

11,05

Расчет относительных дисперсий намагниченности, теплоемкости и восприимчивости в двумерной слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса

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

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

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия

E-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в Редакцию 6 апреля 2023 г.

В окончательной редакции 1 июня 2023 г.

Принята к публикации 3 июня 2023 г.

С применением метода Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , теплоемкости R_c и восприимчивости R_χ для слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.90$. Выявлено, что внесение беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерную модель Поттса приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_c , и R_χ в критической точке. Установлено, что эти значения заметно уменьшаются для систем с линейными размерами $L > 40$.

Ключевые слова: немагнитная примесь, дисперсия, модель Поттса, метод Монте-Карло, фазовый переход.

DOI: 10.21883/FTT.2023.07.55853.55

1. Введение

Основным вопросом в физике конденсированных сред остается вопрос влияния немагнитного беспорядка на различные тепловые и магнитные характеристики изучаемых системы. Это связано с тем, что в реальных системах всегда присутствуют различные дефекты, примеси или другие несовершенства, нарушающие однородность системы и их учет, имеет огромное значение [1–5] при анализе различных физических свойств. Кроме того, имеются основания предполагать, что критические параметры исследуемой системы могут зависеть от способа реализации беспорядка. В частности, в работах [6,7] было обнаружено, что беспорядок, реализованный каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов), приводит к результатам, отличным от случая, когда беспорядок реализовался способом большого канонического типа (доля магнитных узлов в каждой примесной конфигурации флуктуирует). Позже в работе [8], с применением ренормализационной группы, такое поведение объяснило различием конечно-размерных эффектов в этих двух типах разбавления.

На сегодняшний день эти вопросы достаточно хорошо не исследованы. Особенно применительно к решеточным моделям Поттса и вызывают большой теоретический и экспериментальный интерес. Для моделей Поттса не выяснены особенности распределения термодинамических параметров по соответствующему ансамблю в зависимости от размеров L исследуемых систем. Строгое исследование таких закономерностей в ближайшее время возможно лишь на основе данных

численного эксперимента и практически невозможно другими методами.

В связи с этим, в настоящей работе с применением метода Монте-Карло исследуются особенности самосреднения термодинамических критических параметров двумерной слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса в зависимости от размеров исследуемых систем. Следует отметить, что на моделях Поттса можно проверить влияние примесей на фазовые переходы (ФП) и определить их роль как стабилизирующего фактора при ФП второго рода. С другой стороны, в соответствии с критерием Харриса [9] в случае двумерных моделей Поттса с $q = 3$ или с $q = 4$ примеси должны повлиять и на критическое поведение, так как для этих моделей в неразбавленном виде $\alpha = 1/3$ и $\alpha = 2/3$ соответственно [10,11].

2. Трехкомпонентная примесная модель Поттса на квадратной решетке

Приведем здесь формулировку трехкомпонентной примесной модели Поттса на квадратной решетке используемой для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. В рассматриваемой нами модели примеси распределены каноническим способом [2]. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности.

1. В узлах квадратной решётки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 3-х симметричных

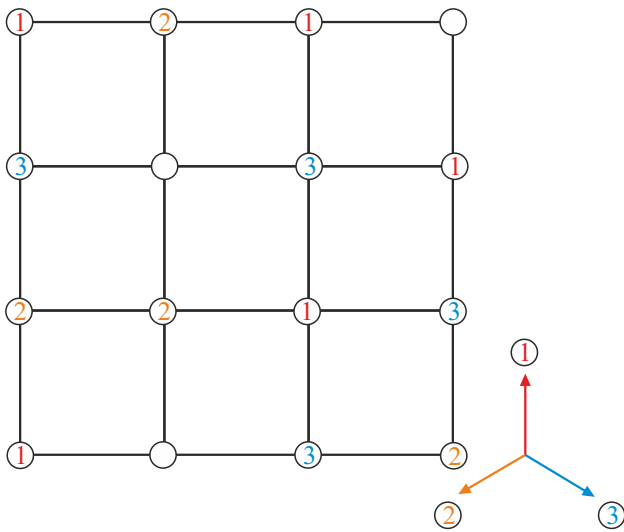


Рис. 1. Стандартная двумерная трехкомпонентная слабо разбавленная модель Поттса на квадратной решетке.

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 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 [12]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, \quad (1)$$

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

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

P_q — обозначение состояния спина с номером i , J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия.

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

Кластерный алгоритм Вольфа метода Монте-Карло является наиболее эффективным на сегодняшний день [13,14]. Методика его реализации подробно рассмотрена в [15,16]. В данной работе этот алгоритм использован в следующем виде.

1. Случайным образом выбирается узел на решётке. Если в этом узле окажется немагнитная примесь, то опять случайным образом выбирается узел и так до тех пор, пока не будет выбран узел со спином S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят спином, который сонаправлен с неперевернутым данным спином S_i , то с вероятностью $p = 1 - \exp(-K)$, где $K = J/k_B T$, этот спин тоже переворачивается, а его координаты запоминаются в стеке. Затем осуществляется просмотр ближайших соседей последнего спина, с которым была установлена связь. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты границы системы.

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

4. Процедура переворота спинов заканчивается, когда стек оказывается пустым. Этот процесс называется переворотом кластера.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.0, 0.9$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20-160$. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одинаковых состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 400\tau_0$. Для самой большой системы $L = 160$, $\tau_0 = 2 \cdot 10^3$ МК шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией $p = 0.90$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 1000 различным конфигурациям.

4. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения восприимчивости и теплоемкости нами использовались флуктуационные соотношения [17]:

$$\chi = \frac{\overline{(NK)}(\overline{\langle m^2 \rangle} - \langle m \rangle^2), \quad (3)$$

$$C = \frac{\overline{(NK^2)}(\overline{\langle U^2 \rangle} - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

где $K = J/k_B T$, ($J > 0$), $N = pL^2$ — число магнитных узлов, m — намагниченность системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, черта сверху означает усреднение по каноническому ансамблю с различной реализацией беспорядка.

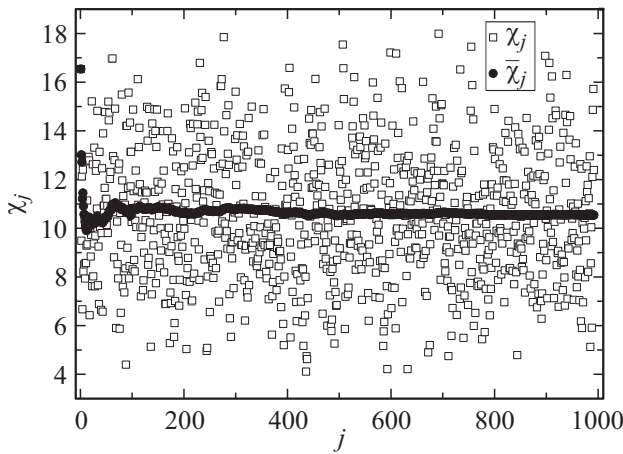


Рис. 2. Распределение восприимчивости по каноническому ансамблю с различным распределением немагнитных примесей для системы с $p = 0.90$, $T = T_c$ и линейным размером $L = 160$.

Для вычисления намагниченности в двумерной слабо разбавленной модели Поттса использовалось следующее соотношение:

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

На рис. 2 представлены значения восприимчивости χ_j для различных примесных конфигураций j двумерной трехкомпонентной модели Поттса в слабо разбавленном режиме при $p = 0.90$, $T = T_c(p)$, $0 \leq j \leq N_s$, N_s — общее число примесных конфигураций. Представлены здесь же и усредненные значения $\bar{\chi}_j$ по соответствующему каноническому ансамблю с различным распределением немагнитных примесей для систем с линейным размером $L = 160$. Как видно из рисунка, использованное нами для усреднения количество примесных конфигураций N_s позволяет достичь асимптотического критического режима.

В методах вычислительной физики для определения температуры фазового перехода $T_i(p)$ хорошо зарекомендовал метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [18,19]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (7)$$

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L . Формулы (6) и (7) предоставляют возможность определить $T_i(p)$ с наибольшей точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. При этом данный метод, хорошо зарекомендовал себя и при определении рода фазового перехода.

Особенности реализации этого метода при определении температуры и рода фазового перехода приведено в

работе [20]. При этом для ФП второго рода характерны следующие отличительные черты [19]:

– усредненная величина кумулянтов Биндера по энергии $V_L(T, p)$ стремится к тривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d}, \quad (8)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_i(L)$, где V^* равна $2/3$;

– кривые кумулянтов Биндера по намагниченности в критической области имеют ярко выраженную точку пересечения.

Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 0.90$ приведены соответственно на рис. 3 и 4. Как видно из рис. 4 критическая точка $T_c = 0.842(1)$ в единицах J/k_B .

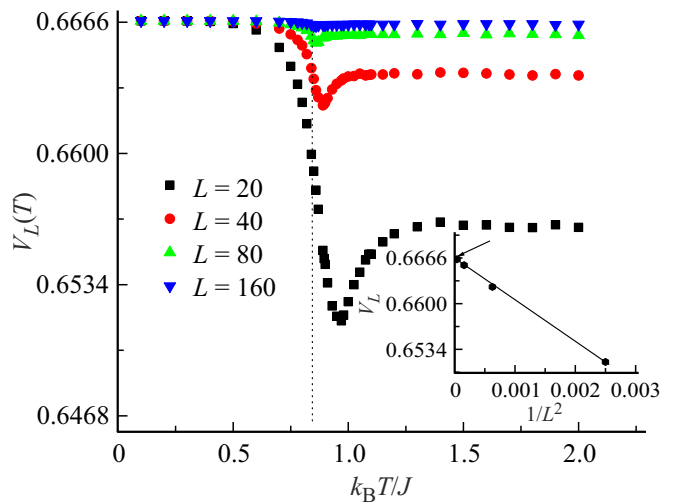


Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса при $p = 0.90$.

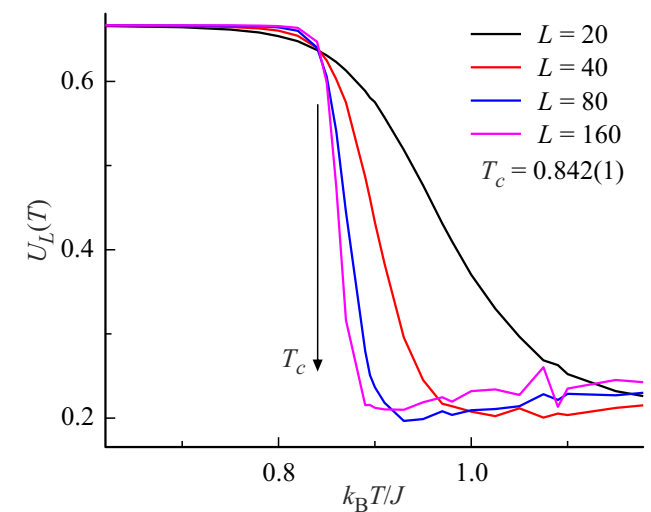


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса при $p = 0.90$.

Значения относительных дисперсий восприимчивости, намагниченности и теплоемкости для двумерной трехкомпонентной слабо разбавленной модели Поттса

L	R_χ	R_m	R_c
10	0.03121	0.00125	0.00542
20	0.02217	0.00114	0.00535
40	0.01504	0.00112	0.00477
80	0.01163	0.00108	0.00307
160	0.00789	0.00101	0.00247

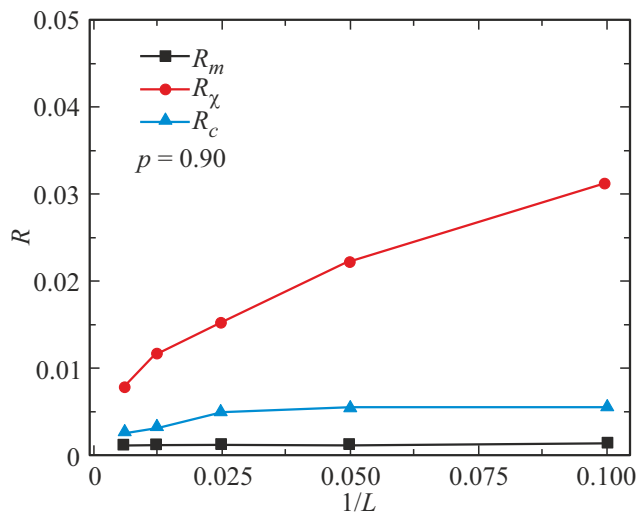


Рис. 5. Зависимость относительных дисперсий намагниченности R_m , теплоемкости R_c и восприимчивости R_χ от обратных размеров $1/L$ при концентрации $p = 0.90$, при $T = T_c$.

Для расчета относительных дисперсий (квадратов коэффициентов вариации) намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c при $T = T_c$ в зависимости от линейных размеров L исследуемой системы использовались выражения

$$R_m = \frac{\overline{m^2(L)} - \overline{m(L)}^2}{\overline{m(L)}^2}, \quad (9)$$

$$R_\chi = \frac{\overline{\chi^2(L)} - \overline{\chi(L)}^2}{\overline{\chi(L)}^2}, \quad (10)$$

$$R_c = \frac{\overline{C^2(L)} - \overline{C(L)}^2}{\overline{C(L)}^2}. \quad (11)$$

Численные данные в критической точке T_c , рассчитанные по выражениям (9)–(11), позволяют судить о закономерности самоусреднения термодинамических величин и их погрешности в зависимости от L . Соответствующие значения R_m , R_χ и R_c в зависимости от L при концентрациях спинов $p = 0.90$ представлены в таблице.

Как видно из таблицы, введение слабого беспорядка в двумерную трехкомпонентную модель Поттса приводит

к ненулевым значениям R_m , R_χ и R_c . Эти данные позволяют судить об ошибках, связанных с размерами изучаемых систем. На рис. 5 приведены дисперсии R_m , R_c , R_χ в зависимости от $1/L$. Как видно из рисунка с увеличением линейных размеров, значения R_m , R_c , R_χ заметно уменьшаются.

Таким образом, из полученных данных R_m , R_c , R_χ следует, что для однозначного определения рода ФП, критических параметров и других особенностей в слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса, необходимо изучать системы с линейными размерами $L > 80$.

5. Заключение

В настоящей работе с соблюдением единой методики впервые на основе кластерного алгоритма метода Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в слабо разбавленной модели Поттса при концентрации спинов $p = 0.90$. Полученные данные свидетельствуют о следующем.

1. Внесение слабого беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерную решеточную трехкомпонентную модель Поттса на квадратной решетке приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_χ и R_c , что указывает на плохое самоусреднение для исследуемых термодинамических параметров.

2. Установлено, что для слабо разбавленных систем описываемых трехкомпонентной моделью Поттса заметное уменьшение R_m , R_χ , R_c происходит только при $L > 40$. Для получения достоверных характеристик для этой модели необходимо изучать спиновые системы с $L > 40$.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V.S. Dotsenko. Usp. Fiz. Nauk **165**, 481 (1995).
- [2] R. Folk, Y. Golovach, T. Yavorsky. Adv. Phys. Sci. **173**, 175 (2003).
- [3] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Fiz. Nizk. Temp. **46**, 818 (2020).
- [4] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. JETP **132**, 917 (2021).
- [5] O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
- [6] S. Wiseman, E. Domany. Phys. Rev. E **58**, 2938 (1998).
- [7] S. Wiseman, E. Domany. Phys. Rev. Lett. **81**, 22 (1998).
- [8] A. Aharony, A.B. Harris, S. Wiseman. Phys. Rev. Lett. **81**, 252 (1998).
- [9] A.B. Harris. J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [10] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике / Под ред. А.М. Бродского. Мир, М. (1985). 486 с.
- [11] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **162**, 9, 398 (2022).

- [12] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [13] U. Wolff. Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [14] J.-S. Wang, R.H. Swendsen. Phys. A **167**, 565 (1990).
- [15] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Math. Mod. Comp. Simul. **11**, 4, 575 (2019).
- [16] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Low Temper. Phys. **41**, 608 (2015).
- [17] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [18] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
- [19] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
- [20] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. J. Supercond. Nov. Magn. **35**, 2205 (2022).

Редактор Т.Н. Василевская