

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

КАПІКРАНЯН Олександр Євгенович

УДК 537.9

**Вплив безладу на низькотемпературну поведінку двовимірних
спінових моделей із неперервною симетрією**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2008

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України (м. Львів) та Лабораторії фізики матеріалів Університету Анрі Пуанкаре (м. Нансі, Франція).

- Наукові керівники – доктор фізико-математичних наук, професор **Головач Юрій Васильович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, провідний науковий співробітник відділу статистичної теорії конденсованих систем;
- габілітований доктор, професор **Бертран Берш**, Лабораторія фізики матеріалів Університету Анрі Пуанкаре, м. Нансі, Франція.
- Офіційні опоненти – член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор **Стасюк Ігор Васильович**, завідувач відділу квантової статистики Інституту фізики конденсованих систем НАН України;
- габілітований доктор **Домінік Муана**, викладач, Лабораторія фізики конденсованої речовини, Університет П'єра та Марі Кюрі, м. Париж, Франція

Захист відбудеться “21” січня 2009 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026 м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “19” грудня 2008 року.

Вчений секретар спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01, кандидат фіз.-мат. наук



Т. Є. Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Питання впливу структурного безладу на поведінку моделей магнетиків, підняте вперше більше ніж п'ятдесят років тому, викликало появу багатьох теоретичних робіт. Утім, незважаючи на те, що в таких класичних спінових моделях, як моделі Ізинга та Гайзенберга заморожений безлад було досліджено широким арсеналом існуючих методів, двовимірна ХУ модель лишилась якось осторонь цих досліджень, імовірно через той факт, що характер її критичної поведінки якісно не змінюється в присутності безладу згідно із критерієм Гаріса (А. В. Harris, J. Phys. C: Solid State Phys. Vol. 7 (1974) 1671). Утім відомо, що ця модель за відсутності безладу все ж таки відзначається рядом важливих аналітичних результатів, які не є універсальними і можуть змінюватися, зокрема, і під впливом безладу. Парадоксальним чином, лише останнім часом були зроблені перші кроки у дослідженні подібних проблем, переважно методами комп'ютерного моделювання, проте, ні експериментальні, ні аналітичні результати не можна вважати на сьогодні достатньо вичерпними: наприклад, досі не було зроблено принаймні приблизної аналітичної оцінки спостережуваної в комп'ютерних експериментах зміни критичної температури, спричиненої безладом. Даною роботою ми сподіваємося долучитися до бодай часткового заповнення цих білих плям.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України та Лабораторії фізики матеріалів Університету Анрі Пуанкаре (Laboratoire de Physique des Matériaux, Université Henri Poincaré, Nancy 1, Франція) згідно з планами робіт за темами: № 0105U002081 "Особливості критичної поведінки конденсованих систем під впливом зовнішнього поля, структурного безладу, фрустрації та анізотропії" (2005-2007 рр.), № 0107U002081 "Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп'ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах" (2007-2011 рр.); за підтримки гранту "Allocation de these en co-tutelle MESR", франко-німецької аспірантської програми Collège doctoral Franco-Allemand "Statistical Physics of Complex Systems", та проекту співпраці CNRS (Франція) - НАН України "Критична поведінка структурно-невпорядкованих та фрустрованих систем" (2005-2007 рр.).

Мета і задачі дослідження. Об'єктом досліджень виступають класичні двовимірні спінові моделі неперервної симетрії із дефектами структури у вигляді немагнітних домішок (вакансій), розподілених випадковим чином на вузлах ґратки (заморожений нескорельований безлад). Предметом дослідження даної роботи є вплив безладу та скінченності розміру на поведінку зазначених моделей. Мета дослідження полягає в обчисленні кількісних характеристик поведінки перелічених моделей (напр., показника парної кореляційної функції, критичної температури) як функцій концентрації немагнітного розведення. Методами дослідження

виступають як аналітичні розрахунки на основі заданих моделей з використанням методу функціонального інтегрування, так і Монте-Карло симуляції за алгоритмом Вольфа.

Наукова новизна одержаних результатів. У дисертаційній роботі отримано значення температурно-залежного показника парної кореляційної функції двовимірної XY моделі із безладом як функції концентрації структурних дефектів. Отриманий результат краще узгоджується із даними Монте-Карло симуляцій, ніж оцінки, що існували до цього часу. Отримано також показник, що характеризує спадання залишкової намагніченості як функції розміру скінченної системи. Як і у випадку нерозведеної моделі, цей показник виявився пов'язаним із показником кореляційної функції. У межах використаних наближень наведено аргументи на користь самоусередності таких величин як конфігураційно-залежні парна кореляційна функція та залишкова намагніченість 2D XY моделі при достатньо низьких температурах.

Отримано вирази, що описують модель Вілена із безладом, і, виходячи з гамільтоніану моделі знайдено вигляд енергії взаємодії структурних дефектів із спін-хвильовими та топологічними збудженнями (вихорами). Взаємодію між немагнітними домішками та вихорами оцінено також у рамках феноменологічної моделі Костерліца-Таулеса методом, який краще відображає мікроскопічну структуру вихідної моделі (2D XY), ніж підхід, використовуваний іншими авторами. Оцінки для взаємодії структурних та топологічних дефектів, отримані в моделях Вілена та Костерліца-Таулеса, узгоджуються між собою, а також і з існуючими на сьогодні експериментальними даними.

На основі отриманих результатів для взаємодії структурних та топологічних дефектів уперше зроблено аналітичну оцінку зниження критичної температури топологічного фазового переходу (переходу Березінського-Костерліца-Таулеса, БКТ), спричиненого замороженням немагнітним розведенням системи. Одержаний результат узгоджується з доступними на сьогодні даними Монте-Карло експериментів.

Знайдено поведінку парної кореляційної функції двовимірної моделі Гайзенберга на скінченній ґратці в границі низьких температур.

Методами Монте-Карло симуляцій досліджено розподіл намагніченості у двовимірній XY моделі скінченного розміру із безладом.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані у дисертаційній роботі результати можуть бути використані при експериментальному дослідженні магнітних матеріалів, властивості яких описуються в рамках 2D XY моделі (шаруваті магнетики, надтонкі магнітні плівки).

Особистий внесок здобувача. У роботах, виконаних із співавторами, автору належить:

- обчислення парної кореляційної функції та залишкової намагніченості (для скінченної ґратки) у двовимірній ХУ моделі із замороженим безладом у спін-хвильовому наближенні [1-3,6];
- виведення виразів, що описують модель Вілена із структурними дефектами та оцінка енергії взаємодії структурних дефектів із топологічними та спін-хвильовими збудженнями, заснована на мікроскопічному гамільтоніані моделі Вілена [4,6];
- аналітична оцінка взаємодії структурних та топологічних дефектів у феноменологічній моделі Костерліца-Таулеса [4,6];
- аналітична оцінка зменшення температури БКТ переходу, пов'язаного із структурним безладом [4,6];
- участь в реалізації Монте-Карло симуляцій [1-3];
- інтерпретація розподілів намагніченості в двовимірній ХУ моделі із безладом, отриманих в Монте-Карло симуляціях [2,3,6];
- обчислення парної кореляційної двовимірної моделі Гайзенберга скінченного розміру в низькотемпературній границі [5].

Автор брав безпосередню участь в аналізі та інтерпретації усіх результатів отриманих при дослідженні.

Апробація роботи. Результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на таких наукових зустрічах: "Statistical Physics and Low Dimensional Systems 2006: Atelier des groupes Physique Statistique et Surface et Spectroscopies du LPM" (Нансі, Франція, 17-19 травня 2006 р.), "2nd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (QEDSP2006)" (Харків, 19-23 вересня 2006 р.), "Statistical Physics and Low Dimensional Systems 2007: Atelier des groupes Physique Statistique et Surface et Spectroscopies du LPM" (Нансі, Франція, 23-25 травня 2007 р.), "The 32nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO32)" (Ладек Здруй, Польща, 16-18 квітня 2007 р.), "Різдвяні дискусії 2008" (Львів, 4-5 січня 2008 р.), "VII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та конденсованої речовини -- 2008" (Львів, 5-6 червня 2008 р.), а також на семінарах відділу статистичної теорії конденсованих систем ІФКС НАН України, семінарах теоретичної групи Лабораторії фізики матеріалів Університету Анрі Пуанкаре у місті Нансу (Франція) та на семінарі в Інституті теоретичної фізики Університету м. Ляйпціг (Німеччина).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 5 журнальних статей, 1 препринт та 4 тези конференцій. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел. Робота викладена на 122 сторінках (разом з літературою – 136 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 115 найменувань.

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** висвітлено актуальність теми дослідження, сформульовано мету роботи та відзначено її наукову новизну.

У **першому розділі** подано огляд основних робіт, які стосуються спінових моделей неперервної симетрії, зокрема двовимірної (2D) XY моделі, а також робіт, присвячених вивченню безладу, особливо у стосунку до зазначеної моделі. Огляд частково засновується на оглядовій роботі автора [6].

У **другому розділі** досліджується низькотемпературна поведінка двовимірної XY моделі із замороженим нескорельованим безладом заміщення, зокрема, поведінка парної кореляційної функції спінів. У випадку квазідалекосяжного впорядкування, яким характеризується низькотемпературна фаза нерозведеної моделі, ця функція спадає із відстанню за степеневим законом.

Перший підрозділ присвячено опису загальної моделі нескорельованого замороженого безладу заміщення у магнітних системах. Просторове розміщення немагнітних домішок, що описуються випадковими змінними

$$c_r = \begin{cases} 1, & \text{якщо на вузлі } r \text{ є спін;} \\ 0, & \text{якщо вузол } r \text{ порожній;} \end{cases} \quad (1)$$

задається фіксованим розподілом імовірності, який взагалі кажучи не відповідає рівноважному положенню домішок у системі. Спостережувані фізичні величини, які у цьому випадку залежать від конкретної реалізації безладу, мають бути усереднені за цим розподілом. Цю процедуру, що має назву конфігураційного усереднення, можна записати у вигляді:

$$\overline{(\dots)} = \sum_{c_{r1}=0,1} \dots \sum_{c_{rN}=0,1} \left[\prod_r P(c_r) \right] (\dots), \quad (2)$$

де

$$P(c_r) = \begin{cases} c, & \text{якщо } c_r = 1; \\ 1 - c, & \text{якщо } c_r = 0. \end{cases} \quad (3)$$

N – загальна кількість вузлів, c – концентрація магнітних вузлів, а $1-c$ – концентрація немагнітних домішок. Також обговорено проблему самоусередності спостережуваних фізичних величин.

У другому підрозділі записано гамільтоніан 2D XY моделі із безладом з допомогою випадкових змінних (1) та кутових спінових змінних θ :

$$H = -J \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\alpha=x,y} \cos(\theta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha} - \theta_{\mathbf{r}}) c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha} c_{\mathbf{r}}, \quad (4)$$

який у межах спін-хвильового наближення зводиться до:

$$H_{\text{sw}} = \frac{1}{2} J \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\alpha=x,y} (\theta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha} - \theta_{\mathbf{r}})^2 c_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha} c_{\mathbf{r}}. \quad (5)$$

Перешовши до фур'є-змінних, гамільтоніан (5) можна представити у двох різних формах запису: через фур'є-трансформанту локальної густини немагнітних домішок, $\rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} (1 - c_{\mathbf{r}})$:

$$H_{\text{sw}} = H_{\text{sw}}^{\text{p}} + J \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha} \cos \frac{(k_{\alpha} + k'_{\alpha})a}{2} \rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'} K_{\alpha}(\mathbf{k}) K_{\alpha}(\mathbf{k}') \theta_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}'} - \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha} e^{i \frac{(k_{\alpha} + k'_{\alpha})a}{2}} \left[\sum_{\mathbf{q}} e^{iq_{\alpha}a} \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \right] K_{\alpha}(\mathbf{k}) K_{\alpha}(\mathbf{k}') \theta_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}'}, \quad (6)$$

та через параметр неоднорідності конфігурації безладу, $\Delta\rho_{\mathbf{q}} = \rho_{\mathbf{q}} - \overline{\rho_{\mathbf{q}}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} (c - c_{\mathbf{r}})$:

$$H_{\text{sw}} = H_{\Delta\rho=0} + cJ \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha} \cos \frac{(k_{\alpha} + k'_{\alpha})a}{2} \Delta\rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'} K_{\alpha}(\mathbf{k}) K_{\alpha}(\mathbf{k}') \theta_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}'} - \frac{J}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha} e^{i \frac{(k_{\alpha} + k'_{\alpha})a}{2}} \left[\sum_{\mathbf{q}} e^{iq_{\alpha}a} \Delta\rho_{\mathbf{q}} \Delta\rho_{-\mathbf{k}-\mathbf{k}'-\mathbf{q}} \right] K_{\alpha}(\mathbf{k}) K_{\alpha}(\mathbf{k}') \theta_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}'}, \quad (7)$$

де H_{sw} – спін-хвильовий гамільтоніан при відсутності розведення, а $H_{\Delta\rho=0}$ – спін-хвильовий гамільтоніан із домішками, розміщеними строго однорідним чином.

У третьому підрозділі досліджено асимптотично поведінку парної кореляційної функції спінів:

$$G(\mathbf{R}) = \overline{c^2 \langle \cos(\theta_{\mathbf{r}+\mathbf{R}} - \theta_{\mathbf{r}}) \rangle}, \quad (8)$$

шляхом розкладу її в ряд за ρ або $\Delta\rho$ до членів третього порядку включно і подальшого конфігураційного усереднення; кутові дужки у (8) означають операцію термодинамічного усереднення. Використовуючи знайдені значення кореляторів:

$$\overline{\rho_{\mathbf{q}_1} \dots \rho_{\mathbf{q}_n}} \simeq (1 - c) \frac{1}{N^{n-1}} \delta_{\mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{q}_n, 0} \quad (9)$$

та

$$\begin{aligned}\overline{\Delta\rho_{\mathbf{q}}} &= 0 , \\ \overline{\Delta\rho_{\mathbf{q}}\Delta\rho_{\mathbf{q}'}} &= c(1-c) \frac{1}{N} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}',0} , \\ \overline{\Delta\rho_{\mathbf{q}}\Delta\rho_{\mathbf{q}'}\Delta\rho_{\mathbf{q}''}} &= -c(1-3c+2c^2) \frac{1}{N^2} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}'',0} ,\end{aligned}\quad (10)$$

отримані розклади було представлено у формі:

$$\begin{aligned}G(\mathbf{R}) \simeq c^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\beta J} \left(S_0(\mathbf{R}) + \underbrace{(1-c) 2S_1(\mathbf{R})}_{\text{1-ий порядок}} \right. \right. \\ \left. \left. + \underbrace{(1-c) S_1(\mathbf{R})}_{\text{2-ий порядок}} + \underbrace{(1-c) \left[S_2(\mathbf{R}) + 2 S_0(\mathbf{R}) \right]}_{\text{3-ий порядок}} \right) \right\}\end{aligned}\quad (11)$$

для розкладу за ρ , та у формі:

$$\begin{aligned}G(\mathbf{R}) = c^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\beta c^2 J} \left(S_0(\mathbf{R}) + \frac{1-c}{c} S_1(\mathbf{R}) \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1-3c+2c^2}{c^2} \left[S_2(\mathbf{R}) + 2 S_0(\mathbf{R}) \right] \right) \right\}\end{aligned}\quad (12)$$

для розкладу за $\Delta\rho$. S_0 , S_1 та S_2 позначають багатократні суми за вузлами оберненої ґратки в межах першої зони Брілюена, які містять залежність від відстані R . Знайшовши асимптотичну поведінку цих сум,

$$\begin{aligned}S_0(\mathbf{R}) &\simeq \frac{1}{2\pi} \ln(R/a) , \quad R \rightarrow \infty ; \\ S_1(\mathbf{R}) &\simeq 0.727 \frac{1}{2\pi} \ln(R/a) , \quad R \rightarrow \infty ; \\ S_2(\mathbf{R}) &\simeq 0.264 \frac{1}{2\pi} \ln(R/a) , \quad R \rightarrow \infty ,\end{aligned}\quad (13)$$

парну кореляційну функцію в границі низьких температур можна записати у формі:

$$G(\mathbf{R}) \simeq \left(\frac{R}{a} \right)^{-\eta_{\text{dis}}} ,\quad (14)$$

із показником

$$\eta_{\text{dis}} = \frac{1}{2\pi\beta J} \left(1 + \underbrace{2(1-c)}_{\text{1-ий порядок}} + \underbrace{0.727(1-c)}_{\text{2-ий порядок}} + \underbrace{2.264(1-c)}_{\text{3-ий порядок}} \right)\quad (15)$$

у випадку розкладу до членів третього порядку за ρ , і

$$\eta_{\text{dis}} = \frac{1}{2\pi\beta J} \left(\frac{1}{c^2} + 0.727 \frac{1-c}{c^3} - 2.264 \frac{1-3c+2c^2}{c^4} \right) \quad (16)$$

– у випадку аналогічного розкладу за параметром неоднорідності конфігурації безладу $\Delta\rho$.

Розклад за ρ розглядається як теорія збурень для слабких розведень, хоча кінцевий результат (14) і не виявляє швидкої збіжності ряду при $c \rightarrow 1$. Натомість від розкладу за параметром неоднорідності конфігурації безладу $\Delta\rho$ очікується точніший опис поведінки при сильніших розведеннях, оскільки внесок від флуктуацій локальної густини домішок має бути малим у порівнянні із “однорідною” складовою розведення в широкому інтервалі концентрацій. Порівняння із результатами спеціально виконаних нами Монте-Карло симуляцій підтверджує наші очікування (див. рис.1). В границі малих концентрацій розведення результати відповідних порядків обох розкладів збігаються у той час, як при сильніших розведеннях (15) істотно краще узгоджується із експериментальними результатами. Хоча це і не дозволяє робити висновків про збіжність застосованих розкладів, принаймні до третього порядку включно вони виявляють поступове наближення до результатів Монте-Карло симуляцій.

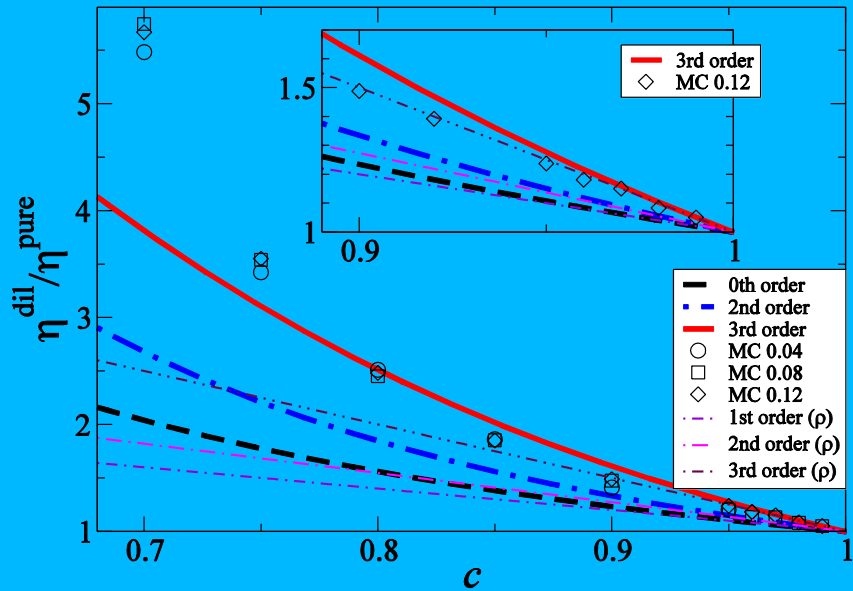


Рисунок 1: Порівняння результатів Монте-Карло симуляцій та аналітичних результатів, отриманих в різних порядках розкладів за ρ та $\Delta\rho$. Числа проти символів МС означають величини безрозмірної температури kT/J .

У **третьому розділі** досліджено характер взаємодії немагнітних домішок із топологічними дефектами (вихорами), які визначають критичну поведінку 2D XY моделі. Дослідження

торкається як феноменологічної моделі Костерліца-Таулеса, так і більш строгої моделі Вілена. На основі отриманих результатів зроблено спробу аналітично оцінити зниження критичної температури, спричинене безладом заміщення.

Статистична сума моделі Вілена із безладом, отримана в наближенні низьких температур з розведеної 2D XY моделі (4), має вигляд:

$$Z = \sum_{m(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\infty}^{+\infty} \Theta(m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}) \left(\prod_{\mathbf{r}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\theta_{\mathbf{r}}}{2\pi} \right) e^{-\beta H_{\text{Vill}}}$$

із гамільтоніаном

$$H_{\text{Vill}} = \frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'})^2 c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}'} + \varepsilon \sum_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}}^2, \quad (17)$$

а

$$\Theta(m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}) \equiv c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}'} + (1 - c_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}'}) \delta_{m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, 0}.$$

Змінні $m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$ описують вихрові збурення основного стану. Шляхом точних математичних перетворень в гамільтоніані (17) виділено частину, яка відповідає взаємодії ізольованої немагнітної домішки із вихровими збуреннями:

$$H_{\text{vort}}^{\rho} = \sum_{\mathbf{r}} (1 - c_{\mathbf{r}}) \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} q(\mathbf{R}) q(\mathbf{R}') V_{qq}^{\rho}(\mathbf{R} - \mathbf{r}, \mathbf{R}' - \mathbf{r}), \quad (18)$$

та частину, що пов'язана із взаємодією ізольованої домішки як із вихровими, так і зі спін-хвильовими збуреннями:

$$H_{\text{sw, vort}}^{\rho} = \sum_{\mathbf{r}} (1 - c_{\mathbf{r}}) \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{r}'} q(\mathbf{R}) \varphi_{\mathbf{r}'} V_{q\varphi}^{\rho}(\mathbf{R} - \mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r}). \quad (19)$$

У (18), (19) $q(\mathbf{R})$ – топологічні заряди:

$$q(\mathbf{R}) = m_{\mathbf{R} - \frac{\mathbf{a}_x}{2} - \frac{\mathbf{a}_y}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{a}_x}{2} + \frac{\mathbf{a}_y}{2}} + m_{\mathbf{R} - \frac{\mathbf{a}_x}{2} + \frac{\mathbf{a}_y}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{a}_x}{2} + \frac{\mathbf{a}_y}{2}} + m_{\mathbf{R} + \frac{\mathbf{a}_x}{2} + \frac{\mathbf{a}_y}{2}, \mathbf{R} + \frac{\mathbf{a}_x}{2} - \frac{\mathbf{a}_y}{2}} + m_{\mathbf{R} + \frac{\mathbf{a}_x}{2} - \frac{\mathbf{a}_y}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{a}_x}{2} - \frac{\mathbf{a}_y}{2}}, \quad (20)$$

означені на вузлах дуальної ґратки $\mathbf{R}$.

В границі великих відстаней між домішкою та топологічними дефектами ``потенціали'', що фігурують у (18) та (19), мають вигляд:

$$\begin{aligned}
 & V_{qq}^\rho(\mathbf{R} - \mathbf{r}, \mathbf{R}' - \mathbf{r}) \\
 = & -a^2 J \left\{ \frac{(X-x)(X'-x)}{((X-x)^2 + (Y-y)^2)((X'-x)^2 + (Y'-y)^2)} \right. \\
 & \times \left(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(Y-y)} \cos \frac{\pi}{a}(X-x) \right) \left(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(Y'-y)} \cos \frac{\pi}{a}(X'-x) \right) \\
 & + \frac{(Y-y)(Y'-y)}{((X-x)^2 + (Y-y)^2)((X'-x)^2 + (Y'-y)^2)} \\
 & \times \left(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(X-x)} \cos \frac{\pi}{a}(Y-y) \right) \left(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(X'-x)} \cos \frac{\pi}{a}(Y'-y) \right) \\
 & - 2(0.17)^2 \frac{a^2}{\pi^2} \frac{(1 - \cos \frac{\pi}{a}(X-x))(1 - \cos \frac{\pi}{a}(Y-y))}{(X-x)(X'-x)(Y-y)(Y'-y)} \\
 & \left. \times (1 - \cos \frac{\pi}{a}(X'-x))(1 - \cos \frac{\pi}{a}(Y'-y)) \right\} \quad (21)
 \end{aligned}$$

та

$$\begin{aligned}
 & V_{q\varphi}^\rho(\mathbf{R} - \mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r}) \\
 = & aJ \left\{ (\delta_{\mathbf{r}-\mathbf{a}_x, \mathbf{r}'} - \delta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_x, \mathbf{r}'}) \frac{(Y-y)(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(X-x)} \cos \frac{\pi}{a}(Y-y))}{(X-x)^2 + (Y-y)^2} \right. \\
 & + (\delta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_y, \mathbf{r}'} - \delta_{\mathbf{r}-\mathbf{a}_y, \mathbf{r}'}) \frac{(X-x)(1 - e^{-\frac{\pi}{a}(Y-y)} \cos \frac{\pi}{a}(X-x))}{(X-x)^2 + (Y-y)^2} \\
 & - (\delta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_x, \mathbf{r}'} + \delta_{\mathbf{r}-\mathbf{a}_x, \mathbf{r}'} + \delta_{\mathbf{r}+\mathbf{a}_y, \mathbf{r}'} + \delta_{\mathbf{r}-\mathbf{a}_y, \mathbf{r}'}) \\
 & \left. \times 0.17 \frac{a}{\pi} \frac{(1 - \cos \frac{\pi}{a}(X-x))(1 - \cos \frac{\pi}{a}(Y-y))}{(X-x)(Y-y)} \right\},
 \end{aligned}$$

відповідно.

Взаємодія між немагнітною домішкою та топологічними дефектами, отримана нами в рамках феноменологічної моделі Костерліца-Таулеса для квадратної ґратки, має загальний вигляд:

$$V_{qq}^{KT}(\mathbf{R} - \mathbf{r}, \mathbf{R} - \mathbf{r}') = -Ja^2 \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}'} q(\mathbf{R})q(\mathbf{R}') \frac{(X-x)(X'-x) + (Y-y)(Y'-y)}{[(X-x)^2 + (Y-y)^2][(X'-x)^2 + (Y'-y)^2]} \quad (22)$$

який збігається із (21) в границі $X-x, Y-y, X'-x, Y'-y \rightarrow \infty$.

На основі отриманих виразів для взаємодії немагнітної домішки із вихорами було оцінено критичну температуру моделі із топологічним фазовим переходом (2D XY модель, модель Вілена) та слабким безладом заміщення як температуру, при якій дисоціюють зв'язані нейтральні пари топологічних дефектів. Результат, нормований на критичну температуру нерозведеної моделі, оцінену тим самим методом:

$$T_{\text{BKT}}^{\text{dil}}/T_{\text{BKT}}^{\text{pure}} = 1 - 2(1 - c) , \quad (23)$$

порівнюється із існуючими на сьогодні даними Монте-Карло симуляцій (рис.2). Певне відхилення нашого аналітичного результату від експериментальних кривих, яке посилюється при більших концентраціях розведення, можна пояснити впливом локальних флуктуацій густини немагнітних домішок, які були знехтувані при оцінюванні критичної температури. Незважаючи на це, для достатньо низьких концентрацій вираз (23) є досить близьким до експериментальних даних, причому воно навіть передбачає обертання критичної температури в нуль при концентрації магнітних вузлів $c=0.5$. Хоча цей результат і відрізняється кількісно від справжнього значення перколяційного порогу для двовимірної ґратки, $c=0.59$, якісно він правильно описує ситуацію при сильному немагнітному розведенні.

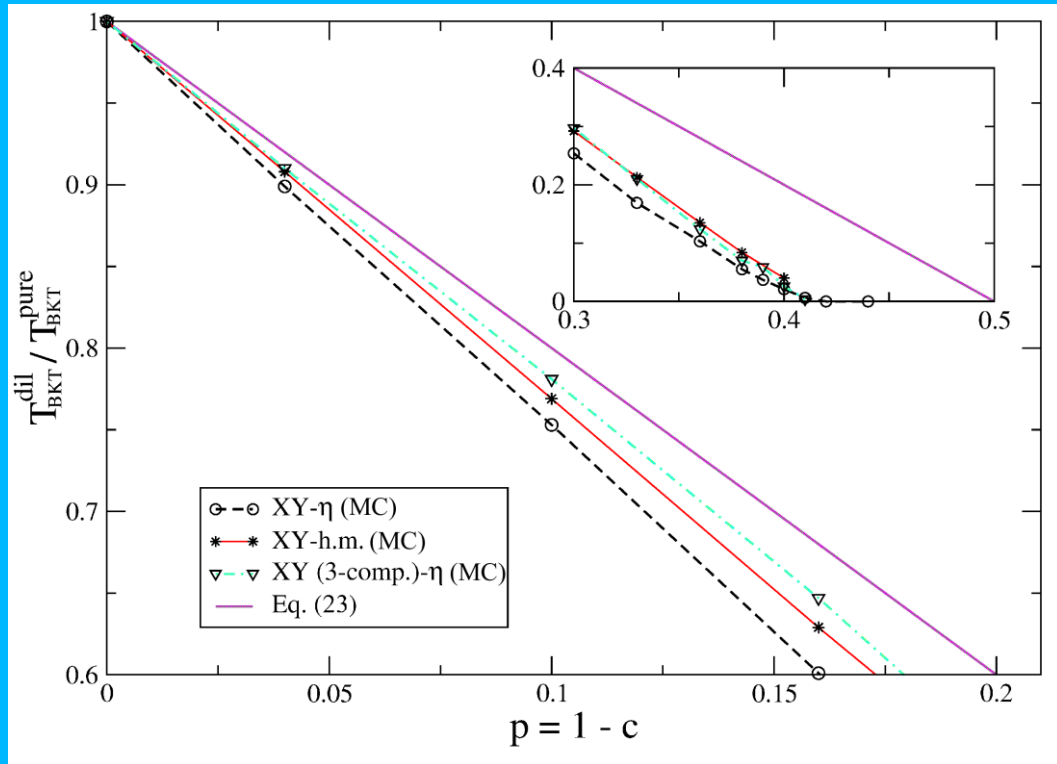


Рисунок 2: Фазова діаграма 2D XY моделі із замороженим немагнітним розведенням концентрації $p=1-c$ (c – концентрація магнітних вузлів). Результати Монте-Карло симуляцій (G. M. Wysin, A. R. Pereira, I. A. Marques, S. A. Leonel, P. Z. Coura, Phys. Rev. B. Vol. 72 (2005) 094418) порівнюються із аналітичним результатом (23). Вставка демонструє область, близьку до перколяційного порогу.

У четвертому розділі досліджено середнє значення спонтанної намагніченості, що спостерігається у скінченній 2D XY моделі із безладом при низьких температурах, та розподіл

імовірності її значень, а також низькотемпературну поведінку парної кореляційної функції спінів у двовимірній моделі Гайзенберга скінченного розміру. Дослідження включає як аналітичні розрахунки, так і Монте-Карло симуляції.

Результати Монте-Карло симуляцій 2D XY моделі із безладом, які були використані власне для оцінки показника парної кореляційної функції зі скейлінгу середнього значення спонтанної намагніченості, зображаються найвичерпнішим чином у вигляді розподілу імовірності значень намагніченості (рис.3) або у формі кільцевих функцій (рис.4).

На рис. 3 зображено функції розподілу імовірності намагніченості в системі із слабким немагнітним розведенням, $c=0.95$, при різних значеннях температури та розміру ґратки. Поведінка функції розподілу є якісно такою ж, як і у випадку нерозведеної моделі. Цікаво порівняти розподіли в системах із різними концентраціями немагнітних домішок.

Кільцеві функції на рис. 4 представляють нанесені на площину (m_x, m_y) значення намагніченості для кожного Монте-Карло вимірювання. Форма розподілу відображається в густині точок. Очевидно, що немагнітне розведення суттєво змінює характер розподілу: як положення максимуму, так і величину дисперсії.

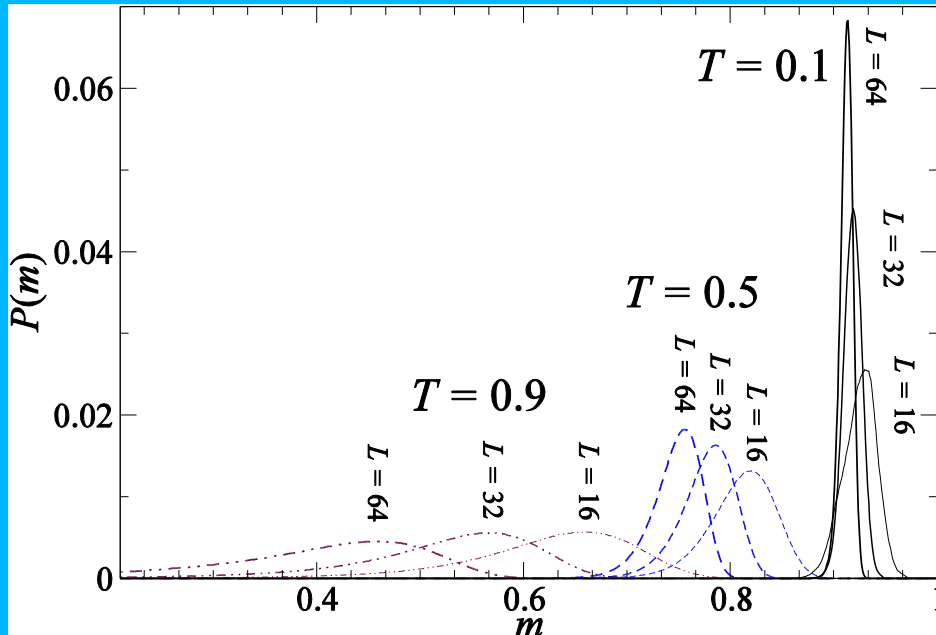


Рисунок 3: Функції розподілу імовірності значень спонтанної намагніченості в 2D XY моделі, усереднені за 1000 реалізацій безладу ($c=0.95$) при температурах $k_B T/J=0.1, 0.5$ та 0.9 для систем розмірів $L=16, 32, 64$.

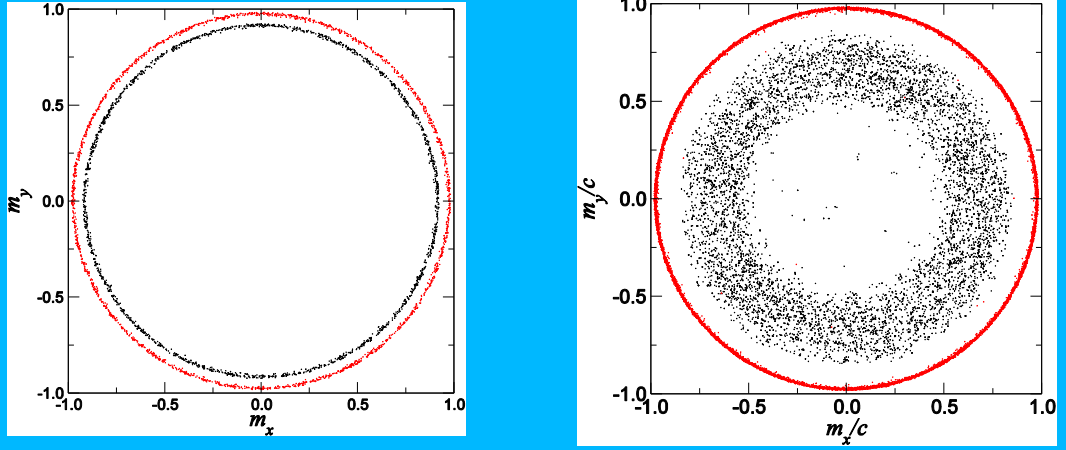


Рисунок 4: Кільцеві функції системи розміру $L=16$ із концентраціями магнітних вузлів $c=0.95$ (зліва) та $c=0.70$ (справа) при температурі $k_B T/J=0.1$. Зовнішні кільця представляють аналогічні результати для нерозведеної системи.

Намагніченість як функцію мікроскопічного стану 2D XY моделі із безладом можна записати як:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \bar{\theta}) , \quad (24)$$

де $\bar{\theta} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}}$. Нас буде цікавити середнє значення намагніченості (усереднене як термодинамічно, так і за конфігураціями безладу), а також значення її p -го моменту:

$$\overline{M_p} \equiv \overline{\langle m^p \rangle} = \frac{1}{N^p} \sum_{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_p} \overline{\langle c_{\mathbf{r}_1} \cdots c_{\mathbf{r}_p} \cos \psi_{\mathbf{r}_1} \cdots \cos \psi_{\mathbf{r}_p} \rangle} . \quad (25)$$

Розкладаючи в ряд за параметром неоднорідності конфігурації безладу Δ_r , подібно до того, як це робилось при обчисленні парної кореляційної функції, отримуємо результат для середньої намагніченості:

$$\overline{\langle m \rangle} \approx c N^{-\frac{1}{4} \eta^{\text{dil}}} \quad (26)$$

та p -го моменту намагніченості:

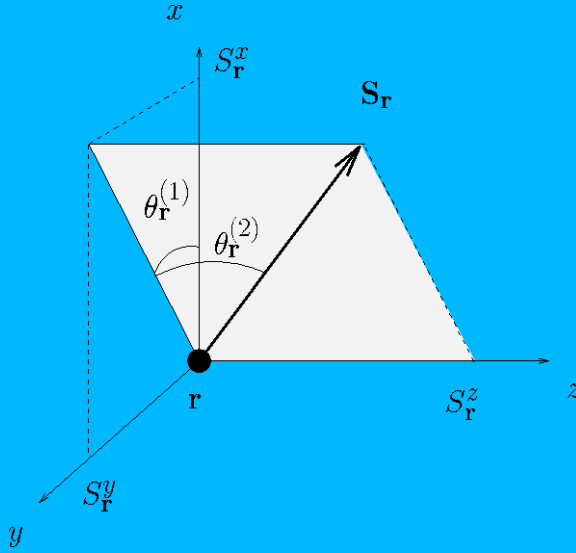
$$\overline{M_p} \approx c^p N^{-\frac{p}{4} \eta^{\text{dil}}} , \quad (27)$$

де η^{dil} представляється виразом (15). На жаль, отриманий нами результат (27) для p -го моменту намагніченості, відповідає дельтаподібному розподілу намагніченості при будь-якій концентрації розведення і не дозволяє пояснити залежність форми розподілу від концентрації, яка спостерігається в Монте-Карло симуляціях. Це пов'язано із нехтуванням при виведенні (26), (27) степенями температури, вищими за першу.

Останній підрозділ присвячено дослідженню низькотемпературної поведінки двовимірної моделі Гайзенберга скінченного розміру, яка описується гамільтоніаном

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (S_{\mathbf{r}}^x S_{\mathbf{r}'}^x + S_{\mathbf{r}}^y S_{\mathbf{r}'}^y + S_{\mathbf{r}}^z S_{\mathbf{r}'}^z) \quad (28)$$

із феромагнітною ($J>0$) взаємодією найближчих сусідів. Переходячи до спеціально означених кутових змінних (див. рис. 5) за формулами:



$$S_{\mathbf{r}}^x = \cos \theta_{\mathbf{r}}^{(1)} \cos \theta_{\mathbf{r}}^{(2)},$$

$$S_{\mathbf{r}}^y = \sin \theta_{\mathbf{r}}^{(1)} \cos \theta_{\mathbf{r}}^{(2)},$$

$$S_{\mathbf{r}}^z = \sin \theta_{\mathbf{r}}^{(2)},$$

Рисунок 5: Кутові змінні $\theta_{\mathbf{r}}^{(1)}$ та $\theta_{\mathbf{r}}^{(2)}$.

та вважаючи обидва кути малими в границі низьких температур, гамільтоніан (28) можна записати як:

$$H = H_0 + H_{\text{sw}}(\theta^{(1)}) + H_{\text{sw}}(\theta^{(2)}), \quad (29)$$

де H_{sw} – спін-хвильовий гамільтоніан двовимірної XY моделі. Таке наближення ґрунтується на очевидному факті, що при достатньо низьких температурах у скінченній моделі існуватиме спонтанна намагніченість, яку можна вважати спрямованою уздовж осі Oх (див. рис. 5).

Запропоноване наближення дозволяє оцінити асимптотичну поведінку парної кореляційної функції спінів 2D моделі Гайзенберга скінченного розміру:

$$G_2(R) \simeq \begin{cases} (R/a)^{-2\eta^{XY}} & \text{при } \frac{(R/a)^2}{4\beta J} \ll 1 ; \\ (4\pi\beta J)^{-\eta^{XY}} (R/a)^{-\eta^{XY}} & \text{при } \frac{(R/a)^2}{4\beta J} \gg 1 , \end{cases} \quad (30)$$

де $\eta^{XY} = kT/(2\pi J)$ – показник парної кореляційної функції 2D XY моделі у спін-хвильовому наближенні. Фізично нашому наближенню відповідає перша стрічка у (30), коли температура прямує до нуля, а розмір системи, а отже і відстань R , залишаються скінченними. Цей результат ідеально узгоджується із результатами Монте-Карло симуляцій двовимірної моделі Гайзенберга (рис. 6).

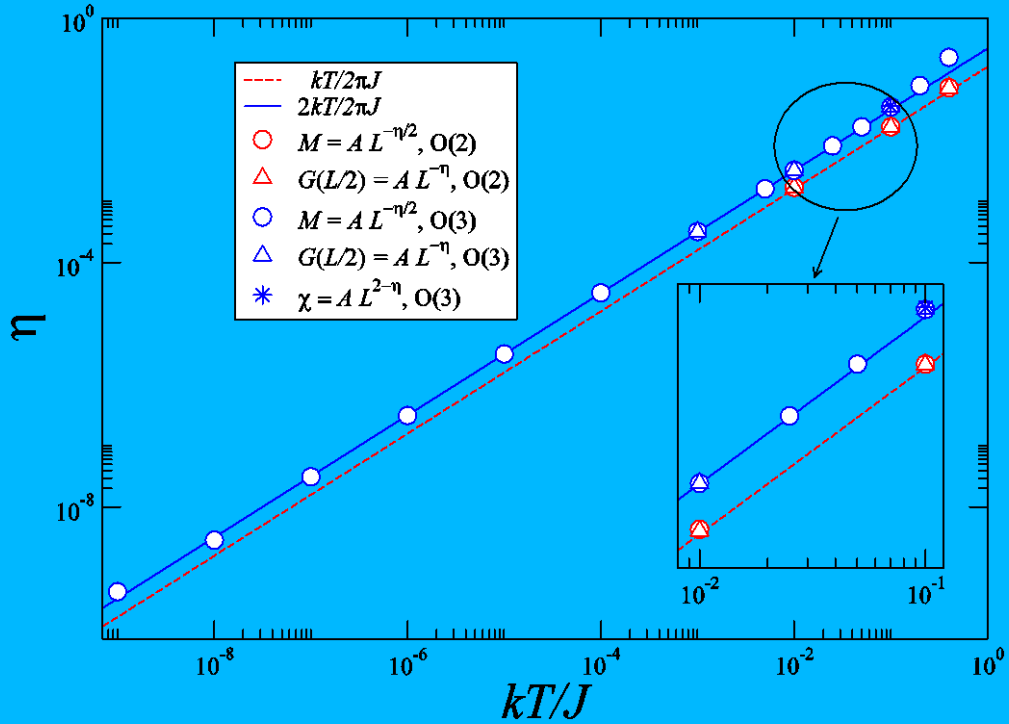


Рисунок 6: Порівняння результатів для показника η двовимірної моделі Гайзенберга, отриманих в Монте-Карло симуляціях та аналітично в межах низькотемпературного наближення. Для порівняння приведено також показник 2D XY моделі (штрихова лінія).

Основні результати та висновки.

1. Досліджено поведінку парної кореляційної функції двовимірної XY моделі із немагнітним безладом заміщення (немагнітним розведенням) у спін-хвильовому наближенні. Показано, що парна кореляційна функція спінів спадає із відстанню за степеневим законом. Така поведінка свідчить про квазі-далекосяжне впорядкування. Обчислено показник загасання як функцію концентрації немагнітних домішок. Аналітично отриманий результат добре узгоджується з результатами Монте-Карло симуляцій розведеної 2D XY моделі, виконаними для різних значень концентрації розведення.
2. Показано, що взаємодія між топологічними дефектами (вихорами) та немагнітними домішками має притягальний характер. Таке твердження, зроблене на підставі аналізу феноменологічної

моделі Костерліца-Таулеса, цілком узгоджується з результатами інших робіт, проте вигідно вирізняється від існуючих оцінок врахуванням мікроскопічної структури ґратки. Отриманий результат узагальнено на довільну кількість топологічних дефектів.

3. Гамільтоніан моделі Вілена із немагнітним безладом, виведений нами з гамільтоніану розведеної 2D XY моделі у низькотемпературній границі, дає повну картину взаємодій у системі, описучи взаємодію немагнітних домішок як з топологічними дефектами, так і зі спін-хвильовими збуреннями основного стану, які не враховувалися в моделі Костерліца-Таулеса. Показано, що асимптотичний вигляд енергії взаємодії спінової вакансії із топологічними дефектами на великих відстанях узгоджується із відповідним результатом, отриманим нами для моделі Костерліца-Таулеса, виявляючи втім деякі ефекти, зумовлені дискретністю ґратки.
4. На основі виразів для енергії взаємодії між топологічними дефектами і немагнітними домішками, отриманих в моделях Вілена та Костерліца-Таулеса, зроблено аналітичну оцінку пониження критичної температури, спричиненого немагнітним розведенням. Отриманий результат виявляє характерні риси поведінки критичної температури як функції концентрації розведення, які спостерігаються у Монте-Карло симуляціях.
5. Представлено у вигляді кільцевих функцій статистичні дані для намагніченості, що спостерігається у двовимірній XY моделі із безладом, отримані нами в Монте-Карло симуляціях. Відзначено нетривіальну залежність форми розподілів імовірності значень намагніченості від концентрації немагнітних домішок, а саме, зростання ширини розподілу із зменшенням концентрації магнітних вузлів. Аналітично розраховане у спін-хвильовому наближенні середнє значення модуля намагніченості у скінченній 2D XY моделі із немагнітним розведенням свідчить про степеневу залежність від лінійного розміру системи із показником, удвічі меншим за показник парної кореляційної функції (у повній аналогії із поведінкою нерозведеної моделі).
6. Аналітичний результат для парної кореляційної функції двовимірної моделі Гайзенберга скінченного розміру, отриманий у низькотемпературному наближенні, свідчить про степеневе загасання із показником, що удвічі перевищує аналогічний показник двовимірної XY моделі (отриманий у спін-хвильовому наближенні). Отриманий результат добре узгоджується із результатами Монте-Карло симуляцій відповідної моделі для різних значень розмірів ґратки в широкому інтервалі низьких температур.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Kapikranian O. Perturbation expansion for the diluted two-dimensional XY model / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch // Phys. Lett. A. -- 2007. -- Vol. 366. -- P. 150--154.

2. Kapikranian O. The 2D XY model on a finite lattice with structural disorder: quasi-long-range ordering under realistic conditions / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch // Eur. Phys. J. B. - 2007. – Vol. 56. -- P. 94--105.
3. Kapikranian O. Finite size induced phenomena in 2D classical spin models / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch // Problems of Atomic Science and Technology, Ser. Nuclear Physics. -- 2007. -- № 3 (2). -- P. 376--379.
4. Kapikranian O. Interplay of topological and structural defects in the two-dimensional XY model / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch // Phys. Lett. A. -- 2008. – Vol. 372. -- P. 5716--5721.
5. Kapikranian O. Quasi-long-range ordering in a finite-size 2D classical Heisenberg model / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch // J. Phys. A: Math. Theor. -- 2007. – Vol. 40. -- P. 3741--3748.
6. Капікраниян О. Є. Топологічні та структурні дефекти у двовимірній XY моделі / Капікраниян О. Є. -- Львів: Ін-т фізики конденсованих систем НАН України, 2008. -- 19 с. -- (Препринт / НАН України, Ін-т фізики конденсованих систем; ICMP--08--11U).
7. Kapikranian O. The low-temperature phase of the disordered finite-size 2D XY model. In ``Book of abstracts: 2nd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics (QEDSP2006)'' / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch. -- Kharkov: NSC KIPT, 2006. -- 212 p.
8. Kapikranian O. Influence of disorder on the 2D XY model properties. In ``MECO32: The 32nd Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics. Abstracts'' / O. Kapikranian, B. Berche, Yu. Holovatch. -- Ladek Zdrój, 2007. -- 78 p.
9. Капікраниян О. Вплив замороженого структурного безладу на поведінку двовимірних спінових моделей неперервної симетрії. У збірці тез ``VII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та конденсованої речовини -- 2008''. - - Львів: ІФКС НАНУ, 2008. - 45 с.
10. Капікраниян О. Є. Вихори та немагнітні домішки у двовимірній XY-моделі (тези доповідей) / О. Є. Капікраниян, Б. Берш, Ю. Головач // Журнал фізичних досліджень. – 2008. – Т. 12, №1. – С. 1998.

Капікраниян О. Є. Вплив безладу на низькотемпературну поведінку двовимірних спінових моделей із неперервною симетрією.– Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика., Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2008.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей двовимірних спінових моделей неперервної симетрії (XY модель, модель Гайзенберга) із такими важливими з практичної точки зору характеристиками ґратки як безлад заміщення та скінченність розміру. Серед арсеналу використаних аналітичних підходів можна виділити спін-хвильове наближення, феноменологічну модель Костерліца-Таулеса, модель Вілена, метод функціонального інтегрування. Було здійснено також серію Монте-Карло симуляцій зазначених моделей на основі алгоритму Вольфа. В результаті дослідження було знайдено аналітичний вигляд низькотемпературної поведінки парної кореляційної функції спінів 2D XY моделі із безладом та 2D моделі Гайзенберга скінченного розміру. Ця функція виявилася степеневим спадною із відстанню в обох випадках; відповідні показники було оцінено аналітично і порівняно з результатами Монте-Карло симуляцій. Було отримано вирази для енергії взаємодії немагнітних домішок із топологічними дефектами в моделі Костерліца-Таулеса та моделі Вілена; результати добре узгоджуються між собою, а також і з іншими роботами в цьому напрямку. Нарешті, на основі виразів для зазначеної взаємодії було оцінено аналітично зниження критичної температури переходу Березінського-Костерліца-Таулеса, спричинене немагнітним розведенням. Середнє значення спонтанної намагніченості та розподіл імовірності її значень в 2D XY моделі із безладом було досліджено в Монте-Карло симуляціях і аналітично у спін-хвильовому наближенні.

Ключові слова: *двовимірна XY модель, топологічні дефекти, заморожений безлад, перехід Березінського-Костерліца-Таулеса, модель Вілена, двовимірна модель Гайзенберга.*

Капикранян О. Е. Влияние беспорядка на низкотемпературное поведение двумерных спиновых моделей с непрерывной симметрией. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2008.

Диссертационная работа посвящена исследованию свойств двумерных спиновых моделей непрерывной симметрии (XY модель, модель Гейзенберга) с такими важными с практической точки зрения характеристиками решетки как беспорядок замещения и конечность размера. Среди арсенала использованных аналитических подходов можно выделить спин-волновое приближение, феноменологическую модель Костерлица-Таулеса, модель Вилена, метод функционального интегрирования. Было произведено также серию Монте-Карло симуляций перечисленных моделей на основе алгоритма Вольфа. В результате исследования было найдено аналитический вид низкотемпературного поведения парной корреляционной функции спинов 2D XY модели с беспорядком и 2D модели Гейзенберга конечного размера. Эта функция оказалась степенноубывающей с расстоянием в обоих случаях; соответственные показатели было оценено

аналитически и сопоставлено с результатами Монте-Карло симуляций. Было получено выражения для энергии взаимодействия немагнитных примесей с топологическими дефектами в модели Костерлица-Таулеса и в модели Вилена; результаты хорошо согласовываются между собой, а также и с другими работами в этом направлении. Наконец, на основе выражений для такого взаимодействия было оценено аналитически снижение критической температуры перехода Березинского-Костерлица-Таулеса, вызванное немагнитным разведением. Среднюю величину спонтанной намагниченности и распределение вероятности её значений в 2D XY модели с беспорядком замещения было исследовано в Монте-Карло симуляциях, а также аналитически в спин-волновом приближении.

Ключевые слова: двумерная XY модель, топологические дефекты, замороженный беспорядок, переход Березинского-Костерлица-Таулеса, модель Вилена, двумерная модель Гейзенберга .

Kapikranian O. Influence of disorder on the low-temperature behaviour of two-dimensional spin models of continuous symmetry. – Manuscript.

Thesis for the defending of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2008

The work is devoted to investigation of the properties of two-dimensional spin models of continuous symmetry (XY model, Heisenberg model) with such important for experimental applications characteristics of the lattice as substitution disorder and finiteness. Among the analytic tools we used one can distinguish the spin-wave approximation, phenomenological Kosterlitz-Thouless model, Villain model, functional integration method. Also a series of Monte Carlo simulations of the stated models were realized on the basis of the Wolff cluster algorithm.

As one of the main outputs of the investigation the asymptotic form of the pair correlation function of spins in the 2D XY model with disorder was found in the low-temperature limit, and it appeared to be power law decaying with distance (just like in the undiluted model) evidencing of the quasi-long-range ordering; the corresponding exponent was estimated analytically up to the third order in the expansion in the disorder parameter and showed good agreement with the results of the Monte Carlo simulations performed for this purpose.

The expressions describing the Villain model with nonmagnetic impurities were obtained in the low-temperature limit from the diluted 2D XY model. The Hamiltonian of the diluted Villain model gave the full picture of interactions in the system: between impurities and vortices as well as between impurities and spin-wave excitations.

The form of the non-magnetic-impurity—vortex interaction energy was obtained both in the phenomenological Kosterlitz-Thouless model based on the continuous medium approximation and from

the microscopic Villain model Hamiltonian; the results accord well between themselves as well as with other works on this topic. Finally, an analytic description of the critical temperature reduction, well known from the Monte Carlo works, caused by quenched non-magnetic dilution, was presented on the basis of the interaction between structural and topological defects mentioned above.

The mean value of the spontaneous magnetization existing in a finite 2D XY model with non-magnetic disorder at low temperatures and its probability distribution function were investigated by Monte Carlo simulations. The results were presented in the form of ring functions, and the non-trivial dependence of their form on the dilution concentration was pointed out. The analytical approach allowed for the reliable estimation of the mean value of magnetization in the low-temperature limit, but failed to describe the dependence of the distribution width on the dilution concentration due to the neglect of the higher powers of temperature.

The asymptotic behaviour of the spin-spin pair correlation function of a finite two-dimensional Heisenberg model was estimated in the low-temperature limit. The obtained power law decay suggests analogy with the quasi-long-range ordering in the 2D XY model, although this analogy is quite formal, since in the 2D Heisenberg model this property survives only as long as the system size remains finite. The analytically estimated exponent is two times larger than the corresponding exponent of the 2D XY model (estimated in the spin-wave approximation) and accords perfectly with the result of the Monte Carlo simulation of the 2D Heisenberg model performed for different sizes of the lattice.

Key words: *two-dimensional XY model, topological defects, quenched disorder, Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition, Villain model, two-dimensional Heisenberg model.*
