Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 9, с. 618 – 622

Трикритическая точка трехмерной модели Поттса ($q = 4$) с вмороженным немагнитным беспорядком

А. К. Муртазаев[+*], *А. Б. Бабаев*[+×1)]

[+]*Институт физики им. Амирханова ДНЦ РАН, 367003 Махачкала, Россия*

[*]*Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия*

[×]*Дагестанский государственный педагогический университет, 367003 Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 26 марта 2014 г.
После переработки 4 апреля 2014 г.

Методом Монте-Карло исследуется влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на простой кубической решетке. Изучены фазовые переходы в этой модели при концентрации спинов $p = 1.0{-}0.70$. Определено значение трикритической точки на фазовой диаграмме.

DOI: 10.7868/S0370274X14090100

1. Введение. В последние годы исследование систем, в которых содержится вмороженный немагнитный беспорядок, вызывает значительный интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точки зрения [1–3]. Смещение акцентов современной физики конденсированного состояния в область микромасштабов вызвало необходимость понимания явлений, связанных с наличием примесей и других дефектов структуры. К настоящему моменту хорошо известно, что вмороженный беспорядок существенен, если соответствующий критический индекс теплоемкости α чистой системы положителен, т.е. теплоемкость в критической точке расходится. Это утверждение известно как критерий Харисса [4]. Критический индекс теплоемкости α для трехмерной модели Изинга в отсутствие структурного беспорядка положителен ($\alpha > 0$). Поэтому критерий Харриса применим к этой модели. Исследованию критических свойств неупорядоченной модели Изинга с вмороженным беспорядком в последнее время было посвящено значительное число работ (см. обзоры [1–3] и [5–8]). Достигнут существенный прогресс в понимании особенностей влияния на эту модель немагнитных примесей.

В то же время имеются основания предполагать, что немагнитные примеси оказывают совершенно иное влияние, вплоть до изменения рода фазового перехода (ФП) в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [9–11]. Экспериментально такое поведение наблюдалось при ФП от однородной фазы к нематической фазе в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [12]. Кроме того, в ряде работ было показано, что для низкоразмерных систем ($d \leq 2$), описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$ (где q_c – критическое число состояний спина, d – размерность), наличия сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [10, 11, 13]. Для систем с размерностью $d \geq 3$ для которых в чистом состоянии наблюдается ФП первого рода, наличие вмороженного беспорядка может привести к трикритической точке p_c, отделяющей на фазовой диаграмме область ФП первого рода от области ФП второго рода. Определение трикритической точки p_c для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ на простой кубической решетке с немагнитными примесями и является главной задачей данной работы.

Результаты, полученные разными авторами для рассматриваемой неупорядоченной модели при оценке значения трикритической точки, не столь однозначны. В случае вмороженного беспорядка, реализованного в виде случайных связей, по одним данным трикритическая точка, отделяющая на фазовой диаграмме область ФП первого рода от области ФП второго рода, наблюдается при концентрации спинов $p_c = 0.74(2)$ [14], по другим – при $p_c = 0.76(8)$ [15].

В отличие от [14, 15] в данной работе вмороженный беспорядок вносился в спиновую систему в виде немагнитных примесей каноническим способом. Отметим, что модель с каноническим распределением беспорядка и модель с беспорядком типа "случайная связь" должны характеризоваться одним и тем же

1)e-mail: b_albert78@mail.ru

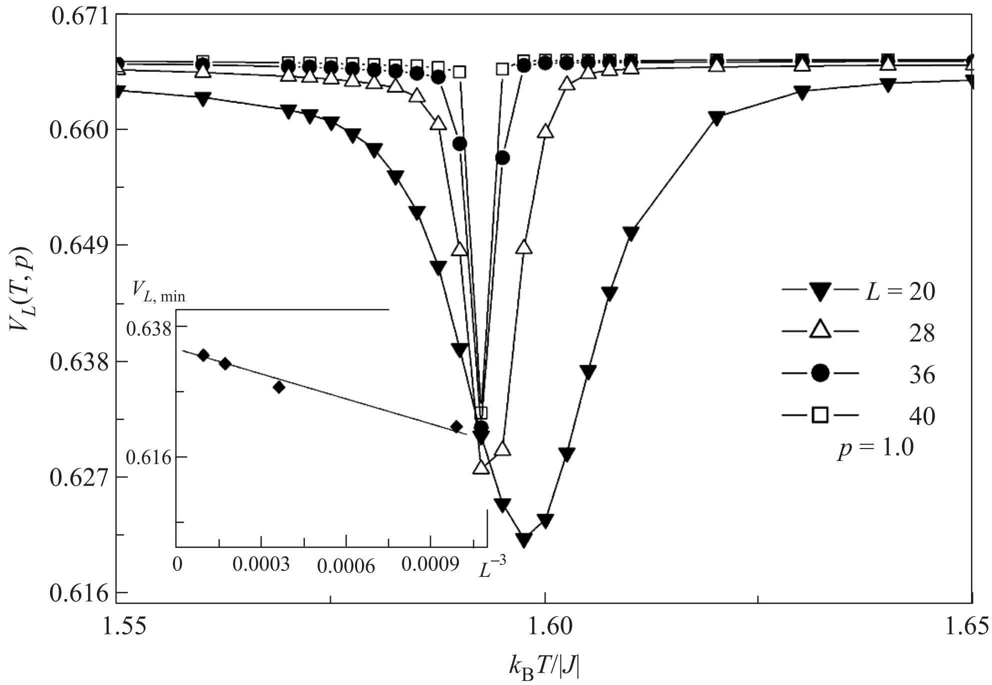

Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 1.00$

классом универсальности [2]. Что касается трехмерной модели Поттса с $q = 4$, в которой беспорядок реализован в виде вмороженных немагнитных примесей каноническим способом, то к настоящему времени исследования тепловых, магнитных и, особенно, критических свойств этой модели с соблюдением единого методического подхода не выполнены. Не определено с хорошей точностью и значение трикритической точки.

Интерес к рассматриваемой модели обусловлен тем, что она описывает многие физические свойства реальных объектов и явлений в физике конденсированных сред (многокомпонентные сплавы и жидкие кристаллы в пористой аэрогелевой среде [12], поведение гранецентрированных антиферромагнитных материалов: NdSb, NdAs, CeAs и т.д. [16]).

2. Модель и метод исследования. Разбавленная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ описывается микроскопическим гамильтонианом следующего вида [17]:

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

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов, $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i = 0$, если в узле i находится немагнитная примесь. Численные расчеты, проведенные в работах [18, 19], показали, что в отсутствие беспорядка ($p = 1.0$) эта модель демонстрирует поведение, характерное для ФП первого рода, в соответствии с предсказаниями теории среднего поля [20]. При спиновой же концентрации $p = 0.65$ происходит ФП второго рода. Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [21] метода Монте-Карло (МК).

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20{-}120$. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние для всех систем с линейными размерами L вычислялось время релаксации τ_0. Затем проводилось усреднение по участку марковской цепи длиной $\tau = 180\tau_0$. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией спинов $0.90 \geq p \geq 0.70$ осуществлялось усреднение по 1000–25000 неупорядоченным конфигурациям с различной реализацией примесей.

3. Результаты численного эксперимента. Для анализа характера ФП и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в подобных исследованиях наиболее эффективным зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [22]:

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

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

где E и m – энергия и намагниченность системы с линейными размерами L.

Методика определения критической температуры описана нами в работах [18, 23]. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род ФП в системе. Фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [24]. Усредненная величина $V_L(T,p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

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

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 $L \to \infty$. Указанные особенности продемонстрированы на рис. 1 и 2 для

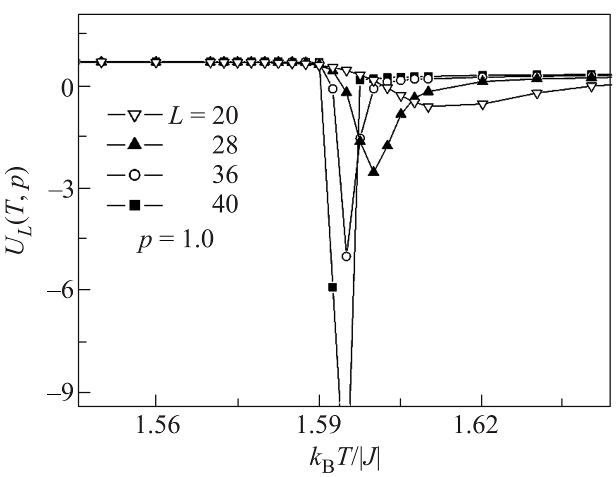

Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 1.00$

модели Поттса с $q = 4$ при отсутствии структурного беспорядка ($p = 1.0$). Аналогичное поведение наблюдалось и для промежуточных значений концентраций спинов, $0.70 < p < 1.00$.

В случае ФП второго рода температурные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ имеют четко выраженную точку пересечения. Это продемонстрировано на рис. 3 для модели Поттса с $q = 4$ при $p = 0.70$.

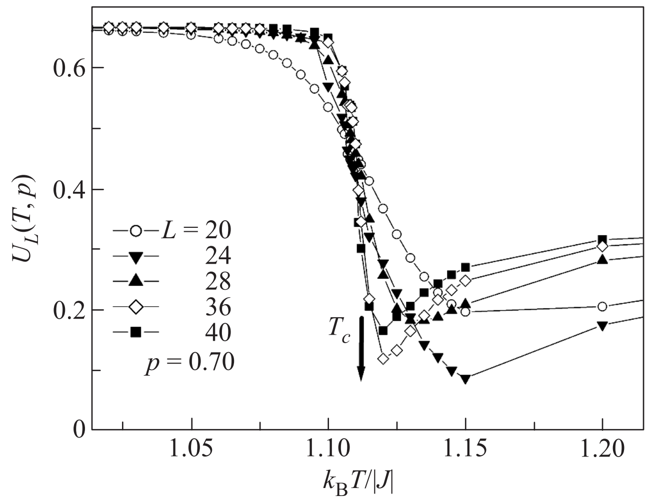

Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 0.70$

Характерные зависимости энергетических кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 0.70$ приведены на рис. 4. Заметим, что из вставки к рис. 4 наглядно видно, что при $L \to \infty$ нетривиальная величина $V^* \to 2/3$. Аппроксимация зависимостей $V_{L,\min}$ от L была проведена на основе выражения (4). Такое поведение также характерно для ФП второго рода [24]. Таким образом, очевидно, что немагнитные примеси порядка $c = 0.30$, $c = 1 - p_c$, $p_c = 0.70$ приводят к смене рода ФП с первого на второй. При концентрации примесей $c < 0.30$ мы всегда получали признаки, характерные для ФП первого рода.

Независимо от кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [25, 26]. Он позволяет надежно определить не только область концентраций спинов p, при которых возможна смена ФП первого рода на ФП второго рода, но и минимальные размеры систем, в которых можно правильно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [19]. Гистограммный анализ, проведенный для $3d$-модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 0.70$, также свидетельствует о ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На нем представлена гистограмма распределения энергии вблизи критической точки T_c для систем с линейными размерами $L = 60$. Видно, что для этой модели наблюдается распределение энергии с одним максимумом, характерное для ФП второго рода. В то же время при концентрации спинов $p = 0.74$ наблюдается бимодальное распределе-

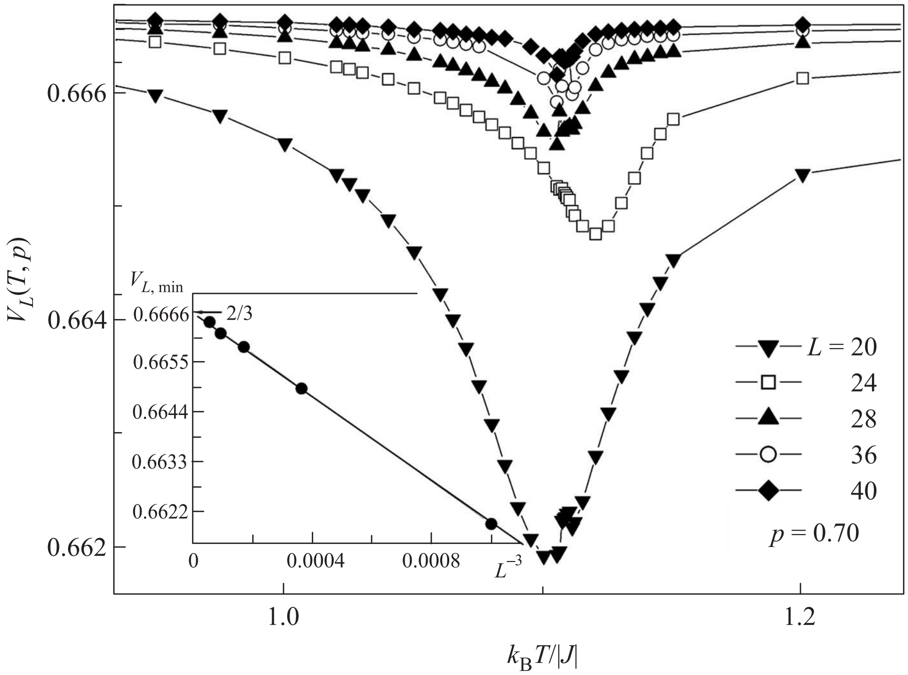

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 0.70$

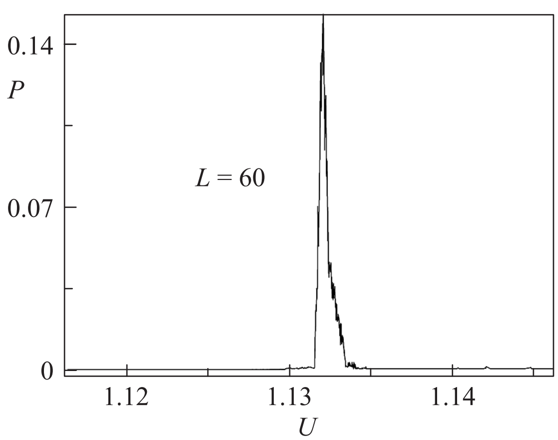

Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 0.70$

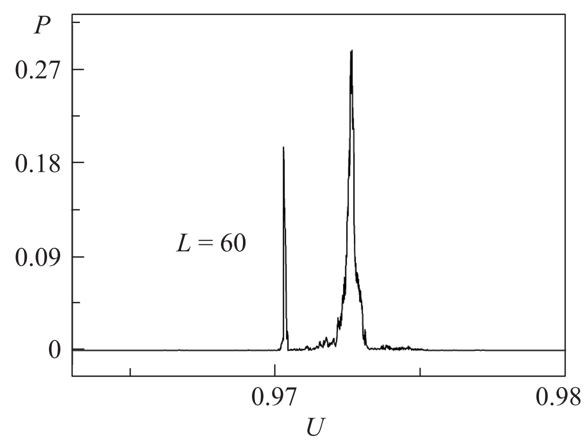

Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрации спинов $p = 0.74$

ние энергии (рис. 6), которое отличается от значения представленного в работе [14]. Такое распределение наблюдалось для всех значений концентрации примесей $c < 0.30$. Бимодальность распределения энергии является важным критерием, свидетельствующим в пользу ФП первого рода. Следует отметить, что в распределении энергии для систем с линейными размерами $L < 60$ проявляются лишь слабо выраженные признаки бимодальности. Поэтому при определении рода ФП нами рассматривались только системы с $L \geq 60$.

4. Заключение. Итак, наши данные, полученные двумя способами (методом кумулянтов Биндера и с помощью гистограммного анализа), свидетельствуют о том, что в модели Поттса с $q = 4$ ФП первого рода меняется на ФП второго рода при внесении немагнитных примесей, концентрация c которых (где $c = 1 - p_c$) примерно равна порогу спиновой перколяции p_c для данного типа решетки. Такую смену рода

ФП мы объясняем тем, что для кубической решетки при $c \sim 0.30$ примеси образуют связывающий кластер, который при $T \leq T_c$ сосуществует со спиновым связывающим кластером вплоть до порога спиновой перколяции $p_c \sim 0.31$.

Работа поддержана грантами РФФИ #13-02-00220 и 12-02-96504.

1. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. А. К. Муртазаев, УФН **176**, 1119 (2006).
4. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
5. А. Н. Вакилов, В. В. Прудников, Письма в ЖЭТФ **55**, 709 (1992).
6. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
7. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, J. Mag. Mag. Mater. **321**, 2630 (2009).
8. А. И. Морозов, А. С. Сигов, Письма в ЖЭТФ **90**, 818 (2009).
9. Y. Imry and M. Wortis, Phys. Rev. B **19**, 3580 (1979).
10. M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
11. J. Cardy and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997).
12. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer, J. W. Doane, and D. Finotello, Phys. Rev. Lett. **71**, 2595 (1993).
13. K. Hui and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).
14. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, Eur. Phys. J. B **49**, 195 (2006).
15. C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, andP. Berche, Nucl. Phys. B **719**(3), 275 (2005).
16. E. Domany, Y. Shnidman, and D. Mukamel, J. Phys. C **15**, L495 (1982).
17. А. Н. Ермилов, Физика элементарных частиц и атомного ядра **20**, 1379 (1989).
18. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФНТ **37**, 167 (2011).
19. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **143**, 116 (2013).
20. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
21. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
22. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
23. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **142**, 1189 (2012).
24. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
25. E. P. Munger and M. A. Novotny, Phys. Rev. B **43**, 5773 (1991).
26. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).