10,11,05

Исследование термодинамических свойств и фазовых переходов в трехвершинной сильноразбавленной антиферромагнитной модели Поттса методом Монте-Карло

© А.К. Муртазаев [1,2], А.Б. Бабаев [1,3], Г.Я. Атаева [1,4,¶]

[1] Институт физики им. Х.И. Амирханова Даг НЦ РАН,
Махачкала, Россия
[2] Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия
[3] Дагестанский государственный педагогический университет,
Махачкала, Россия
[4] Дагестанский государственный университет народного хозяйства,
Махачкала, Россия
[¶] E-mail: ataeva20102014@mail.ru

(Поступила в Редакцию 11 мая 2016 г.)

Методом Монте-Карло исследованы термодинамические свойства и фазовые переходы в двумерной сильноразбавленной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 18-48$. С использованием метода кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что внесение немагнитных примесей в спиновую систему, описываемую двумерной антиферромагнитной моделью Поттса, приводит к смене фазового перехода первого на фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-02-00214-а и №16-32-00105-мол-а.

DOI: 10.21883/FTT.2017.01.43963.175

Изучение фазовых переходов (ФП) и связанных с ними критических явлений (КЯ) традиционно привлекают к себе весьма активное внимание физиков. Неидеальные черты присущие реальным системам оказывают значительное влияние на фазовые переходы и критические явления в магнитных системах, в частности присутствие немагнитных примесей в системе может изменить род фазового перехода, и эта проблема остается актуальной в течение последних двадцати лет [1,2]. Теоретические и лабораторные методы сталкиваются с рядом проблем при попытке рассмотрения данного вопроса, и, в связи с этим, данная проблема исследуется на основе моделей, которые отображают основные свойства реального тела и позволяют провести численное или аналитическое описание системы и таким образом описать фазовый переход. В итоге с развитием вычислительной физики и с применением методов Монте-Карло стало возможно изучать более реалистичные модели и учитывать усложняющие факторы всегда присутствующие в реальных материалах [2,3]. В качестве таких моделей реальных физических систем, могут выступать, двумерные статистические системы, такие как модель Поттса, критическое поведение которой весьма богато и интересно само по себе. Наиболее интересным на сегодня объектом для изучения является антиферромагнитная модель Поттса, которая мало изучена, о ней нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на ФП, неустановлен класс универсальности критического поведения, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде вмороженных немагнитных примесей [4]. Достоверным фактом является лишь то, что в чистой беспримесной системе наблюдается фазовый переход первого рода [5].

В данной работе исследуются фазовые переходы в двумерной сильноразбавленной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке при концентрации спинов $p = 0.70$ и 0.65. При этом рассматривались системы с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 18-48$. Модель Поттса в чистом состоянии ($p = 1.00$) и в слаборазбавленном режиме ($p = 0.90$, 0.80) была исследована в работе [6].

Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех рассмотренных систем. Для моделирования спиновой конфигурации был применен стандартный алгоритм Метрополиса [7] в сочетании с однокластерным алгоритмом Вольфа метода Монте-Карло [8].

При построении сильно неупорядоченной модели Поттса следует учесть следующие особенности: в узлах треугольной решетки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из $q > 2$ состояний, и немагнитные примеси; немагнитные примеси расположены случайно и фиксированы в узлах решетки.

Гамильтониан подобной системы имеет вид [5].

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \cos\theta_{i,j}, \quad S_i = 1, 2, 3, \tag{1}$$

где J — параметр обменного антиферромагнитного взаимодействия ближайших соседей $(J < 0)$; $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, $\rho_i = 0$, если в узле находится немагнитная примесь; $\theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами $S_i{-}S_j$.

Для определения критических температур и рода фазового перехода был задействован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [9],

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \tag{2}$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3\langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \tag{3}$$

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (2) и (3) позволяют определить $T_c(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Известным фактом является несколько отличительных черт характерных для ФП [10]: для ФП первого рода характерно то, что усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d}, \tag{4}$$

при $L \to \infty$ и $T = T_c(L)$, где V^* отлична от 2/3; минимальная величина $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p)$ расходится $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p) \to -\infty$ при $L \to \infty$; при ФП второго рода усредненная величина $V_L(T, p)$ при $T = T_c(L)$ будет стремиться к значению 2/3, а кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ будут иметь четко выраженную точку пересечения. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [11–15].

Характерные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для сильноразбавленной антиферромагнитной модели Поттса от температуры для систем с разными линейными размерами L приведены на рис. 1. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превосходит размеров символов используемых для обозначения зависимости. Как видно из рис. 1 в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения, что и свидетельствует о ФП второго рода. Кроме того, этот рисунок демонстрирует насколько точно можно определить критическую температуру T_c. На рис. 2 показаны зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 0.65$. Из рис. 2 хорошо видно стремление величины $V_L(T, p)$ к 2/3 при $L \to \infty$.

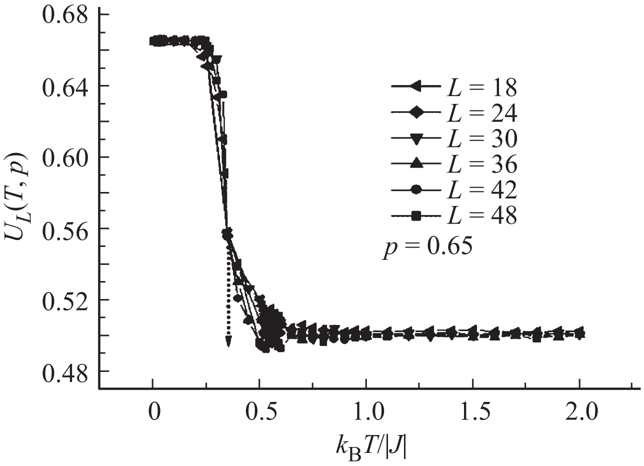

Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

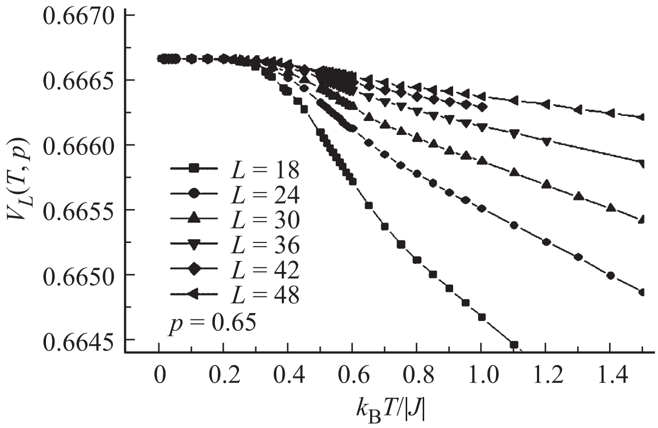

Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода [10]. Аналогичное поведение наблюдалось и для систем при концентрации спинов $p = 0.70$. Определенные методом кумулянтов Биндера критические температуры $T_N(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_N(1.00) = 0.940(1)$, $T_N(0.90) = 0.79(1)$, $T_N(0.80) = 0.65(2)$, $T_N(0.70) = 0.42(3)$, $T_N(0.65) = 0.35(4)$.

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались флуктуационные соотношения [16]

$$C = (NK^2)\big(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2\big), \tag{5}$$

$$\chi = (NK)\big(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2\big), \tag{6}$$

где $K = |J|/k_B T$, $N = L^2$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение. В качестве параметра порядка антиферромагнитной

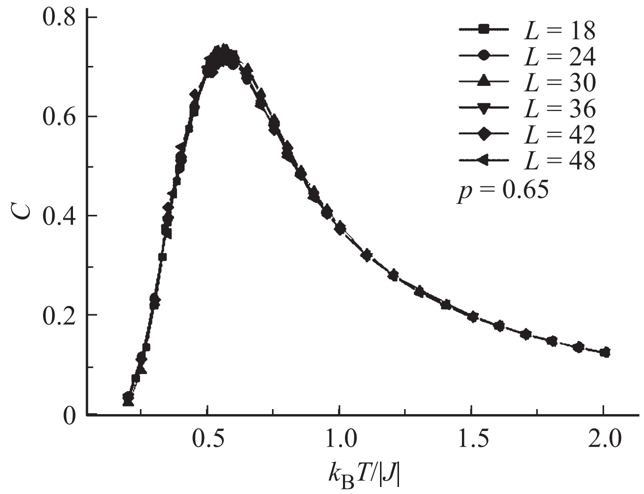

Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости C разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

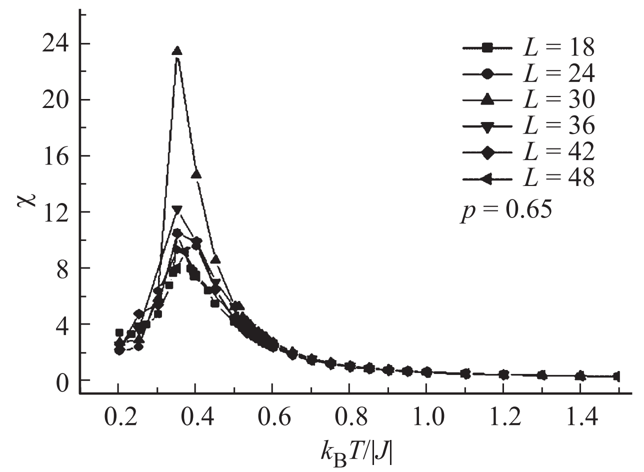

Рис. 4. Температурная зависимость восприимчивости χ разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

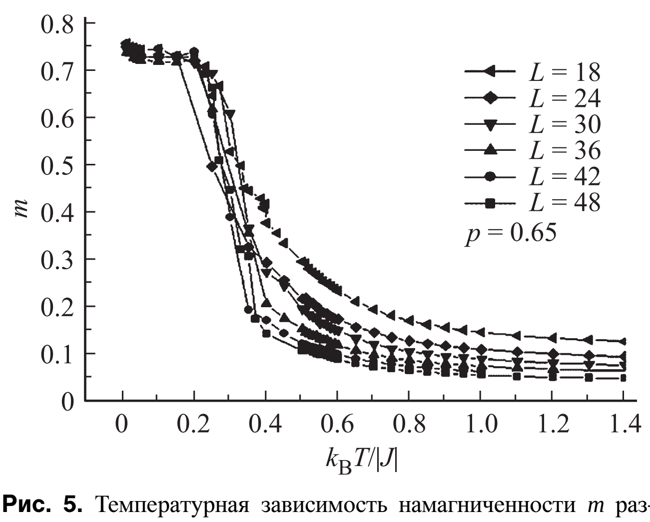

Рис. 5. Температурная зависимость намагниченности m разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

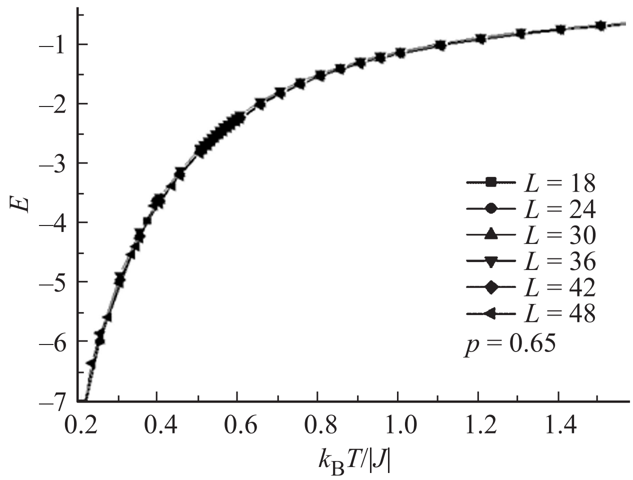

Рис. 6. Температурная зависимость энергии E разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.65$.

(m_{AF}) модели Поттса использовалось следующее выражение [17]:

$$m_{\mathrm{AF}} = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} \left(\frac{(N_\alpha + N_\beta + N_\gamma}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \qquad (7)$$

где $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3\}$, N_1 — число спинов в состоянии с $q = 1$, N_2 — число спинов в состоянии с $q = 2$, N_3 — число спинов в состоянии с $q = 3$, N_α, N_β, N_γ — число спинов в подрешетке A, B и C соответственно, $N = L^2$.

На рис. 3, 4 и 5 представлены характерные зависимости теплоемкости C, восприимчивости χ и намагниченности m от температуры T для систем с разными линейными размерами.

Отметим, что в зависимостях теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходят на одну температуру. Так же нами была исследована зависимость энергии E от температуры для двумерной сильноразбавленной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке при $p = 0.65$, которая показана на рис. 6. Отсутствие гистерезиса в ходе кривых энергетической зависимости говорит о том, что данное поведение характерно для фазового перехода второго рода.

Таким образом, в настоящей работе с соблюдением единой методики исследовано влияние сильного беспорядка на фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке при $p = 0.70$ и 0.65 Полученные данные свидетельствуют о том, что внесение сильного вмороженного беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерную чистую структуру, описываемой антиферромагнитной моделью Поттса, приводит к смене ФП первого рода на ФП второго рода. Такая смена рода фазового перехода связана с тем, что примеси приводят к подавлению флуктуационной неустойчивости.

Список литературы

[1] В.С. Доценко. УФН **165**, *5*, 481 (1995).
[2] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
[3] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
[4] X. Qian, Y. Deng, W. Blote. Phys. Rev. E **72**, 056 132 (2005).
[5] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
[6] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. ФТТ **57**, *7*, 1410 (2015).
[7] N. Metropolis, W. Rosenbluth. J. Chem. Phys. **21**, *6*, 1087 (1953).
[8] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
[9] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Cond. Matter **8**, 5209 (1996).
[10] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. **5**, 735 (1998).
[11] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Aznaurova. Solid State Phenomena **168**–**169**, 357 (2011).
[12] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. J. Magn. Magn. Mater. **324**, 3870 (2012).
[13] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова. ФТТ **50**, 703, (2008).
[14] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. J. Magn. Magn. Mater. **321**, 2630 (2009).
[15] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
[16] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys.Rev. B **43**, 6087 (1991).
[17] Y. Saito. J. Phys. A **15**, 1885 (1982).