

Монте-Карло моделирование двумерного электронного газа на неупорядоченной решетке-матрице

В.В. Славин

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: slavin@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 9 сентября 2009 г.

Изучены низкотемпературные термодинамические свойства двумерного электронного газа на неупорядоченной решетке-матрице в пределе низкой концентрации электронов. Предложен оригинальный алгоритм Монте-Карло моделирования, позволяющий эффективно изучать свойства данной системы. Обнаружена ненулевая остаточная энтропия на частицу и определено ее значение. В рамках предложенной модели показано, что в низкотемпературной зависимости диэлектрической восприимчивости как функции внешнего электрического поля присутствует излом («cusp»), характерный для спин-стекляных систем.

Досліджено низкотемпературні термодинамічні властивості двовимірного електронного газу на неупорядкованої ґратці-матриці у границі низької концентрації електронів. Запропоновано оригінальний алгоритм Монте-Карло моделювання, що дозволяє ефективно вивчати властивості даної системи. Виявлено ненульову залишкову ентропію на частинку і визначено її значення. В рамках запропонованої моделі показано, що в низкотемпературній залежності діелектричної сприйнятливості як функції зовнішнього електричного поля присутній злам («cusp»), характерний для спин-скляних систем.

PACS: **05.10.-a** Вычислительный метод в статистической физике и динамике нелинейных систем;
05.20.-y Классическая статистическая механика.

Ключевые слова: обобщенный вигнеровский кристалл, термодинамика, низкоразмерные системы, неупорядоченные системы, Монте-Карло моделирование.

1. Введение

В последние годы наблюдается всплеск интереса к исследованиям низкоразмерных проводящих систем, во многом обусловленный достижениями в области технологий создания многослойных структур на основе металлооксидов, а также одно- и двумерных искусственных проводящих систем — сверхрешеток на базе различного рода полупроводников. Среди последних особое внимание уделяется узкозонным проводникам с дальнедействующим потенциалом межэлектронного отталкивания [1–10], которые обладают специфическими и весьма интересными особенностями. Эти особенности качественно отличают данные системы не только от металлов и полупроводников, но и от проводников так называемого хаббардовского типа с локальным электрон-электронным взаимодействием. Одной из таких особенностей является специфическое макроскопическое локализованное электронное со-

стояние, получившее название «замороженная электронная фаза» (ЗЭФ). Такое состояние возникает как комбинация дальнедействующего потенциала межэлектронного отталкивания $u(r)$ и дискретности узкозонной электронной динамики. Это означает, что перемещение электронов по проводнику осуществляется путем «прыжков» между ближайшими узлами решетки-матрицы (РМ) с эквивалентными атомными орбиталями. ЗЭФ существует в широкой области параметров, определенной следующим критерием [4]:

$$t / \delta u \leq 1.$$

Здесь t — ширина зоны, $\delta u \sim (a_0 / \bar{l})^2 u(\bar{l})$ — типичное изменение $u(r)$ при электронном прыжке на соседний узел РМ, a_0 — характерное межатомное расстояние РМ и \bar{l} — среднее расстояние между электронами. В такой ситуации происходит полное разрушение блоховских состояний и электроны становятся локализованными в пределах квантовых ловушек атомного размера.

В одномерном случае свойства ЗЭФ изучены достаточно хорошо. Основное состояние было построено Хаббардом [3]. Он рассмотрел случай, когда $t=0$, РМ упорядочена, а $u(r)$ удовлетворяет ряду требований: 1) $u(r) > 0$; 2) $u(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем $1/r$; 3) $u(r)$ всюду выпуклая функция. Было показано, что при нуле температур и при произвольной концентрации электронов образуется упорядоченная структура [1–3], получившая название «обобщенный вигнеровский кристалл». Недавно результаты Хаббарда были обобщены на случай произвольного $u(r)$ [7]. Низкотемпературная термодинамика такой системы изучена в [5], а влияние динамических эффектов рассмотрено в [8]. Существует также несколько работ, посвященных влиянию беспорядка РМ на термодинамические и кинетические свойства одномерного обобщенного вигнеровского кристалла [9,10].

Свойства двумерной ЗЭФ изучены значительно хуже. В то же время подавляющее количество реальных объектов, в которых реализуется ЗЭФ, являются именно двумерными. В настоящее время известна структура основного состояния при $t=0$ на упорядоченной РМ [6]. Однако большинство систем данного сорта являются неупорядоченными, и вопрос о влиянии беспорядка РМ на низкотемпературное поведение и особенности основного состояния крайне актуально. Например, в полупроводниках на основе MOSFET этот беспорядок обусловлен хаотическим характером распределения примесей [11], во многих наноструктурах [12,13] беспорядок определяется разбросом величин туннельных связей.

В работе [14] была построена низкотемпературная термодинамика двумерной ЗЭФ на неупорядоченной РМ при $t=0$ в пределе высокой концентрации электронов. Однако в большинстве двумерных ЗЭФ систем реализуется обратный предел. Основной целью данной работы как раз является построение низкотемпературной термодинамики двумерной ЗЭФ на неупорядоченной РМ в пределе низкой концентрации электронов.

2. Гамильтониан

В данной работе изучены свойства классического ансамбля электронов на двумерной неупорядоченной РМ. Гамильтониан такой системы может быть записан в виде

$$\mathcal{H}(n_1, n_2, \dots, n_N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N u(|\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j|) n_i n_j + \sum_{i=1}^N n_i (\phi(\mathbf{a}_i) - \mu). \quad (1)$$

Здесь N — число узлов решетки-матрицы, \mathbf{a}_i — координаты этих узлов, являющиеся случайными вели-

чинами с функцией распределения $w(\mathbf{a})^*$; $n_i \equiv n_{\mathbf{a}_i}$ — микроскопические переменные ($n_i = 0, 1$); μ — химический потенциал; $\phi(\mathbf{r})$ — потенциал внешнего электрического поля, приложенного в плоскости РМ (будем работать в системе единиц, где заряд электрона $e=1$).

В рамках такой модели, получившей название модели бесспиновых фермионов, отсутствуют слагаемые, описывающие туннелирование электронов с узла на узел, а также учитывающие взаимодействие электронов с противоположными спинами на одном узле.

Обозначим $\mathcal{R} = \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N\}$ — набор векторов решетки-матрицы. Этот набор полностью определяет данную реализацию системы. Свободная энергия F записывается в виде

$$F = -T \left\langle \ln \sum_{\{n_i\}} \exp \left(- \frac{\mathcal{H}(n_1, n_2, \dots, n_N, \phi, \mu, \mathcal{R})}{T} \right) \right\rangle_{\{\mathcal{R}\}}, \quad (2)$$

где T — температура, измеряемая в энергетических единицах, символом $\sum_{\{n_i\}}$ обозначено суммирование по всем возможным наборам микроскопических переменных n_i , а символ $\langle \dots \rangle_{\{\mathcal{R}\}}$ означает усреднение по всем возможным реализациям.

В случае высокой концентрации, когда количество электронов $M = \sum_{i=1}^N n_i \lesssim N$, при вычислении свободной энергии (2) можно ограничиться взаимодействием между электронами на ближайших узлах РМ и воспользоваться методом трансфер-матриц [14].

Как указывалось во Введении, в данной работе изучен противоположный случай низкой электронной концентрации $\rho = M/N \ll 1$, который гораздо чаще реализуется на практике. В указанном пределе приближение, рассмотренное в [14], становится неприменимым, поскольку среднее расстояние между узлами РМ a_0 много меньше типичного межэлектронного расстояния $\bar{l} \sim a_0 / \sqrt{\rho}$.

В этом случае удобно перейти от изучения системы при фиксированном μ к системе с заданной концентрацией ρ и от микроскопических переменных n_i к координатам электронов \mathbf{r}_i . Гамильтониан (1) приобретает вид

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_M) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j \in \mathcal{R}}}^M u(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \sum_{i=1}^M \phi(\mathbf{r}_i). \quad (3)$$

Выражение (3) представляет собой гамильтониан двумерного вигнеровского кристалла (ВК) при concentra-

* В случае, когда векторы \mathbf{a}_i образуют регулярную решетку (т.е. обобщенный вигнеровский кристалл), функция $w(\mathbf{a})$, очевидно, имеет вид $w(\mathbf{a}) = \sum_{m,n} \delta(\mathbf{a} - m\mathbf{c}_1 + n\mathbf{c}_2)$, где $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2$ — примитивные трансляционные векторы обобщенного вигнеровского кристалла.

ции частиц ρ и с дополнительным ограничением на позиции электронов: $\mathbf{r}_j \in \mathcal{R}$. Без данного ограничения и при $\phi = \text{const}$ конфигурация основного состояния хорошо известна и представляет собой правильную треугольную решетку с межэлектронным расстоянием $\sim a_0 / \sqrt{\rho}$. Наше основное предположение состоит в том, что в рассматриваемой области параметров ($\rho \ll 1$, $T \ll u(\bar{l})$) конфигурации электронов, дающих основной вклад в статистическую сумму, будут представлять собой слабдеформированный ВК. Представить себе предложенную модель можно следующим образом. Мысленно наложим случайным образом решетку ВК с концентрацией ρ на изучаемую систему. Обозначим посредством \mathbf{R}_i ($i = 1, \dots, M$) радиусы-векторы данного ВК, а R_{WC} — длину его примитивных трансляционных векторов. Вокруг каждого узла \mathbf{R}_i выделим произвольным образом небольшую область изучаемой системы. Для удобства будем выбирать эти области таким образом, чтобы они содержали одинаковое количество узлов РМ. Обозначим это число $\nu = 2, 3, \dots$, а данные области будем называть «кластерами». Выражение «небольшая область» означает, что площади «кластеров» $\sim \nu a_0^2$ много меньше площади элементарной ячейки ВК $\sim a_0^2 / \rho$. Таким образом, система разбивается на «кластеры», в каждом из которых находится по одному электрону. Каждый электрон может занимать один из ν узлов РМ внутри «кластера».

Введем теперь в каждом «кластере» локальную систему координат, привязанную к \mathbf{R}_i . Радиус-вектор электрона в «кластере» i можно записать в виде $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i + \xi_i^\alpha$, где ξ_i^α — локальная координата электрона, находящегося в i -м «кластере» и занимающего в

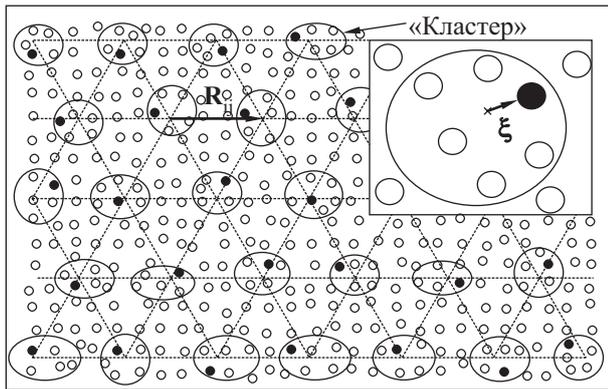


Рис. 1. Схематическое изображение случайной конфигурации системы. Пунктирной линией обозначена соответствующая решетка ВК. Пустые кружки — свободные узлы РМ, закрашенные — узлы РМ, занятые электронами. В каждом «кластере» находятся 5 узлов РМ ($\nu = 5$). На вставке изображен один из «кластеров» в увеличенном масштабе. Значок \times обозначен соответствующий узел ВК.

нем α -й узел РМ ($\alpha = 1, \dots, \nu$). Схематически «кластеры» изображены на рис. 1. Очевидно, что векторы ξ_i^α зависят от реализации системы, т.е. $\xi_i^\alpha = \xi_i^\alpha(\mathcal{R})$, поскольку $\mathbf{R}_i + \xi_i^\alpha \in \mathcal{R}$. Гамильтониан (3), записанный в терминах микроскопических переменных ξ_i^α , имеет вид

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^M u(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j + \xi_i^\alpha - \xi_j^\beta|) + \sum_{i=1}^M \phi(\mathbf{R}_i + \xi_i^\alpha), \quad (4)$$

где $\alpha, \beta = 1, \dots, \nu$; $u(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j + \xi_i^\alpha - \xi_j^\beta)$ представляет собой энергию взаимодействия электрона, занимающего узел α РМ в «кластере» i , с таковым, занимающим узел β РМ в «кластере» j .

В гамильтониане (4) можно ограничиться взаимодействием между ближайшими соседями. Важно подчеркнуть, что в отличие от гамильтониана (1), где приближение ближайших соседей означает учет взаимодействия между электронами на соседних узлах РМ, в гамильтониане (4) данное приближение означает учет взаимодействия между соседними электронами, находящимися на расстояниях $\sim \bar{l}$. Иными словами, учитывается взаимодействие электрона, находящегося в i -м «кластере», с электронами в шести соседних «кластерах».

Как указывалось выше, основное предположение данной статьи состоит в том, что изучаемая система представляет собой слабдеформированный ВК. Это предположение, в свою очередь, эквивалентно выполнению неравенства $|\xi| / R_{WC} \ll 1$. Разложим в гамильтониане (4) $\phi(\mathbf{r})$ и $u(|\mathbf{r}|)$ по данному малому параметру, ограничившись слагаемыми первого и второго порядка соответственно. Кроме того, будем рассматривать случай однородного внешнего электрического поля ($\mathbf{E} = -\nabla\phi = \text{const}$). Тогда, опустив несущественные для вычислений константы M / R_{WC} и $M\phi(0)$, получаем

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2R_{WC}^2} \sum_{ij'}^M \sum_{s,t=x,y,z} (D_{ij'}^{\alpha\beta})_{s,t} (\mathbf{n}_{ij})_s (\mathbf{n}_{ij})_t - \mathbf{E} \sum_i^M \xi_i^\alpha, \quad (5)$$

где символ « \sum » означает суммирование по трем ближайшим соседям; $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) / R_{WC}$ — единичный вектор; $(D_{ij'}^{\alpha\beta})_{s,t} = 3(\xi_i^\alpha - \xi_j^\beta)_s (\xi_i^\alpha - \xi_j^\beta)_t - (\xi_i^\alpha - \xi_j^\beta)^2 \delta_{s,t}$ — тензор квадрупольных моментов; индексы s и t принимают значения x и y .

Первое слагаемое представляет собой потенциал поля пар «диполей» $\xi_i^\alpha - \xi_j^\beta$. Начало каждого «диполя» совпадает с узлом ВК, а конец — с узлом РМ соответствующего «кластера». С этой точки зрения «диполь» ξ_i^α можно рассматривать как своеобразную пару: электрон, покинувший i -й узел ВК (т.е. дырка), + электрон, занимающий α -й узел РМ i -го «кластера». Второе слагаемое есть энергия взаимодействия «диполей» с электрическим полем \mathbf{E} .

Свободная энергия, записанная в терминах ξ , равна

$$F(T, \mathbf{E}) = -T \left\langle \ln \sum_{k_1=1}^{\nu} \sum_{k_2=1}^{\nu} \dots \sum_{k_M=1}^{\nu} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}(\xi_1^{k_1}, \xi_2^{k_2}, \dots, \xi_M^{k_M}, \mathbf{E}, \mathcal{R})}{T} \right) \right\rangle_{\{\mathcal{R}\}} \quad (6)$$

Для численного изучения низкотемпературной термодинамики (6) использован метод трансфер-матриц [14], позволяющий точно вычислять свободную энергию для систем малого размера ($M \sim 150$), а также разработан оригинальный параллельный алгоритм мультиканонического Монте-Карло моделирования, позволяющий приближенно вычислять термодинамические потенциалы системы достаточно большого размера ($M \sim 10^5$). Суть данного алгоритма изложена в следующем разделе.

3. Метод параллельного мультиканонического Монте-Карло моделирования

Как известно, в классическом методе Монте-Карло вычисление термодинамических средних осуществляется путем последовательной одночастичной релаксации системы из некоторого начального состояния (случайного, либо специальным образом сгенерированного) в состояние, соответствующее термодинамическому равновесию. Термодинамическое среднее $\langle O \rangle$, равное

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \times \sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} O(x_1, x_2, \dots, x_N) \exp \left(-\frac{\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_N)}{T} \right), \quad (7)$$

где статистическая сумма

$$Z = \sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}(x_1, x_2, \dots, x_N)}{T} \right), \quad (8)$$

в рамках метода Монте-Карло заменяется средним арифметическим (закон больших чисел):

$$\langle O \rangle = \frac{1}{K} \sum_{\{x_i\}} O(x_1, x_2, \dots, x_N),$$

Здесь K — число Монте-Карло шагов ($K \gg 1$), $\{x_i\}$ означает суммирование по случайным выборкам микроскопических переменных, переход от одной выборки $\{x_i\}$ к другой $\{x'_i\}$ осуществляется с вероятностью $w(\{x_i\} \rightarrow \{x'_i\})$. Эта вероятность определена, как известно, неоднозначно. В качестве наиболее часто применяемой w можно привести функцию Метрополиса:

$$w(\{x_i\} \rightarrow \{x'_i\}) = \frac{1}{\tau} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}(\{x'_i\}) - \mathcal{H}(\{x_i\})}{T} \right),$$

где τ — произвольная константа, определяющая шкалу времени МК моделирования. Обычно τ полагается равным 1. Достоинства и недостатки такого подхода хорошо известны. К первым следует отнести простоту и универсальность. Ко вторым — невозможность непосредственного вычисления Z и, как следствие, невозможность прямого вычисления термодинамических потенциалов системы (например, свободной энергии и энтропии). Кроме того, данный метод практически неприменим при изучении неупорядоченных систем, где одночастичная релаксация происходит крайне медленно из-за большого количества локальных барьеров потенциального профиля гамильтониана.

Одной из весьма эффективных альтернатив рассмотренному выше методу является так называемый мультиканонический метод МК. В рамках этого метода суммирование по конфигурациям в (7), (8) заменяется суммированием по уровням энергий E_i :

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i O(E_i) n(E_i) \exp \left(-\frac{E_i}{T} \right),$$

$$Z = \sum_i n(E_i) \exp \left(-\frac{E_i}{T} \right),$$

где $n(E)$ — плотность состояний (число конфигураций с энергией, лежащей в интервале $[E, E + \delta E]$, $\delta E \ll E$).

Введем обозначения: $\omega_B(E) = \exp \left(-\frac{E}{T} \right)$ и

$$P_B(E) = n(E) \omega_B(E), \quad (9)$$

тогда

$$Z = \sum_i P_B(E_i),$$

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i O(E_i) P_B(E_i).$$

Функция (9) имеет вполне определенный физический смысл: $P_B(E)$ — вероятность обнаружения конфигурации с энергией, лежащей в интервале $[E, E + \delta E]$, в процессе МК моделирования. Индекс «B» указывает на больцмановский вид $\omega(E)$. $P_B(E)$ представляет собой

«острую» функцию с ярко выраженными экспоненциальными крыльями*. Очевидно, что конфигурации с энергиями, существенно отличающимися от максимума распределения (9), встречаются крайне редко. Следовательно, требуется очень большое время компьютерных вычислений, чтобы учесть вклад таких конфигураций в термодинамические характеристики системы.

Основная идея мультиканонического МК — переход от *априори* фиксированного (больцмановского) распределения $\omega_B(E)$ к некоторому $\omega_{mu}(E)$, вычисляемому в процессе МК моделирования. При этом $\omega_{mu}(E)$ должна удовлетворять условию

$$P_{mu}(E) = n(E)\omega_{mu}(E) \approx \text{const},$$

что эквивалентно

$$w_{mu}(E) \approx 1/n(E).$$

Если это условие выполнено, то в процессе МК моделирования все конфигурации будут встречаться с равной вероятностью, и время, необходимое для компьютерных вычислений термодинамических характеристик, уменьшается кратно!

После того, как функция $\omega_{mu}(E)$ определена, необходимо вернуться к реальным термодинамическим переменным:

$$Z = c_0 \sum_i \frac{\omega_B(E_i)}{\omega_{mu}(E_i)}. \quad (10)$$

Нормировочная константа c_0 находится из соотношения $Z(T \rightarrow \infty) = v^M$, где v — количество степеней свободы, а M — число частиц. Тогда

$$c_0 = \frac{v^M}{\sum_i \frac{1}{\omega_{mu}(E_i)}}.$$

Важно отметить, что данный метод позволяет непосредственно вычислять $Z(T)$, а следовательно, и все термодинамические потенциалы системы.

Существует несколько основных подходов к вычислению $\omega_{mu}(E)$ [15–19]. Наиболее распространенный из них — так называемый гистограммный метод, в рамках которого $\omega_{mu}(E)$ ищется в виде

$$\omega_{mu}(E) = \exp[-\beta(E)E + a(E)],$$

функция $\beta(E)$ называется микроканонической температурой, а $a(E)$ — микроканонической свободной энергией.

С другой стороны,

$$\omega_{mu}(E) = 1/n(E) = \exp(-S(E)),$$

где $S(E)$ — энтропия системы, пропорциональная $\log(P_{mu}(E))$. Поскольку в методе МК фигурирует не сама $\omega_{mu}(E)$, а вероятность перехода, равная

$$w(E \rightarrow E') = \omega_{mu}(E) / \omega_{mu}(E') = \exp(-\beta(E)\varepsilon), \quad (11)$$

$$\varepsilon = E' - E,$$

для проведения моделирования необходима лишь функция $\beta(E)$. Эта функция вычисляется при помощи итерационной процедуры. Функция $a(E)$ потребуется после завершения МК моделирования для вычисления (10). Методы восстановления $a(E)$ по $\beta(E)$ и $\omega(E)$ описаны в [16]. К недостаткам данного подхода следует отнести тот факт, что универсальной итерационной процедуры не существует: фактически, для каждой модели неупорядоченной системы приходится строить собственный, оптимальный алгоритм. Автором был разработан оригинальный алгоритм вычисления $\beta(E)$, тестирование которого показало его достаточную эффективность и высокую универсальность. Суть предложенного алгоритма состоит в следующем. Определим функцию

$$h^n(E) = \max\{h_0, P_{mu}^n(E)\}.$$

Здесь h_0 — некоторая константа (обычно равная единице), а верхний индекс n — номер МК итерации. Вычисляемая в процессе МК моделирования функция P_{mu}^n может принимать нулевые значения вдали от максимума распределения, а интересующая нас функция $\beta(E)$, по определению, равна

$$\beta(E) = \frac{\partial S(E)}{\partial E} = \frac{\partial \log(P_{mu}(E))}{\partial E}. \quad (12)$$

Чтобы избежать появления бесконечных значений логарифма, введено ограничение снизу на $P_{mu}^n(E)$ константой h_0 . Функция $h^n(E)$ обычно называется гистограммой. Заменяя производную (12) на конечно-разностное выражение

$$\frac{1}{\varepsilon} \log[h(E + \varepsilon) / h(E)] \quad (\varepsilon \ll E), \quad (13)$$

определим следующую рекуррентную схему. Выделим энергетический интервал $[E_{\min}, E_{\max}]$, в котором будет производиться Монте-Карло моделирование. На первом шаге МК моделирования примем $\beta^1(E) = 0 \forall E \in [E_{\min}, E_{\max}]$. Вычислим $P_{mu}^1(E)$, а следовательно, и $h^1(E)$. Типичный вид $h^1(E)$ приведен на рис. 2,а.

* Исключения составляют окрестности фазовых переходов, где $P_B(E)$ демонстрирует двугорбое поведение.

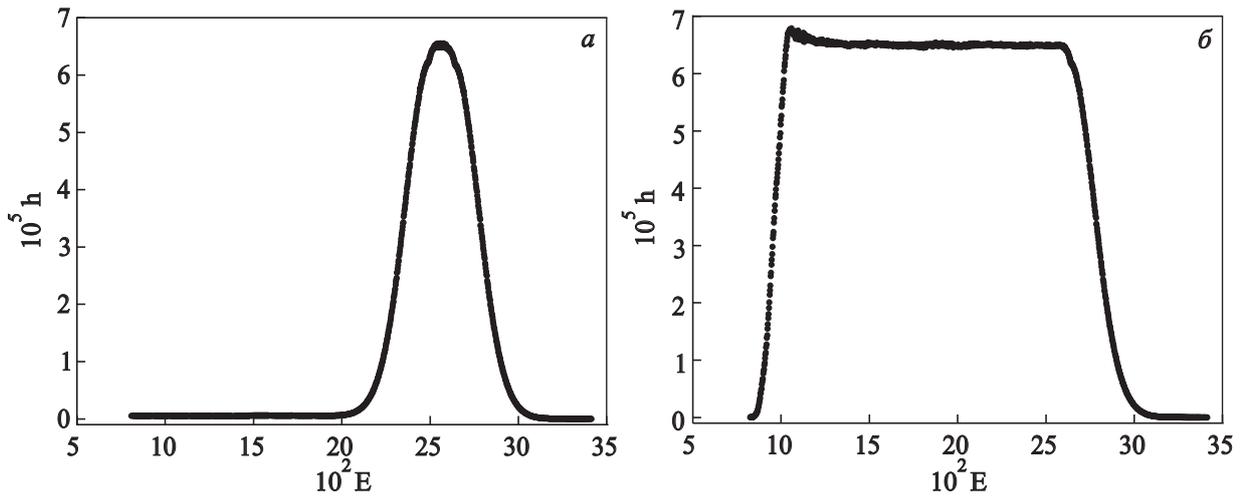


Рис. 2. Типичные зависимости начального (а) и конечного (б) распределения $h(E)$.

Вычислим E_{\min}^1 и E_{\max}^1 — минимальное и максимальное значения энергий распределения $P_{mu}^1(E)$ и медиану этого распределения:

$$E_{md} = \frac{\sum_i E_i h^1(E_i)}{\sum_i h^1(E_i)}.$$

Здесь суммирование ведется по всем энергиям в интервале $[E_{\min}^1, E_{\max}^1]$. Все $\beta(E)$ с $E \geq E_{md}$ оставим без

изменения, а для остальных $\beta(E)$ определим рекурсию в соответствии с (13):

$$\beta^2(E) = \beta^1(E) + \frac{1}{E_{md} - E} \log \left(\frac{h_{mu}^1(E_{md})}{h_{mu}^1(E)} \right).$$

Повторяя указанную процедуру, окончательно получаем итерационную (рекуррентную) схему:

$$\beta^{n+1}(E) = \begin{cases} \beta^n(E), & E > E_{md}, \\ \beta^n(E) + \frac{1}{E_{md} - E} \log \left(\frac{h_{mu}^n(E_{md})}{h_{mu}^n(E)} \right), & E_{\min}^n \leq E \leq E_{md}, \\ \beta^n(E_{\min}^n), & E < E_{\min}^n, \end{cases} \quad (14)$$

В результате последовательного применения (14) получаем $h(E)$, которая слабо отличается от константы $h(E_{md})$ во всем интервале $[E_{\min}, E_{\max}]$ (рис. 2,б).

Важно отметить, что время, необходимое для МК моделирования, удалось существенно сократить, используя распараллеливание процесса вычислений. Для этого вычислительные ресурсы были разбиты на n групп, содержащие по m процессов. Во всех группах независимо создавались свои реализации системы (т.е. свои наборы переменных ξ), а в каждом из m процессов генерировалась своя марковская цепочка случайных чисел, необходимая для формирования последовательности переходов из одного микроскопического состояния в другое с вероятностью (11).

После окончания очередной МК итерации в каждой группе процессов производилось усреднение насчитанных функций $h_{mu}^n(E)$. Такая процедура возможна, поскольку все эти функции соответствуют одной и той

же реализации системы. По усредненным значениям $h_{mu}^n(E)$ вычислялись вероятности переходов (11).

После завершения МК моделирования для каждой реализации вычислялся логарифм Z (10), а затем производилось усреднение по всем реализациям в (6). Схематически алгоритм параллельного мультиканонического моделирования представлен на рис. 3.

4. Результаты и обсуждение

Алгоритм (14) тестировался на стандартных (так называемых «реперных») моделях — модели Изинга и модели спинового стекла. На рис. 4 представлена температурная зависимость теплоемкости двумерного изинговского магнетика ($C = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 / T^2$), полученная методом параллельного мультиканонического МК. Для сравнения на том же рисунке представлено точное решение [20] и решение, полученное ме-

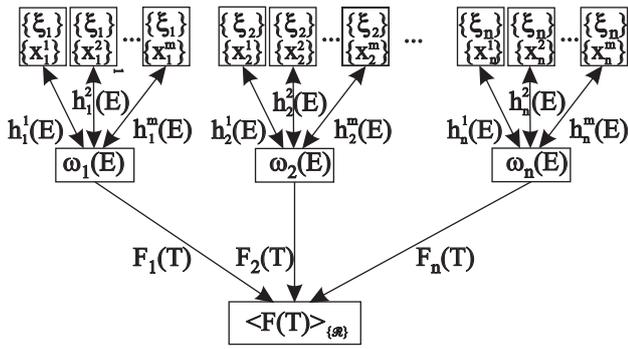


Рис. 3. Алгоритм параллельного мультиканонического Монте-Карло моделирования.

тодом трансфер-матриц [14]. Как видно, предложенный МК алгоритм хорошо описывает поведение системы даже вблизи особенности. Графики температурных зависимостей свободной энергии и энтропии, полученные путем МК моделирования, визуально неотличимы от точных решений [20] и приводить их в статье представляется нецелесообразным.

На следующем этапе проводилось МК моделирование спинового стекла с гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j'} J_{ij} s_i s_{j'}$$

где символ «'» означает суммирование по ближайшим соседям; $J_{ij} = \pm 1$, $\sum J_{ij} = 0$. Вычисленные значения остаточной энтропии на спин $s_0 = 0,073$ и энергии основного состояния на спин $e_0 = -1,402$ хорошо согласуются с данными, приведенными другими авторами и полученными другими методами [18,21]. Кроме того, результаты МК моделирования хорошо согласу-

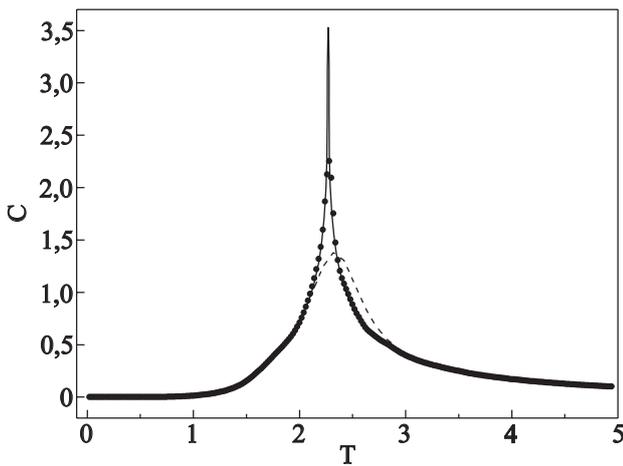


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости двумерного изинговского магнетика. Сплошная линия — точное решение [20], • — метод параллельного мультиканонического МК (96×96 спинов), пунктирная линия — метод трансфер-матриц (12×12 спинов).

ются с таковыми, полученными при помощи метода трансфер-матриц.

После этого были проведены исследования системы с гамильтонианом (5). Параметр ν принимался равным 2, т.е. в каждом «кластере» выбиралось два узла РМ. Изучались четыре модели генерации наборов векторов ξ .

1. Виртуально создавалась квадратная РМ, смещения ее узлов от идеальных позиций задавались при помощи случайных векторов $\{\rho, \theta_0\}$, где θ_0 — случайное, равномерно распределенное число, лежащее в интервале $(0, 2\pi]$, и ρ — случайное число с нормальным законом распределения. По полученной РМ вычислялись векторы ξ .

2. $\xi = \{\xi_x = \cos \theta, \xi_y = \sin \theta\}$, где θ — случайное, равномерно распределенное число, лежащее в интервале $[0, 2\pi)$. Иными словами, предполагалось, что все векторы ξ имеют единичную длину и случайную ориентацию.

3. $\xi = \{\rho, \theta_0\}$, где θ_0 — случайное число, лежащее в интервале $(0, 2\pi]$, но *общее* для всех ξ_i ($i=1, 2, \dots, M$); ρ — случайное число с нормальным законом распределения. В этом случае векторы ξ имеют случайную длину и случайное, но одинаковое для всех направление.

4. Аналогично предыдущему случаю, но ρ имело равномерный закон распределения: $0 < \rho < 1$.

Проведенное МК моделирование показало, что результаты качественно не зависят от выбора модели генерации ξ . По этой причине в статье приведены лишь результаты, относящиеся к модели 4, поскольку она обеспечивает наибольшую простоту и скорость счета. Типичная температурная зависимость теплоемкости системы, полученная методом МК и при помощи трансфер-матриц, представлена на рис. 5. На рис. 6 при-

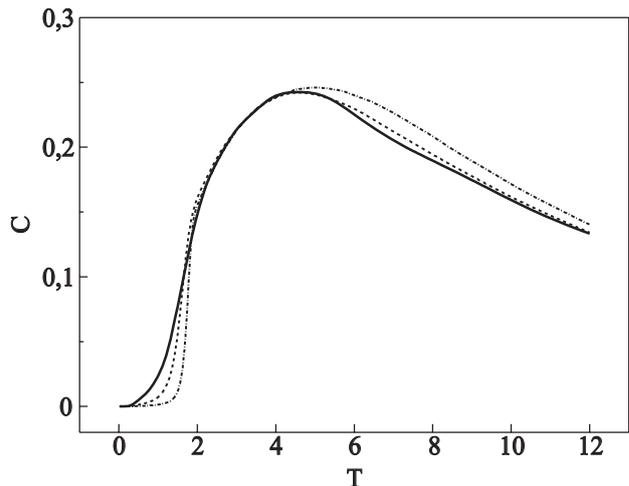


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости системы (5). Сплошная линия — результат, полученный методом трансфер-матриц (12×12 спинов); пунктирная и штрих-пунктирная линии — методы параллельного мультиканонического МК (32×32 спинов) и МК (96×96 спинов) соответственно.

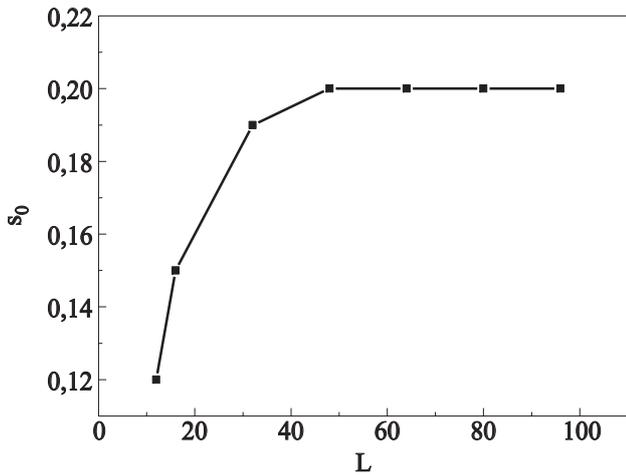


Рис. 6. Зависимость остаточной энтропии на частицу s_0 от линейного размера системы ($L = \sqrt{M}$), полученная методом МК.

ведена зависимость остаточной энтропии на частицу $s_0 = S(T \rightarrow 0, \mathbf{E} = 0) / N$ как функция линейного размера системы L . Как видно, начиная с $L \approx 50$, s_0 практически не меняется, выходя на значение $0,201 \pm 0,01$. Аналогичным образом ведет себя зависимость энергии основного состояния $e_0 = F(T \rightarrow 0, \mathbf{E} = 0) / N$ от L . Полученное таким образом значение e_0 равно $2,096 \pm 0,005$.

Отдельно изучался вопрос о влиянии внешнего электрического поля на термодинамические свойства системы. Была выбрана модель, в которой

$$(\xi_i^\alpha)_x = (\xi_i^\alpha)_y \quad \forall i, \alpha, \quad (15)$$

т.е. $\theta_0 = \pi/4$, а направление вектора \mathbf{E} выбиралось параллельным ξ . На рис. 7 представлена зависимость поляризации на частицу

$$P = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial E}$$

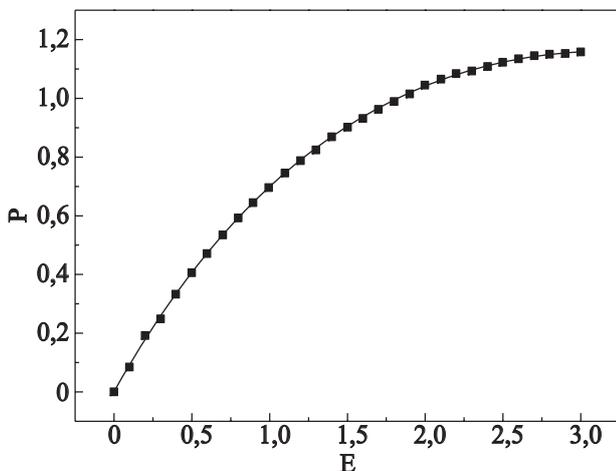


Рис. 7. Зависимость поляризации системы P от внешнего электрического поля E .

как функция приложенного поля E при $T \rightarrow 0$. Точность проведенных вычислений позволяет сделать вывод о том, что $P(T \rightarrow 0, E = 0) = 0 \pm 0,002$. Таким образом, в рамках модели (15) спонтанная поляризация отсутствует. В то же время температурная зависимость диэлектрической восприимчивости

$$c = \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right)_{E=0}$$

демонстрирует ярко выраженный излом («cusp») в области низких температур (рис. 8), характерный для спин-стекловых систем.

Проведенные исследования низкотемпературных свойств двумерного разряженного электронного газа на неупорядоченной решетке-матрице позволили выявить ряд интересных особенностей. Обнаружено ненулевое остаточное значение энтропии, что характерно для неупорядоченных дискретных систем. Кроме того, в рамках модели (15) показано, что спонтанная поляризация отсутствует. На первый взгляд этот результат кажется парадоксальным, поскольку в данной модели все «диполи» ориентированы параллельно либо антипараллельно $\mathbf{n}_0 = \{\cos \theta_0, \sin \theta_0\}$, а энергия их взаимодействия $\sim (\xi_i - \xi_j)^2$ и, следовательно, минимальна именно при параллельной взаимной ориентации «диполей». Этот парадокс, однако, объясняется просто. Рассмотрим структуру основного состояния системы. Выберем мысленно в i -м «кластере» «диполь», направленный, например, параллельно \mathbf{n}_0 . В силу случайности системы в соседнем с ним j -м «кластере» может вообще не оказаться «диполей» с нужной ориентацией (все v «диполей» «кластера» j могут оказаться антипараллельны \mathbf{n}_0). Кроме того, существует конкуренция между стремлением выстроить все «диполи» коллинеарно (и тем самым получить выигрыш энергии $\sim -2\xi_i \xi_j$) и стремлением выбрать «диполи» минимальной длины, понижая тем самым энергию $\sim \xi^2$.

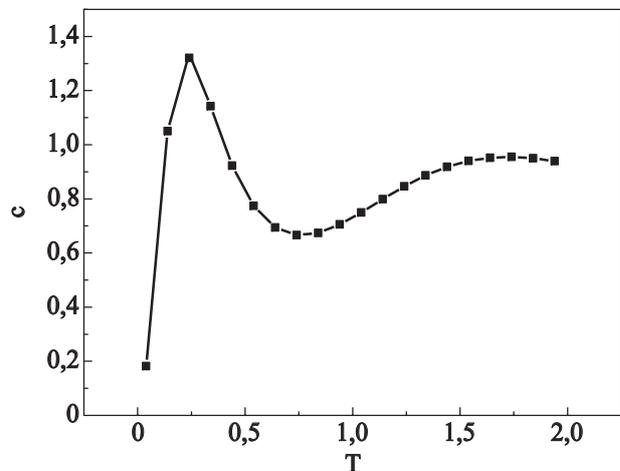


Рис. 8. Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости c .

Это значит, что даже если в j -м «кластере» существует «диполь» нужной ориентации, но его длина достаточно велика, то энергетически может оказаться выгодно проиграть за счет ориентации, но выиграть за счет длин «диполей». Таким образом, в системе образуются фрустрации в ориентации «диполей», что и приводит к исчезновению спонтанной поляризации.

МК моделирование проводилось на вычислительном кластере ФТИНТ. Было задействовано 32 ядра (8 групп по 4 процесса). Время вычисления варьировалось от нескольких минут (для системы 12×12) до 10 часов (для системы 96×96). Кроме того, проводились вычисления при помощи метода трансфер-матриц [14] для систем 12×12 . Эффективное время вычисления одной точки составляло около 1,5 мин.

В заключение автор выражает искреннюю благодарность Л.Ф. Белоусу за помощь при проведении компьютерных вычислений.

1. P. Bak and R. Bruinsma, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 249 (1982).
2. Ya.G. Synay and S.Ye. Burkov, *Russian Math. Surveys* **38**, 235 (1983).
3. J. Hubbard, *Phys. Rev.* **B17**, 494 (1978).
4. A.A. Слуткин, Л.Ю. Горелик, *ФHT* **19**, 1199 (1993) [*Low Temp. Phys.* **19**, 852 (1993)].
5. V.V. Slavin and A.A. Slutskin, *Phys. Rev.* **B54**, 8095 (1996).
6. A.A. Slutskin, V.V. Slavin, and H.A. Kovtun, *Phys. Rev.* **B61**, 14184 (2000).
7. J. Jedrzejewski and J. Miekisz, Los-Alamos, cond-mat/9903163.
8. S. Fratini, B. Valenzuela, and D. Baeriswyl, Los-Alamos, cond-mat/0209518, cond-mat/0302020, cond-mat/0309450.
9. V.V. Slavin, *Phys. Status Solidi* **B241**, 2928 (2004).
10. A.A. Slutskin and H.A. Kovtun, *Fiz. Nizk. Temp.* **31**, 784 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 594 (2005)].
11. M.S. Bello, E.I. Levin, B.I. Shklovskii, and A.L. Efros, *ЖЭТФ* **53**, 822 (1981).
12. E.Y. Andrei, *2D Electron Systems on Helium and Other Substrates*, Kluwer, New York (1997).
13. H. Nejoh and M. Aono, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 2803 (1995).
14. V.V. Slavin, *Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 197 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 149 (2009)].
15. B.A. Berg, U.E. Hensmann, and T. Celik, *Phys. Rev.* **B50**, 16444 (1994).
16. B.A. Berg, arxiv.org/abs/cond-mat/0206333v2.
17. B.A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, Singapore, MCMC (2004).
18. B.A. Berg and T. Celik, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2292 (1992).
19. J.V. Lopes, M.D. Costa, J.M.B. Lopes dos Santos, and R. Toral, *Phys. Rev.* **E74**, 046702 (2006).
20. K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, Inc., New York-London (1963).
21. J.S. Wang and R.H. Swendsen, *Phys. Rev.* **B38**, 4840 (1988).

Monte Carlo simulation of two-dimensional electron gas on disordered host-lattice

V.V. Slavin

Low-temperature thermodynamic properties of two-dimensional electron gas on disordered host-lattice in the limit of low electron density have been studied. A new original algorithm of Monte Carlo simulation is proposed to investigate effectively the properties of the system. A residual entropy is discovered and its value is estimated. In the framework of the proposed model it is shown that the low temperature dependence of dielectric susceptibility as a function of external electric field has a cusp which is typical of spin-glass systems.

PACS: **05.10.-a** Computational methods in statistical physics and nonlinear dynamics;
05.20.-y Classical statistical mechanics.

Keywords: generalized Wigner crystal, thermodynamics, low-dimensional systems, disordered systems, Monte Carlo simulation.