

# 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 ( $n_i = 0, 1$ );  $\mu$  — 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  $\mu$  к системе с заданной концентрацией  $\rho$  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  $\rho$  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  $\rho$  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  $\nu$  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  $\xi_i^\alpha$  — локальная координата электрона, находящегося в  $i$ -м «кластере» и занимающего в

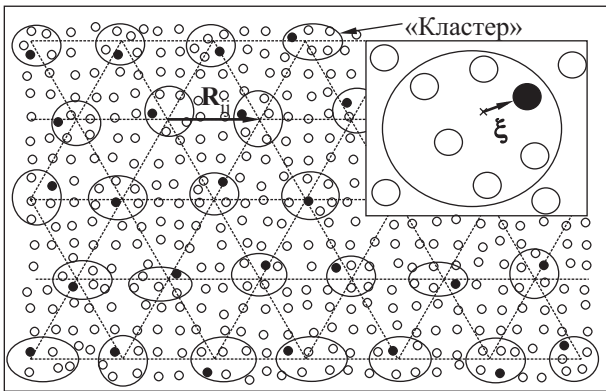


Рис. 1. Схематическое изображение случайной конфигурации системы. Пунктирной линией обозначена соответствующая решетка ВК. Пустые кружки — свободные узлы РМ, закрашенные — узлы РМ, занятые электронами. В каждом «кластере» находятся 5 узлов РМ ( $\nu = 5$ ). На вставке изображен один из «кластеров» в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

нем  $\alpha$ -й узел РМ ( $\alpha = 1, \dots, \nu$ ). Схематически «кластеры» изображены на рис. 1. Очевидно, что векторы  $\xi_i^\alpha$  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  $\xi_i^\alpha$ , 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  $\alpha$  РМ в «кластере»  $i$ , с таковым, занимающим узел  $\beta$  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

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

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»  $\xi_i^\alpha$  можно рассматривать как своеобразную пару: электрон, покинувший  $i$ -й узел ВК (т.е. дырка), + электрон, занимающий  $\alpha$ -й узел РМ  $i$ -го «кластера». Второе слагаемое есть энергия взаимодействия «диполей» с электрическим полем  $\mathbf{E}$ .

Свободная энергия, записанная в терминах  $\xi$ , 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  $\tau$  — произвольная константа, определяющая шкалу времени МК моделирования. Обычно  $\tau$  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.

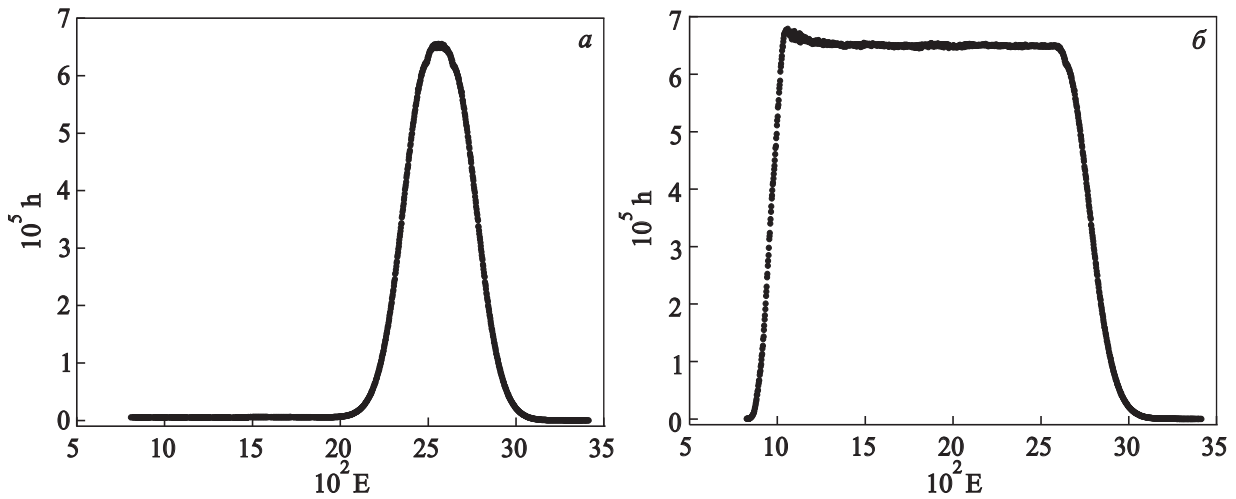


Рис. 2. Типичные зависимости начального (а) и конечного (б) распределения  $h(E)$ .

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  $\xi$ ), 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-

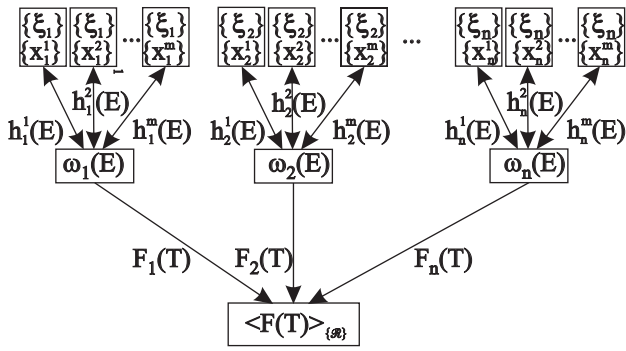


Рис. 3. Алгоритм параллельного мультиканонического Монте-Карло моделирования.

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-

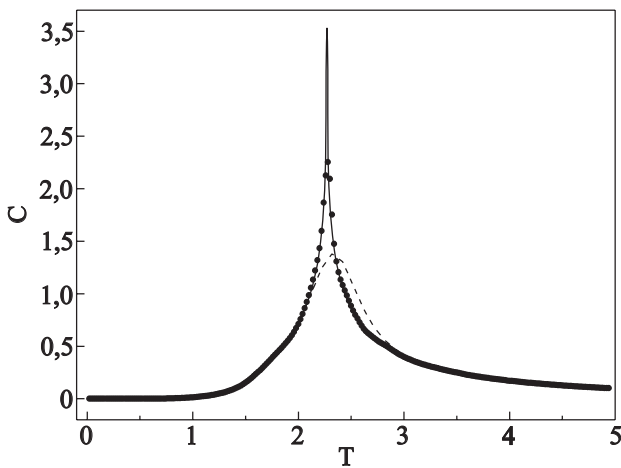


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости двумерного изинговского магнетика. Сплошная линия — точное решение [20], • — метод параллельного мультиканонического МК (96×96 спинов), пунктирная линия — метод трансфер-матриц (12×12 спинов).

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

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

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

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

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

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

Проведенное МК моделирование показало, что результаты качественно не зависят от выбора модели генерации  $\xi$ . 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-

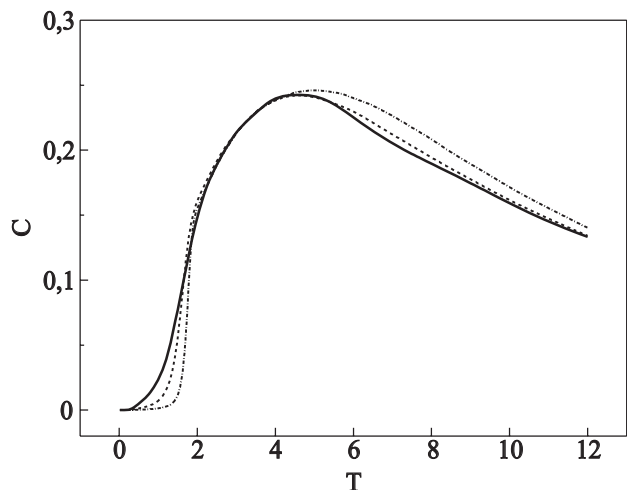


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости системы (5). Сплошная линия — результат, полученный методом трансфер-матриц (12×12 спинов); пунктирная и штрих-пунктирная линии — методы параллельного мультиканонического МК (32×32 спинов) и МК (96×96 спинов) соответственно.

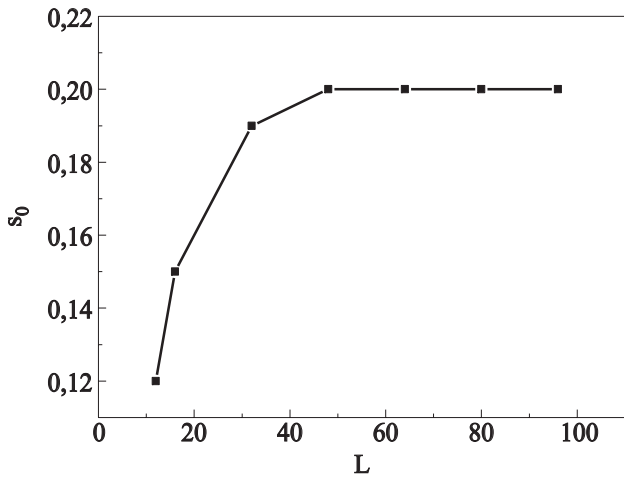


Рис. 6. Зависимость остаточной энтропии на частицу  $s_0$  от линейного размера системы ( $L = \sqrt{M}$ ), полученная методом МК.

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  $\xi$ . На рис. 7 представлена зависимость поляризации на частицу

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

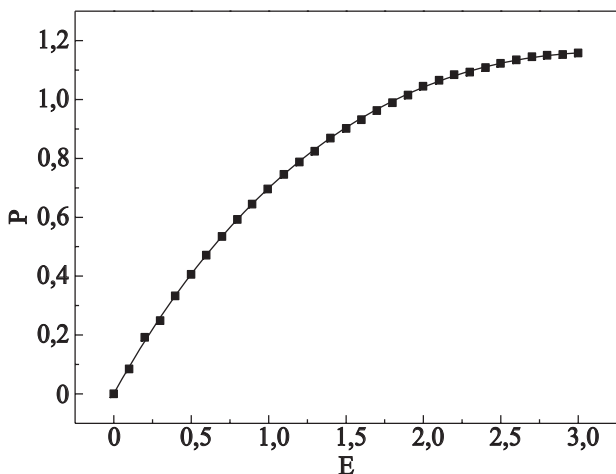


Рис. 7. Зависимость поляризации системы  $P$  от внешнего электрического поля  $E$ .

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  $\sim \xi^2$ .

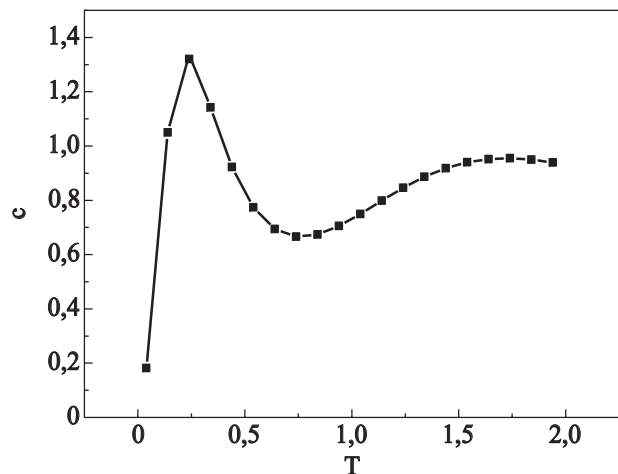


Рис. 8. Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости  $c$ .



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  $12 \times 12$ ) до 10 часов (для системы  $96 \times 96$ ). Кроме того, проводились вычисления при помощи метода трансфер-матриц [14] для систем  $12 \times 12$ . 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.