

# Слабая универсальность в неупорядоченной двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке

А. Б. Бабаев<sup>+\*1)</sup>, А. К. Муртазаев<sup>+×</sup>

<sup>+</sup>Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

<sup>\*</sup>Дагестанский государственный педагогический университет, 367003 Махачкала, Россия

<sup>×</sup>Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 26 марта 2018 г.

После переработки 5 апреля 2018 г.

Методом Монте-Карло исследуется критическое поведение неупорядоченной двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке, в которой беспорядок реализован в виде немагнитных примесей. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы восприимчивости  $\gamma$ , намагнитченности  $\beta$ , теплоемкости  $\alpha$  и индекса радиуса корреляции  $\nu$  при концентрации спинов  $p = 0.90; 0.80; 0.70; 0.65$ . Обнаружено, что с ростом беспорядка критические индексы увеличиваются, в то время как отношения  $\gamma/\nu$  и  $\beta/\nu$  не изменяются, не нарушая выполнимость скейлингового равенства  $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d$ . Такое поведение критических индексов мы связываем со слабой универсальностью критического поведения, характерной для неупорядоченных систем. Все результаты получены на основе применения независимых алгоритмов метода Монте-Карло: Метрополиса и Вольфа.

DOI: 10.7868/S0370274X18100077

**Введение.** Фазовым переходам (ФП) и критическим явлениям (КЯ) в системах, содержащих беспорядок в виде замороженных немагнитных примесей, случайных связей и случайных полей, посвящено огромное количество работ (см. [1–3]). Критерий Харриса [4] ответил на принципиальный вопрос о смене критического поведения при введении небольшого количества неподвижных (“замороженных”) примесей. Согласно этому критерию, если  $d\nu > 2$ , где  $d$  – размерность систем, а  $\nu$  – критический индекс (КИ) радиуса корреляции, то примеси не изменяют критические индексы. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что  $d\nu = 2$ . Детальное рассмотрение этого случая [5] 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 то же время 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 [6, 7]. Такая смена ФП эксперименталь-

но наблюдается в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [8]. Для низкоразмерных систем ( $d \leq 2$ ), описываемых моделью Поттса с  $q > q_c(d)$  ( $q_c$  – критическое число состояний спина,  $d$  – размерность) наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [7, 9]. Для однородных систем с размерностью  $d \geq 3$ , описываемых моделями Поттса, для 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 [10–12].

Однако остался невыясненным вопрос: являются ли критические индексы неупорядоченных низкоразмерных систем, для которых в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода, универсальными, т.е. независимыми от концентрации примесей вплоть до порога перколяции, или непрерывно изменяются с ростом концентрации примесей. Выяснение этого вопроса является главной задачей этой работы.

Не столь однозначны результаты, полученные разными авторами на основании экспериментальных и теоретических исследований в случае конечных концентраций немагнитных примесей на различных

<sup>1)</sup>e-mail: b\_albert78@mail.ru

решетках. В работах [13, 14] подтверждается результат о независимости КИ намагниченности и восприимчивости двумерной модели Изинга от степени беспорядка. В то время в работе [15] КИ двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$  зависят от концентрации случайных связей. Более того, авторы работы [16] на примере неупорядоченной двумерной модели Изинга утверждают, что в случае внесения в спиновую систему замороженного беспорядка может наблюдаться универсальность критических амплитуд вплоть до порога перколяции.

В отличие от работ [13–16], в данной работе исследуется критическое поведение неупорядоченной двумерной антиферромагнитной (АФ) модели Поттса с  $q = 3$  на треугольной решетке, в которой беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей каноническим способом. Интерес к этой модели обусловлен тем, что в результате многочисленных исследований на разнообразных решетках обнаружилась замечательная особенность. Треугольная решетка оказалась единственной, в которой наблюдается фазовый переход при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями. Кроме того, рассматриваемая модель описывает многие физические свойства многокомпонентных сплавов, адсорбированных пленок и жидких кристаллов в пористой аэрогелевой среде [17].

**2. Модель и метод исследования.** В классической модели Изинга имеется  $N$  дискретных объектов, называемых узлами решетки, каждый из которых может находиться в одном из двух состояний (рис. 1а). Обобщением модели Изинга на число воз-

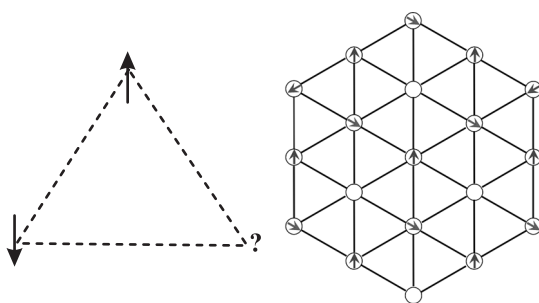


Рис. 1. (а) – Фрустрации в модели Изинга. (б) – Примесная антиферромагнитная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке

можных направлений спина больше двух ( $q \geq 2$ ) являются модели Поттса. Поэтому при построении двумерной АФ разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке необходимо иметь в виду следующие особенности:

– в узлах треугольной решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут находиться в одном из  $q \geq 2$  состояний и немагнитные примеси (вакансии, рис. 1б). Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (*quenched disorder*);

– энергия парного взаимодействия принимает одно значение, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (безразлично в каких именно), и другое значение, если они находятся в разных состояниях (опять же, все равно в каких именно). Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если в одном из взаимодействующих узлов расположена немагнитная примесь.

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [18]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \cos \theta_{i,j}, \quad (1)$$

где  $J$  – параметр обменного антиферромагнитного взаимодействия ближайших спинов ( $J < 0$ );  $\rho_i = 1$ , если узел  $i$  занят магнитным атомом, и  $\rho_i = 0$ , если в  $i$  узле немагнитная примесь;  $\theta_{i,j}$  – угол между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$ , причем  $\theta_{i,j} = 2\pi n/q$  и может принимать три значения  $0^\circ, 120^\circ, 240^\circ$  при  $n = 0, 1, 2$ , соответственно; спин  $S_i$  может находиться в одном из  $q = 3$  состояний  $S_i = 1, 2, 3$ .

Известно, что в этой модели в отсутствие структурного беспорядка наблюдается слабо выраженный ФП первого рода [19], как и ожидалось из предсказаний теории среднего поля [18]. Внесение незначительного беспорядка в эту модель может индуцировать ФП второго рода, что строго было показано в работе [7]. Этот результат был подтвержден в многочисленных исследованиях [20–23], а также при экспериментальном изучении перехода в сверхтекучее состояние  $^4\text{He}$  в пористой среде аэрогеля [8, 24]. Кроме того, для однородных систем с размерностью  $d \geq 3$ , для которых наблюдается ФП первого рода, внесение беспорядка приводит к трикритической точке  $p^*$  [10–12, 25, 26].

Изучение критического поведения низкоразмерных неупорядоченных систем на основе традиционных теоретических и экспериментальных методов является очень сложной задачей. 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, 2]. Поэтому строго и последо-

вательно такие низкоразмерные системы, на основе микроскопических гамильтонианов, могут быть исследованы методами Монте-Карло (МК). Методы МК позволяют исследовать критические параметры спиновых систем с любой сложностью при любых контролируемых значениях концентраций немагнитных примесей. В данной работе использовался кластерный алгоритм Вольфа [27] в сочетании с классическим алгоритмом Метрополиса [28] метода МК. Более подробно рассмотренные алгоритмы описаны в работах [29, 30]. Полученные результаты проверялись с помощью этих независимых алгоритмов, и была достигнута хорошая сходимость. Сочетание этих алгоритмов дает существенную экономию машинного времени.

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями. Исследовались системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 20 - 120$ . Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все ближайшие соседи рассматриваемого спина находились в разных состояниях. При этом фрустрация, наблюдаемая на треугольной решетке в случае АФ модели Изинга ( $q = 2$ ) (см. рис. 1а), будет отсутствовать для модели Поттса с  $q = 3$  (см. рис. 1б). Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0$  для системы с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 200\tau_0$ . Для самой большой системы  $L = 120$ ,  $\tau_0 = 2 \times 10^3$  МК шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным неупорядоченным спиновым конфигурациям. Для спиновых систем с концентрацией спинов  $p = 0.90 - 0.65$  осуществлялось усреднение по 1000–25000 конфигураций с различной реализацией беспорядка. Полученные данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров.

**3. Результаты моделирования.** Влияние вмороженного немагнитного беспорядка на фазовые переходы в двумерной АФ модели Поттса на треугольной решетке нами исследовались в работах [22, 23, 31, 32]. Было продемонстрировано, что при концентрации примесей с  $c \geq 0.1$ ,  $c = 1 - p$ , происходит смена ФП первого рода на ФП второго рода. Кроме того, на основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка [33] и гистограммным анализом данных [34] были определены критические температуры в слабо разбавленном режиме (при концентрации спинов  $p = 0.90; 0.80$ ) и в сильно разбавленном режиме ( $p = 0.70; 0.65$ ). Определенные этим методом критические температуры разбавленных систем  $T_c(p)$  в

единицах  $|J|/k_B$  равны:  $T_c(0.90) = 0.79(1)$ ,  $T_c(0.80) = 0.65(2)$ ,  $T_c(0.70) = 0.42(3)$ ,  $T_c(0.65) = 0.35(4)$ .

В настоящей работе, используя значения критических температур, полученных в работах [22, 23, 31, 32], в достаточно широком интервале исследованных концентраций примесей  $0.1 \leq c \leq 0.35$  на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [35], рассчитывались статические критические индексы параметра порядка  $\beta$ , восприимчивости  $\chi$ , теплоемкости  $\alpha$  и КИ радиуса корреляции  $\nu$ . Из соотношений этой теории следует, что для достаточно большой системы с ПГУ при температуре  $T = T_c$  параметр порядка  $m_{AF}$ , восприимчивость  $\chi$  и параметр  $V_n$  для определения критического индекса  $\nu$  удовлетворяют следующим аналитическим выражениям [36]:

$$m_{AF} \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (3)$$

$$V_n \sim L^{1/\nu}. \quad (4)$$

В качестве  $V_n$  могут выступать:

$$V_i = \frac{\langle m_{AF}^i E \rangle}{\langle m_{AF}^i \rangle} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2), \quad (5)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m_{AF}^2 \rangle^2} \times \left[ \langle m_{AF}^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m_{AF}^4 \rangle \langle m_{AF}^4 E \rangle}{\langle m_{AF}^2 \rangle} + \langle m_{AF}^4 E \rangle \right], \quad (6)$$

где  $\beta = 1/T$ ,  $T$  – температура.

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$ , как правило, используются другие выражения, например [37]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (7)$$

где  $A$  – некоторый коэффициент.

Для расчета КИ  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\alpha$  и  $\nu$  строились зависимости  $m_{AF}$ ,  $\chi$ ,  $C$  и  $V_n$  от  $L$ . На рис. 2а–д в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметра порядка  $m_{AF}$ , восприимчивости  $\chi$ , теплоемкости  $C$  и параметра  $V_n$  для определения критического индекса радиуса корреляции, от линейных размеров решетки  $L$  для двумерной АФ сильно разбавленной модели Поттса на треугольной решетке при  $T = T_c$  и  $p = 0.65$ . Погрешность указана на рис. 3. Обратим внимание на то, что данные, полученные для всех рассмотренных термодинамических параметров, незначительно отклоняются от прямой при малых значениях  $L$ . Очевидно, что использованное нами для усреднения количество различных начальных конфигураций и размеры  $L \geq 20$

**Таблица 1.** Критические индексы двумерной неупорядоченной трехвершинной АФ модели Поттса на треугольной решетке, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга

$p$	$\beta/\nu$	$\gamma/\nu$	$\alpha/\nu$	$1/\nu$	$\nu$	$\beta$	$\gamma$	$\alpha$	$2\beta/\nu + \gamma/\nu = 2$
0.90	0.133	1.733	0.351	1.136	0.880	0.117	1.430	0.310	1.999
0.80	0.132	1.735	0.402	1.203	0.831	0.111	1.451	0.333	1.999
0.70	0.130	1.732	0.381	1.189	0.841	0.109	1.462	0.319	1.992
0.65	0.137	1.730	0.222	1.096	0.912	0.124	1.571	0.202	2.004

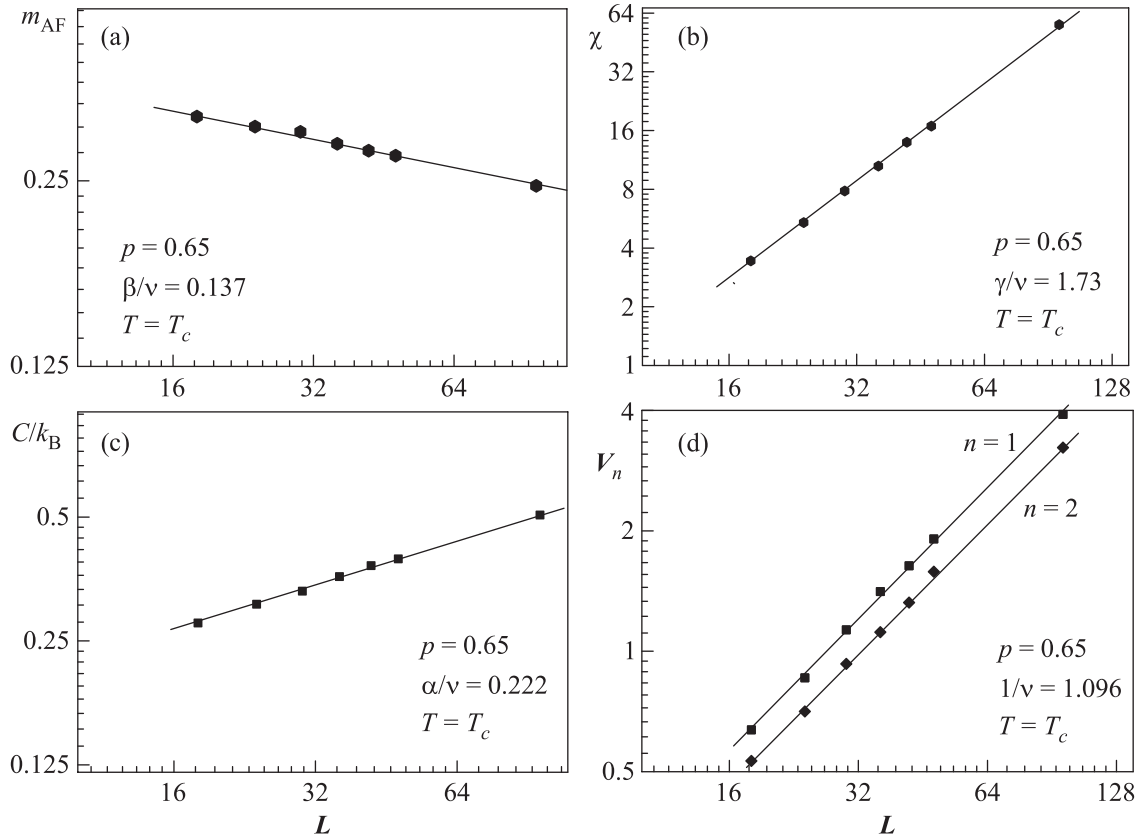


Рис. 2. Зависимость параметра порядка  $m_{AF}$  (а), восприимчивости  $\chi$  (б), теплоемкости  $C$  (с) и параметра  $V_n$  (д) для двумерной сильно разбавленной трехвершинной АФ модели Поттса от линейных размеров системы  $L$  при  $p = 0.65$  и  $T = T_c$

изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима. Очень важным моментом является и то, что индекс  $\nu$  вычислялся непосредственно из результатов численного эксперимента в рамках данного исследования, тогда как во многих других работах этот индекс обычно определяется из различных скейлинговых соотношений. Отношения КИ  $\alpha/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $1/\nu$  и значения самих индексов для различных значений  $p$ , полученные при соответствующем  $\nu(p)$ , представлены в табл. 1. Соответствующие зависимости эффективных КИ  $\beta_{eff}$  (а),  $\gamma_{eff}$  (б), и отношений КИ  $\beta/\nu$  (с) и  $\gamma/\nu$  (д) от концентрации спинов  $p$  приведены на рис. 3. Как видно из этого рисунка, эффективные критические индексы КИ  $\gamma_{eff}$

(а) и  $\beta_{eff}$  (б) изменяются весьма существенно при изменении концентрации магнитных узлов от  $p = 0.90$  до 0.65, в то время как отношения самих КИ  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$  остаются неизменными в пределах статистической ошибки. Вывод о независимости отношений КИ  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$  от степени разбавления, не нарушая выполнимость скейлингового равенства  $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d$ , является главным результатом этой статьи. Как известно из литературы, такая закономерность в поведении КИ связана со “слабой универсальностью”, характерная для разбавленных систем [38].

**Закключение.** Таким образом, в настоящей работе, с соблюдением единой методики, исследовано критическое поведение двумерной неупорядоченной

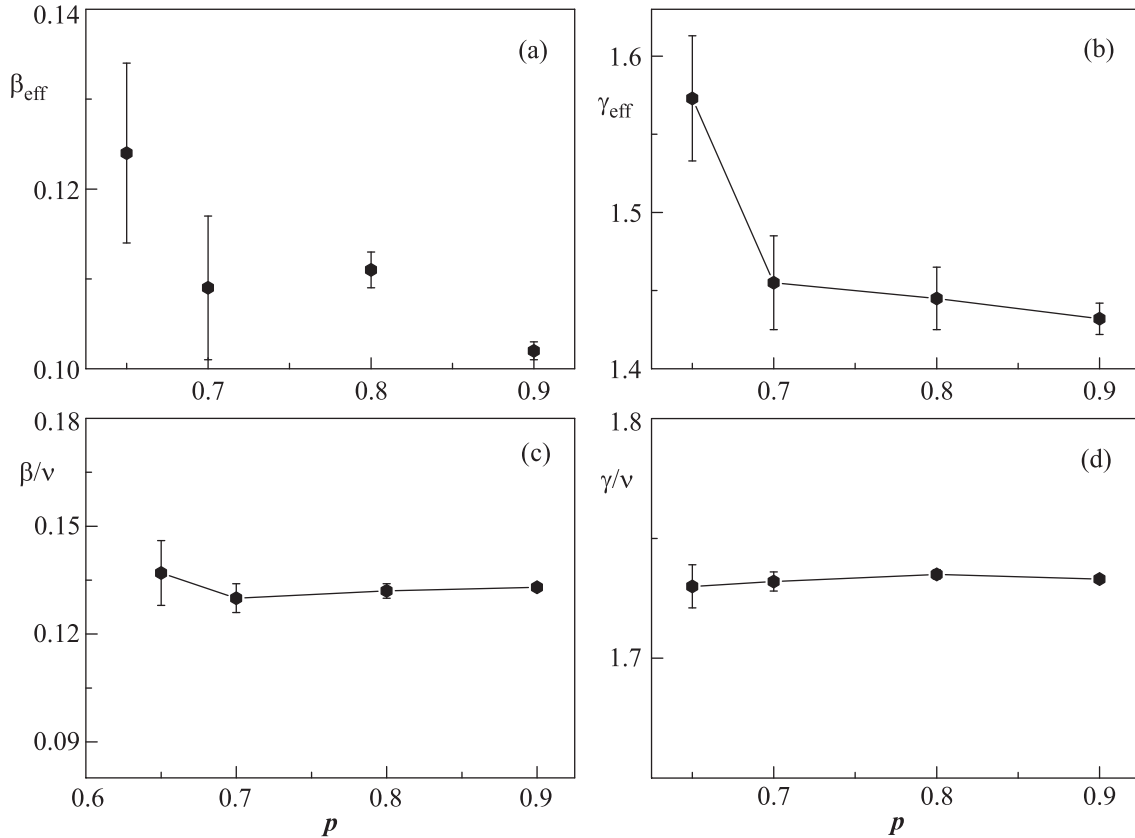


Рис. 3. Зависимость эффективных критических индексов параметра порядка  $\beta_{\text{eff}}$  (a), восприимчивости  $\gamma_{\text{eff}}$  (b) и отношений  $\beta/\nu$  (c) и  $\gamma/\nu$  (d) от концентрации спинов  $p$

антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке, в которой беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей. Численно установлена независимость отношения критических индексов  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$  при изменении концентрации немагнитных примесей  $s$  от 0.10 до 0.35, что является следствием слабой универсальности в рассматриваемой неупорядоченной модели.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований # 16-02-00214.

1. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995) [Phys. Usp. **38**, 457 (1995)].
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. А. К. Муртазаев, УФН **176**, 1119 (2006).
4. А. В. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
5. Vik. Dotsenko and Vl. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
6. Y. Imry and M. Wortis, Phys. Rev. B **19**, 3580 (1979).
7. M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).

8. C. R. Vasquez, R. V. Paredes, A. Hasmy, and R. Jul-ien, Phys. Rev. Lett. **90**, 170602 (2003).
9. K. Hui and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).
10. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, Eur. Phys. J. B **49**, 195 (2006).
11. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, JETP Lett. **99**, 535 (2014).
12. A. B. Babaev and A. K. Murtazaev, JETP Lett. **105**, 384 (2017).
13. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi, and J. J. Ruiz-Lorenzo, J. Phys. A **30**, 8379 (1997).
14. U. L. Fulco, F. D. Nobre, L. R. da Silva, and L. S. Lucena, Physica A **297**, 131 (2001).
15. J.-K. Kim, Phys. Rev. B **53**, 3388 (1996).
16. L. N. Shchur and O. A. Vasilyev, Phys. Rev. B **65**, 016107 (2001).
17. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer, J. W. Doane, and D. Finotello, Phys. Rev. Lett. **71**, 2595 (1993).
18. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
19. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 5117 (1995).
20. R. Paredes V. and J. Valbuena, Phys. Rev. E **59**, 6275 (1999).

21. C. Chatelain and B. Berche, Phys. Rev. Lett. **80**, 1670 (1998).
22. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya. Ataeva, Phys. Solid State **57**, 1436 (2015).
23. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Ataeva, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 101 (2017).
24. C. Vasquez and R. Paredes, Condensed Matter Physics **9**, 305 (2006).
25. C. J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper, Phys. Rev. E **72**, 036120 (2005).
26. C. Chatelain, P.-E. Berche, B. Berche, and W. Janke, Nuclear Physics B **106**, 899 (2002).
27. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
28. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, and A. H. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
29. A. B. Babaev and A. K. Murtazaev, Low Temp. Phys. **41**, 608 (2015).
30. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya. Aznaurova, Phys. Solid State **50**, 733 (2008).
31. A. B. Babaev, A. K. Murtazaev, and R. A. Murtazaliev, Solid State Phenomena **233–234**, 79 (2015).
32. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya. Ataeva, Phys. Solid State **59**, 141 (2017).
33. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
34. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).
35. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
36. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
37. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
38. О. А. Васильев, Л. Н. Щур, ЖЭТФ **117**, 1110 (2000).