11,05

Влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке

© А.К. Муртазаев[1,2], А.Б. Бабаев[1,3], Г.Я. Атаева[1]

[1] Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия
[2] Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия
[3] Дагестанский государственный педагогический университет,
Махачкала, Россия
E-mail: b_albert78@mail.ru

(Поступила в Редакцию 26 января 2015 г.)

Методом Монте-Карло исследовано влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной разбавленной антиферромагнитной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 9{-}144$. С использованием метода кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что внесение вмороженного беспорядка в спиновую систему, описываемую двумерной антиферромагнитной моделью Поттса, приводит к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.

Работа поддержана грантом РФФИ № 13-02-00220.

Прогресс в понимании проблем физики фазовых переходов и критических явлений, в основном достигнут благодаря гипотезе скейлинга, универсальности и теории ренормализационной группы [1–3]. Однако актуальной темой в теории фазовых переходов (ФП) остается влияние неидеальных черт (таких как примеси, дефекты структуры) реальных систем на ФП и критические явления магнитных систем [4]. Имеются основания предполагать, что немагнитные примеси изменяют род ФП в моделях Поттса, для которых в чистом состоянии наблюдается ФП первого рода. Подобные системы в настоящее время активно исследуются с применением методов Монте-Карло, так как при изучении этих вопросов лабораторными и теоретическими методами возникают труднопреодолимые проблемы.

В настоящей работе исследовано влияние вмороженных немагнитных примесей на ФП в двумерной трехвершинной (с числом состояний спина $q = 3$) антиферромагнитной (АФ) модели Поттса на треугольной решетке. Рассмотрены системы с концентрацией спинов $p = 1.00$, 0.90, 0.80. Исследования проведены на основе стандартного алгоритма Метрополиса в сочетании с кластерным алгоритмом Вольфа метода Монте-Карло. Двумерная ферромагнитная модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на треугольной решетке была исследована нами в [5–7]. В этих работах определены полный набор статических критических индексов и показано, что они в пределах погрешности численного эксперимента достаточно хорошо согласуются с данными, полученными в других работах.

Отметим, что для двумерной разбавленной АФ-модели Поттса с $q = 3$ до сих пор нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на ФП, не установлен класс универсальности критического поведения, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде вмороженных немагнитных примесей [8]. Единственным надежно установленным фактом является то, что в чистой модели происходит ФП первого рода [9].

При построении двумерной трехвершинной АФ-модели Поттса с вмороженными немагнитными примесями необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах треугольной решетки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из $q > 2$ состояний, и немагнитные примеси; немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки. С учетом этих особенностей гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [9]

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

где J — параметр обменного антиферромагнитного взаимодействия ближайших соседей; $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i = 0$, если в узле i находится немагнитная примесь; $\theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами $S_i{-}S_j$.

Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 9{-}144$. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00$, 0.90, 0.80. Кроме того, проводилось усреднение по различным

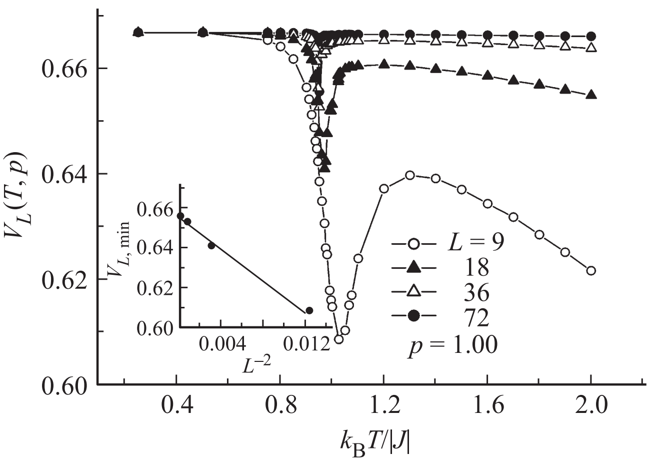

Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для неразбавленной АФ-модели Поттса при отсутствии структурного беспорядка ($p = 1.00$). На вставке приведена аппроксимация зависимостей $V_{L,\min}$ от L.

начальным конфигурациям. Для систем с концентрацией $p = 0.90$, 0.80 осуществлялось усреднение по 900 и 1000 различных конфигураций соответственно, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 180\tau_0$.

Для анализа характера ФП в качестве наиболее эффективного метода зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [10]

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

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

где E — энергия, а m — параметр порядка системы с линейным размером L. Выражения (2) и (3) позволяют определить $T_N(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род ФП в системе. Фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [11]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

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

при $L \to \infty$ и $T = T_N(L)$, где V^* отлична от $2/3$, а 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 АФ-модели Поттса с $q = 3$ при отсутствии структурного беспорядка ($p = 1.00$). Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [12–16].

Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при $p = 0.90$ приведены на рис. 3. Как видно из вставки к рис. 3, нетривиальная величина V^*, полученная при аппроксимации в соответствии с выражением (4), стремится к $2/3$ при $L \to \infty$. Такое поведение, как отмечалось, характерно для ФП второго рода [11]. Аналогичное поведение наблюдалось и для систем при концентрации спинов $p = 0.80$. Определенные методом кумулянтов Биндера критические температуры $T_N(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_N(1.00) = 0.940(1)$, $T_N(0.90) = 0.79(2)$, $T_N(0.80) = 0.65(3)$.

Таким образом, в настоящей работе с соблюдением единой методики исследовано влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной разбавленной антиферромагнитной модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке. Полученные данные

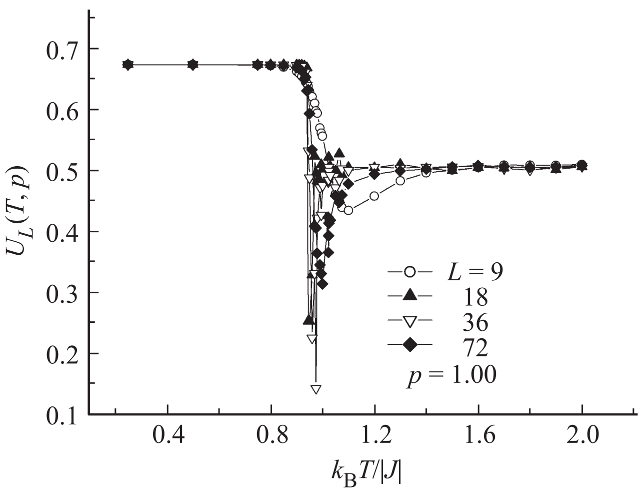

Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для неразбавленной АФ-модели Поттса при отсутствии структурного беспорядка ($p = 1.00$).

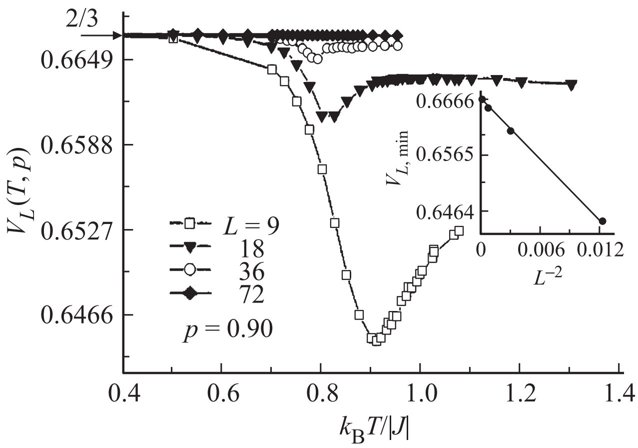

Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для разбавленной АФ-модели Поттса при $p = 0.90$. На вставке приведена аппроксимация зависимостей $V_{L,\min}$ от L.

свидетельствуют о том, что внесение немагнитных примесей в двумерную структуру, описываемую двумерной АФ-моделью Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке, приводит к смене ФП первого рода на ФП второго рода.

Список литературы

[1] А.З. Паташинский, В.А. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982). 380 с.
[2] К. Вильсон, Д. Когут. Ренормализационная группа и ε-разложение. Мир, М. (1975). 256 с.
[3] Г. Стенли. Фазовые переходы и критические явления. Мир, М. (1973). 419 с.
[4] В.С. Доценко. УФН **165**, *5*, 481 (1995).
[5] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. ФНТ **39**, 194 (2013).
[6] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **142**, 1189 (2012).
[7] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Изв. РАН. Сер. физ. **77**, 1476 (2013).
[8] X. Qian, Y. Deng, W. Blote. Phys. Rev. E **72**, 056 132 (2005).
[9] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
[10] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Cond. Matter **8**, 5209 (1996).
[11] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
[12] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Aznaurova. Solid State Phenomena **168**–**169**, 357 (2011).
[13] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. J. Magn. Magn. Mater. **324**, 3870 (2012).
[14] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова. ФТТ **50**, 733, (2008).
[15] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. J. Magn. Magn. Mater. **321**, 2630 (2009).
[16] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).