

# Компьютерное моделирование критического поведения сильно разбавленных низкоразмерных антиферромагнитных систем на треугольной решетке

А.Б. Бабаев<sup>1,2</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Махачкала, Россия

<sup>2</sup>Дагестанский научный центр РАН, Махачкала, Россия

<sup>3</sup>Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: b\_albert78@mail.ru

Статья поступила в редакцию 20 марта 2018 г., после переработки 10 мая 2018 г., опубликована онлайн 26 октября 2018 г.

Проведено компьютерное моделирование критического поведения двумерной сильно разбавленной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрации спинов  $p$  равной 0,70 и 0,65. Рассматривались системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 20-144$ . На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , параметра порядка  $\beta$  и критический индекс  $\nu$  для радиуса корреляции. Численно показано, что рассчитанные критические индексы варьируются с изменением концентрации спинов  $p$ , в то время как отношения  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$  в пределах статистических ошибок остаются неизменными, проявляя слабую универсальность критического поведения неупорядоченных систем.

Ключевые слова: низкоразмерные антиферромагнитные системы, модель Поттса, скейлинг.

## Введение

Применение методов Монте-Карло для исследования критических свойств магнитных систем стало отправной точкой, позволяющей изучать более реалистичные модели с примесями и дефектами структуры и учитывать усложняющие факторы, всегда присутствующие в реальных материалах [1–3]. Это связано с тем, что существующие теоретические методы перестают работать в сильно разбавленной системе, а результаты экспериментальных исследований существенно зависят не только от метода, но и от способа изготовления образца [2].

В связи с этим основной задачей данной работы является расчет на основе методов Монте-Карло критических параметров сильно неупорядоченных систем, описываемых антиферромагнитной (АФ) моделью Поттса на треугольной решетке при концентрации спинов  $p = 0,70$  и  $p = 0,65$ .

Интерес к рассматриваемой модели обусловлен тем, что в результате многочисленных исследований на

разнообразных решетках обнаружена особенность. Треугольная решетка оказалась единственной, в которой наблюдается фазовый переход (ФП) при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями [4]. Кроме того, рассматриваемая модель описывает многие физические свойства многокомпонентных сплавов, адсорбированных пленок и жидких кристаллов в пористой аэрогелевой среде [5].

## Модель и метод исследования

Модель Поттса представляет собой обобщение модели Изинга, в которой спины могут принимать не два, а одно из  $q$  значений. Основные свойства этой модели рассмотрены в обзоре [5].

Гамильтониан этой модели имеет вид

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

где  $J$  — параметр обменного АФ взаимодействия ближайших соседей ( $J < 0$ );  $\theta_{i,j}$  — угол между взаимодей-

ствующими спинами  $S_i-S_j$ , причем  $\theta_{i,j} = 2\pi n/q$  и может принимать значения  $0, 120, 240^\circ$  при  $n = 0, 1, 2$  соответственно; спин  $S_i$  может находиться в одном из  $q = 3$  состояний  $S_i = 1, 2, 3$ ;  $\rho_i, \rho_j$  — случайные переменные, описываемые функцией распределения

$$P(\rho_i) = p\delta(1-\rho_i) + (1-p)\delta(\rho_i) \quad (2)$$

и характеризующие распределенные по узлам решетки замороженные немагнитные примеси.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями. Исследовались системы с линейными размерами  $L \times L = N, L = 20-144$ . Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все ближайшие соседи рассматриваемого спина находились в разных состояниях. При этом фрустрация, наблюдаемая на треугольной решетке в случае АФ модели Изинга ( $q = 2$ ), будет отсутствовать для модели Поттса с  $q = 3$  (см. рис. 1). Ферро- и антиферромагнитные модели Поттса на треугольной решетке в однородном состоянии при различных усложняющих факторах нами исследованы в работах [6-8]. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0$  для системы с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 200\tau_0$ . Для самой большой системы  $L = 144, \tau_0 = 2 \cdot 10^3$  МК шагов/спин. Кроме того, для повышения точности расчетов проводилось усреднение по 10 различным начальным конфигурациям. Эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров. Кроме того, для сильно неупорядоченных систем осуществлялось усреднение по 10000 различным конфигурациям распределения примесей в решетке.

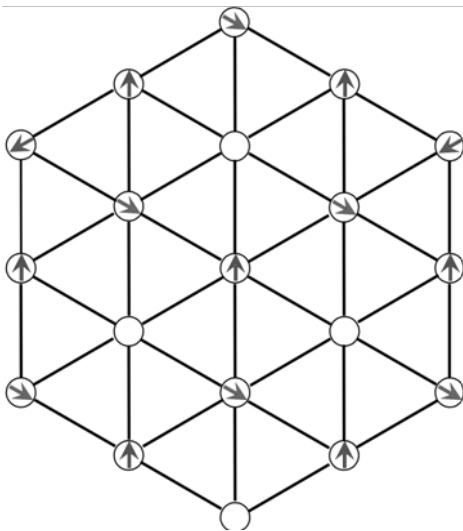


Рис. 1. Двумерная разбавленная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке.

### Результаты компьютерного моделирования

Влияние замороженного немагнитного беспорядка на фазовые переходы в ферро- и антиферромагнитных моделях Поттса на треугольной и кубической решетках нами исследованы в работах [9-12]. В этих работах подробно исследовались термодинамические параметры, такие как параметр порядка  $m_{AF}$ , восприимчивость  $\chi$ , теплоемкость  $C$  и кумулянты Биндера четвертого порядка по энергии  $V_E$  и по параметру порядка  $U_{m_{AF}}$  в зависимости от степени разбавления. Было продемонстрировано, что для модели Поттса с  $q = 3$  на треугольной решетке при концентрации примесей  $c \geq 0,1, c = 1 - p$ , происходит замена ФП первого рода на ФП второго рода. Кроме того, на основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка [13] и гистограммного анализа данных [14] были определены критические температуры в сильно разбавленной системе ( $p = 0,70; 0,65$ ). Определенные этим методом критические температуры сильно разбавленных систем  $T_c(p)$  в единицах  $|J|/k_B$  равны:  $T_c(0,70) = 0,42(3), T_c(0,65) = 0,35(4)$ . Более подробно методика определения критических температур этими методами рассмотрена в работах [15-17].

В представленной работе для сильно разбавленных систем ( $p = 0,70; 0,65$ ), в которых наблюдается ФП второго рода, на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) рассчитаны статические критические индексы (КИ) теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , параметра порядка  $\beta$  и критический индекс для радиуса корреляции  $\nu$ . Из соотношений этой теории следует, что для достаточно большой системы с периодическими граничными условиями при температуре  $T = T_c$  параметр порядка  $m_{AF}$ , восприимчивость  $\chi$  и параметр  $V_n$  для определения критического индекса  $\nu$  удовлетворяют следующим аналитическим выражениям [18,19]:

$$m_{AF} \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (3)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (4)$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (5)$$

где  $g_{V_n}$  — некоторая постоянная, а в качестве  $V_n$  могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, \quad (6)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[ \langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (7)$$

где  $\beta = 1/T, T$  — температура.

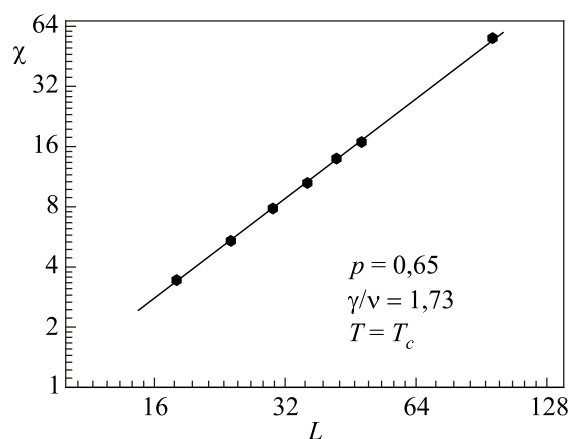


Рис. 2. Зависимость параметра порядка  $m_{AF}$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_c$ .

Для аппроксимации зависимости теплоемкости от  $L$ , как правило, используются другие выражения, например [20]:

$$C(L) = C_0 + AL^{\alpha/\nu}, \quad (8)$$

где  $C_0$  — постоянная,  $A$  — некоторый коэффициент.

Для расчета КИ  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ ,  $\alpha$  строились зависимости  $m_{AF}$ ,  $\chi$ ,  $V_n$  и  $C$  от  $L$ . На рис. 2–5 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметра порядка  $m_{AF}$ , восприимчивости  $\chi$ , параметра  $V_n$  и теплоемкости  $C$  от линейных размеров решетки  $L$  для двумерной АФ сильно разбавленной модели Поттса на треугольной решетке при  $T = T_c$  и  $p = 0,65$ . Погрешность данных на этих рисунках не превышает размер символов. Аналогичным образом были получены зависимости и для систем при  $p = 0,70$ . Обратим внимание на то, что данные, полученные для всех рассмотренных термодинамических параметров, незначительно отклоняются от прямой при малых значениях  $L$ . Анализ данных, выполненный

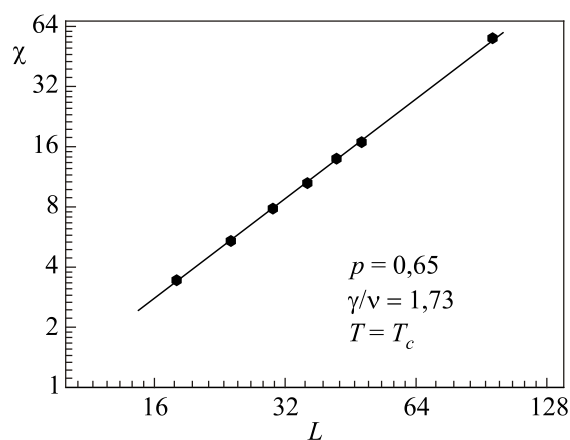


Рис. 3. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_c$ .

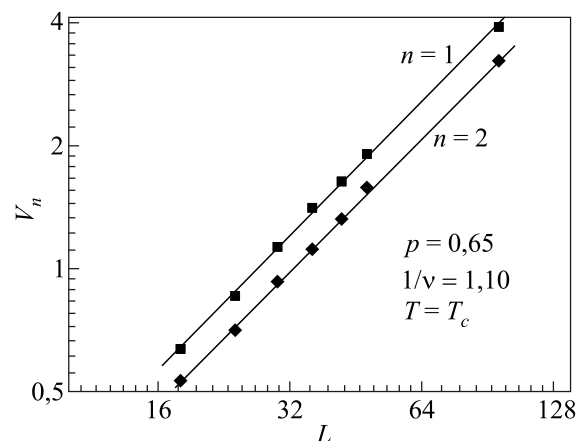


Рис. 4. Зависимость параметра  $V_n$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_c$ .

с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения при концентрации спинов  $p = 0,70$ :  $\alpha/\nu = 0,380(3)$ ,  $\beta/\nu = 0,130(2)$ ,  $\gamma/\nu = 1,732(3)$ ,  $1/\nu = 1,19(3)$  и при  $p = 0,65$ :  $\alpha/\nu = 0,222(3)$ ,  $\beta/\nu = 0,137(2)$ ,  $\gamma/\nu = 1,730(3)$ ,  $1/\nu = 1,10(7)$ . Затем, с использованием значений  $\nu$ , полученных в рамках данного исследования, были определены следующие индексы при  $p = 0,70$ :  $\alpha = 0,319(3)$ ,  $\beta = 0,109(2)$ ,  $\gamma = 1,455(3)$ ,  $\nu = 0,84(1)$  и при  $p = 0,65$ :  $\alpha = 0,202(9)$ ,  $\beta = 0,125(9)$ ,  $\gamma = 1,574(9)$ ,  $\nu = 0,91(4)$ . Полученные критические индексы в пределах погрешности удовлетворяют соотношению теории КРС  $d\nu = \gamma + 2\beta$ .

### Заключение

В настоящей работе на основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , параметра порядка  $\beta$  и индекс радиуса корреляции  $\nu$  двумерной сильно разбавленной АФ модели Поттса с  $q = 3$  на треугольной решетке при концентрациях спинов  $p = 0,70$

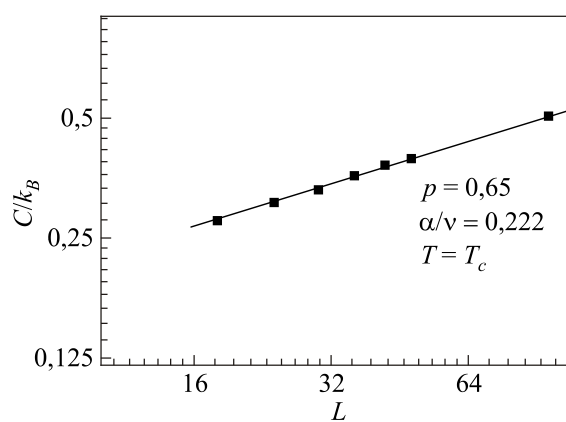


Рис. 5. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_c$ .

и  $p = 0,65$ . Численно показано, что соответствующие отношения КИ  $\beta/\nu$  и  $\gamma/\nu$  при различных значениях концентраций спинов  $p$  в пределах статистических ошибок находятся в хорошем согласии друг с другом, в то время как значения самих индексов  $\beta$  и  $\gamma$  сильно варьируются. Как известно из работ [21,22], такое поведение КИ указывают на слабую универсальность критического поведения рассматриваемой сильно разбавленной модели.

1. В.С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
3. А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, *ФНТ* **41**, 794 (2015) [*Low Temp. Phys.* **41**, 608 (2015)].
4. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 5117 (1995).
5. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
6. A.B. Babaev, A.K. Murtazaev, E.M. Suleimanov, and T.R. Rizvanova, *Phys. Solid State* **58**, 2074 (2016).
7. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, *ФНТ* **39**, 194 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 147 (2013)].
8. А.К. Муртазаев and А.В. Babaev, *J. Exp. Theor. Phys.* **115**, 6, 1042 (2012).
9. А.К. Муртазаев, А.В. Babaev, and G.Ya. Ataeva, *Phys. Solid State* **59**, 141 (2017).
10. A.B. Babaev, A.K. Murtazaev, G.Ya. Ataeva, T.R. Rizvanova, and M.R. Dzamaludinov, *Phys. Solid State* **60**, 1180 (2018).
11. А.К. Муртазаев, А.В. Babaev, and G.Ya. Ataeva, *Phys. Solid State* **57**, 1436 (2015).
12. А.К. Муртазаев, А.В. Babaev, and G.Ya. Aznaurova, *Phys. Solid State* **50**, 733 (2008).
13. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
14. N.A. Alves, B.A. Berg, and R. Villanova, *Phys. Rev. B* **41**, 383 (1990).
15. А.К. Муртазаев and А.В. Babaev, *JETP Lett.* **99**, 535 (2014).
16. А.К. Муртазаев, А.В. Babaev, and G.Y. Aznaurova, *Solid State Phenomena* **152–153**, 571 (2009).
17. А.К. Муртазаев, А.В. Babaev, and G.Ya. Aznaurova, *Solid State Phenomena* **168–169**, 357 (2011).
18. M.E. Fisher and M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
19. D. Loison, *Phys. Lett. A* **257**, 83 (1999).
20. P. Peczas, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
21. О.А. Васильев, Л.Н. Щур, *ЖЭТФ* **117**, 1110 (2000).
22. Jae-Kwon Kim, *Phys. Rev. B* **53**, 3388 (1996).

## Комп'ютерне моделювання критичної поведінки сильно розбавлених низькорозмірних антиферромагнітних систем на трикутній ґратці

А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев

Проведено комп'ютерне моделювання критичної поведінки двовимірної сильно розбавленої антиферромагнітної моделі Поттса з числом станів спіна  $q = 3$  на трикутній ґратці. Розрахунки проводилися для систем з періодичними граничними умовами при концентрації спинів  $p$ , яка дорівнює 0,70 та 0,65. Розглядалися системи з лінійними розмірами  $L \times L = N$ ,  $L = 20–144$ . На основі теорії кінцево-вимірного скейлінгу, розраховано статичні критичні індекси теплоємності  $\alpha$ , сприйнятливості  $\gamma$ , параметра порядку  $\beta$  та критичний індекс  $\nu$  для радіусу кореляції. Чисельно показано, що розраховані критичні індекси варіюються зі зміною концентрації спинів  $p$ , тоді як відношення  $\beta/\nu$  та  $\gamma/\nu$  в межах статистичних помилок залишаються незмінними, проявляючи слабку універсальність критичної поведінки сильно нерегульованих систем.

Ключові слова: низьковимірні антиферромагнітні системи, модель Поттса, скейлінг.

## Computer simulation of critical behavior of strongly diluted low-dimensional antiferromagnetic systems on the triangulare lattice

A.B. Babaev and A.K. Murtazaev

A computer simulation of the critical behavior of the two-dimensional strongly dilute 3-state antiferromagnetic Potts model on a triangular lattice is carried out. Calculations were carried out for systems with periodic boundary conditions at a spin concentration  $p = 0.70, 0.65$ . Systems with linear dimensions  $L \times L = N$ ,  $L = 20–144$  were considered. Based on the theory of finite-dimensional scaling, static critical exponents of the heat capacity  $\alpha$ , susceptibility  $\gamma$ , order parameter  $\beta$ , and critical index  $\nu$  for the correlation radius are calculated. It is shown numerically that the calculated critical indices vary with the change in the spin concentration  $p$ , while the ratios  $\beta/\nu$  and  $\gamma/\nu$  remain unchanged, showing a weak universality of the critical behavior of strongly disordered systems.

Keywords: low-dimensional antiferromagnetic systems, Potts model, scaling.