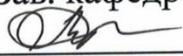


Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Инженерно-физический факультет
Кафедра физики
Направление подготовки 03.04.01 – Прикладные математика и физика
Направленность (профиль) образовательной программы Физика твердого тела

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ
Зав. кафедрой
 Е.В. Стукова
«06» 07 2020 г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему: Неравновесное поведение и критические свойства одноосных сегнето-электриков в концепции стохастической модели Изинга

Исполнитель
студент группы 814-ом  15.06.2020 М.С. Быковский
(подпись, дата)

Руководитель
профессор, д-р физ.-мат.
наук  15.06.2020 А.Г. Масловская
(подпись, дата)

Руководитель
научного содержания
программы магистратуры  17.06.2020 Е.В. Стукова
(подпись, дата)

Нормоконтроль  18.06.2020 О.В. Зотова
(подпись, дата)

Рецензент  29.06.2020 А.Ю. Милинский
(подпись, дата)

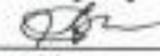
Благовещенск 2020

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
(ФГБОУ ВО «АмГУ»)

Факультет инженерно-физический
Кафедра физики

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой

 Е.В. Стукова
« 21 » 05 2020 г.

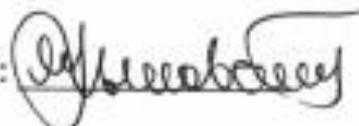
З А Д А Н И Е

К выпускной квалификационной работе студента Быковского Михаила Сергеевича

1. Тема выпускной квалификационной работы: «Неравновесное поведение и критические свойства одноосных сегнетоэлектриков в концепции стохастической модели Изинга» (утверждена приказом от 30.04.2020 № 810-уч).
2. Срок сдачи студентом законченной работы: 15.06.2020 г.
3. Исходные данные к выпускной квалификационной работе: отчет по преддипломной практике, отчеты по научно-исследовательской работе, ППП Matlab.
4. Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих разработке вопросов): фундаментальные концепции физики сегнетоэлектрических явлений, классические решеточные модели фазовых переходов в сегнетоэлектрических материалах и их современные модификации, расчет характеристик фазовых переходов в сегнетоэлектриках на основе двумерной модели Изинга
5. Перечень материалов приложения: листинги компьютерных программ.
6. Консультанты по выпускной квалификационной работе: рецензент – доцент, канд. физ.-мат. наук Милинский Алексей Юрьевич; нормоконтроль – Зотова О.В., доцент, канд. физ.-мат. наук.
7. Дата выдачи задания: 21.05.2020 г.

Руководитель магистерской диссертации: Масловская Анна Геннадьевна, профессор, д-р физ.-мат. наук.

Задание принял к исполнению (21.05.2020):



РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация содержит 82 с., 19 рисунков, 2 таблицы, 1 приложение, 60 источников.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ, МОДЕЛЬ ИЗИНГА, МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО, АЛГОРИТМ МЕТРОПОЛИСА

Магистерская диссертация направлена на развитие модели стохастической модели Изинга в приложении к исследованию неравновесного поведения и критических свойств одноосных сегнетоэлектриков. Проведен обзор основных концепций сегнетоэлектрических явлений и описания фазовых переходов в них. Изложены фундаментальные основы решеточных моделей для формализации фазовых переходов в магнитных и сегнетоэлектрических системах. Проведен анализ практических примеров применения моделей Изинга и Гейзенберга для расчета характеристик фазовых переходов в сегнетоэлектриках. Сформулирована модель Изинга в приложении к расчету характеристик фазовых переходов в одноосных сегнетоэлектриках (в базовой постановке и в постановке, учитывающей дальнейшее взаимодействие). Разработана базовая прикладная программа, реализующая двумерную модель Изинга на основе алгоритма Метрополиса в ППП Matlab.

Представлены результаты вычислительных экспериментов по моделированию температурных зависимостей поляризации и теплоемкости в окрестности температуры фазового перехода для сегнетоэлектриков со 180° доменной структурой. Проведено моделирование гистерезисной зависимости поляризации от приложенного поля при варьировании температуры. Проведены оценки критических индексов и сравнение результатов с аналитическими приближениями. Проведено сравнение модельных результатов с данными литературных источников для кристалла ТГС.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	6
1 Фундаментальные концепции физики сегнетоэлектрических явлений	10
1.1 Общая характеристика полярных диэлектрических материалов	10
1.2 Доменная структура сегнетоэлектриков	14
1.3 Сегнетоэлектрический гистерезис	17
1.4 Базовые положения термодинамической теории сегнетоэлектриков	18
1.5 Сходства и различия между сегнетоэлектриками и ферромагнетиками	21
2 Модель Изинга как классическая решеточная модель фазовых переходов и ее применение для изучения свойств сегнетоэлектриков	24
2.1 Модель Изинга для описания свойств ферромагнетиков	24
2.2 Метод Монте-Карло и алгоритм Метрополиса	34
2.3 Модель Изинга в приложении к исследованию свойств сегнетоэлектриков	38
2.4 Применение решеточных моделей для изучения свойств сегнетоэлектриков: обзор современных исследований	43
2.4.1 Примеры применения теории эффективного поля для расчета характеристик сегнетоэлектриков в модели Изинга	43
2.4.2 Использование метода Монте-Карло для моделирования микроскопического состояния сегнетоэлектриков	47
2.5 Модель Изинга и критические индексы	50
3 Расчет характеристик фазовых переходов в сегнетоэлектриках на основе двумерной модели Изинга	51
3.1 Границы применимости модели Изинга в приложении к сегнетоэлектрическим материалам	51
3.2 Концептуальная и математическая постановки задачи моделирования	53
3.3 Формальное описание алгоритма Метрополиса для компьютерной реализации модели Изинга	55

3.4 Вычислительные эксперименты и анализ результатов моделирования	57
3.4.1 Моделирование характеристик в окрестности температуры фазового перехода (в отсутствие внешнего поля)	57
3.4.2 Моделирование диэлектрического гистерезиса	58
3.4.3 Оценка критических индексов	60
3.4.4 Сравнение результатов моделирования температурной зависимости поляризации с аналитическим решением и экспериментальными данными	63
3.4.5 Моделирование характеристик сегнетоэлектриков с учетом дальнодействующих связей	65
Заключение	69
Библиографический список	71
Приложение А Листинг компьютерной программы, реализующей двумерную модель Изинга и ее модификацию	77

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время моделирование фазовых переходов и связанных с ними критических явлений является одной из важнейших прикладных задач статистической теории и привлекает внимание ученых в различных областях научного знания. Теория фазовых переходов имеет приложения в различных областях физики: физика твердого тела, физическая химия, биохимия, квантовая электроника. Особенно интересным объектом для исследования являются фазовые переходы второго рода, определяемые перестройкой структуры вещества без обмена энергией с окружающей средой. Использование концепций стохастического моделирования критических явлений в макроскопических системах и применение технологии вычислительного эксперимента позволяют исследовать свойства твердых тел и интерпретировать условия аномального поведения некоторых характеристик в окрестности температуры фазового перехода.

Для описания критических явлений и фазовых переходов наибольшее распространение получили модели Изинга и Гейзенберга. Методом стохастического моделирования поведения характеристик макроскопических систем является метод Монте-Карло, который приобрел в последние десятилетия в связи с широким применением техники компьютерного эксперимента для решения проблем экспериментальной и теоретической физики.

Классическим примером прикладной задачи является расчет основных физических величин, характеризующих ферромагнитный фазовый переход второго рода в магнитных системах. Однако, в последние годы особое развитие получил класс статистических моделей (Изинга, Гейзенберга и Поттса) для описания характеристик сегнетоэлектриков в окрестности фазового перехода. Данная тематика не теряет своей актуальности в связи с большим разнообразием как специфики постановок формулируемых задач (размерности, объектов, внешних условий полевого воздействия), так и с возможностями вариаций программных решений.

Объектом настоящей работы являются сегнетоэлектрические материалы,

предметом – характеристики фазовых переходов в сегнетоэлектриках, установленные с помощью моделирования методом Монте-Карло (в концепции модели Изинга).

Цель данной работы – развитие подхода к расчету характеристик одноосных сегнетоэлектриков в окрестности температуры Кюри на основе компьютерной реализации решеточной модели Изинга методом Монте-Карло.

Для достижения цели сформулирован ряд задач:

1) выяснить границы применимости решеточных моделей для описания свойств сегнетоэлектриков;

2) разработать прикладную программу, реализующую двумерную модель Изинга на основе алгоритма Метрополиса, и дополнить ее функционал возможностью расчета температурных характеристик сегнетоэлектриков;

3) реализовать модифицированную модель Изинга с учетом дальнедействующих связей;

4) провести вычислительные эксперименты в нормированных величинах, установить общие закономерности поведения поляризации, теплоемкости и диэлектрической восприимчивости от температуры и сравнить результаты с аналитическими аппроксимациями и экспериментальными данными для кристалла ТГС;

5) построить гистерезисные зависимости поляризации при изменении электрического поля одноосных сегнетоэлектриков при различных температурах;

6) провести оценку критических индексов и сравнить их с данными литературных источников.

При решении задач, поставленных в магистерской диссертации, использованы следующие **методы и программные средства**: общая методология физико-математического моделирования, технология реализации вычислительного эксперимента; метод Монте-Карло, алгоритм Метрополиса, средства алгоритмического программирования и графические возможности пакета математических программ Matlab.

Элементы научной новизны полученных результатов заключаются в авторской программной реализации стохастической двумерной модели Изинга, предназначенной для исследования характеристик фазовых переходов одноосных сегнетоэлектриков типа «порядок-беспорядок», учете дальнедействующих взаимодействий в модифицированном алгоритме Метрополиса (ранее такой учет был проведен только в рамках теории эффективного поля), а также в сравнительном анализе данных моделирования с экспериментальными данными для кристалла ТГС.

Теоретическая значимость работы заключается в развитии подхода стохастической модели Изинга для моделирования поведения сегнетоэлектриков в окрестности фазового перехода и определении границ этого подхода применительно к сегнетоэлектрикам. **Практическая значимость** работы заключается в возможности прогнозирования характеристик фазового перехода на основе данных модельного расчета.

Результаты работы были **апробированы** на следующих научных мероприятиях вузовского, городского, российского и международного уровня:

- XXVIII научной конференции «День науки АмГУ – 2019», г. Благовещенск, 2019 г. (очное участие);

- II Всероссийской национальной научной конференции «Молодёжь и наука: актуальные проблемы фундаментальных и прикладных исследований», г. Комсомольск-на-Амуре, 2019 г. (заочное участие);

- XX региональной научно-практической конференции «Молодежь XXI века: шаг в будущее», г. Благовещенск, 2019 г. (заочное участие);

- XIV региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», г. Благовещенск, 2019 г. (заочное участие).

За время работы над данной темой научного исследования **опубликованы** 3 научные работы, библиографическое описание которых приведено в общем списке литературы.

Структура работы. Выпускная квалификационная работа состоит из

введения, трех глав, заключения и библиографического списка. Первая глава посвящена описанию общих сведений о полярных диэлектрических материалах, доменной структуре сегнетоэлектриков и гистерезисных явлениях, базовых положений термодинамической теории сегнетоэлектрической. Вторая глава является методической, в ней представлены классические решеточные модели фазовых переходов с акцентом на модель Изинга. Результаты оригинальных исследований по реализации модели Изинга и моделированию характеристик сегнетоэлектриков в окрестности фазового перехода представлены в третьей главе диссертации.

1 ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ КОНЦЕПЦИИ ФИЗИКИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

1.1 Общая характеристика полярных диэлектрических материалов

Диэлектрические материалы в кристаллической форме распределены по всем тридцати двум кристаллографическим классам. Диэлектрик, помещенный в электрическое поле поляризуется, его диполи поворачиваются, т.е. приобретают момент, который количественно характеризуется поляризацией. Поляризация подразделяется на четыре типа [1-2]:

- 1) электронная, при которой происходит смещение внешнего электронного облака относительно ядра;
- 2) ионная – происходит смещение противоположных заряженных ионов в электрическом поле;
- 3) ориентационная – молекулы поворачиваются в электрическом поле;
- 4) миграционная, когда объёмные заряды возникают за счет перемещения свободных носителей заряда внутри диэлектрика (имеет место только в керамиках).

Состояние диэлектрика задается величиной \mathbf{P} , называемой поляризацией вещества, и равной суммарному дипольному моменту единицы объема [3]:

$$P = \frac{\sum \mathbf{p}_i}{\Delta V}, \quad (1.1)$$

где $\sum_{\Delta V} \mathbf{p}_i$ – сумма электрических моментов атомов и молекул, заключенных в

физически малом элементе диэлектрика ΔV ;

\mathbf{p}_i – электрический момент i -атома (молекулы).

У изотропных диэлектриков поляризация связана с напряженностью внешнего электрического поля следующим образом:

$$\mathbf{P} = \chi \varepsilon_0 \mathbf{E}, \quad (1.2)$$

где ε_0 – электрическая постоянная;

\mathbf{E} – напряженность внешнего электрического поля;

χ – диэлектрическая восприимчивость.

Величиной, которую характеризуют сторонние заряды диэлектрика, является электрическое смещение \mathbf{D} [3]:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}, \quad (1.3)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость, связанная с диэлектрической восприимчивостью соотношением $\varepsilon = 1 + \chi$.

Полярное состояние может быть реализовано в диэлектрических материалах в кристаллической форме всех 32 точечных групп симметрии. У ряда материалов, принадлежащих 20 из 32 кристаллографических групп, поляризация может быть инициирована приложением механического напряжения типа «растяжение-сжатие» или «сдвига», такие кристаллы являются пьезоэлектриками.

Сегнетоэлектрики – это вещества, вследствие низкой симметрии кристалла, обладающие спонтанной поляризацией в отсутствие внешнего электрического поля до температуры T_C , а при достижении критической точки T_C становятся диэлектриками. Направление поляризации сегнетоэлектриков можно изменить на противоположное при противоположном электрическом поле или механическом напряжении. Все сегнетоэлектрики в сегнетоэлектрической фазе обладают пирозэффектом. Пирозэлектрический эффект – изменение самопроизвольной поляризации кристаллов при однородном изменении температуры.

На рисунке 1.1 представлен общий характер зависимостей диэлектрической проницаемости ε , самопроизвольной поляризации P , изобарной теплоемкости C_p , от температуры.

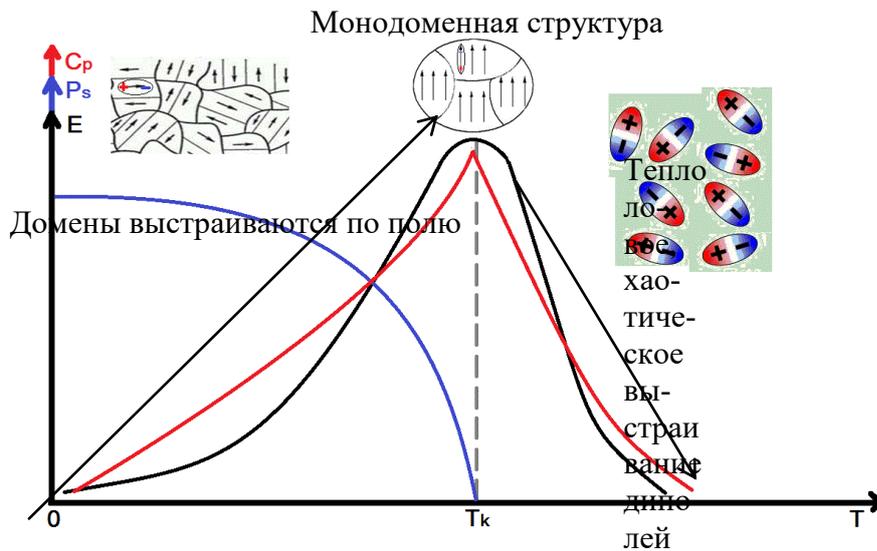


Рисунок 1.1 – Температурные зависимости диэлектрической проницаемости, самопроизвольной поляризации, изобарной теплоемкости



Рисунок 1.2 – Структурная схема активных диэлектриков

Сегнетоэлектрический фазовый переход изменяет симметрию кристалла при определенных условиях [3]. Существуют вещества (рисунок 1.2), обладающие и не обладающие самопроизвольной поляризацией в отсутствие внешнего электрического поля [6].

Все сегнетоэлектрики в сегнетоэлектрической фазе обладают пирозэффектом. Пирозэлектрический эффект – изменение самопроизвольной поляризации кристаллов при однородном изменении температуры. Все сегнетоэлектрики можно разбить на 2 типа и 4 класса, как показано на рисунке 1.3.

К первому классу относятся: титанат бария BaTiO_3 , ниобат калия KNbO_3 , титанат свинца PbTiO_3 , метатанталат свинца PbTa_2O_6 . Ко второму классу относятся: триглицинсульфат $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \times \text{H}_2\text{SO}_4$, кислый сульфат аммония NH_4HSO_4 , сульфат аммония $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, фторобериллат аммония $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$. К третьему классу принадлежат: метиламмонийные квасцы $\text{C}(\text{NH}_3)\text{Al}(\text{SO}_4)_2 \times 12\text{H}_2\text{O}$. К четвертому классу – дигидрофосфат калия KH_2PO_4 , дигидроарсенат калия KH_2AsO_4 , дигидрофосфат палладия PdH_2PO_4 , сегнетова соль $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \times 4\text{H}_2\text{O}$ [5-6].

По типу фазового перехода и характеру химической связи сегнетоэлектрики можно разделить на две большие группы: сегнетоэлектрики типа смещения (спонтанная поляризованность обусловлена смещением положения равновесия колеблющихся подрешеток ионов) и сегнетоэлектрики, сегнетоэлектрики – типа порядок – беспорядок (появление спонтанной поляризованности связано с упорядочением диполей).

Сегнетоэлектрики можно также классифицировать по характеру фазового перехода (I или II рода), по наличию или отсутствию пьезоэффекта в параэлектрической фазе, по числу возможных направлений спонтанной поляризации (одноосные и многоосные), по типу кристаллической структуры.

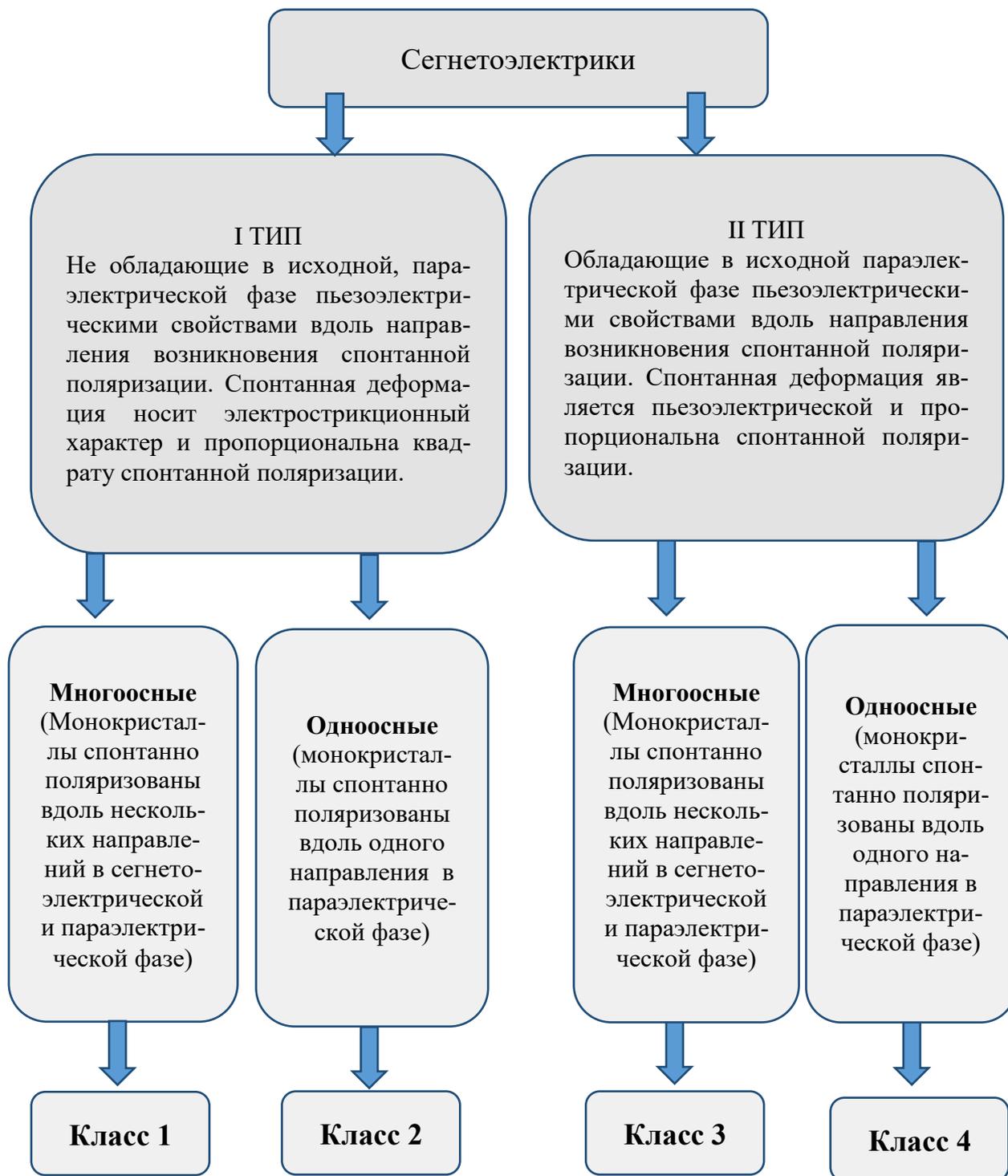


Рисунок 1.3 – Типы сегнетоэлектриков

1.2 Доменная структура сегнетоэлектриков

В поликристаллах и в монокристаллах сегнетоэлектриков при отсутствии внешних полевых воздействий макроскопическая спонтанная поляризация не наблюдается. Этот факт обусловлен тем, что спонтанно поляризованное со-

стояние реализуется в сегнетоэлектриках в виде доменной структуры. Сегнетоэлектрический кристалл состоит из доменов – областей спонтанной поляризации. Спонтанные поляризации всех элементарных ячеек одного домена направлены одинаково, в то же время, поляризации, соответствующие доменам, ориентированы в различных направлениях, поэтому суммарная величина макроскопической поляризации монокристалла остается равной нулю.

Как отмечают многие авторы [5], разбиение кристалла на домены представляет собой энергетически выгодный процесс. Наличие доменной структуры в сегнетоэлектриках обусловлено «энергетическим фактором» – минимизируемая энергия представляется суммой энергии деполяризующего поля и энергии, которой обладают доменные границы. В полидоменном кристалле существенно уменьшается электрическая энергия за счет возникновения «энергетического компромисса» между уменьшением энергии деполяризующего поля из-за разбиения объема образца на все более мелкие домены и увеличением энергии системы в таком процессе при увеличении числа доменных границ. Схематическое изображение доменной структуры со 180° -доменными стенками показано на рисунке 1.4. Минимум функции, определяемой суммой вклада энергии деполяризующих полей и энергии доменных границ, будет соответствовать некоторой равновесной ширине домена.

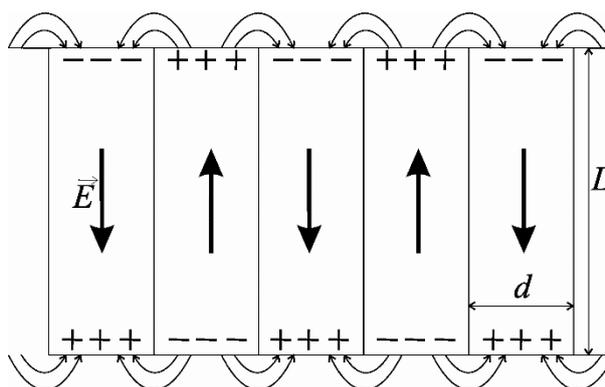


Рисунок 1.4 – Схема разбиения кристалла на домены (L – размер кристалла вдоль полярной оси, d – среднее значение ширины доменов)

Общие закономерности поведения доменной структуры и динамики доменных границ в целом определяют процессы поляризации и переключения

поляризации сегнетоэлектрических материалов, в том числе и явление диэлектрического гистерезиса. В настоящее время известно достаточно большое число результатов экспериментальных и теоретических исследований динамики доменной структуры и процессов переключения поляризации. Экспериментальные методики, как правило, сосредоточены либо на прямом наблюдении кинетики доменных границ с помощью аналитических возможностей микроскопической техники, либо на исследовании изменения электрических характеристик образцов, подверженных внешним воздействиям. При этом процессы перестройки доменной структуры могут определяться как характеристиками самого кристалла (присутствие дефектов, структура и геометрия доменов и пр.), так и условиями экспериментального наблюдения (наличие электродов, характеристики электродов и состояние поверхности образца) [5-7].

Первыми работами, проведенными в данном направлении, можно считать исследования Mitsui и Furuichi, Merz и Жирнова [7]. Mitsui и Furuichi наблюдали наряду с непрерывным и скачкообразный рост доменов в кристаллах сегнетовой соли и KDP. Механизм переключения поляризации, ассоциированный со скачкообразным характером перестройки доменной структуры, назван гистерезисным и представляет собой некий аналог сухого трения. При этом появление зародышей новой фазы вблизи доменных границ осуществляется при условии достижения электрическим полем некоторого порогового значения. При теоретических расчетах толщины и энергии доменных стенок в сегнетоэлектрических материалах кристалл часто рассматривается как континуальный объект. На основе феноменологического подхода были проведены расчеты энергии и толщины доменной стенки для ряда сегнетоэлектрических материалов. Жирновым было установлено, что толщина доменной стенки имеет размер порядка одной постоянной решетки [7]. Полученные в рамках феноменологической теории выводы относительно энергии и толщины доменных стенок в предположении непрерывной среды оказываются затруднительными в применении в случае, когда толщина стенки сопоставима с несколькими постоянными решетки.

1.3 Сегнетоэлектрический гистерезис

Спонтанная поляризация \mathbf{P}_S в кристалле возникает по определенному кристаллографическому направлению параэлектрической фазы. Это направление обычно называют осью спонтанной поляризации или сегнетоэлектрической осью. У одноосных сегнетоэлектриков одна ось спонтанной поляризации, совпадающая с единичным направлением. У многоосных сегнетоэлектриков несколько осей спонтанной поляризации и в параэлектрической фазе они являются кристаллографически эквивалентными. Обычно число возможных направлений спонтанной поляризации \mathbf{P}_S равно удвоенному числу сегнетоэлектрических осей. Но когда спонтанная поляризация возникает вдоль полярного направления, возможных ее направлений столько же, сколько сегнетоэлектрических осей [7].

При приложении к сегнетоэлектрическому кристаллу с симметричной доменной структурой в направлении сегнетоэлектрической оси постоянного электрического поля напряженностью E , в кристалле возникает не нулевая поляризация. С увеличением поля E зависимость $P(E)$ сначала носит линейный характер (при слабых полях), а затем становится нелинейной. Наиболее крутому участку кривой $P(E)$ соответствует интенсивная перестройка доменной структуры. Когда поляризация становится равной спонтанной P_S , ее рост практически прекращается и является результатом процессов ионного и электронного смещения, при этом кристалл становится однодоменным. Значение P_S может быть получено экстраполяцией зависимости $P(E)$ к значению $E = 0$. При обращении поля E в нуль вещество сохраняет остаточную поляризацию P_r . Под действием противоположно направленного поля, равного коэрцитивной силе E_c , поляризация становится равной нулю. Кривая деполяризации, полученная при уменьшении напряженности внешнего электрического поля E , приложенного к сегнетоэлектрику, не будет совпадать с кривой поляризации. Это обусловлено тем, что уменьшение поляризации P будет отставать от уменьшения напряженности E . Кривая, выражающая зависимость поляризации

сегнетоэлектрического кристалла от напряженности внешнего поля $P(E)$, называется диэлектрическим гистерезисом (рисунок 1.5) [7-8].

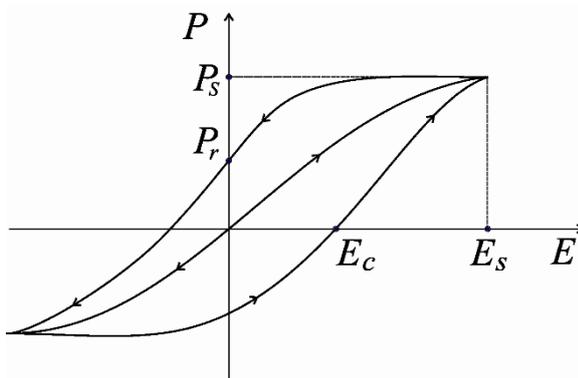


Рисунок 1.5 – Общий вид гистерезисной зависимости поляризации P от напряженности поля E

Интегральную информацию о процессах переключения поляризации на различных частотах дают динамические петли гистерезиса. При некоторых взаимодействиях, а также в зависимости от дефектности и условий роста кристалла симметричность петли гистерезиса может быть нарушена [8].

1.4 Базовые положения термодинамической теории сегнетоэлектриков

Термодинамической теорией, позволяющей количественно описать поведение материала в окрестности фазового перехода первого и второго рода, является теория структурных фазовых переходов Ландау. На основе теории Ландау Гинзбург и Девоншир развили феноменологическую термодинамическую теорию сегнетоэлектричества [3]. Данная теория описывает структурные фазовые переходы, ассоциированные с изменением порядка расположения атомов или с изменением кристаллографической сингонии образца.

Согласно концепциям термодинамической теории состояние равновесной сегнетоэлектрической системы может быть задано фиксированным набором величин: поляризация (P), электрическое поле (E), температура (T), механические деформации (η) и напряжение (σ). Как правило, поляризация и деформация вводятся в рассмотрение как внутренние параметры, электрическое поле и механическое напряжение – как внешние.

Основной тезис термодинамической теории сегнетоэлектриков формулируется в виде – при заданных внешних параметрах свободная энергия сегнетоэлектрика F может быть представлена как функция десяти переменных (шесть компонент тензора деформаций, три компоненты поляризации и одна скалярная величина – температура). Вторым фундаментальным аспектом является априорное требование – величины зависимых переменных соответствуют минимуму свободной энергии F для равновесного состояния системы.

В окрестности температуры Кюри функция F раскладывается в степенной ряд, параметры которого могут быть рассчитаны с использованием экспериментальных данных или на основе первопринципного моделирования. Условия centrosymmetrichnosti неполярной фазы позволяют уменьшить число членов ряда. В частном случае, когда приложенные механические напряжения отсутствуют, индукция направлена вдоль одной из кристаллографических осей, для одноосного сегнетоэлектрика свободную энергию можно разложить по степеням единственной компоненты поляризации [5]:

$$F_P = \frac{1}{2}aP^2 + \frac{1}{4}bP^4 + \frac{1}{6}cP^6 - EP, \quad (1.4)$$

где a , b и c – термодинамические коэффициенты.

Равновесной конфигурации будет соответствовать минимум плотности свободной энергии F_P : $\frac{\partial F_P}{\partial P} = 0$. Выражение (1.4) позволяет определить зависимость электрического поля E от поляризации P :

$$E = aP + bP^3 + cP^5. \quad (1.5)$$

Линейную диэлектрическую восприимчивость выше точки перехода можно определить дифференцируя выражение (1.5) по P и принимая $P = 0$:

$$\chi = \frac{P}{E} = \frac{1}{a}. \quad (1.6)$$

Согласно теории Ландау-Гинзбурга-Девоншира предполагается, что в окрестности температуры Кюри T_N коэффициент a зависит от температуры

$$a = a_0(T - T_0), \quad (1.7)$$

в то время как другие коэффициенты в разложении термодинамического потенциала от температуры не зависят. Температура T_0 , при которой a изменяет знак, не всегда совпадает с температурой Кюри. Для большинства сегнетоэлектриков будет справедлив закон Кюри-Вейсса (для χ) при $T > T_0$:

$$\frac{1}{\chi} = a_0(T - T_0). \quad (1.8)$$

Выражение для плотности свободной энергии, с учетом линейной температурной зависимости коэффициента a имеет вид:

$$F_P = \frac{1}{2}a_0(T - T_0)P^2 + \frac{1}{4}bP^4 + \frac{1}{6}cP^6 - EP, \quad (1.9)$$

где коэффициенты a_0 и c положительны для всех известных сегнетоэлектриков.

Общий вид зависимости свободной энергии от поляризации в параэлектрической ($T \gg T_0$) и сегнетоэлектрической ($T \ll T_0$) фазах показана на рисунке 1.6. Изменение свободной энергии между этими конфигурациями, зависит от знака коэффициента b . При $T = T_0$ если $b > 0$ происходит переход второго рода, а если $b < 0$ фазовый переход первого рода [5].

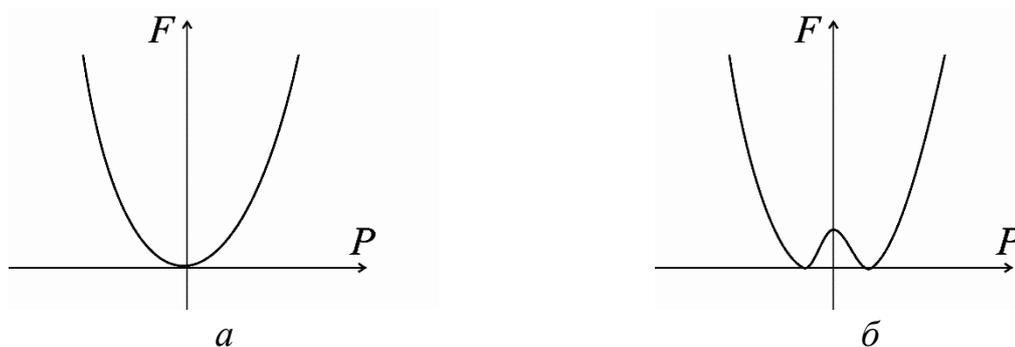


Рисунок 1.6 – Общий вид зависимости свободной энергии от поляризации для параэлектрического (а) и сегнетоэлектрического (б) состояний

Сегнетоэлектрический фазовый переход можно описать, используя представление о «жестких» и «индуцированных» диполях [8]. В случае «жестких диполей» говорят о фазовом переходе типа порядок-беспорядок, а в случае «индуцированных» диполей – о переходе типа смещения. Ниже температуры Кюри все диполи оказываются вполне ориентированными. С ростом температуры увеличивается амплитуда тепловых колебаний решетки, упорядоченность ориентации диполей ухудшается и при температуре фазового перехода исчезает. В сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа смещения при этом исчезают и сами диполи, а в сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок (в кристаллах с молекулярными группами) диполи сохраняются и выше температуры Кюри, однако их ориентация полностью нарушается, так, что макроскопическая поляризация становится равной нулю [8].

Роль термодинамической теории Ландау – Гинзбурга – Девошира в исследовании сегнетоэлектриков трудно переоценить. Она служит теоретическим базисом, позволяющим с точки зрения различных приближений описывать диэлектрические, пьезоэлектрические, электрокалорические и другие свойства сегнетоэлектрических материалов и во многих случаях дает удовлетворительное согласование с результатами экспериментов.

1.5 Сходства и различия между сегнетоэлектриками и ферромагнетиками

В сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа смещения (является фазовым переходом I-го рода) поле изменяет величину индуцированных диполей

p , а не их направление, ориентация по разрешенному направлению обусловлена кооперативным полем скоррелированных соседних диполей. У этих материалов имеется близкая аналогия с магнитными материалами, особенно в случае жестких диполей. В магнетиках таким жестким магнитным диполем является спин электрона [8-9].

В сегнетоэлектриках с фазовым переходом типа порядок-беспорядок (является фазовым переходом II-го рода) момент p обусловлен диполями p_0 , почти независимыми от окружения в кристалле и изменяющими в поле только свою ориентацию. Данный класс сегнетоэлектриков обладает сильной анизотропией и момент p_0 не может вращаться, а имеет только ограниченный набор допустимых ориентаций, например две ориентации ($+z$ и $-z$), или же шесть ($\pm x, \pm y, \pm z$). Допустимые направления в случае диэлектрика и направления легкого намагничивания в магнитных материалах не сопоставимы между собой. В диэлектриках эти процессы обусловлены связью электрических сил и кристаллических связей, в магнетиках – различием длин связей в различных направлениях.

Одно из самых существенных различий: взаимодействие в ферромагнетиках в основном короткодействующее, поскольку взаимодействиями между магнитными диполями можно пренебречь. Сила взаимодействия между двумя магнитными диполями, величиной в один магнетон Бора на расстоянии r равна:

$$F_M = \frac{\mu_0 \mu_B}{4\pi r^3} \approx \frac{\alpha^2}{4\pi} \left(\frac{\alpha_B}{r} \right)^3, \quad (1.10)$$

где $\alpha_B = 0,05$ нм;

$\alpha \approx 1/137$ (используются атомные единицы).

Для электрического диполя $p = e\Delta\alpha_B$, тогда сила дипольного взаимодействия:

$$F_D = \frac{p^2}{8\pi\epsilon_0 r^3} \approx \frac{\Delta^2}{4\pi} \left(\frac{\alpha_B}{r} \right)^3 \quad (1.11)$$

где $\Delta \approx 1$, определяется атомными смещениями и поперечными электрическими зарядами.

Отношение сегнетоэлектрических к магнитным дипольным силам имеет порядок $\frac{\Delta^2}{\alpha^2} \approx (137)^2$, следовательно, в сегнетоэлектриках следует учитывать дальнедействующее взаимодействие, а в магнитных системах им можно пренебречь [5].

В сегнетоэлектриках присутствует экранирование, связанное наличие свободных зарядов, которые уменьшают локальные макроскопические поля. В магнитных системах экранирования нет, т.к. отсутствуют свободные магнитные монополии.

В связи с тем, что магнитную активность проявляют все вещества без исключения, можно утверждать, что магнитные свойства веществ определяются элементарными частицами, входящими в состав каждого атома. Такими одинаковыми для всех веществ частицами являются электроны, протоны и нейтроны. Исследования показали, что магнитные моменты протона и нейтрона почти на три порядка ниже наименьшего магнитного момента электрона, поэтому в первом приближении можно пренебречь магнитным моментом ядра, состоящего из протонов и нейтронов, и полагать, что магнитные свойства атома в целом определяются электронами. Это положение является фундаментальным в электронной теории магнетизма, которая общепринята в учении о магнетизме [1, 2].

В ферромагнетиках аналогично сегнетоэлектрикам с фазовым переходом типа смещения индуцированные диполи являются жесткими. Но жестким магнитным диполем является спин электрона, свободно вращающийся и обладающим собственным магнитным моментом, направленным по направлению магнитного поля в ферромагнитном и противоположно в диамагнитном состоянии. В диамагнитном состоянии магнитная восприимчивость отрицательна. Она обусловлена прецессией электронных орбит во внешнем поле. Диэлектриков с отрицательной восприимчивостью не существует [3].

2 МОДЕЛЬ ИЗИНГА КАК КЛАССИЧЕСКАЯ РЕШЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Изначально модель Изинга была разработана для исследования свойств магнитных материалов вблизи фазовых переходов, но в настоящее время она набирает все большую актуальность в различных предметных областях, в том числе, для изучения характеристик сегнетоэлектрических материалов [9-13].

2.1 Модель Изинга для описания свойств ферромагнетиков

Модель Изинга представляет собой одну из самых распространенных физических моделей фазового перехода. Модель была предложена Ленцем (1920 г.) и исследована его учеником Изингом с целью изучения фазового перехода из парамагнитного состояния в ферромагнитное [10-15]. Модель Изинга упоминается в монографиях и учебных вузовских изданиях, как пример приложения метода Монте-Карло [16] к моделированию физических систем [10-15]. Модель Изинга представлена в ранних работах [17-19] для описания магнитных фазовых переходов. В настоящее время интерес многих авторов также связан с использованием концепций модели Изинга и Гейзенберга для описания фазовых переходов в магнетиках, сегнетоэлектриках и мультиферроиках [20-33].

В настоящее время статистическая теория модели Изинга нашла применение при рассмотрении самых разнообразных магнитных и немагнитных систем (ферромагнетики, антиферромагнетики, бинарные смеси и сплавы, решеточная модель жидкости, адсорбция на поверхности и др.).

В работах [20-21] получены соотношения дуальности между моделью Изинга на квадратной решетке, намотанной на цилиндр с дефектом и свободными граничными условиями на его основаниях, и моделью Изинга с магнитными полями, приложенными к основаниям цилиндра. Также выведены соотношения дуальности для моделей Изинга со свободными, смешанными и фиксированными граничными условиями на основаниях цилиндра.

Модель Изинга используется при моделировании адсорбции в нанострук-

турах. Разрабатываются алгоритмы и программы для расчета времени релаксации и корреляционной длины для одномерной модели адсорбции (одномерного решеточного газа с оборванными концами) в рамках модели Изинга. Получены зависимости корреляционной длины и времени релаксации от температуры и числа частиц [23]. Проводится анализ компьютерного моделирования двумерной и трехмерной модели Изинга с целью создания алгоритма тестирования псевдослучайных последовательностей и хеширования данных [25, 28].

В работе [27] вычислены спектры фрактальных размерностей, а также обобщенные фрактальные размерности множеств для одномерной модели Изинга и исследована зависимость этих характеристик от величины случайного локального поля.

Исследование фазовых переходов в двумерной модели Изинга с учетом взаимодействия спинов в некотором радиусе показало, что с увеличением данного радиуса корреляции возрастает температура фазового перехода [21].

В работе [11] описаны результаты компьютерного моделирования критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга, полученные результаты согласуются с результатами экспериментальных исследований критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков.

Были проведены исследования критических свойств трехмерной полностью фрустрированной модели Изинга на кубической решетке [21]. В результате рассчитаны критические индексы теплоемкости, намагниченности, радиуса корреляции и индекса Фишера. Полученные данные свидетельствуют о принадлежности изучаемой модели к новому классу универсальности.

В настоящее время разрабатываются новые методы численного моделирования спиновых стекол как двумерной модели Изинга [31]. В работе [32] спиновая решетка моделируется пятиугольниками (классическая модель Изинга моделируется четырехугольниками). В работе [23] производится расчет магнитных свойств нанокластерных квазидвумерных магнетиков.

В работе [29] проведены исследования особенностей магнитного взаимодействия для магнитокалорических материалов типа «сплав Гесслера» на осно-

ве результатов первопринципного моделирования. Был произведен расчет обменных взаимодействий для ряда магнитных систем [33].

Кроме того, неожиданным оказалось использование модели Изинга в ряде прикладных задач, не связанных с физикой, таких как решение задачи коммивояжера и распознавании образов [34]. Для решения задачи коммивояжера используется алгоритм, схожий с алгоритмом Метрополиса. В этом алгоритме вместо переворота спинов выступает изменение порядка посещения городов, в роли энергии выступает длина пути.

Приведем краткое изложение концептуальных основ модели Изинга. В своей диссертации 1924 г. Изинг, применяя матричный метод решения, доказал, что в одномерной цепочке спинов, связанных взаимодействием с ближайшими соседями, фазового перехода не существует. Однако в двумерном и трехмерном случаях модель Изинга обнаруживает фазовый переход при температуре Кюри, связанной с появлением спонтанной намагниченности в решеточной системе спинов в отсутствие внешнего магнитного поля.

Первое исследование ферромагнитных свойств двумерной решетки было выполнено Пайерлсом (1936 г.) и затем развито Крамерсом и Ванье [13, 15]. Матричный метод был развит Крамерсом и Ванье для плоской квадратной решетки, с учетом взаимодействия с ближайшими соседями. Также они определили критическую точку для квадратной решетки. Онсагер в 1944 г. сделал следующий шаг в изучении статистической механики фазовых переходов, получив точное решение для квадратной решетки Изинга в нулевом магнитном поле. Он нашел решение для задачи Изинга с разными энергиями взаимодействия в горизонтальном и вертикальном направлениях. Полученная им модель позволяла не только объяснить переход, но и определить температуру фазового перехода.

Модель Изинга рассматривалась многими авторами, которые предлагали модифицированные методы точного решения задачи описания фазовых переходов. В 1952 г. Ч. Янг объяснил явление спонтанной намагниченности [17]. В 1949 г. Онсагер и Кауфман рассчитали спиновые корреляционные функции. В

1950-1955 гг. Ванье, Темперли, Хаутапель, Сиози и др. рассмотрели треугольную, шести угольную и более сложные типы двумерных решеток. В работе [20] были исследованы пределы статистической суммы и корреляционной функции для одномерной и двумерной моделей Изинга со свободными граничными условиями.

Важная роль статистической теории модели Изинга обусловлена тем, что она применяется при рассмотрении множества различных магнитных и немагнитных систем. Сюда входят ферромагнетики, антиферромагнетики, бинарные смеси и сплавы, решеточная модель жидкости, «плавление» ДНК, адсорбция на поверхности и т.д. Именно поэтому статистика модели Изинга занимает важное место в статистической механике.

Модель Изинга используется для моделирования поведения канонических ансамблей и представляет собой решеточную модель, в которой рассматриваются локальные взаимодействия – взаимодействия между узлами решетки. Под каноническим ансамблем традиционно понимают физическую систему, не изолированную от окружающей среды. В самом простейшем случае предполагается, что система находится при постоянной температуре. В магнитных системах локальные взаимодействия обусловлены спинами, расположенными в узлах решетки [18-25].

В соответствии с современными представлениями механизм ферромагнетизма имеет квантово-механическую природу, поэтому для построения адекватной модели изучаемого явления необходимо использовать математический аппарат квантовой механики. Однако оказывается, что даже изучение классических двумерных и трехмерных моделей Изинга дает возможность выявить общие закономерности поведения магнитных систем вблизи фазового перехода. В то же время важно понимать, что классические модели Изинга, которым приписаны известные ограничения, не могут дать полного адекватного описания ферромагнетизма, что особенно заметно проявляется при температурах, близких к абсолютному нулю.

Рассмотрим d -мерную решетку, содержащую $N=L^d$ узлов, где L – характерный размер решетки. С каждым узлом решетки i связан спин s_i , который может принимать значение $s_i = +1$, если спин сонаправлен с осью OZ и значение $s_i = -1$, если спин направлен противоположно. Любая конфигурация задается набором переменных s_1, s_2, \dots, s_N для всех узлов решетки.

Так как макроскопические свойства системы определяются свойствами ее достижимых микросостояний, необходимо вычислить зависимость энергии от конфигурации спинов. Энергия системы при наличии магнитного поля будет определяться по формуле:

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle}^N J_{i,j} s_i s_j - \mu_B \sum_{i=1}^N B_i \cdot s_i, \text{ эВ}, \quad (2.1)$$

где $J_{i,j}$ – потенциал взаимодействия спинов, эВ (или Дж, $1 \text{ эВ} = 1,602 \cdot 10^{-19}$ Дж);

B_i – магнитное поле в месте расположения спина, Тл;

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ – магнетон Бора, Дж/Тл.

Здесь первая сумма берется по всем ближайшим соседним парам спинов, а вторая по всем спинам решетки. Потенциал взаимодействия спинов J характеризует силу взаимодействия соседних спинов (рисунок 2.1).

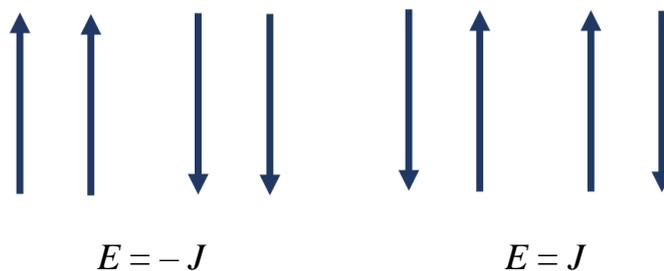


Рисунок 2.1 – Энергия взаимодействия между ближайшими соседними спинами в отсутствие магнитного поля

Если $J > 0$, то состояние с одинаковой ориентацией соседних спинов энер-

гетически выгоднее состояния с противоположно направленными спинами. Таким образом, для $J > 0$ состояние с наименьшей полной энергией является ферромагнитным. Если $J < 0$, то энергетически более выгодным оказывается состояние, в котором спины противоположно направлены. Соответственно, среднее число спинов сориентированных в одном направлении, равно нулю, то есть спины упорядочены через один (антиферромагнитное состояние). При наложении внешнего магнитного поля спины приобретают дополнительную внутреннюю энергию, равную h и минус h , где $h = \mu_B B$.

В основу модели Изинга положено два упрощающих предположения:

- 1) кинетическая энергия узлов решетки принимается равной нулю;
- 2) в выражении (2.1), описывающем энергию взаимодействия, учитывается вклад от ближайших соседей, а сами спины могут находиться таким образом в двух дискретных состояниях [13].

Так как в дальнейшем определению будут подлежать термодинамические характеристики данной системы, при нормировке учитываем, что энергии связей J и h определяется в единицах $k_T T$. Тогда нагревание системы будет приводить к ослаблению этих связей.

В классической трехмерной XY-модели описывается критическое поведение множества различных физических систем. Эта модель описывается гамильтонианом вида:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.2)$$

где J – константа обменного взаимодействия;

\vec{S}_i – плоский единичный вектор в узле i , а суммирование ведется по всем ближайшим соседним узлам решетки.

При описании термодинамических фазовых переходов спинам атомов ставятся в соответствие классические векторы, а не операторы спинов, задаваемые в теории магнетизма матрицами Паули.

Эта модель является частным случаем общих решеточных моделей с двухкомпонентным параметром порядка и является одной из простейших моделей с непрерывной симметрией. При $J > 0$ эта модель описывает фазовый переход второго рода в ферромагнитное состояние при температуре ниже температуры Кюри.

Модель Изинга является базовой математической моделью фазовых переходов. Однако в литературе известны и другие модели фазовых переходов, представляющие модификации классической модели Изинга. Такой моделью является модель Гейзенберга, в которой используется гамильтониан вида [11]:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (J^x S_i^x S_j^x + J^y S_i^y S_j^y + J^z S_i^z S_j^z). \quad (2.3)$$

Для минимизации погрешности связанной с невозможностью моделировать систему, состоящую из огромного числа частиц, осуществляется аппроксимация граничных условий в следующих вариантах:

1) периодические граничные условия (наиболее точные) восстанавливают трансляционную инвариантность конечных систем путем наложения условий на любую наблюдаемую величину A :

$$A(X_i) = A(X_i - L_i), \quad (2.4)$$

где $(X_i) = (X, Y, Z)$;

$(L_i) = (L_1, L_2, L_3)$ – линейные размеры системы;

2) свободная граница;

3) нестандартные граничные условия.

С использованием средних по ансамблю значений средней энергии $\langle E \rangle$ и средней намагниченности $\langle M \rangle$:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^P E_p \exp\left(-\frac{E_p}{k_T \cdot T}\right), \text{ Дж}; \quad (2.5)$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{p=1}^P M_p \exp\left(-\frac{E_p}{k_T \cdot T}\right), \text{ А/м}, \quad (2.6)$$

где $Z = \sum_{p=1}^P \exp\left(-\frac{E_p}{k_T \cdot T}\right)$ – сумма по всем P микросостояниям системы;

T – температура системы, К;

$k_T = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Из соотношений термодинамики макроскопические характеристики системы – теплоемкость C и магнитная восприимчивость χ равны:

$$c = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}, \quad \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N E_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right), \quad (2.7)$$

где $Z = \sum_{s=1}^N \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right)$,

$$\begin{aligned} c &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N E_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) = \\ &= -\frac{1}{Z^2} \sum_{s=1}^N E_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) \left(\frac{E_s}{k_T \cdot T^2}\right) \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) + \\ &+ \frac{1}{Z \cdot k_T \cdot T^2} \sum_{s=1}^N E_s \cdot E_s \cdot \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right), \end{aligned} \quad (2.8)$$

$$c = \frac{1}{k_T \cdot T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right). \quad (2.9)$$

Выполним проверку размерности: $\frac{\text{К}}{\text{Дж} \cdot \text{К}^2} \text{Дж}^2 = \text{Дж}/\text{К}$.

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\partial \langle m \rangle}{\Delta V \cdot \partial H}, \quad (2.10)$$

$$E_s = E_{s,0} - \sum_{i=1}^N \mu_B B_i s_i = E_{s,0} - \sum_{i=1}^N \mu_0 H_i \cdot m_i, \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial E_s}{\partial H} = -\mu_0 m_s, \quad (2.12)$$

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N m_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right), \quad (2.13)$$

где $Z = \sum_{s=1}^N \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right)$,

$$\frac{\partial Z}{\partial H} = + \frac{1}{k_T \cdot T} \sum_{s=1}^N \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) \cdot \mu_0 m_s, \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial H} &= - \frac{1}{Z^2} \sum_{s=1}^N m_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) \cdot \frac{1}{k_T \cdot T} \sum_{s=1}^N \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) \cdot \mu_0 m_s + \\ &+ \frac{1}{k_T \cdot T \cdot Z} \sum_{s=1}^N m_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) \mu_0 m_s = \frac{\mu_0}{k_T \cdot T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} = \frac{\partial \langle m \rangle}{\Delta V \cdot \partial H} = \frac{\mu_0}{\Delta V \cdot k_T \cdot T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2). \quad (2.16)$$

Выполним проверку размерности: $\left[\frac{\text{Н}}{\text{А}^2 \cdot \text{м}^3} \frac{\text{К}}{\text{Дж} \cdot \text{К}} (\text{А}^2 \cdot \text{м}^4) \right] = \left[\frac{\text{Н} \cdot \text{м}}{\text{Дж}} \right] = [1]$.

В простейшем случае вычисления можно проводить не по схеме Гиббса (определение средних значений $\langle E \rangle$ и $\langle M \rangle$ по ансамблю с использованием распределения Больцмана), а с использованием значений генерального математического ожидания:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{s=1}^N E_s}{N}, \quad \langle M \rangle = \frac{\sum_{s=1}^N M_s}{N}. \quad (2.17)$$

Суммарная намагниченность системы определяется как сумма:

$$M = \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.18)$$

За параметр порядка системы принимают средний модуль намагниченности: $\langle M \rangle = \left\langle \sqrt{M_x^2 + M_y^2} \right\rangle$.

Одномерная модель Изинга может быть реализована на основе аналитического решения [14, 35]. Так, при $N \rightarrow \infty$, средняя намагниченность системы равна:

$$\langle M \rangle = \mu \frac{\sinh\left(\frac{\mu B}{k_T T}\right)}{\sqrt{\left[\sinh\left(\frac{\mu B}{k_T T}\right)\right]^2 + \exp\left(\frac{4J}{k_T T}\right)}}. \quad (2.19)$$

Двухмерная модель Изинга также может быть реализована на основе аналитического решения. Намагниченность системы в данном случае равна:

$$\langle M \rangle = \left(1 - \frac{1}{\left[\sinh \left(\frac{2J}{k_T T} \right) \right]^4} \right)^{\frac{1}{8}}. \quad (2.20)$$

Намагниченность исчезает при критической температуре T_c :

$$\frac{J}{k_T T_c} = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} - 1) \approx \frac{1}{2,27}. \quad (2.21)$$

2.2 Метод Монте-Карло и алгоритм Метрополиса

Важным классом реализуемых на ЭВМ моделей реальных систем, которым, как правило, присуща неопределенность являются стохастические (или недетерминированные) модели, в которых реализация рассматриваемого процесса зависит от случайных параметров. Выходные значения для таких моделей при заданном наборе входных данных можно предсказать только в вероятностном смысле.

Причины появления неопределенности разнообразны:

- погрешности и помехи измерений входов и выходов системы (естественные погрешности);
- неточность самой модели системы, что заставляет искусственно вводить в модель погрешность;
- неполнота информации о параметрах системы и т. д.

Среди различных способов уточнения и формализации неопределенности наибольшее распространение получил стохастический (вероятностный) подход, при котором неопределенные величины считаются случайными. Развитый понятийный и вычислительный аппарат теории вероятностей и математической статистики позволяет дать конкретные рекомендации по выбору структуры системы и оценке ее параметров.

Основу моделирования в таком случае составляет использование равномерно распределенных случайных чисел. Равномерно распределенные случайные числа заключены в интервале от 0 до 1 и выбираются случайным образом в соответствии с функцией распределения $F(x) = \Pr\{X < x\} = x$, $0 < x < 1$. Здесь $\Pr\{X < x\}$ – вероятность того, что случайная величина X примет значение меньше x .

При равномерном распределении одинаково правдоподобно появление любых значений случайной величины в интервале $(0, 1)$. Основным методом получения случайных чисел является их генерация по модулю. Таким образом, мы имеем дело с «псевдослучайными числами». Пусть m, a, c, x_0 – целые числа, такие, что $m > x_0, a, c, x_0 > 0$. Псевдослучайное число x_i , из последовательности $\{x_i\}$ получается с помощью рекуррентного соотношения: $x_i = ax_{i-1} + c \pmod{m}$ [14].

Стохастические характеристики генерируемых чисел решающим образом зависят от выбора m, a, c . Неудачный выбор этих параметров приводит к ошибочным результатам.

Термином «метод Монте-Карло» обозначается большая группа численных методов, в которых используются генераторы случайных чисел и статистические оценки случайных чисел [14]. Метод Монте-Карло используется для решения различных математических задач: интерполяции, вычисления интегралов, решения дифференциальных и интегральных уравнений, поиска экстремума. Также данный метод нашел широкое применение для решения практически важных задач статистической физики.

Метод Монте-Карло используют когда аналитические методы в применении оказываются затруднительными, либо вообще аналитического решения задачи не существует.

Первая работа по использованию метода Монте-Карло была опубликована Холлом в 1873 г., именно при организации стохастического процесса экспериментального определения числа π путём бросания иглы на лист линованной бумаги. Яркий пример использования методов Монте-Карло – использование

идеи Дж. фон Неймана при моделировании траекторий нейтронов в лаборатории Лос Аламоса в сороковых годах прошлого столетия. Хотя методы Монте-Карло связаны с большим количеством вычислений, отсутствие электронной вычислительной техники ни в том ни в другом случае не смутило исследователей при применении этих методов, поскольку в том и другом случае речь шла о моделировании случайных процессов. Своё название они получили по имени столицы княжества Монако, знаменитой своими игорными домами, основу которых составляет рулетка – совершенный инструмент для получения случайных чисел. А первая работа, где этот вопрос излагался систематически, опубликована в 1949 г. Метрополисом и Уламом [13], где метод Монте-Карло применялся для решения линейных интегральных уравнений, в котором явно угадывалась задача о прохождении нейтронов через вещество. В нашей стране работы по методам Монте-Карло стали активно публиковаться после Международной Женевской конференции по применению атомной энергии в мирных целях.

Теоретическая основа метода была известна давно. Более того, некоторые задачи статистики рассчитывались иногда с помощью случайных выборок, т.е. фактически методом Монте-Карло. Однако до появления ЭВМ этот метод не мог найти достаточно широкого применения, поскольку моделировать случайные величины вручную – очень трудоемкая работа. Таким образом, возникновение метода Монте-Карло как весьма универсального численного метода стало возможным только благодаря появлению ЭВМ.

Суть данного метода состоит в том, что результат испытания зависит от значения некоторой случайной величины, распределенной по заданному закону. Поэтому результат каждого отдельного испытания также носит случайный характер. Проведя серию испытаний, получают множество частных значений наблюдаемой характеристики (выборку). Полученные статистические данные обрабатываются и представляются в виде численных оценок интересующих исследователя величин (характеристик системы).

Принципиальная математическая основа использования методов Монте-Карло – усиленный закон больших чисел в форме А.Н. Колмогорова [10]. Пусть

требуется найти значение a некоторой изучаемой величины. Для этого выбирают такую случайную величину X , математическое ожидание которой равно a : $M(X) = a$. Производят n испытаний, в результате которых получают n возможных значений X и вычисляют их среднее арифметическое: $\bar{X} = \frac{\sum X_i}{n}$ и принимают его в качестве оценки искомого числа a : $\bar{X} \approx a$.

При применении метода Монте-Карло возможно появление ряда трудностей. Как правило, требуется определить достаточно достоверную оценку искомой величины, т.е. оценка с малой погрешностью. Значимую роль играет проверка адекватности построенной вероятностной модели.

Ошибка метода Монте-Карло пропорциональна $\sqrt{\frac{D}{N}}$, где D – некоторая постоянная, N – число случайных реализаций. Таким образом, чтобы уменьшить ошибку в 10 раз, необходимо увеличить число испытаний в 100 раз.

Отдельная реализация метода Монте-Карло разыгрывается с помощью специальной процедуры – «бросание жребия». «Единичным жребием» называют любой опыт со случайным исходом.

Любая реализация случайного явления методом Монте-Карло строится из цепочки единичных жребиев, сочетающихся с обычными расчетами. Ими учитывается влияние исхода жребия на дальнейший ход событий. Стандартным механизмом организации единичного жребия является выброс случайного числа, все значения которого от 0 до 1 обладают одинаковой плотностью вероятности.

Поскольку генерация случайных чисел осуществляется по формуле вида $\gamma_{k+1} = F(\gamma_k)$, а в коде программы можно записать лишь конечное число различных чисел, то начиная с некоторого номера члены последовательности начнут повторяться. Для численного моделирования часто требуется большое количество случайных чисел, поэтому период последовательности генерируемых случайных чисел, после которого последовательность начинает повторяться, дол-

жен быть достаточно большим. Он должен быть существенно больше требуемого для моделирования количества случайных чисел, иначе получаемые результаты будут искажены.

Программные оболочки, как правило, содержат генератор случайных чисел. Однако большинство статистических тестов показывает коррелированность между получаемыми случайными числами. Таким образом, существенную роль играет качество используемых генераторов случайных чисел. Написание корректных генераторов – сложная задача, успешно решаемая в рамках разных научных и инженерных математических библиотек, например, в одной из лучших из них – Intel® Math Kernel Library (Intel® MKL).

Если система состоит из N частиц, находящихся в объёме V при постоянной температуре T алгоритм Метрополиса для нормированных величин включает следующие основные шаги:

- 1) сформировать начальную конфигурацию системы;
- 2) произвести пробное случайное изменение конфигурации;
- 3) вычислить пробное изменение энергии системы ΔH ;
- 4) если $\Delta H \leq 0$, то перейти к пункту 8;
- 5) если $\Delta H \geq 0$, то вычислить «вероятность перехода» $W = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_T T}\right)$;
- 6) сгенерировать случайное число r в интервале $[0,1]$;
- 7) если $r \leq W$, принять новую конфигурацию, иначе сохранить предыдущую конфигурацию;
- 8) определить значения требуемых физических величин;
- 9) повторить пункты 2–8 для получения множества конфигураций;
- 10) вычислить средние по статистически независимым конфигурациям.

2.3 Модель Изинга в приложении к исследованию свойств сегнетоэлектриков

В современной научной литературе известен цикл работ [36-40], посвященных применению стохастической модели Изинга для исследования харак-

теристик сегнетоэлектрических систем. Центральной гипотезой идеи применения модели Изинга для описания свойств сегнетоэлектриков является «магнитная аналогия» этих материалов. «В проекции» на такие объекты, как сегнетоэлектрики, модель предполагает также вычисление и минимизацию энергии на основе модельного Гамильтониана, только роль спинов играют так называемые «псевдоспины» – дипольные моменты. Соответственно, направления дипольного момента в классической двумерной решеточной модели Изинга соответствует двум состояниям: вверх и вниз. Таким образом, классическая двумерная модель Изинга может быть применена только для одноосных сегнетоэлектриков (тонких пленок и малых частиц в составе композитов). Ранее, в разделе 1, было также отмечено, что наиболее подходящей модель Изинга будет для сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа порядок – беспорядок [7-8].

Рассмотрим d -мерную кристаллическую решетку, содержащую $N=L^d$ узлов, где L – характерный размер решетки. Каждому узлу решетки поставлен в соответствие дипольный момент \mathbf{p}_i с направлением, которое определяет величина s_i – «псевдоспин». Направление дипольного момента s_i может принимать значение $s_i=+1$, если он сонаправлен с осью OZ и значение $s_i=-1$ – если направлен противоположно. Любая конфигурация задается набором переменных \mathbf{p}_i и s_i для всех узлов решетки. Состояние системы в отсутствие внешнего поля определяется эффективным гамильтонианом вида

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} s_i s_j - \sum_{i=1}^N E_i \cdot |p_i| \cdot s_i - \sum_{i=1}^N E_0 \cdot |p_0| s_i, \quad (2.22)$$

где H – общая энергия системы, Дж;

s_i – направление дипольного момента \mathbf{p}_i ;

$J_{i,j}$ – потенциал междипольного взаимодействия (аналог потенциала взаимодействия спинов);

E – напряженность внешнего электрического поля в месте расположения диполя (абсолютное значение), В/м;

E_0 – напряженность некоторого изначального электрического поля диполей (чаще всего принимается равной 0), В/м;

$|p_i|$ – абсолютная величина дипольного момента ячейки, Кл·м (при условии, что полярная ось совпадает с кристаллографической осью, иначе учет направления потребует задания $|p_i| \cos \alpha$).

Каждому узлу решетки поставлен s_i («псевдоспин»), соответствующий направлению дипольного момента p : $s_i = \begin{cases} +1, \text{ если } \mathbf{p} \uparrow \uparrow OZ \\ -1, \text{ если } \mathbf{p} \uparrow \downarrow OZ \end{cases}$. Поляризация вещества P , равна суммарному электрическому дипольному моменту атомов и молекул \mathbf{p}_i в малой единице объема ΔV : $P = \frac{\sum \mathbf{p}_i}{\Delta V}$. Для анизотропных диэлектриков, поляризация определяется выражением $P_i = \sum_j \chi_{ij} E_j$. В простейшем случае вычисления можно проводить не по схеме Гиббса (определение средних значений $\langle P \rangle$ по ансамблю с использованием распределения Больцмана), а с использованием значений генерального математического ожидания:

$$\langle P \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N P_i}{N}. \quad (2.23)$$

За параметр порядка системы принимают средний модуль поляризации:

$$\langle P \rangle = \sqrt{P_x^2 + P_y^2}. \quad (2.24)$$

где χ_{ij} – симметричный тензор 2-го ранга диэлектрической восприимчивости.

У изотропных диэлектриков поляризация связана с напряженностью внешнего электрического поля следующим образом:

$$P = \chi \varepsilon_0 E, \quad (2.24)$$

где ε_0 – диэлектрическая проницаемость при абсолютном нуле ($8,854 \cdot 10^{-12}$ Кл/(В·м));

E – напряженность внешнего электрического поля, В/м,

χ – диэлектрическая восприимчивость;

ε – диэлектрическая проницаемость $\varepsilon = \frac{E_0}{E_0 \pm E'} = 1 + \chi$, где E' – поле, создаваемое диполями.

даваемое диполями.

Величиной, которую характеризуют сторонние заряды диэлектрика, является электрическое смещение [1], равное: $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}$. Средняя энергия $\langle E \rangle$ и средняя поляризация $\langle P \rangle$ (Кл/м²) по всем n микросостояниям с использованием средних по ансамблю значений равна:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^N E_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T T}\right), \quad \langle P \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{n=1}^N P_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T T}\right), \quad (2.25)$$

где T – температура системы, К;

$$Z = \sum_{n=1}^N \exp\left(-\frac{E_n}{k_T T}\right);$$

$k_T = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Из соотношений термодинамики теплоемкость C и диэлектрическая восприимчивость χ равны:

$$\begin{aligned} c &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{Z} \sum_{s=1}^N E_s \exp\left(-\frac{E_s}{k_T \cdot T}\right) =, \\ &= -\frac{1}{Z^2} \sum_{n=1}^N E_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right) \left(\frac{E_n}{k_T \cdot T^2}\right) \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right) + \end{aligned}$$

$$+\frac{1}{Z \cdot k_T \cdot T^2} \sum_{n=1}^N E_n \cdot E_n \cdot \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right), \quad (2.26)$$

$$c = \frac{1}{k_T \cdot T^2} \left(\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2 \right). \quad (2.27)$$

Выполним проверку размерности: $\frac{\text{К}}{\text{Дж} \cdot \text{К}^2} \text{Дж}^2 = \text{Дж}/\text{К}$.

$$\chi = \frac{\partial \langle P \rangle}{\varepsilon_0 \partial E} = \frac{\partial \langle p \rangle}{\varepsilon_0 \Delta V \cdot \partial E} = \frac{\partial}{\varepsilon_0 \Delta V \cdot \partial E} \left[\frac{1}{Z} \sum_{n=1}^N p_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T T}\right) \right], \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \langle E_n \rangle}{\partial E} = -p_n, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial Z}{\partial E} = \frac{\partial Z}{\partial E_n} \frac{\partial \langle E_n \rangle}{\partial E} = -\frac{1}{k_T T} \sum_{n=1}^N \exp\left(-\frac{E_n}{k_T T}\right), \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle p \rangle}{\varepsilon_0 \Delta V \partial E} &= \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial E} + \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial E_n} \cdot \frac{\partial \langle E_n \rangle}{\partial E} = \\ &= \frac{1}{Z^2} \sum_{n=1}^N p_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right) \cdot \frac{1}{k_T \cdot T} \sum_{n=1}^N \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right) \cdot p_n + \\ &+ \frac{1}{k_T \cdot T \cdot Z} \sum_{n=1}^N p_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_T \cdot T}\right) p_n = \frac{1}{k_T \cdot T} \left(\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \right). \end{aligned} \quad (2.31)$$

тогда: $\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 \Delta V \cdot k_T \cdot T} \left(\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \right).$ (2.32)

Выполним проверку размерности: $\left[\frac{\text{В} \cdot \text{м}}{\text{Кл} \cdot \text{м}^3} \cdot \frac{1}{\frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot \text{К}} (\text{Кл}^2 \cdot \text{м}^2) \right] = [1].$

2.4 Применение решеточных моделей для изучения свойств сегнетоэлектриков: обзор современных исследований

2.4.1 Примеры применения теории эффективного поля для расчета характеристик сегнетоэлектриков в модели Изинга

Теория среднего (или самосогласованного, или эффективного) поля представляет собой подход к изучению поведения больших и сложных стохастических систем посредством исследования простых моделей.

Задача многих взаимодействующих частиц очень сложна и не имеет точного решения. Поэтому используются приближённые методы расчёта. Один из подходов состоит в рассмотрении многочисленных малых компонент, которые взаимодействуют между собой. Влияние других индивидуальных компонент квантово-механической системы на заданный объект аппроксимируется некоторым усреднённым эффектом – самосогласованным полем. Различные варианты введения эффективного поля отличаются способом усреднения взаимодействия. Теория среднего поля широко применяется для приближённого описания состояний и расчёта многоэлектронных атомов, молекул, тяжёлых ядер, электронов в металле, системы спинов в ферромагнетике и т.д. Свое применение теория эффективного поля нашла и для описания характеристик сегнетоэлектриков в концепции модели Изинга. Остановимся подробнее на некоторых из многочисленных исследований.

В цикле работ Gonzalo и Wang [36-37] была развита идея использования теории эффективного поля в приложении к описанию фазовых переходов I рода. В частности, в работах Wang и Teng [37-38] для модели Изинга в, так называемом поперечном поле, в приближении самосогласованного поля используется следующее представление энергии:

$$H = -\Omega \sum_i s_i^x - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^{(2)} s_i^z s_j^z - \sum_{\langle ijkl \rangle} J_{ijkl}^{(4)} s_i^z s_j^z s_k^z s_l^z, \quad (2.33)$$

где Ω – поперечное поле;

s^x, s^z – x - и z -компоненты операторов «псевдоспинов»;
 $J^{(2)}, J^{(4)}$ – «двух-спинные» и «четырёх-спинные» потенциалы взаимодействия.

Используя аппроксимацию в рамках теории эффективного поля, авторы получили решения для модельного Гамильтониана, выражение для приближения поляризации и температуры фазового перехода.

В рамках подобного подхода представлены и результаты работы Diouf и соавторов [39]. Дополнительно авторами использован аппарат вероятностного распределения для оценки корреляционной функции в приложении к наноктаэдрическим системам в рамках модели Изинга. На основе модельных расчетов получены температурные зависимости поляризации, восприимчивости, а также гистерезисная зависимость поляризации от приложенного поля с учетом вариации потенциала взаимодействия.

Несколько теоретических концепций описано в обзоре автора Panigrahi и соавторов [40]. Одно из полезных представлений гамильтониана дает информацию о том, как учитывать направление дипольного момента в скалярном произведении с полем:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i^z s_j^z + E_0 \frac{\sum s_i^z \bar{p} p_i \cos \alpha}{\bar{p}}, \quad (2.34)$$

где α – угол между i -м дипольным моментом и внешним полем E ;

\bar{p} – максимальное значение проекции дипольного момента на главную ось.

Последователями модели (2.33) можно считать автора Rong работы [41]. Используя подход самосогласованного поля в концепции модели Изинга с поперечным полем он исследовал характеристики сегнетоэлектрических тонких пленок. Им установлены диаграммы состояния физической системы в зависи-

мости от изменения температуры в зоне температуры Кюри. Проведено сравнение модельного расчета с экспериментами данными для кристалла ТГС. Аналогичный подход описан и в работе Chen [42].

Приверженцем теории эффективного поля является и автор работы [43] – Sa Barreto. Особенностью его исследования является различное представление энергии (и модельного гамильтониана, соответственно) для сегнетоэлектриков типа смещения и типа порядок-беспорядок. Он рассмотрел общее представление энергии для двухатомного кристалла (два вида атомов – A и B) в форме (без учета внешнего поля):

$$H = \sum_{\mathbf{R}} \left(\frac{1}{2} a u(\mathbf{R})^2 + \frac{1}{4} b (\mathbf{R})^4 \right) + \frac{1}{2} c \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \left(u(\mathbf{R})^2 - u(\mathbf{R}')^2 \right), \quad (2.35)$$

где $u(\mathbf{R})$ – смещение вдоль главной z -оси атомов типа A в ячейке с центром, заданным вектором \mathbf{R} ;

$a < 0$, $b > 0$ и c – коэффициенты смещения.

Первое слагаемое описывает взаимодействие между парами атомов вида A и B , второе – между атомами вида A .

Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения ($|a| \ll c$) при $T > T_c$ смещение определяется соотношением:

$U = \frac{1}{2} (a + 6c) u(\mathbf{R}_0)^2 + \frac{1}{4} b u(\mathbf{R}_0)^4$. Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом

типа «порядок-беспорядок» ($|a| \gg c$) автор вводит представление для гамиль-

тониана: $H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} J s(\mathbf{R}) s(\mathbf{R}')$.

Wang [44] в концепции предложенной модели Изинга (в поперечном поле) исследовал размерные эффекты на основе учета дальнедействующих связей. Он ввел соотношение, аппроксимирующее потенциал взаимодействия в зависимости от расстояния:

$$J_{ij} = \frac{J}{r_{ij}^\sigma}, \quad (2.36)$$

где σ – мера диапазона взаимодействия, предельные случаи: $\sigma=\infty$ соответствует модели с учетом дальнодействующих связей, $\sigma=0$ соответствует модели ближайших взаимодействий.

Модель Изинга с оценками на основе теории самосогласованного поля представлена также в работах отечественных авторов Пирозерского и Чарной [45], в которой предложена модель (в концепции модели Изинга) для описания сегнетоэлектрического фазового перехода в системе взаимодействующих малых частиц. Потенциальную энергию ансамбля частиц авторы ввели в виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i, \mathbf{R}, j, \mathbf{R}' \\ (i, \mathbf{R}) \neq (j, \mathbf{R}')}} J_{ij\mathbf{R}-\mathbf{R}'} S_{i\mathbf{R}} S_{j\mathbf{R}'}, \quad (2.37)$$

где каждая частица состоит из n ячеек, с каждой из которых связан псевдоспин $p_{i\mathbf{R}}$, i – номер ячейки, \mathbf{R} – радиус-вектор узла, в котором находится частица.

Для формализации дальнодействующих электрических взаимодействий в след за Wang [44], введены соотношения для обменных интегралов в виде степенной зависимости от расстояний между ячейками. Теоретический анализ проведен в приближении самосогласованного поля, на основании которого выведено соотношение для температуры фазового перехода. Рассматривались тетрагональные решётки и частицы, состоящие из 27 ячеек.

Установлено, что на смещение температуры Кюри относительно точки перехода в объемной материале оказывают влияние размерные эффекты. Этот факт авторы объясняют малостью частиц и взаимодействием между частицами. Особенную роль данное исследование играет в интерпретации сегнетоэлектрических свойств нанокompозитных материалов.

В работе Голицыной [46] с использованием концепции двумерной модели Изинга построены корреляционной функции доменной структуры и описана ее релаксационная кинетика при фиксированной температуре для одноосных сегнетоэлектриков.

2.4.2 Использование метода Монте-Карло для моделирования микроскопического состояния сегнетоэлектриков

В открытой печати известно не так много работ, посвященных использованию стохастических моделей Изинга и Гейзенберга для исследования свойств сегнетоэлектриков. Дадим краткую характеристику известных результатов.

Наиболее обширные и последовательные обзоры представлены в работах Wang и соавторов [47-48]. Авторами проведены реализации двумерной и трехмерной моделей Изинга на основе метода Монте-Карло и алгоритма Метрополиса. Моделирование сначала проводилось для достаточно небольшой размерности решетки $L=20$ и $L=30$ и размерность увеличивалась до 150. Учитывались только ближние взаимодействия (четыре «соседа» – сверху, снизу, слева, справа). Рассмотрен модельный Гамильтониан:

$$H = -\Omega \sum_i s_i - \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i^z s_j^z - \frac{1}{4} \sum_{\langle ijkl \rangle} J'_{ijkl} s_i^z s_j^z s_k^z s_l^z - 2\mu \sum_i E_0 s_i^z. \quad (2.38)$$

Значение потенциала взаимодействия J было одинаковым (рассматривалась кубическая решетка) и варьировалось в пределах от 0 до 1. Проведены численные оценки характеристик вблизи температуры фазового перехода. Установлено, что для фазовых переходов I рода критическое значение для величины «деформации потенциала» J'/J больше чем, это же значение, установленное на основе теории среднего поля. Установлено критическое значение параметра решетки $L=40$, при котором $J'/J = 1$ и значение температуры фазового перехода $T_C = 8.148 \cdot J$.

Применение модифицированной модели Гейзенберга для описания поведения поляризации при переходе через точку Кюри для кристаллов титаната бария представлено в работе Srinoi, Laosiritaworn [49]. Авторы рассмотрели модель для случая трех пространственных переменных в отсутствие внешнего поля. Для фазового перехода BaTiO₃ из кубической параэлектрической фазы в тетрагональную полярную ($T_c^{TC}=120$ °C) и из тетрагональной полярной в орторомбическую полярную ($T_c^{RT}=5$ °C) рассмотрен модельный Гамильтониан:

$$H = H_{ex} + H_R + H_T, \quad (2.39)$$

где $H_{ex} = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j$ – энергия обменного взаимодействия;

$$H_R = \sum_{\langle i,j \rangle}^N \alpha_R (T - T_c^{RT}) (\mathbf{s}_i \mathbf{n}_R)^2, \quad H_T = \sum_{\langle i,j \rangle}^N \alpha_T (T - T_c^{TC}) (\mathbf{s}_i \mathbf{n}_T)^2$$
 – энергия структурных взаимодействий при «смене» фаз.

турных взаимодействий при «смене» фаз.

Моделирование проведено в нормированных величинах, с потенциалом обменного взаимодействия $J=1$, с периодическими граничными условиями и для ближних взаимодействий диполей. Модель реализована программно методом Монте-Карло согласно алгоритму Метрополиса. Выявлены закономерности поведения температурных зависимостей поляризации и восприимчивости вблизи температур фазового перехода.

Интересным примером является применение модели Изинга для моделирования характеристик отклика сегнетоэлектрика Ca₃CoMnO₆ на воздействие магнитного поля автором Yao [50]. Моделирование проведено в рамках идеи Изинга методом Монте-Карло. Использовано сложное, многокомпонентное представление энергии. Исследованы характеристики при разных температурах и значений магнитных полей, установлены конфигурации «псевдоспинов», обеспечивающие наблюдение «экзотических» свойств данного сегнетоэлектрика.

Сравнение результатов применения двух 3D-моделей Изинга: классической и в рамках случайного поля для сегнетоэлектрика ниобата бария стронция SBN:Ce представлено в работе Granzow и коллег [51]. Авторами рассмотрено соотношение для поляризации P с учетом введения т.н. критической экспоненты β :

$$P(T) = P_0 \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^\beta, \quad (2.40)$$

где T_C – температура Кюри;

Установлены изменения этого критического параметра при изменении поляризации в зависимости от температуры. Особенностью данной работы является моделирование в размерных величинах, авторами использованы оцененные из данных первопринципного моделирования значения потенциалов взаимодействия между всеми парами атомов. Подобные результаты подтверждаются и в работе Delgado [52], которая также посвящена исследованию сегнетоэлектрика-релаксора SBN.

2.5 Модель Изинга и критические индексы

Обобщим аналитические выражения, соответствующие критическим индексам.

Для температурной зависимости поляризации $P(T)$ ниже температуры Кюри – формула (2.25).

Для температурной зависимости теплоемкости $c(T)$ выше температуры Кюри:

$$c(T) \propto \left(\frac{T}{T_C} - 1\right)^{-\alpha}. \quad (2.41)$$

Для температурной зависимости диэлектрической восприимчивости $\chi(T)$ выше температуры Кюри:

$$\chi(T) \propto \left(\frac{T}{T_C} - 1 \right)^{-\gamma}. \quad (2.42)$$

Основные физические величины, характеризующие фазовый переход, пропорциональны при $T \rightarrow T_C$ величине:

$$(T - T_C)^{\pm\gamma_i}, \quad (2.43)$$

где γ_i – критические индексы для различных физических величин, предсказываемые термодинамической теорией (таблица 2.1) [3]. Однако до сих пор с достаточной точностью измерен только индекс γ .

Таблица 2.1 – Критические индексы

Показатель	α	β	γ	δ	η	ν
Теория Ландау	0	1/2	1	3	0	1/2
Модель Изинга $d=2$	0	1/8	7/4	≈ 15	1/4	1
Модель Изинга $d=3$	$0,125 \pm 0,015$	$0,312 \pm 0,003$	$1,250 \pm 0,003$	$5,15 \pm 0,02$	$0,055 \pm 0,010$	$0,642 \pm 0,003$

Все девять критических индексов можно выразить через две фундаментальные величины, характеризующие фазовый переход. Соотношение подобия дает некоторую информацию о поведении системы в «критической области» (области длин волн Фурье-компонент флуктуации, меньших когерентной длины).

3 РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СЕГНЕТО-ЭЛЕКТРИКАХ НА ОСНОВЕ ДВУМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

3.1 Границы применимости модели Изинга в приложении к сегнетоэлектрическим материалам

Как показал, литературный обзор, представленный в первой и второй главах диссертации, сегнетоэлектрические материалы не могут являться «полной магнитной аналогией» в отношении применения модели Изинга для расчета характеристик вблизи фазового перехода. Подобная «проекция» имеет ряд ограничений. Сформулируем базовые положения, составляющие концептуальную основу для применения модели Изинга в исследованиях характеристик фазового перехода сегнетоэлектрических материалов.

В числе микроскопических теорий сегнетоэлектричества особое место занимает подход, состоящий в использовании решеточных моделей Изинга, Гейзенберга и Поттса. В подобных модельных представлениях за основу выбирается принцип «магнитной аналогии» – для описания сегнетоэлектрических явлений используются модели, описывающие поведение магнитных систем. В случае сегнетоэлектрических материалов решетка спинов электронов заменяется решеткой диполей с соответствующими дипольными моментами – «псевдоспинами», имеющими ограниченный набор допустимых ориентаций. Потенциальная энергия системы задается модельным гамильтонианом, а анализ поведения системы позволяет установить температурные зависимости характеристик сегнетоэлектриков вблизи фазового перехода.

В плане реализации моделей традиционно рассматривают два подхода – аналитико-приближенный, представленный теорией самосогласованного или эффективного поля [36-46] и численно-стохастический метод Монте-Карло, применяемый в сочетании с алгоритмом Метрополиса, которые дают процедуру определения средних величин в каноническом ансамбле [47-49]. Известно, что аналитические решения в приближении самосогласованного поля удалось построить только для одномерной и двумерной моделей Изинга (с классиче-

ским или стандартным представлением гамильтониана) [35], поэтому прямое моделирование на основе метода Монте-Карло не теряет своей актуальности.

Рассмотрим основные аспекты применимости решеточных моделей для исследования поведения характеристик сегнетоэлектриков в окрестности фазового перехода.

1) Модель Изинга в своем классическом представлении с двумя возможными направлениями «псевдоспинов» может быть применена только для одноосных сегнетоэлектриков. Для многоосных сегнетоэлектриков требуется переход к трехмерной решеточной модели Гейзенберга.

2) В зависимости от типа фазового перехода (смещения или порядок – беспорядок) вид гамильтониана в моделях Изинга и Гейзенберга существенно отличается [43]. Широко известное выражение гамильтониана модели Изинга может быть использовано для моделирования характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа порядок-беспорядок. Для сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения используется модифицированное представление [43].

3) Моделирование фазовых переходов на основе моделей Изинга, Гейзенберга, Поттса в приложении к объемным кристаллам требует трехмерной реализации для большого числа узлов (не менее 20-30 вдоль одного координатного направления), двумерная решеточная модель в большей степени применима к тонким пленкам и малым частицам в составе композитов [43-45].

4) Классическая модель Изинга учитывает только ближние взаимодействия, в то время как, для сегнетоэлектриков оказывается важным учет дальнедействующих связей [44-45], который может быть введен посредством модификации алгоритма Метрополиса и рассмотрения связей, находящемся в некотором «радиусе» взаимодействия. Такая модификация рассмотрена в приближении самосогласованного поля и данные по реализации такой модели на основе метода Монте-Карло в литературе отсутствуют.

5) Проводя анализ применимости метода Монте-Карло для моделирования микроканонического ансамбля можно также отметить, что при оценке точ-

ности различают статистическую погрешность и систематическую погрешность результата. Первая обусловлена числом случайных реализаций в алгоритме Метрополиса, вторая – вызвана числом ячеек моделируемой системы, наложением периодических граничных условий и аппроксимацией термодинамических характеристик. Для верификации данных требуется проводить сопоставление результатов с оценкой предельных аналитических соотношений, полученных на основе теории Ландау (теории эффективного поля). Также можно использовать статистический подход, состоящий в проведении серии вычислительных экспериментов, обнаруживающих согласование результатов в пределах статистической погрешности.

Таким образом, хотя развитию модели Изинга применительно к исследованию характеристик сегнетоэлектриков посвящен достаточно широкий круг работ, очень много вопросов остаются открытыми и требуют дальнейшего исследования. В настоящей главе представлена формализация и реализация модели двумерной стохастической Изинга в приложении к исследованию поведения температурных характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок в окрестности фазового перехода.

3.2 Концептуальная и математическая постановки задачи моделирования

Будем исходить из предположения, что модель Изинга, широко используемая для моделирования характеристик фазовых переходов в магнетиках, может быть применена для исследования характеристик сегнетоэлектриков. В последнем случае каждому узлу решетки в модели Изинга следует поставить в соответствие «псевдоспин», значение которого отвечает за направление дипольного момента ячейки s_i . Для одноосных сегнетоэлектриков (или кристаллов со 180° доменной структурой) возможны только два направления вектора спонтанной поляризации, поэтому концепция модели Изинга оказывается достаточной для моделирования характеристик подобных систем.

Поскольку теоретическим базисом работы является модель Изинга, требуется провести программную реализацию этой модели и установить соответ-

ствие между моделируемыми характеристиками магнитных и сегнетоэлектрических систем. Моделирование будем проводить для двумерной системы, с учетом нормированных значений параметров и переменных модели. Сформулируем общую концептуальную постановку задачи в следующей форме.

Рассмотрим d -мерную решетку, содержащую $N=L^d$ узлов, где L – характерный размер решетки. Каждому узлу решетки поставлен в соответствие «псевдоспин» s_i , отвечающий за направление дипольного момента ячейки решетки \mathbf{p}_i . «Псевдоспин» s_i может принимать значение $s_i = +1$, если он сонаправлен с осью OZ и значение $s_i = -1$, если направлен противоположно, как показано на рисунке 3.1.

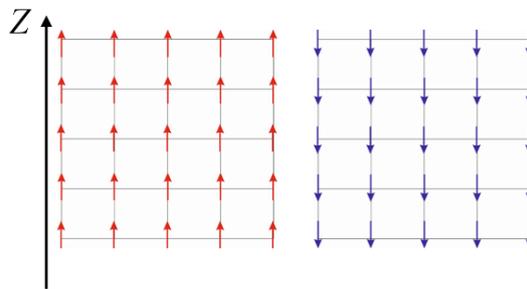


Рисунок 3.1 – Начальные конфигурации «псевдоспинов» в модели Изинга

Любая конфигурация задается набором переменных s_1, s_2, \dots, s_n для всех узлов решетки. Основной гамильтониан модели запишем в следующем виде:

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i E |p_i| s_i, \quad (3.1)$$

где H – потенциальная энергия системы, Дж;

s_i – текущее направление «псевдоспина»;

J_{ij} – константа связи (аналог потенциала взаимодействия спинов), Дж;

E – напряженность внешнего электрического поля в месте расположения «псевдоспина» (аналог индукции магнитного поля), В/м;

$|p_i|$ – абсолютная величина дипольного момента ячейки, Кл·м (при условии, что полярная ось совпадает с кристаллографической осью, иначе учет на-

правления потребует задания $|p_i| \cos \alpha$).

Дополнительными параметрами этой модели являются: число случайных испытаний метода Монте-Карло – M ; температура или диапазон изменения температур системы – T или $[T_0, T_1]$; постоянная Больцмана – k_T .

Переменные модели и величины, подлежащие определению:

– конфигурация «псевдоспинов» s_i ;

– энергия системы H ;

– поляризация системы $P = \sum_i p_i / \Delta V$, Кл/м², или в нормированном виде

$$P = \sum_i |p_i| s_i; \text{ теплоемкость системы } C = \frac{1}{k_T T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2), \text{ Дж/К};$$

– диэлектрическая восприимчивость $\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 \Delta V k_T T} (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)$, рассчи-

танные с использованием средних по ансамблю значений энергии $\langle H \rangle$ и поляризации $\langle P \rangle$, где T – температура.

3.3 Формальное описание алгоритма Метрополиса для компьютерной реализации модели Изинга

Задача решается методом статистических испытаний при помощи алгоритма Метрополиса, который включает следующие основные шаги:

- 1) сформировать начальную конфигурацию системы;
- 2) провести пробное случайное изменение конфигурации;
- 3) вычислить изменение энергии системы ΔH ;
- 4) если $\Delta H \leq 0$, тогда принять новую конфигурацию системы и перейти к пункту 8;
- 5) если $\Delta H \geq 0$, то вычислить «вероятность перехода»
$$W = \exp(-\Delta H / (k_T T));$$
- 6) сгенерировать равномерно распределенное случайное число $r \in (0, 1)$;
- 7) если $r \leq W$, принять новую конфигурацию, иначе сохранить предыдущую конфигурацию;
- 8) определить значения требуемых физических величин;

9) повторить пункты 2-8 для получения достаточного количества конфигураций;

10) вычислить средние по статистически независимым друг от друга конфигурациям.

Формализация алгоритма соответствует блок-схеме, представленной на рисунке 3.2.



Рисунок 3.2 – Блок-схема алгоритма Метрополиса для реализации 2D-модели Изинга

В модели приняты периодические (тороидальные) граничные условия. Модель реализована в ППП Matlab с использованием базовой версии программы [53]. Моделирование проводилось с учетом нормировки параметров. Обще-принятый подход при реализации модели Изинга (не включающей квантово-механический расчет потенциалов взаимодействия J_{ij}) – параметр масштабиро-

вания принимают равным $J_{ij}=1$ и моделирование проводят в нормированных величинах на основе нормировочного соотношения: $J/(k_T T)$). Программа включает в себя четыре файла, модульно связанных друг с другом. Листинг функций приведен в приложении А. Структура программного комплекса:

1) главная программа `Vysov1.m`, в которой инициализируются параметры и из которой вызываются исполняемые модули;

2) функциональный модуль `InitSp.m` предназначен для формирования начальной конфигурации системы;

3) функциональный модуль `Espin.m` предназначен для расчета энергии текущей конфигурации;

4) системный модуль `Model.m` предназначен для расчета основных характеристик магнитных систем.

В качестве входных параметров требуется инициализировать: число узлов решетки N , константу J , величину внешнего электрического поля E , температуру системы T (или массив значений температур) и количество испытаний M для реализации метода Монте-Карло (в алгоритме Метрополиса).

3.4 Вычислительные эксперименты и анализ результатов моделирования

3.4.1 Моделирование характеристик в окрестности температуры фазового перехода (в отсутствие внешнего поля)

Параметры модели: число случайных испытаний ($M=2000$); диапазон изменения температуры системы – $[0.1, 4.1]$; параметр масштабирования (аналог потенциала взаимодействия «псевдоспинов») – J (нормирован к 1 отн. ед.); характерный размер решетки – $L=16$; постоянная Больцмана – k_T (1 отн. ед.). Переменные модели и величины, подлежащие определению: конфигурация «псевдоспинов» – s_i ; энергия системы – H ; поляризация системы – P ; теплоемкость системы – C .

На рисунке 3.3 приведены результаты компьютерного расчета зависимости поляризации и теплоемкости в окрестности температуры фазового перехода

(для данной вариации модели Изинга). При температурах $T < T_C$ поляризация системы принимает наибольшие значения, в то время как энергия соответствует минимальным. При переходе через точку Кюри ($T_C = 2.3$ отн. ед.) меняется значение поляризации и система переходит из сегнетофазы в парафазу с нулевым значением поляризации. Зависимость теплоемкости от температуры имеет ярко выраженный максимум в точке фазового перехода.

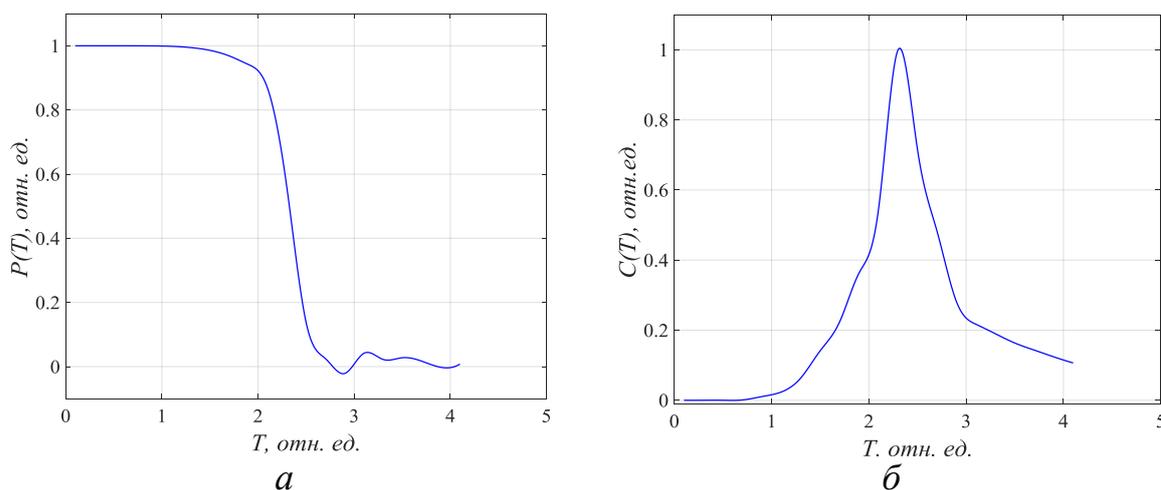


Рисунок 3.3 – Результаты вычислительного эксперимента – графики температурных зависимостей: поляризации – *а* и теплоемкости – *б*

Таким образом, классическая модель Изинга применена для моделирования характеристик полярного состояния и расчета «калорической» макроскопической характеристики одноосных сегнетоэлектриков со 180° доменной структурой. Базовая прикладная программа послужит основой для компьютерной реализации модифицированных моделей.

3.4.2 Моделирование диэлектрического гистерезиса

Состояние, при котором все домены будут характеризоваться одинаковым направлением вектора спонтанной поляризации, является энергетически выгодным. Поэтому первоначальная конфигурация рассматривалась при $s_i = +1$ или $s_i = -1$ для всех узлов решетки (такая ситуация имеет место, например, при предварительной поляризации кристалла). Возможные конфигурации системы определяются заданием значений всех переменных s_i , число которых составляет 2^N , а вклад любой из конфигураций определяется функцией распределения для

канонического ансамбля. Для описания состояний физической системы вводят равновесные статистические характеристики – среднюю энергию $\langle E \rangle$ и среднюю поляризацию $\langle P \rangle$ с использованием средних по ансамблю значений рассматриваемых физических величин. Модель реализована в виде программного приложения в ППП Matlab (базовая версия представлена в [3]) с использованием алгоритма Метрополиса. Параметры модели: число случайных испытаний – $M=2000$; характерный размер решетки $L=16$; напряженность электрического поля E изменяется в диапазоне $[-2,2]$ отн. ед. Переменные модели и величины, подлежащие определению: зависимость суммарной поляризации системы P как функции изменяющегося поля при различных значениях температуры. На рисунке 3.4 приведены результаты компьютерного моделирования поляризации в окрестности температуры фазового перехода (2.3 отн. ед.).

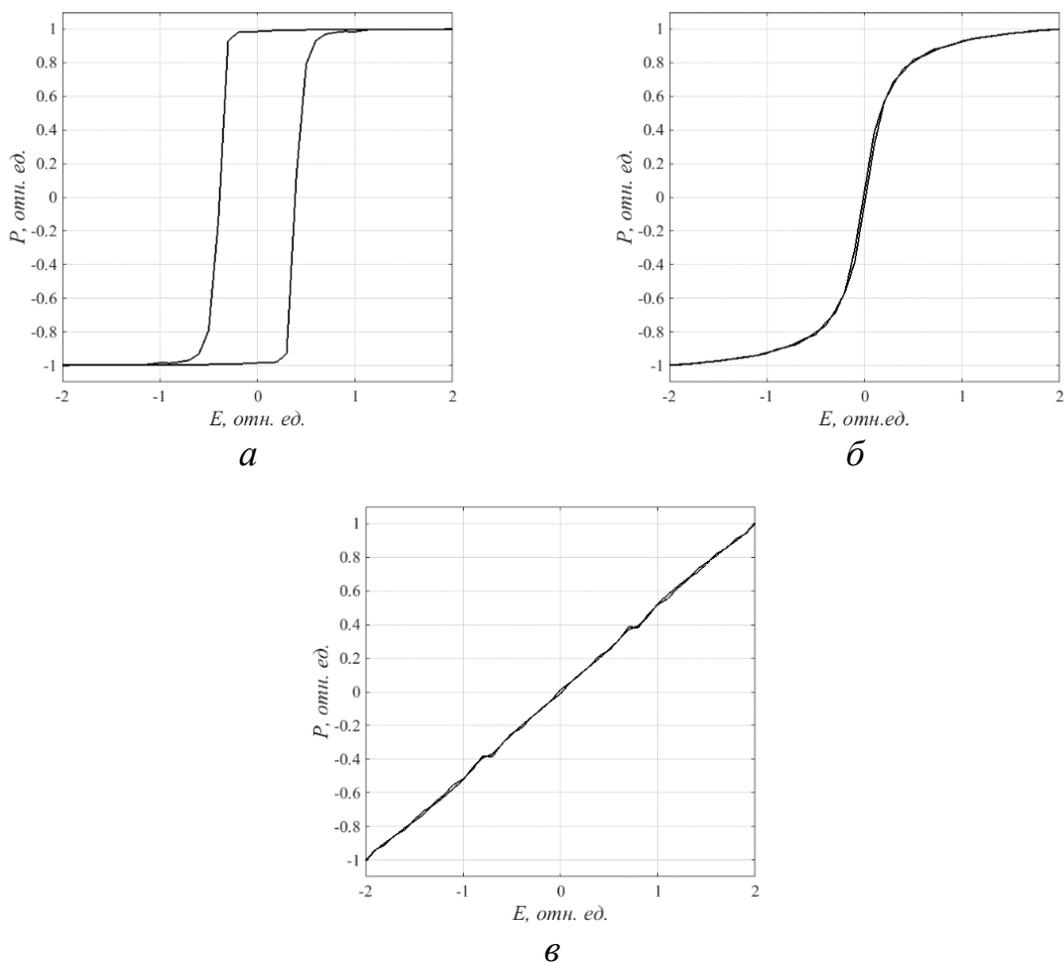


Рисунок 3.4 – Сегнетоэлектрический гистерезис – зависимость поляризации от поля при: *а* – $T=1.5$ отн. ед., *б* – $T=3$ отн. ед., *в* – $T=10$ отн. ед.

При температуре, меньшей T_C , наблюдается гистерезисная зависимость поляризации от внешнего поля; при температурах, больших температуры Кюри, зависимость P от E соответствует параэлектрической фазе (объект «теряет» свои сегнетоэлектрические свойства и становится линейным пироэлектриком).

3.4.3 Оценка критических индексов

Фазовые переходы в сегнетоэлектриках также, как и в ферромагнетиках, удобно описывать с помощью группы показателей – так называемых критических индексов. В термодинамике и молекулярной теории поля вводятся следующие аналитические выражения, соответствующие критическим индексам: для температурной зависимости поляризации $P(T)$ ниже температуры Кюри:

$$P(T) \propto (1 - T/T_C)^\beta, \quad (3.2)$$

для температурной зависимости теплоемкости $C(T)$ и диэлектрической восприимчивости $\chi(T)$ выше температуры Кюри:

$$C(T) \propto ((T - T_C)/T_C)^{-\alpha}, \quad (3.3)$$

$$\chi(T) \propto ((T - T_C)/T_C)^{-\gamma}, \quad (3.4)$$

где T_C – температура Кюри.

Проведем оценку характерных критических индексов для одной из реализаций модели Изинга. Параметры модели: число случайных испытаний – $M=1000$; температура меняется в диапазоне [0.1 4.1]; напряженность электрического поля E отсутствует. Переменные модели и величины, подлежащие определению: зависимость суммарной поляризации системы P , теплоемкости $C(T)$, диэлектрической восприимчивости $\chi(T)$, от температуры. На рисунке 3.5 представлен результат стохастического моделирования методом Монте-Карло зависимости поляризации от температуры в сравнении с графической визуализацией на основе аналитического соотношения (3.2). Приближение проведено мето-

дом наименьших квадратов. Значение критического индекса на основе аппроксимации эмпирической зависимостью установлено на уровне $\beta=0.1112-0.1528$ (при нескольких случайных реализациях).

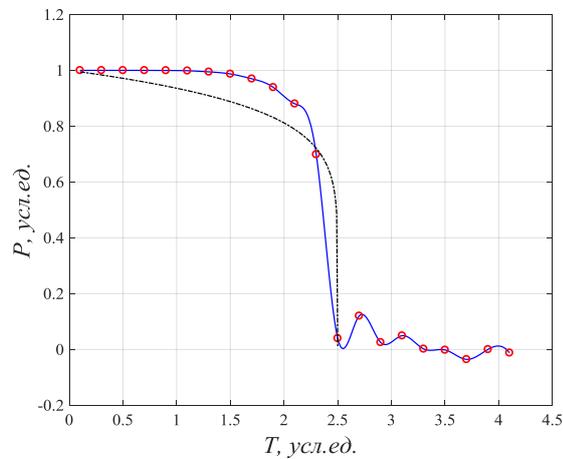


Рисунок 3.5 – Зависимость поляризации от температуры в сравнении с аппроксимацией аналитической зависимостью (3.2)

Графическое представление аппроксимаций, полученных на основе теоретических оценок для восприимчивости и теплоемкости показано на рисунке 3.6.

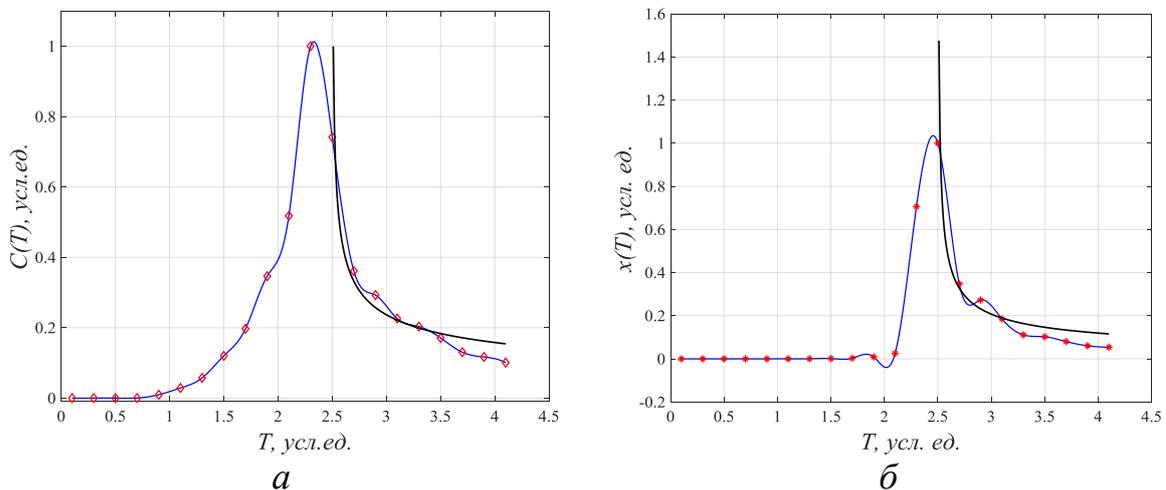


Рисунок 3.6 – Температурная зависимость теплоёмкости

в сравнении с аппроксимацией аналитической зависимостью (3.3) – а, температурная зависимость диэлектрической восприимчивости в сравнении с аппроксимацией аналитической зависимостью (3.4) – б

Для установления критических параметров построим графики, отвечаю-

щие зависимостям (3.3) и (3.4) в двойном логарифмическом масштабе, как показано на рисунке 3.7. Далее проведем аппроксимацию методом наименьших квадратов на основе линейной зависимости. Угловым коэффициентом полученных прямых и будет соответствовать значениям критических индексов.

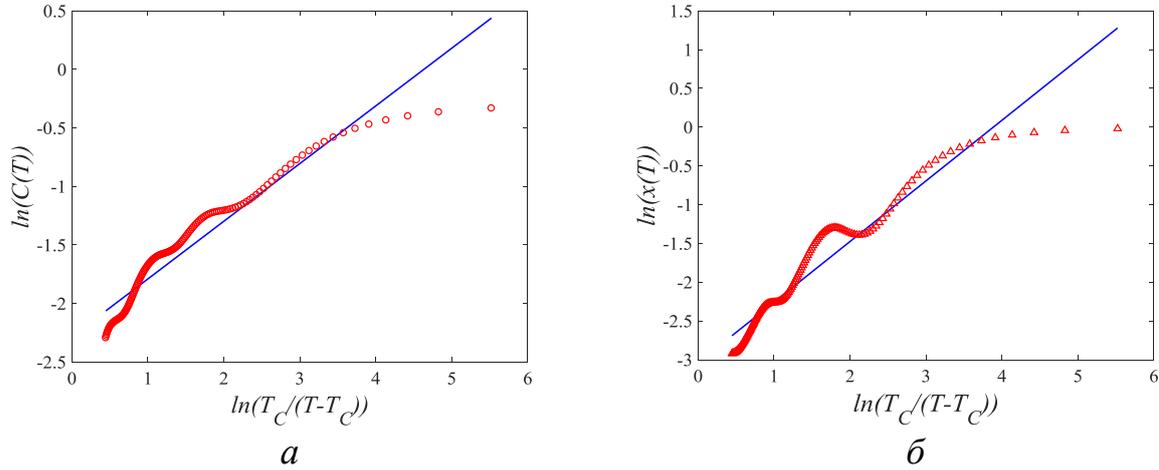


Рисунок 3.7 – Зависимости термодинамических характеристик от температуры в двойном логарифмическом масштабе: для теплоемкости – а, для диэлектрической восприимчивости – б

Численные значения критических индексов представлены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Значения критических индексов

Обозначение индекса	Теоретическая оценка (теория молекулярного поля)**	Асимптотические оценки для модели Изинга [7]		Результат вычислительного эксперимента	Экспериментальные оценки [56-57]
		Двумерная модель Изинга	Трехмерная модель Изинга		
α	0	0	0,125	0,48-0,50	*
β	0,5	0,125	0,31	0,15-0,2	ТГС $0,27 \pm 0,02$ при $T < 48^\circ\text{C}$
					$0,51 \pm 0,02$ – вблизи $T_c = 48,95^\circ\text{C}$
					ДТГС $0,26 \pm 0,02$ при $T < 57^\circ\text{C}$
					$0,50 \pm 0,02$ вблизи $T_c = 58,95^\circ\text{C}$
					SBN:Ce $0,126-0,232 \pm 0,01$
γ	1	1,75	1,25	0,71-0,78	0,9-1,4

*Примечание. В одних сегнетоэлектриках теплоемкость испытывает конечный скачок при $T=T_C$ (кубические кристаллы), в других (для одноосных сегнетоэлектриков) – ведет себя как $\ln(T-T_C)$ [56-57]

**Примечание. Или теория эффективного поля

Вблизи температуры Кюри зависимость поляризации от температуры в наибольшей степени (по данным эксперимента для кристаллов ТГС и ДТГС, SBN) соответствует теоретической оценке, при отдалении от температуры фазового перехода, эксперимент имеет большее согласование с результатами, полученными на основе модели Изинга.

3.4.4 Сравнение результатов моделирования температурной зависимости поляризации с аналитическим решением и экспериментальными данными

Как известно, задача аппроксимации характеристик «ферроиков» для классической модели Изинга в одномерном и двумерном случаях допускает аналитическое решение на основе подхода теории эффективного поля [35]. Используем аналитическую оценку для среднего значения поляризации, которая дается выражением [35, 37]:

$$\langle P \rangle = \left[1 - \frac{1}{\sinh^4(2J/[k_T T])} \right]^{\frac{1}{8}}, \quad (3.5)$$

при этом температура Кюри в нормированных величинах приблизительно равна 2.27.

Примем следующий набор нормированных параметров: $N=256$, число испытаний в алгоритме Метрополиса 1000, поле E отсутствует, температура меняется в диапазоне [0.1 4.1]. Результат сравнения данных стохастического моделирования и аналитического представления показан на рисунке 3.8.

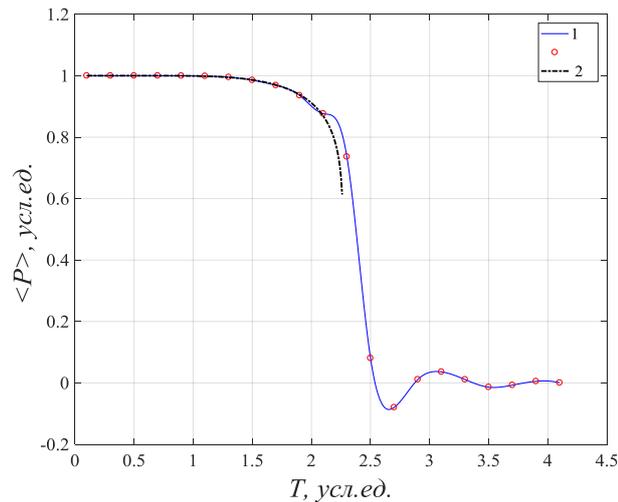


Рисунок 3.8 – Сравнение результатов моделирования методом Монте-Карло (1) с данными (2) аналитической оценки (3.5)

Сравнение результатов показывает достаточно хорошее согласование в температурном диапазоне, отдаленном от точки Кюри. Вблизи температуры Кюри наблюдается некоторое расхождение, связанное с точностью расчета метода Монте-Карло (реализован на решетке, содержащей всего 16×16 узлов). Тем не менее, представленный результат может служить одним из подходов к верификации данных компьютерного моделирования.

Вблизи температуры Кюри зависимость поляризации от температуры в наибольшей степени (по данным эксперимента для кристаллов ТГС и ДТГС, SBN) соответствует теоретической оценке, при отдалении от температуры фазового перехода, эксперимент имеет большее согласование с результатами, полученными на основе модели Изинга.

Проведем сравнение результатов моделирования температурной зависимости поляризации $P(T)$ с экспериментальными данными (из литературных источников). На рисунке 3.9 приведены результаты модельного расчета зависимости $P(T)$ с данными эксперимента для кристалла ТГС [57]. Сегнетоэлектрический кристалл триглицинсульфата является одним из наиболее подходящих «кандидатов» для проведения подобного сопоставления, так как он является хорошо изученным, одноосным сегнетоэлектриком с фазовым переходом типа «порядок-беспорядок».

Для подобного сопоставления все значения нормировались: поляризация – по отношению к максимальному значению $P_0 = 2,5 \cdot 10^{-2} \text{ Кл/м}^2$ и температура – таким образом, чтобы температура Кюри соответствовала теоретическому значению 2,27 усл. ед.

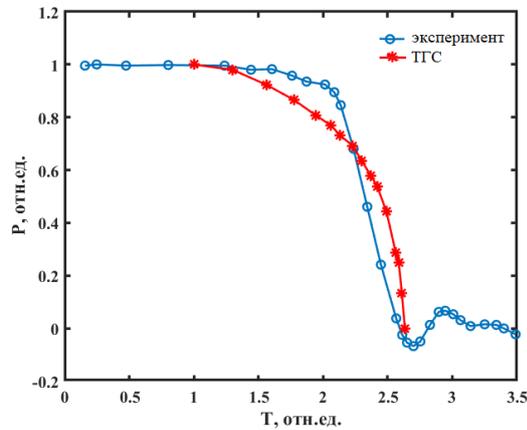


Рисунок 3.9 – Сравнение результатов моделирования температурной зависимости поляризации с экспериментальными данными для кристалла ТГС

Из данного сопоставления следует, что даже двумерная модель Изинга дает вполне удовлетворительное качественное согласование с данными эксперимента по оценке характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа ТГС.

3.4.5 Моделирование характеристик сегнетоэлектриков с учетом дальнедействующих связей

Как было отмечено во второй главе, для сегнетоэлектриков модельное представление гамильтониана нуждается в модификации, если принять во внимание не только ближайшие взаимодействия – для 1D-модели (2 «псевдоспина» – слева и справа) и для 2D-модели (4 «псевдоспина» – слева, справа, сверху, снизу), а также и дальнедействующие связи. Wang [44] предложил скорректировать потенциал взаимодействия на основе соотношения $J_{ij} = \frac{J}{R_{ij}^\sigma}$, где R – радиус взаимодействия.

Проведем модификацию алгоритма модели с учетом дальних взаимодействий диполей, входящих в радиус R , как показано на рисунке 3.10.

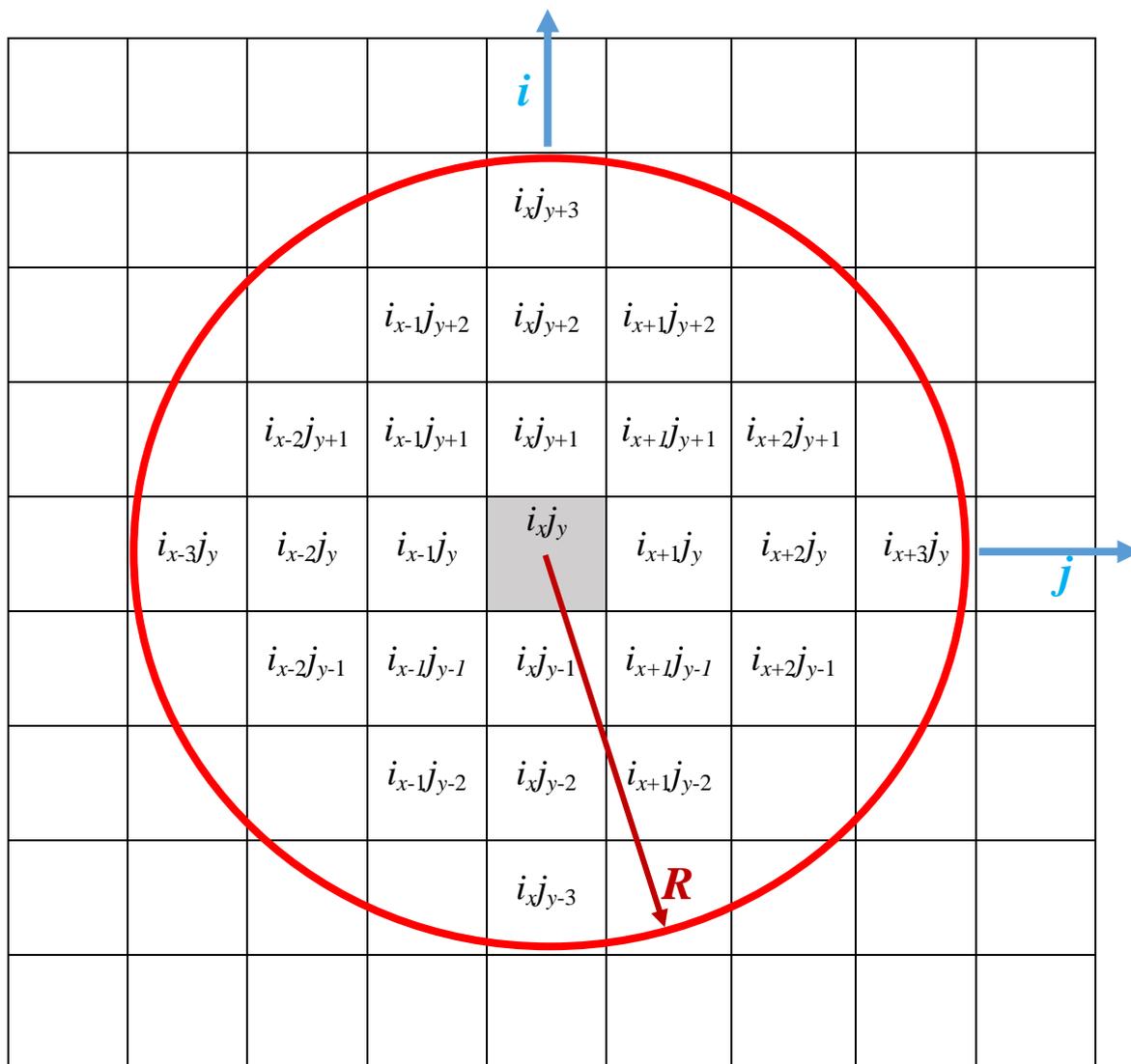


Рисунок 3.10 – Схематическое представление матрицы соседних элементов, учитываемых при расчете энергии

В данной модели количество соседних диполей, оказывающих действие на направление вектора спонтанной поляризации диполя принято 24. В модели приняты периодические (тороидальные) граничные условия. Проведено моделирование с большим числом узлов – расчетная область 32×32 . Для каждой позиции двумерной решетки учитываются взаимодействия со всеми диполями, входящими в окружность радиуса R . Соответственно ведется расчет энергии на основе суперпозиции от каждой пары взаимодействующих диполей. В остальном алгоритм повторяет основные шаги алгоритма Метрополиса, формализация

которого приведена на рисунке 3.2. Листинг компьютерной программы (функция `IsingWang.m`) представлен в Приложении А.

На рисунке 3.11 представлена последовательная серия изменения конфигурации дипольных моментов («псевдоспинов») при температуре $T=4,1$ усл. ед. Изначальная конфигурация – все «псевдоспины» направлены вверх, далее наблюдается изменение конфигурации и при данной температуре полярное состояние оказывается невыгодным – «псевдоспины» принимают разнонаправленные положения и суммарное усредненное по ансамблю значение поляризации оказывается равным нулю (состояние соответствует параэлектрической фазе) (рисунок 3.8).

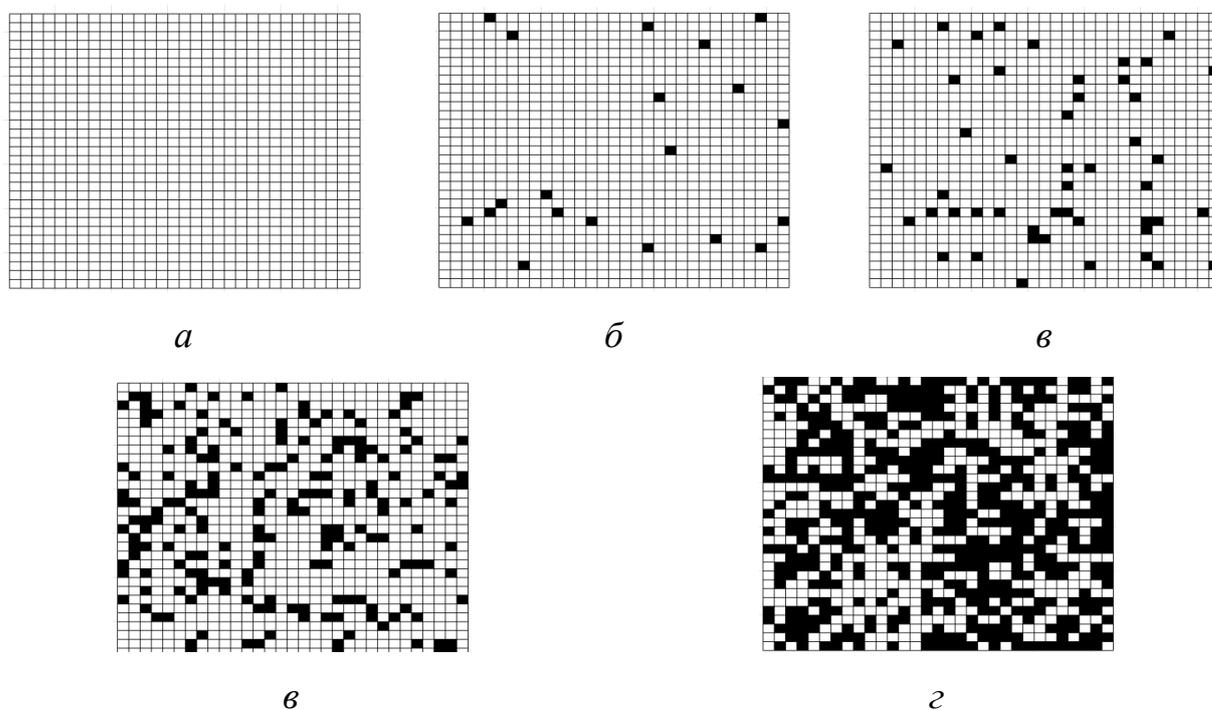
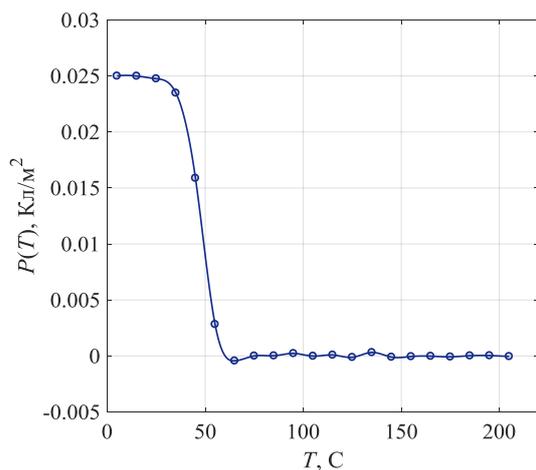


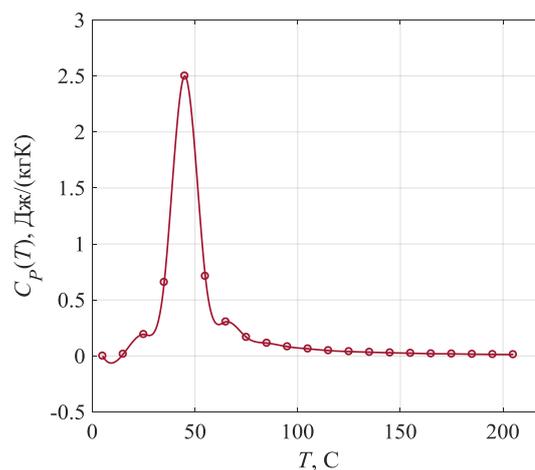
Рисунок 3.11 – Иллюстрация модели перехода сегнетоэлектрика из сегнетофазы в параэлектрическую фазу при различных моментах времени:

$a - t=0$, $б - t=100$, $в - t=200$, $г - t=1000$, $д - t=10000$ при $T=4,1$ усл.ед.

На рисунке 3.12 представлены полученные на основе модельных расчетов температурные зависимости поляризации и теплоемкости, приведенные с помощью масштабирования к значениям экспериментальных данных для кристалла ТГС (согласно [7, 56-57]).



a



б

Рисунок 3.12 – Результаты вычислительного эксперимента, приведенные к размерным величинам – графики температурных зависимостей:

a – поляризации и *б* – теплоемкости

Таким образом, реализованная двумерная модель Изинга позволяет проводить исследование поведения характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок в окрестности температуры фазового перехода. Для уточнения результата требуется переход к трехмерному представлению модели Изинга и к увеличению числа ячеек моделируемой системы. Для модельного представления характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения требуется модификация представления гамильтониана, для многоосных кристаллов – переход к концепции модели Гейзенберга. Результаты исследований автора опубликованы в работах [58-60].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты развития модели Изинга применительно к задаче расчета характеристик фазовых переходов в одноосных сегнетоэлектрических материалах. Разработана базовая прикладная программа, реализующая двумерную модель Изинга на основе алгоритма Метрополиса в ППП Matlab. Продемонстрированы результаты вычисленных экспериментов. Основные результаты работы можно сформулировать в виде следующих выводов.

1) Проведенные вычислительные эксперименты свидетельствуют, что двумерная модель Изинга воспроизводит основные особенности зависимостей поляризации и теплоемкости от температуры, поляризации от внешнего электрического поля для одноосных сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа порядок-беспорядок. Сравнение с аналитической аппроксимацией показывает достаточно хорошее согласование в температурном диапазоне, отдаленном от точки Кюри. Вблизи температуры Кюри наблюдается расхождение, связанное с точностью оценок, полученных методом Монте-Карло для двумерной модели с небольшим числом узлов.

2) Оценка критических индексов показала, что вблизи температуры Кюри зависимость поляризации от температуры в наибольшей степени (по данным эксперимента для кристаллов ТГС и ДТГС, SBN) соответствует теоретической оценке, при отдалении от температуры фазового перехода, эксперимент имеет большее согласование с результатами, полученными на основе компьютерной реализации модели Изинга (с помощью алгоритма Метрополиса).

3) Сравнение модельной зависимости поляризации от температуры с экспериментальными данными для типичного сегнетоэлектрического кристалла триглицинсульфата демонстрирует их качественное согласование. В связи с чем, алгоритм Метрополиса в концепции двумерной модели Изинга можно считать приемлемым средством для моделирования поведения характеристик одноосных сегнетоэлектриков группы ТГС.

4) Представлена модификация алгоритма Метрополиса стохастической

модели Изинга для решетки, состоящей из 32×32 узлов, с учетом дальних взаимодействий диполей (реализация которой ранее была описана только в рамках концепции эффективного поля). Проведены вычислительные эксперименты. Анализ зависимости поляризации от температуры и поляризации от внешнего электрического поля показали достаточно хорошую согласованность с экспериментальными зависимостями для сегнетоэлектриков группы ТГС.

5) Модернизация программы с учетом констант для различных сегнетоэлектриков показала, что существует принципиальная возможность использовать модель и прикладную программу для вычисления характеристик в размерных физических величинах при наличии данных о потенциале взаимодействия.

В целом, реализованная двумерная модель Изинга позволяет проводить исследование поведения характеристик одноосных сегнетоэлектриков типа порядок-беспорядок в окрестности температуры фазового перехода (преимущественно для низкоразмерных структур). Для уточнения результата требуется переход к трехмерному представлению модели Изинга (в случае объемных материалов) и к увеличению числа ячеек моделируемой системы. Для модельного представления характеристик сегнетоэлектриков с фазовым переходом типа смещения требуется модификация представления гамильтониана, для многоосных кристаллов сложных сингоний – переход к концепции моделям Гейзенберга и Поттса.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1 Епифанов, Г.И. Физика твердого тела / Г.И. Епифанов – Учебное пособие. – СПб.: Издательство «Лань», 2011. – 288 с.

2 Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика Ч. I. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 616 с.

3 Лайнс, М. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы / М. Лайнс, А. Гласс. – М.: Мир, 1981. – 736 с.

4 Сидоркин, А.С. Доменная структура и сегнетоэлектриках и родственных материалах / А.С. Сидоркин. – М.: Физматлит, 2000. – 240 с.

5 Физика сегнетоэлектриков: современный взгляд / под ред. К.М. Рабе, Ч.Г. Анна, Ж.-М. Трискона; пер. с англ. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 440 с.

6 Тополов В.Ю. Физика сегнето- и пьезоэлектриков / В.Ю. Тополов, А.Е. Панич – Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2009. – 71 с.

7 Смоленский, Г.А. Сегнетоэлектрики и антисегнетоэлектрики / Г.А. Смоленский, В.А. Боков, В.А. Исупов, Н.Н. Крайник, Р.Е. Пасынков, М.С. Шур. – М.: Наука, 1971. – 465 с.

8 Барфут, Дж. Полярные диэлектрики и их применения / Дж. Барфут, Дж. Тейлор. – М.: Мир, 1981. – 526 с.

9 Тополов В.Ю. Физика сегнето- и пьезоэлектриков / В.Ю. Тополов, А.Е. Панич – Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета, 2009. – 71 с.

10 Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике. Т 2. [Текст] / Х. Гулд, Я. Тобочник – М.: Мир, 1990. – 400 с.

11 Прудников, В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования / В.В. Прудников, А.Н. Вакилов, П.В. Прудников – М.: Физматлит, 2009. – 224 с.

12 Тарасевич, Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: Учебное пособие. Изд. 4-е, испр. / Ю.Ю. Тарасевич. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 152 с.

13 Поршнева, С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB / С. В. Поршнева – М.: Горячая линия – Телеком, 2003. – 592 с.

14 Нjorth-Jensen, M. Computational physics / M. Нjorth-Jensen – Oslo: Department of Physics, University of Oslo, 2003. – 333 p.

15 Захаров, А.Ю. Решеточные модели статистической физики: Учеб.-метод. пособие / А. Ю. Захаров – Великий Новгород: НовГУ им. Ярослава Мудрого, 2006. – 74 с.

16 Metropolis, N. The Monte-Carlo method / N. Metropolis, S. Ulam // J. Amer. Stat. Assos., 1949. – Т. 44. – № 247. – P. 335-341.

17 Владимиров, В.С. Расчёт наименьшего характеристического числа уравнения Пайерлса методом Монте-Карло / В.С. Владимиров, И.М. Соболев // Вычислительная математика, 1958. – № 3 – С. 130-137.

18 Березин, Ф.А. Плоская модель Изинга / Ф.А. Березин // Успехи математических наук. – 1969. – Т. 24, вып. 3. – С. 3-22.

19 Бугрий, А.И. Двумерная модель Изинга: дуальность и граничные условия / А.И. Бугрий, В.Н. Шадура // Письма в ЖЭТФ, 1996. – Т. 63. – С. 369-374.

20 Shchur, L.N. Cluster Monte Carlo: Scaling of systematic errors in the two-dimensional Ising model / L.N. Shchur, W. Henk, J. Blote // Physical Review E., 1997. – Т. 55. – No 5. – P. 1122-1135.

21 Муртазаев, А.К. Критические свойства трехмерной фрустрированной модели Изинга на кубической решетке / А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов // Физика твердого тела, 2005. – Т. 47. – С. 1125-1129.

22 Таскин, А.Н. Критические индексы с учетом динамического скейлинга для адсорбции на малых одномерных кластерах / А.Н. Таскин, В.Н. Удодов, А.И. Потекаев // Известия высших учебных заведений. Физика, 2005. – № 8. – С. 82-87.

23 Капитан, В.Ю. Расчет магнитных свойств наноструктурных пленок методом параллельного Монте-Карло / В.Ю. Капитан, К.В. Нефедев // Компьютерные исследования и моделирование, 2013. – Т. 5. – № 4. – С. 693-703.

24 Иванов, В.А. Компьютерное моделирование фазового равновесия в системах жесткоцепных полимеров и сополимеров. // Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / В.А. Иванов – М., 2014. – 52 с.

25 Белим, С.В. Тестирование генераторов псевдослучайных последовательностей с помощью трехмерной модели Изинга / С.В. Белим, А.Ю. Шерешик // Наука и образование, 2012. – № 9. – С. 1-5

26 Бирюков, А.А. Компьютерное моделирование фазовых переходов в модели Изинга с дальними корреляциями / А.А. Бирюков, Я.В. Дегтярева, М.А. Шлеенков // Вестник СамГУ (Естественнонаучная серия), 2012. – № 9(100). – С. 159-163.

27 Болецкая, Т.К. Исследование фрактальных характеристик одномерной модели Изинга со случайным магнитным полем / Т.К. Болецкая, Н.Н. Кирченко // Вестник Омского университета, 2005. – № 1. – С. 23-25

28 Шерешик, А.Ю. Использование модели Изинга на двумерной решетке для построения хеш-функции // Вестник Омского университета, 2012. – № 4. – С. 187-190.

29 Dannenberg, A. Ab initio and Monte Carlo investigations of structural, electronic and magnetic properties of new ferromagnetic Heusler alloys with high Curie temperatures / A. Dannenberg // Dissertation. – Duisburg, 2011. – 128 p.

30 Comtessea, D. A first-principles study aided with Monte Carlo simulations of carbon doped iron-manganese alloys / D. Comtessea, H.C. Herper, A. Hucht, P. Entel // Eur. Phys. J. B, 2012. – V. 85. – P. 343-356.

31 Creighton, K. Thomas Numerically exact correlations and sampling in the two-dimensional Ising spin glass / Creighton K. Thomas, A. Alan Middleton // Phys. Rev., 2013. – V. 87. – P. 174542-17551.

32 Rojas, M. Frustrated Ising model on the Cairo pentagonal lattice / M. Rojas, Onofre Rojas, S. M. de Souza // Phys. Rev., 2012 – V. 86. – P. 163390-163405.

33 Grunebohm, A. Optimizing the magnetocaloric effect in Ni-Mn-Sn by substitution: A first-principles study / A. Grunebohm, D. Comtesse, A. Maslovskaya, P. Entel // IEEE Transactions on Magnetics, 2014. – V. 5 (11). – P. 6971662-6971668.

34 Mezard, M. Information, Physics, and Computation / M. Mezard, A. Montanari – Oxford: Oxford University Press, 2009. – 569 p.

35 Scherer, P.O.J. Computational physics. Simulation of classical and quantum systems / P.O.J. Scherer – Cham Heidelberg: Springer, 2013. – 453 p.

36 Gonzalo, J.A. Effective Field Approach to Phase Transitions and Some Applications to Ferroelectrics / J.A.Gonzalo – Singapore: World Scientific Press., 2006. – 312 p.

37 Wang, C. Theories and methods of First Order Ferroelectric Phase Transitions, Ferroelectrics / C. Wang // Dr. Indrani Coondoo (Ed.), 2010 – P. 275-300. [Эл. ресурс]. Режим доступа: <http://www.intechopen.com/books/>

38 Teng, B.H. Transition regions in the parameter space based on the transverse Ising model with a four-spin interaction / B.H. Teng, H.K. Sy // Europhys. Lett., 2005. – V. 72. –P. 823-829.

39 Diouf, A.A. How to Model an Ising Ferroelectric System: Case of the Investigation of the Dielectrics Properties of a Nano-Octahedral Ferroelectric System / A.A. Diouf, B. Lo, A.N. Dione, C.B. Ndao, A. Chedikh // Communications, 2017. – V. 5 (5). – P. 51-57.

40 Panigrahi, M.R. Theoretical description of ABO_3 relaxor ferroelectric: a review / M.R. Panigrahi, T. Badapanda, S. Panigrahi // Indian J. Phys., 2009. – V. 83(4). – P. 567-571.

41 Rong, L. Phase transition behaviours of the spontaneous polarization in ferroelectric thin films / L. Rong // In: Proc. of Intern. Conf. on Mechatronics, Electronic, Industrial and Control Engineering, 2015. – P. 54-57.

42 Chen, H. Dielectric properties of ferroelectric thin film with surface transition layers / H. Chen, T. Lu, L. Cui, W, Cao // Physica A., 2008. – V. 387 (8). – P. 1963-1971.

43 Sa Barreto, F.C. Ferroelectric phase transitions and the Ising Model / F.C. Sa Barreto // Brazilian J. of Phys., 2000. – V. 30. – No. 4. – P. 778-782.

44 Wang, C.L. Size effect of ferroelectric particles described by the transverse Ising model / C.L. Wang, Y. Xin, X.S. Wang, W.L. Zhong // *Phys. Rev. B.*, 2000. – V. 62. – No 17. – P. 11423-11427.

45 Пирозерский, А.Л. Модель Изинга сегнетоэлектрического фазового перехода в системе взаимодействующих малых частиц / А.Л. Пирозерский, Е.В. Чарная // *ФТТ*, 2010. – Т. 52. – Вып. 3. – С. 572-576.

46 Голицина, О.М. Корреляционные эффекты при формировании доменной структуры одноосного сегнетоэлектрика вблизи фазового перехода / О.М. Голицина // *Вестник ВГУ, серия: физика, математика*, 2013. – № 2. – С. 54-60.

47 Gonzalo, J.A. Monte-Carlo approach to Phase transitions / J.A. Gonzalo, C. Wang // *Madrid: Asociacion Espanola Ciencia y Cultura*, 2008 – 301 p.

48 Wang, C.L. Monte Carlo Simulation of First Order Phase Transitions / C.L. Wang, J.C. Li, M.L. Zhao, M.I. Marqués, C. Aragó, J.A. Gonzalo // *Ferroelectrics*, 2010. – V. 401(1). – P. 3-8.

49 Srinoi, S. Investigation of temperature-driven ferroelectric phase-transition via modified Heisenberg model: the Monte-Carlo simulation / S. Srinoi, Y. Laosiritaworn // *Advanced Material Research*, 2013. – V. 813. – P. 315-318.

50 Yao, X. Monte-Carlo simulation on ferroelectric response to magnetic field in an elastic Ising spin chain / X. Yao, V.C. Lo, J.-M. Liu // *Journal of Appl. Phys.*, 2009. – V. 106. – P. 013903(5).

51 Granzow, T. Change from 3D-Ising to random field-Ising-model criticality in a uniaxial relaxor ferroelectrics / T. Granzow, Th. Woike, M. Wohlecke, M. Imlau, W. Kleemann // *Phys. Rev. Letter*, 2004. – V. 92. – No 6. – P. 065701(4).

52 Delgado, M. The freezing mechanisms of perovskite relaxor ferroelectrics and the thermodynamic stability of their ferroelectric states / M. Delgado // *PhD diss. ... College of the University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois*, 2009. – 65 p.

53 Детченков И.Л., Рвачева М.И., Масловская А.Г. Применение метода Монте-Карло в задачах моделирования фазовых переходов // *Вестник АмГУ. Серия «Естественные и экономические науки»*. – Благовещенск: АмГУ, 2015. – Вып. 71. – С. 33-38.

54 Blinc, R. Critical behavior of ferroelectric TGS and deuterated TGS / R. Blinc, M. Burgar, A. Levstik // *Solid State Comm.*, 1970. – V. 8. – P. 317-321.

55 Delgado, M. Phase Transitions in Relaxor Ferroelectrics / M. Delgado. Nigel Goldenfeld's Group Publ. [Эл. ресурс], 2015. – 11 p. Режим доступа: http://guava.physics.uiuc.edu/~nigel/courses/563/Essays_2005/PDF/delgado.pdf

56 Струков Б.А. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах / Б.А. Струков, А.П. Леванюк. – М: Наука, 1995. – 304 с.

57 Сонин, А.С. Введение в сегнетоэлектричества / А.С. Сонин, Б.А. Струков – М.: Высшая школа, 1970. – 271 с.

58 Быковский, М.С. Моделирование температурных характеристик одноосных сегнетоэлектриков в окрестности фазовых переходов / М.С. Быковский, А.Г. Масловская // В кн.: «Молодёжь и наука: актуальные проблемы фундаментальных и прикладных исследований»: сборник материалов II Всероссийской национальной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных – Комсомольск-на-Амуре: Изд-во КНАГУ, 2019. – С. 244-247.

59 Быковский, М.С. Сегнетоэлектрический фазовый переход в концепции двумерной модели Изинга: компьютерное моделирование методом Монте-Карло / М.С. Быковский // В кн.: «Молодежь XXI века: шаг в будущее»: сборник материалов XX региональной научно-практической конференции – Благовещенск: Изд-во АмГУ, 2019. – Т. 3. – С. 148-150.

60 Быковский, М.С. Двумерная модель Изинга сегнетоэлектрического фазового перехода: реализация методом Монте-Карло / М.С. Быковский, А.Г. Масловская // В кн.: Материалы XIV региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», Благовещенск: Изд-во Амурского государственного университета, 2019. – С. 14-17.

Приложение А

Листинг компьютерной программы, реализующей двумерную модель Изинга и ее модификацию

```
% Программа Vysov1
clc; close all; clear all;
Nspin=1024;
J=1;
h=0;
% T=1.5;
T=0.1:0.2:4.1;% температура - изменяется в диапазоне
kT=1;%константа Больцмана
m0=1;
NTrial=10000; %Число испытаний в алгоритме Метрополиса
ts=tic; % подсчет времени вычислений
Et=zeros(length(T),1);
Mt=zeros(length(T),1);
for i=1:length(T)
    % Et=0; % для каждого момента времени будет итоговое значение
    энергии всей конфигурации
    % Mt=0; % для каждого момента времени будет итоговое значение маг-
    нитного момента дял всей конфигурации
    [Estart,Sstart,Mstart]=InitSp(Nspin,J,h); % начальное положе-
    ние спинов, начальное значение энергии и магнитного момента

    [E,Accept,M,s]=IsingWang(Nspin,J,h,NTrial,T(i),Sstart,Mstart,Estar
t);%алгоритм Метрополиса
    j=1:length(E)-2000;
    E1(j)=E(j+2000);
    M1(j)=M(j+2000);
    Et(i)=mean(E1);
    Mt(i)=mean(M1);
    E2=E1.^2;
    M2=M1.^2;
    c(i)=(1/T(i).^2)*(mean(E2)-mean(E1).^2);
    xi(i)=(1/T(i))*(mean(M2)-mean(M1).^2);
    mm(i)=mean(M1);
end
t=0.1:0.01:4.1;% температура для аппроксимации
c=c./abs(max(c));
Mt=Mt./abs(max(Mt));
xi=xi./abs(max(xi));
xs=spline(T,xi,t);
cs=spline(T,c,t);
ms=spline(T,Mt,t);
es=spline(T,Et,t);
toc(ts)
figure(4)
plot(T,c,'ro',t,cs,'r-'); grid on; title('Зависимость теплоемкости
от температуры')
```

```

figure(5)
plot(T,xi,'bo',t,xs,'b-');grid on; title('Зависимость восприимчи-
вости от температуры')
figure(6)
plot(T,Mt,'ko',t,ms,'k-'); grid on; title('Зависимость поляризации
от температуры')
% Программа Vysov2
clc; close all; clear all;
Nspin=1024;
J=1;
h=-2.5:0.1:2.5;
T=8.0;% фиксируем температуру
kT=1;%константа Больцмана
m0=1;
NTrial=10000; %Число испытаний в алгоритме Метрополиса
ts=tic; % подсчет времени вычислений
Et=zeros(length(h),1);
Mt=zeros(length(h),1);
for i=1:length(h)
% Et=0; % для каждого момента времени будет итоговое значение
энергии всей конфигурации
% Mt=0; % для каждого момента времени будет итоговое значение маг-
нитного момента дял всей конфигурации
[Estart,Sstart,Mstart]=InitSp(Nspin,J,h(i)); % начальное поло-
жение спинов, начальное значение энергии и магнитного момента

[E,Accept,M,s]=IsingWang(Nspin,J,h(i),NTrial,T,Sstart,Mstart,Estar
t);%алгоритм Метрополиса
j=1:length(E)-2000;
E1(j)=E(j+2000);
M1(j)=M(j+2000);
Et(i)=mean(E1);
Mt(i)=mean(M1);
E2=E1.^2;
M2=M1.^2;
c(i)=(1/T.^2)*(mean(E2)-mean(E1).^2);
xi(i)=(1/T)*(mean(M2)-mean(M1).^2);
mm(i)=mean(M1);
end
toc(ts)
Mt=Mt./abs(max(Mt));
figure(1);
plot(h,Mt,'b-','-h,-Mt,'LineWidth',1); grid on;
ylim([-1.1 1.1])

% Функция InitSp
function [E,s,M]=InitSp(Nspin,J,h)
% функция возвращает значение энергии E, начальную конфигурацию s и
% значение полного магнитного момента всей системы M в начальный
момент
% времени
% вход: Nspin - общее число спинов, J - потенциал обменного взаи-
модействия,

```

```

% h - значение магнитного поля (В в мат модели)
Ns=Nspin.^0.5; % строится квадратная решетка, например, Ns*Ns=256,
т.е. Ns=16 спинов вдоль стороны квадрата
M=0; % начальное значение магнитного момента
s=zeros(Ns); % инициализация массива значений спинов
for i=1:Ns % циклы по решетке: строки и столбцы
    for j=1:Ns
        % первый вариант в комментарии - для случая, если начальная конфигу-
        рация
        % соответствует антиферромагнитному состоянию - спины ориентиро-
        ваны в шахматном порядке
            %if (round((i+j)/2))~=((i+j)/2)
                s(i,j)=1;
            %else
                % s(i,j)=-1;
            % end
        % вариант начальной конфигурации, при котором все спины направле-
        ны вверх -
        % ферромагнитное состояние
            s(i,j)=1;
            M=M+s(i,j); % считаем общее значение намагниченности систе-
            мы
        end
    end
end
E=Espin(Nspin,s,h,J); % считаем энергию всей системы
% Функция IsingWang
function [E,Accept,M,s] =
IsingWang(Nspin,J,h,NTrial,T,Sstart,Mstart,Estart)
% ВЫХОД: функция возвращает мгновенные значения энергии системы E,
% число принятия Accept,
% мгновенный магнитный момент системы M,
% мгновенные конфигурации спинов системы s
% ВХОД:
% Nspin - число спинов системы
% h - напряженность внешнего магнитного поля
% J - константа обменного взаимодействия
% NTrial - число испытаний число испытаний в алгоритме Метрополиса
% T - температура системы
% Sstart - матрица с данными об ориентации спинов в начальный мо-
мент времени
% Mstart - значение магнитного момента системы в начальный момент
времени
% Estart - энергия системы в начальный момент времени
kT=1;
Ns=Nspin.^0.5;
M=zeros(Nspin*NTrial,1);
M(1)=Mstart;
%S=Sstart;
E=zeros(Nspin*NTrial,1);
E(1)=Estart;
s=Sstart;
figure(1);
surf(s); colormap([0 0 0; 1 1 1]); view(2)

```

```

Accept=0;
k=2; %номер конфигурации, счетчик
out=false;
for i=1:NTrial
    for j=1:Nspin
        Ix=floor(Ns*rand(1)+1);%случайный выбор номера узла для
опрокидывная спина
        Iy=floor(Ns*rand(1)+1);
        % проверка и задание периодических граничных условий
        Left=Iy-1; Left2=Iy-2; Left3=Iy-3;

        if Iy==1
            Left=Ns; Left2=Ns-1; Left3=Ns-2;
        end
        if Iy==2
            Left=Iy-1; Left2=Ns; Left3=Ns-1;
        end
        if Iy==3
            Left=Iy-1; Left2=Iy-2; Left3=Ns;
        end
        %%%
        Right=Iy+1; Right2=Iy+2; Right3=Iy+3;
        if Iy==Ns
            Right=1; Right2=2; Right3=3;
        end
        if Iy==Ns-1
            Right=Ns; Right2=1; Right3=2;
        end
        if Iy==Ns-2
            Right=Ns-1; Right2=Ns; Right3=1;
        end
        %%%
        %%%
        Up=Ix-1; Up2=Ix-2; Up3=Ix-3;
        if Ix==1
            Up=Ns; Up2=Ns-1; Up3=Ns-2;
        end
        if Ix==2
            Up=1; Up2=Ns; Up3=Ns-1;
        end
        if Ix==3
            Up=2; Up2=1; Up3=Ns;
        end
        %%%
        %%%
        Down=Ix+1; Down2=Ix+2; Down3=Ix+3;
        if Ix==Ns
            Down=1; Down2=2; Down3=3;
        end
        if Ix==Ns-1
            Down=Ns; Down2=1; Down3=2;
        end
        if Ix==Ns-2

```

```

        Down=Ns-1; Down2=Ns; Down3=1;
    end
    %%%%%%%%%
    Temp=s(Ix,Iy);% буферная переменная - запоминаем значение-
положение спина
    s(Ix,Iy)=-s(Ix,Iy);%испытание - переворот спина
    sig=5;
    Sum1=s(Ix,Right)+s(Ix,Left)+s(Up,Iy)+s(Down,Iy);
    Sum2=s(Ix,Right2)+s(Ix,Left2)+s(Up2,Iy)+s(Down2,Iy);
    Sum3=s(Ix,Right3)+s(Ix,Left3)+s(Up3,Iy)+s(Down3,Iy);
    Sum4=s(Up,Left)+s(Up,Right)+s(Down,Left)+s(Down,Right);

    Sum5=s(Up,Left2)+s(Up2,Left)+s(Up,Right2)+s(Up2,Right)+s(Down,Left
2)+s(Down2,Left)+s(Down,Right2)+s(Down2,Right);

    Sum6=s(Up2,Left2)+s(Up2,Right2)+s(Down2,Left2)+s(Down2,Right2);
    %
    de=-
2*s(Ix,Iy)*(h+J*Sum1+J*Sum2/(2^sig)+J*Sum3/(3^sig)+J*Sum4/((sqrt(2
))^sig)+J*Sum5/((sqrt(3))^sig));% вычисляем изменение энергии
    de=-
s(Ix,Iy)*0.5*(h+J*Sum1+J*Sum2./(2.^sig)+J*Sum3./(3.^sig)+J*Sum4./((
sqrt(2)).^sig)+J*Sum5./((sqrt(3)).^sig)+J*Sum6./(2.^sig));
    if or(de<=0,rand(1)<=exp(-de./(kT*T))) % или энергетически
выгоднее или попали в доверительный интервал для "невыгодной"
энергии
        % переворот принят
        Асcept=Асcept+1;
        E(k)=E(k-1)+de;
        M(k)=M(k-1)+2*s(Ix,Iy);
    else
        s(Ix,Iy)=Temp;% оставляем "старую" конфигурацию
        E(k)=E(k-1);
        M(k)=M(k-1);
    end
end

    if k==5000 % делаем "срезы" для изображений в текущие мо-
менты времени
        figure(2);
        surf(s); colormap([0 0 0; 1 1 1]);view(2)
    else if k==10000
        figure(3);
        surf(s); colormap([0 0 0; 1 1 1]);view(2)
    end
end
k=k+1;
end
end
Асcept=Асcept/NTrial/Nspin;% среднее число принятия решений

% Функция Espin
function z=Espin(Nspin,s,h,J)
% функция, возвращающая энергию для заданной конфигурации спинов

```

```

% Nspin - число спинов системы
% s - матрица положений спинов (1- вверх, -1 - вниз)
% h - напряженность внешнего магнитного поля
% J - константа обменного взаимодействия
Ns=Nspin.^0.5;
E=0;
for i=1:Ns
    for j=1:Ns
        % проверка-задание периодических граничных условий
        if j==1
            Left=Ns;
        else
            Left=j-1;
        end
        if j==Ns
            Right=1;
        else
            Right=j+1;
        end
        if i==Ns
            Up=1;
        else
            Up=i+1;
        end
        if i==1
            Down=Ns;
        else
            Down=i-1;
        end
        % энергия системы
        E=E-s(i,j)*(h+J*(s(i,Left)+s(i,Right)+s(Down,j)+s(Up,j)));
    end
end
z=E;

```