

Фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$

А.К. Муртазаев^{1,2}, А.Б. Бабаев^{1,3}, Г.Я. Азнаурова¹

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН
ул. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия

² Дагестанский государственный университет, ул. М. Гаджиева, 43а, г. Махачкала, 367025, Россия

³ Дагестанский государственный педагогический университет, г. Махачкала, 367003, Россия
E-mail: b_albert78@mail.ru

Статья поступила в редакцию 12 июля 2010 г.

Методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы и критические явления в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с немагнитными примесями. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 20\text{--}32$ при концентрациях спинов $p = 1,00; 0,90; 0,65$. С использованием метода кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что в сильно разбавленном режиме при концентрации спинов $p = 0,65$ в данной модели наблюдается фазовый переход второго рода, а для чистой модели ($p = 1,00$) и слабо разбавленной ($p = 0,90$) — фазовый переход первого рода. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β и радиуса корреляции ν .

Методом Монте-Карло досліджено фазові переходи й критичні явища в тривимірній моделі Поттса із числом станів спіну $q = 4$ з немагнітними домішками. Розглянуто системи з лінійними розмірами $L = 20\text{--}32$ при концентраціях спінів $p = 1,00; 0,90; 0,65$. З використанням методу кумулянтів Біндера четвертого порядку показано, що в сильно розведеному режимі при концентрації спінів $p = 0,65$ у даній моделі спостерігається фазовий перехід другого роду, а для чистої моделі ($p = 1,00$) і слабо розведеної ($p = 0,90$) — фазовий перехід першого роду. На основі теорії кінцево-розмірного скейлінгу розраховано статичні критичні індекси теплоємності α , сприйнятливості γ , намагніченості β та радіуса кореляції ν .

PACS: 75.40.Cx Статические свойства;

75.40.Mg Изучение на численных моделях.

Ключевые слова: модель Поттса, замороженный беспорядок, фазовые переходы, критические явления.

1. Введение

Изучение тепловых и критических свойств магнитных материалов, содержащих примеси и другие дефекты структуры, представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это обусловлено тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержат примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых проявляется в их тепловых и магнитных характеристиках и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при фазовых переходах (ФП).

В связи с этим существует серьезная необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты структуры

влияют на поведение различных систем при ФП. На основе эвристических аргументов сформулирован критерий, называемый обычно критерием Харриса [2], определяющий существенность влияния замороженных немагнитных примесей на критическое поведение. Согласно этому критерию, слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда теплоемкость соответствующей чистой системы испытывает расходимость в критической точке. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга.

Исследованию критических свойств неупорядоченной модели Изинга в последнее время посвящено значительное число работ [3–7], в них получены ответы на многие вопросы. В отличие от трехмерной разбав-

ленной модели Изинга весьма запутанной остается ситуация с трехмерной моделью Поттса с числом состояний спина $q = 4$, в которой замороженный беспорядок внесен в виде немагнитных примесей. В этой модели в чистом состоянии наблюдается ФП первого рода. В связи с тем, что эта модель может быть использована для описания наноструктур и сверхрешеток, исследование влияния примесей на их критические и термодинамические свойства имеет важное значение [8].

Несмотря на интенсивные теоретические исследования спиновых решеточных систем с замороженным беспорядком в течение последних двадцати лет, к настоящему времени существует совсем немного надежно установленных фактов о поведении систем, для которых в чистом состоянии наблюдается слабо выраженный ФП первого рода. Известно, что присутствие замороженного беспорядка в модели Поттса с состоянием $q > q_c$ (q_c — критическое число состояний спина) может изменить порядок ФП. Для двумерной неразбавленной модели Поттса величина $q_c = 4$ [9], в то время как для трехмерной модели Поттса $q_c = 2,45$ [10]. При этом для первой модели наблюдается ФП второго рода, а для второй — слабо выраженный ФП первого рода. В ряде работ [11,12] строго доказано, что для низкоразмерных систем $d \leq 2$, описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$, наличие сколь угодно малой величины замороженного беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода. В работе [13] показано, что для трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$, для которой в отсутствие структурного беспорядка наблюдается слабо выраженный ФП первого рода, внесение в систему замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей с концентрацией c порядка 5% ($c = 1 - p$, $p = 0,95$) достаточно, чтобы наблюдалось поведение, характерное для ФП второго рода.

Для трехмерной разбавленной модели Поттса с $q = 4$ до сих пор нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на ФП, не установлен класс универсальности критического поведения, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей [14]. Единственным надежно установленным фактом является то, что в чистой модели происходит ФП первого рода [15].

В настоящей работе исследованы ФП в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК). Огромный интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, модель Поттса служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферро-

магнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких как SrTiO_3 , могут описываться моделью Поттса с состоянием спина $q = 3$ [14,15]. Кроме того, адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита может также описываться моделями решеточного газа Поттса с числом состояний спина q .

Во-вторых, исследование влияния замороженного беспорядка на универсальные характеристики критического поведения, помимо практического, имеет и большой академический интерес [16].

В-третьих, первые попытки исследования этой модели методами вычислительной физики предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

2. Модель и методика исследования

При построении трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на простой кубической решетке необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах решетки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из $q \geq 2$ состояний, и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или хотя бы в одном узле расположен 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 [14]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, \quad (1)$$

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

и

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

Следует отметить, что в данной модели в отсутствие замороженного беспорядка ($p = 1,00$) наблюдается ФП первого рода. Поэтому первоначально мы провели контрольные исследования термодинамических параметров для чистой неразбавленной 3D модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [17]. Рас-

четыре проведены для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1,00; 0,90; 0,65$. Рассматривали системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20-32$. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L . Усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$ и по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1,0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрациями $p = 0,90; 0,65$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 100 и 1000 различным конфигурациям соответственно, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 180\tau_0$.

3. Результаты численного эксперимента

Для анализа характера фазовых переходов и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях наиболее эффективным оказался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [18,19]:

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

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

где E — энергия, 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. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [20]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

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

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c(L)$, где V^* отлична от $2/3$, а минимальная величина $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p)$ расходится: $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$. Максимумы теплоемкости C и восприимчивости χ пропорциональны объему L^d . Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ от температуры для слабо разбавленных систем с разными линейными размерами при

$p = 0,90$ приведены на рис. 1. Заметим, что на вставке к рис. 1,а наглядно видно, что нетривиальная величина V^* , полученная при аппроксимации в соответствии с выражением (4), не стремится к $2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось, характерно для ФП первого рода. На рис. 1,б также видно, что в критической области $U_L(T, p)$ проявляет тенденцию стремления к $-\infty$ при $L \rightarrow \infty$, что также свидетельствует о ФП первого рода. Аналогичные зависимости термодинамических параметров наблюдались и для чистой неразбавленной модели при $p = 1,0$.

Температурные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ от температуры для сильно разбавленных систем с разными линейными размерами при $p = 0,65$ приведены на рис. 2. Заметим, что на вставке к рис. 2,а наглядно видно, что нетривиальная величина V^* в отличие от слабо разбавленного режима ($p = 0,90$), стремится к $2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Аппроксимация, проведенная на основе выражении (4), приведена на рис. 3. Такое поведение характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 2,б видно, что в критической области для $U_L(T, p)$ наблюдается четко выраженная точка

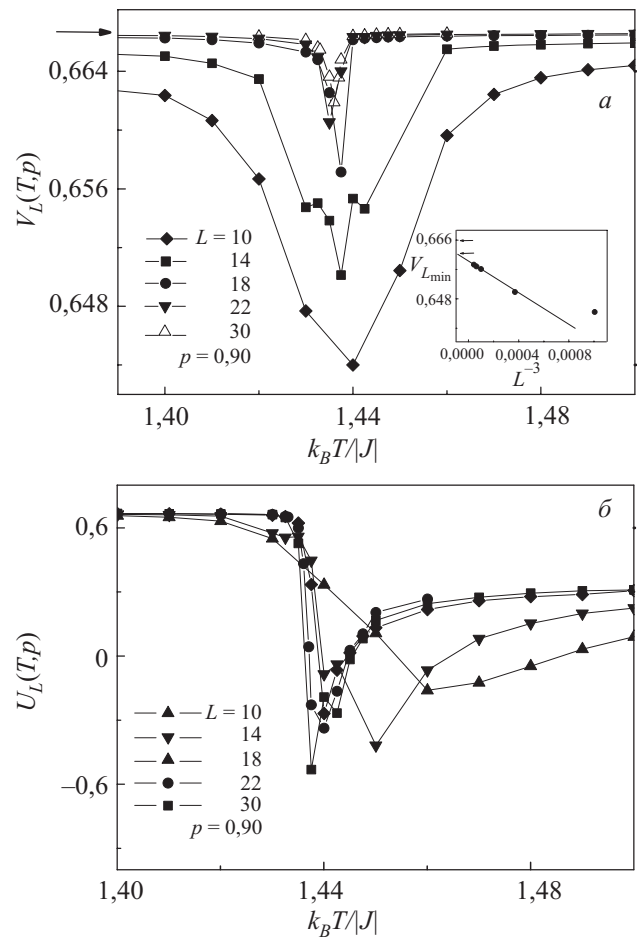


Рис. 1. Температурные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ (а) и $U_L(T, p)$ (б) для 3D слабо разбавленной модели Поттса с $q = 4$.

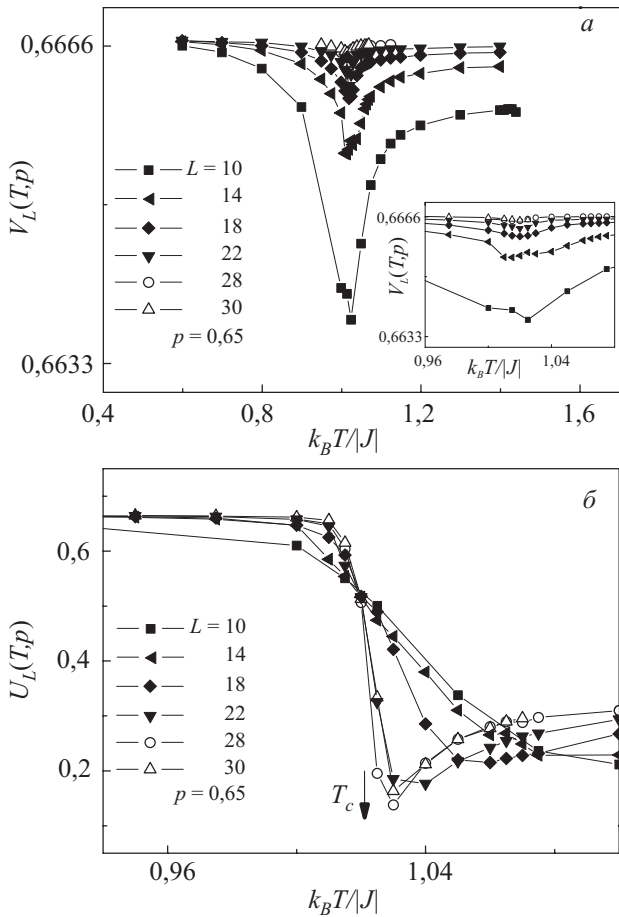


Рис. 2. Температурные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ (а) и $U_L(T,p)$ (б) для 3D сильно разбавленной модели Поттса с $q = 4$.

ка пересечения и $U_L(T,p)$ не проявляет тенденцию стремления к $-\infty$ при $L \rightarrow \infty$, что также свидетельствует о ФП второго рода. Определенные методом кумулянтов Биндера критические температуры $T_c(p)$ равны: $T_c(1,00) = 1,5925$; $T_c(0,90) = 1,4375$; $T_c(0,65) = 1,0222$ в единицах $|J|/k_B$.

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода на фазовой диаграмме, для этой модели на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [21,22] нами рассчитаны статические критические индексы (КИ) теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β и радиуса корреляции ν . Из соотношений теории КРС следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L намагниченность, восприимчивость и параметр V_n для определения критического индекса ν удовлетворяют следующим аналитическим выражениям:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (5)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (6)$$

$$V_n \sim L^{1/\nu}, \quad (7)$$

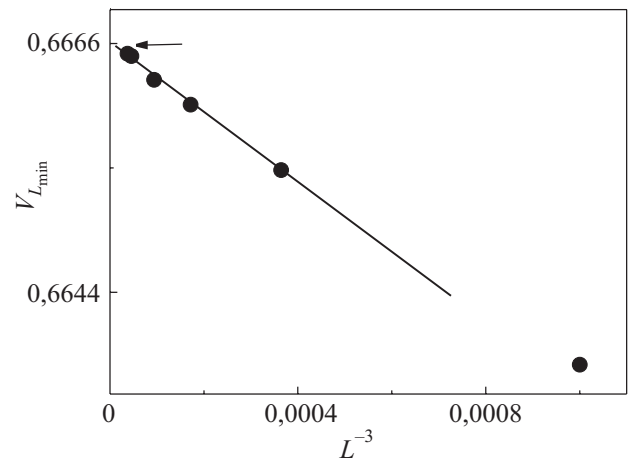


Рис. 3. Зависимость кумулянтов Биндера $(V_L)_{\min}$ от L при $p = 0,65$. Аппроксимация проведена на основе выражения (4).

где в качестве V_n может выступать

$$V_i = (\langle m^i E \rangle / \langle m^i \rangle) - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2, 3).$$

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L , как правило, в случае ФП второго рода используется выражение [23]

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (8)$$

где A — некоторый коэффициент.

Расчет КИ проводился в области фазовой диаграммы, соответствующей сильно разбавленному режиму ($p = 0,65$). Для расчета КИ α , β , γ и ν строились зависимости C , m , χ и V_n от L . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить $\alpha/\nu = -0,187(11)$, $\beta/\nu = 0,691(24)$, $\gamma/\nu = 1,521(30)$, $1/\nu = 1,342(13)$. Затем, с использованием значений ν , полученных в рамках данного исследования, получены значения индексов: $\alpha = -0,139(11)$, $\beta = 0,514(24)$ и $\gamma = 1,133(30)$. Более подробно эта процедура описана в работе [24].

4. Заключение

В данной работе с соблюдением единой методики впервые на основе метода кумулянтов Биндера изучены фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$. На основе полученных данных можно сделать выводы.

1. В модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ в отсутствие структурного беспорядка ($p = 1,0$) и в области слабого разбавления ($p = 0,90$) наблюдается поведение, характерное для ФП первого рода.

2. В сильно разбавленной области ($p = 0,65$) внесение в систему замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей ($c = 1 - p$) изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода. Числен-

ные значения КИ, рассчитанные в сильно разбавленной области $p = 0,65$, имеют значения $\alpha = -0,139(11)$, $\beta = 0,514(24)$, $\gamma = 1,133(30)$, $\nu = 0,745(13)$ и достаточно хорошо удовлетворяют скейлинговому соотношению $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 09-02-96506-р_юг_а, № 10-02-00130-а) и грантом ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (Госконтракты №П554 и «02.740.11.03.97).

1. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
2. A.V. Harris, *J. Phys.* **C7**, 1671 (1974).
3. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
4. H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J.J. Ruiz-Lorenzo, *Phys. Rev.* **B58**, 2740 (1998).
5. В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницын, *ЖЭТФ* **132**, 417 (2007).
6. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **126**, 1377 (2004).
7. А.К. Муртазаев, *УФН* **176**, 1119 (2006).
8. S.A. Sarfan, P.S. Sahni, and G.S. Grest, *Phys. Rev.* **B28**, 2693 (1983).
9. M. Loulidi, *Physica* **A287**, 177 (2000).
10. A.J. Guttmann and I.G. Enting, *J. Phys.* **A27**, 5801 (1994).
11. M. Aizenman and J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
12. K. Hui and A.N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2507 (1989).
13. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ЖЭТФ* **136**, 516 (2009).
14. А.Н. Ермилов, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **20**, 1379 (1989).
15. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
16. Вик. С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
17. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
18. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
19. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
20. D. Loison and K.D. Schotte, *Eur. Phys. J.* **B5**, 735 (1998).
21. M.E. Fisher and M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
22. D. Loison, *Phys. Lett.* **A257**, 83 (1999).
23. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev.* **B43**, 6087 (1991).
24. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.А. Магомедов, *ЖЭТФ* **120**, 1535 (2001).

The phase transitions in 3D 4-state diluted Potts model

A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, and G.Ya. Aznaurova

Phase transitions and critical phenomena in the three-dimensional 4-state diluted Potts model with nonmagnetic impurities are investigated by the Monte-Carlo method. The systems with linear sizes $L = 20-32$ are examined with spin concentrations $p = 1.00, 0.90, 0.65$. By using the Binder cumulants method of the fourth order, it is shown that the second-order phase transition is observed in a strongly diluted model at spin concentration $p = 0.65$, while a pure model ($p = 1.00$) and a weakly diluted one ($p = 0.90$) display the first-order phase transition. The static critical parameters of heat capacity α , susceptibility γ , magnetization β , and radius correlation exponent ν are calculated on the basis of the finite-size scaling theory.

PACS: 75.40.Cx Static properties;
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: Potts model, quenched disorder, phase transitions, critical phenomena.