

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ СО СМЕШАННОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Чиков А.А.

Научные руководители: д-р физ.-мат. наук,  
проф. Москвин А.С., асс. Аввакумов И.Л.

*Уральский Федеральный Университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина*

Для описания спиновых систем — традиционного объекта внимания физики магнитных явлений — был разработан ряд эффективных методов, которые можно распространить на объекты, имеющие принципиально иную природу, путем использования псевдоспинового формализма, который состоит в введении псевдоспина — величины, описывающей несколько состояний элемента системы и эффективного гамильтониана, описывающего взаимодействие между этими элементами. В некоторых случаях это удастся сделать так, что получившаяся псевдоспиновая система, если и не имеет точного аналога среди истинно спиновых систем, то может быть описана или смоделирована с помощью уже известных методов. В качестве дополнительного преимущества этого подхода нужно отметить тот факт, что при численном моделировании исследователь может начать работу с уже изученной спиновой системы и, получив известный результат и убедившись в отсутствии ошибок в коде, достаточно быстро модернизировать алгоритм под интересующую его псевдоспиновую систему. Такой подход может сократить процесс отладки и служит дополнительным критерием истинности полученных результатов.

В данной работе псевдоспиновый формализм применен к описанию сильнокоррелированной системы со смешанной валентностью — плоскостей  $\text{CuO}_2$ , которые, согласно результатам ряда исследований отвечают за сверхпроводимость в соединениях типа  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  (рис.1). В рамках предложенного подхода 3 валентных состояний кластера  $\text{CuO}_4$  ( $\text{CuO}_4^{6-}$ ;  $\text{CuO}_4^{7-}$ ;  $\text{CuO}_4^{5-}$ ) формально связываем с триплетом  $M_s = 0, \pm 1$  состояний псевдоспина  $S = 1$ . Эффективный гамильтониан системы со смешанной валентностью представим в виде:

$$\hat{H} = \sum_i A_i \hat{S}_{iz}^2 - \sum_i h_i \hat{S}_{iz} + \sum_{i>j} v_{ij} \hat{S}_{iz}^2 \hat{S}_{jz}^2 + \sum_{i>j} V_{ij} \hat{S}_{iz} \hat{S}_{jz},$$

где под суммой по  $i > j$  следует понимать суммирование по ближайшим соседям. Два первых слагаемых описывают эффекты затравочного псевдоспинового расщепления. При этом второе слагаемое, описывающее электрон-дырочную асимметрию, может быть сопоставлено с псевдомагнитным полем  $h_i$  (в частности с реальным электрическим полем).

Третье и четвертое слагаемые описывают эффекты коротко- и дальнедействующих межионных взаимодействий, таких как экранированное кулоновское и ковалентное. Мы пренебрегаем эффектами переноса заряда, так что задача фактически сводится к классической. При использовании этого гамильтониана для описания систем со смешанной валентностью нас будет интересовать главным образом основная характеристика модельной системы: корреляционная функция типа «плотность-плотность» и ее Фурье-образ — структурный фактор. В ходе работы

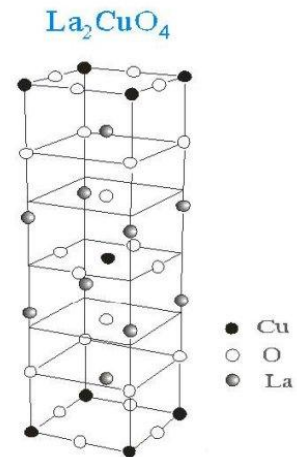


Рисунок 1:  
Кристаллическая  
структура  
исследуемого  
соединения

методом Монте-Карло исследовались зависимости структурного фактора в точке  $(\pi, \pi)$  от соотношения между величиной эффективной одноионной анизотропии и допирования системы  $Sr$ . Исходная система имела половинное заполнение, допирование вводилось следующим образом: выбирался квадратный кластер, центр которого соответствовал допированному иону  $Sr$ . На одном из узлов кластера увеличивалось значение проекции псевдоспина на 1, значение одноионной анизотропии, обмена и псевдомагнитного поля изменялись на всем кластере. Согласно экспериментальным данным были выбраны следующие значения констант:  $\Delta_i = 0.4\text{эВ} = 6.4 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$ ,  $V_{ij} = 0.35\text{эВ} = 5.6 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$ ,  $h_i = 0\text{эВ}$ ,  $v_{ij} = 0\text{эВ}$  при допировании они изменяются на  $\Delta_i^{dop} = -0.5\text{эВ} = 8.0 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$ ,  $V_{ij}^{dop} = 0.245\text{эВ} = 3.92 \text{ Дж}$  и  $h_i^{dop} = 0.35\text{эВ} = 5.6 \cdot 10^{-20} \text{ Дж}$  соответственно.

Для тестирования метода обратимся к системе со спином  $S = 1/2$  и гамильтонианом:

$$\hat{H} = \sum_{i>j} V_{ij} \hat{S}_{iz} \hat{S}_{jz}.$$

Это модель Изинга, при  $V > 0$  мы имеем антиферромагнитный случай. Для плоской квадратной решетки (которая нас и интересует) известно точное значение температуры фазового перехода антиферромагнетик - разупорядоченная парамагнитная фаза (Неелевский переход) который характеризуется скачкообразным изменением структурного фактора в точке  $(\pi, \pi)$  с единицы (в случае половинного заполнения) до нуля. Точное значение температуры фазового перехода  $T_c = 0.653V$ , где  $V$  – значение обменного интеграла – этот результат будет нами получен в качестве тестового перед переходом к моделированию системы со спином  $S = 1$ .

Наша задача сводится к вычислению квантовомеханического температурного среднего от некоторого оператора  $\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} Sp \{ \hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \}$ , где  $\beta$  – обратная температура, а  $Z = Sp \{ e^{-\beta \hat{H}} \}$  – статистическая сумма. Метод Монте-Карло – общее название группы численных методов, в которых так ли иначе задействованы генераторы случайных чисел. Применительно к нашей задаче метод сводится к усреднению интересующих параметров по некоторой выборке в фазовом пространстве системы. Производить простую выборку (случайным образом забрасывать систему в некоторую точку фазового пространства) не рационально, поэтому обратимся к алгоритму Метрополиса, который состоит в усреднении по Марковской цепи, построенной с соблюдением принципа детального равновесия. Марковская цепь – это последовательность вероятностных событий, такая, что каждое следующее зависит только от предыдущего, в нашем случае это цепочка преобразований системы, которая имитирует ее температурную эволюцию. Вероятность принятия новой конфигурации (результата единичного преобразования) должна удовлетворять принципу детального равновесия:  $W(\alpha)P(\alpha \rightarrow \alpha') = W(\alpha')P(\alpha' \rightarrow \alpha)$ , что обеспечит выполнение гипотезы эргодичности, т.е. эквивалентность термодинамического и статистического усреднения. Так как гамильтониан нашей системы диагонален в выбранном представлении мы можем вычислить изменение энергии при изменении конфигурации и ввести вероятность принятия перехода следующим образом:

$$W(\alpha \rightarrow \alpha') = \begin{cases} 1, & E_\alpha - E_{\alpha'} < 0 \\ e^{\beta(E_\alpha - E_{\alpha'})}, & E_\alpha - E_{\alpha'} > 0 \end{cases},$$

где  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ . Это не единственный, но наиболее логичный способ ввести величину  $W$ .

Принимать сгенерированную конфигурацию (т.е. включать ее в Марковскую цепь) мы будем в случае, если  $p < W(\alpha \rightarrow \alpha')$ , ( $p$ –число, сгенерированное случайным образом так, что  $0 < p < 1$ ) и отбрасывать (т.е. включать в Марковскую цепь старую конфигурацию повторно) в противном случае. Генерация новой конфигурации состоит в перевороте двух спинов в старой, переворот делается таким образом, чтобы сумма всех значений проекций спинов системы осталась неизменной. Важно отметить тот факт, что начальная точка Марковской цепи должна лежать близко к основному состоянию, иначе при достаточно низких температурах система может застрять в метастабильном состоянии, что приведет к неправильному результату. Для решения этой проблемы используют процедуру термализации или отжига, один из вариантов ее реализации – прогон системы без накопления каких либо параметров на температуре несколько превышающей расчетную, с целью поиска состояния с наименьшей энергией, с которого в основном расчете будет стартовать Марковская цепь. В ходе исследования проводились эксперименты с различным количеством шагов и разными размерами решетки, для построения фазовых диаграмм была выбрана система размером  $10 \times 10$  с  $1,5 \cdot 10^4$  шагов в цикле термализации и  $5 \cdot 10^4$  шагов в основном цикле. Граничные условия везде периодические.

Перейдем к обсуждению полученных результатов. Зависимость структурного фактора от температуры для модели Изинга ( $S = 1/2$ ) совпала с ожидаемой – упорядоченная фаза (антиферромагнетик) при низких температурах и разупорядоченная (парамагнетик) при  $T > T_c = 0.65 - 0.66V$ , точное значение  $T_c = 0.653V$ . При переходе к  $S = 1$  в той же модели температура фазового перехода увеличилась, но качественно зависимость осталась прежней (Рис.2), что объясняется тем, что увеличилось максимальное значение проекции спина на ось  $Z$  и соответственно, вклад в полную энергию от каждой связи в упорядоченной фазе. Цель этого этапа – убедиться в том, что модель работает правильно – достигнута.

Следующий этап – подбор оптимальных параметров расчета – размера решетки и количества шагов для исследования зависимости поведения модели от параметров системы – величины эффективной одноионной анизотропии и допирования (отклонения от половинного заполнения). Было исследовано поведение систем размером от  $2 \times 2$  до  $32 \times 32$  (рис.3), для построения фазовых диаграмм была выбрана система  $10 \times 10$ , так как с дальнейшим увеличением размера поведение вблизи критической точки существенно не меняется. Критерий выбора количества шагов для каждого конкретного размера системы – визуальная гладкость кривой, для системы  $10 \times 10$  это  $1,5 \cdot 10^4$  шагов в цикле термализации и  $5 \cdot 10^4$  шагов в основном цикле.

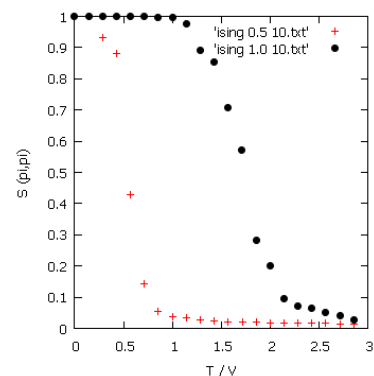


Рисунок 2: Неелевский переход в модели Изинга для  $S=1/2$  и  $S=1$

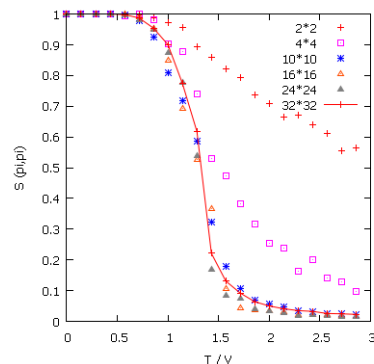


Рисунок 3: Неелевский переход на решетках различного размера для  $S=1$

Задача третьего этапа – построить фазовые диаграммы на плоскостях  $(T, \Delta)$  и  $(T, N_{dop})$ , где  $N_{dop}$  – отношение количества допированных ионов  $Sr$  к полному количеству узлов в системе. В системе не возникает упорядоченной фазы при значении анизотропии  $\Delta > 2V$ , но такой ситуации, когда при нулевой температуре наблюдается упорядоченная фаза, которая разрушается при незначительном увеличении температуры, не обнаружено (рис.4), что вероятно, является следствием фиксации суммарного спина системы. Более интересная с практической точки зрения диаграмма в плоскости  $(T, N_{dop})$  показала относительно слабую зависимость температуры фазового перехода при отклонении от половинного заполнения (при разумных концентрациях допирования) и частичное подавление антиферромагнитного порядка при  $T < T_c$ . Последний результат также является следствием фиксации суммарного спина системы, а слабая зависимость  $T_c(N_{dop})$  является нетривиальным свойством системы (рис.5).

Дальнейшее развитие этой работы предполагает проверку полученных результатов с помощью кластерного алгоритма Монте-Карло и анализ систем с расширенным оператором Гамильтона, в котором будут учтены такие явления как одно- и двухчастичный перенос, что позволит искать в системе фазу с псевдоспином, ориентированным в плоскости решетки, которая соответствует сверхпроводящему состоянию.

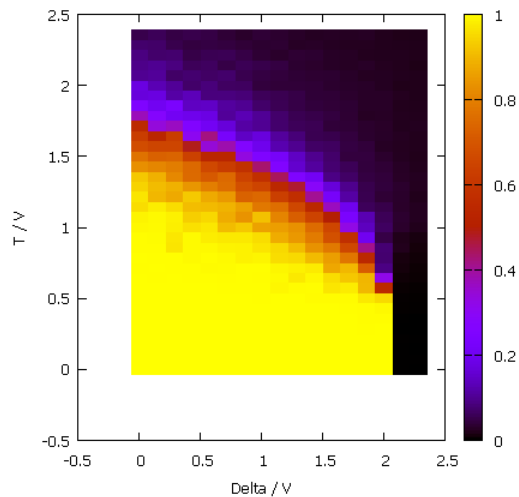


Рисунок 4: Фазовая диаграмма на плоскости  $(T, \Delta)$ , цветом показан структурный фактор

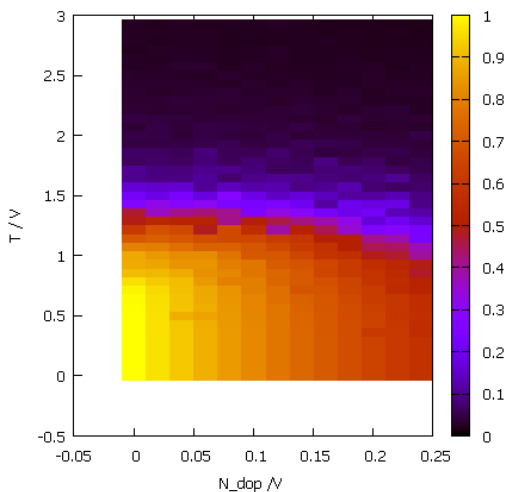


Рисунок 5: Фазовая диаграмма на плоскости  $(T, N_{dop})$ , цветом показан структурный фактор