В этой модели в чистом состоянии наблюдается

ФП первого рода. В связи с тем, что эта модель может быть использована для описания наноструктур и сверхрешеток, исследование влияния примесей на их критические и термодинамические свойства имеет важное значение [88]. Результаты полученные при исследовании микроскопических моделей наноструктур сложных магнитных материалов, в том числе и с примесями, будут иметь важное значение не только с точки зрения практического применения, но и с точки зрения фундаментальной науки. Практическая значимость полученных результатов будет определяться тем, что микроскопические модели сложных наноструктур позволяют получить достоверные сведения о магнитных, тепловых, кристаллографических, объемных и других свойствах целых семейств материалов и систем.

Несмотря на интенсивные теоретические исследования спиновых решеточных систем с замороженным беспорядком в течение последних двадцати лет, к настоящему времени существует совсем немного надежно установленных фактов о поведении систем, для которых в чистом состоянии наблюдается слабо выраженный ФП первого рода. Для трехмерной разбавленной модели Поттса с $q=4$ до сих пор нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на ФП, не установлен класс универсальности критического поведения, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей [81]. Единственным надежно установленным фактом является то, что в чистой модели происходит ФП первого рода [71].

Модель Поттса впервые определил в 1952 г. Поттс [61] по предложению С. Домба. В действительности он определил две модели. Первая из них в настоящее время называется ZYY-моделью. В этой модели каждый узел решетки характеризуется двумерным единичным вектором,

направленным по одному из N равномерно распределенных по углам направлений. Энергия взаимодействия двух векторов на соседних узлах пропорциональна их скалярному произведению. Вторая модель, рассматриваемая здесь модель Поттса. Модель Поттса с числом состояний спина $q=4$ представлена на рис.3.1.

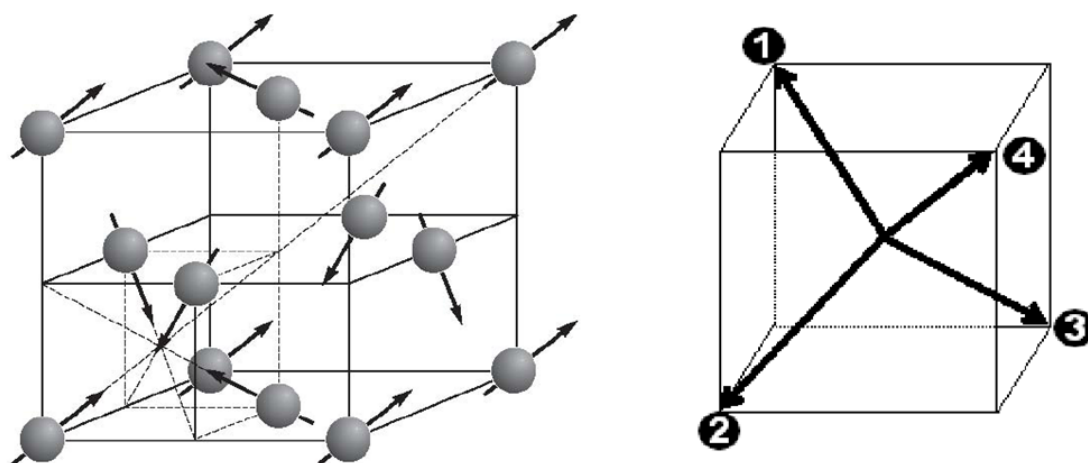


Рис.3.1. Четырехвершинная модель Поттса.

При построении трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на простой кубической решетке необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах решетки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из $q \geq 2$ состояний, и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или хотя бы в одном узле расположен немагнитный атом, и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [81].

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, \quad (3.1)$$

где $\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$

и $\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь.} \end{cases}$

Следует отметить, что в данной модели в отсутствие замороженного беспорядка ($p=1.0$) наблюдается ФП первого рода. Поэтому первоначально мы провели контрольные исследования термодинамических параметров для чистой неразбавленной 3D модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [13].

Для исследования влияния немагнитных примесей на критические и термодинамические свойства проводились расчеты для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p=1.0; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$. Рассматривались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20-40$. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L , а в случае $p=1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Усреднение по ансамблю проводилось по участку Марковской цепи длиной $\tau=150\tau_0$ и по различным начальным конфигурациям. Для систем с концентрациями $p=0.90; 0.65$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 100 и 1000 различным конфигурациям соответственно, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau=180\tau_0$.

§ 3.2. Результаты экспериментальных и теоретических исследований трехмерной модели Поттса с немагнитными примесями

3.2.1. Результаты лабораторного эксперимента

В пористых структурах, в частности в жидких средах содержащих аэрогель описываемых моделью Поттса (с $q=3$ и $q=4$) были исследованы фазовые переходы. Большой интерес к аэрогелевой среде обусловлен тем, что аэрогель, можно рассматривать как немагнитное вещество, в которой составляющие частицы коррелированы. Беркером [89] было показано, что наличие аэрогелевых частиц может оказать существенное влияние на фазовый переход первого рода в трехмерной модели Поттса с $q=3$ и $q=4$. На основе анализа Монте-Карло результатов и на основе теории конечно-размерного скейлинга было показано что присутствие ненулевых областей аэрогелевых фракций не влияет на фазовый переход первого рода, до области где происходит смена на фазовый переход второго рода, в отличие от двумерных систем в которых наличие сколь угодно малой концентрации примесей приводит к смене фазового перехода.

В экспериментальной работе [90], были получены критические индексы теплоемкости α в He^4 зависимости от концентрации аэрогеля, и критический индекс радиуса корреляции ν , численные значения которых приведены ниже в таблице 3.1. На рис.3.2. показана зависимость теплоемкости от температуры при различных концентрациях аэрогеля.

Как видно из рисунка наличие примеси приводит к уменьшению пика теплоемкости и смещения в сторону более низких температур.

Критический индекс радиуса корреляции $\nu=0.72-0.79$ полученный в данной работе и в работе [91], находится в хорошем согласии с данными, полученными в наших работах.

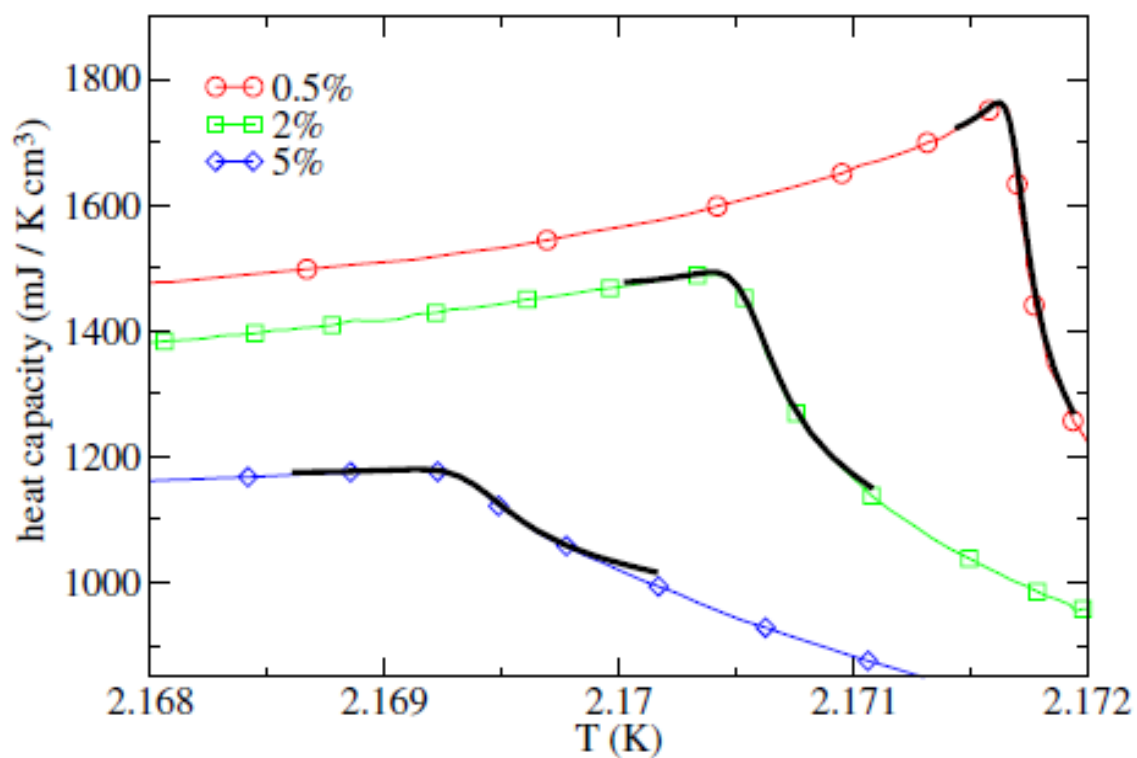


Рис.3.2. зависимость теплоемкости от температуры при различных концентрациях аэрогеля.

Таблица 3.1. Критические индексы определенные экспериментальным методом

Лабораторный эксперимент			Численный Эксперимент		Наши результаты	
Концентр. аэрогеля	α	ν	α	ν	α	ν
0,5%	-0.13 ± 0.02	0.72 ± 0.015	_____	_____	_____	_____
2%	-0.39 ± 0.01	0.76 ± 0.01	_____	_____	_____	_____
5%	-0.57 ± 0.01	0.79 ± 0.01	-0.20	0.73	$\approx -0,14$	$\approx 0,75$
M. Nikolaou, M. Wallin, and H. Weber. Critical Scaling Properties at the Superfluid Transition of 4He in Aerogel // Physical Review Letters, V.97, N 22.,C 225702-1-4. 2006.						

Модель Поттса является одним из составляющих элементов в статистической физике и их неупорядоченные версии, такие как Поттсовские стекла обычно используются для описания широкого ряда анизотропно упорядоченных стекол. Например, молекулярный кристалл азота неупорядоченный путем внесения некоторого процента аргона, в результате чего получается соединение $Ar_{1-x}(N_2)_x$ которое является неупорядоченным квадрупольным стеклом. Поттсовские стекла являются одной из моделей, которые используются при исследовании подобного типа материалов. Итак, модель Поттса очень богата по своему содержанию, что позволяет ей быть реализованной в широком диапазоне физических систем.

Антиферромагнитная модель Поттса с $q=4$ была исследована в работе [98] с применением метода Монте-Карло на основе алгоритма Ванга-Ландау. Данная модель интересна еще тем что, имеет ненулевую энтропию в основном состоянии без фрустраций.

На рис. 3.3. показаны зависимости термодинамических параметров полученных в данной работе, которые свидетельствуют о том, что в системе существует четкий фазовый переход при конечной температуре.

Ими получены следующие значения критической температуры и критических индексов $T_c=0.669$, $1/\nu=1.41$ и $\beta/\nu=0.44$, полученные ими значения критических индексов близки к значениям для трехмерной модели Гейзенберга. Данная модель так же была исследована в работе [99], где обнаружился так же фазовый переход при конечной температуре, и критические явления могут принадлежать Гейзенберговскому классу универсальности, при условии, что это фазовый переход второго рода. Тем не менее, в данной работе так же не отрицается возможность фазового перехода первого рода.

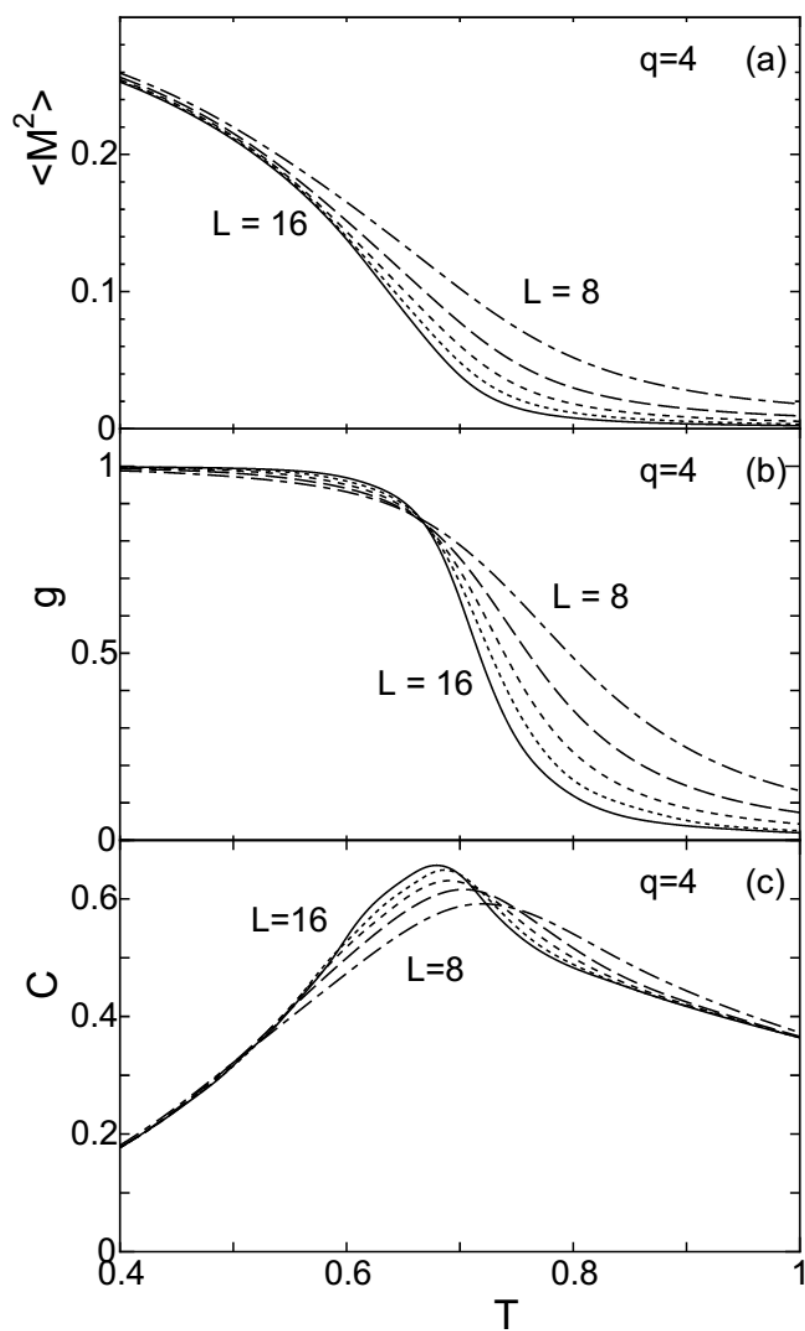


Рис.3.3. Температурная зависимость намагниченности, кумулянта Биндера и теплоемкости $3D$ антиферромагнитной модели Поттса с $q=4$ для системы с $L=8, 10, 12, 14, 16$.

§ 3.3. Критическое поведение трехмерной разбавленной модели

Поттса с числом состояний спина $q=4$

3.3.1. Результаты численного эксперимента

Для анализа характера фазовых переходов и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях как мы уже говорили хорошо зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе [92,93].

Зависимости кумулянтов Биндера от температуры для систем с разными линейными размерами при концентрации спинов $p=1.0; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$; приведены на рисунках 3.4-3.13. Характерные зависимости $V_L(T,p)$ и $U_L(T,p)$ от температуры для чистой и слабо разбавленной системы с разными линейными размерами приведены на рис.3.4.-3.7. Заметим, что на вставке к рис. 3.7, наглядно видно, что нетривиальная величина V^* , полученная при аппроксимации в соответствии с выражением (2.33), не стремится к $2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось ранее, характерно для ФП первого рода. На рис. 3.6 также видно, что в критической области $U_L(T, p)$ проявляет тенденцию стремления к $-\infty$ при $L \rightarrow \infty$, что также свидетельствует о ФП первого рода. Аналогичные зависимости термодинамических параметров наблюдались и для чистой неразбавленной модели Поттса с $q=4$ при $p=1.0$.

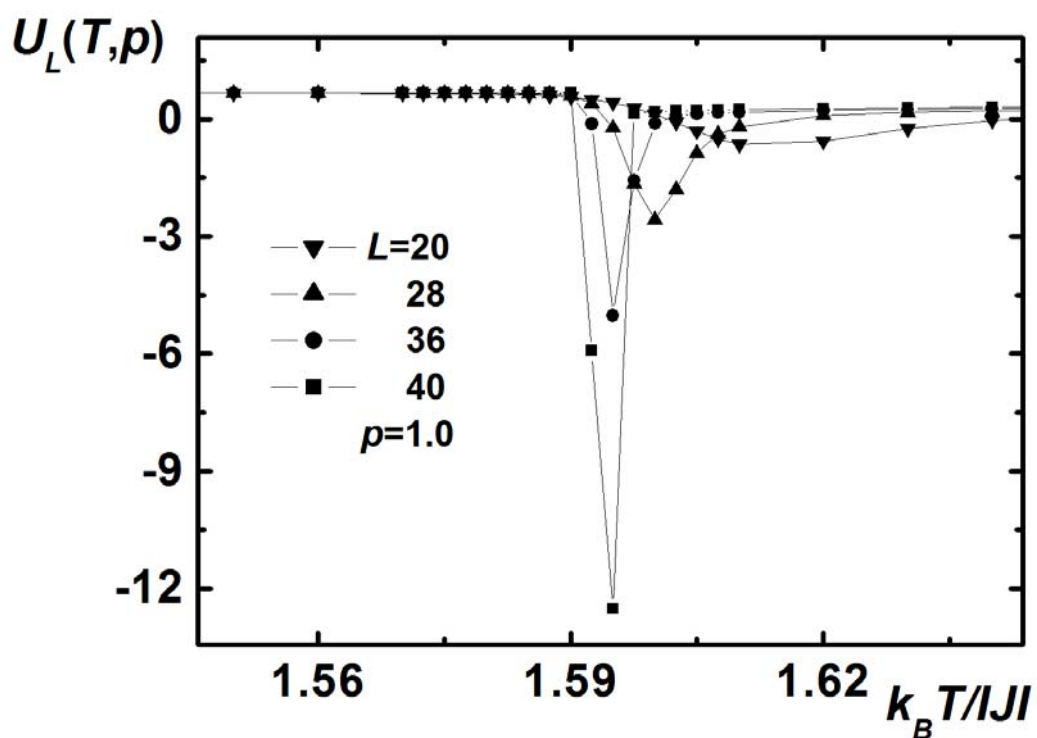


Рис.3.4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера

$U_L(T, p)$ для системы при $p=1.0$

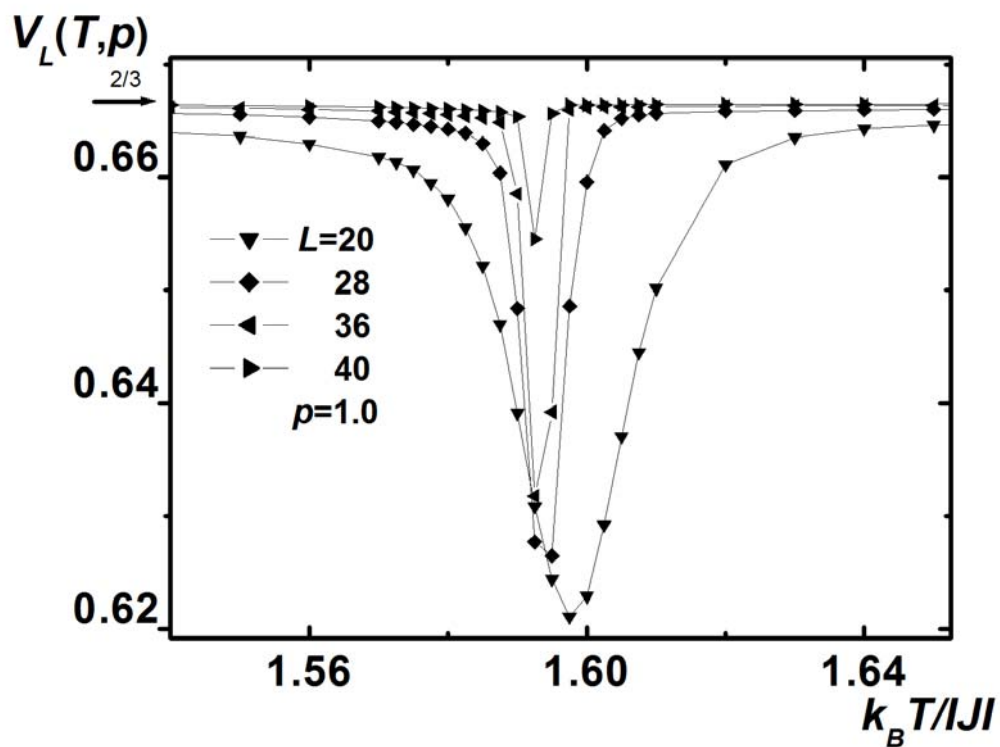


Рис.3.5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера

$V_L(T, p)$ для системы при $p=1.0$

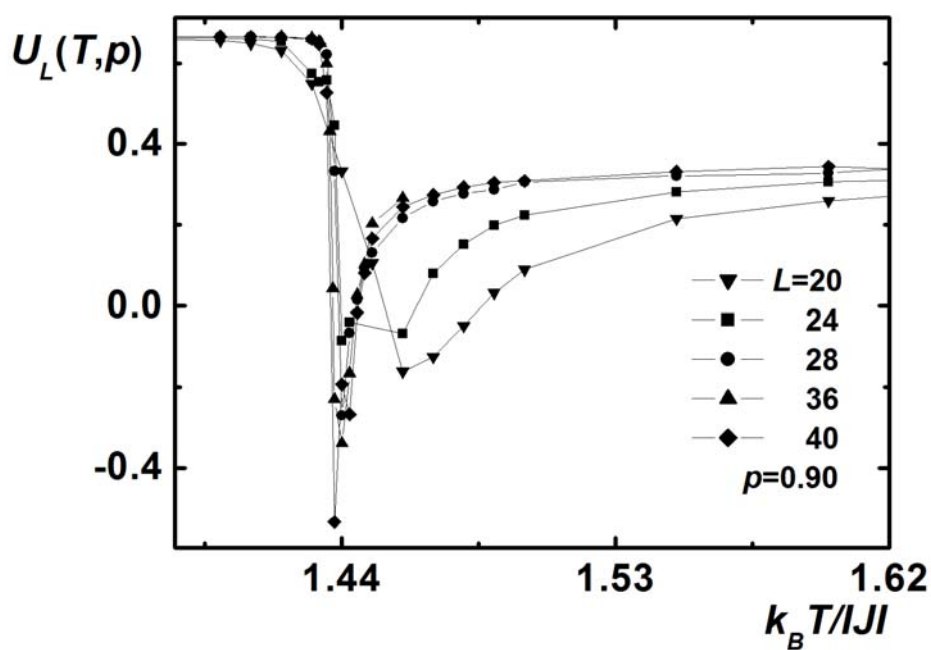


Рис.3.6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для системы при $p=0.90$

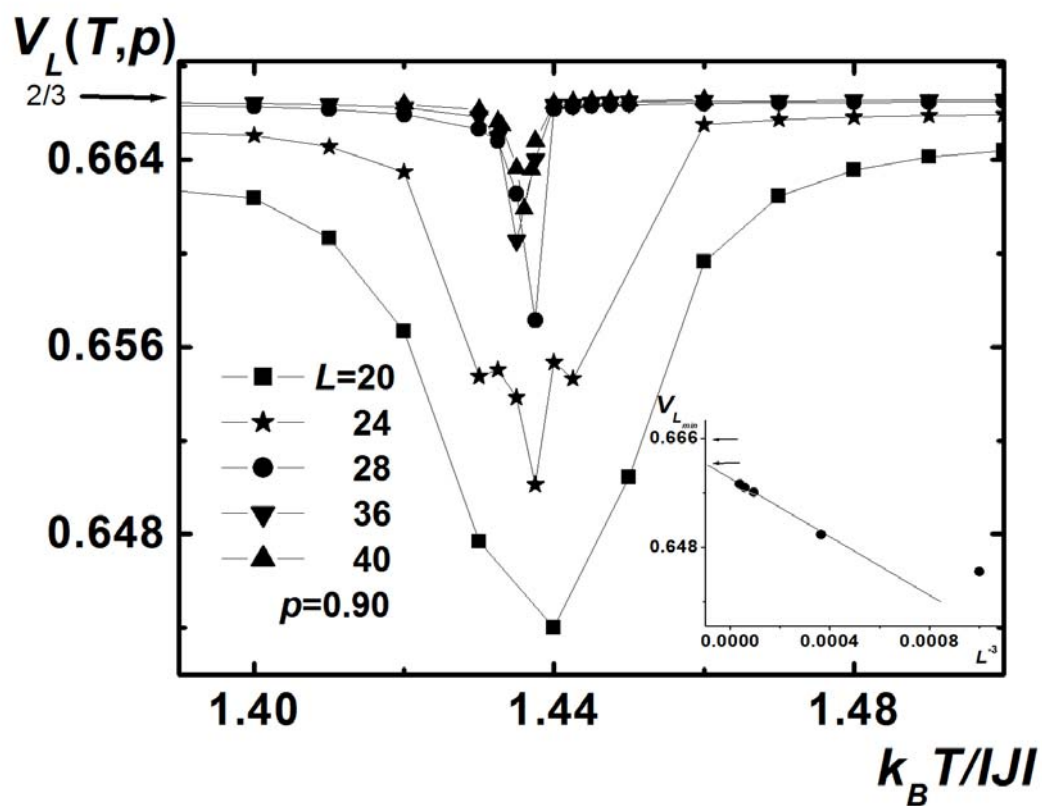


Рис.3.7. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для системы при $p=0.90$

На рис 3.8.-3.11 приведены зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ и $V_L(T,p)$ от температуры для сильно разбавленных систем с разными линейными размерами при $p=0.70$; 0,65. На рис. 3.8, 3.10, видно, что в критической области для $U_L(T,p)$ наблюдается четко выраженная точка пересечения, $U_L(T,p)$ не проявляет тенденции стремления к $-\infty$ при $L \rightarrow \infty$, что свидетельствует о ФП второго рода. Кроме того из вставок к рис. 3.9-3.11 кумулянта $V_L(T,p)$, наглядно видно, что нетривиальная величина V^* стремиться к значению $2/3$ при $L \rightarrow \infty$ в отличие от слабо разбавленного режима ($p=0.90$), что является одной из характерных черт фазового перехода второго рода. Таким образом, очевидно, что немагнитные примеси порядка $c=0.35$, $c=1-p$ приводят к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.

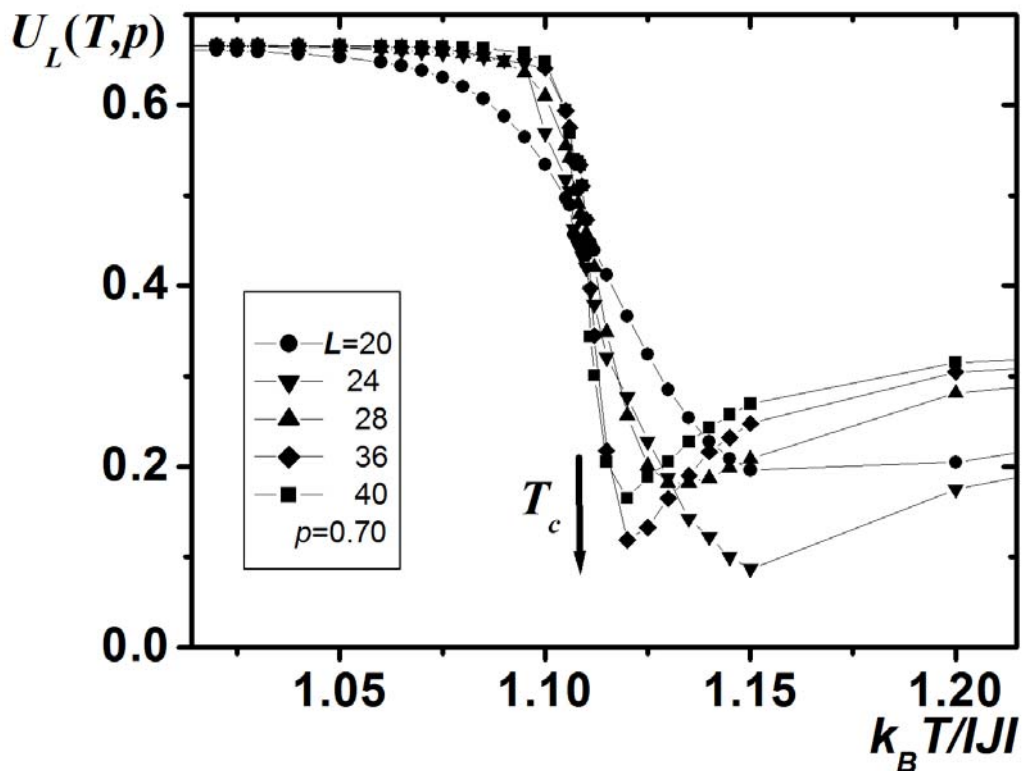


Рис.3.8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ для системы при $p=0.70$

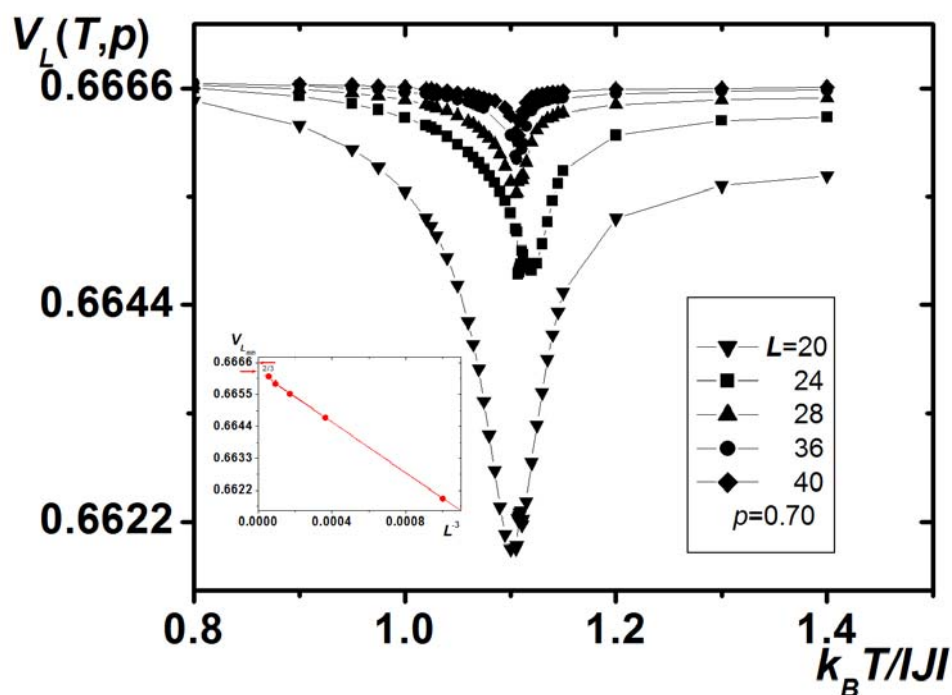


Рис.3.9. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для системы при $p=0.70$

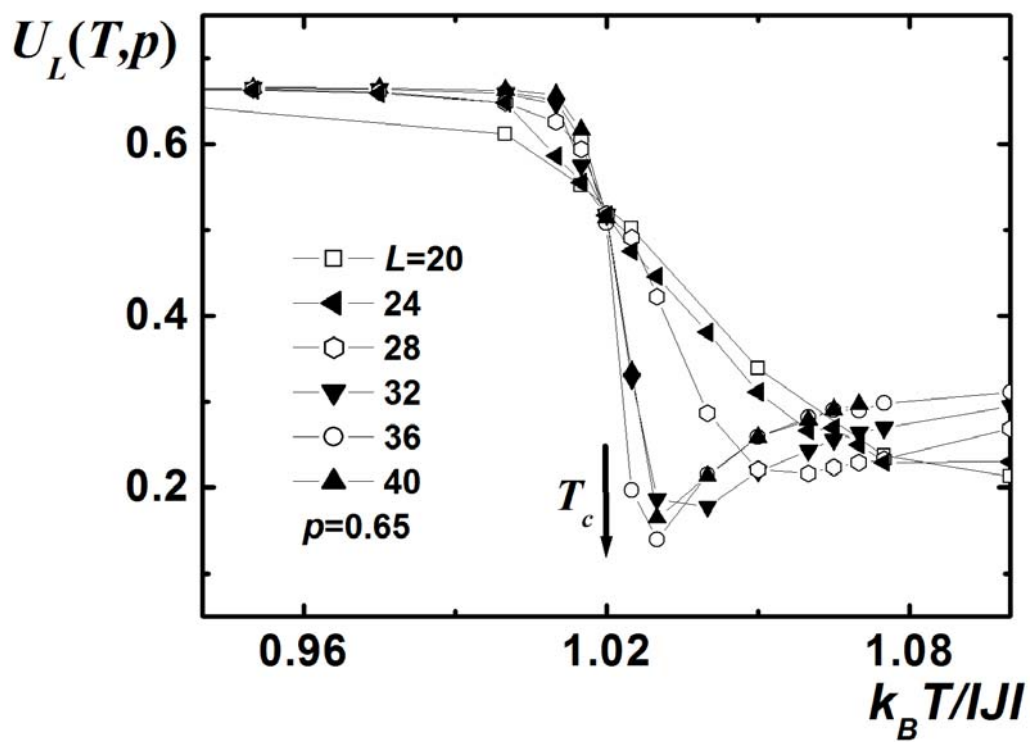


Рис.3.10. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для системы при $p=0.65$

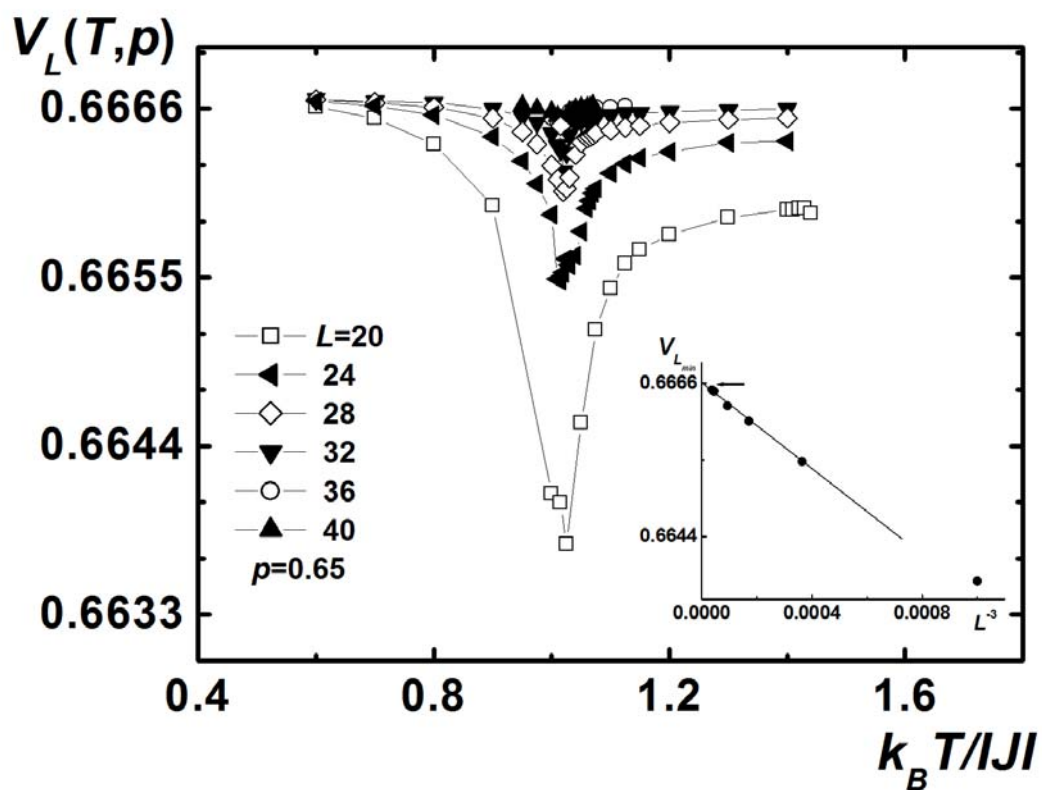


Рис.3.11. Температурная зависимость кумулянтов
Биндера $V_L(T, p)$ для системы при $p=0.65$

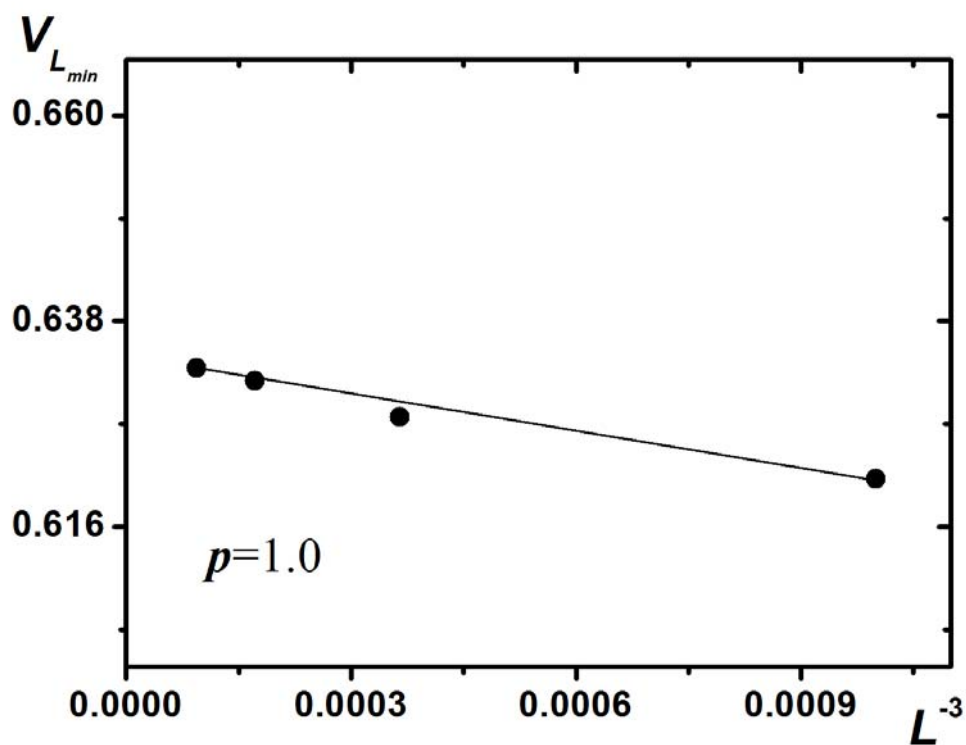


Рис.3.12. Зависимость $(V_L)_{\min}$ от L для системы при $p=1.0$

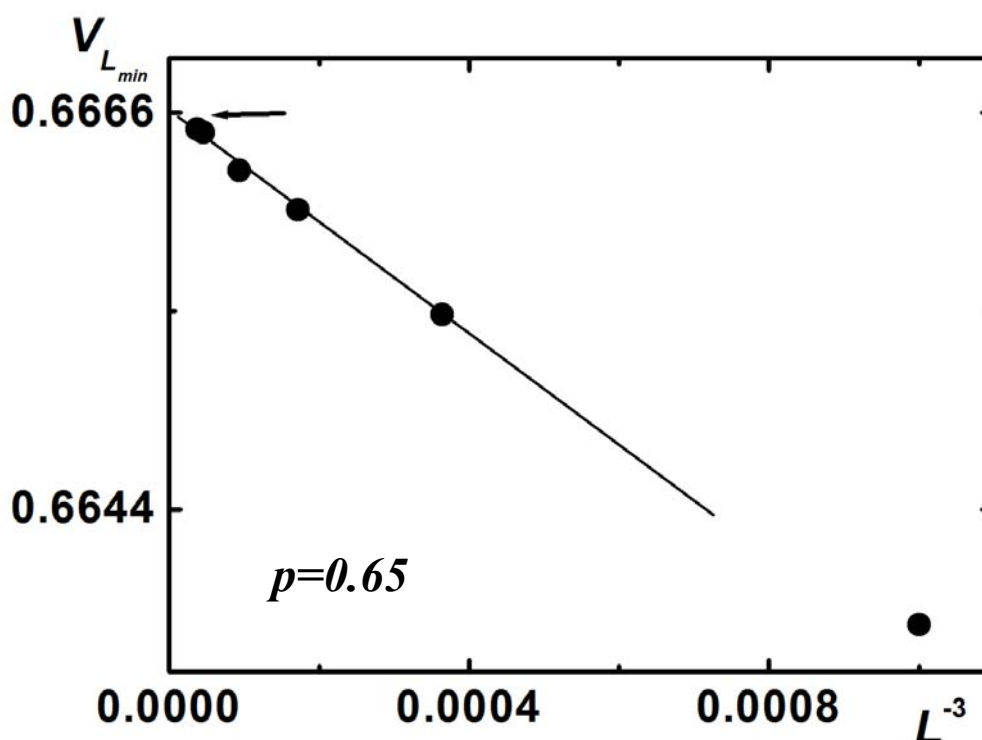


Рис.3.13. Зависимость $(V_L)_{min}$ от L для системы при $p=0.65$

Далее приведена аппроксимация, проведённая на основе выражения (2.32), для чистой и разбавленной систем на рис. 3.12. и 3.13. соответственно. При концентрации спинов $p=0.65$ из рис. 3.13. видно, что значение V_{Lmin} практически равно значению $2/3$, что характерно для фазового перехода второго рода.

На рисунке 3.14-3.15 представлены зависимости намагниченности m и относительного среднего размера переворачиваемого кластера N_{cl}/N для моделируемых систем при концентрации спинов $p=0.65$. Отметим монотонное уменьшение величины m и N_{cl}/N с повышением температуры. В низкотемпературной области намагниченность практически не зависит от линейных размеров L неупорядоченной системы. Заметим, что при $T \ll T_c$ относительный средний размер переворачиваемого кластера одинаков для всех систем при фиксированной температуре (Рис. 3.15).

На рисунке 3.16-3.17 представлены температурные зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C для сильно разбавленной трехмерной модели Поттса при концентрации спинов $p=0.65$ для систем с линейными размерами $L=20, 24, 28, 36, 40, 44$. Как видно из рисунка 3.16, для восприимчивости χ , при сильном разбавлении для систем всех исследованных нами размеров наблюдаются хорошо выраженные максимумы и положение максимумов для систем с разным числом спинов в пределах погрешности, приходятся на одну и ту же температуру. Отсутствие смещение пиков теплоемкости (рис. 3.17), восприимчивости (рис. 3.16) и с изменением числа спинов $N=pL^3$ в системе и достаточно хорошее совпадение их по температуре свидетельствует о достижении асимптотического режима по N .

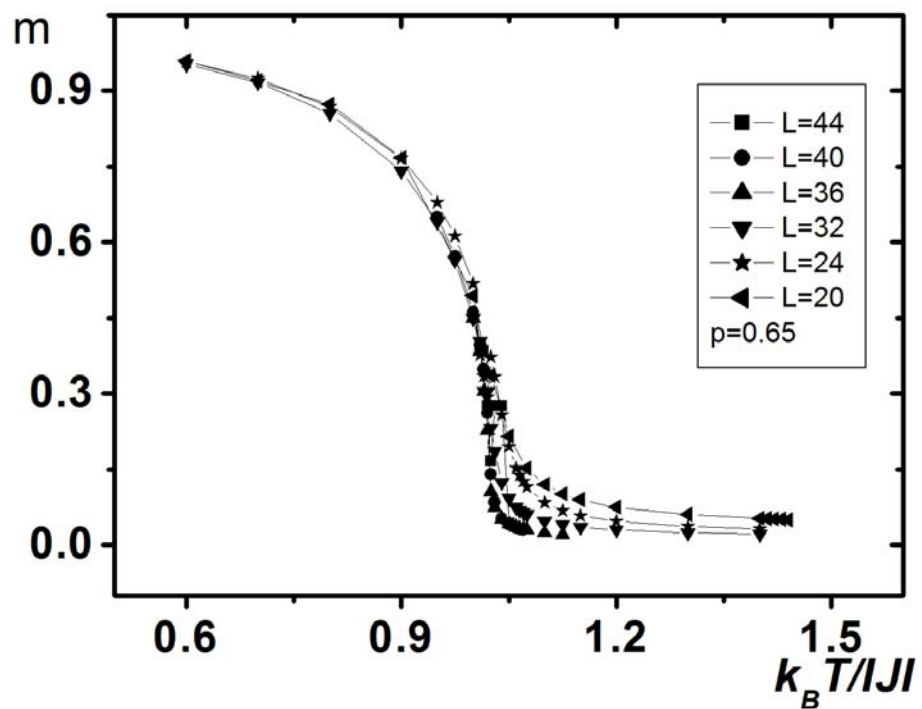


Рис. 3.14. Температурная зависимость намагниченности m для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=4$ при $p=0.65$.

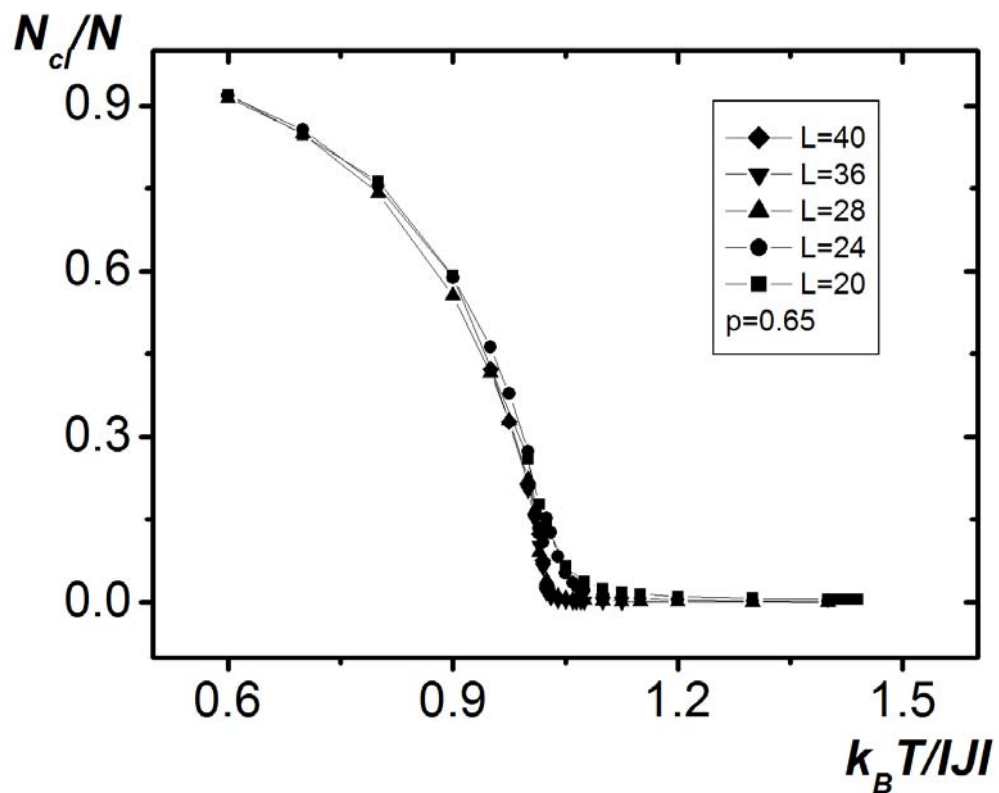


Рис. 3.15. Температурная зависимость относительного среднего размера кластера N_{cl} / N для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=4$ при $p=0.65$.

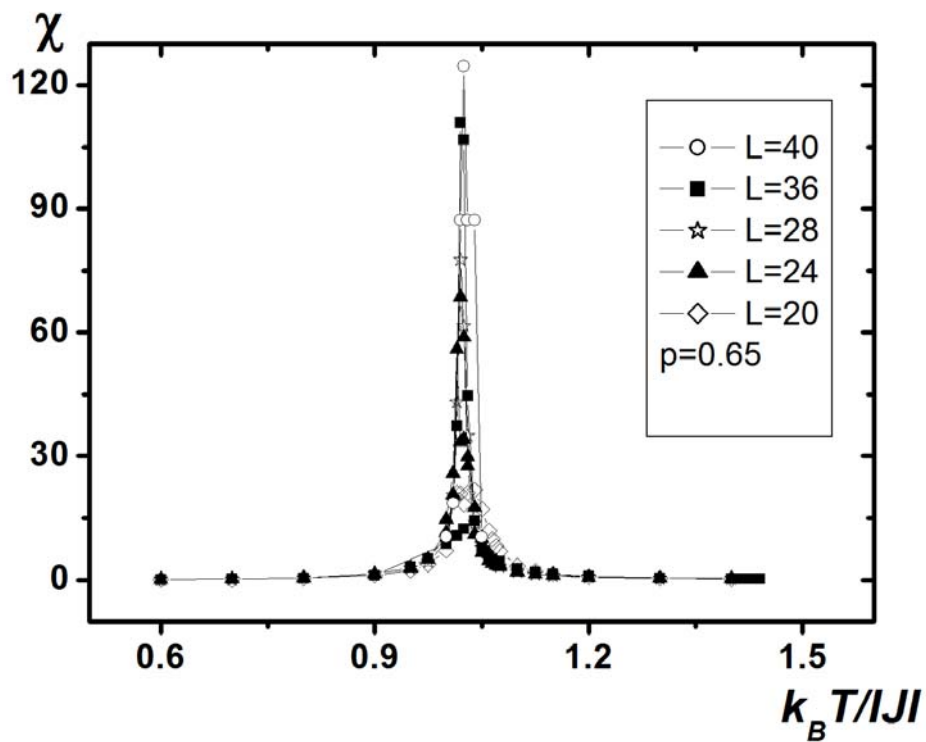


Рис. 3.16. Температурная зависимость восприимчивости χ для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=4$ при $p=0.65$.

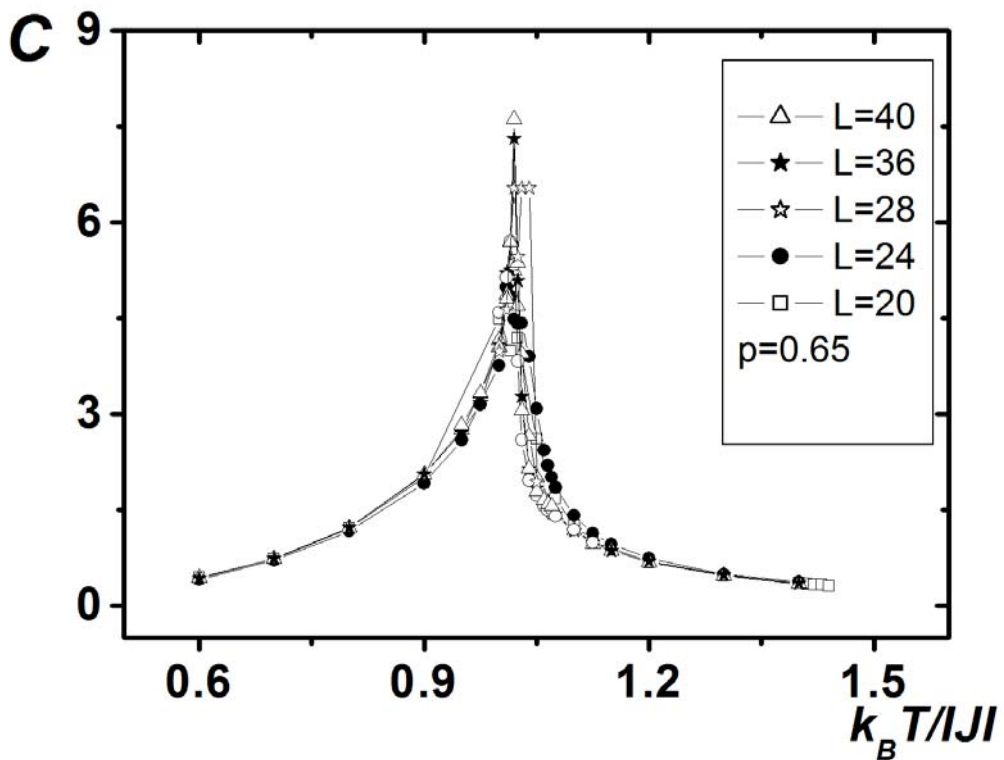


Рис. 3.17. Температурная зависимость теплоемкости C для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=4$ при $p=0.65$.

На рисунке 3.18 показаны зависимости значений V_n от L . Как видно из рисунка точки хорошо ложатся на прямую для всех значений V_n . На основе этого можно определить критический индекс ν с достаточно высокой степенью точности для всех исследованных систем с концентрацией p . Окончательное значение индекса ν нами определялось усреднением полученных показателей по первым четырем выражениям (2.40)-(2.42). Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, нами на основе теории конечно размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы (КИ): теплоемкости α , восприимчивости χ , намагниченности β , и критический индекс радиуса корреляции ν . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить следующие значения: α/ν , β/ν , χ/ν , $1/\nu$. Затем с использованием значений ν , полученных в рамках данного исследования, были получены оставшиеся критические индексы, которые приведены в таблице 3.2.

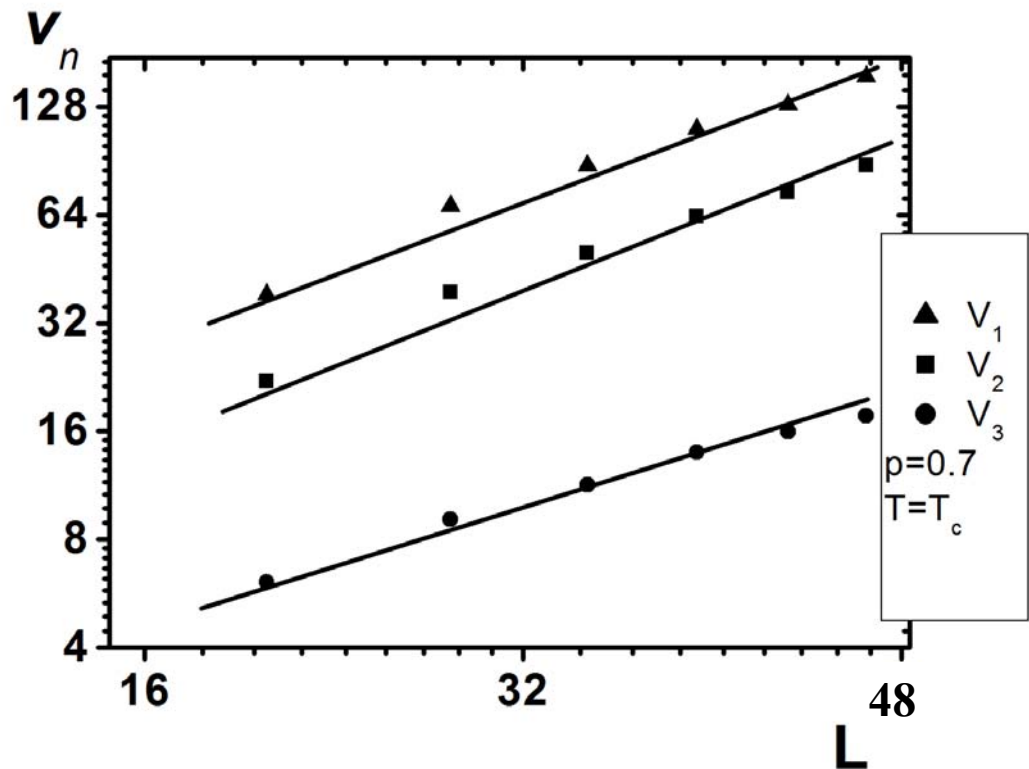


Рис. 3.18. Зависимость V_n от линейных размеров системы L для разбавленной трехмерной модели Поттса $q=4$ при $p=0.70$ и $T=T_c$.

Таблица 3.2. Критические индексы трехмерной разбавленной модели Поттса с состоянием $q=4$, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга.

Модель	p	$k_B T_c / J $	ν	α	γ	β
Поттс $q=4$	0.70	1.106	0.735(13)	-0.131(11)	1.098(30)	0.502(24)
	0.65	1.0222	0.745(13)	-0.139(11)	1.133(30)	0.514(24)

На рисунке 3.19 - 3.21 в двойном логарифмическом масштабе представлены зависимости намагниченности m , восприимчивости χ , теплоемкости C для разбавленной модели Поттса от линейных размеров решетки L при $p=0.7$ и $T=T_c$. Полученные таким образом значения КИ для систем с концентрацией спинов $p=0.70$; 0.65 представлены в таблице 3.2. Как видно из таблицы 3.2, полученные значения КИ достаточно хорошо согласуются друг с другом в пределах погрешности численного эксперимента для различных спиновых концентраций $p=0.70$ и $p=0.65$.

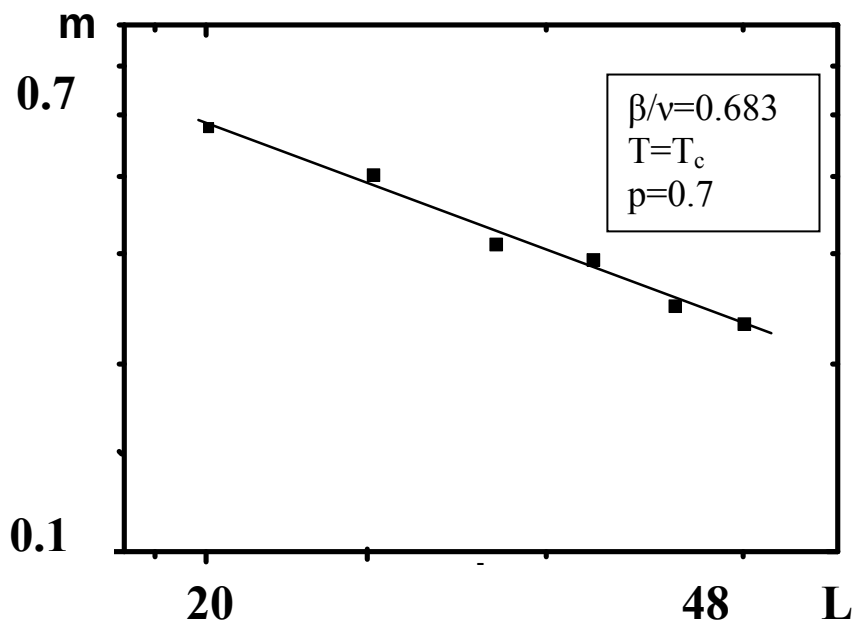


Рис. 3.19. Зависимость намагниченности m от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.70$.

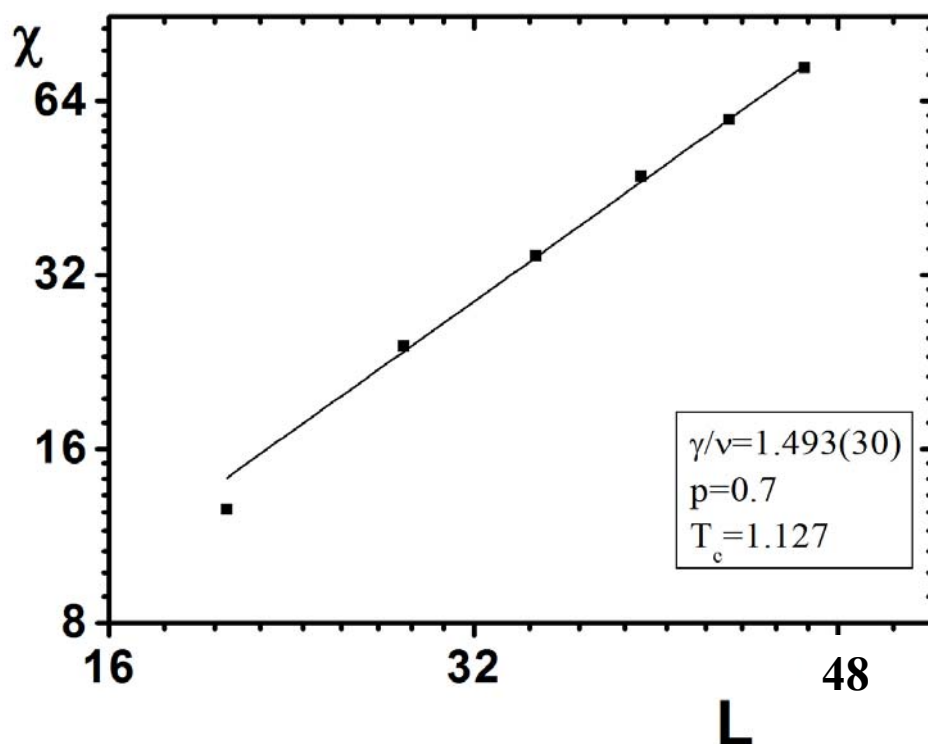


Рис. 3.20. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.70$.

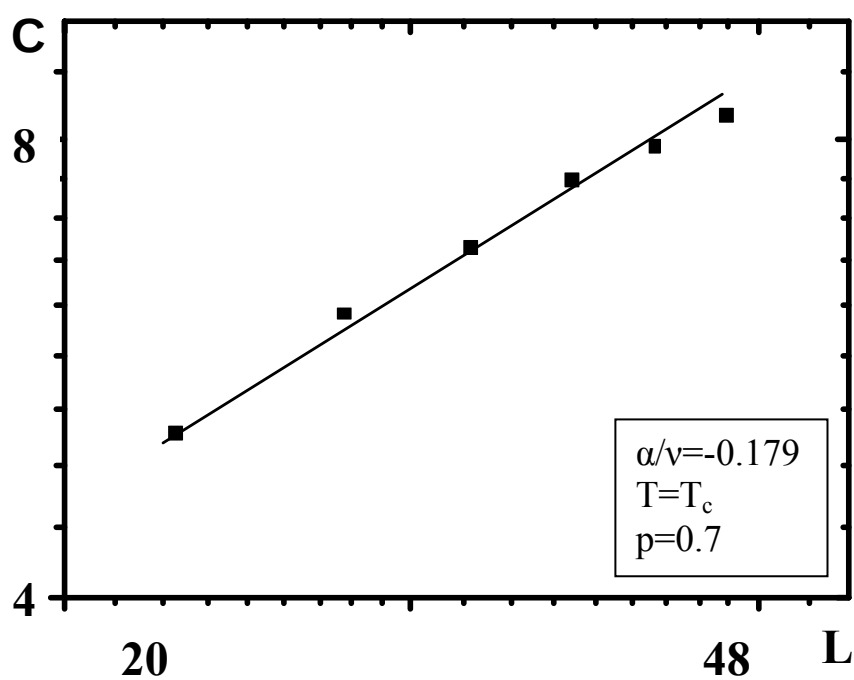


Рис. 3.21. Зависимость теплоемкости C от линейных размеров системы L при $T=T_c$ и $p=0.70$.

На основе полученных данных можно сделать следующие выводы:

1. Впервые, в широком интервале температур и при концентрации спинов $p=0.70$ и 0.65 исследованы статические критические и термодинамические свойства трехмерной разбавленной модели Поттса при $q=4$ с замороженными немагнитными примесями, распределенными каноническим способом.
2. Показано, что в модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ в отсутствие структурного беспорядка ($p=1.0$) и в области слабого разбавления ($p \geq 0.80$) наблюдается поведение, характерное для ФП первого рода.
3. Обнаружено, что при внесении значительного количества примесей $p=0.7$ и 0.65 в трехмерной разбавленной модели Поттса с состоянием $q=4$ наблюдается фазовый переход второго рода.
4. Исследования показали, что значения КИ для трехмерной разбавленной модели Поттса с $q=4$ при $p=0.7$ и 0.65 в пределах погрешности численного эксперимента достаточно хорошо согласуются друг с другом и удовлетворяют скейлинговому соотношению $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведено исследование методами численного эксперимента статических критических свойств неупорядоченных спиновых систем с немагнитными примесями. Для исследования применен высокоэффективный одно-кластерный алгоритм Вольфа спиновых систем, в которых замороженные немагнитные примеси реализованы каноническим способом.

С использованием метода Монте-Карло исследованы статические критические свойства трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=3$. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны все основные статические критические индексы (КИ) этой модели как для однородного случая $p=1.0$, так и при концентрации спинов $p=0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$. Показаны закономерности их изменения в зависимости от концентрации немагнитных примесей c , $c=1-p$. Установлены закономерности изменения термодинамических параметров от концентрации немагнитных примесей и размеров изучаемых систем.

Проведены высокоточные исследования для трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ при $p=1.0; 0.9; 0.80; 0.70; 0.65$. Показано, что в области сильного разбавления, в этой модели происходит смена фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.

В связи с проблемами теории фазовых переходов и критических явлений в неупорядоченных спиновых системах определение характера критического поведения и классов универсальности для разбавленных моделей, в которых возможны кроссоверные явления, исследование этих систем представляет огромный интерес.

Так как высокоэффективным одно-кластерным алгоритмом Вольфа впервые на основе единого методического подхода проведены

исследования критических свойств спиновых моделей с немагнитными примесями, то установленные при этом закономерности, а также подходы и методы, использованные при их исследовании и анализе данных, представляют также значительный методологический интерес.

Сложность рассматриваемых неупорядоченных моделей не дает возможности провести сколько-нибудь строгие аналитические расчеты и делает целесообразным применением методов вычислительной физики. Следует также отметить, что и для методов вычислительной физики упомянутые задачи являются достаточно сложными, и их решение потребовало большой предварительной методической работы и проведения значительного объема вычислений на ЭВМ.

Основные оригинальные результаты диссертационной работы могут быть сформулированы следующим образом:

1. Для исследования статических критических свойств спиновых моделей с замороженными немагнитными примесями был разработан комплекс программ для ЭВМ
2. Впервые в широком интервале температур и концентрации спинов $p=1.0; 0.95; 0.90; 0.8; 0.7; 0.65$ выполнены высокоточные исследования критических и термодинамических свойств трехмерной модели Поттса при $q=3$ и $q=4$ с примесями распределенными каноническим способом.
3. С использованием теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны критические индексы теплоемкости α , намагниченности β , восприимчивости γ и радиуса корреляции ν трехмерной модели Поттса с $q=3$ и $q=4$ разбавленной немагнитными примесями каноническим способом.
4. Высокоточным методом кумулянтов Биндера определены критические температуры для трехмерных неупорядоченных моделей Поттса с $q=3$ и $q=4$ при $p=1.0; 0.95; 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$.

5. Разработана единая методологическая основа для изучения особенностей критического поведения и расчета критических параметров, сильно разбавленных спиновых систем, для которых многие надежные и проверенные на чистых моделях схемы аналитических подходов оказались непригодными.
6. Показано, что в трехмерной модели Поттса с $q=3$ внесение незначительного количества примесей приводит к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.
7. В модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ в отсутствии структурного беспорядка при ($p=1.0$) и в области слабого беспорядка ($p \geq 0.80$) наблюдается поведение характерное для ФП первого рода. При внесении значительного количества немагнитных примесей превышающих порог перколяции ($p=0.65$) происходит изменение фазового перехода с первого рода на фазовый переход второго рода.

В заключении хотелось бы выразить глубокую благодарность своему научному руководителю член-корреспонденту РАН, д. ф.-м. н., профессору **Муртазаеву Акаю Курбановичу** за предложенную тему исследования, постоянное внимание и благожелательный интерес к работе, полезные обсуждения полученных результатов и большую помощь, оказанную при выполнении настоящей работы.

Автор также глубоко признателен всем сотрудникам лаборатории «Вычислительной физики и физики фазовых переходов», принимавшим активное участие в обсуждении результатов работы.

БИБЛИОГРАФИЯ.

1. Паташинский А.З., Покровский В.А. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 380 с.
2. Вильсон К., Когут Д. Ренормализационная группа и ε -разложение / Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. В.К. Федянина. – М.: Мир, 1975. – 256 с.
3. Паташинский А.З., Покровский В.А. Метод ренормализационной группы в теории фазовых переходов // УФН. – 1977. – Т.121, вып.1. – С.55-96.
4. Ма Ш. Современная теория критических явлений / Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова; Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. – М.: Мир, 1980. – 298 с.
5. Kadanoff L.P. Scaling laws for Ising models near T_c // Physica. - 1966. – V.2. – P. 263-268.
6. Onsager L. Crystal statistics. 1: A two- dimensional model with an order-disorder transitions // Phys. Rev. – 1944. – V.65. – P.117-149.
7. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. – М.: Мир, 1985. – 486 с.
8. Изюмов Ю.А., Скрыбин Ю. Н. Статистическая механика магнитоупорядочных систем. – М.: Наука, 1987. – 264 с.
9. Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком // УФН. - 1995г. – Т.165, вып.5. – С.481-528.
10. Peczak P., Ferrenberg A.M., Landau D.P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // Phys. Rev. B. – 1991. – V.43, N. 7. – P.6087-6093.47
11. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena // Physica A. – 1994. – V. 205, – P. 41-65.48
12. Antonenko S.A., Sokolov A.I. Critical exponents for a three-dimensional $O(n)$ – symmetric model with $n>3$ // Phys. Rev. E. – 1995. – V. 51, N. 3. – P. 1894-1898 00

13. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems // Phys. Lett. – 1989. – V.62, N. 4. – P.361-364.
14. Barkema G.T., Newman M.E.J. New Monte Carlo algorithm for classical spin systems // preprint cond-mat/9703179.
15. Loison D. Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians $H=J\sum(S_i S_j)^3$ // Phys. Lett. A – 1999. – V.257. – P.83-87.
16. Муртазаев А.К., Камиллов И.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей // ЖЭТФ. – 2001. – Т. 120, вып.6. – С.1535-1543.
17. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. Optimized Monte Carlo data analysis // Phys. Rev. Lett. – 1989, - V.63, N. 12. – P.1195-1198.
18. Ferdinand A.E., Fisher M.E. Bounded and inhomogeneous Ising models. I. Specific-heat anomaly of a finite lattice // Phys. Rev. – 1969. – V.185, N. 2 – P.832-846.
19. Fisher M.E., Barber M.N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region // Phys. Rev. Lett. – 1972. – V. 28, N. 23. – P.1516-1519.
20. Barber M.N. Finite-size scaling. In: Phase transitions and critical phenomena, V.8, p.1 (Academic press, New York, 1983).
21. Privman N. (Editor): Finite-size scaling and numerical simulation (Word scientific, Singapore, 1990).
22. Wegner F. J. // Phys. Rev. B. -1972. – V. 5. – P. 4529.
23. Harris B.A. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C: Solide State Phys. – 1974. – V.7, N.9. – P.1671-1692.
24. Соколов А.И., Шалаев Б.Н. О критическом поведении модели Изинга с примесями // ФТТ. –1981. –23, вып. 7. – С.2058-2063.
25. Jug G. Critical behavior of disordered spin systems in two and three dimensions // Phys. Rev. B. – 1983. – V.27, N.1. – P. 609–612.
26. Mayer I. O. Critical exponents of the dilute ising model from four-loop expansion // J. Phys. A/ - 1989. - V. 22. – P. 2815-2823.

27. Mayer I. O., Sokolov A. I., Shalaev B. N. Critical exponents for cubic and impure uniaxial crystals: most accurate theoretical values // *Ferroelectrics*. – 1989. – V. 95. - № 1. P. 93-96.
28. Хмельницкий Д.Е. Фазовый переход второго рода в неоднородных телах // *ЖЭТФ*. – 1975. – Т. 68, вып. 5. – С.1960-1968.
29. Lubensky T. C. . // *Phys. Rev. B*. -1975. – V. 11. – P. 3573-3580.
30. Mukamel D., Grinstein G. . // *Phys. Rev. B*. -1981. – V. 25. №1 – P. 381-388
31. Pakhnin D.V., Sokolov A.I. Critical exponents for three-dimensional impure Ising model in the five-loop approximation // *Pis'ma v ZhETF*. –2000. – V.71, N.10. – P. 600-605.
32. Pelissetto A., Vicari E. Randomly dilute spin models: A six-loop field-theoretic study // *Phys. Rev. B*. – 1987. – V.62, N.10. – P. 6393–6409.
33. Birgeneau R.J., Cowley R.A., Shirane G., Yoshizawa H., Belanger D.P., King A.R., Jaccarino V. Critical behavior of a site-diluted three-dimensional Ising magnet // *Phys. Rev. B*. – 1983. – V.27, N.11. – P. 6747 – 6753.
34. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков // *ЖЭТФ*. – 1993. – Т. 103, вып.3. – С.962-969.
35. Прудников В.В., Бородихин В.Н. Исследование неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга со случайными магнитными полями методом Монте-Карло // *ЖЭТФ*. – 2005. – Т. 128, вып.2 (8). – С.337-343.
36. Heuer H.-O. Monte Carlo simulation of strongly disordered Ising ferromagnets // *Phys. Rev. B*. – 1990. – V.42, N.10. – P.6476-6484.
37. Heuer H.-O. Critical crossover phenomena in disordered Ising systems // *J. Phys. A*. – 1993. – V.26, L333-L339.
38. Wiseman S., Domany E. Self-averaging, distribution of pseudocritical temperatures, and finite size scaling in critical disordered systems // *Phys. Rev. E*. – 1998. – V.58, N.3. – P.2938-2951.

39. Ballesteros H.G., Fernandez L.A., Martin-Mayor V., Munoz Sudupe A. Critical exponents of the three-dimensional diluted Ising model // Phys. Rev. B. – 1998. – V.58, N.5. – P.2740-2747.
40. Васильев О.В., Щур Л.Н. Универсальность отношения критических амплитуд восприимчивости двумерной модели Изинга с немагнитными примесями // ЖЭТФ. – 2000. – Т. 117, вып.6. – С.1110-1121.
41. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Бабаев А.Б. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с замороженным беспорядком на кубической решетке // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 126, вып.6 (12). – С.1377-1383.
42. Камилов И.К., Муртазаев А.К., Алиев Х.А. Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло // УФН. – 1999. – Т.169, в.п.7. – С.773-795.
43. Wiseman S., Domany E. Lack of self-averaging in critical disordered systems // Phys. Rev. E. – 1995. – V.52, N.4. – P. 3469–3484.
44. Муртазаев А.К. Исследование критических явлений в моделях реальных магнетиков методами вычислительной физики: Диссертация докт. физ.-мат. наук СПбГУ – СПб., 1999. – 280с.
45. Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике / Пер. с англ. В.Н. Новикова, К.К. Сабельфельда; Под. ред. Г.И. Марчука, Г.А. Михайлова. – М.: Мир, 1982. – 400 с.
46. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Пер. с англ. А.И. Мицека, Т.С. Шубиной; Под ред. С.В. Вонсовского. – М.: Мир, 1973. – 419 с.
47. Metropolis N., Rosenbluth W., Rosenbluth N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines // Jour. Chem. Phys. – 1953. – V.21, N. 6. – P. 1087 - 1092.
48. Wood W.W., Parker F.R. Monte-Carlo equation of state of molecules interactions with the Lenard-Jones potential. I: A supercritical isotherm at about twice the critical temperature // Jour. Chem. Phys. – 1957. – V.27, N.3. – P. 720-733.

49. Вуд В.В. Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло // Физика простых жидкостей / Под ред. Х.М. Темперли, Д.С. Роулинсон, Т.С. Рашбрука. – М.: Мир, 1978.
50. Brown F.R., Woch T.J. Overrelaxed heat-bath and Metropolis algorithms for accelerating pure gauge Monte Carlo calculations // Phys. Rev. Lett. – 1987. – V.58, N. 23. – P. 2394-2396.
51. Swendsen R.H., Wang J.-S. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses // Phys. Rev. Lett. – 1986. – V.57, N. 21. – P. 2607-2609.
52. Hokushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo method and application to spin glass simulations // Jour. Phys. Soc. Jap. – 1996. – V.65, N. 6. – P.1604-1608.
53. Wang J.-S., Swendsen R. H. Monte Carlo and high-temperature-expansion calculations of a spin-glass effective hamiltonial // Phys. Rev. B. – 1988. – V.38, N. 13. – P. 9086-9092.
54. Wang J.-S., Swendsen R. H. Low-temperature properties of the $\pm J$ Ising spin glass in two dimensions // Phys. Rev. B. – 1988. – V.38, N. 7. – P.4840-4844.
55. Campos P.R.A., Onody R.N. Single-cluster algorithm for the site-bond-correlated Ising model // Phys. Rev. B. – 1999-II – V.56, N. 22. – P.14529-14531.
56. Aharony A., Harris B. Absence of Self-Averaging and Universal Fluctuations in Random Systems near Critical Points // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V.77, N.18. – P. 3700–3703.
57. Aharony A., Harris A.B. Wiseman S. Critical Disordered Systems with Constraints and the Inequality $\nu > 2/d$ // Phys. Rev. Lett. – 1998. – V.81, N.2. – P. 252–255.
58. Marques M.I., Gonzalo J.A. Evolution of the universality class slightly diluted ($0.8 < p < 1.0$) Ising systems // Physica A. – 2000. V.284, N.1 - 4. – P. 187-194.
59. Binder K., Luijten E. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models // Phys. Reports. – 2001. – V. 344, – P.179-253.
60. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. – М.: Наука, 1977. – 228 с.
61. Potts R.B. Some generalized order-disorder transformations // Proc. Camb. Phil. Soc. – 1952. – V.48, N.1. – P. 106 - 109.

62. Loulidi M. Some analytical results on the bond diluted q -state Potts model // *Physica A*. - 2000. - V.287. - P. 177-184.
63. Guttman A.J., Enting I.G. Series studies of the Potts model: III. The 3-state model on the simple cubic lattice // *J. Phys. A.: Math. Gen.* - 1994. - V.27. - P. 5801-5812.
64. Chatelain C., Berche B., Janke W., Berche P.-E. Monte Carlo Study of Phase Transitions in the Bond-Diluted 3D 4-State Potts Model // *Nuclear Physics B* – 2005. – V.719/3. – P. 275 – 320.
65. Aizenman M., Wehr J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder // *Phys. Rev. Lett.* - 1989. - V.62, N.21. - P. 2503-2506.
66. Hui K., Berker A.N. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems // *Phys. Rev. Lett.* - 1989. - V.62, N.21. - P. 2507-2510.
67. Aizenman M., Chayes T.T., Chayes L., Newman C.M. The phase boundary in dilute and random Ising and Potts ferromagnets // *Physica A*. - 2000. - V.287. - P. 177-184
68. Wolfhard Janke, Ramon Villanova. Three-dimensional 3-state Potts model revisited with new techniques // *Nuclear Physics B* – 1997. – V.489. – P. 679 – 696.
69. Berker A.N., Ostlund S., Putnam F.A. Renormalisation-group treatment of a Potts lattice gas for krypton adsorbed into graphite // *Phys. Rev.* - 1978. - V.17, N. 9. - P. 3650 - 3655.
70. Sluckin T.J. A Potts model for the herringbone transition // *Phys. A*. - 1988. - V.21, N.6. - P. 1415 - 1424.
71. Mukamel D., Fisher M.E., Domany E. Magnetisation of cubic ferromagnets and the three-component Potts model // *Phys. Rev. Lett.* - 1976. - V.37, N.10. - P. 565 - 568.
72. Barbara B., Rossignol M.F., Bak P. First-order transition and tricritical points in DyAl_2 ; a realisation of the three-state Potts model // *J. Phys. C*. - 1978. - V.11, N.5. - P. L183 - L187.
73. Wu F.Y. The Potts model // *Rev. Mod. Phys.* - 1982. - V.54, N.1. - P. 235 - 268.

74. Aharony A., Muller K.A., Berlinger W. Trigonal to tetragonal transition in stressed SrTiO_3 -realisation of 3-state Potts model // *Phys. Rev. Lett.* - 1977. - V.38, N.1. - P. 33-36.
75. Shchur L., Butera P., Berche B. Susceptibility amplitude ratio in the two-dimensional three-state Potts model // *Nucl. Phys. B.* - 2002. - V.620. - P. 579-587.
76. Caselle M., Tateo R., Vinti S. Universal amplitude ratios in the 2D four-state Potts model // *Nucl. Phys. B.* - 2002. - V.620. - P. 579-587.
77. Chatelain C., Berche B., Janke W., Berche P.-E. Monte Carlo Study of Phase Transitions in the Bond-Diluted 3D 4-State Potts Model // *Nuclear Physics B* - 2005. - V.719/3. - P. 275 - 320.
78. Marques M.C., Santos M.A. Mean-field renormalization group for the Potts model in a transverse field // *J. Phys. C.* - 1986. - V.19, N.22. - P. L213-L221.
79. Fischer K.H. Spin glasses // *Phys. Stat. Sol. B.* 1983. V. 116, N.2. - P. 357-414.
80. Fisher K.H. Spin glasses // *Physica B&C.* - 1977. - V.86-88, Pt. 2. - P. 813-819.
81. Ермилов А.Н. Аналитический метод исследования стохастической модели Поттса // *Физика элементарных частиц и атомного ядра.* - 1989. - Т.20, вып.6. - С.1479-1544.
82. Edwards S.F., Anderson P.W. Theory of spin glasses // *J. Phys. F.* - 1975. - V.5, N.5. P. 965-964.
83. Sherrington D., Kirkpatrick S. Solvable model of a spin glass // *Phys. Rev. Lett.* - 1975. - V.35, N.26. - P. 1792-1796.
84. Toulouse G. Theory of the frustration effect in spin glasses // *Commun. Phys.* - 1977. - V.2, N.4. P. 115-119.
85. Miyazima S. A random Potts model with different number of Potts spin states // *Progr. Theor. Phys.* - 1984. - V.71, N.6. - P. 1123-1128.
86. Chayes J.T., Chayes L., Fisher D.S., Spencer T. // *Phys. Rev. Lett.*

- 57, 2999 (1986).
87. Ballesteros H.G., Fernandez L.A., Munoz Sudupe A., Parisi G., Ruiz-Lorenzo J.J. Phys. Rev. B **61**, 3215 (2000).
 88. Sarfan S.A., P.S. Sahni, and G.S. Grest, Phys. Rev. **B28**, 2693 (1983).
 89. Berker A. N., Physica (Amsterdam) 194A, 72 (1993).
 90. Yoon J., D. Sergatskov, J. Ma, N. Mulders, and M. H.W.Chan, Phys. Rev. Lett. **80**, 1461 (1998).
 91. Nikolaou M., M. Wallin, and H. Weber. Critical Scaling Properties at the Superfluid Transition of ^4He in Aerogel // Physical Review Letters, V.97, N 22, C 225702-1-4. (2006).
 92. Binder K., Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
 93. Eichhorn K. and K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
 94. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$.// ФНТ. 2011. Т. 37, № 2. С. 167-171.
 95. Binder K., Landau D.P. Phase diagrams and critical behavior in Ising square lattices with nearest- and next-nearest-neighbor interactions // Phys. Rev. B. – 1980. – V. 21, N 5. – P. 1941 – 1962.
 96. Ledue D., Landau D.P., Teillet J. Static critical behavior of the ferromagnetic Ising model on the quasiperiodic octagonal filing // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 51, N 18. – P. 12523 – 12530.
 97. Buendia G.M., Cardona R. Monte Carlo study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Ising ferrimagnetic model // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 59, N.10. – P. 6784 – 6789.
 98. Yamaguchi C. and Okabe Y. Three-dimensional antiferromagnetic q -state Potts models: application of the Wang-Landau algorithm // J. Phys. A34. – 2001. – P. 8781 – 8794.
 99. Itakura M. // Phys. Rev. B 60. - 1999. P. 6558/