Письма в ЖЭТФ, том 105, вып. 6, с. 363 – 366

Трикритическая точка трехмерной неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на простой кубической решетке

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

[+] *ФГБУН Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия*

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

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

Поступила в редакцию 13 февраля 2017 г.

После переработки 21 февраля 2017 г.

Рассмотрены слабо разбавленные магнитные системы, описываемые неупорядоченной трехмерной моделью Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на простой кубической решетке. С использованием гистограммного метода Монте-Карло для этой модели определено значение трикритической точки на фазовой диаграмме.

DOI: 10.7868/S0370274X1706008X

1. Введение. В последнее время исследованиям фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в системах, содержащих беспорядок в виде замороженных немагнитных примесей и других различных дефектов структуры, уделяется большое внимание. Это связано с тем, что современная микроэлектроника (и спинтроника) достигла такого уровня миниатюризации, при котором влиянием этих дефектов на поведение приборов и элементов микроэлектроники невозможно пренебречь. Кроме этого, влияние замороженного беспорядка на различные характеристики магнитных систем представляет и фундаментальный научный интерес [1].

Работа Харриса [2], посвященная влиянию замороженного беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей, на критические свойства магнетиков, вызвала значительный интерес к исследованию критического поведения структурно-неупорядоченных систем. Согласно этому критерию дефекты, реализованные в виде замороженных немагнитных примесей, существенны в том случае, если в однородном варианте теплоемкость расходится в критической точке, т.е. критический индекс теплоемкости положителен, $\alpha > 0$. К настоящему моменту в понимании особенностей влияния замороженного беспорядка, реализованного как в виде немагнитных примесей [1], случайных связей [3], так и в виде случайных магнитных полей [1, 4], на критическое поведение магнитных систем достигнут существенный прогресс.

С другой стороны в ряде работ [5–7] было продемонстрировано, что замороженный беспорядок может изменить род ФП в системах, в которых в неразбавленном состоянии наблюдается ФП первого рода. В эксперименте такое поведение наблюдалось при ФП в жидких кристаллах в пористой матрице [8].

В случае низкоразмерных систем ($d \leq 2$), описываемых моделью Поттса, с числом состояний спина $q > 4$ наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно для того, чтобы ФП первого рода сменился на ФП второго рода [6, 9]. Для однородных систем с размерностью $d \geq 3$, у которых наблюдается ФП первого рода, ситуация может оказаться существенно другой. В этом случае, внесение замороженного беспорядка может привести к трикритической точке p^*, ниже которой будет наблюдаться ФП второго рода, а выше – ФП первого рода. Определение трикритической точки для систем, описываемых трехмерной моделью Поттса, с числом состояний спина $q = 3$ является основной целью данной работы.

Определение точной величины трикритической точки имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении влияния замороженного беспорядка на разные термодинамические характеристики. Имеющиеся в литературе результаты по определению трикритической точки [10–12] для систем, описываемых моделью Поттса с $q = 3$, не столь однозначны. По одним данным трикритическая точка наблюдается при $p^* = 0.90(1)$ [10], по другим данным – при $p^* = 0.76(8)$ [11, 12].

1)e-mail: b_albert78@mail.ru

В отличии от работ [10–12] нами замороженный беспорядок реализован в виде немагнитных примесей каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов). Отметим, что беспорядок, реализованный в виде немагнитных примесей, и беспорядок типа "случайная связь" должны характеризоваться одним классом универсальности [1, 3]. Нами ранее в работе [13] для беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей, а в работе [14] – для беспорядка типа "случайная связь" при исследовании модели Поттса с $q = 4$ с погрешностью 0.01 были определены трикритические точки. В случае $q = 3$ значения координат трикритической точки с хорошей точностью не определены.

Интерес к неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ обусловлен тем, что она описывает физические свойства многих многокомпонентных сплавов и жидких кристаллов в аэрогелиевой среде. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких как $SrTiO_3$, описываются моделью Поттса с $q = 3$.

2. Модель и метод исследования. Гамильтониан трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на простой кубической решетке может быть представлен в следующем виде [15]:

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

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов, $\rho_i = 1$ (если узел i занят магнитным атомом) и $\rho_i = 0$ (если в i узле немагнитная примесь).

В работах [16, 17] было показано, что эта модель в отсутствии структурного беспорядка демонстрирует слабо выраженный ФП первого рода, как и ожидалось из предсказаний теории среднего поля [18]. Для определения трикритической точки нами на основе гистограммного анализа данных в очень узком интервале разбавления $0.95 \le p \le 1.00$ изучены термодинамические свойства системы в зависимости от линейных размеров системы L.

Определение трикритической точки для неупорядоченных систем на основе традиционных теоретических и экспериментальных методов – задача очень сложная. Дело в том, что получить качественные образцы с четко определенными и распределенными концентрациями примесей практически невозможно. Кроме того, большинство традиционных теоретических методов исследования в случае применения к неупорядоченным системам перестают работать [1]. Поэтому строго и последовательно такие системы на основе микроскопических гамильтонианов могут быть исследованы методами Монте-Карло (МК), позволяющими изучать термодинамические параметры спиновых систем с любой сложностью при любых контролируемых значениях концентраций немагнитных примесей.

В данном исследовании использован высокоэффективный кластерный алгоритм Вольфа [19] метода Монте-Карло. Более подробно этот алгоритм нами описан в работах [20, 21].

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный анализ данных метода МК [22, 23]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m определяется выражением [22]:

$$\overline{P(U, m)} = \frac{1}{Z(K)}W(U, m)\exp[KU], \qquad (2)$$

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

3. Результаты моделирования. Расчеты проводили для систем с периодическими граничными условиями. При этом рассматривали концентрации спинов $p = 1.00$, 0.97, 0.95. Исследовали системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20\ldots90$. Для вывода системы в равновесное состояние вычисляли соответствующее время релаксации τ_0 для каждой системы с линейными размерами L. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Кроме того, выполняли усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовали 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией $p = 0.97$, 0.95 осуществляли конфигурационное усреднение по 1000–3000 различным конфигурациям. Методика усреднения по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией вмороженного беспорядка нами подробно рассмотрена в работе [16].

Для определения критических температур нами использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [24]. Методика определения критических температур методом кумулянтов Биндера нами подробно приведена в работах [21, 25–27]. На рис. 1 представлена фазовая диаграмма зависимости температуры фазового перехода от концентрации спинов p. Значения численных значений критических температур при $p = 1.0$, 0.95, 0.90, 0.70, 0.65 на этой диаграмме взяты из работы [17], а при $p = 0.97$ и

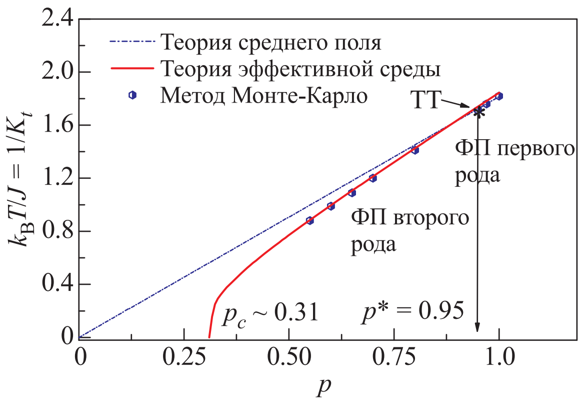

Рис. 1. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма для трехмерной неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$, ТТ – трикритическая точка

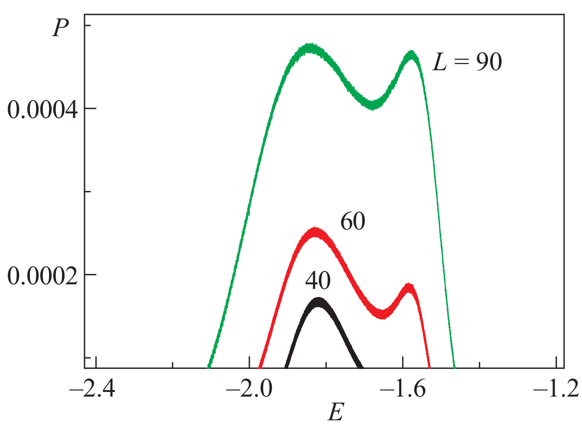

Рис. 2. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 3$ при концентрации спинов $p = 0.97$ и различных линейных размерах системы L

$p = 0.60$ получены в данной работе. При $p^* = 0.95$ и ниже этой величины в системе происходит ФП второго рода, а выше – ФП первого рода. На том же рисунке приведены результаты, предсказываемые теорией среднего поля для температуры ФП $T_t(p)$ в зависимости от концентрации спинов p, где $T_t(p) = p^* T_t(1)$ [11] и теорией эффективной среды [28]:

$$K_t(p) = \log \left[\frac{(1-p_c)e^{K_t(1)} - (1-p)}{(p-p_c)} \right], \tag{3}$$

где p_c – порог спиновой перколяции ($p_c = 0.31$), $K_t = J/k_BT$.

Как следует из рис. 1, при концентрации спинов $p \geq 0.8$ рассчитанная зависимость $T_c(p)$ находится в хорошем соответствии как с данными теории эффективной среды, так и с данными теории среднего поля. При $p < 0.8$ наблюдается заметное отклонение данных, предсказываемых теорией среднего поля от данных теории эффективной среды и данных МК.

Гистограммный анализ данных метода Монте-Карло [22, 23] позволяет надежно определять область концентраций спинов p, при которых возможна смена ФП первого рода на ФП второго рода. Также этот метод позволяет оценить минимальные размеры систем, в которых возможно правильно определять род ФП. Гистограммный анализ данных, проведенный нами для трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ при концентрации спинов $p = 0.97$, свидетельствует о ФП первого рода как и для чистой неразбавленной системы при $p = 1.0$, что продемонстрировано на рис. 2. На нем представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки

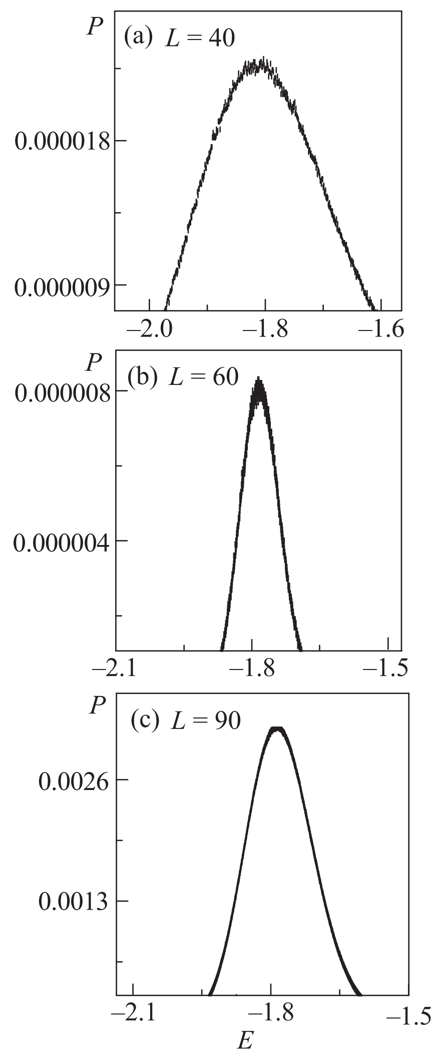

Рис. 3. Гистограммы распределений энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 3$ при концентрации спинов $p = 0.95$ и различных линейных размерах системы L

ФП для систем с разными линейными размерами L. Как видно из рис. 2, бимодальность в распределении энергии наблюдается для систем с $L = 60$ и $L = 90$, и отсутствует для системы с $L = 40$, что говорит о целесообразности гистограммного анализа данных для систем, линейные размеры которых не меньше $L = 60$. Бимодальность в распределении энергии является достаточным условием для ФП первого рода. В то же время при концентрации спинов $p = 0.95$ для всех рассмотренных нами систем с линейными размерами $L = 40$, $L = 60$ и $L = 90$ вблизи точки ФП наблюдается распределение энергии с одним максимумом (рис. 3), характерное для ФП второго рода. Такое же поведение наблюдалось и при всех других значениях концентраций спинов $p \leq 0.95$. Для модели Поттса с $q = 4$ бимодальность распределения энергии наблюдается при $p^* \sim 0.70(1)$ [13] в случае беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей, и при $p^* \sim 0.74(2)$ [14] для беспорядка реализованного в виде случайных связей.

4. Заключение. Проведенный гистограммный анализ данных метода Монте-Карло с соблюдением единой методики для спиновых систем, описываемых трехмерной слабо неупорядоченной моделью Поттса с $q = 3$, показывает, что для рассмотренной модели Поттса смена ФП первого рода на ФП второго рода происходит при $p^* = 0.95(1)$. Незначительное увеличение концентрации спинов от этой величины приводит к ФП первого рода. На основе чего мы делаем вывод о том, что значение p^* является трикритической точкой для данной модели.

Работа поддержана грантом РФФИ # 16-02-00214.

---

1. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995) [Phys. Usp. **38**, 457 (1995)].
2. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
3. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
4. А. И. Морозов, А. С. Сигов, Письма в ЖЭТФ **90**, 818 (2009).
5. Y. Imry and M. Wortis, Phys. Rev. B **19**, 3580 (1979).
6. M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
7. J. Cardy and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997).
8. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer, J. W. Doane, and D. Finotello, Phys. Rev. Lett. **71**, 2595 (1993).
9. K. Hui and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).
10. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, Phys. Rev. B **61**, 3215 (2000).
11. C. Chatelain, B. Berche, W. Janke, and P. E. Berche, Phys. Rev. E **64**, 036120 (2001).
12. C. J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper, Phys. Rev. E **72**, 036120 (2001).
13. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
14. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, Eur. Phys. J. B **49**, 195 (2006).
15. А. Н. Ермилов, Физика элементарных частиц и атомного ядра **20**, 1379 (1989).
16. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, J. Magnetism and Magnetic Mater. **324**, 3870 (2012).
17. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Aznaurova, JETP **109**, 442 (2009).
18. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
19. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
20. A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, and A. B. Babaev, JETP **99**, 1201 (2004).
21. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, JETP **115**, 1042 (2012).
22. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).
23. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
24. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter. **8**, 5209 (1996).
25. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФНТ **41**, 784 (2015).
26. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Aznaurova, Solid State Phenomena **152–153**, 571 (2009).
27. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Aznaurova, Solid State Phenomena **168–169**, 357 (2011).
28. L. Turban, Phys. Lett. A **75**, 307 (1980).