Low Temperature Physics/Фізика низьких температур, 2020, т. 46, № 7, с. 818–823

Влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной модели Поттса

А.Б. Бабаев[1,2], А.К. Муртазаев[1]

[1]*Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН*
Махачкала, 367010, Россия
E-mail: b_albert78@mail.ru

[2]*Отдел математики и информатики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН*
Махачкала, 367000, Россия

Статья поступила в редакцию 31 октября 2019 г., опубликована онлайн 26 мая 2020 г.

Кластерным алгоритмом Вольфа метода Монте-Карло исследовано влияние вмороженных немагнитных примесей, распределенных каноническим способом, на фазовые переходы в двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 20–160$ при концентрациях спинов $p = 1,0$ и $0,9$. Методом кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммным методом анализа данных показано, что внесение в систему слабого вмороженного беспорядка в виде немагнитных примесей ($p = 0,9$) изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

Ключевые слова: модель Поттса, вмороженный беспорядок, кумулянты Биндера.

Введение

Изучение влияния беспорядка, содержащегося в твердом теле в виде примесей или других дефектов структуры, на фазовые переходы (ФП) и критические явления представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это связано с тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при ФП. По этой причине существует необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел.

Критерий Харриса [2] ответил на принципиальный вопрос о смене критического поведения при введении небольшого количества неподвижных, «вмороженных» примесей. Согласно этому критерию, если $d\nu > 2$, где d — размерность систем, а ν — критический индекс радиуса корреляции, примеси не изменяют критические индексы. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что $d\nu = 2$. Детальное рассмотрение этого случая [3] 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. В случае двумерных моделей Поттса с числом состояний спина $q \le 4$ примеси могут изменить критические индексы и класс универсальности критического поведения.

Имеются основания предполагать, что примеси оказывают совершенно другое влияние вплоть до изменения рода ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [4,5]. Такая смена ФП экспериментально наблюдается в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [6]. Для низкоразмерных систем ($d \le 2$), описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$ ($q_c = 4$, q_c — критическое число состояний спина, d-размерность), на основе аналитических методов показано, что наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [7]. Для однородных систем с размерностью $d \ge 3$, описываемых моделями Поттса, для которых наблюдается ФП первого рода, ситуация может оказаться другой. В этом случае внесение вмороженного беспорядка может привести к трикритической точке p^*, ниже которой будет наблюдаться ФП второго рода, выше — ФП первого рода [8–10].

Цель работы — исследование на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло влияния слабого беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей, распределенных каноническим способом, на ФП в низкоразмерных системах, описываемых моделью Поттса с числом состояний спина $q = 5$, для которой в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода.

2. Модель и методика исследования

Рассмотрена двумерная слабо разбавленная модель Поттса с числом состояний спина $q = 5$. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах квадратной решетки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из q-состояний ($q \geq 2$), и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы (канонический способ) на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях, или хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях. С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5, \qquad (1)$$

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

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

ρ_i, ρ_j — случайные переменные, описываемые функцией распределения

$$P(\rho_i) = p\delta(1-\rho_i) + (1-p)\delta(\rho_i), \qquad (2)$$

характеризующие распределенные по узлам решетки вмороженные немагнитные примеси.

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [11]. Расчеты выполнялись 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 были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 190\tau_0$. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1{,}0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией $p = 0{,}9$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 1000 различным конфигурациям, для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 190\tau_0$.

3. Результаты численного эксперимента

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости применялись флуктуационные соотношения [12]:

$$c = (NK^2)\left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2\right), \qquad (2)$$

$$\chi = (NK)\left(\langle m_F{}^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2\right), \qquad (3)$$

где $K = |J| / k_B T$, $N = pL^2$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m_F — намагниченность системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности (m_F), для ферромагнитной (ФМ) модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ использовалось следующее выражение [13]:

$$m_F = \frac{\left[q\left(\frac{N_{\max}}{N}\right) - 1 \right]}{q - 1} \qquad (4)$$

где $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$, N_i — число спинов в состоянии с $q = i$, $N = pL^2$.

На рис. 1 и рис. 2 представлены характерные зависимости для восприимчивости χ и теплоемкости c от температуры T для двумерной слабо разбавленной ФМ модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке для систем с линейными размерами $L = 10$–160 при концентрации спинов $p = 0{,}9$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости χ и теплоемкости c от температуры для всех исследуемых систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну температуру.

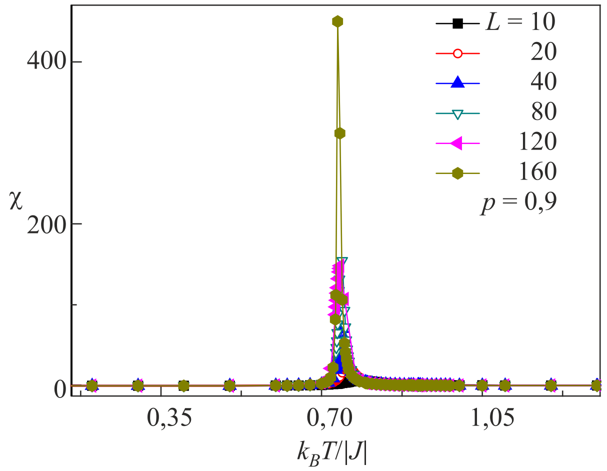

Рис. 1. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость восприимчивости χ для двумерной слабо разбавленной ФМ модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке.

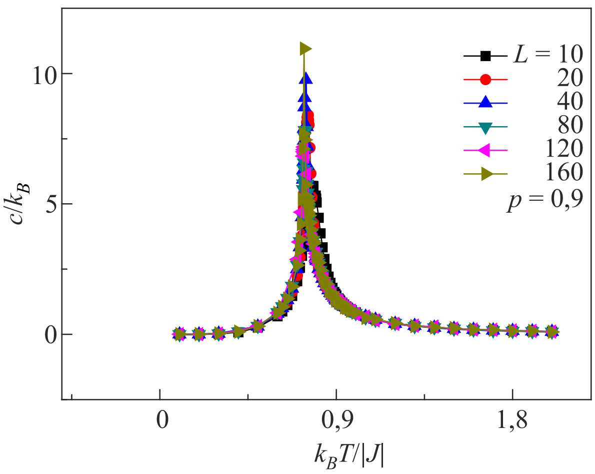

Рис. 2. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость теплоемкости c для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке.

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для двумерной трехвершинной слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0{,}9$. Как видно, наблюдается монотонное уменьшение величины m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов» при увеличении линейного размера L.

Для определения критических температур и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [14]

$$V_L(T,p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \tag{5}$$

$$U_L(T,p) = 1 - \frac{\left\langle m^4(T,p;L) \right\rangle_L}{3\left\langle m^2(T,p;L) \right\rangle_L^2}, \tag{6}$$

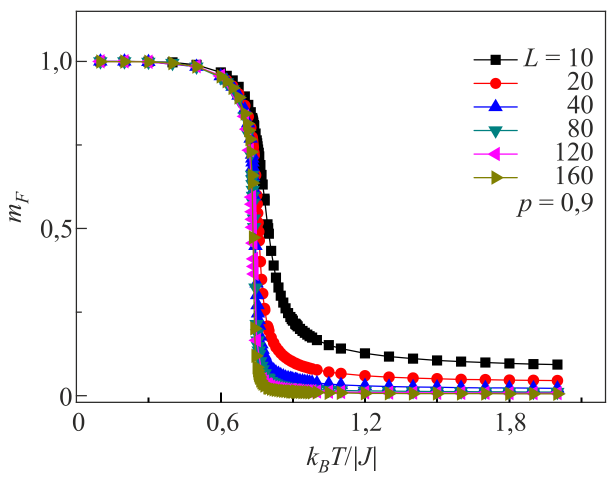

Рис. 3. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость намагниченности m_F для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке.

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (5) и (6) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Методика определения температуры ФП этим методом рассмотрена в работах [15–17]. 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 [18]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению:

$$V(T,p) = V^* + bL^{-d}, \tag{7}$$

при $L \to \infty$ и $T = T_l(L)$, где V^* отлична от 2/3, а минимальная величина $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p)$ расходится как $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p) \to -\infty$ при $L \to \infty$, что и продемонстрировано на рис. 4 и рис. 5 для исследованной модели в отсутствие структурного беспорядка ($p = 1{,}0$); 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 систем с разными линейными размерами при $p = 0{,}9$ приведены на рис. 6 и рис. 7. На вставке рис. 6 наглядно видно, что нетривиальная величина $V^* \to 2/3$ в соответствии с выражением (4) при $L \to \infty$. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 7 в критической области для $U_L(T,p)$ наблюдается четко выраженная точка пересечения и $U_L(T,p)$ не проявляет тенденцию стремления к $-\infty$ при $L \to \infty$, что также свидетельствует о ФП второго рода. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_l(1{,}0) = 0{,}8515(1)$, $T_l(0{,}9) = 0{,}731(2)$. Как видно, температура ФП, полученная для чистой спиновой системы при $p = 1{,}0$ достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением, полученным Бакстером [19] по формуле

$$\frac{k_B T_l}{|J|} = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{5})} = 0{,}8515\ldots$$

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП использовался гистограммный анализ данных метода Монте-Карло [20,21]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m, определяется выражением [20]

$$\overline{P(U,m)} = \frac{1}{Z(K)} W(U,m)\exp[KU], \tag{8}$$

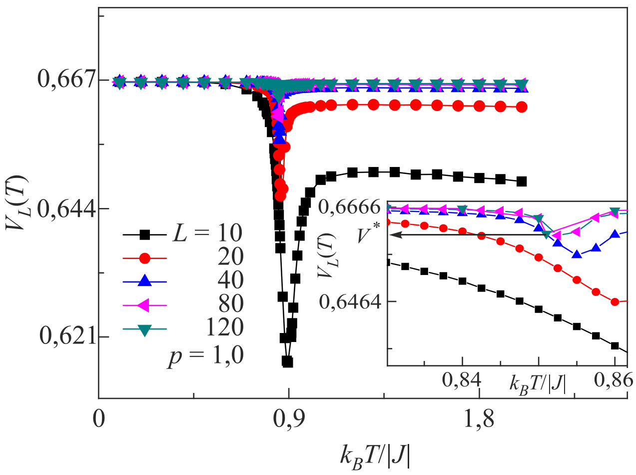

Рис. 4. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке.

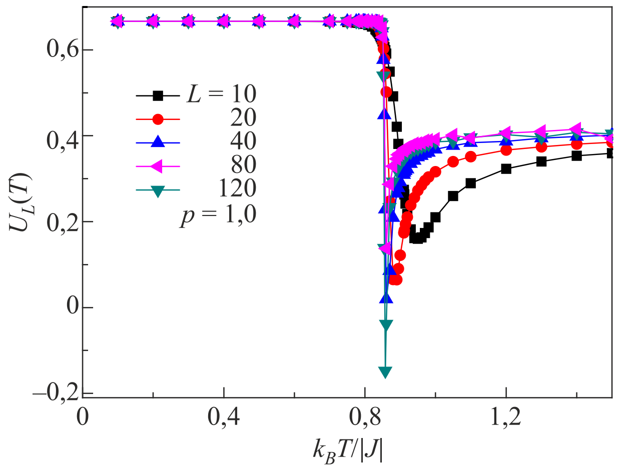

Рис. 5. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке.

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

Гистограммный анализ данных, проведенный для двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке, также свидетельствует о наличии ФП первого рода. На рис. 8 представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для систем с линейным размером L = 60. Видно, что на зависимости вероятности P от энергии U для системы L = 60 наблюдается два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является важным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса на квадратной решетке, но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности P от энергии U для системы с L = 120 наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 9), что является характерным признаком для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные свидетельствуют о том, что в двумерной ФМ модели Поттса с q = 5 в отсутствие структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с результатами теоретических исследований [19,22]. В тоже время в недавних работах [23,24] с применением масштабно-инвариантной теории рассеяния показано, что для неразбавленной антиферромагнитной модели Потса при q = 5, в отсутствие структурного беспорядка, возможен ФП второго рода. Выяснение этого вопроса для чистой неразбавленной модели Поттса требует дополнительных тщательных расчетов, что станет целью другой работы. Внесение в рассматривае-

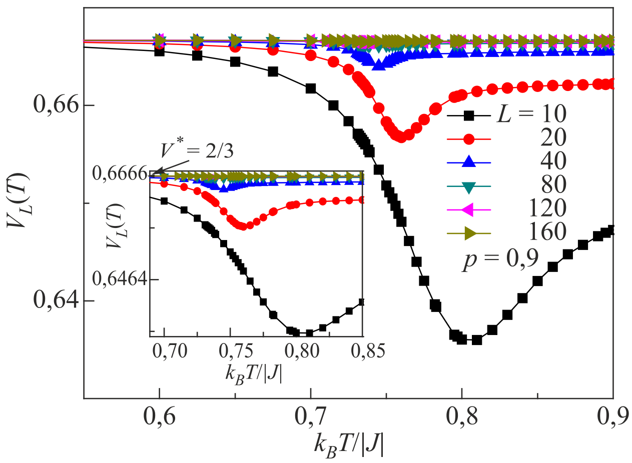

Рис. 6. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке.

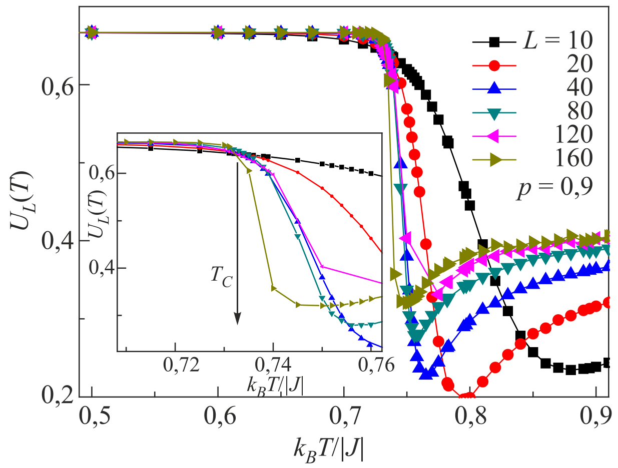

Рис. 7. (Онлайн в цвете) Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке.

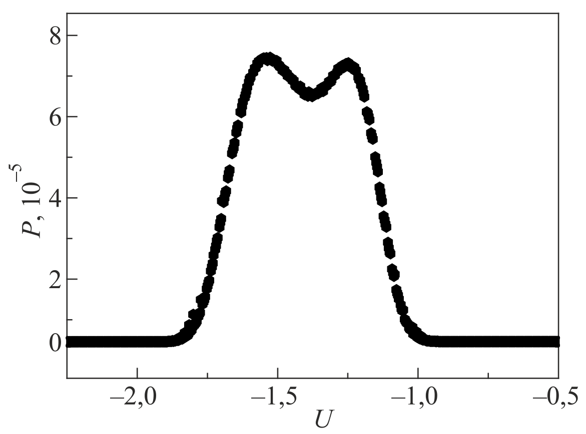

Рис. 8. Гистограмма распределения энергии для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке при $p = 1{,}0$ и $T = T_l$.

мую модель слабого вмороженного беспорядка (p = 0,9) в виде немагнитных примесей, распределенных каноническим способом, приводит к ФП второго рода. Отметим, что в работах [13,25] такая смена ФП наблюдалась и для спиновых систем, в которых беспорядок внесен в виде случайных связей.

Выяснение влияния вмороженного беспорядка, реализованного каноническим способом, в зависимости от концентрации спинов p на критическое поведение двумерной модели Поттса с q = 5 на квадратной решетке требует отдельного рассмотрения. Изучение этой проблемы позволит сравнить полученные данные при канонической реализации беспорядка с результатами других авторов [13,25–29] и ответить на вопрос: являются ли критические индексы неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина q = 5 универсальными или непрерывно изменяются с ростом концентрации примесей. В частности, в работах [30,31] показано, что в случае антиферромагнитной разбавленной модели Поттса с q = 3 на треугольной решетке критическое поведение проявляет слабую универсальность.

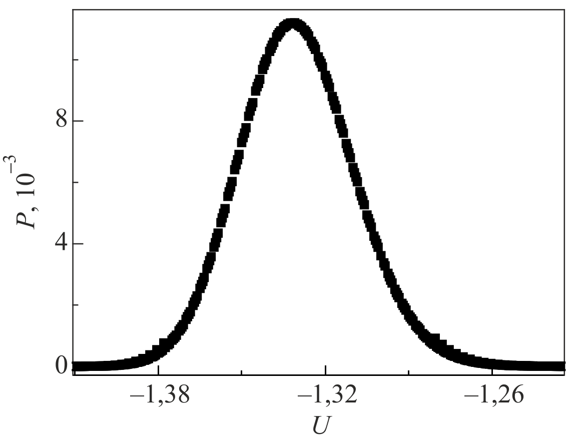

Рис. 9. Гистограмма распределения энергии для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке при $p = 0{,}9$ и $T = T_l$.

4. Заключение

Исследовано с соблюдением единой методики влияние слабого беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина q = 5 на квадратной решетке. Данные, полученные в результате исследований, свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с q = 5 на квадратной решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с теорией среднего поля [22]. Внесение слабого беспорядка (p = 0,9) в виде вмороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель приводит к ФП второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153.

1. O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, and Yu. Holovatch, *Phys. Rev. E* **92**, 042118 (2015).
2. A.B. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
3. Vik. Dotsenko and Vl. Dotsenko, *Adv. Phys.* **32**, 129 (1983).
4. Y. Imry and M. Wortis, *Phys. Rev. B* **19**, 3580 (1979).
5. J. Cardy and J.L. Jacobsen, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4063 (1997).
6. G.S. Iannacchione, G.P. Crawford, S. Žumer, J.W. Doane, and D. Finotello, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2595 (1993).
7. M. Aizenman and J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
8. C.J.Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper, *Phys. Rev. E* **72**, 036120 (2001).
9. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 618 (2014).
10. А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 363 (2017).
11. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
12. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
13. C. Chatelain and B. Berche, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1670 (1998).
14. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
15. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, *ФНТ* **39**, 194 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 147 (2013)].
16. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 267 (2014).
17. А.Б. Бабаев, Т.Р. Ризванова, А.К. Муртазаев, *ФТТ* **59**, 2416 (2017).
18. D. Loison and K.D. Schotte, *Europ. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
19. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
20. N.A. Alves, B.A. Berg, and R. Villanova, *Phys. Rev. B* **41**, 383 (1990).
21. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **143**, 116 (2013).
22. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
23. G. Delfino and E. Tartaglia, *Phys. Rev. E* **96**, 042137 (2017).

24. G. Delfino, W. Selke, and A. Squarcini, *J. Stat. Mech.* **5**, 053203 (2018).
25. R. Paredes and J. Valbuena, *Phys. Rev. E* **59**, 6275 (1999).
26. U.L. Fulco, F.D. Nobre, L.R. da Silva, and L.S. Lucena, *Physica A* **297**, 131 (2001).
27. L.N. Shchur and O.A. Vasilyev, *Phys. Rev. B* **65**, 016107 (2001).
28. I. Balog and K. Uzelac, *Phys. Rev. E* **86**, 061124 (2012).
29. N.G. Fytas, A. Malakis, W. Selke, and L.N. Shchur, *Eur. Phys. J. B* **88**, 204 (2015).
30. А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 656 (2018).
31. A.K. Murtazaev and A.B. Babaev, *Mater. Lett.* **238**, 321 (2019).

Вплив вморожених немагнітних домішок на фазові переходи у двовимірній моделі Поттса

А.Б. Бабаєв, А.К. Муртазаєв

Кластерним алгоритмом Вольфа методу Монте-Карло досліджено вплив вморожених немагнітних домішок, що розподілені канонічним способом, на фазові переходи у двовимірній моделі Поттса з числом станів спіну $q = 5$. Розглянуто системи з лінійними розмірами $L = 20–160$ при концентраціях спінів $p = 1{,}0$ та 0,9. З використанням методу кумулянтів Біндера четвертого порядку та гістограмного методу аналізу даних показано, що внесення в систему слабкого вмороженого безладу у вигляді немагнітних домішок ($p = 0{,}9$) змінює фазовий перехід першого роду на фазовий перехід другого роду.

Ключові слова: модель Поттса, вморожений безлад, кумулянти Біндера.

Influence of frozen non-magnetic impurities on phase transitions in two-dimensional Potts model

A.B. Babaev and A.K. Murtazaev

An influence of frozen nonmagnetic canonically distributed impurities on phase transitions in two-dimensional Potts model with the number of spin states $q = 5$ has been studied by Wolf cluster Monte Carlo algorithm. The systems with linear size $L = 20–160$ and with spin concentrations $p = 1.0$, 0.9 are considered. Using the fourth-order Binder cumulant method and the histogram data analysis method it is shown that introducing a weak frozen disorder into the system in the form of non-magnetic impurities ($p = 0.9$) changes the first-order phase transition to the second-order phase transition.

Keywords: Potts model, frozen disorder, phase transitions, Binder cumulants.