

КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА С ВМОРОЖЕННЫМ БЕСПОРЯДКОМ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

A. B. Бабаев^{a}, A. K. Муртазаев^{a,b}*

^a Институт физики им. Х. И. Амирханова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия

^b Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
367000, Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 7 марта 2025 г.,
после переработки 19 июня 2025 г.
Принята к публикации 21 июня 2025 г.

Методом Монте-Карло исследовано критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса с вморооженным беспорядком на квадратной решетке при концентрациях спинов $p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.80$. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10\text{--}320$. Для определения критической температуры использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. С применением теории конечно-размерного скейлинга определены критические индексы теплоемкости α , намагниченности β , восприимчивости γ и критический индекс радиуса корреляции ν в рассмотренном интервале разбавлений p . Показано, что класс универсальности слабо разбавленной трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке описывается новым набором критических индексов и этот набор отличается от соответствующего для чистой модели Поттса ($p = 1.00$).

DOI: 10.7868/S3034641X25100086

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение влияния вморооженного беспорядка на фазовые переходы и критическое поведение является одной из важных задач в физике конденсированных сред. Как известно, некоррелированный вморооженный беспорядок существенен, если критический индекс теплоемкости α для однородной спиновой системы положителен. Это правило известно как критерий Харриса [1]. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что для нее критический индекс теплоемкости $\alpha = 0$, что соответствует пограничному случаю. Задача о критическом поведении теплоемкости двумерной модели Изинга при введении малой концентрации примесных связей c , $c = 1 - p$ была решена братьями Доценко [2]. Они обнаружили, что до тех пор пока корреляционная длина ξ не превышает характерное

расстояние между примесями $l_i \propto \exp(\text{const}/c)$, поведение теплоемкости не отличается от случая чистой модели Изинга, т. е. теплоемкость расходится логарифмически:

$$C(\tau) \propto \ln(1/|\tau|),$$

где $\tau = (T - T_c)/T_c$ — приведенная температура. Для значений температуры, более близких к критической, при которых корреляционная длина ξ значительно превышает примесную длину l_i , критическое поведение теплоемкости сменяется на дважды логарифмическое:

$$C(\tau) \propto \ln \ln(1/|\tau|),$$

Из фазовой диаграммы (см. [3]), полученной на основе теоретических приближений, следует, что в двумерной трехкомпонентной ($q = 3$, q — число состояний спина) модели Поттса должен наблюдаться фазовый переход второго рода. Конечно-размерный анализ данных, проведенный для неразбавленной модели Поттса с $q = 3$ на квадратной решетке, подтверждает наличие фазового перехода второго рода

* E-mail: b_albert78@mail.ru

с критическими показателями, характерными для класса универсальности двумерной трехкомпонентной модели Поттса (см. [4]). В соответствии с критерием Харриса [1] для модели Поттса с $q = 3$ примеси должны повлиять на критическое поведение в силу того, что для этой модели теория в неразбавленном режиме предсказывает критический индекс для теплоемкости $\alpha > 0$, $\alpha = 1/3$ [3]. Однако вопрос об универсальности новых критических индексов для рассматриваемой модели Поттса на квадратной решетке в разбавленном режиме остается открытым.

В связи с этим основной целью настоящей работы является исследование критического поведения трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке в разбавленном режиме при концентрациях спинов $p = 0.95, 0.90, 0.80$. Анализ полученных данных позволит выяснить вопрос об универсальности критических индексов для спиновых систем, описываемых трехкомпонентной моделью Поттса на квадратной решетке в разбавленном режиме.

Отдельно следует отметить, что интерес к исследованию модели Поттса на различных двумерных решетках обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, модель Поттса эквивалентна модели типа льда на линии фазового перехода. Для нее вычислена свободная энергия и известно значение критической точки в зависимости от числа состояний спина q [5]. Кроме того, адсорбция благородных газов на адсорбентах типа графита может описываться моделями Поттса с числом состояний спина $q = 3$ или $q = 4$ на различных двумерных решетках [3, 6].

Во-вторых, слабо разбавленная модель Поттса с дискретным состоянием спина имеет большой практический интерес, так как на уровне простейшей модели позволяет включать в рассмотрение макроскопические эффекты беспорядка, всегда присутствующие в реальных объектах.

В-третьих, исследование влияния вмороженного беспорядка на универсальные характеристики критического поведения помимо практического имеет и большой академический интерес.

2. ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ РАЗБАВЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

Приведем здесь формулировку трехкомпонентной разбавленной стандартной модели Поттса на квадратной решетке, используемую для описания различных объектов и явлений в физике конденси-

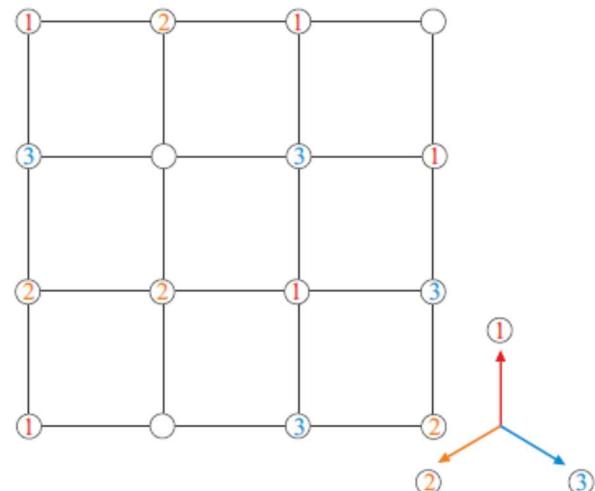


Рис. 1. Трехкомпонентная разбавленная модель Поттса на квадратной решетке

рованных сред. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности [6].

1. В узлах квадратной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в трех симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1). Немагнитные атомы распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (вмороженный беспорядок, quenched disorder).

2. 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 спины находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно, в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [6]

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

где суммирование проводится по всем ближайшим соседям, J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ($J > 0$), $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, $\rho_j = 0$, если в узле находится немагнитная примесь, P_i — обозначение состояний спина с номером i ;

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

Концентрация магнитных спинов определяется выражением

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

Тогда значение $p = 1$ соответствует чистой модели Поттса, а $p = 0$ — пустой, чисто примесной решетке.

3. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алгоритм Вольфа — один из наиболее эффективных кластерных алгоритмов метода Монте-Карло (МК) на сегодняшний день [7]. Методика ее реализации подробно рассмотрена в работах [8–11]. Основная суть алгоритма заключается в следующем.

1. Два случайных числа задают координаты i, j узла на решетке. Если в этом узле находится немагнитная примесь, то генерируются новые случайные числа до тех пор, пока не будут сгенерированы координаты магнитного узла, в котором размещен спин S_i и который в дальнейшем рассматривается как начало роста кластера, к которому присоединяются ближайшие соседние спины S_j с вероятностью $p = 1 - \exp(-K)$, где $K = J/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура в единицах J/k_B , если оба спина находятся в одинаковых состояниях при $J > 0$ и ранее между ними связь не устанавливалась. Каждое состояние спина S_j выбирается с равной вероятностью среди всех его трех различных состояний и запоминается в стеке, и в дальнейшем устанавливается связь между другими ближайшими соседями, если они находятся только в этом состоянии. Рост кластера продолжается до тех пор, пока список непроверенных спинов исчерпывается.

2. Переворот кластера в случае модели Поттса означает присвоение всем спинам, вошедшим в кластер, новое значение спина S'_i с равной вероятностью среди всех его q состояний, которое отлично от старого значения S_i .

По описанному выше алгоритму Вольфа [7] реализовался марковский процесс для систем с периодическими граничными условиями. Расчеты проводились для спиновых систем с линейными размерами $L = 10\text{--}320$ на квадратной решетке. При этом число спинов равно $L \times L = N$, где L изменяется в единицах межатомной длины. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одном из трех состояний. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех

систем с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Для систем с концентрацией магнитных узлов $p = 0.95, 0.90, 0.8$ отсекаемый участок вблизи критической точки составлял соответственно $3 \cdot 10^4, 4 \cdot 10^4, 5 \cdot 10^4$ МК-шагов/спин. Усреднение по различным примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка выполнялось по 1000–3000 различным конфигурациям примесей.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Фазовые переходы в трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 1.00, 0.80$ были исследованы в работах [8, 9]. Численные расчеты подтвердили, что в этой модели в чистом режиме наблюдается фазовый переход второго рода с критическими показателями, соответствующими классу универсальности трехкомпонентной модели Поттса (см. [4]). Вопрос о влиянии немагнитного беспорядка на критическое поведение в этих работах не рассматривался.

В рассматриваемой работе с применением метода МК исследовано критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.95, 0.90, 0.80$. Важное значение при определении критических показателей для различных термодинамических функций имеет точность определения критической температуры $T_c(p)$. В последние годы для определения критической температуры хорошо себя зарекомендовал метод кумулянтов Биндера четвертого порядка U_L [12]:

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

где m — намагниченность системы с линейным размером L . Для определения T_c необходимо определить температурную зависимость кумулянта $U_L(T, p)$, усредненного по примесным конфигурациям с различной реализацией беспорядка для нескольких размеров решетки (L_1, L_2, \dots, L_n). Критическая температура T_c определяется как значение температуры, при котором усредненное значение кумулянта не зависит от линейных размеров решетки (см. рис. 2). Характерная зависимость усредненных кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ от температуры для систем с разными линейными размерами при концентрации спинов $p = 0.90$ показана на рис. 2. Точка пересечения этих кривых соот-

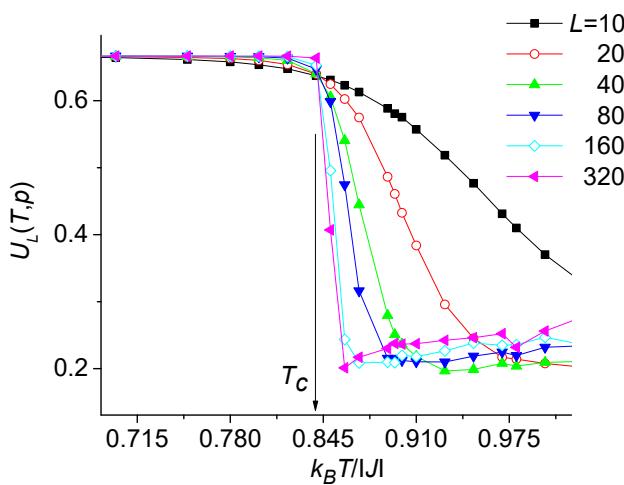


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при $p = 0.90$

ветствует критической температуре $T_c = 0.843(7)$. Здесь и далее погрешность данных не превышает размеры использованных символов на рисунках.

С применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка в работах [8,9] с хорошей точностью были определены критические температуры $T_c(p)$ для трехкомпонентной модели Поттса при $p = 1.00$ и 0.80 . Причем в работе [8] было показано, что температура фазового перехода $T_c(1.0) = 0.994(1)$ в неразбавленном режиме достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением, полученным Поттсом исходя из соображений самодуальности решетки [5,6] по формуле $k_B T_c / |J| = 1/\ln(1 + \sqrt{3}) = 0.99497$.

На следующем шаге нами на основе применения теории конечно-размерного скейлинга [13] рассчитывались статические критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β и критический индекс ν радиуса корреляции. Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с периодическими граничными условиями при температуре T , близкой к критической температуре T_c бесконечно большой системы, может быть представлена в виде

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2)$$

где $t = |T - T_c|/T_c$, ν — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$).

Уравнение (2) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящимся на один спин:

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (3)$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (4)$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (5)$$

где α, γ, β — статические критические индексы для системы с $L = \infty$, связанные соотношением гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [14,15]. Следует иметь в виду, что в выражениях (3)–(5) для маргинального случая ($d = 2, q = 2$ или $q = 4, d$ — размерность системы) возможны появления логарифмических множителей [16,17].

Кроме того, в настоящее время на основе теории конечно-размерного скейлинга предложен целый ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции ν [18]. В соответствии с этой теорией в точке фазового перехода выполняется соотношение

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n},$$

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

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, 3$$

$$V_4 = \frac{dU_L}{dK} = \frac{1}{3 \langle m^2 \rangle^2} \left[\langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} + \langle m^4 E \rangle \right],$$

где U_L — кумулянт Биндера (1) по намагниченности m , $K = 1/T$.

Из соотношений (4), (5) следует, что в системе с размерами $L \times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим аналитическим выражениям:

$$\chi(T, p) \propto L^{\gamma/\nu}, \quad m(T, p) \propto L^{-\beta/\nu}.$$

Эти соотношения использовались нами для определения величин γ и β . Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работе [19]. Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L , как правило, используются другие выражения, например [20,21]

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

где A — некоторый коэффициент.

Для расчета критических индексов γ, β, α и ν строились зависимости χ, m, C и V_n от L при

Таблица. Значения критических индексов для трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке в различных режимах разбавления

Метод	p	$k_B T_c/J$	ν	α	γ	β	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Теория [3, 6]	1.00	0.99497	5/6	1/3	13/9	1/9	2.00
			0.833	0.333	1.444	0.111	
МК [4]		0.994(2)	0.82	0.36	1.44	0.10	2.00
МК (данная работа)	0.95	0.986(2)	0.84(1)	0.30(1)	1.45(1)	0.12(1)	1.99
	0.90	0.844(6)	1.02(1)	0.12(1)	1.55(1)	0.17(1)	2.01
	0.80	0.682(9)	1.03(3)	0.11(3)	1.57(3)	0.16(3)	2.00

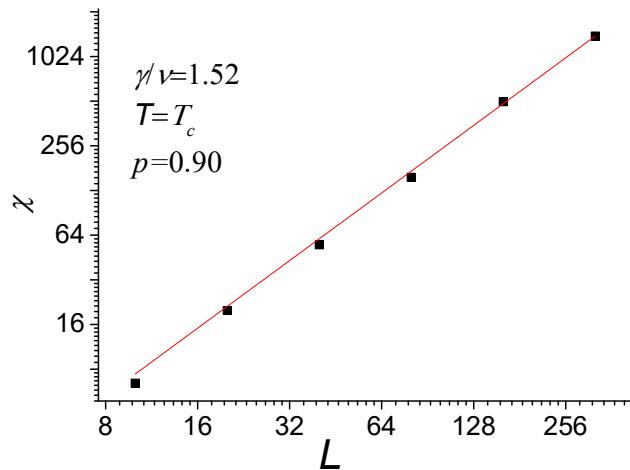


Рис. 3. Характерная зависимость восприимчивости χ от линейных размеров решетки L при $p = 0.90$ и $T = T_c$

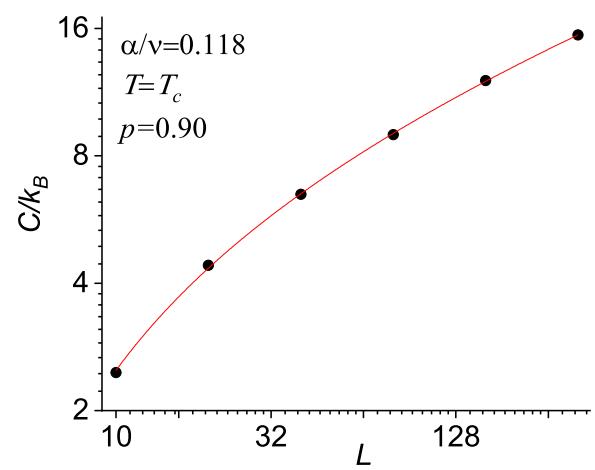


Рис. 5. Характерная зависимость теплоемкости С от линейных размеров решетки L при $p = 0.90$ и $T = T_c$

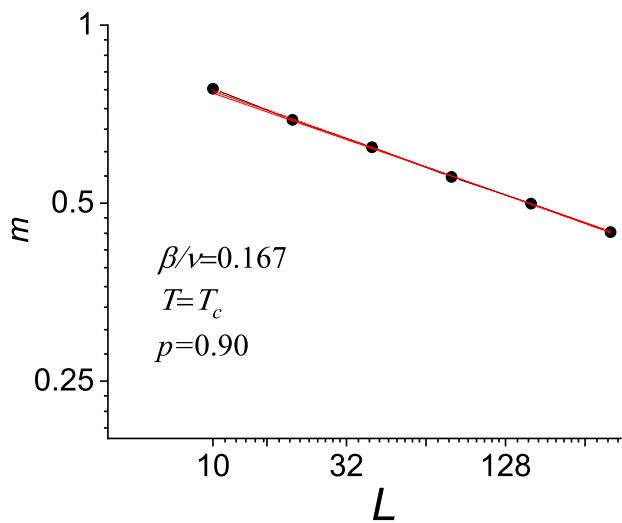


Рис. 4. Характерная зависимость намагниченности m от линейных размеров решетки L при $p = 0.90$ и $T = T_c$

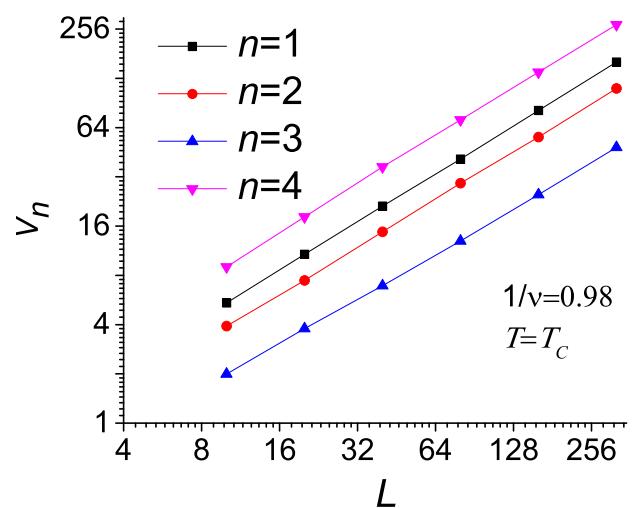


Рис. 6. Характерная зависимость V_n от линейных размеров решетки L при $p = 0.90$ и $T = T_c$

$T = T_c$. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения γ/ν , β/ν , α/ν и $1/\nu$. Затем с использованием усредненного значения ν при $n = 1, 2, 3$ и 4 , полученного в рамках данного исследования, определялись индексы γ , β и α .

На рис. 3–6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости восприимчивости, намагниченности, теплоемкости и параметра V_n для определения критического индекса радиуса корреляции ν от линейных размеров решетки L для трехкомпонентной слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при $p = 0.90$. При определении критических индексов важное значение имеет тщательный контроль данных, полученных для разных L . Очевидно, что использованное нами для усреднения количество различных примесных конфигураций с различной реализацией беспорядка и размеры $L \geq 10$ изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима. Кроме того, следует отметить, что все значения критических индексов определялись непосредственно из результатов моделирования, а не из различных скейлинговых соотношений. Аналогичным образом были определены значения критических индексов при концентрации спинов $p = 0.95$ и $p = 0.80$.

Весь набор полученных значений критических индексов для трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.80$ представлен в таблице. При этом данные при $p = 1.00$ взяты из работы [4]. В таблице также приведены значения критических показателей, полученные из аналитических приближений. Как видно из таблицы, численные значения критических индексов для намагниченности β , восприимчивости γ и критический индекс радиуса корреляции ν для трехкомпонентной модели Поттса с ростом немагнитного беспорядка начинают заметно отличаться от соответствующих значений, полученных для чистой модели Поттса ($p = 1.0$). Критическое поведение разбавленных систем, описываемых моделью Поттса с $q = 3$ на квадратной решетке, характеризуется новым набором критических индексов, образуя свой класс универсальности. Это отчетливо прослеживается для значений концентраций $p = 0.90$ и $p = 0.80$. Очевидно, что в таком случае должна существовать кроссоверная область между чистой ($p = 1.0$) и слабо разбавленной системами ($p > 0.90$). Значения критических индексов, полученные при $p = 0.95$, по-видимому, попадают

в кроссоверную область. Тщательный анализ этой области требует дополнительных расчетов.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с применением метода Монте-Карло исследовано влияние немагнитного беспорядка на критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке при концентрациях спинов $p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.80$. Показано, что с ростом концентрации немагнитных примесей значения критических индексов начинают заметно отличаться от соответствующих значений, полученных для чистой модели Поттса.

Финансирование. Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
2. V. Dotsenko and V. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
3. F. Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*, World Scientific, London (2009).
4. Г. Я. Атаева, А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, ФТТ **66**, 781 (2024).
5. Р. Бекстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
6. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
7. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
8. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, ФТТ **66**, 858 (2022).
9. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, М. А. Бабаев, ФТТ **64**, 639 (2022).
10. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов*, Физматлит, Москва (2023).
11. А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, ФММ **124**, 577 (2023).
12. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter. **8**, 5209 (1996).
13. M. E. Fisher and M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).

14. А. З. Патапинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
15. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
16. J. S. Salas and A. D. Sokal, J. Stat. Phys. **88**, 567 (1996).
17. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **162**, 398 (2022).
18. D. Loison, Phys. Lett. A. **83**, 257 (1999).
19. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
20. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
21. А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, Письма ЖЭТФ **107**, 656 (2018).