

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Дмитро Степанович Іванейко

ДОСЛІДЖЕННЯ КРИТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ РОЗВЕДЕНИХ
МАГНЕТИКІВ З ВИКОРИСТАННЯМ МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

Роботу отримано 9 квітня 2008 р.

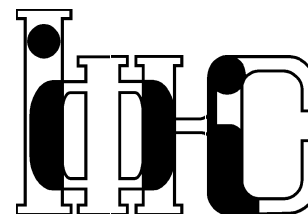
Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу СТЕКС

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-08-06U

Дмитро Іванейко*

ДОСЛІДЖЕННЯ КРИТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ
РОЗВЕДЕНИХ МАГНЕТИКІВ З ВИКОРИСТАННЯМ
МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

* Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Драгоманова 12, Львів 79005

ЛЬВІВ

УДК: 538.913; 537.611.2

PACS: 61.72.-y

Дослідження критичних властивостей розведених магнетиків з використанням методу Монте-Карло

Дмитро Іванейко

Анотація. Здійснено огляд робіт присвячених застосуванню методу Монте-Карло для дослідження статичної і динамічної критичної поведінки розведеної тривимірної моделі Ізинга з випадковими вузлами. Коротко розглянуто три основні Монте-Карло алгоритми (алгоритми Метрополіса, Свендсена-Ванга, Вольфа) та методи аналізу комп'ютерних симуляцій. Для розведеної моделі Ізинга вперше було отримано динамічні критичні показники для кластерних Монте-Карло алгоритмів, а отримані значення статичних показників підтверджують раніше отримані результати.

The Monte Carlo studies of the critical behaviour of diluted magnets

Dmytro Ivaneyko

Abstract. In this review we discuss application of Monte Carlo methods in studying of static and dynamic critical behaviour 3d random-site Ising model. We describe shortly three basic MC algorithms (Metropolis, Swendsen-Wang and Wolff) as well as methods to analyze results of Monte Carlo simulations. Dynamic critical exponents for the 3d random-site Ising model are obtained for cluster algorithms and the results for static exponents are confirmed.

Подається в Фізичний збірник НТШ

Submitted to Collected Physical Papers of Shevchenko Scientific Society

1. ВСТУП

Дослідження критичної поведінки розведених систем є однією з важливих задач фізики конденсованого стану. Це пов'язано з тим, що реальні об'єкти, речовини далекі від ідеальності і мають певні структурні неоднорідності, дефекти (безлад). Найпростіший вид дефектів, що зустрічаються в кристалічних тілах є точковий безлад. Це зокрема домішки, дірки. Також, в матеріалознавстві розрізняють і більш складні дефекти: дислокації, границі розриву, домішки, що утворюють лінії, площини та інші [1–5].

Наявність будь-якого типу безладу ускладнює, а в деяких випадках взагалі не дозволяє теоретично описати критичну поведінку системи з дефектами, що може сильно відрізнятись від критичної поведінки чистої системи. Розрізняють рівноважний та нерівноважний (заморожений) безлад [6]. В першому випадку, критична поведінка розведеної системи визначається через поведінку чистої системи згідно так званого перенормування Фішера [7]. В другому випадку, система може змінити клас універсальності: критичні показники можуть отримати нові невідомі значення.

Для замороженого безладу відомий критерій Гарріса [8], згідно якого наявність домішок змінює клас універсальності системи, якщо в чистій системі відбувається фазовий перехід другого роду з критичним показником теплоємності $\alpha_{pure} > 0$. Розведена система набуває нового класу універсальності, а показник $\alpha_{diluted}$ стає від'ємним.

Однією з можливих систем, в якій відбувається фазовий перехід II роду є тривимірна модель Ізинга (див. розділ 2). Критичний показник питомої теплоємності чистої системи має значення $\alpha_p = 0.109 > 0$. Таким чином, згідно критерію Гарріса, наявність безладу має суттєво впливати на критичну поведінку розведеної тривимірної моделі Ізинга.

Дослідження критичної поведінки розведеної тривимірної моделі Ізинга чисельними методами триває вже більше ніж 25 років [9-25]. З усіх типів безладу найкраще дослідженим в даній моделі є точковий безлад (випадково розподілені нескорельовані немагнітні вузли). В перших роботах спостерігалася певна залежність критичних показників від концентрації розведення, так звані ефективні показники [10, 11, 16, 17]. Пізніше прийшли до висновку, що критичні показники мають асимптотичні значення [9, 13, 14, 19, 23–25].

На даний час з високою точністю знайдені критичні показники як аналітичними так і чисельними методами [2, 3, 26]. Однак, досі зали-

шається не відомим значення універсального відношення критичних амплітуд для магнітної сприйнятливості. Також, не достатньо досліджена динамічна критична поведінка тривимірної моделі Ізинга з випадковими вузлами.

Основний акцент в нашій статті буде зроблено якраз на дослідженні цих питань. Зокрема, ми детальніше зупинимось на результатах отриманих в роботах [27–29]. Основним інструментом дослідження був вибраний метод Монте-Карло. Цей метод дозволяє досліджувати як ідеалізовані системи, так і системи з різним ступенем порушення структури. Також, він дозволяє отримати з високою точністю кількісні значення універсальних характеристик системи в околі температури фазового переходу.

Структура нашого огляду буде такою. В розділі (2) ми опишемо розведену тривимірну модель Ізинга. В розділі (3) розглянемо три основні Монте-Карло алгоритми: алгоритм Метрополіса, Свендсена-Ванга та Вольфа. В розділі (4) ми опишемо один з основних методів оцінки критичних показників в Монте-Карло симуляціях – скінченно-розмірний скейлінг (finite-size scaling, FSS) [30] і техніку переважування гістограм (histogram reweighting technique) [31], яка дозволяє отримати максимум інформації в критичній області, здійснюючи Монте-Карло симуляції лише в одній температурній точці. Застосовуючи ці два методи, ми отримаємо значення ефективних критичних показників (підрозділ 4.3).

Крім того, ми також обчислимо універсальну комбінацію G^+ / G^- критичних амплітуд магнітної сприйнятливості χ при $T > T_c$ і $T < T_c$, відповідно (підрозділ 4.4).

В розділі (5) дослідимо динамічну критичну поведінку системи в околі критичної точки. Порівняємо різні алгоритми методу Монте-Карло, обговорюючи області їх застосування, переваги та недоліки в залежності від мети симуляцій. Знайдемо динамічні критичні показники розведеної тривимірної моделі Ізинга для трьох різних Монте-Карло алгоритмів (підрозділ 5.3).

2. РОЗВЕДЕНА ТРИВИМІРНА МОДЕЛЬ ІЗИНГА (RIM)

Модель Ізинга є однією з найвідоміших і найбільш дослідженою моделлю в статистичній механіці. Вперше вона була введена в 20-тих роках минулого століття В. Ленцом в теорії магнетизму [32, 33], а зараз ця модель перетворилася в універсальну модель для вивчення критичності у багатьох системах, в яких складовий елемент ("спін")

може приймати два стани. Через простоту і універсальність формулювання, модель Ізинга використовується для пояснення критичних явищ різної природи. Зокрема і тих, що відбуваються в хемії, біології, соціології, тощо [34–36]. В фізиці конденсованих систем модель Ізинга використовується для пояснення критичної точки рідина-газ, фазових переходів у бінарних сплавах заміщення, одновісних (анти-)ферромагнетиках. Зокрема, модель Ізинга дала можливість дослідити вплив структурного безладу на критичність. Далі ми будемо розглядати модель Ізинга в застосуванні до вивчення магнетизму в тривимірних системах з певним ступенем структурного безладу.

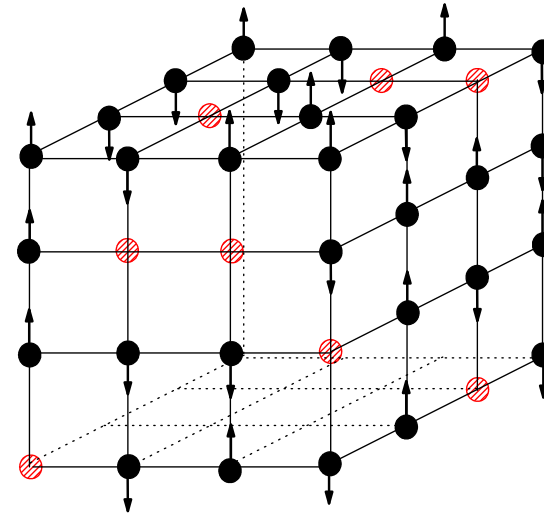


Рис. 1. Розведена тривимірна модель Ізинга. Червоні заштриховані кружечки позначають немагнітні частинки

Гамільтоніан розведеної моделі Ізинга (Random Ising model, RIM) має вигляд

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} c_i c_j S_i S_j, \quad (2.1)$$

де $\langle ij \rangle$ означає підсумовування за найближчими сусідами у тривимірній простій кубічній ґратці, J – константа взаємодії, c_i, c_j – числа заповнення магнітною складовою. Змінна $c_i = 1$, якщо i -ий вузол займає спін і $c_i = 0$, якщо i -ий вузол зайнятий немагнітною частинкою.

У моделі Ізинга, яка розглядається в даній роботі, спіні S_i приймає два значення ± 1 .

Надалі ми зупинимось на роботах в яких досліджувався вплив нерівноважного замороженого безладу на критичну поведінку тривимірної моделі Ізинга. Вважаємо, що магнітні та немагнітні вузли випадково накидані і зафіксовані у якісь конфігурації (див. рис. 1). Імовірність заповнення вузла i магнітною частинкою рівна

$$P(c_i) = (1 - p)\delta(c_i) + p\delta(c_i - 1), \quad (2.2)$$

де p – концентрація магнітної компоненти. Функція (2.2) нормована на 1

$$\sum_{c_i=0,1} P(c_i) = 1. \quad (2.3)$$

Функція розподілу для цілого зразка у випадку відсутності кореляцій між вузлами запишеться як

$$P(\{c_i\}) = \prod_{i=1}^N P(c_i). \quad (2.4)$$

Для заданого розташування магнітних вузлів термодинамічне середнє значення деякої спостережуваної величини \mathcal{O} при температурі T можна обчислити термодинамічним усередненням за розподілом Больцмана як

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Sp } \mathcal{O} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.5)$$

де $\beta = (k_B T)^{-1}$, $K = J/k_B T$ – безрозмірна константа зв'язку, k_B – стала Больцмана, а \mathcal{Z} – конфігураційно залежна статистична сума

$$\mathcal{Z} = \text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (2.6)$$

Шпур (2.6) береться за всіма спіновими ступенями вільності.

Відповідно, для знаходження спостережуваного значення величини \mathcal{O} , необхідно усереднити $\langle \mathcal{O} \rangle$ за всіма можливими конфігураціями немагнітних вузлів. Таке усереднення називатимемо конфігураційним (на відміну від термодинамічного усереднення (2.5)) і позначатимемо як

$$\overline{\langle \mathcal{O} \rangle} = \prod_i \sum_{c_i=0,1} P(c_i) \langle \mathcal{O} \rangle, \quad (2.7)$$

В наступному розділі (3) ми покажемо як в теорії критичних явищ за допомогою методу Монте-Карло обчислюють термодинамічне середнє деякої спостережуваної величини \mathcal{O} (2.5). Схематично

опишемо три основні Монте-Карло алгоритми, що застосовуються у симуляціях. Приведемо методику аналізу Монте-Карло симуляцій для отримання повної картини критичної поведінки системи.

3. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО В ТЕОРІЇ КРИТИЧНИХ ЯВИЩ

3.1. Статистичне обґрунтування методу Монте-Карло

Основним завданням класичної статистичної фізики є обрахунок (або асимптотична оцінка при $N, V \rightarrow \infty$) конфігураційного інтегралу

$$Q_N = \int \int_{(V)} \dots \int e^{-U_N(r_1, \dots, r_N)/k_B T} dr_1 \dots dr_N, \quad (3.1)$$

де N – кількість частинок, V – об'єм, $U_N(r_1, \dots, r_N)$ – енергія взаємодії N -частинкової системи, яка вважається відомою. Через труднощі аналітичного обчислення конфігураційного інтегралу (3.1) для реальних об'єктів, виникли чисельні підходи. Одним з них є метод Монте-Карло.

Ідея застосувати чисельні методи до задач статистичної фізики була вперше висловлена Дж. Майером і застосована в роботі Н. Метрополіса та ін. [37]. В математичному розумінні метод Монте-Карло означає метод чисельного обрахунку одно- або багатовимірних інтегралів, в якому вводяться специфічні імовірнісні елементи. У застосуванні до задач статистичної фізики, головним чином, мова йде про обчислення багатократних інтегралів типу (3.1) шляхом чисельного інтегрування за випадковим набором точок фазового простору узгальнених координат, використовуючи спеціальні правила їх відбору. При визначенні, наприклад, середнього значення функції F

$$\langle F \rangle = Q_N^{-1} \int \int_{(V)} \dots \int F(r_1, \dots, r_N) e^{-U_N(r_1, \dots, r_N)/k_B T} dr_1 \dots dr_N, \quad (3.2)$$

усереднення ведеться за послідовністю випадкових конфігурацій, кожна наступна з яких однозначно задається попередньою. Такий ланцюг послідовних конфігурацій називається марківським [38]. Виходячи з цього, можна записати

$$\langle F \rangle = Q'_N{}^{-1} \sum_{i=1}^s F_i e^{-U_i/k_B T}, \quad (3.3)$$

$$Q_N \sim Q'_N = \sum_{i=1}^s e^{-U_i/k_B T}, \quad (3.4)$$

де сума визначається за вище згаданою послідовністю конфігурацій.

Відмітимо, що в просторі випадкових конфігурацій існує безліч марківських ланцюгів. Проблема вибору найоптимальнішого ланцюга долається за допомогою так званої умови детального балансу, яка виражає собою, принцип мікроскопічної оборотності в системі. Тому при практичній побудові конкретного типу марковського ланцюга з необхідними нам граничною властивістю можна виходити з співвідношення

$$p_{ij}e^{-U_i/k_B T} = p_{ji}e^{-U_j/k_B T}, \quad (3.5)$$

де p_{ij} – імовірність переходу з конфігурації i в конфігурацію j . Таким чином, марківський ланцюг, всі стани якого утворюють один ергодичний клас і імовірності переходів в який задовільняють умові (3.5), збігається до канонічного ансамблю Гіббса в тому значенні, що при досить довгій довжині ланцюга різні стани намагаються з'явитися з частотами, пропорційними больцманівським множникам $e^{-U_i/k_B T}$. Збіжність не залежить від вибору початкового стану, і середні від функцій станів вздовж ланцюга прямують до середніх по канонічному ансамблю.

Принцип мікроскопічної оборотності в системі вперше було реалізовано в алгоритмі Метрополіса.

3.2. Алгоритм Метрополіса

Алгоритм Метрополіса історично був першим алгоритмом Монте-Карло [37]. В основі цього методу лежить здійснення вибірки з конфігураційного простору, при якій кожна спінова конфігурація вже має відповідну больцманівську вагу. Замість того, щоб кожну нову конфігурацію генерувати незалежно, вона утворюється із попередньої шляхом виконання локальних змін. Така схема повинна задовольняти умову детального балансу, що забезпечує правильне здійснення вибірки фазового простору. Як результат, утворюється марківський ланцюг конфігурацій, що визначає псеводинаміку системи.

В алгоритмі Метрополіса послідовно відбувається перекидання одного із спінів. Новий стан спіну приймається з імовірністю P , рівною відношенню ваг Гіббса

$$P = \begin{cases} e^{\frac{(E_1 - E_2)}{k_B T}}, & \text{при } E_1 < E_2 \\ 1, & \text{при } E_1 > E_2. \end{cases} \quad (3.6)$$

де E_1, E_2 – енергії системи із старим і новим значенням спіну відповідно. Якщо новий стан не прийнято, то старий стан не змінюється.

Така процедура повторюється N разів, що приводить до нової конфігурації системи. Таким чином, завершено один Монте-Карло крок (MCS, MC step). Середні значення обчислюються з використанням отриманих конфігурацій. Алгоритм Метрополіса може бути узагальнений на випадок моделей з неперервним значенням спіну [39].

Таким чином, алгоритм Метрополіса для моделі Ізинга можна записати у вигляді блок-схеми:

1. Створити початкову конфігурацію з N спінів.
2. Перевернути випадково вибраний спін S_i .
3. Оцінити різницю енергій $\Delta E = E_1 - E_2$ в новому і старому станах.
4. Прийняти нову конфігурацію з імовірністю $P = \min(1, e^{-\Delta E/k_B T})$.
5. Повторити кроки 2 до 4 поки N спроб перевертання спінів не буде зроблено.
6. Кінець одного Монте-Карло кроку, зберегти моментальні значення характеристик системи.
7. Повторити кроки 2 до 6 поки не буде зроблено N_{sim} кроків Монте-Карло.

Відмітимо, що алгоритм Метрополіса не є єдиним, який задовольняє умові детального балансу. Існують також інші Монте-Карло алгоритми, наприклад Глаубера [40] та Кавасакі [41]. Всі три згадані алгоритми є локальними, оскільки тільки один спін (два спіни у випадку алгоритму Кавасакі) оновлюється за одну спробу. Локальність цих алгоритмів – серйозний недолік біля критичної точки, де з'являються великі кластери скорельованих спінів. Як результат, велика кількість спроб перевернути одинарні спіни є марною. Тому послідовні конфігурації сильно скорельовані і система рухається в фазовому просторі неефективно. Щоб подолати ці труднощі, було запропоновано декілька кластерних алгоритмів.

3.3. Алгоритм Свендсена-Ванга

Кластерні алгоритми проектувалися, щоб подолати проблему великих скорельованих спінів поблизу T_c . Вони базуються на утворенні спінових кластерів, використовуючи ідеї перколяції. Тоді, спінові кластери можуть бути перевернені згідно з певними правилами.

У випадку моделі Ізинга (або більш загальної моделі Поттса), перколяційний процес відбувається через випадкові зв'язки, які вперше було запропоновано К. Фортуїном і П. Кастеляйном [42]. Ідея цього методу полягає в розбитті системи на набір кластерів, побудованих із однаково орієнтованих спінів. Зв'язування спінів в клас-

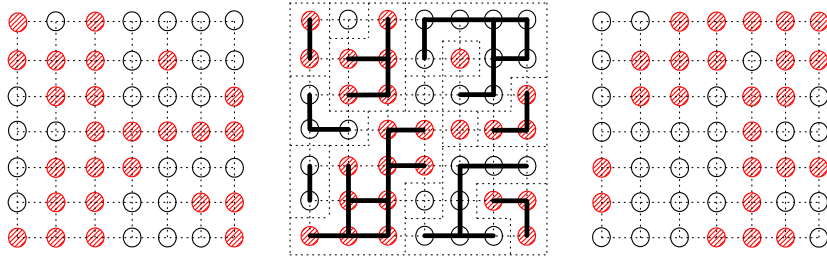


Рис. 2. Перколяційні кластери в алгоритмі Свендсена-Ванга на двовимірній ґратці.

тери відбувається з врахуванням больцманівської ваги для кожного зв'язку. Це дозволяє уникнути перерахунку енергій нової і старої конфігурацій (що робилось у алгоритмі Метрополіса). У алгоритмі Свендсена-Ванга [43], основні кроки такі:

1. Приготувати початкову конфігурацію, що складається з N спінів.

2. Розбити систему на кластери (кожен кластер формується із з'єднаних спінів однакової орієнтації, а спіни i та j вважаються з'єднаними з ймовірністю $P = 1 - e^{-2\beta J c_i c_j}$, c_i і c_j – числа заповнення).

3. Усім спінам, що належать до того самого кластеру присвоїти однакове випадкове значення $+1$ або -1 .

4. Кінець одного Монте-Карло кроку, зберегти моментальні значення характеристик системи.

5. Повторити кроки 2 до 4 поки не буде зроблено N_{sim} кроків Монте-Карло.

Ймовірність утворення зв'язку $P = 1 - e^{-2\beta J c_i c_j}$ вибрана таким чином, щоб задовольнити умову детального балансу. Вона також гарантує, що нова конфігурація приймається з ймовірністю $P = 1$ [44].

Фактично, алгоритм Свендсена-Ванга розбиває спінову систему на кластери в критичній області (при порозі протікання). Існування кластерів досить великих розмірів поблизу критичної точки сприяє ефективному рухові в фазовому просторі на противагу локальним алгоритмам.

3.4. Алгоритм Вольфа

В 1989 році У. Вольф запропонував однокластерний алгоритм [39], який концептуально подібний до алгоритму Свендсена-Ванга. Схема алгоритму така:

1. Приготувати початкову конфігурацію, що складається з N спінів.

2. Випадково вибрати спін S_i .

3. Починаючи зі спіну S_i , побудувати навколо нього кластер, який містить спіни такої ж орієнтації і зв'язані один з одним з ймовірністю $P = 1 - e^{-2\beta J c_i c_j}$.

4. Перевернути всі спіни в цьому кластері.

5. Кінець одного Монте-Карло кроку, зберегти моментальні значення характеристик системи.

6. Повторити кроки 2 до 5 поки не буде зроблено N_{sim} кроків Монте-Карло.

Відмітимо, що даний алгоритм, перевертає спіни лише одного кластеру і тому проводиться тільки часткове оновлення системи. Щоб мати такий самий масштаб кроку, як в алгоритмах Метрополіса і Свендсена-Ванга, потрібно промасштабувати крок в алгоритмі Вольфа. Для цього обраховується коефіцієнт нормування $c = n_{\text{cluster}}/N_p$, де n_{cluster} – середній розмір кластеру, що перевернули в системі розміру L .

4. СТАТИЧНІ КРИТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРИВИМІРНОЇ МОДЕЛІ ІЗИНГА З РОЗВЕДЕНИМИ ВУЗЛАМИ

В Монте-Карло симуляціях кожна спінова конфігурація генерується з Больцманівською вагою. Таким чином для заданої конфігурації магнітних та немагнітних вузлів термодинамічне середнє означене в (2.5), зводиться до арифметичного середнього за всіма згенерованими конфігураціями. Якщо N_{steps} є сумарне число Монте-Карло кроків, тоді

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N_{\text{steps}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{steps}}} \mathcal{O}_n, \quad (4.1)$$

де \mathcal{O}_n – значення фізичної величини \mathcal{O} на n -ому кроці Монте-Карло симуляції.

В ідеальному випадку, коли конфігурації є статистично незалежними (нескорельованими), сумарна похибка при визначенні $\langle \mathcal{O} \rangle$ може бути записана як

$$\langle \delta \mathcal{O} \rangle = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^{N_{\text{steps}}} (\delta \mathcal{O}_n)^2}{N_{\text{steps}} (N_{\text{steps}} - 1)}}, \quad (4.2)$$

де $\delta\mathcal{O}_n = \mathcal{O}_n - \langle \mathcal{O} \rangle$. На практиці, отримати статистично незалежні конфігурації є досить важко. Кореляції між різними спіновими конфігураціями є результатом застосування певного Монте-Карло алгоритму. Від величини кореляцій залежить ефективність того чи іншого алгоритму. Кількісно, кореляція описується автокореляційною функцією, що стандартно визначається у часових змінних як [45]

$$C_{\mathcal{O}}(\delta t) = \frac{\langle \delta\mathcal{O}(t_0 + \delta t)\delta\mathcal{O}(t_0) \rangle}{\langle \delta\mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle \langle \delta\mathcal{O}(t_0) \rangle}, \quad (4.3)$$

де t_0 – початок відліку Монте-Карло кроків. В Монте-Карло симуляціях роль часу t відіграє крок n . Детальний розгляд автокореляційних функцій буде присвячений розділ (5).

4.1. Скінченно-розмірний скейлінг і техніка переважування гістограм

Статична критична поведінка системи в термодинамічній границі може бути отримана з властивостей системи скінченного розміру L . Це можна здійснити за допомогою дослідження залежності від L сингулярної частини густини вільної енергії. Такий підхід, що називається скінченно-розмірний скейлінг (finite-size scaling, FSS), вперше був запроваджений М. Фішером [30].

Згідно з цією теорією, вільна енергія системи достатньо великого, але скінченного розміру L , з граничними періодичними умовами поблизу критичної температури безмежної системи T_c може бути записана як

$$F_{L,T,H} = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}^0(tL^{1/\nu}, hL^{(\gamma+\beta)/\nu}), \quad (4.4)$$

де $t = (T - T_c)/T_c$, h – зовнішнє магнітне поле, а α, ν, β і γ – критичні показники теплоємності, кореляційної довжини, намагніченості та магнітної сприйнятливості безмежної системи.

Ввівши нові скейлінгові змінні $x_t = tL^{1/\nu}$ та $x_h = hL^{(\gamma+\beta)/\nu}$, для вільної енергії (4.4) отримаємо

$$F_{L,T,H} = L^{-(2-\alpha)/\nu} \mathcal{F}^0(x_t, x_h). \quad (4.5)$$

За відсутності зовнішнього поля, кладемо $x_h = 0$.

Різні термодинамічні величини, як скейлінгові рівняння для намагніченості $C(T, L)$, теплоємності $m(T, L)$ і магнітної сприйнятливості $\chi(T, L)$ отримуються шляхом диференціювання вільної енергії за відповідними параметрами

$$C(T, L) = L^{\alpha/\nu} C^0(x_t), \quad (4.6)$$

$$m(T, L) = L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}^0(x_t), \quad (4.7)$$

$$\chi(T, L) = L^{\gamma/\nu} \chi^0(x_t). \quad (4.8)$$

Статичні критичні показники α, ν, β і γ задовільняють співвідношенням гіперскейлінгу

$$2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma, \quad (4.9)$$

а інші критичні показники можна знайти за відомими скейлінговими співвідношеннями [46].

Рівняння (4.6)-(4.8), що відтворюють критичну поведінку безмежної системи для великих $tL^{1/\nu}$ ($t \ll 1$ і $L \rightarrow 1$), забезпечують асимптотичну форму $\mathcal{M}^0(tL^{1/\nu}) \sim t^\beta L^{\beta/\nu}$ і $\chi^0(tL^{1/\nu}) \sim t^{-\gamma} L^{-\gamma/\nu}$.

Критична температура системи визначається положенням точок екстремумів відповідних термодинамічних величин. Наприклад, для сприйнятливості $\chi(T, L)$ системи скінченного розміру точка досягається при температурі, де $\left. \frac{d\chi^0(x_t)}{dx_t} \right|_{x_t=x_t^*} = 0$. Умова $x_t = x_t^*$ визначає температуру фазового переходу системи скінченного розміру $T_c(L)$, або ефективну температуру фазового переходу. Ця критична температура міняється асимптотично зі зміною розміру системи як

$$T_c(L) = T_c + T_c x_t^* L^{-1/\nu}, \quad (4.10)$$

Для систем малих розмірів існують поправки до скінченно-розмірного скейлінгу [47]. Наприклад, температура переходу тоді буде мати вигляд

$$T_c(L) = T_c + T_c x_t^* L^{-1/\nu} (1 + cL^{-w}) = T_c + \lambda' L^{-1/\nu} (1 + cL^{-w}), \quad (4.11)$$

де w – показник поправки до скейлінгу. В термінах безрозмірної оберненої температури $K = J/k_B T$ (4.10) зміниться

$$K_c(L) = K_c + \lambda L^{-1/\nu} (1 + cL^{-w}). \quad (4.12)$$

Довгий час існувала певна трудність оцінки критичного показника ν в методі Монте-Карло, поки Курт Біндер не запропонував таку оцінку ν на підставі магнітного кумулянту U четвертого порядку, (який тепер прийнято називати кумулянтом Біндера) [48]

$$U = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (4.13)$$

де m – намагніченість на один спін. К. Біндер показав, що нахил кумулянта $U(K)$ в критичній області має максимальне значення,

пропорційне до $L^{1/\nu}$ [48]. З врахуванням поправки до скейлінгу, то залежність буде мати вигляд

$$\left. \frac{dU}{dK} \right|_{max} = -T^2 \left. \frac{dU}{dT} \right|_{max} = aL^{1/\nu}(1 + bL^{-w}). \quad (4.14)$$

Відмітимо, що положення максимуму нахилу кумулянта Біндера служить також для оцінки ефективної критичної температури $T_c^U(L)$.

Поряд з кумулянтом Біндера для оцінки показника ν використовують також інші величини. Наприклад, логарифмічна похідна від намагніченості будь-якої степені

$$\frac{\partial}{\partial K} \ln \langle m^n \rangle = \frac{1}{\langle m^n \rangle} \frac{\partial}{\partial K} \langle m^n \rangle = \left[\frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle \right]. \quad (4.15)$$

має таку саму критичну поведінку як нахил кумулянта Біндера, але при критичній температурі, яка характеризує аномалію цієї величини. Положення максимуму нахилу величини (4.15) також дозволяє визначити додаткове значення ефективної критичної температури $T_c^m(L)$.

Для оцінки $T_c(L)$ також використовують похідну від $|m|$ за K та магнітну сприйнятливості χ (4.21) системи скінченного розміру.

Щоб визначити критичні показники β і γ використовують рівності (4.7)-(4.8). В критичній точці ($t = 0$), скейлінг спонтанної намагніченості можна описати як $m(T_c, L) \sim L^{-\beta/\nu} M^0(0)$. В логарифмічній шкалі $\ln m(T_c, L) \sim -\beta/\nu \ln L$. Відкладаючи на графіку залежність $\ln m$ від $\ln L$ для різних розмірів системи, і апроксимуючи її лінійною функцією ми отримуємо значення $-\beta/\nu$. Подібно як для намагнічення, співвідношення γ/ν можна знайти з лінійної інтерполяції функції $\ln \chi(L)$.

При застосуванні методу скінченно-розмірного скейлінгу корисною виявляється техніка переважування гістограм (histogram reweighting technique) [31]. Вона дозволяє отримати максимум інформації з Монте-Карло симуляцій здійснених при одній температурі.

Як було сказано в розділі (3) метод Монте-Карло здійснює симуляцію системи при температурі $T = T_0$, генеруючи конфігурації з ймовірностями пропорційними до Больцманівської ваги, $e^{-\beta_0 \mathcal{H}}$, де $\beta_0 = 1/k_B T_0$ – обернена температура, \mathcal{H} – гамільтоніан системи. Для спінових систем, в змінних $K_0 = \beta_0 J$ і $E = -\sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$ вага матиме вигляд $e^{K_0 E}$. Ймовірність спостереження системи, що при темпера-

турі T_0 має енергію E і намагніченість $M = \sum_i S_i$ запишеться

$$P_{K_0}(E, M) = \frac{1}{Z(K_0)} W(E, M) e^{K_0 E}, \quad (4.16)$$

де $W(E, M)$ – кількість конфігурацій (густина станів) з енергією E і намагніченістю M , $Z(K_0)$ – статистична сума системи. Під час симуляцій будується гістограма розподілу за значеннями E і $M H_{K_0}(E, M)$, яка є оцінкою для $P_{K_0}(E, M)$ [31]. З рівняння (4.16) бачимо, що розподіл $P_K(E, M)$ для іншої температури T (відповідно $K = J/k_B T$) має вигляд

$$P_K(E, M) = \frac{1}{Z(K)} W(E, M) e^{KE} \approx H_K(E, M), \quad (4.17)$$

де знак \approx позначає оцінку під час симуляцій.

Зауважимо, що при температурі K_0 функція розподілу $H_K(E, M)$, може бути отримана переважуванням розподілу $H_{K_0}(E, M)$

$$H_K(E, M) = \frac{1}{Z(K)} H_{K_0}(E, M) e^{(K-K_0)E}, \quad (4.18)$$

де $Z(K) = \sum_{E, M} H_{K_0}(E, M) e^{(K-K_0)E}$. З $H_K(E, M)$ середнє значення довільної функції, що залежить від E і K , $f(E, M)$ може бути отримане як

$$\langle f(E, M) \rangle = \sum_{E, M} f(E, M) H_K(E, M). \quad (4.19)$$

В такий спосіб можна обчислити середні при будь-якій температурі K , що дозволяє визначити точки екстремумів термодинамічних функцій з високою точністю.

4.2. Параметри Монте-Карло симуляції моделі RIM

Застосуємо тепер описані в розділі (3) алгоритми Монте-Карло та методи для аналізу критичної поведінки тривимірної моделі Ізинга з гамільтоніаном (2.1) і розглянемо результати отримані в роботах [27–29]. У цих роботах виконувались симуляції тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами на простій кубічній ґратці з ребром довжиною L і сталою ґратки, рівною 1. Усі симуляції здійснювались для восьми ґраткових розмірів $L = 10, 12, 16, 24, 32, 48, 64, 96$ з використанням періодичних граничних умов.

Надалі, ми використовуватимемо такі позначення: кількість вузлів ґратки – $N = L^3$, кількість "магнітних" вузлів – N_p . Концентрація спінів визначається як $p = N_p/N$, концентрація немагнітних розведених вузлів рівна $1 - p$. Концентрація спінів обиралась сталою і рівною $p = 0.85$. Такий вибір був зумовлений тим, що для тривимірної випадкової моделі Ізинга при концентрації спінів $p \sim 0.8$ поправки до скейлінгу є досить малими [19]. Це дало можливість не враховувати цих поправок.

Під час симуляцій на кожному кроці записувалась енергія системи (2.1) і намагніченість, що припадає на один вузол

$$m = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^N c_i S_i \quad (4.20)$$

Для кожної реалізації безладу була оцінена магнітна сприйнятливність згідно флуктуаційно-дисипативної теореми (4.21)

$$\chi = KN_p(\langle |m|^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2). \quad (4.21)$$

де $\langle \dots \rangle$ означає термодинамічне середнє і $K = \beta J = J/k_B T$ – безрозмірна константа зв'язку. З максимуму сприйнятливості кожної репліки знайдена її критична температура $T_c(L)$. Середня критична температура для всіх реплік $\overline{T_c(L)}$.

4.3. Критичні показники тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами та критична температура безмежної системи

Для оцінки критичних показників виконувалась описана раніше традиційна схема скінченно-розмірного скейлінгу. Відповідно до неї, обчислювався ряд термодинамічних величин, як функції безрозмірної константи зв'язку K для кожної реалізації безладу (для кожної репліки). Для визначення показника ν обчислювали кумулянт Біндера U (4.13), та логарифми першого і другого степеня модуля намагніченості $\ln \langle |m| \rangle$ і $\ln \langle m^2 \rangle$ (4.15) відповідно. Усі ці три величини мають однакову скейлінгову поведінку, що пропорційна до $L^{1/\nu}$

$$\left. \frac{dU}{dK} \right|_{max} = -T^2 \left. \frac{dT}{dT} \right|_{max} \sim L^{1/\nu}, \quad (4.22)$$

$$\left. \frac{d}{dK} \ln \langle |m| \rangle \right|_{max} = -T^2 \left. \frac{d}{dT} \ln \langle |m| \rangle \right|_{max} \sim L^{1/\nu}, \quad (4.23)$$

$$\left. \frac{d}{dK} \ln \langle m^2 \rangle \right|_{max} = -T^2 \left. \frac{dT}{dT} \right|_{max} \ln \langle m^2 \rangle \Big|_{max} \sim L^{1/\nu}, \quad (4.24)$$

Значення похідних визначались чисельно, завдяки неперервності цих функцій від $T(K)$. Зазначимо, що метод переважування гістограм дозволив отримати (4.22)-(4.24) як неперервні функції температури. Для кожної реалізації безладу було знайдено максимальне значення похідних, зробили конфігураційне усереднення і отримали $\left. \frac{dU}{dK} \right|_{max}$, $\left. \frac{d \ln \langle |m| \rangle}{dK} \right|_{max}$ та $\left. \frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK} \right|_{max}$. Відкладаючи на графіку в логарифмічному масштабі ці три величини для різних розмірів системи L , три значення ν^{-1} (рис. 3) отримали лінійною інтерполяцією і приведені в таблиці 1.

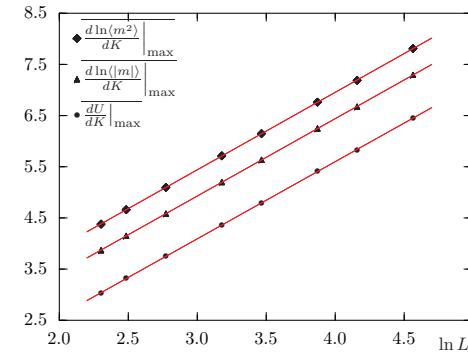


Рис. 3. Конфігураційно усереднені максимальні значення температурних похідних від кумулянта Біндера (4.22) (диски), логарифмів модуля намагніченості $\ln \langle |m| \rangle$ (4.23) (трикутники) і $\ln \langle m^2 \rangle$ (4.24) (ромби) в логарифмічному масштабі

Усереднення трьох незалежних результатів для показника ν приводить до значення

$$\nu = 0.662 \pm 0.002. \quad (4.25)$$

Отримане значення для ν суттєво відрізняється від аналітично обчисленого значення відповідного показника ν для чистої тривимірної моделі Ізинга: $\nu = 0.6304(13)$ [49] і світить про те, що розведення магнітною компонентою змінює клас універсальності RIM. Однак, воно трошки менше асимптотичного значення ν випадкової тривимірної моделі Ізинга, отриманого в теоретико-польовому RG

interpolation of	$1/\nu$	ν
$\frac{dU}{dK} _{\max}$	1.507 ± 0.008	0.664 ± 0.004
$\frac{d \ln \langle m \rangle}{dK} _{\max}$	1.512 ± 0.001	0.661 ± 0.001
$\frac{d \ln \langle m^2 \rangle}{dK} _{\max}$	1.514 ± 0.001	0.660 ± 0.001

Табл. 1. Значення критичного показника ν , отриманого за допомогою лінійної інтерполяції похідних від кумулянта Біндера (4.22), логарифмів модуля намагніченості $\ln \langle |m| \rangle$ (4.23) і $\ln \langle m^2 \rangle$ (4.24) в логарифмічному масштабі.

підході $\nu = 0.678(10)$ [50] і за допомогою Монте-Карло симуляцій $\nu = 0.6837(53)$ [19], $\nu = 0.683(3)$ [24]. Очевидно, що для вибраної спінової концентрації $p = 0.85$ і розмірів $L = 10 \div 96$ система все ще не перебуває в асимптотичному режимі. Відмітимо, що подібні оцінки для ν були отримані при подібних параметрах симуляцій (і нехтування поправок до скейлінга) в Монте-Карло симуляціях тривимірної моделі Ізинга з випадковими вузлами: $p = 0.9$, $L = 64 \div 128$, $\nu = 0.6644(15)$ [19]; і для тривимірної моделі Ізинга з випадковими зв'язками: $p_{bonds} = 0.7$, $\nu = 0.660(10)$ [25].

Аналогічну схему скінчено-розмірного скейлінгу застосовують для оцінки інших критичних показників, зокрема для показника магнітної сприйнятливості γ і намагніченості β [51]. Згідно з цією схемою для системи скінченного розміру L в критичній області ми маємо

$$\overline{\chi_{\max}} \sim \Gamma L^{\gamma/\nu}, \quad \overline{\langle m \rangle} \sim B L^{-\beta/\nu}, \quad (4.26)$$

де Γ та B – критичні амплітуди. В (4.26) $\overline{\chi_{\max}}$ – це усереднене значення по всіх реалізаціях безладу максимального значення сприйнятливості порахованої для кожної репліки, а $\overline{\langle m \rangle}$ – усереднене значення намагніченості порахованої для кожної репліки в температурі, де сприйнятливість має максимальне значення. Результати дослідження зображені на Рис. 4 в логарифмічному масштабі.

Відзначимо, що дані обох рисунків майже ідеально інтерполюються прямою. Використовуючи лінійну інтерполяцію і оцінюючи її точність методом найменших квадратів, отримують такі значення критичних показників γ і β , [27]

$$\gamma/\nu = 1.986 \pm 0.001 \quad (4.27)$$

$$\beta/\nu = 0.509 \pm 0.001 \quad (4.28)$$

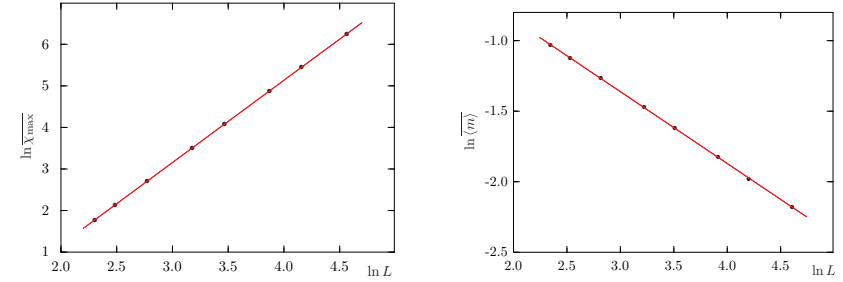


Рис. 4. Усереднені значення максимуму сприйнятливості $\overline{\chi_{\max}}$ та намагніченості $\overline{\langle m \rangle}$, отримані для різних розмірів системи L , відкладені в логарифмічному масштабі.

$$\gamma = 1.314 \pm 0.004 \quad (4.29)$$

$$\beta = 0.337 \pm 0.001. \quad (4.30)$$

З тих самих причин, що і показник ν , значення (4.27)-(4.30) помітно відрізняються від їх асимптотичних еквівалентів в чистій тривимірній моделі Ізенга: $\beta = 0.3546(28)$, $\gamma = 1.342(10)$ [19]. Наші значення добре узгоджуються з іншими чисельними оцінками показників для тривимірної моделі Ізинга з розведеними зв'язками: $\beta/\nu = 0.515(5)$, $\gamma/\nu = 1.97(2)$ [25]. Це служить підтвердженням того, що тривимірний модель Ізинга з випадковими вузлами і з випадковими зв'язками належать до одного класу універсальності.

Поряд зі значенням критичного показника ν було оцінено критичну температуру для системи безмежного розміру $T_c(\infty)$.

$$T_c(\infty) = 3.7566845 \pm 0.0001175, \quad \beta_c = T_c^{-1}(\infty) = 0.2661922 \pm 0.0000083. \quad (4.31)$$

Оцінка для T_c отримана при концентрації спінів $p = 0.85$ [27] знаходиться між відповідними значеннями, отриманими раніше для $p = 0.8$ і $p = 0.9$. Справді, ці оцінки є такими: $\beta_c(p = 0.8) = 0.2857368(52)$; $\beta_c(p = 0.9) = 0.2492880(35)$ [19], $\beta_c(p = 0.8) = 0.2857447(24)$ [24].

4.4. Відношення критичних амплітуд тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами

Критичні амплітуди Γ^+ і Γ^- характеризують поведінку магнітної сприйнятливості в критичній області

$$\chi = \begin{cases} \Gamma^+ t^{-\gamma}, & T > T_c \\ \Gamma^- t^{-\gamma}, & T < T_c. \end{cases} \quad (4.32)$$

Їх відношення – універсальне (не залежить від мікроскопічних параметрів системи) і донедавна не було визначене методом Монте-Карло. В роботі [27] було використано метод для оцінки критичних амплітуд Γ^+ і Γ^- , вперше запропонований в роботі [25].

В результаті було отримано оцінку

$$\Gamma^+/\Gamma^- = 1.67 \pm 0.15. \quad (4.33)$$

Отримане значення добре узгоджується з недавніми результатами $\Gamma^+/\Gamma^- = 1.62 \pm 0.1$ [25], отриманим за допомогою Монте-Карло симуляцій для тривимірної моделі Ізинга з випадковими зв'язками при концентрації магнітної складової $p_{bond} = 0.7$. Теоретична оцінка, отримана за допомогою теоретико-польового ренорм-групового підходу в трипетловому наближенні така: $\Gamma^+/\Gamma^- = 3.05(32)$ [52]. Як причина відмінності між оцінками з одного боку (4.33), [25] і [52] з іншого, можна вказати на недостатній порядок теорії збурень при виконанні теоретичних обчислень, а також на розбіжність оцінюваних теоретичних рядів. Для отримання остаточної відповіді слід провести додатковий аналіз.

Так чи інакше, як теоретичні оцінки так і результати Монте-Карло симуляцій приводять до значень Γ^+/Γ^- , що відрізняються від значення для чистої тривимірної моделі Ізинга: $\Gamma^+/\Gamma^- = 4.70 \div 4.95$ (див. [53]).

5. ДИНАМІЧНІ КРИТИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРИВИМІРНОЇ МОДЕЛІ ІЗИНГА З РОЗВЕДЕНИМИ ВУЗЛАМИ

5.1. Явище критичного сповільнення

Особливістю динаміки системи біля точки фазового переходу другого роду є так зване явище критичного сповільнення [54–56]. Воно полягає в тому, що час релаксації τ при досягненні критичної точки T_c має сингулярну поведінку з універсальним динамічним критичним показником z

$$\tau \sim t^{-\nu z} \sim \xi^z, \quad (5.1)$$

де ν – критичний показник кореляційної довжини ξ , $t = |T - T_c|/T_c$.

В Монте-Карло симуляціях фігурує цілий ряд часів релаксації, що відповідають різним режимам вимірювання та різним спостережуваним (\mathcal{O}). Так, автокореляційна функція $C_{\mathcal{O}}(\delta t)$ (4.3) на великих часах експоненційно спадає за законом Дебая

$$C_{\mathcal{O}}(\delta t) = a e^{-\delta t/\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}}, \quad (5.2)$$

де $\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$ – експоненційний час автокореляції, отриманий для величини \mathcal{O} , a – константа. Нагадаємо, що при виконанні Монте-Карло симуляцій час вимірюється у кількості Монте-Карло кроків. Час $\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$ визначає масштаб генерації нескоррельованих конфігурацій. Таким чином, в симуляціях довжиною N_{steps} тільки $\sim \frac{N_{\text{steps}}}{\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}}$ конфігурацій є статистично незалежні [57].

Окрім $\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$, релаксація спостережуваної величини \mathcal{O} характеризується інтегральним часом автокореляції $\tau_{\mathcal{O},\text{int}}$ [58]. Він визначається як

$$\tau_{\mathcal{O},\text{int}} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} C_{\mathcal{O}}(\delta t). \quad (5.3)$$

У випадку, коли автокореляційна функція має експоненційну форму (5.2), то $\tau_{\mathcal{O},\text{int}} = \tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$. У загальному випадку $\tau_{\mathcal{O},\text{int}} < \tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$ [58]. На практиці, $\tau_{\mathcal{O},\text{int}}$ обчислюється із скінченої суми (5.3).

Для системи скінченного розміру L в околі T_c часи автокореляцій запишуться [57]

$$\tau_{\mathcal{O},\text{exp}} \sim L^{z_{\mathcal{O},\text{exp}}}, \quad (5.4)$$

$$\tau_{\mathcal{O},\text{int}} \sim L^{z_{\mathcal{O},\text{int}}}, \quad (5.5)$$

де \mathcal{O} – спостережувана величина (E , m , $|m|$), обчислена під час Монте-Карло симуляцій.

Відмітимо, що теоретичні ренормгрупові обрахунки припускають лише один динамічний критичний показник z для часу релаксації усіх спостережуваних величин [58]. Однак, для експериментально визначених часів автокореляцій (5.4), (5.5) це не підтверджується. Тим не менше, для чистої системи відомо, що скейлінг часів автокореляції, обчислений для величин, що пов'язані з енергією, має один динамічний критичний показник [57], що відрізняється від показника, отриманого для величин, отриманих з намагніченості [59].

Зазначимо, що локальні і кластерні Монте-Карло алгоритми приводять до різних форм критичної динаміки, і, відповідно, характеризуються різними критичними динамічними показниками z (5.1). Динаміка локальних алгоритмів пов'язана з переверотом окремих спінів. В той час як нелокальні, кластерні алгоритми, (див. підрозділи 3.3-3.4) розглядають псевдодинаміку системи, пов'язану з оновленням цілих кластерів спінів. Основна практична мета цих алгоритмів – зменшення ефективного часу автокореляції і покращення статистики генерованих конфігурацій. У той самий час, ці алгоритми вводять систему в інші динамічні класи універсальності. Тому, головною метою досліджень, проведених в роботах [28, 29] було ви-

вчити різні динаміки Монте-Карло алгоритмів у тривимірній моделі Ізинга з розведеними вузлами.

У наступній частині цього розділу ми розглянемо критичну динаміку тривимірної моделі Ізинга з випадковими вузлами для трьох різних Монте-Карло алгоритмів, описаних в підрозділах (3.2, 3.3 та 3.4).

5.2. Порівняльний аналіз критичної динаміки локальних і кластерних алгоритмів

Для кількісного аналізу часів автокореляції необхідно оцінити автокореляційну функцію для різних термодинамічних величин системи [45]. Розглянемо автокореляції енергії E , намагніченості m та її абсолютного значення $|m|$. Означена в (4.3) автокореляційна функція може бути переписана як

$$\begin{aligned} C_{\mathcal{O}}(\delta t) &= \frac{\langle \delta \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \delta \mathcal{O}(t_0) \rangle}{\langle \delta \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle \langle \delta \mathcal{O}(t_0) \rangle} = \\ &= \frac{\langle \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \mathcal{O}(t_0) \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle}{\sqrt{(\langle \mathcal{O}(t_0 + \delta t)^2 \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle^2)(\langle \mathcal{O}(t_0)^2 \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle^2)}} \end{aligned} \quad (5.6)$$

В термодинамічній границі $\langle \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle = \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle$, і можна отримати звичну форму:

$$C_{\mathcal{O}}(\delta t) = \frac{\langle \mathcal{O}(t_0) \mathcal{O}(t_0 + \delta t) \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle}{\langle \mathcal{O}(t_0) \mathcal{O}(t_0) \rangle - \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle \langle \mathcal{O}(t_0) \rangle}, \quad (5.7)$$

де $\mathcal{O}(t)$ – значення величини в момент часу t , t_0 – початковий час, δt – приріст часу. Для покращення статистики (особливо для великих t) використовується усереднення за набором часів t_0 . Відмітимо, що різні Монте-Карло алгоритми мають різний характерний масштаб часу.

Щоб обчислити інтегральний час автокореляції $\tau_{\mathcal{O},\text{int}}$ використовується вираз (5.3). Відзначимо, що похибка автокореляційної функції на великих часах збільшується, оскільки усереднення відбувається за меншою кількістю інтервалів. Точність обчислення інтегрального часу можна збільшити вибором скінченної межі сумування δt_{max} , що зазвичай є порядку $\delta t_{\text{max}} \cong 6\tau_{\text{int}}$ [58]

$$\tau_{\mathcal{O},\text{int}}(\delta t_{\text{max}}) = \frac{1}{2} + \sum_{\delta t=1}^{\delta t_{\text{max}}} C_{\mathcal{O}}(\delta t), \quad (5.8)$$

а хвостову частину автокореляційної функції для $\delta t > \delta t_{\text{max}}$ апроксимувати за допомогою експоненційної функції. Як результат, остаточний вираз для інтегрального часу є такий

$$\begin{aligned} \tau_{\mathcal{O},\text{int}} &= \frac{1}{2} + \sum_{\delta t=1}^{\delta t_{\text{max}}} C_{\mathcal{O}}(\delta t) + a \sum_{\delta t=\delta t_{\text{max}}+1}^{\infty} e^{-\delta t/t_{\mathcal{O},\text{exp}}} = \\ &= \tau_{\mathcal{O},\text{int}}(\delta t_{\text{max}}) + a \frac{e^{-1/t_{\mathcal{O},\text{exp}}}}{1 - e^{-1/t_{\mathcal{O},\text{exp}}}} e^{-\delta t_{\text{max}}/t_{\mathcal{O},\text{exp}}}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Для оцінки другого доданку в (5.9), необхідно обчислити $\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$. В той час як в чистих системах присутня однаково асимптотична поведінка часів автокореляції, то для розведених систем є цілий спектр часів автокореляції в області кроссоверу і це відбивається в кривизні функції автокореляції в логарифмічному масштабі.

Для кожної реалізації безладу було обчислено автокореляційні функції $C_{\mathcal{O}}(\delta t)$ для термодинамічних величин E , m і $|m|$ та оцінено експоненційні та інтегральні часи. Усереднені за реалізаціями безладу часи $\overline{\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}}$ і $\overline{\tau_{\mathcal{O},\text{int}}}$ приведені в таблицях 2 і 3 (результати роботи [29]).

L	Метрополіс			Свендсен-Ванг Вольф			
	$\tau_{E,\text{exp}}$	$\tau_{ m ,\text{exp}}$	$\tau_{m,\text{exp}}$	$\tau_{E,\text{exp}}$	$\tau_{ m ,\text{exp}}$	$\tau_{E,\text{exp}}$	$\tau_{ m ,\text{exp}}$
10	8.94(63)	9.34(88)	6.80(1.80)·10	3.76(19)	3.72(20)	1.53(17)	1.23(10)
12	1.33(11)·10	1.40(16)·10	1.02(28)·10 ²	4.16(23)	4.12(21)	1.64(17)	1.30(9)
16	2.49(24)·10	2.69(44)·10	1.98(63)·10 ²	4.82(27)	4.80(36)	1.80(21)	1.41(10)
24	5.99(37)·10	6.51(95)·10	5.10(19)·10 ²	5.87(38)	5.92(37)	2.06(24)	1.54(10)
32	1.12(08)·10 ²	1.24(28)·10 ²	1.02(57)·10 ³	6.78(52)	6.71(42)	2.20(28)	1.65(11)
48	2.71(25)·10 ²	2.86(40)·10 ²	2.40(1.30)·10 ³	8.15(69)	8.02(52)	2.51(30)	1.75(10)
64	4.65(48)·10 ²	6.31(97)·10 ²	4.78(2.25)·10 ³	9.19(85)	9.03(76)	2.35(21)	1.88(11)
96	1.22(14)·10 ²	1.44(26)·10 ³	1.20(0.52)·10 ⁴	10.7(9)	10.5(9)	2.79(35)	1.99(16)

Табл. 2. Експоненційні часи автокореляції $\tau_{\mathcal{O},\text{exp}}$ моделі РІМ, обчислені в критичній температурі T_c безмежної системи в Монте-Карло кроках для алгоритмів Метрополіса, Свендсена-Ванга і Вольфа

Приведений аналіз не дозволив знайти часи автокореляції $\tau_{m,\text{exp}}$ і $\tau_{m,\text{int}}$ для кластерних алгоритмів з достатньою точністю.

5.3. Динамічні критичні показники $3d$ моделі Ізинга з розведеними вузлами

Знайшовши часи автокореляції для різних спостережуваних величин, як функції розміру L , через рівняння (5.4), (5.5) можна отрима-

L	Метрополіс			Свендсена-Ванг Вольф			
	$\tau_{E,int}$	$\tau_{ m ,int}$	$\tau_{m,int}$	$\tau_{E,int}$	$\tau_{ m ,int}$	$\tau_{E,int}$	$\tau_{ m ,int}$
10	6.14(30)	9.22(49)	6.6(1.6)·10	3.57(16)	3.22(17)	1.33(8)	0.95(4)
12	8.47(49)	1.36(8)·10	9.8(2.5)·10	3.92(18)	3.50(19)	1.42(9)	0.98(4)
16	1.44(10)·10	2.53(20)·10	1.87(53)·10 ²	4.47(23)	3.95(25)	1.55(12)	1.00(4)
24	3.10(20)·10	6.13(48)·10	4.74(1.50)·10 ²	5.33(31)	4.68(27)	1.75(15)	1.02(4)
32	5.51(40)·10	1.16(14)·10 ²	9.05(3.41)·10 ²	6.05(36)	5.14(34)	1.87(18)	1.04(4)
48	1.22(12)·10 ²	2.71(28)·10 ²	2.17(0.82)·10 ³	7.11(47)	6.07(43)	2.08(20)	1.04(4)
64	2.15(20)·10 ²	5.59(62)·10 ²	3.80(1.44)·10 ³	7.81(51)	6.71(50)	2.16(18)	1.07(3)
96	4.84(51)·10 ²	1.24(15)·10 ³	9.57(3.45)·10 ³	9.21(61)	7.65(59)	2.33(25)	1.10(4)

Табл. 3. Інтегральні часи автокореляції $\tau_{O,int}$ моделі РІМ, обчислені в критичній температурі T_c безмежної системи в Монте-Карло кроках для алгоритмів Метрополіса, Свендсена-Ванга і Вольфа

ти значення динамічних критичних показників для кожного з даних алгоритмів. Щоб отримати значення показників було використано лінійну інтерполяцію $\tau(L)$.

Як відмічалось вище (підрозділ 5.1), виконаний аналіз не дозволив знайти всі часи автокореляції з достатньою точністю. Числові значення показників для алгоритму Метрополіса показані в першому рядку таблиці 4. За винятком показника для інтегрального часу автокореляції енергії $\tau_{E,int}$, решта значень показників в межах похибки є близькими до $z \simeq 2.2$. Це значення добре узгоджуються з теоретичними оцінками [60–64], з експериментальними результатами [65] і значеннями з Монте-Карло симуляцій [66, 67], отриманими раніше. Застосування методу короткочасової нерівноважної динаміки приводить до значення $z = 2.62$ [68], що досить сильно відрізняється від результатів, отриманих для рівноважного Монте-Карло моделювання [69].

	$z_{E,int}$	$z_{E,exp}$	$z_{ m ,int}$	$z_{ m ,exp}$	$z_{m,int}$	$z_{m,exp}$
Метрополіс	1.92(4)	2.16(4)	2.18(4)	2.23(6)	2.21(16)	2.29(19)
Свендсен-Ванг	0.39(6)	0.44(7)	0.36(6)	0.42(7)	–	–
Вольф	0.21(8)	0.22(12)	–	0.19(6)	–	–

Табл. 4. Динамічні критичні показники моделі РІМ різних Монте-Карло алгоритмів, обчислених в критичній температурі безмежної системи з часів автокореляції, даних в таб. 2-3

Отримані в роботі [29] значення динамічних критичних показників часу автокореляції для кластерних алгоритмів приведені в дру-

гому і третьому рядках таблиці 4. Слід відзначити, що динамічні критичні показники для кластерних алгоритмів Свендсена-Ванга і Вольфа отримані вперше для тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами.

Однією з особливостей динамічних показників кластерних алгоритмів є те, що розведення магнітних вузлів приводить до зменшення значення критичних показників, порівняно з їх величинами для чистої тривимірної моделі Ізинга. Дійсно, значення інтегрального динамічного критичного показника для алгоритму Свендсена-Ванга, отриманого з автокореляційної функції $C_E(t)$ [59] має значення $z_{E,int} = 0.459(30)$. В цій самій роботі приводиться експоненційний динамічний критичний показник, що рівний $z_{exp} = 0.481$. Обидва значення перевищують ті результати, що отримали ми і приведені в другому рядку таблиці 4. Подібна ситуація по відношенню до розведення спостерігалася в тривимірній моделі Ізинга з випадковими зв'язками [25]. Для алгоритму Свендсена-Ванга значення показника рівне $z = 0.41$ для концентрації вузлів $p = 0.7$, що менше у порівнянні з відповідним значенням для чистої 3d моделі Ізинга [59].

Аналогічно, в роботі [29] було також проаналізовано дані симуляції, проведені в критичній температурі обмеженої системи розміру L , $T_c(L)$.

Для чистої моделі Ізинга в роботі [70] встановлено емпіричне співвідношення, що пов'язує динамічний критичний показник алгоритму Свендсена-Ванга $z_{E,int}^{SW}$ із статичними критичними показниками намагніченості і кореляційної довжини

$$z_{E,int}^{SW} = \beta/\nu. \quad (5.10)$$

Цікаво перевірити, чи отримані в Монте-Карло симуляціях [29] значення показників задовольняють співвідношення (5.10).

Слід відзначити, що хоча статичні критичні показники тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами чисельно відрізняються від показників, отриманих в чистій моделі Ізинга (для порівняння, теоретична ренорм-групова оцінка дає значення $\beta = 0.349(5)$ і $\nu = 0.678(10)$ [50] для тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами, а для чистої моделі показники рівні $\beta = 0.3258(14)$ і $\nu = 0.6304(13)$ [49]), проте їхнє відношення залишається майже незмінним. Для значень, приведених вище отримаємо $\beta/\nu = 0.515(15)$ для тривимірної моделі Ізинга з розведеними вузлами і $\beta/\nu = 0.517(3)$ для чистої тривимірної моделі Ізинга. Тому, зміна динамічного критичного показника при розведенні свідчить про те, що відношення (5.10) не виконується для тривимірної моделі Ізинга з розведеними

вузлами .

Ще одне емпіричне співвідношення для чистої моделі Ізинга пов'язує динамічний критичний показник для алгоритму Вольфа $z_{E,int}^W$ і статичні критичні показники α і ν [70]

$$z_{E,int}^W = \alpha/\nu. \quad (5.11)$$

Оскільки $\alpha < \beta$ для моделі Ізинга, то порівняння рівнянь (5.10) і (5.11), приводить до нерівності

$$z_{E,int}^W < z_{E,int}^{SW}. \quad (5.12)$$

Рівняння (5.11) не виконується для розведених систем (де критичний показник питомої теплоємності від'ємний). Однак, порівнюючи дані з таблиці 4 для алгоритмів Вольфа і Свендсена-Ванга, бачимо, що нерівність (5.12) виконується. Також видно, що значення динамічного критичного показника для розведеної системи є меншим, ніж значення яке спостерігається у чистій системі. Для алгоритму Вольфа, динамічний критичний показник, отриманий при різних симуляціях має значення $z_{E,int} = 0.28(2)$ [72]; $0.44(10)$ [73]; $0.33(1)$ [70] (наші значення, див. табл. 4).

6. ВИСНОВКИ

В цій роботі ми здійснили огляд результатів, отриманих при застосуванні методу Монте-Карло для аналізу критичної поведінки $3d$ моделі Ізинга з розведеними вузлами. Дослідження цієї моделі проводяться вже досить давно і особливу увагу приділяються критичним показникам системи. Це зумовлено двома причинами: 1) розведена модель Ізинга дозволяє на рівні простої моделі включити в розгляд макроскопічні ефекти безладу, що притаманний реальним об'єктам; 2) в критичній області наявність навіть досить малого безладу може сильно впливати на критичну поведінку (зокрема, статичні критичні показники отримують нові значення). Це зокрема, передбачається критерієм Гаріса [8].

Важливу роль відіграє вплив безладу на динамічну критичну поведінку $3d$ моделі Ізинга з розведеними вузлами, хоча в літературі мало уваги приділяється динамічним властивостям розведеної системи. Тому основна увага в цьому огляді була присвячена динамічним критичним властивостям $3d$ моделі Ізинга з розведеними вузлами.

Ми привели опис повного циклу Монте-Карло дослідження статистичної та динамічної критичної поведінки спінових систем. Ми

розглянули три Монте-Карло алгоритми, що застосовуються для симуляції спінових моделей, дали коротко їхні блок-схеми та розглянули методи аналізу Монте-Карло симуляцій.

Ми дослідили динамічну критичну поведінку розведеної моделі Ізинга, для трьох різних Монте-Карло алгоритмів: локального односпінового алгоритму Метрополіса, кластерного алгоритму Свендсена-Ванга та однокластерного алгоритму Вольфа. При дослідженні статичної критичної поведінки усі ці три алгоритми приводять до однакових результатів критичних показників, в той час як в динамічній критичній поведінці відповідають різним формам динаміки. Порівняння чисельних результати експоненційних та інтегральних часів релаксації енергії та намагніченості (і відповідних динамічних критичних показників) даних алгоритмів приводить до висновку, що кластерні алгоритми є більш ефективними в критичній області.

Автор висловлює щирю подяку Юрію Головачу, котрому присвячена дана робота, Ярославу Ільницькому за допомогу у реалізації чисельних методів і неоціненний досвід, Берtrandу Бершу за цінні поради і підтримку.

Література

1. *Займан Дж.* Модели беспорядка. - М.:Мир, 1982.
2. *Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т.* Успехи физических наук. 2003. **173**. N 2. 175-200.
3. *Pelissetto A., Vicari E.* Phys. Rep. 2002. **368**. 549.
4. *Berche B., Chatelain C.* In: Order, Disorder and Criticality, ed. by Yu. Holovatch (World Scientific, Singapore). 2003.
5. *Chatelain C., Berche B., Janke W., Berche P.-E.* Nucl. Phys. B. 2005. **719**. N 3. 275.
6. *Brout R.* Phys. Rev. 1959. **115**. 824.
7. *Fisher M.E.* Phys. Rev. 1968. **176**. 257.
8. *Harris A.B.* J. Phys. C. 1974. **7**. 1671.
9. *Landau D. P.* Phys. Rev. B. 1980. **22**. 2450.
10. *Marro J., Labarta A., Tejada J.* Phys. Rev. B. 1986. **34**. 347.
11. *Chowdhury D., Stauffer D.* J. Stat. Phys. 1986. **44**. 203.
12. *Braun P., Fähnle M.* J. Stat. Phys. 1988. **52**. 775.
13. *Wang J.-S., Chowdhury D.* J. Phys. 1989. **50**. 2905.
14. *Wang J.-S., et al.* Physica A. 1990. **166**. 173.
15. *Holey T., Fähnle M.* Phys. Rev. B. 1990. **41**. 11709; *Fähnle M., Holey T., Eckert J.* J. Magn. Magn. Matter. 1992. **104-107**. 195.

16. Heuer H.-O. Europhys. Lett. 1990. **12**. 551; Heuer H.-O. Phys. Rev. B. 1990. **42**. 6476.
17. Heuer H.-O. J. Phys. A: Math. Gen. 1993. **26**. L333.
18. Hennecke M. Phys. Rev. B. 1993. **48**. 6271.
19. Ballesteros H.G., Fernández L.A., Martiñ-Mayor V., Muñoz Suredure A. Phys. Rev. B. 1998. **58**. 2740.
20. Wiseman S., Domany E. Phys. Rev. Lett. 1998. **81**. 22.
21. Wiseman S., Domany E. Phys. Rev. E. 1998. **58**. 2938.
22. Marqués M.I., Gonzalo J. A. Phys. Rev. E. 1999. **60**. 2394.
23. Marqués M.I., Gonzalo J. A., Íñiguez J. Phys. Rev. E. 2000. **62**. 191.
24. Calabrese P., Martiñ-Mayor V., Pelissetto A., Vicari E. Phys. Rev. E. 2003. **68**. 036136.
25. Berche P.E., Chatelain C., Berche B., Janke W. Eur. Phys. J. B. 2004. **39**. 463.
26. Berche B., Berche P.E., Chatelain C., Janke W. Cond. Mat. Phys. 2005. **8**. N 1. 47–58.
27. Ivaneyko D., Ilnytskyi J., Berche B., Holovatch Yu. Cond. Mat. Phys. 2005. **8**. N 1(41). 149-162.
28. Ivaneyko D., Ilnytskyi J., Berche B., Holovatch Yu. Physica A. 2006. **370**. 163-178.
29. Ivaneyko D., Ilnytskyi J., Berche B., Holovatch Yu. J. Mol. Liquids. 2006. **127**. 69-70.
30. Fisher, M. E. In: Critical phenomena. Proc. Enrico Fermi Int. School of Physics, ed. by Green, M. S. N.Y.: Academic 1971, **51**, 1-99; Fisher, M. E., Barber, M. N. Phys. Rev. Lett. 1972. **28**. 1516-1519; Privman V. In: Finite-size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems, ed. by V. Privman (World Scientific, Singapore), 1990.
31. Ferrenberg A.M., Landau D.P. Phys. Rev. B. 1991. **44**. N 10. 5081-5091.
32. Lenz W. Phys. Zeitschrift. 1920. **21**. 613Ц615.
33. Brush S.G. Rev. Mod. Phys. 1967. **39**. 883Ц893.
34. Кобе С. Журнал фізичних досліджень. 1998. **2**. 1-2; J. Stat. Phys. 1997. **88**. 991.
35. Newman M.E.J., Barkema G. T. Monte Carlo Methods in Statistical Physics, (Oxford University Press), 1999.
36. Order, Disorder and Criticality, ed. by Yu. Holovatch, (World Scientific, Singapore), 2004, **1**; 2007, **2**.
37. Metropolis N., Rosenbluth A., Rosenbluth M., Teller A. and Teller E. J. Phys. Chem. 1953. **21**. 1087.

38. Grinstead C. M., Snell J. L., Introduction to Probability, American Mathematical Society, 1997, 510.
39. Wolff U. Phys. Rev. Lett. 1989. **62**. 361-364.
40. Glauber R. J. J. Math. Phys. 1963. **4**. 294-307.
41. Kawasaki K. Phys. Rev. 1966. **145**. 224-230.
42. Fortuin C. M., Kasteleyn P. W. Physica 1972. **57**. 536-564.
43. Swendsen R.H., Wang J.-S. Phys. Rev. Lett. 1987. **58**. 86-88.
44. Frenkel D., Smit B. Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, Academic Press, A division of harcourt, Inc. 1996.
45. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.
46. Stanley H. E., Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford University Press, 1987, 336.
47. Barber M.N. Finite-size scaling. In: Phase Transitions and Critical Phenomena, eds. C.Domb and J.Lebowitz, Academic, New York, **8**, 1983.
48. Binder K., Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Springer-Verlag New York, Inc; 2nd edition, 1986, 411.
49. Guida R., Zinn-Justin J. J. Phys. A. 1998. **31**. 8103.
50. Pelissetto A., Vicari E. Phys. Rev. B. 2000. **62**. 6393.
51. Ferrenberg A.M., Landau D.P. Phys. Rev. B. 1991. **44**. N 10. 5081-5091.
52. Bervillier C., Shpot M. Phys. Rev. B. 1992. **46**. N 2. 955-968.
53. Caselle M., Hasenbusch M. J. Phys. A. 1997. **30**. 4963.
54. Janke W., In: Computational Physics: Selected Methods - Simple Exercises - Serious Applications, ed. K.H. Hoffmann and M. Schreiber, Springer, Berlin, 1996, 10.
55. Janke W. Math. and Comput. in Simulations. 1998. **47**. 329.
56. Halperin B.I. Theory of dynamical critical Properties. Proceedings of the Inter. conferece "Statistical Physics". 1975.
57. Salas J., Sokal A. D. J. Stat. Phys. 1997. **87**. 1.
58. Janke W., In: Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, Lecture Notes, J.Grotendorst, D.Marx, A.Muramatsu, eds., John von Neumann Institute for Computing, Jülich, NIC Series, 2002, **10**, 423-445.
59. Ossola G., Sokal A. D. Nucl. Phys. B. 2004. **691**. 259.
60. Grinstein G., Ma S.-K., Mazenko G.F. Phys. Rev. B. 1977. **15**. 5081.
61. Prudnikov V. V., Vakilov A. N. Sov. Phys. JETP. 1992. **74**. 990 [Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1992. **101**. 1853].

62. Prudnikov V. V., Belim S. V., Osintsev E. V., Fedorenko A. A. Phys. Solid State. 1998. **40**. 1383 [Fiz. Tverd. Tela. 1998. **40**. 1526].
63. Janssen H. K., Oerding K., Sengespeick E. J. Phys. A. 1995. **28**. 6073.
64. Blavats'ka V., Dudka M., Folk R., Holovatch Yu. Phys. Rev. B. 2005. **72**. 064417.
65. Rosov N., Hohenemser C., Eibschütz M. Phys. Rev. B. 1992. **46**. 3452.
66. Heuer H.-O. J. Phys. A. 1993. **26**. L341.
67. Prudnikov V. V., Vakilov A. N. JETP Lett. 1992. **55**. 741 [Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1992. **55**. 709].
68. Parisi G., Ricci-Tersenghi F., Ruiz-Lorenzo J. J. Phys. Rev. B. 1999. **60**. 5198.
69. Schehr G., Paul R. Phys. Rev. E. 2005. **72**. 016105.
70. Coddington P.D., Baillie C.F. Phys. Rev. Lett. 1992. **68**. 962.
71. Li X.-J., Sokal A. D. Phys. Rev. Lett. 1989. **63**. 827.
72. Wolff U. Phys. Lett. B. 1989. **228**. 379.
73. Tamayo P., Brower R. C., Klein W. J. Stat. Phys. 1990. **58**. 1083.

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>
