

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ
СВОЙСТВА

УДК 537.611.45

РАСЧЕТ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ДИСПЕРСИЙ НАМАГНИЧЕННОСТИ,
ТЕПЛОЕМКОСТИ И ВОСПРИИМЧИВОСТИ
В ДВУМЕРНОЙ СЛАБО РАЗБАВЛЕННОЙ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ
МОДЕЛИ ПОТТСА

© 2023 г. Г. Я. Атаева^{a, *}, А. Б. Бабаев^{a, b}, А. К. Мургазаев^{a, b}

^aИнститут физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,
ул. Ярагского, 94, Махачкала, 367015 Россия

^bДагестанский федеральный исследовательский центр РАН, ул. М. Гаджиева, 45, Махачкала, 367000 Россия

*e-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в редакцию 24.03.2023 г.

После доработки 24.05.2023 г.

Принята к публикации 05.06.2023 г.

Методом Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , теплоемкости R_c и восприимчивости R_χ в спиновой решеточной четырехкомпонентной слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.80$. Показано, что внесение беспорядка в виде немагнитных примесей в двумерную модель Поттса приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_c и R_χ в критической точке. Установлено, что эти значения заметно уменьшаются для систем с линейными размерами $L \geq 120$ в единицах межатомной длины.

Ключевые слова: дисперсия, примесь, фазовый переход, модель Поттса, метод Монте-Карло

DOI: 10.31857/S0015323023600466, **EDN:** WTSZAH

ВВЕДЕНИЕ

В физике конденсированных сред значительную роль имеют исследования, связанные с изучением влияния немагнитных примесей на различные магнитные и тепловые свойства спиновых систем. Основано это тем, что немагнитная примесь оказывает влияние на термодинамические параметры исследуемой системы вплоть до смены рода фазового перехода в них [1–6]. Также есть все основания предполагать наличие зависимости критических параметров от способа реализации беспорядка в исследуемой модели. Например, в работах [7, 8] было показано, что беспорядок, реализованный каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов) и способом большого канонического типа (доля магнитных узлов в каждой примесной конфигурации флуктуирует), приводит к различным результатам. Исследования [9], проведенные ренормгрупповыми методами, такое поведение объяснило различием конечно-размерных эффектов в этих двух типах разбавления.

Вопрос об особенностях влияния беспорядка на род фазового перехода (ФП) в спиновых решеточных моделях продолжает вызывать повышенный интерес [1–6]. Отметим, что поведение термодинамических критических параметров неупо-

рядоченных моделей при различных реализациях беспорядка в виде немагнитных примесей в широком интервале изменении концентрации примесей $c_{\text{imp}} = 1 - p$, где p – концентрация спинов, с соблюдением единой методики до настоящего времени исследовано недостаточно полно. Не выяснены особенности распределения термодинамических параметров по соответствующему ансамблю. По-видимому, строгое исследование таких закономерностей в ближайшее время возможно лишь на основе данных численного эксперимента и практически невозможно другими методами.

В связи с этим в данной работе методом Монте-Карло исследуется проблема самоусреднения термодинамических критических параметров в неупорядоченной четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке. Основываясь на моделях Поттса, можно проверить особенности влияния примесей на ФП и определить их роль как стабилизирующего фактора при ФП второго рода. С другой стороны, в соответствии с критерием Харриса [10] в случае двумерных моделей Поттса с $q = 3$ или $q = 4$ примеси должны повлиять и на критическое поведение, так как для этих моделей в неразбавленном виде $\alpha = 1/3$ и $\alpha = 2/3$ соответственно [11, 12].

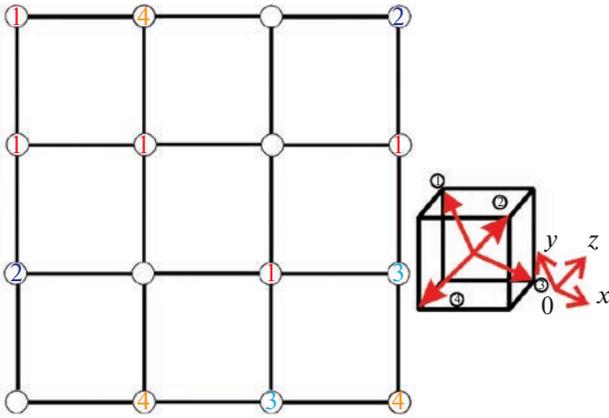


Рис. 1. Слабо разбавленная четырехкомпонентная стандартная модель Поттса на квадратной решетке.

СЛАБО РАЗБАВЛЕННАЯ ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНАЯ СТАНДАРТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Приведем здесь формулировку слабо разбавленной четырехкомпонентной стандартной модели Поттса, используемую для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. В рассматриваемой нами модели примеси распределены каноническим способом [2]. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах квадратной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 4-х симметричных направлениях в пространстве с размерностью $q-1$ так, что углы между любыми двумя направлениями спинов равны. Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (*quenched disorder*) (рис. 1).

2. 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 микроскопической гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [12]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, \quad (1)$$

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальнейшем считаем $J = 1$ и работаем с безразмерной тем-

пературой), P_i – обозначение состояния спина с номером i ,

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases},$$

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

Концентрация магнитных спинов определяется выражением:

$$p = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \rho_i \delta(S_i, q). \quad (2)$$

Тогда значение $p = 1$ соответствует не разбавленной решетке, $p = 0$ – полностью разбавленной.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Расчеты проводили на основе кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло [14–18]. В данной работе этот алгоритм использован в следующем виде:

1. Случайным образом выбирается узел на решетке. Если в этом узле окажется немагнитная примесь, то опять случайным образом выбирается узел, и так до тех пор, пока не будет выбран узел с магнитным спином S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят магнитным спином, который сонаправлен с неперевернутым данным спином S_i , то с вероятностью $p = 1 - \exp(-K)$, где $K = J/k_B T$, этот спин тоже переворачивается, а его координаты запоминаются в стеке. Затем осуществляется просмотр ближайших соседей последнего спина, с которым была установлена связь. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут достигнуты границы системы.

3. Все спины, между которыми установлена связь, образуют “кластер”.

4. Процедура переворота спинов заканчивается, когда стек становится пустым. Этот процесс называется переворотом кластера, а все переворотные спины считаются принадлежащими кластеру Вольфа.

Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.0, 0.8$. Исследованы системы с линейными размерами $L = 10-160$, и числом спинов $N = p \times L \times L$. Начальные конфигурации задавали таким образом, чтобы все атомы находились в одном состоянии. Для вывода системы с линейными размерами $L \times L$ в равновесное состояние вычисляли время релаксации τ_0 . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной

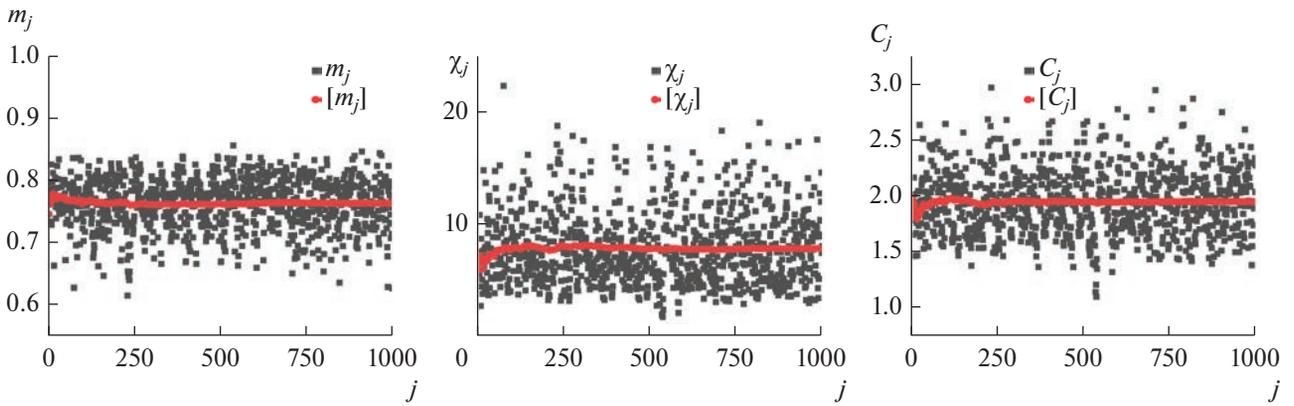


Рис. 2. Распределение намагниченности m_j , восприимчивости χ_j , теплоемкости C_j по каноническому ансамблю с различным распределением беспорядка для спиновой системы при $p = 0.80$, $T = T_c(p)$ и $L = 120$.

$\tau = 400\tau_0$. Для самой большой системы $L = 160$, $\tau_0 = 2 \times 10^3$ МК шагов/спин. Кроме того, проводили усреднение по различным примесным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовали 10 начальных примесных конфигураций. Для систем с концентрацией $p = 0.80$ выполняли конфигурационное усреднение по 1000 примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным поведением восприимчивости и теплоемкости нами использованы следующие флуктуационные соотношения [19]:

$$\chi = \frac{\overline{(Nm)^2} - \langle m \rangle^2}{NK}, \quad (3)$$

$$C = \frac{\overline{(NU)^2} - \langle U \rangle^2}{NK^2}, \quad (4)$$

где $K = J/k_B T$, ($J > 0$), $N = pL^2$ число магнитных узлов, m – намагниченность системы, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, черта сверху означает усреднение по каноническому ансамблю с различной реализацией беспорядка.

Для вычисления намагниченности двумерной слабо разбавленной модели Поттса использовали следующее соотношение:

$$m_F = \frac{\left[q \left(\frac{N_{\max}}{N} \right) - 1 \right]}{q - 1}, \quad (5)$$

где $q = 4$ (q – число состояний спина), $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, N_4\}$, N_i – число спинов с состоянием P_i .

На рис. 2 представлены значения намагниченности m_j , восприимчивости χ_j и теплоемкости C_j , для различных примесных конфигураций j двумерной модели Поттса в слабо разбавленном ре-

жиме при $p = 0.80$, $T = T_c(p)$, $0 \leq j \leq N_s$, N_s – общее число примесных конфигураций. Представлены здесь же усредненные значения $[m_j]$, $[\chi_j]$, $[C_j]$ по соответствующему каноническому ансамблю с различным распределением немагнитных примесей для систем с линейным размером $L = 120$. Очевидно, что использованное для усреднения количество примесных конфигураций и размеры L позволяют корректно оценить значения критических параметров, при которых не наблюдается явная зависимость от числа примесных конфигураций.

Для расчета относительной дисперсии (квадрата коэффициентов вариации) намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_C в зависимости от линейных размеров L исследуемой системы использовали выражения:

$$R_m = \frac{\overline{m^2(L)} - \overline{m(L)}^2}{\overline{m(L)}^2}, \quad (6)$$

$$R_\chi = \frac{\overline{\chi^2(L)} - \overline{\chi(L)}^2}{\overline{\chi(L)}^2}, \quad (7)$$

$$R_C = \frac{\overline{C^2(L)} - \overline{C(L)}^2}{\overline{C(L)}^2}. \quad (8)$$

Данные, рассчитанные по выражениям (6)–(8), позволяют судить о самоусреднении термодинамических величин и погрешностях, связанных с размерами изучаемых систем. Соответствующие значения R_m , R_χ и R_C в зависимости от линейных размеров L при концентрациях спинов $p = 0.80$ представлены в табл. 1. Как видно из таблицы, введение слабого беспорядка в четырехкомпонентную модель Поттса приводит к ненулевым значениям R_m , R_χ и R_C . Аналогичное поведение было обнаружено для этих величин в работе [20] при $p = 0.90$. Анализ данных R_m , R_χ , R_C , полученных в настоящей работе при $p = 0.80$ в зависимо-

Таблица 1. Значения относительных дисперсий восприимчивости, намагниченности и теплоемкости для слабо разбавленной модели Поттса с $q = 4$ при $p = 0.80$

L	R_χ	R_m	R_c
20	0.06796	0.00277	0.02189
120	0.05681	0.00146	0.00564
160	0.05108	0.000149	0.0025

сти от рассмотренных линейных размеров, позволяет заключить, что на их точность определения сильное влияние оказывает размеры изучаемых систем. Для исследуемой неупорядоченной четырехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке заметное уменьшение значений R_m , R_χ , R_c наблюдается для систем с линейными размерами $L \geq 120$. При этом следует обратить внимание на то, что дисперсии намагниченности и теплоемкости намного быстрее уменьшаются с увеличением L (табл. 1).

Таким образом, из полученных данных R_m , R_χ , R_c следует, что для однозначного определения магнитных и тепловых характеристик и их особенностей в разбавленных моделях Поттса, необходимо изначально выявить размерные особенности дисперсии для всех интересующихся физических параметров. В частности, для рассмотренной модели Поттса с $q = 4$ заметное уменьшение R_m , R_χ , R_c наблюдается при $L \geq 120$ в слабо разбавленном режиме ($p = 0.80$).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики впервые на основе кластерного алгоритма метода Монте-Карло рассчитаны относительные дисперсии намагниченности R_m , восприимчивости R_χ и теплоемкости R_c в слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.80$. Полученные данные свидетельствуют о следующем:

1. Внесение слабого беспорядка в виде немагнитных примесей в четырехкомпонентную модель Поттса на квадратной решетке приводит к отличным от нуля значениям для R_m , R_χ , R_c , что указывает на плохое самоусреднение для исследуемых термодинамических параметров.

2. Установлено, что для получения надежных численных характеристик путем компьютерного моделирования четырехкомпонентной модели Поттса в слабо разбавленном режиме необходимо исследовать спиновые системы с линейными размерами $L \geq 120$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dotsenko V.S.* Critical phenomena and quenched disorder // *Usp. Fiz. Nauk.* 1995. Т. 165. С. 481.

2. *Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т.* Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // *УФН.* 2003. Т. 173. С. 175.

3. *Дубс В.В., Прудников В.В., Прудников П.В.* Ренорм-групповое описание влияния дефектов структуры на фазовый переход в сложных спиновых системах с эффектами случайной анизотропии и дефектами структуры // *Теоретическая и математическая физика.* 2017. Т. 190. С. 419.

4. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* // *Fiz. Nizk. Temp.* 2020. V. 46. P. 818.

5. *Бабеев А.Б., Муртазаев А.К.* Фазовые переходы в низкоразмерных неупорядоченных моделях Поттса // *ФТТ.* 2020. Т. 62. С. 757.

6. *Муртазаев А.К., Бабеев А.Б.* Фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$ // *ФТТ.* 2021. Т. 10. С. 1644.

7. *Wiseman S., Domany E.* Self-averaging, distribution of pseudocritical temperatures, and finite size scaling in critical disordered systems // *Phys. Rev. E.* 1998. V. 58. P. 2938.

8. *Wiseman S., Domany E.* Finite-Size Scaling and Lack of Self-Averaging in Critical Disordered Systems // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 81. P. 22.

9. *Aharony A., Harris A.B., Wiseman S.* Critical Disordered Systems with Constraints and the Inequality $\nu > 2/d$ // *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 81. P. 252.

10. *Harris A.B.* Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models // *J. Phys.* 1974. V. C 7. P. 1671.

11. *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике / Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. М.: Мир, 1985. 486 с.

12. *Муртазаев А.К., Бабеев А.Б., Атаева Г.Я., Магомедов М.А.* Фазовые переходы и критические явления в двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на квадратной решетке // *ЖЭТФ.* 2022. Т. 162. Вып. 9. С. 398–405.

13. *Wu F.Y.* The Potts model // *Rev. Mod. Phys.* 1982. V. 54. P. 235.

14. *Wolff U.* Collective Monte Carlo Updating for spin systems // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 361.

15. *Wang J.-S., Swendsen R.H.* Swendsen. Cluster Monte Carlo algorithms // *Phys. A.* 1990. V. 167. P. 565.

16. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // *J. of Magnetism and Magnetic Materials.* 2022. V. 563. P. 169864.

17. *Муртазаев А.К., Бабеев А.Б., Атаева Г.Я., Бабеев М.А.* Фазовые переходы в разбавленной двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке // *Физика твердого тела.* 2022. Т. 64. С. 639.

18. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // *Mathematical Models and Computer Simulations.* 2019. V. 11. P. 575.

19. *Peczak P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 43. P. 6087.

20. *Murtazaev A.K., Babaev A.B., Ataeva G.Ya., Murtazaeva A.A.* Calculation of relative dispersions of magnetization, susceptibility, and heat capacity in a two-dimensional weakly diluted Potts model based on computer simulation methods // *Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur.* 2021. V. 47. P. 119.