ЖЭТФ, 2009, том 136, вып. 3 (9), стр. 516–520 © 2009

ОСОБЕННОСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТРЕХМЕРНЫХ РАЗБАВЛЕННЫХ СТРУКТУРАХ, ОПИСЫВАЕМЫХ МОДЕЛЬЮ ПОТТСА

А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова*

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 24 февраля 2009 г.

Методом Монте-Карло исследуются фазовые переходы в трехмерных структурах с числом состояний спина $q = 3$ с немагнитными примесями, описываемых моделью Поттса. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 20$–44 при концентрациях спинов $p = 1.00$, 0.95, 0.90, 0.80, 0.70, 0.65. С помощью метода кумулянтов Биндера показано, что внесение в систему вмороженного беспорядка в виде немагнитных примесей изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β и индекса радиуса корреляции ν.

PACS: 05.40.-a, 64.60.F-, 75.10.Hk, 75.40.Cx

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение фазовых переходов (ФП) и критических явлений в магнитных материалах, содержащих примеси и другие дефекты структуры, представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это обусловлено 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. В связи с этим 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.

На основе эвристических аргументов был сформулирован критерий, определяющий степень влияния вмороженных немагнитных примесей на критическое поведение, называемый обычно критерием Харриса [2]. Согласно этому критерию слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда теплоемкость соответствующей чистой системы испытывает расходимость в критической точке. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга. Исследованию критических свойств систем, описываемых неупорядоченной моделью Изинга, в последнее время было посвящено значительное число работ [3–7], в которых получены ответы на многие вопросы.

В отличие от случая трехмерных разбавленных систем, описываемых моделью Изинга, весьма запутанной остается ситуация с трехмерными структурами с числом состояний спина $q = 3$, описываемыми моделью Поттса, в которые вмороженный беспорядок внесен в виде немагнитных примесей. В структурах, описываемых этой моделью, в чистом состоянии наблюдается слабо выраженный ФП первого рода. Несмотря на интенсивные теоретические исследования спиновых решеточных систем с вмороженным беспорядком в течение последних двадцати лет, к настоящему времени существует совсем немного надежно установленных фактов о поведении систем, для которых в чистом состоянии наблюдается слабо выраженный ФП первого рода.

*E-mail: b_albert78@mail.ru

Известно, что присутствие вмороженного беспорядка в структурах с состоянием $q > q_c$ (q_c — критическое число состояний спина) для модели Поттса может изменить порядок ФП. Для двумерных неразбавленных систем, описываемых моделью Поттса, величина $q_c = 4$ [8], в то время как для трехмерных — $q_c = 2.45$ [9]. При этом для первого случая наблюдается ФП второго рода, а для второго — слабо выраженный ФП первого рода. В ряде работ [10, 11] было строго доказано, что для низкоразмерных систем $d \le 2$, описываемых моделью Поттса с $q > q_c(d)$, наличия сколь угодно малой величины вмороженного беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП с первого рода на второй.

Что касается трехмерной разбавленной структуры с $q = 3$, описываемой моделью Поттса, то 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 [12].

В настоящей работе исследованы ФП в трехмерной разбавленной системе, описываемой моделью Поттса, с числом состояний спина $q = 3$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК). Огромный интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, модель Поттса служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких как $SrTiO_3$, могут описываться моделью Поттса с состоянием спина $q = 3$ [12, 13].

Во-вторых, исследование влияния вмороженного беспорядка на универсальные характеристики критического поведения, помимо практического, имеет и большой академический интерес [14].

В-третьих, первые попытки исследования этой модели методами вычислительной физики предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе рассматривается модель Поттса, служащая для описания трехмерных разбавленных систем с числом состояний спина $q = 3$. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах кубической решетки расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из $q \ge 2$ состояний, 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 же, 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

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

где

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

и

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

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [15]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00$, 0.95, 0.90, 0.80, 0.70, 0.65. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20$–44. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией $0.95 \ge p \ge 0.65$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 100–1000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 150\tau_0$.

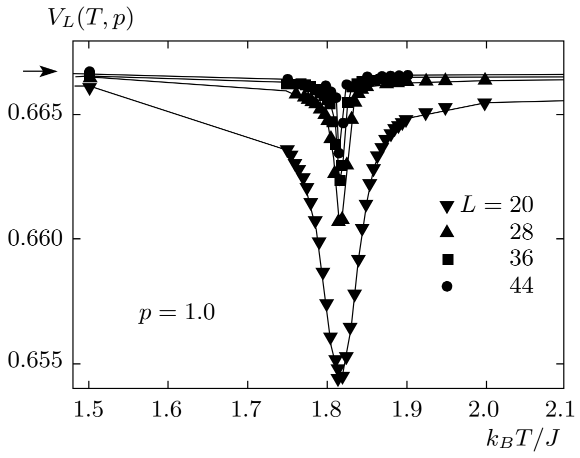

Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 3$

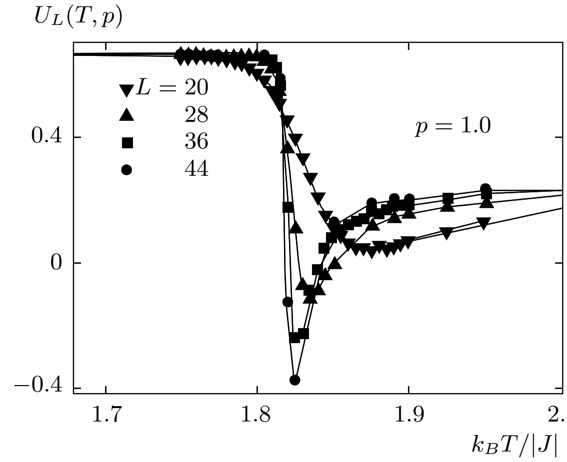

Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 3$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Для анализа характера фазовых переходов и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях наиболее эффективным методом зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [16, 17]:

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

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

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (2) и (3) позволяют определить $T_c(p)$ с большой точностью в фазовых переходах соответственно первого и второго рода. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [18]: 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 $T = T_c(L)$, где величина 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 $L \to \infty$, что и продемонстрировано на рис. 1 и 2 для исследованной нами модели в отсутствие структурного беспорядка ($p = 1.0$); максимумы теплоемко-

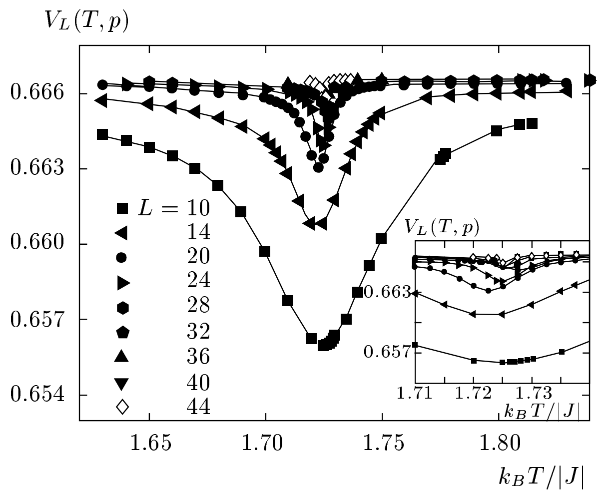

Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 3$

сти C и восприимчивости χ пропорциональны объему L^d. 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 $p = 0.95$ приведены соответственно на рис. 3 и 4. Заметим, что на вставке к рис. 3 наглядно видно, что нетривиальная величина $V^* \to 2/3$ при $L \to \infty$. Аппроксимация, проведенная в соответствии с выражением (4), показана на рис. 5. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 4 видно, что в критической об-

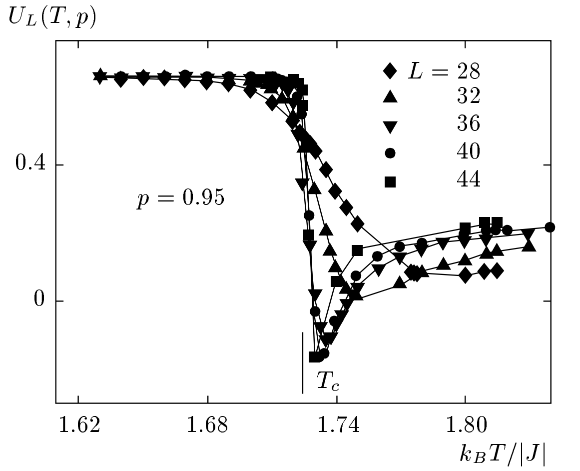

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ для трехмерной модели Поттса с $q = 3$

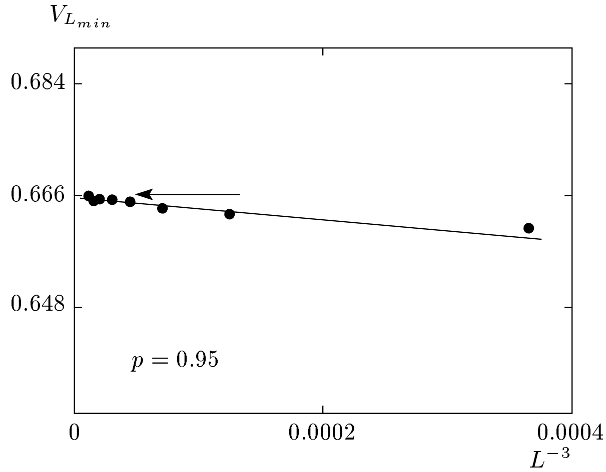

Рис. 5. Зависимость кумулянтов Биндера $(V_L)_{min}$ от L при $p = 0.95$. Аппроксимация проведена на основе выражения (4)

ласти для $U_L(T,p)$ наблюдается четко выраженная точка пересечения и $U_L(T,p)$ не стремится к $-\infty$ при $L \to \infty$, что и свидетельствует о наличии ФП второго рода. Аналогичное поведение температурных зависимостей кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ и $U_L(T,p)$ наблюдалось и для систем с концентрацией спинов $p = 0.90$, 0.80, 0.70, 0.65. Определенные методом кумулянтов Биндера критические индексы приведены в таблице. Таким образом, очевидно, что наличие немагнитных примесей порядка $c = 0.05$, $c = 1 - p$ приводит к смене ФП с первого рода на второй. Отметим, что в других работах [19, 20], где исследовалась модель Поттса для описания трехмерных разбавленных систем с $q = 3$, случай с концентрацией спинов $p = 0.95$ не рассматривался.

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, на основе теории конечно-размерного скейлинга [21, 22] рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β и критический индекс радиуса корреляции ν. Из соотношений теории конечно-размерного скейлинга следует, что в системе с размерами $L\times L\times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L намагниченность, восприимчивость и параметр V_n для определения критического индекса ν удовлетворяют следующим аналитическим выражениям:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \tag{5}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{6}$$

$$V_n \sim L^{1/\nu}, \tag{7}$$

где в качестве V_n может выступать $V_i = \left(\langle m^i E\rangle / \langle m^i\rangle\right) - \langle E\rangle$, $i = 1, 2, 3$.

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L, как правило, в случае ФП второго рода используется выражение [23]

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \tag{8}$$

где A — некоторый коэффициент.

Для расчета критических индексов α, β, γ и ν строились зависимости C, m, χ и V_n от L. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения α/ν, β/ν, γ/ν и $1/\nu$. Затем, с использованием значений ν, полученных в рамках данного исследования, определялись индексы α, β и γ. Более подробно эта процедура описана в работе [24]. Значения критических индексов для различных значений концентраций спинов p, полученные при соответствующем $\nu(p)$, представлены в таблице. Видно, что полученные значения критических индексов достаточно хорошо согласуются друг с другом и проявляют чрезвычайно слабую зависимость от спиновых концентраций $p = 0.95$, 0.90, 0.80, 0.70, 0.65, лишь слегка выходящую за пределы погрешности.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики с помощью метода кумулянтов Биндера исследованы на основе модели Поттса фазовые переходы в трехмерной разбавленной структуре с числом состояний спина $q = 3$ в широком интервале изменения концентрации немагнитных примесей. Полученные данные свидетельствуют о следующем.

Таблица. Критические индексы для трехмерных разбавленных систем с числом состояний спина $q = 3$, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга согласно модели Поттса

p	T_c	ν	α	γ	β	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
0.95	1.724	0.683(9)	−0.001(12)	1.273(5)	0.364(6)	2.000
0.90	1.634(2)	0.671(5)	−0.008(8)	1.275(5)	0.365(5)	1.997
0.80	1.449(2)	0.679(5)	−0.018(9)	1.279(5)	0.372(5)	2.005
0.70	1.245(3)	0.684(8)	−0.025(12)	1.281(6)	0.374(6)	2.004
0.65	1.127(3)	0.688(8)	−0.027(14)	1.284(6)	0.376(6)	2.009

1) В модели Поттса для систем с числом состояний спина $q = 3$ в отсутствие структурного беспорядка ($p = 1.0$) наблюдается поведение, характерное для ФП первого рода.

2) Внесение в систему вмороженного беспорядка в виде немагнитных примесей c, $c = 1 - p$, где $p < 1.00$, изменяет фазовый переход с первого рода на второй.

3) Данные, представленные в таблице, показывают, что численные значения критических индексов, рассчитанные в области ФП второго рода, на фазовой диаграмме для этой модели в пределах погрешности численного эксперимента достаточно хорошо согласуются друг с другом и подтверждают универсальность критического поведения трехмерных слаборазбавленных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 07-02-00194, 09-02-96506) и в рамках программы по поддержке научных школ (НШ-5547.2006.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
2. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
3. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
4. H. G. Ballesteros, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor et al., Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
5. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницин, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
6. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **126**, 1377 (2004).
7. А. К. Муртазаев, УФН **176**, 1119 (2006).
8. M. Loulidi, Physica A **287**, 177 (2000).
9. A. J. Guttmann and I. G. Enting, J. Phys. A **27**, 5801 (1994).
10. M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
11. K. Hui and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).
12. А. Н. Ермилов, Физика элементарных частиц и атомного ядра **20**, 6, 1379 (1989).
13. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
14. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
15. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
16. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
17. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
18. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
19. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, and A. Muñoz Sudupe, Phys. Rev. B **61**, 3215 (2000).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФТТ **50**, 703 (2008).
21. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
22. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
23. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
24. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **120**, 1535 (2001).