УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-2-40-44

А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,3}, Г.Я. Атаева¹

Термодинамические и критические свойства сильно разбавленной низкоразмерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; b_albert78@mail.ru;

² Дагестанский научный центр РАН; Россия, 367025, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45;

³ Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а

Методом Монте-Карло исследованы термодинамические и критические свойства сильно разбавленной низкоразмерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20\text{--}120$. Построены зависимости термодинамических параметров от температуры. На основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что внесение замороженных немагнитных примесей в чистую систему индуцирует фазовый переход второго рода. Этим методом вычислены температуры фазовых переходов для всех рассмотренных значений p . Определены статические критические индексы восприимчивости χ , намагниченности β , теплоемкости α и индекс радиуса корреляции ν для рассмотренной модели при концентрации спинов $p = 0.70, 0.65$. Показано, что вычисленные критические индексы в сильно разбавленном режиме в пределах погрешности удовлетворяют соотношениям теории конечно-размерного скейлинга.

Ключевые слова: критические индексы, кумулянты Биндера, примеси, фазовые переходы, замороженный беспорядок, универсальность, модель Поттса.

Методы Монте-Карло (МК) оказались востребованными для исследования критических свойств магнитных систем с немагнитными примесями. Это связано с тем, что неидеальные черты, являющиеся неотъемлемой частью реальных твердых тел, оказывают значительное влияние на фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) магнитных систем. Существующие же теоретические методы перестают работать в сильно разбавленном режиме, а результаты экспериментальных исследований сильно зависят не только от метода и конкретного образца, но и от способа приготовления образца [1].

Применение методов МК позволило изучать более реалистичные модели с присутствующими им примесями и дефектами структур, учитывать усложняющие факторы, всегда присутствующие в реальных материалах [1–3].

Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости C для сильно разбавленной АФ модели Поттса

виями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 9-144$. При построении сильно разбавленной модели Поттса следует учесть следующие особенности: в узлах треугольной решетки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из $q > 2$ состояний, и немагнитные примеси; немагнитные примеси расположены случайно и фиксированы в узлах решетки.

Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости χ для сильно разбавленной АФ модели Поттса на треугольной решетке.

На рис. 1–3 представлены характерные зависимости теплоемкости C , восприимчивости χ и параметра порядка m_{AF} от температуры T при концентрации спинов $p = 0.90, 0.80, 0.70, 0.65$. Здесь и далее погрешность данных не превышает размеры использованных символов на рисунках. Как видно из рис. 1 и 2, наличие немагнитных примесей приво-

Основной целью данной работы является исследование термодинамических свойств и расчет критических параметров сильно неупорядоченных систем, описываемых антиферромагнитной (АФ) моделью Поттса на треугольной решетке при концентрации спинов $p = 0.65$ на основе методов Монте-Карло. Интерес к АФ модели Поттса на треугольной решетке обусловлен тем, что только на этой решетке наблюдается фазовый переход. Кроме того, многие физические объекты и явления описываются этой моделью на треугольной решетке [4].

Рассматривались системы с периодическими граничными усло-

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид [5].

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

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

В работе [6] на основе метода кумулянтов Биндера [7, 8] было показано, что в сильно разбавленной модели

Поттса при $p = 0.65$ и $T = T_c = 0.35$ (4) наблюдается ФП второго рода. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [9–13].

Рис. 3. Температурная зависимость параметра порядка m_{AF} для сильно разбавленной АФ модели Поттса на треугольной решетке

параметр V_n для определения критического индекса ν удовлетворяют следующим аналитическим выражениям [14, 15]:

$$m_{AF} \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (2)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (3)$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (4)$$

где g_{V_n} – некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать:

$$V_n = \frac{\langle m_{AF}^n E \rangle}{\langle m_{AF}^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad (n = 1, 2, 3), \quad (5)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m_{AF}^2 \rangle^2} \left[\langle m_{AF}^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m_{AF}^4 \rangle \langle m_{AF}^2 E \rangle}{\langle m_{AF}^2 \rangle^2} + \langle m_{AF}^4 E \rangle \right], \quad (6)$$

где $\beta = 1/T$, T – температура.

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L , как правило, используются другие выражения, например [8]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (7)$$

где A – некоторый коэффициент.

Далее для расчета КИ α , β , γ и ν строились зависимости C , m_{AF} , χ , и V_n от L в двойном логарифмическом масштабе при $T = T_C$ и $p = 0.70, 0.65$. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения $\frac{\alpha}{\nu} = 0.362(3)$, $\frac{\beta}{\nu} = 0.146(2)$, $\frac{\gamma}{\nu} = 1.647(3)$ и $\frac{1}{\nu} = 0.98(3)$ при $p = 0.65$. Затем с использованием значения $\nu = 1.02(2)$, полученного в рамках данного исследования, были определены следующие индексы: $\alpha = 0.369(3)$, $\beta = 0.148(2)$,

дид к сглаживанию максимумов теплоемкости и восприимчивости, а также к их уменьшению с ростом концентрации примесей.

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, нами на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) рассчитывались статические критические индексы (КИ): теплоемкости α , восприимчивости γ и параметра порядка β . Из соотношений этой теории следует, что для достаточно большой системы с ПГУ при температуре $T = T_C$, параметр порядка m_{AF} , восприимчивость χ и

$\gamma = 1.685(3)$, $\nu = 1.02(1)$. Полученные критические индексы в пределах погрешности удовлетворяют соотношению теории КРС $d\nu = \gamma + 2\beta$. Более подробно методика определения КИ с использованием теории КРС приведена в работе [16].

Таким образом, в настоящей работе на основе теории КРС рассчитаны статические КИ: теплоемкости α , восприимчивости γ , параметра порядка β и индекс радиуса корреляции ν для двумерной сильно разбавленной АФ модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке при $p = 0.65$. Рассчитанные значения отношений КИ $\frac{\alpha}{\nu}$, $\frac{\beta}{\nu}$, $\frac{\gamma}{\nu}$ и $\frac{1}{\nu}$ удовлетворяют соотношениям теории КРС $\frac{2\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-02-00214-а.

Литература

1. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трехмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // УФН. – 2003. – Т. 173. – С. 175–200.
2. Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком // УФН. – 1995. – Т. 165, № 5. – С. 481–528.
3. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Бабаев А.Б. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с замороженным беспорядком на кубической решетке // ЖЭТФ. – 2004. – Т. 126, № 6. – С. 1377–1383.
4. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Кассан-Оглы Ф.А., Прошкин А.И. Фрустрации и фазовые переходы в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // Письма в ЖЭТФ. – 2014. – Т. 100, № 4. – С. 267–271.
5. Wu F.Y. The Potts model // Rev. Mod. Phys. – 1982. – V. 54. – P. 235–268.
6. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Ataeva G.Y. Investigation of the thermodynamic properties and phase transitions in a strongly diluted three-vertex antiferromagnetic Potts model by the Monte Carlo method // Physics of Solid State. – 2017. – V. 59. – P. 141–144.
7. Eichhorn K., Binder K. Monte Carlo investigation of the three-dimensional random-field three-state Potts model // J. Phys.: Cond. Matter. – 1996. – V. 8. – P. 5209–5227.
8. Loison D., Schotte K.D. First and second order transition in frustrated XY systems // Eur. Phys. J. B. – 1998. – V. 5. – P. 735–743.
9. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Y. Phase transitions in 3D site-diluted Potts model with spin states $q = 4$ // Solid State Phenomena. – 2011. – V. 168–169. – P. 357–360.
10. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Aznaurova G.Y. Investigation of the critical properties in the 3d site-diluted Potts model // Solid State Phenomena. – 2009. – V. 152–153. – P. 571–574.
11. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я. Фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса при $q = 3$ на треугольной решетке // Физика низких температур. – 2013. – Т. 39, № 2. – С. 194–198.
12. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Фазовые переходы в двумерной ферро- и антиферромагнитной моделях Поттса на треугольной решетке // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2012. – Т. 142, № 6. – С. 1189–1195.

13. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Трикритическая точка трехмерной модели Поттса ($q = 4$) с замороженным немагнитным беспорядком // Письма в ЖЭТФ. – 2014. – V. 99, № 9. – С. 618–622.

14. Loison D. Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians // Physics Letters. – 1999. – V. 257. – С. 83–87.

15. Fisher M.E., Barber M.N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region // Phys. Rev. Lett. – 1972. – № 28. – P. 1516.

16. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я., Ризванова Т.Р., Джамалутдинов М.Р. Компьютерное моделирование критического поведения двумерной слабо разбавленной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке // Физика твердого тела. – 2018. – V. 60, № 6. – С. 1169–1172.

Поступила в редакцию 15 февраля 2018 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-2-40-44

Thermodynamic and critical behavior of a strongly diluted low-dimensional antiferromagnetic Potts model on a triangular lattice

A.B. Babaev^{1,2}, A.K. Murtazaev^{1,3}, G.Ya. Ataeva¹

¹ *Institute of Physics, Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences; Russia, 367003, Makhachkala, M. Yaragsky st., 94; b_albert78@mail.ru;*

² *Dagestan Scientific Center of Russian Academy of Sciences; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 45;*

³ *Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a*

The thermodynamic and critical properties of the highly dilute low-dimensional antiferromagnetic Potts model on a triangular lattice are studied by the Monte Carlo method. Calculations were carried out for systems with periodic boundary conditions. Systems with linear dimensions $L \times L = N$, $L = 20\text{--}120$ were studied. Dependences of thermodynamic parameters on temperature are constructed. Based on the fourth Binder order cumulant method, it is shown that the introduction of frozen non-magnetic impurities into a pure system induces a second-order phase transition. This method calculates the phase transition temperatures for all the $p = 0.70, 0.65$ values considered. Static critical indices of susceptibility γ , magnetization β , heat capacity α and index of correlation radius ν for the model considered at spins concentration $p = 0.70, 0.65$ are determined. It is shown that the calculated critical indices in a strongly diluted regime within the error limits satisfy the relations of the theory of finite-dimensional scaling.

Keywords: *critical exponents, Binder cumulants, impurities, phase transitions, quenched disorder, universality, Potts model.*

Received 15 February, 2018