*Математические
структуры и моделирование
2017. № 1(41). С. 30–37*

УДК 538.91

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ДВУМЕРНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С ДЕФОРМИРОВАННОЙ СТАТИСТИКОЙ

В.Н. Бородихин
доцент, к.ф.-м.н., e-mail: borodikhin@inbox.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

Аннотация. В работе впервые исследована двумерная неупорядоченная модель Изинга с деформированной статистикой Цаллиса, со спиновыми концентрациями 0.95 и 0.8. Получены значения критических температур и критических показателей. Для неупорядоченной модели с деформированной статистикой выявлено возникновение нового типа критического поведения, зависящего от концентрации примесей.

Ключевые слова: фазовые переходы, деформированная статистика, модель Изинга.

Введение

В работе [1] рассматривали двумерную однородную модель Изинга с деформированной статистикой Цаллиса [2]. Были определены критические температуры и критические показатели для систем с различной степенью деформации статистики. Исследование данной модели представляет теоретический и экспериментальный интерес, поскольку критическое поведение данной модели качественно согласуется с критическим поведением реальных систем, в частности, так называемых манганитов, например, $La_{0.60}Y_{0.07}Ca_{0.33}Mn_{O3}$ [3, 4]. Однако вопрос о связи подобных систем и неэкстенсивной статистики нуждается в уточнении.

Деформированная статистика характеризуется параметром деформации q, связанным со степенью отклонения от статистики Гиббса. В [1] было показано, что в отличие от стандартной однородной двумерной модели Изинга, в которой индекс теплоёмкости $\alpha = 0$, в двумерной однородной модели Изинга с деформированной статистикой индекс α является положительным. Согласно критерию Харриса [5] немагнитные примеси оказывают существенное влияние на критическое поведение в случае $\alpha > 0$, и таким образом, представляется интересным исследовать влияние вмороженного беспорядка в рамках двумерной модели Изинга с деформированной статистикой, а также исследовать влияние деформированной статистики на критерий Харриса.

В работе впервые были определены значения критических температур и критических показателей для двумерной неупорядоченной модели Изинга со спиновой концентрацией $p = 0.95$ с деформированной статистикой Цаллиса.

1. Моделирование систем с деформированной статистикой

Выражение для неаддитивной энтропии Цаллиса имеет вид [2]:

$$S_q = k\frac{1 - \sum\limits_i p_i^q}{q-1}, \tag{1}$$

где p_i — вероятность нахождения системы в состоянии i, q — параметр деформации статистики: при $0 < p_i < 1$ $p_i^q > p_i$ для $q < 1$, и $p_i^q < p_i$ для $q > 1$. При $q = 1$ статистика не является деформированной.

В неэкстенстивной статистической теории [2] вводится определение:

$$< H >_q = \sum_{i=1}^{\Omega} P_i \varepsilon_i = U_q, \tag{2}$$

где H — гамильтониан системы, ε_i — одно из возможных энергетических состояний, U_q — внутренняя энергия, P_i так называемое эскортное распределение [6]

$$P_i = \frac{p_i^q}{\sum\limits_j^{\Omega} p_j^q} = \frac{(e_q^{-\beta_q'}\varepsilon_i)^q}{\sum\limits_j^{\Omega}(e_q^{-\beta_q'}\varepsilon_j)^q}, \tag{3}$$

где

$$\beta' = \frac{\beta}{\sum\limits_j^{\Omega} p_j^q + (1-q)\beta U_q}, \tag{4}$$

здесь β — лагранжев множитель, e_q^{-x} — деформированная экспонента, удовлетворяющая свойству

$$[1-(1-q)\beta'\varepsilon_i]^{1/(1-q)} = \begin{cases} e_q^{-x}, 1-(1-q)x \geqslant 0; \\ 0, 1-(1-q)x < 0. \end{cases} \tag{5}$$

Следуя [1], в качестве физической температуры выберем β'.

При компьютерном моделировании системы использовали алгоритм метрополиса с модифицированной вероятностью переворота спинов, обусловленной деформированной статистикой:

$$w_q = \frac{P_i^{(2)}}{P_i^{(1)}} = \frac{e_q^{-\varepsilon_i^{(2)}/T}}{e_q^{-\varepsilon_i^{(1)}/T}}, \tag{6}$$

где $P_i^{(2)}$ эскортное распределение (3), соответствующее состоянию после переворота спина, а $P_i^{(1)}$ – состоянию до переворота. Состояние энергии ε_i определяется гамильтонианом двумерной неупорядоченной модели Изинга с учётом взаимодействия ближайших соседних спинов s_i:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} p_i p_j s_i s_j, \tag{7}$$

где J_{ij} — константа обменного ферромагнитного взаимодействия, p_i — случайная переменная, описываемая функцией распределения

$$F(p_i) = p\delta(p_i - 1) + (1 - p_i)\delta(p_i) \tag{8}$$

с $p = 1 - c$, где c — концентрация примесей. Система имеет вид квадратной решётки размера L с периодическими граничными условиями. С узлами решётки связаны спины s_i, принимающие значения ± 1 и немагнитные атомы примеси (пустые узлы с $s_i = 0$). Примесь равномерно распределяется по всей системе, её положение фиксировано для отдельной примесной конфигурации в процессе моделирования системы. Концентрация спинов определяется суммированием абсолютных значений спинов по всем узлам решётки:

$$p = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} |s_i|. \tag{9}$$

При моделировании системы вычисляли намагниченность на спин m, энергию на спин e, восприимчивость χ

$$\chi = \frac{\langle \bar{m^2} \rangle - \langle \bar{m} \rangle^2}{T}, \tag{10}$$

где $\langle ... \rangle$ означает статистическое усреднение по шагам Монте-Карло, а черта — усреднение по примесным конфигурациям. Также вычисляли теплоёмкость

$$C = \frac{\langle \bar{e^2} \rangle - \langle \bar{e} \rangle^2}{T^2} \tag{11}$$

Таблица 1. Критические индексы и критические температуры двумерной однородной и неупорядоченной модели Изинга (p=1, 0.95) с деформированной статистикой

p	q	T_c	α/ν	β/ν	γ/ν
1	1	2.269	0	0.125	1.75
	0.8	1.888 ± 0.005	0.223 ± 0.007	0.1247 ± 0.003	1.770 ± 0.042
	0.6	1.773 ± 0.007	0.261 ± 0.019	0.121 ± 0.003	1.696 ± 0.01
0.95	1[7]	2.088		0.125(5)	1.75(2)
	0.8	1.743 ± 0.006	0.166 ± 0.023	0.1063 ± 0.01	1.605 ± 0.04
	0.6	1.662 ± 0.006	0.182 ± 0.022	0.135 ± 0.004	1.650 ± 0.05

и кумулянт Биндера

$$U = 1 - \frac{\langle \bar{m}^4 \rangle}{3 \langle \bar{m}^2 \rangle^2}. \quad (12)$$

Отношение критических индексов теплоёмкости α/ν, намагниченности β/ν и восприимчивости γ/ν определяли из зависимости параметров от размеров системы L в критической точке T_c бесконечной системы

$$\begin{aligned} C(L,T) &\sim L^{\alpha/\nu}; \\ m(L,T) &\sim L^{-\beta/\nu}; \\ \chi(L,T) &\sim L^{\gamma/\nu}, \end{aligned} \quad (13)$$

где ν – критический индекс корреляционной длины. Для двумерной однородной модели Изинга он равен 1, и как показано в работе [1], практически не зависит от степени деформации статистики.

Таблица 2. Критические индексы и критические температуры двумерной неупорядоченной модели Изинга (p=0.8) с деформированной статистикой

p	q	T_c	β/ν	γ/ν
0.8	1[7]	1.5077	0.11(1)	1.78(2)
	0.8	1.2905 ± 0.009	0.126 ± 0.028	1.3474 ± 0.238
	0.6	1.2413 ± 0.01	0.1185 ± 0.02	1.332 ± 0.225

2. Результаты моделирования

Было осуществлено моделирование двумерной однородной и неупорядоченной модели Изинга с деформированной статистикой. Спиновая концентрация неупорядоченной системы составляла $p = 0.95$, $p = 0.8$, параметр деформации $q = 0.8, 0.6$, размеры системы выбирались $L = 256, 128, 64, 32$. При моделировании использовали 500–1000 примесных конфигураций для неупорядоченных систем, для однородных систем 100–400 прогонок. Отношение критических индексов α/ν, β/ν и γ/ν определяли из соотношений (13) в двойном логарифмическом масштабе в критической точке. Критические температуры определяли по пересечению кумулянтов Биндера (12). На рис. 1 для примера приведено пересечение кумулянтов (p=0.95, q=0.6). На рис. 2 – 5 приведены графики критических показателей при различных концентрациях и параметрах деформации.

Результаты моделирования приведены в табл. 1. Для однородной модели в табл. 1 в отсутствие деформации (q=1) приведены точные значения, для неупорядоченной (p=0.95) и q=1, результаты взяты из [7]. Для спиновой концентрации $p = 0.8$ результаты моделирования приведены в табл. 2.

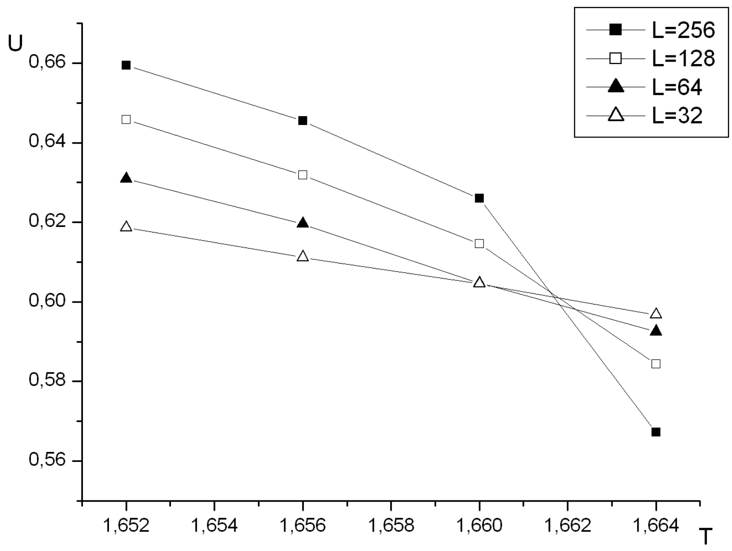

Рис. 1. Кумулянты Биндера, p=0.95, q=0.6.

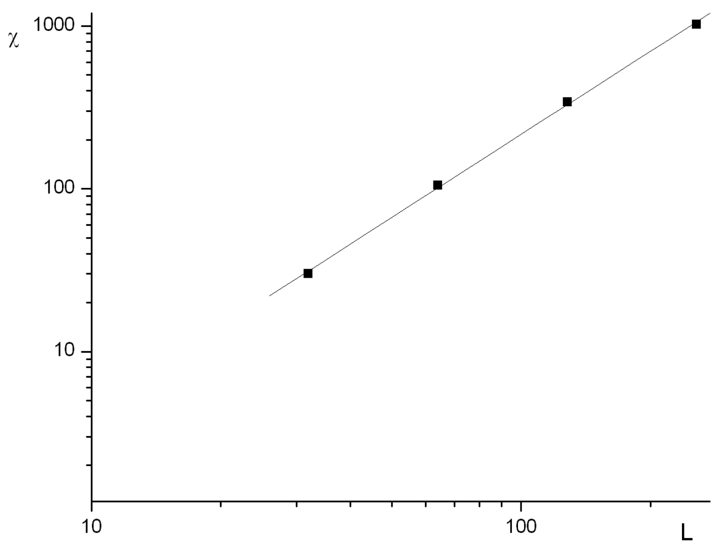

Рис. 2. Критический показатель γ, p=1.0, q=0.6.

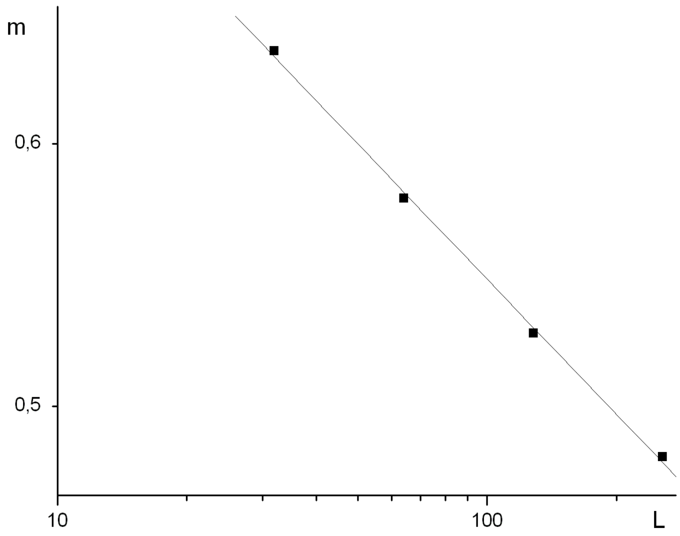

Рис. 3. Критический показатель β, p=0.95, q=0.6.

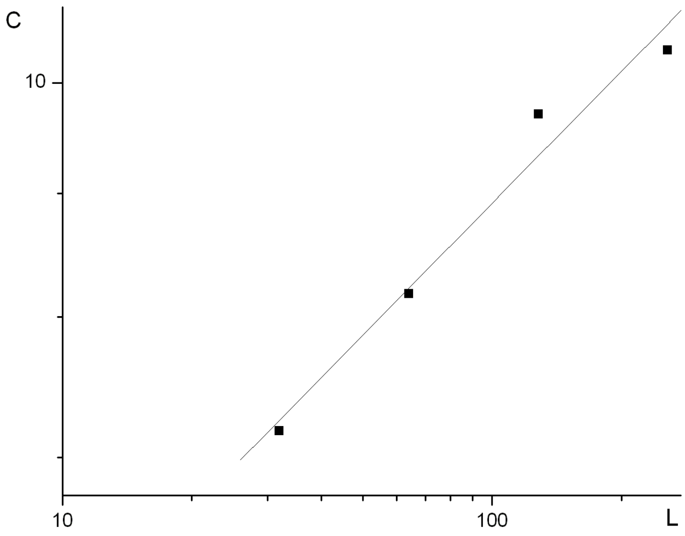

Рис. 4. Критический показатель α, p=0.95, q=0.6.

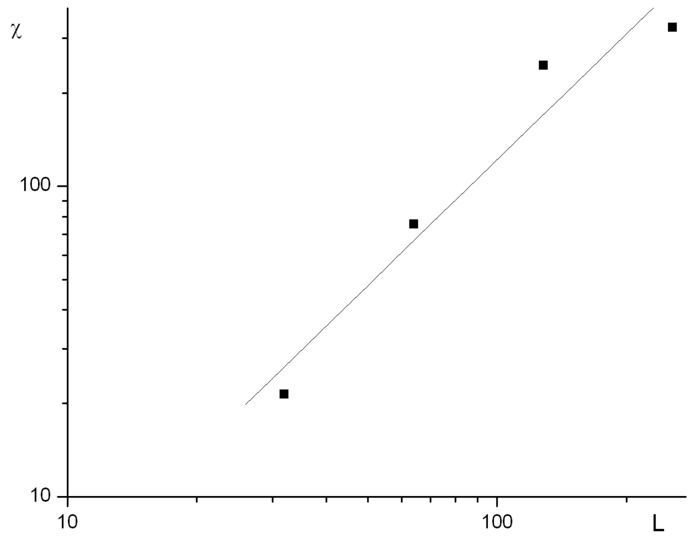

Рис. 5. Критический показатель γ, p=0.8, q=0.8.

3. Заключение

Сравнивая результаты данной работы для однородной деформированной модели Изинга и работы [1], можно выявить некоторые отличия. Критические температуры, полученные в рамках методики пересечения кумулянтов Биндера, в пределах погрешности совпадают с [1], как и критические показатели γ. Критические показатели α почти совпадают в пределах погрешности. Что касается критического показателя β, то в [1] выявлена сильная зависимость данного показателя от параметра деформации статистики q. Так для $q = 0.8$ $\beta = 0.075$, а для $q = 0.6$ $\beta = 0.025$, т.е. с уменьшением параметра деформации критический индекс β практически стремится к нулю. В то же время в данной работе не выявлено подобной зависимости. Критические показатели определяли из логарифмической зависимости соответствующих термодинамических величин в критической точке бесконечной системы.

Как известно, критические показатели двумерной неупорядоченной модели Изинга практически не зависят от концентрации примесей. Однако же в рамках деформированной неупорядоченной модели можно сказать, что и при малых концентрациях примесей (0.05), согласно значениям критических показателей α и γ, появляется новый тип критического поведения. Данный вывод подтверждает критерий Харриса ($\alpha > 0$) соответствующей однородной модели с деформированной статистикой $q \neq 1$. Что касается примесных концентраций 0.2, то здесь не удалось определить показатель α с хорошей точностью. Тем не менее в частности индекс γ демонстрирует существенное отличие от недеформируемой модели, а также от деформируемой модели с малой концентрацией примесей (0.05). Следовательно, для данной примесной концентрации также выявлен новый тип критического поведения.

Таким образом, влияние деформации статистики Цаллиса для неупорядоченной модели Изинга приводит к появлению нового типа критического поведения, зависящего от концентрации примесей.

Литература

1. Crokidakis N., Soares-Pinto D.O., Reis M.S., Souza A.M., Sarthour R.S., Oliveira I.S. Finite size analysis of a two-dimensional Ising model within a nonextensive approach // Phys. Rev. E. 2009. V. 80. P. 051101.
2. Tsallis C. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World. New York : Springer, 2009. P. 382.
3. Reis M.S., Amaral V.S., Araujo J.P. and Oliveira I.S. Magnetic phase diagram for a non-extensive system: Experimental connection with manganites // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 014404.
4. Amaral V.S., Araujo J.P., Pogorelov Y.P., Tavares P.B., Souza A.M., Vieira J.M. Discontinuous transition effects in manganites: magnetization study in the paramagnetic phase // J. Magn. Magn. Mater. 2002. V. 242. P. 655–658.
5. Harris A.B. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // J. Phys. C. 1974. V. 7. P. 1671.
6. Beck C., Schlogl F. Thermodynamics of Chaotic Systems: An Introduction. Cambridge, : Cambridge University Press, 1993. P. 308.
7. Heuer H.O. Monte Carlo Simulation of Disordered 2-Dimensional Ising Systems // Europhys. Lett. 1991. V. 16. P. 503–508.

STUDY OF THE SYSTEMS BEHAVIOR IN PHASE TRANSITIONS ON THE COALESCENCE STAGE

V.N. Borodikhin
Associate Professor, Ph.D. (Phys.-Math.), e-mail: borodikhin@inbox.ru

Dostoevsky Omsk State University

Abstract. For the first time the two-dimensional disordered Ising model with deformed Tsallis statistics, with spin concentrations of 0.95 and 0.8 is investigated. The values of critical temperatures and the critical exponents are obtained. For disordered model with deformed statistics the emergence of a new type of critical behavior depending on the concentration of impurities is revealed.

Keywords: phase transitions, deformed statistics, Ising model.

Дата поступления в редакцию: 11.12.2016