

05,11

Фазовые переходы в разбавленной двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке

© А.К. Муртазаев¹, А.Б. Бабаев^{1,2}, Г.Я. Атаева¹, М.А. Бабаев³

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: b_albert78@mail.ru

Поступила в Редакцию 9 января 2022 г.

В окончательной редакции 9 января 2022 г.

Принята к публикации 19 февраля 2022 г.

Методом компьютерного моделирования проведено исследование фазовых переходов в двумерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10 \div 160$ при концентрации спинов $p = 1.00, 0.80$. Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке наблюдается фазовый переход второго рода в соответствии с теорией. Внесение беспорядка в виде немагнитных примесей ($p = 0.80$) в модели Поттса с $q = 3$ сохраняет фазовый переход второго рода.

Ключевые слова: модель Поттса, метод Монте-Карло, термодинамические параметры, беспорядок.

DOI: 10.21883/FTT.2022.06.52404.285

1. Введение

Развитие компьютерных технологий и вычислительных методов исследования, привело к их превалированию над теоретическими и экспериментальными методами при изучении неупорядоченных магнитных систем. Это обусловлено тем, что в реальных системах всегда присутствуют усложняющие факторы, затрудняющие использование теоретических и экспериментальных методик [1–5]. Многие из известных теоретических схем в рамках теоретико-полевого ренормализационно-группового метода при применении к системам с беспорядком перестают работать (см. обзоры [4,5]). Современные экспериментальные исследования сталкиваются с большими трудностями при изучении термодинамических и критических свойств спиновых систем с замороженным беспорядком. Имеющиеся на сегодняшний день экспериментальные результаты не позволяют сформировать цельной и непротиворечивой картины критического поведения примесных систем. Дело не только в том, что результаты экспериментальных исследований сильно зависят от метода и конкретного образца, но и от способа приготовления образца. Кроме того, практически нет экспериментальных исследований, выполненных на основе единого методического подхода на сериях однотипных образцов при строго контролируемом содержании количества примесей. Практически во всех экспериментальных исследованиях серьезной и до сих пор не решенной проблемой остается проблема достижение асимптотического критического режима [2,4]. На этом фоне обнадеживающими представляются ре-

зультаты и возможности исследования примесных систем методами МК.

К настоящему времени известно, что дефекты структуры, реализованные в виде немагнитных примесей, оказывают влияние на тепловые и магнитные характеристики спиновых систем, и могут влиять на фазовые переходы (ФП), если выполняется так называемый критерий Харриса [6]. Согласно этому критерию примеси существенны, если соответствующий критический индекс теплоемкости α чистой системы положителен, т.е. теплоемкость в критической точке расходится и поэтому этот критерий применим к трехмерной модели Изинга для которой $\alpha > 0$. Исследованию критических свойств неупорядоченной модели Изинга с замороженным беспорядком, в последнее тридцатилетие было посвящено значительное число работ (см. обзоры [4,5] и [7,8]) и достигнут существенный прогресс в понимании особенностей влияния немагнитных примесей на эту модель. В тоже время в случае двумерной модели Изинга критерий Харриса не применим в силу того, что $\alpha = 0$. Детальное рассмотрение этого случая [9] позволило прийти к выводу, что влияние примеси затрагивает только поведение теплоемкости, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения.

С другой стороны, примеси могут влиять на род ФП, в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [10]. На стабилизирующую роль немагнитных примесей при реализации ФП второго рода с применением теоретических методов было указа-

но и в недавней работе [11]. Для изучения этого случая хорошо подходит модель Поттса. С одной стороны, это связано с тем, что в модели Поттса наблюдается ФП первого рода при $q > 4$, и ФП второго рода при $q \leq 4$. С другой стороны, модель Поттса является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений в физике конденсированных сред [12]. Очевидно, что решеточная структура данной модели изоморфна многим таким системам как: слоистый магнетик, аэрогели, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки и т.д. [13].

Таким образом, на моделях Поттса можно проверить особенности влияния примесей на ФП и определить их роль как стабилизирующего фактора при ФП второго рода. Кроме того, в соответствии с критерием Харриса [6] в случае двумерных моделей Поттса с $q = 3$ или с $q = 4$ примеси должны повлиять и на критическое поведение, так как для этих моделей $\alpha = 1/3$ и $\alpha = 2/3$ соответственно. В работе [14] исследовалась четырехкомпонентная ($q = 4$) примесная модель Поттса и было показано, что ФП и критическое поведение этой модели подвергается влиянию беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей. В тоже время для модели Поттса с $q = 3$ в литературе практически не имеются сведения о том, как влияет замороженный беспорядок на фазовые переходы, и его критическое поведение, особенно когда беспорядок реализован в виде немагнитных примесей каноническим способом. Не определены значения критических температур и не выявлены особенности влияния беспорядка на термодинамические параметры, такие как намагниченность m , восприимчивость χ , энергия E , теплоемкость C и кумулянты Биндера U_L и V_L .

В связи с этим основной целью этой работы является изучение влияния немагнитных примесей на фазовые переходы и термодинамическое поведение трехкомпонентной ($q = 3$) двумерной модели Поттса на квадратной решетке.

2. Двумерная примесная модель Поттса с $q = 3$ на квадратной решетке

Приведем здесь формулировку двумерной стандартной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$, используемую для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. В рассматриваемой нами модели примеси распределены каноническим способом [4]. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах квадратной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 3-х симметричных направлениях в пространстве с размерностью $q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны и немагнитные примеси (вакансии) (см. рис. 1). Немагнитные примеси распределены случайно

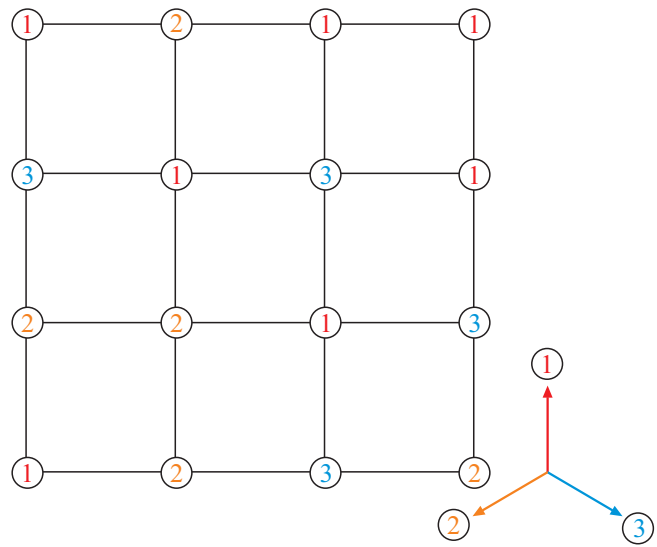


Рис. 1. Стандартная двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке.

и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder).

2. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или же, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна J , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [13]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

и

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь.} \end{cases}$$

Концентрация магнитных спинов определяется выражением

$$p = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \rho_i \delta(S_i, q). \quad (2)$$

Тогда значение $p = 1$ соответствует чистой модели Поттса, а $p = 0$ — пустой, чисто примесной решетке.

3. Методика исследования

Из всех вариантов кластерных алгоритмов метода Монте-Карло наиболее эффективным на сегодняшний

день является алгоритм Вольфа [15]. Методика ее реализации подробно рассмотрена в работах [8,16]. В данной работе этот алгоритм был использован нами в следующем виде.

1. Два случайных числа задают координаты i, j узла на решетке. Если в этом узле находится немагнитная примесь, то генерируются новые случайные числа до тех пор, пока не будут сгенерированы координаты магнитного спина S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят магнитным спином, то с вероятностью

$$P = 1 - \exp(-K), \quad (3)$$

где $K = J/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, активируется связь между S_i и S_j , если S_i и S_j имеют одинаковые значения при $J > 0$. Заметим, что в случае модели Поттса для выражения вероятности включения спина в кластер (2) показатель 2 в экспоненте характерный для соответствующей вероятности модели Изинга исчезает. Таким образом, можно утверждать, что модель Поттса с состоянием спина $q = 2$ эквивалентна модели Изинга с точностью численного фактора 2 в обменной константе J .

3. Если связь между спинами S_i и S_j активируется, то спин в узле j включается в кластер. Следует отметить, что также как и для модели Изинга с примесями, один и тот же спин может быть включен в кластер только один раз, тогда как проверен на включение в кластер несколько раз.

4. После проверки всех ближайших соседей выбранного спина i , первый — включенный в кластер спин становится „центральным“, и начинается процесс активации связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут проверены все ближайшие соседи всех вошедших в кластер спинов или достигнуты границы системы.

5. Все спины, между которыми установлена связь, образуют „кластер“.

6. Полученный кластер переворачивается с вероятностью равной 1. Переворот кластера в случае модели Поттса означает присвоение всем спинам вошедших в кластер новое значение спина S'_i , с равной вероятностью среди всех его состояний q которое отлично от старого значения S_i . Затем переходим к пункту 2.

Об эффективности однокластерного алгоритма Вольфа применительно к модели Поттса можно судить по критическому индексу z характеризующему эффективность используемого алгоритма. В частности исследование чистой двумерной модели Поттса с $q = 3$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа показало, что критический индекс $z = 0.60 \pm 0.02$, в то время как использование классического алгоритма Метрополиса дает значение $z \approx 2$ [17]. По выше описанному алгоритму Вольфа [14] реализовался марковский процесс,

для систем с периодическими граничными условиями. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями для систем с линейными размерами $L = 10 \div 160$ и числом узлов $p \times L \times L = N$. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль одной из осей X, Y или Z . Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Для самой большой системы $L = 160$, $\tau_0 = 1.8 \cdot 10^3$ МК шагов/спин.

4. Результаты моделирования

В процессе компьютерного моделирования вычислялись термодинамические характеристики отдельно взятого образца по следующим формулам [12,18]:

$$U = [\langle U \rangle] = \frac{1}{N} [\langle H \rangle], \quad (4)$$

$$m_F = \frac{[q \left(\frac{N_{\max}}{N}\right) - 1]}{q - 1}, \quad (5)$$

$$C = (NK^2) [\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2], \quad (6)$$

$$\chi = (NK) [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2], \quad (7)$$

где $K = |J|/k_B T$, $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3\}$, N_i — число спинов в состоянии с $q = i$, $N = pL^2$ — число магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, квадратные скобки означают усреднение по примесным конфигурациям.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости намагниченности для чистой ($p = 1.00$) и разбавленной ($p = 0.80$) модели Поттса от температуры соответственно. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Как видно из этих рисунков, для всех рассмотренных систем наблюдается поведение характерное для фазового перехода второго рода.

На рис. 4 и 5 приведены температурные зависимости для восприимчивости χ и теплоемкости C , для систем с разными линейными размерами L при концентрации спинов $p = 1.0$, а на рис. 6 и 7 — при $p = 0.8$. Как видно из этих рисунков для спиновых систем с достаточно большими линейными размерами L в критической области наблюдаются ярко выраженные максимумы и эти максимумы в пределах погрешности приходят на одну и ту же температуру.

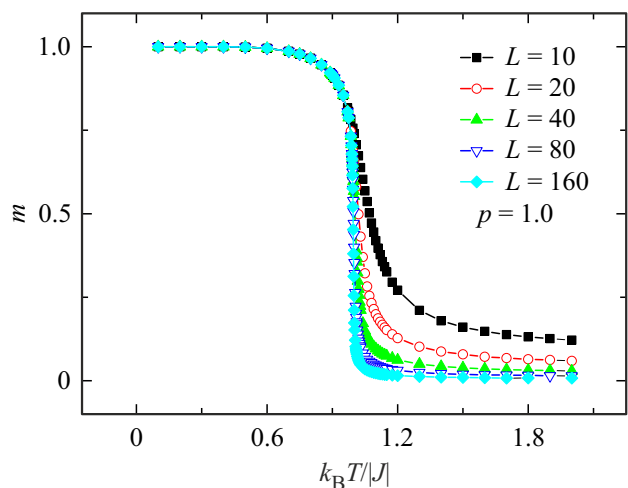


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности для чистой модели Поттса.

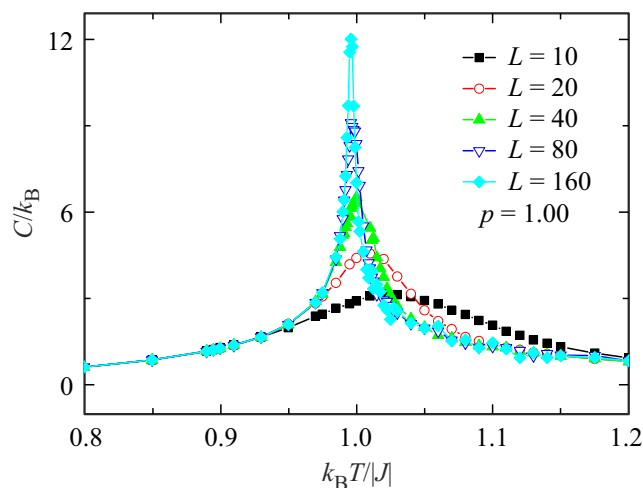


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости чистой модели Поттса.

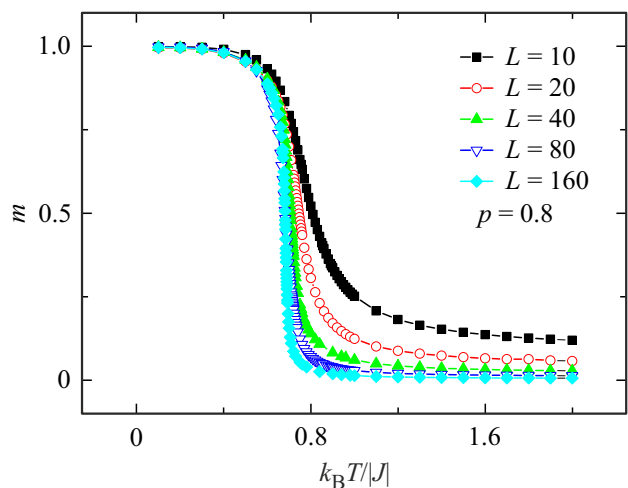


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности для разбавленной модели Поттса.

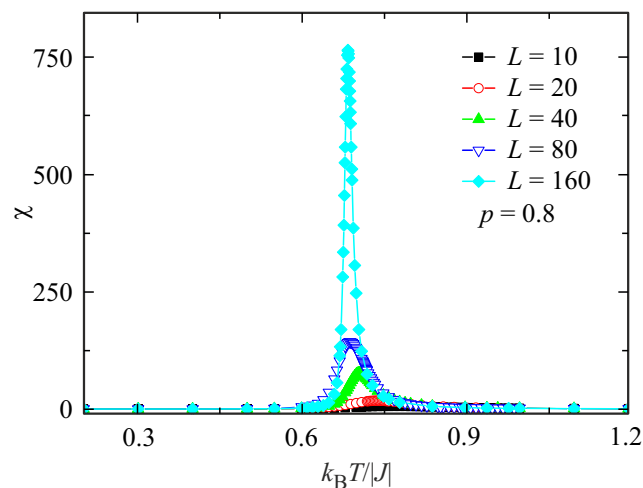


Рис. 6. Температурная зависимость восприимчивости для разбавленной модели Поттса.

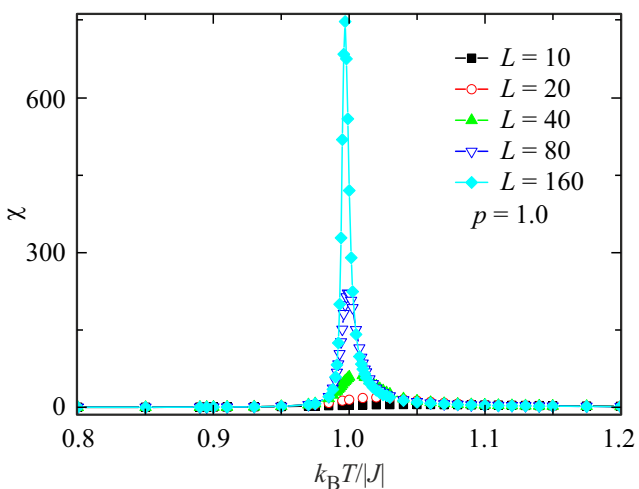


Рис. 4. Температурная зависимость восприимчивости чистой модели Поттса.

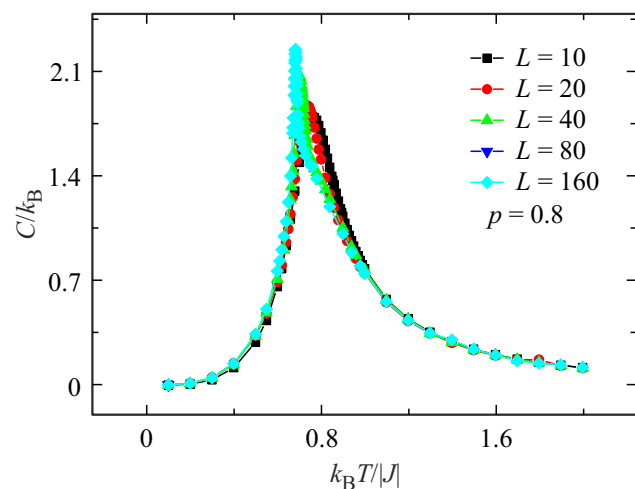


Рис. 7. Температурная зависимость теплоемкости для разбавленной модели Поттса.

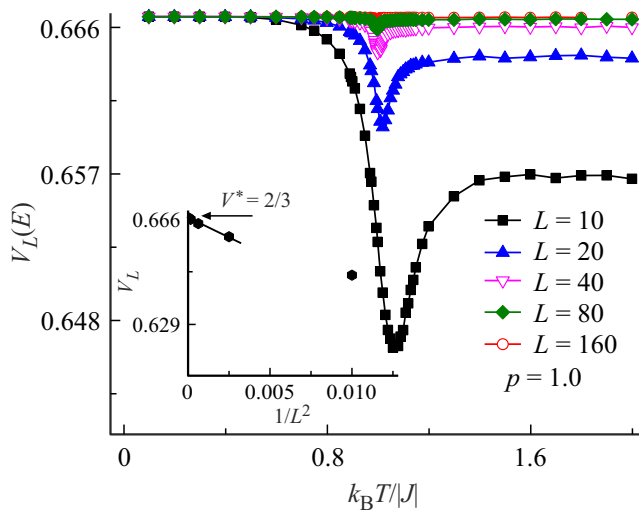


Рис. 8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$.

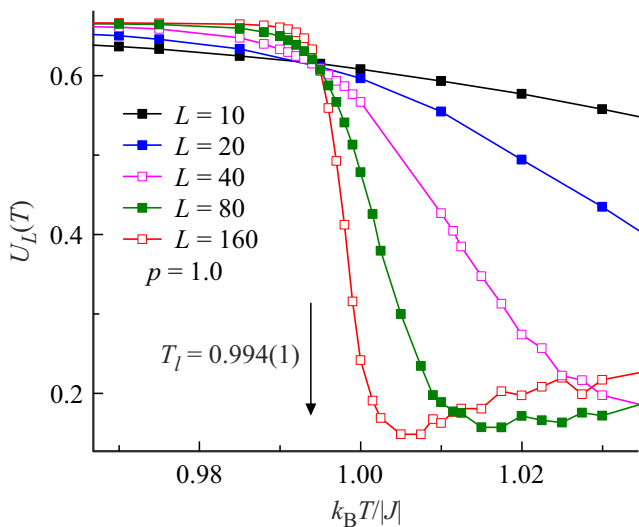


Рис. 9. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$.

Для анализа характера ФП наиболее эффективным методом зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [19]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle E^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (8)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (9)$$

где E — энергия и m — параметр порядка системы с линейным размером L . Выражения (8) и (9) позволяют определить температуру $T_l(p)$ с большой точностью в

фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род ФП в системе. Фазовые переходы второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [20]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к определенному значению V^* согласно выражению

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (10)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* = 2/3$, а кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$

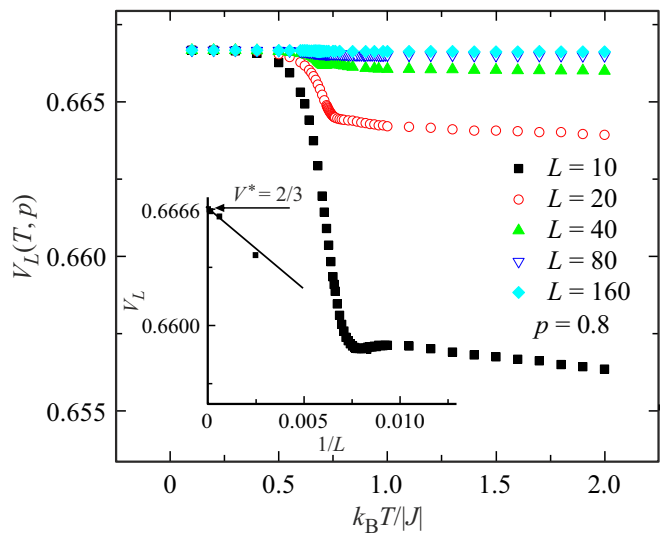


Рис. 10. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$.

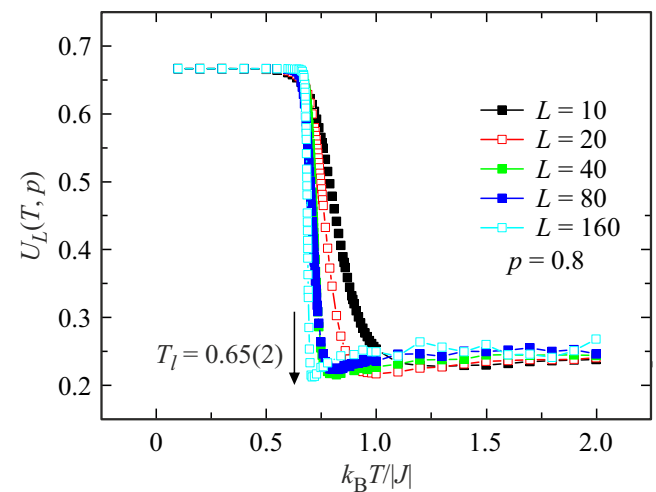


Рис. 11. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$.

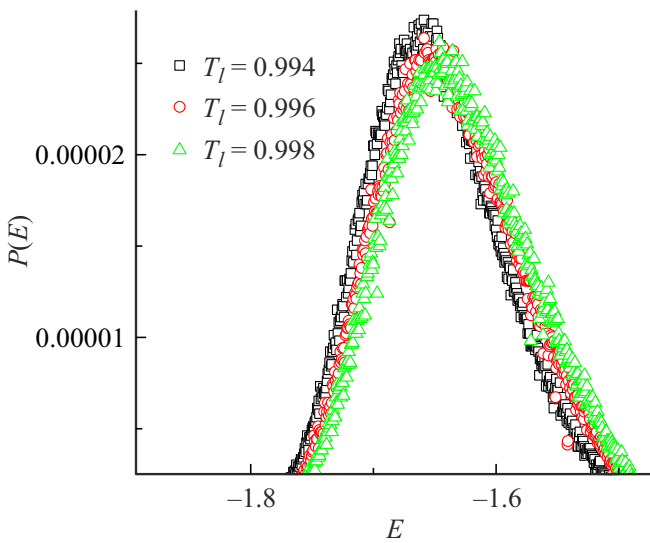


Рис. 12. Гистограмма распределения энергии для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке при $T = T_l$.

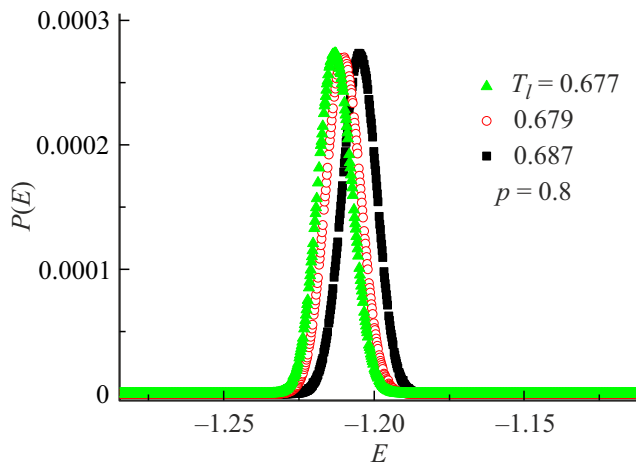


Рис. 13. Гистограмма распределения энергии для двумерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке при $T = T_l$.

будут иметь четко выраженную точку пересечения. Указанные особенности для кумулянтов Биндера четвертого порядка $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ продемонстрированы на рис. 8 и 9 соответственно для ФМ модели Поттса с $q = 3$ на квадратной решетке при отсутствии структурного беспорядка $p = 1.00$. Аналогичная картина наблюдается и при внесении немагнитного беспорядка концентрацией $c = 0.2$, $c = 1 - p$ (см. рис. 10 и 11). Методика определения рода фазового перехода этим методом подробно описана в работах [21–23]. Следует отметить, что температура ФП $T_l = 0.994(1)$ полученная для чистой спиновой системы при $p = 1.0$ достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением полу-

ченным Бакстером [12] по формуле

$$\frac{k_B T_l}{|J|} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{3})} = 0.99497 \dots$$

Независимо от метода кумулянтов Биндера четвертого порядка нами проводится и гистограммный анализ данных для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке. В гистограммном анализе данных вероятность того, что рассматриваемая система обладает энергией U и намагниченностью m равна [24]

$$\overline{P(U, m)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m) \exp[KU], \quad (11)$$

где $Z(K)$ — функция распределения энергии всей системы, а K — обратная температура, $W(U, m)$ — число конфигураций с энергией U и параметром порядка m .

Гистограммный анализ данных, проведенный нами для двумерной ФМ модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ в чистом при $p = 1.00$ и разбавленном режиме $p = 0.80$ на квадратной решетке, также свидетельствует о наличии ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 12 и 13 для спиновой системы с линейным размером $L = 160$. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для трех различных значений температуры вблизи T_l для чистой и разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$. Как видно из этих рисунков, на зависимостях вероятности P от энергии системы U для всех рассмотренных систем наблюдается один хорошо выраженный максимум для всех рассмотренных значений температур. Такое поведение характерно также для ФП второго рода.

Таким образом, в рассматриваемой работе показано, что наличие немагнитного беспорядка в рассматриваемой спиновой системе описываемой моделью Поттса с числом состояний спина $q = 3$ не влияет на род фазового перехода.

5. Заключение

В настоящей работе с соблюдением единой методики на основе метода Монте-Карло исследованы фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке. Полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что в рассматриваемой модели Поттса на квадратной решетке наблюдается фазовый переход второго рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [10,11]. Внесение немагнитных примесей стабилизирует фазовый переход второго рода в рассматриваемой модели Поттса

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Л.Н. Шур. УФН **182**, 7, 787 (2012).
- [2] O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
- [3] D.P. Landau, K. Binder. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge university press (2014).
- [4] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [5] В.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [6] A.V. Harris. J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [7] А.Н. Вакилов, В.В. Прудников. Письма в ЖЭТФ **55**, 709 (1992).
- [8] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Math. Mod. Comp. Simulations **11**, 4, 575 (2019).
- [9] Vik. Dotsenko, Vi. Dotsenko. Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
- [10] M. Aizenman, J. Wehr. Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
- [11] В.В. Дубс, В.В. Прудников, П.В. Прудников. Теор. мат. физика **190**, 3, 419 (2017).
- [12] Р. Бекстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 488 с.
- [13] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [14] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. ФТТ **62**, 5, 757 (2020).
- [15] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
- [16] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. Вестн. Омского ун-та **25**, 1, 7 (2020).
- [17] G.T. Barkema, M.E. Newman. J. New Monte Carlo algorithm for classical spin systems. Preprint cond-mat/9703179.
- [18] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys.Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [19] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
- [20] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
- [21] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. Mater. Lett. **258**, 126771 (2020).
- [22] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Ataeva. J. Magn. Magn. Mater. **440**, 101 (2017).
- [23] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
- [24] N.A. Alves, V.A. Berg, R. Villanova. Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).

Редактор Т.Н. Василевская