

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СЛАБО НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ $Q = 3$

В.Н. Бородихин

доцент, к.ф.-м.н., e-mail: borodikhin@inbox.ru

М.М. Михайловский

студент, e-mail: maxmihailovski@mail.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. В работе исследовано поведение слабо неупорядоченной трёхмерной модели Поттса с числом спиновых состояний $q = 3$, со спиновой концентрацией 0,95 методом коротковременной динамики. Уточнено значение критической температуры. Вычислены динамический индекс z и критический индекс ν с учётом поправок к скейлингу.

Ключевые слова: фазовые переходы, модель Поттса, влияние примесей, критическая динамика.

1. Введение

Проблема фазовых переходов в неупорядоченных системах представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Это связано с тем, что большинство реальных твёрдых тел содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их термодинамические характеристики и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при фазовых переходах. В настоящее время наиболее интересным является исследование влияния замороженных примесей на критические свойства спиновых систем [1].

Исследования показали, что присутствие замороженных примесей изменяет при фазовых переходах свойства лишь тех магнетиков, теплоёмкость которых в однородном состоянии испытывает расходимость в критической точке. Данному критерию удовлетворяют только системы, эффективный гамильтониан которых вблизи критической точки изоморфен модели Изинга. Для разбавленных изингоподобных систем было получено хорошее согласие теоретических расчётов с результатами эксперимента и численного исследования [2, 3].

Представляет интерес исследование неупорядоченной модели Поттса, которая в пределе двух спиновых состояний сводится к модели Изинга, и дефекты структуры могут оказывать существенное влияние на критические свойства данной модели. В частности, представляет интерес исследование критического

поведения слабо неупорядоченной модели Поттса с числом спиновых состояний $q = 3$, поскольку существующие в настоящее время результаты являются неоднозначными. Так, исследования слабо неупорядоченной трёхкомпонентной модели Поттса в равновесном случае [4] показали, что внесение даже малого количества примесей в систему приводит к смене типа фазового перехода с первого на второй. В тоже время исследования [5] на основе теории конечно-размерного скейлинга не выявили смену типа фазового перехода при спиновой концентрации $p = 0,95$. Таким образом, представляет интерес исследование слабо неупорядоченной трёхкомпонентной модели Поттса с использованием методов, не применявшихся ранее для исследования данной модели, в частности, методом коротковременной динамики.

2. Трёхмерная модель Поттса с примесями

Модель Поттса с числом спиновых состояний $q = 3$ находит широкое применение при описании ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред, таких как сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких как $SrTiO_3$ или $Pb_3(PO_4)_2$ относятся к классу универсальности трёхкомпонентной модели Поттса [6].

Данная модель имеет следующие основные особенности. В узлах кубической решётки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из 3-х спиновых состояний, и немагнитные примеси. Немагнитные атомы примеси распределены случайным образом и являются фиксированными в узлах решётки. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, в случае, если они находятся в разных состояниях или если в одном из узлов находится немагнитная примесь, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях, где J — обменный интеграл.

Гамильтониан модели имеет вид

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

где $S_i, i = 1, 2, 3, \delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & S_i = S_j \\ 0, & S_i \neq S_j \end{cases}$, и

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{в узле находится спин;} \\ 0, & \text{в узле находится примесь.} \end{cases}$$

Известно, что в чистой модели Поттса с состоянием $q > q_c(d)$, где d — размерность системы, наблюдается фазовый переход 1-го рода, а для $q < q_c(d)$ фазовый переход 2-го рода. Для двумерной модели Поттса величина $q_c(d = 2) = 4$ [7], в то время как для трёхмерной модели $q_c(d = 3) = 2,45$ [8]. К настоящему времени также известно, что присутствие замороженного беспорядка в модели Поттса с состоянием $q > q_c$ может изменить порядок фазового перехода. В [9] было доказано, что для низкоразмерных систем $d \leq 2$, описываемых моделью

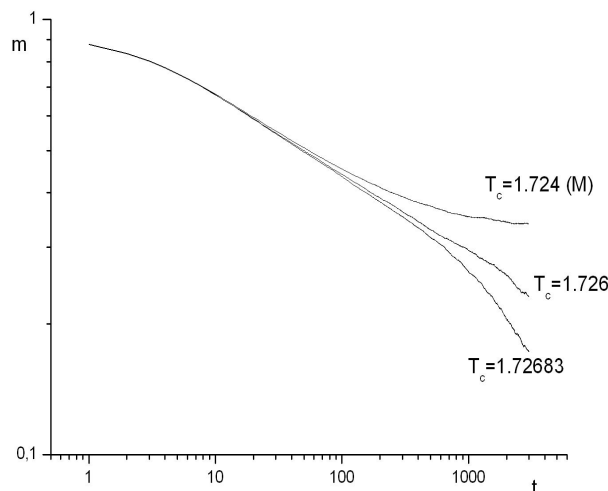


Рис. 1. Критическая температура $p = 0,95$

Поттса с $q > q_c(d)$, наличие сколь угодно малой величины замороженного беспорядка достаточно, чтобы изменить фазовый переход 1-го рода на фазовый переход 2-го рода. Для трёхмерной модели Поттса с $q = 4$ при концентрациях примесей $c = 0,2$ и выше фазовый переход 1-го рода меняется на фазовый переход 2-го рода [10]. Для трёхмерной модели Поттса с $q = 2$, которая соответствует трёхмерной модели Изинга, при примесных концентрациях выше порога примесной перколяции наблюдается фазовый переход второго рода.

3. Компьютерное моделирование

В работе применялся алгоритм Метрополиса. В качестве намагниченности m для разбавленной модели Поттса использовалось следующее выражение [11]:

$$m = \frac{q \left(\frac{N_{max}}{N} \right) - 1}{q - 1}, \tag{2}$$

где $N_{max} = \max\{N_1, N_2, N_3\}$, N_1 — число спинов в состоянии с $q = 1$, N_2 — число спинов в состоянии с $q = 2$, N_3 — число спинов в состоянии с $q = 3$, $N = pL^3$.

Рассмотрим динамическое поведение слабо неупорядоченной трёхкомпонентной модели Поттса. Если исследование статических свойств трёхкомпонентной модели Поттса проводилось и ранее [4, 5], то исследования динамических свойств модели до сих пор не проводились.

При исследовании динамических свойств модели Поттса применялся метод коротковременной динамики, основная особенность которого заключается

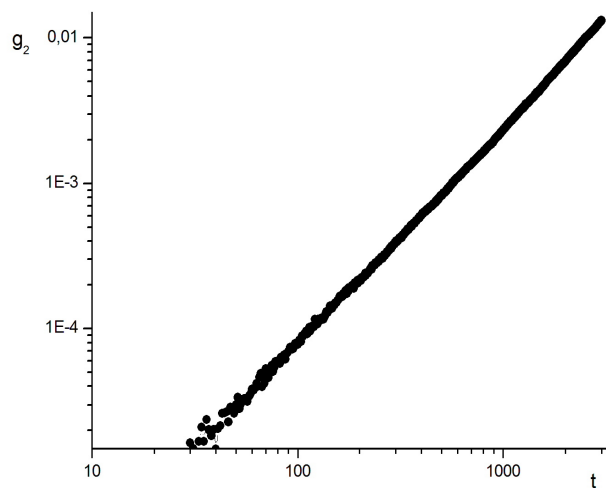


Рис. 2. Временная зависимость кумулянта 2-го порядка

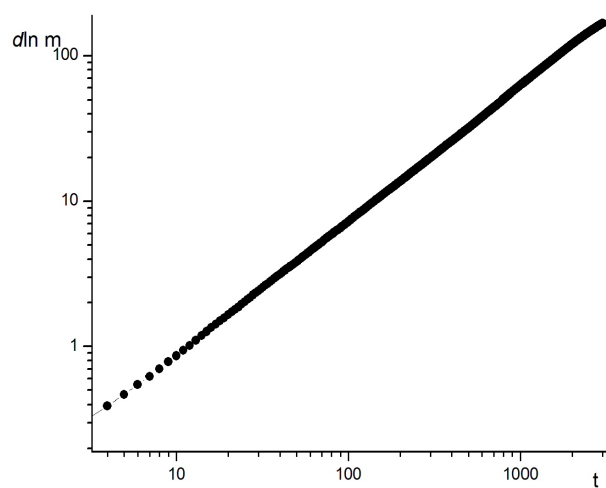


Рис. 3. Временная зависимость логарифмической производной

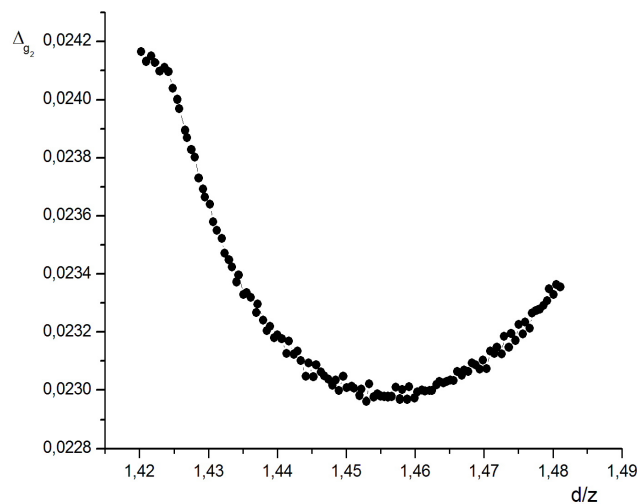


Рис. 4. Минимум погрешности для показателя d/z

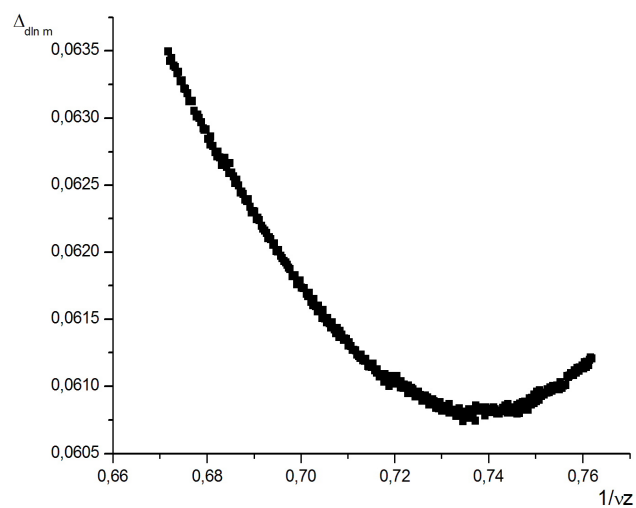


Рис. 5. Минимум погрешности для индекса логарифмической производной

в том, что информация о критическом поведении системы получается из относительно малого макроскопического промежутка времени на ранней стадии развития системы в критической точке или её окрестности.

Для решёток с достаточно большими размерами L динамическая скейлинговая зависимость для параметра порядка m приобретает следующий вид [12] в критической области:

$$m(t, \tau) = t^{\beta/\nu z} F(t^{1/\nu z}, \tau), \quad (3)$$

где t — время, $\tau = \frac{T-T_c}{T_c}$ — приведённая температура, β — критический индекс для параметра порядка, определяемый соотношением

$$m(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad (4)$$

ν — критический индекс, определяющий температурную зависимость корреляционной длины

$$\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (5)$$

z — динамический критический индекс, характеризующий поведение времени релаксации t_p вблизи критической точки:

$$t_p \sim |T_c - T|^{-\nu z}. \quad (6)$$

Для независимого определения критического индекса z использовался кумулянт Биндера второго порядка:

$$U_2(t) = \frac{\langle m(t)^2 \rangle}{\langle m(t) \rangle^2} - 1 \quad (7)$$

со скейлинговой зависимостью

$$U_2(t) \sim t^{d/z}, \quad (8)$$

где d — размерность системы.

Для определения критического показателя ν вычислялась логарифмическая производная

$$\partial_\tau \ln m(t, \tau)|_{\tau=0} \sim t^{1/\nu z}. \quad (9)$$

Полученные результаты уточнялись с использованием поправок к скейлингу, которые определялись методом наименьших квадратов из выражения

$$X(t) = t^\delta (A + Bt^{-\omega/z}), \quad (10)$$

где $X(t)$ — соответствующая физическая величина, δ — уточняемый критический показатель, A, B — коэффициенты, ω — показатель поправки к скейлингу.

4. Основные результаты

Проводилось моделирование трёхмерной слабаразбавленной модели Поттса с $q = 3$. Исследовалась спиновая конфигурация $p = 0,95$. Линейный размер системы брался равным $L = 128$.

Для концентрации $p = 0,95$ была уточнена критическая температура $T_c = 1,726$. На рис. 1 приведён график намагниченности при найденной критической температуре $T_c = 1,726$, видно, что при данной температуре график почти ложится на прямую, что и соответствует критической точке. В тоже время график для температуры $T = 1,724$, найденной в [4], загибается вверх, что соответствует случаю $T < T_c$. Для примера также приведён график температуры $T < T_c$, $T = 1,72683$.

Производилось вычисление динамической зависимости кумулянта второго порядка и логарифмической производной $\Delta T = 0,002$. Статистическое усреднение осуществлялось по 6800 примесным конфигурациям. Результаты моделирования приведены на рис. 2–3. С учётом поправок к скейлингу найдены значения показателей $d/z = 1,452 \pm 0,0011$ ($\omega/z = 0,392 \pm 0,004$), $1/\nu z = 0,73457 \pm 0,0008$ ($\omega/z = 0,40 \pm 0,0045$), соответствующие минимумы погрешностей показаны на рис. 4–5. Из полученных значений показателей, соответственно, значение динамического критического индекса $z = 2,0657 \pm 0,0022$, а значение критического индекса $\nu = 0,6590 \pm 0,003$.

5. Заключение

Исследование модели Поттса с $q = 3$ в статическом случае [4, 11] при малых концентрациях примесей показало, что внесение примесей приводит к новому типу критического поведения, при этом в системе реализуется фазовый переход второго рода. В то время как для однородной модели реализуется фазовый переход первого рода. Таким образом, в модели Поттса с $q = 3$ внесение даже малого количества примесей меняет характер критического поведения, происходит смена фазового перехода первого рода на второй. Проведённые, методом коротковременной динамики исследования подтвердили данные результаты: уже для малой концентрации примесей $p = 0,95$ фазовый переход 1-го рода меняется на фазовый переход 2-го рода. Значение динамического критического показателя z для модели Поттса с учётом поправок к скейлингу имеет немного меньшее значение по сравнению с индексом z , найденным для модели Изинга при той же концентрации примесей [3]. Возможно, это связано с влиянием дополнительной спиновой компоненты. Значение индекса ν близко к значению, найденному в [4] для модели Поттса с концентрацией примесей $p = 0,95$ статическими методами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фольк Р., Головач Ю., Яворский Т. Критические показатели трёхмерной слабо разбавленной замороженной модели Изинга // Успехи физ. наук. 2003. Т. 173. С. 175.
2. Pelissetto A., Vicari E. Randomly dilute spin models: a six-loop field-theoretic study // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 6393.
3. Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Krinitsyn A.S., Vakilov A.N., Pospelov E.A. Short-time dynamics and critical behavior of three-dimensional site-diluted Ising model. arXiv: 1005.5218v1.
4. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Особенности фазовых переходов в трёхмерных разбавленных структурах, описываемых моделью Поттса // Журнал эксперим. и теор. физики. 2009. Т. 136. С. 520.
5. Ballesteros H.G. et al. Effect of Dilution on First Order Transitions: The Three Dimensional Three States Potts Model // Phys. Rev. B. 2000. V. 61. P. 3215.
6. Wu F.Y., The Potts model // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. P. 235.
7. Loulidi M. Some analytical results on the bond diluted q-state Potts model // Physica A. 2000. V. 287. P. 177.
8. Guttman A.J., Enting I.G. Series studies of the Potts model: III. The 3-state model on the simple cubic lattice // J. Phys. A. 1994. V. 27. P. 5801.
9. Aizenman M., Wehr J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2503.
10. Chatelain C., Berche B., Janke W., Berche P.-E. Monte Carlo Study of Phase Transitions in the Bond-Diluted 3D 4-State Potts Model // Nuclear Physics B. 2005. V. 719/3. P. 275.
11. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Азнаурова Г.Я. Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса // Физика твёрдого тела. 2008. Т. 50. С. 703.
12. Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics // Comp. Phys. Comm. 1999. V. 121. P. 338.

**COMPUTER SIMULATION OF THE NONEQUILIBRIUM CRITICAL BEHAVIOR
OF THE WEAKLY DISORDERED POTTS MODEL WITH THE NUMBER
OF SPIN STATES $Q = 3$.**

V.N. Borodikhin

Associate Professor, Ph.D.(Phys.-Math.), e-mail: borodikhin@inbox.ru

M.M. Mikhailovskiy

Student, e-mail: maxmikhailovski@mail.ru

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. In this paper, by the method of short-time dynamics the behavior of weakly disordered three-dimensional Potts model with the number of spin components equal to three was studied. The critical temperature value has been clarified. For spin concentrations 0.95 critical indexes z and ν were calculated.

Keywords: phase transitions, Potts model, effect of impurities, critical dynamics.

REFERENCES

1. Fol'k R., Golovach Yu., and Yavorskii T. Kriticheskie pokazateli trekhmernoii slabo razbavlennoii zamorozhennoii modeli Izinga. Uspekhi fiz. nauk, 2003, vol. 173, pp. 175. (in Russian)
2. Pelissetto A., Vicari E. Randomly dilute spin models: a six-loop field-theoretic study. Phys. Rev. B, 2000, vol. 62, pp. 6393.
3. Prudnikov P.V., Prudnikov V.V., Krinitsyn A.S., Vakilov A.N., and Pospelov E.A. Short-time dynamics and critical behavior of three-dimensional site-diluted Ising model. arXiv: 1005.5218v1.
4. Murtazaev A.K., Babaev A.B., and Aznaurova G.Ya. Osobennosti fazovykh perekhodov v trekhmernykh razbavlennykh strukturakh, opisyvaemykh model'yu Potts'a. Zhurnal eksperim. i teor. fiziki, 2009, vol. 136, pp. 520. (in Russian)
5. Ballesteros H.G. et al. Effect of Dilution on First Order Transitions: The Three Dimensional Three States Potts Model Phys. Rev. B, 2000, vol. 61, pp. 3215.
6. Wu F.Y. The Potts model. Rev. Mod. Phys., 1982, vol. 54, pp. 235.
7. Loulidi M. Some analytical results on the bond diluted q-state Potts model. Physica A, 2000, vol. 287, pp. 177.
8. Guttmann A.J. and Enting I.G. Series studies of the Potts model: III. The 3-state model on the simple cubic lattice. J. Phys. A, 1994, Vvol. 27. pp. 5801.
9. Aizenman M. and Wehr J. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. Phys. Rev. Lett., 1989, vol. 62, pp. 2503.
10. Chatelain C., Berche B., Janke W., and Berche P.E. Monte Carlo Study of Phase Transitions in the Bond-Diluted 3D 4-State Potts Model. Nuclear Physics B, 2005, vol. 719/3, pp. 275.
11. Murtazaev A.K., Babaev A.B., and Aznaurova G.Ya. Issledovanie vliyaniya vmorozhennykh nemagnitnykh primesei na fazovye perekhody v trekhmernoii modeli Potts'a. Fizika tverdogo tela, 2008, vol. 50, pp. 703. (in Russian)
12. Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics. Comp. Phys. Comm., 1999, vol. 121, pp. 338.

Дата поступления в редакцию: 07.09.2019