

11,05

Фазовые переходы в двумерной слабо разбавленной пятивершинной модели Поттса

© А.К. Муртазаев^{1,2}, А.Б. Бабаев^{1,3}, Г.Я. Атаева^{1,¶}

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

¶ E-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в Редакцию 26 февраля 2020 г.

В окончательной редакции 26 февраля 2020 г.

Принята к публикации 12 марта 2020 г.

Методом компьютерного моделирования проведено исследование фазовых переходов в двумерной слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при $q = 5$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10-120$. На основе кумулянтов Биндера четвертого порядка и методом гистограммного анализа данных, показано, что введение немагнитных примесей в спиновую систему, описываемой двумерной моделью Поттса с $q = 5$, приводит к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода

Ключевые слова: примесь, метод Монте-Карло, магнитная система, модель Поттса.

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49478.051

1. Введение

В настоящее время хорошо известно, что присутствие немагнитных примесей и дефектов структуры оказывает влияние на тепловые и магнитные характеристики систем, и в частности оказывает существенное влияние на поведение систем при фазовых переходах (ФП), если критический индекс теплоемкости соответствующий чистой системе положителен, т. е. $\alpha > 0$. В противоположном случае, когда $\alpha < 0$, слабый беспорядок не влияет на критическое поведение (критерий Харриса [1]). 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 [2].

В настоящей работе исследованы ФП в двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 1.00, 0.90, 0.80$. Исследования проведены на основе кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК). Касательно двумерной разбавленной модели Поттса с $q = 5$, до сих пор нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на тепловые и магнитные свойства, не исследовано их влияние на фазовые переходы, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей [3]. Единственным надежно установленным фактом является, то, что в чистой модели происходит ФП первого рода согласно аналитическим методам [4].

Гамильтониан двумерной слабо разбавленной модели Поттса может быть, представлен в следующем виде [4]:

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

$\Theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$, где J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей, $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i = 0$, если в i -узле немагнитная примесь. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10 \div 120$.

2. Результаты численного эксперимента

Для анализа характера фазового перехода был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [5]:

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

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

где E — энергия и m — намагнитченность системы с линейным размером L . Выражения (2) и (3) позволяют определить $T_c(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Данный метод, хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП [6–10]. Характерные зависимости кумулянтов

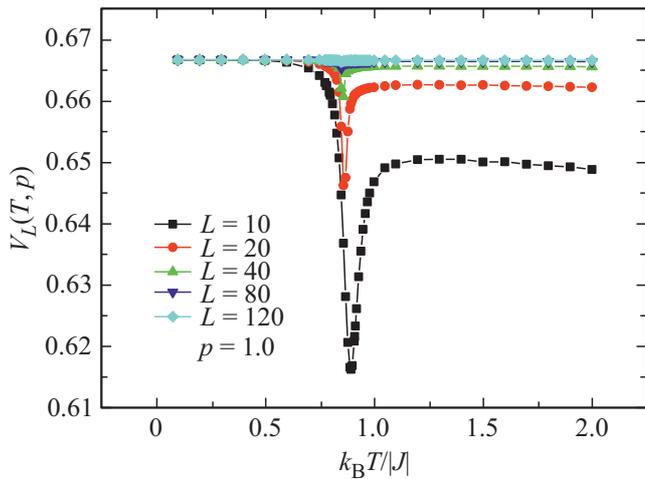


Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для модели Поттса при $p = 1.00$.

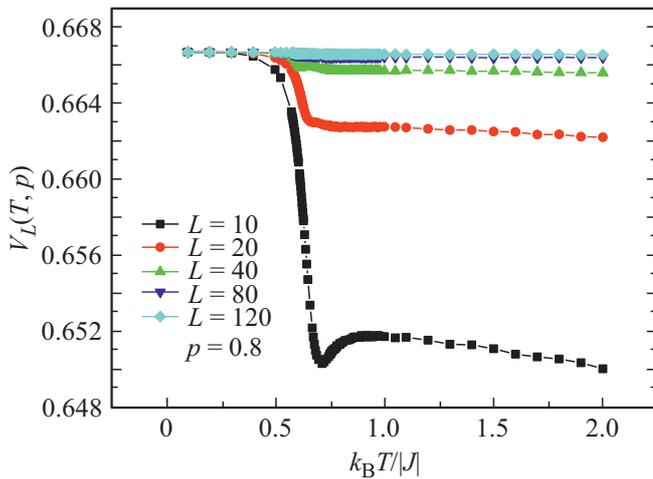


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.80$.

Биндера $V_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 1.00$ и $p = 0.80$ приведены на рис. 1 и 2 соответственно. На рис. 2 наглядно видно, что нетривиальная величина $V^* \rightarrow 2/3$ в соответствии с выражением $V(T, p) = V^* + bL^{-d}$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение как отмечалось выше характерно для ФП второго рода. На рис. 3 и 4 приведены зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ от температуры при $p = 1.00$ и $p = 0.80$. На рис. 4 видно, что 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 $L \rightarrow \infty$, что также свидетельствует о ФП второго рода. Полученные таким способом температуры фазовых переходов $T_l(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_l(1.0) = 0.8515(1)$, $T_l(0.90) = 0.731(2)$, $T_l(0.80) = 0.57(2)$. Как видно, температура ФП полученная для чистой спиновой системы при $p = 1.0$ достаточно хорошо согласуется с аналити-

ческим значением, полученным Бакстером [4] по формуле $\frac{k_B T_l}{|J|} = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{5})} = 0.8515$.

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [11–13]. Гистограммный анализ данных проведенный нами для двумерной чистой ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для систем с линейным размером $L = 60$. Как видно из рисунка, на зависимости вероятности P от энергии системы 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 ферро-

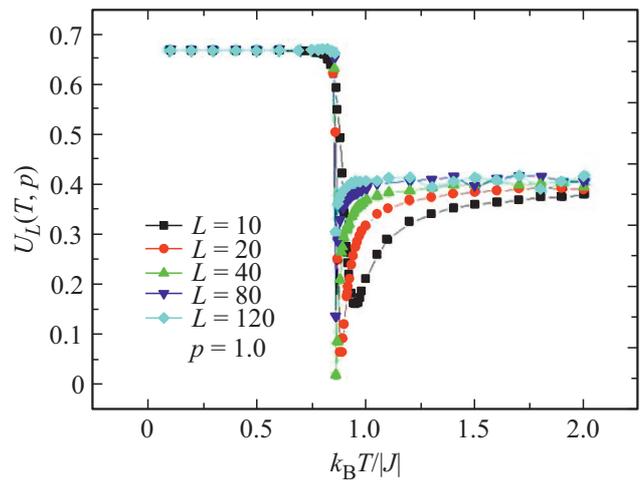


Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для модели Поттса при $p = 1.00$.

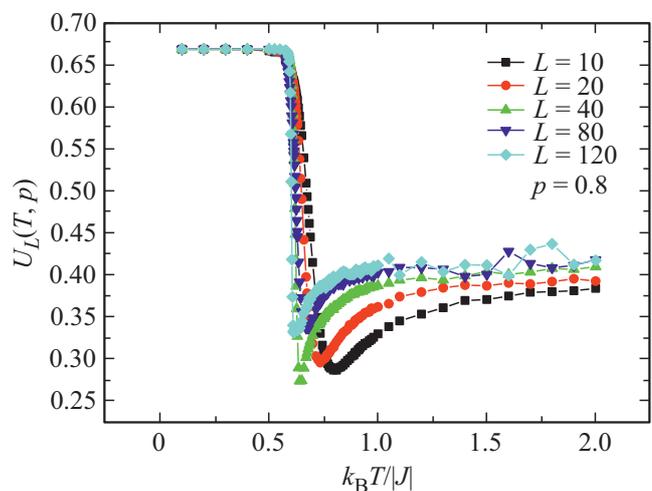


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.80$.

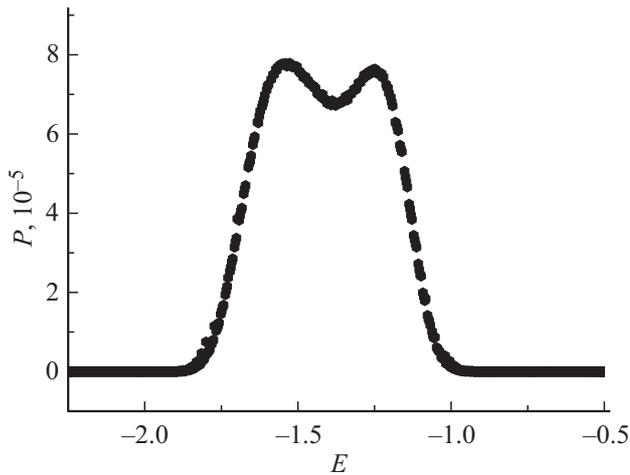


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для двумерной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 1.0$.

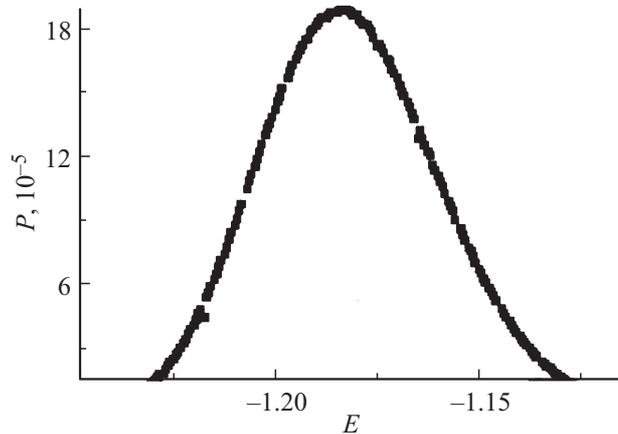


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$ при концентрации спинов $p = 0.80$.

магнитной 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 системы U для системы с $L = 120$ наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 6), что является характерным признаком для ФП второго рода.

3. Заключение

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ в отсутствии структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с предсказаниями теоретических методов [4]. Внесение замороженного беспорядка ($c = 1 - p$) в виде немагнитных примесей, каноническим способом, в рассматриваемую модель, приводит к смене ФП первого рода на ФП второго рода.

Фининсирование

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и рамках научного проекта № 18-32-20098 мол_а_вед.

Список литературы

- [1] A.V. Harris. J. Phys. C 7, 1671 (1974).
- [2] M. Aizenman. J. Wehr. Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
- [3] X. Qian, Y. Deng, W.J. Blöte. Phys. Rev E **72**, 056132-1 (2005).
- [4] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics World Scientific, London (2009).
- [5] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
- [6] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, M.A. Magomedov, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. JETP Lett. **100**, 242 (2014).
- [7] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. Физика низких температур **41**, 8, 784 (2015).
- [8] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. ФТТ **61**, 7, 1342 (2019).
- [9] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Ya. Ataeva. Phys. Solid State **59**, 1, 141 (2017).
- [10] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. Письма в ЖЭТФ **100**, 3, 267 (2014).
- [11] А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **149**, 2, 357 (2014).
- [12] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
- [13] N.A. Alves, V.A. Berg, R. Villanova. Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).

Редактор Т.Н. Василевская