ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 6, стр. 1041–1046

ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННЫХ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

А. К. Муртазаев [a], А. Б. Бабаев [b,c*]

[a] *Институт физики им. Х. И. Амирханова*
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия

[b] *Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук*
367000, Махачкала, Россия

[c] *Дагестанский государственный педагогический университет*
367000, Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2021 г.,
после переработки 10 февраля 2021 г.
Принята к публикации 10 февраля 2021 г.

С помощью кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло исследуется влияние слабого беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 10$–120 при концентрациях спинов $p = 1.00,\ 0.80$. Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных, мы показали, что внесение в систему слабого вмороженного беспорядка ($p = 0.80$) в виде немагнитных примесей изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451021060055

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение влияния беспорядка, содержащегося в твердом теле в виде примесей или других дефектов структуры, на фазовые переходы (ФП) и критические явлений (КЯ) 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 серьезная необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел. Без предварительных теоретических и экспериментальных исследований ни один материал не может быть использован для практических целей. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты структуры влияют на поведение различных систем при ФП.

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 (КИ) радиуса корреляции, то примеси не изменяют критических индексов. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что $d\nu = 2$. В работе [3] было показано, что влияние примеси в двумерной модели Изинга 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 $q \leq 4$ примеси могут изменить критические индексы и изменить класс универсальности 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

* E-mail: b_albert78@mail.ru

первого рода [4,5]. Такая смена ФП экспериментально наблюдается в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [6]. Для низкоразмерных систем ($d \leq 2$), описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$ ($q_c = 4$, q_c — критическое число состояний спина, d — размерность), на основе аналитических методов было показано, что наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [7]. Для однородных систем с размерностью $d \geq 3$, описываемых моделями Поттса, для которых наблюдается ФП первого рода, ситуация может оказаться существенно другой. В этом случае внесение вмороженного беспорядка может привести к трикритической точке p^*, ниже которой будет наблюдаться ФП второго рода, а выше ФП — первого рода [8–10].

В связи с этим целью настоящей работы является исследование на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК) влияния слабого беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей каноническим способом, на ФП в трехмерных системах, описываемых моделью Поттса с числом состояний спина $q = 5$, для которой в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе рассматривается трехмерная слабо разбавленная модель Поттса с числом состояний спина $q = 5$. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах кубической решетки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из состояний $q \geq 2$, 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 если хотя бы в одном узле находится 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

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

где

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

$$\rho_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad S_i = S_j, \\ 0, & \text{если} \quad S_i \neq S_j. \end{cases}$$

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [11]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00, 0.80$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 10$–120. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L. Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 200\tau_0$.

Для самой большой системы $L = 120$, $\tau_0 = 2.3 \cdot 10^3$ МК-шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для слабо разбавленных систем с концентрацией спинов $p = 0.80$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 1000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 200\tau_0$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

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

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

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

где $K = |J|/(k_BT)$, $N = pL^3$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m_F — намагниченность системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности (m_F), для ФМ-модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ использовалось следующее выражение [13]:

$$m_F = \frac{q\,(N_{max}/N) - 1}{q - 1}, \qquad (4)$$

где $N_{max} = \max[N_1, N_2, N_3, N_4, N_5]$, N_i — число спинов в состоянии с $q = i$, $N = pL^3$.

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости для восприимчивости χ и теплоемкости C

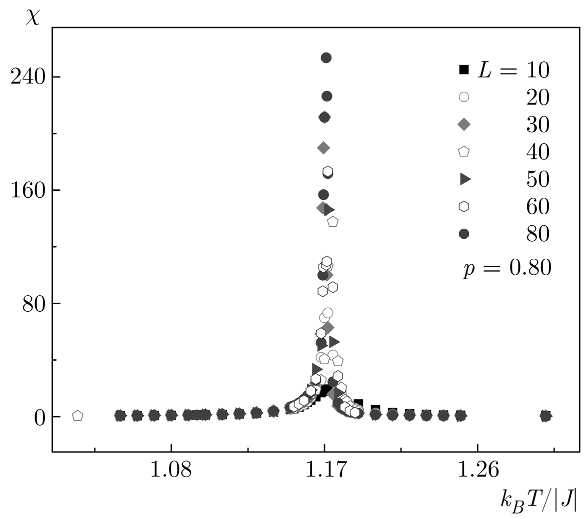

Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

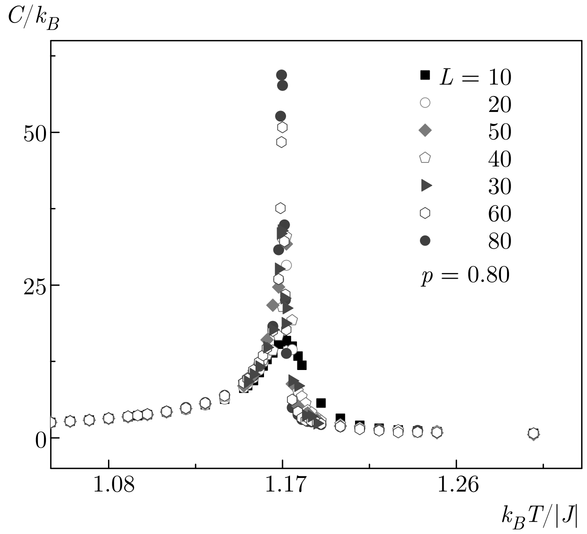

Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

от температуры T для трехмерной слабо разбавленной ФМ-модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке для систем с линейными размерами $L = 10$–80 при концентрации спинов $p = 0.80$. 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 нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности соответствуют одной температуре.

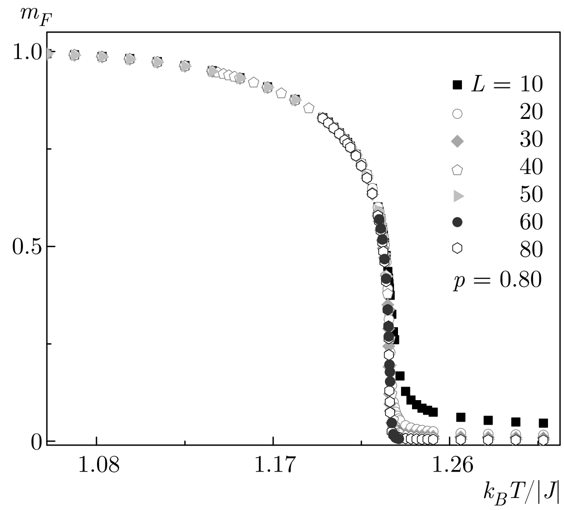

Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 0.80$. Как видно на рис. 3, наблюдается монотонное уменьшение величины m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов» при увеличении линейного размера L.

Для определения температуры фазового перехода $T_l(p)$ и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [14]:

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

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

где E — энергия, и m_F — намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (5) и (6) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$ с большой точностью в фазовых переходах соответственно первого и второго рода. Методика определения температуры ФП этим методом рассмотрена в работах [15–17]. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [18]: усредненная величина $V_L(T,p)$

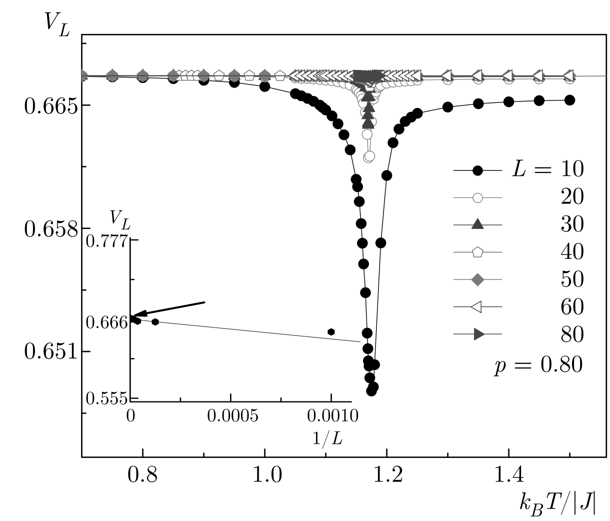

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

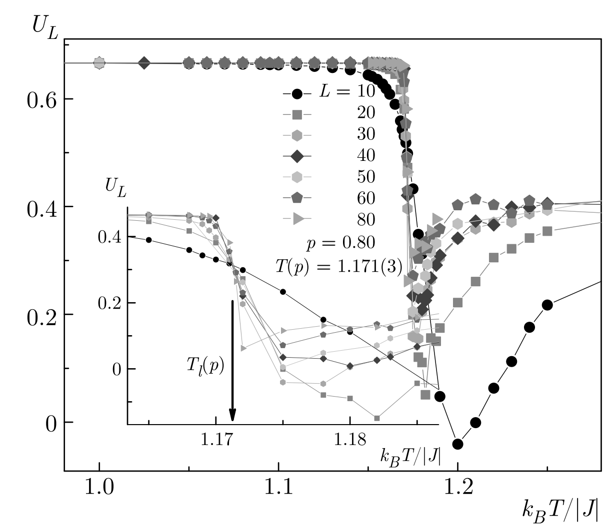

Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке

стремится к тривиальному значению согласно выражению

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

при $L \to \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* = 2/3$.

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 $p = 0.80$ приведены соответственно на рис. 4 и 5. Заметим, что на вставке к рис. 4 наглядно видно, что тривиальная величина $V^* \to 2/3$ в соответствии с выражением (7) при $L \to \infty$. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 5 видно, что в критической области для $U_L(T, p)$ наблюдается четко выраженная точка пересечения и $U_L(T, p)$ не проявляет тенденции стремления к $-\infty$ при $L \to \infty$, что также свидетельствует о ФП второго рода. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов $\mathrm{T}_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $\mathrm{T}_l(1.0) = 1.452(1)$, $\mathrm{T}_l(0.80) = 1.171(3)$.

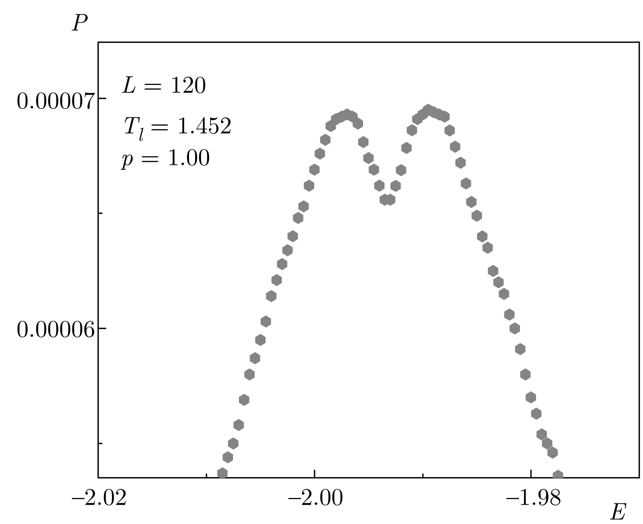

Рис. 6. Гистограмма распределении энергии для трехмерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке при $p = 1.0$ и $T = T_l$

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [19,20]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m_F определяется выражением [19]

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

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

Гистограммный анализ данных проведенный нами для чистой неразбавленной трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина

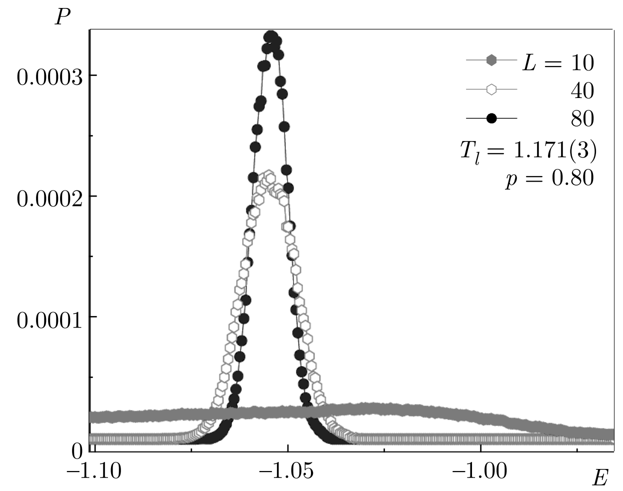

Рис. 7. Гистограмма распределении энергии для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке при $p = 0.80$ и $T = T_l$

$q = 5$ на простой кубической решетке также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 6. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для систем с линейным размером $L = 120$. Как видно на рисунке, на зависимости вероятности P от энергии системы U для системы $L = 120$ наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является достаточным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса на простой кубической решетке при концентрации спинов $p = 0.80$, но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности P от энергии системы U с достаточно большим линейным размером L наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 7), что является характерным признаком для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные свидетельствуют о том, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ в отсутствие структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теории [21]. Внесение слабого вмороженного беспорядка ($c = 0.20$, $c = 1 - p$) в виде немагнитных примесей каноническим способом в рассматриваемую модель приводит к ФП второго рода. Отметим, что в работах [13, 22] такая смена ФП наблюдалась и для спиновых систем, в которых беспорядок внесен в виде случайных связей.

Определение точного значения трикритической точки p_c, отделяющей на фазовой диаграмме область ФП первого рода от ФП второго рода для трехмерной модели Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке, — предмет отдельного рассмотрения. Точная величина трикритической точки имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении влияния вмороженного беспорядка на различные термодинамические характеристики.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики исследовано влияние слабого вмороженного беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке. Данные полученные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что:

1. В трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [21].

2. Внесение слабого беспорядка ($p = 0.80$) в виде вмороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель приводит к фазовым переходам второго рода.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-02-00153.

ЛИТЕРАТУРА

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. A. Bailly-Reyre and H. T. Diep, Physics Procedia **75**, 557 (2015).

5. J. Cardy and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997).

6. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer et al., 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, ФТТ **61**, 1342 (2019).

16. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ФНТ **46**, 818 (2020).

17. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, Mater. Lett. **258**, 126771 (2020).

18. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).

19. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).

20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, ФТТ **62**, 1088 (2020).

21. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

22. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, Eur. Phys. J. B **49**, 195 (2006).