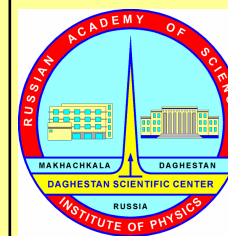




Дагестанский научный центр Российской академии наук Институт физики
Лаборатория вычислительной физики и
физики фазовых переходов

367003, Российская Федерация, Махачкала, Ярагского, 94,
Институт физики ДагНЦ РАН

тел: (8722) 62-66-75, (8722) 62-89-00 факс: (8722) 62-89-00 e-mail: m_akai@iwt.ru



Исследование фазовых переходов в спиновых моделях с замороженным беспорядком методами Монте-Карло.

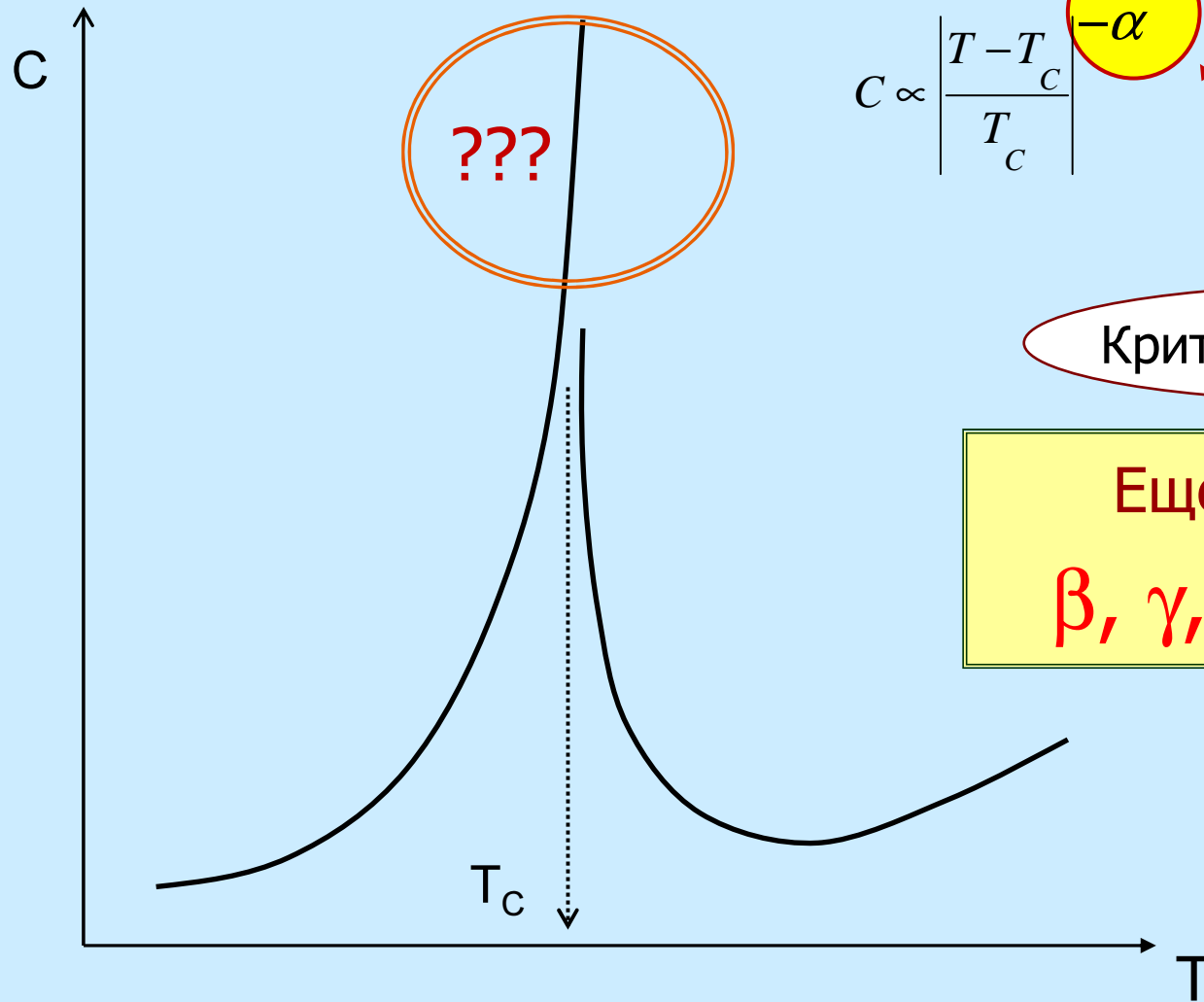
[А.К. Муртазаев](#)

Институт физики ДНЦ РАН, Махачкала
e-mail: akai2005@mail.ru

О чем говорим (план)?

1. **Критические индексы.**
2. **Универсальность.**
3. **Какие бывают примеси (беспорядок)?**
4. **Трудности исследования примесных систем.**
5. **Модель Изинга с замороженным беспорядком.**
6. **Модель Поттса с $q=3$ и замороженным беспорядком.**
7. **Модель Поттса с $q=4$ и замороженным беспорядком.**
8. **Некоторые выводы.**

Что такое критический индекс???



$$C \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\alpha}$$

$$C(\tau) \sim |\tau|^{-\alpha}$$

Критический индекс!!!

Еще индексы!!!

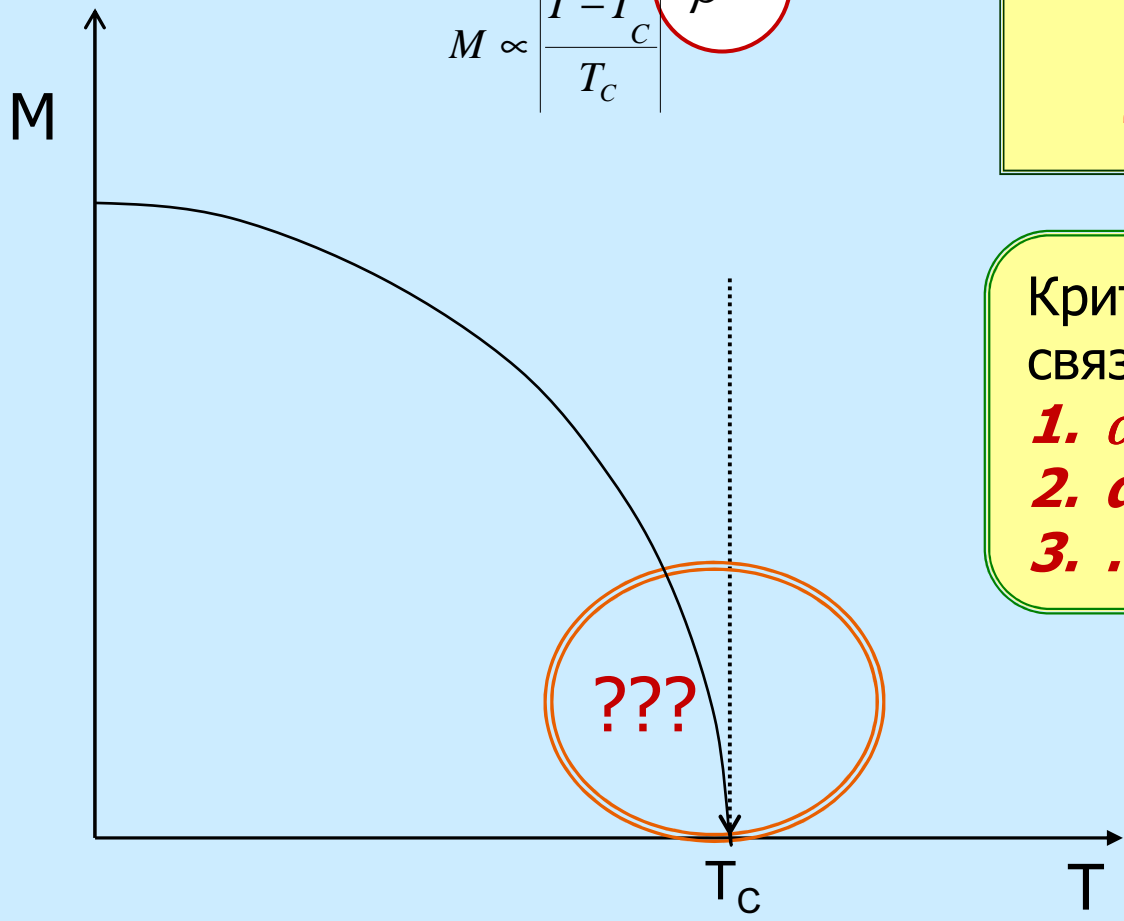
$\beta, \gamma, \nu, \delta, \eta$ и др.

Что такое критический индекс???

Критический индекс!!!

$$M \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^\beta$$

Еще индексы!!!
 $\gamma, \nu, \delta, \eta$ и др.



Критические индексы
связаны соотношениями:

1. $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2;$
2. $d\nu \geq 2 - \alpha;$
3.

Универсальность!

Класс универсальности критического поведения зависит:

1. От размерности пространства d ;
2. От числа компонент параметра порядка n ;
3. От радиуса характерного взаимодействия;
4. От симметрии системы;
5. От чего-нибудь еще...???

Критич. параметр	Класс универсальности, $d=3$.		
	Изинг ($n=1$)	XУ ($n=2$)	Гейз. ($n=3$)
K_c	0.2216595	0.4542	0.6930
ν	0.6305	0.671	0.706
α	0.108	-0.012	-0.117
β	0.3265	0.3485	0.366
γ	1.239	1.315	1.386
η	0.037	0.040	0.038
δ	4.795	4.773	4.8187

1. Дипольный;
2. Полимерный.

Почему надо изучать системы с примесями (с Беспорядком!!)??

1. Это позволяет включать в рассмотрение макроскопические эффекты беспорядка, всегда присутствующие в реальных материалах.
2. Позволяет понять многие особенности других систем (спиновых стекол, жидкостей, полимеров и др.)
3. Имеет большой академический интерес!!!

Что произойдет, если в систему внесены немагнитные примеси (беспорядок) ??

Какие бывают примеси??



1. Примеси отожджены – annealed model $\tau_{\text{imp}} \sim \tau_{\text{spin}}$.
2. Примеси заморожены – quenched model $\tau_{\text{imp}} \gg \tau_{\text{spin}}$.
3. Примеси коррелированы.
4. Примеси имеют градиент распределения.

Критерий Харриса !!!

Немагнитные примеси влияют только на системы с $\alpha > 0$!!!

Harris A.B. *J. Phys. C: Solid State Phys.* 7 1671 (1974)

Если в системе отожженный (annealed)
беспорядок $\tau_{\text{imp}} \sim \tau_{\text{spin}}$ И $\alpha_{\text{pure}} > 0$,



в системе происходит перенормировка Фишера:



$$x = \frac{x_{\text{pure}}}{1 - \alpha_{\text{pure}}}, \quad \alpha = \frac{-\alpha_{\text{pure}}}{1 - \alpha_{\text{pure}}}$$

Fisher M.E. *Phys. Rev.* **176**, 257 (1968)



Вмороженный беспорядок !!

Примеси некоррелированы !!!


Здесь возможны три случая:

Если $\alpha < 0$, то беспорядок не влияет на критическое поведение (модель Гейзенберга)

Если $\alpha = 0$, то маргинальный случай (2d модель Изинга) и теплоемкость приобретает вид:

Если $\alpha > 0$, то меняется критическое поведение (3d Изинг, Поттс?)



$C(\tau) \sim \ln\left(\frac{1}{\tau}\right)$  $C(\tau) \sim \frac{1}{r} \ln\left(\ln\left(\frac{1}{\tau}\right)\right)$

Вмороженный беспорядок приводит к смене характера критического поведения (факт!) !!!




Это приводит к множеству других вопросов ???



1. Зависят ли новые критические индексы от концентрации спинов $p=?$;
2. Если «да», то каким образом?
3. Почему многие традиционные схемы РГ для этих систем не работают?
4. Почему критическая динамика и статика проявляют совершенно разную зависимость от p ?
5. Что делать, если все теоретические подходы применимы только при $p \gg u$?
6. Влияет ли на критическое поведение коррелированность примесей?
7. Зависит ли критическое поведение от характера корреляции примесей?
8. ???

На сегодняшний день теория полагает, что:



1. Критическое поведение примесных систем должно быть универсальным и не зависит от концентрации примесей (c);
2. Концентрация (c) определяет лишь температурный интервал $\tau < \tau^*(c) = C^{1/\alpha}$ вблизи T_c на котором происходит кроссовер в новый критический режим;
3. $\nu > 2/d$;
4. Показано, что если, для примесных систем $\alpha_{\text{random}} > 0$, то фиксированная точка не стабильна!!
5. Когда $\alpha = 0$ $C(\tau) \sim \ln(\frac{1}{\tau})$  $C(\tau) \sim \frac{1}{r} \ln(\ln(\frac{1}{\tau}))$

Какие вопросы возникают при теоретическом изучении примесных систем??

1. Применение аппарата РГ затруднено нарушением репличной симметрии (НРС). Это делает РГ потоки не устойчивыми(?).
2. В таких системах возникает макроскопическое число локальных минимумов энергии, разделенных барьерами, тогда применение традиционных РГ схем вызывает большие сомнения.
3. Во всех РГ схемах $s \ll 1$, как быть при не малых s , какой концентрации спинов соответствуют РГ индексы,?
4. Многие традиционные схемы РГ для примесных систем вырождаются. Например, ε -разложение в $\sqrt{\varepsilon}$ разложение бесполезное при количественных расчетах.
5. Полученные РГ ряды не суммируемы по Борелю. Пересуммирование типа Паде-Бореля дает сходящуюся последовательность в низких порядках по теории возмущения, но не работает в высоких порядках.
6. С проблемой НРС, возможно, связана проблема фазы Гриффица.
 $T_c < T < T_0$, T_0 - критическая температура чистой модели.

$$\langle x(0)x(t) \rangle \sim \exp\{(-t/\tau)^\lambda\}$$

Что дает ЭКСПЕРИМЕНТ ???

FeF_2 – идеальный изинговский АФ, можно и MnF_2 !!
Обычно используют образцы:
 $\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$ или $\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$

Однозначных ответов нет! Причин много:

1. Качество образцов;
2. Проблема множества однотипных образцов;
3. Градиенты концентраций;
4. Разные методы для каждого КИ;
5. Разные установки для разных параметров;
6. Значительно труднее выйти на асимптотический критический режим;
7. Проблема определения критической температуры;
8. И т.д.

**Экспериментальные значения критических индексов веществ,
соответствующих примесной 3d модели Изинга:**

Образец	Концент. p	β	γ	ν	α
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.6; 0.5$		1.44	0.73	-0.09
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.46$		1.31	0.69	
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.99-0.95$	0.36			
$\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.75,$ $p=0.5, \tau>0$ $p=0.5 \tau<0$		1.364 ± 0.076 1.57 ± 0.16 1.56 ± 0.16	0.715 ± 0.035 0.75 ± 0.05 0.76 ± 0.08	
$\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.5$	0.33			
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.5$	0.35			
$\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.4; 0.55;$ 0.83				-0.09
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$0.31 < p < 0.84$				-0.09
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.52$	0.35			
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.5$	0.36			
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.93$				-0.10
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.93$		1.35	0.71	
$\text{Fe}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$	$p=0.93$		1.34	0.70	

Метод Монте-Карло и проблемы исследования QIM!

1. Для МК исследования надо $L \geq 20$!!;
2. T_c определенное по максимумам теплоемкости и восприм. не годится;
3. Результаты могут зависеть от алгоритма;
4. Серьезная проблема рост уср. $\langle \dots \rangle$, с уменьшением концентрации p !!!
5. Появляется проблема «самоусреднения»: оказалось, что самоусреднение реализуется только для слабого беспорядка!!
6. Другая серьезная проблема – это тип ансамбля: БКА или КА!! Одни и те же авторы (Aharony, Harris, Wiseman) в одной работе утверждают о различном критическом поведении в БКА и КА!!
7. В другой работе они же показали, что БКА и КА образуют один и тот же класс универсальности, отличие заключается лишь в коррекции к скейлингу!!!

1. Для критических температур показано:
 $T_c(p=0.6)=2.422$ – БКА;
 $T_c(c=0.6)=2.422$ – КА
2. Показано, что если для QIM $\alpha_{\text{random}} > 0$, то фиксированная не стабильна!!
3. Показано, что если для QIM $\alpha_{\text{random}} < 0$, то фиксированная точка стабильна для обоих типов распределения примесей!!
4. Почему $R_{\chi(c)} \gg R_{\chi(\max)}$

Что дает МК эксперимент (наши данные)???

Гамильтониан примесной модели Изинга имеет вид:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \rho_i S_i \rho_j S_j$$

где

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

- Кластерный алгоритм (алгоритм Wolf);
- Усреднение выполнялось по цепи длиной ($\tau \sim 300\tau_0$);
- Рассматривались системы с концентрацией спинов $p=0.95, 0.9, 0.8, 0.7, 0.65, 0.6$;
- Усреднение выполнялось по 60-500 различным конфигурациям примесей;
- Изучались системы с размерами $L=20 \div 60$.

Critical behavior of a three-dimensional random-bond Ising model using finite-time scaling with extensive Monte Carlo renormalization-group method

Wanjie Xiong,^{1,2} Fan Zhong,^{1,*} Weilun Yuan,¹ and Shuangli Fan¹

¹*State Key Laboratory of Optoelectronic Materials and Technologies, School of Physics and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, People's Republic of China*

²*Department of Applied Physics, College of Science, South China Agricultural University, Guangzhou 510640, People's Republic of China*

(Received 22 February 2010; published 25 May 2010)

We have investigated the critical behavior of a three-dimensional random-bond Ising model for a series of the disorder strength by a finite-time scaling combining with Monte Carlo renormalization-group method in the presence of a linearly varying temperature. The method enables us to estimate a lot of critical exponents of both static and dynamic nature independently as well as the critical temperatures. The static exponents obtained agree well with most existing results, verify both the hyperscaling and the Rushbrooke scaling laws and their combined scaling law, which in turn validate their asymptotic nature, and corroborate the universality of the relevant random fixed point with respect to the forms of disorder. The dynamic critical exponent z is estimated to 2.114(51), which is compatible with those obtained from experiments and renormalization-group analyses.

The exponents at low and high disorder strengths do not satisfy all scaling laws and are argued to be crossover exponents that reflect crossover from the random fixed point to the pure and the percolation fixed point. They also indicate that the exponents that were previously suggested to be a distinct universality class for strong disorder strength in the literature may be just crossover. Our results demonstrate the effectiveness of the finite-time scaling method.

DOI: 10.1103/PhysRevE.81.051132

PACS number(s): 64.60.Ht, 75.10.Nr, 05.10.Ln, 75.40.-s

XIONG *et al.*

sides, a recent investigation suggested that there are two universality classes corresponding to strong and weak dilutions [18,21]. Thus, further investigations are still needed.

In addition, there exists an issue concerning with the va

[18] V. V. Prudnikov, P. Prudnikov, A. Vakilov, and A. Krinitsyn, *Sov. Phys. JETP* **105**, 371 (2007).

[19] V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. S. Krinitsyn, A. N. Vakilov, E. A. Pospelov, and M. V. Rychkov, *Phys. Rev. E* **81**, 011130 (2010).

[20] M. Tissier, D. Mouhanna, J. Vidal, and B. Delamotte, *Phys. Rev. B* **65**, 140402(R) (2002).

[21] A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, and A. B. Babaev, *Sov. Phys. JETP* **99**, 1201 (2004); A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *J. Magn. Mater.* **321**, 2630 (2009).

[22] D. V. Pakhnin and A. I. Sokolov, *JETP Lett.* **71**, 412 (2000).

third law [11]. This may stem from the different proximity to the fixed point [28]. As corrections to scaling are not important especially for $r_0=2$ as seen in Fig. 3, the exponents that dissatisfied the scaling laws cannot be asymptotic except unlikely the scaling laws are themselves violated. Accordingly, the most likely scenario is that the exponents in $r_0 \leq 4$ and $r_0 \geq 5$ are, similar to the Potts model [47], crossover ones that reflect the crossover from the pure fixed point to the random fixed point and the latter to the percolation fixed point in the system, respectively. In addition, although whether or not crossover exponents should satisfy scaling laws is still an open problem [66], our results seem to indicate that at least not all of them are satisfied in these two cases. In other words, validating of a single or even two scaling laws may not be invoked as an indication of the asymptotic nature.

Now we turn to the question of the possible existence of two universality classes. It was found by a finite-size scaling method without considering corrections to scaling that for a spin concentration $p=0.6$, $\nu=0.725(6)$, $\gamma=1.446(4)$, $\alpha=-0.093(7)$, and $\beta=0.349(4)$, which were different from the lower disorder ones and thus were suggested to belong to a new class [21]. Similar results were also obtained when considering corrections [18]. One finds from Table III that our corresponding exponents for $r_0=10$ are quite close to those numbers. This seems to indicate that their results may just also be crossover exponents that reflect the crossover to the percolation fixed point. In fact, using their exponents listed, one finds $\alpha+d\nu=2.082(19)$, $\alpha+2\beta+\gamma=2.051(11)$, and $2\beta/\nu+\gamma/\nu=2.957(27)$. Accordingly, one sees that the first two laws are broken by 4–5 times of their respective standard errors and the third one by about two times. In addition, their exponents vary with p [21]. So do those in [18]. Consequently, these exponents [18,21] may be more probably crossover than a new class.

In order to distinguish possible different universality classes among the site-diluted, the bond-diluted, the $\pm J$, and the RBIM, we list in Table VII the critical exponents of the four kinds of disordered Ising model, along with the six-loop RG results of random Ising model. One sees clearly that the exponents all agree quite well, confirming the universality of the fixed point with respect to the forms of disorder.

V. CONCLUSION

We have investigated the critical behavior of 3D RBIM for $r_0=2, 4, 5$, and 10 by the finite-time scaling combining

TABLE VII. The critical exponents for the site-diluted Ising model (SDIM), the bond-diluted Ising model (BDIM), the $\pm J$ Ising model ($\pm JIM$), and the present random-bond Ising model (RBIM). The six-loop RG results of the random Ising model (RIM) are also listed for comparison.

Model	ν	β	γ	α
RIM (RG) ^a	0.678(10)	0.349(5)	1.330(17)	-0.034(30)
SDIM ^b	0.681(2)	0.354(1)	1.341(4)	-0.049(6)
BDIM ^c	0.68(2)	0.35(1)	1.34(1)	-0.04(6)
$\pm JIM$ ^b	0.682(3)	0.354(8)	1.339(7)	-0.046(9)
RBIM (here)	0.686(25)	0.346(8)	1.332(31)	-0.049(24)

^aReference [7].

^bReference [16].

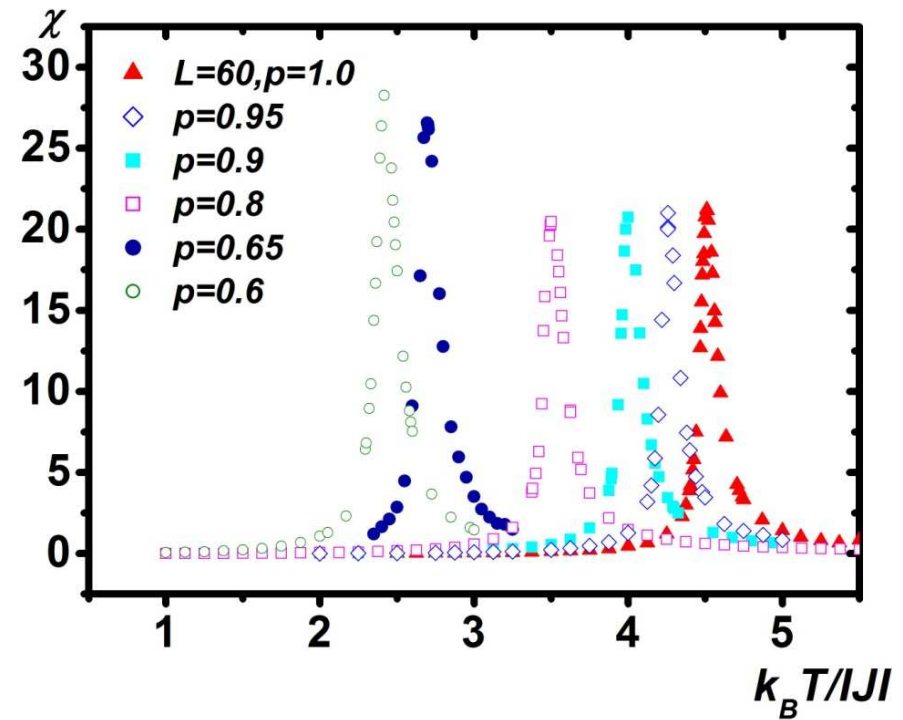
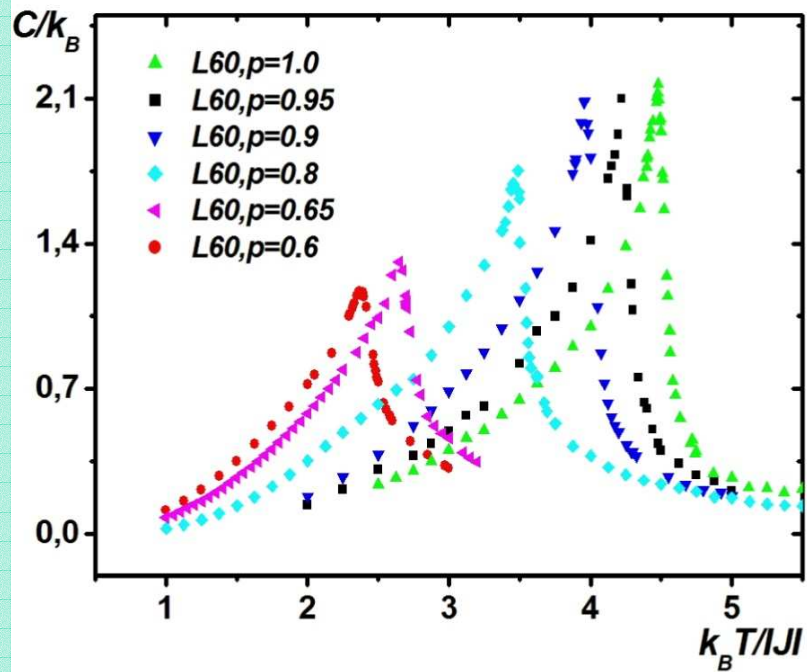
^cReference [11].

with MCRG method in the presence of the linearly varying temperature. The method enables us to estimate a lot of critical exponents independently as well as the critical temperatures. Our results listed in Eq. (25) show that the static exponents agree well with most existing results and the dynamic critical exponent of $z=2.114(51)$ support a lower value found by RG analyses, experiments, and some MC simulations. They also verify both the hyperscaling and the Rushbrooke scaling laws and their combined scaling law, which in turn validate their asymptotic nature. In addition, they corroborate the universality of the site-diluted, the bond-diluted, the $\pm J$, and the RBIM. The exponents at $r_0=2$ and $r_0=10$ are argued to be crossover exponents that reflect crossover from the random fixed point to the pure and the percolation fixed point and that do not satisfy all scaling laws. So, validating of a single or even two scaling laws may not be invoked as an indication of the asymptotic nature of the obtained exponents. In addition, the crossover exponents at $r_0=10$ appear to close to those that were proposed to constitute a distinct universality class. This indicates that they are probably also crossover only. Our results also demonstrate that the finite-time scaling method can directly probe both static and dynamic critical behavior without taking corrections to scaling into account with reasonable precisions due to the small correction exponent for the method.

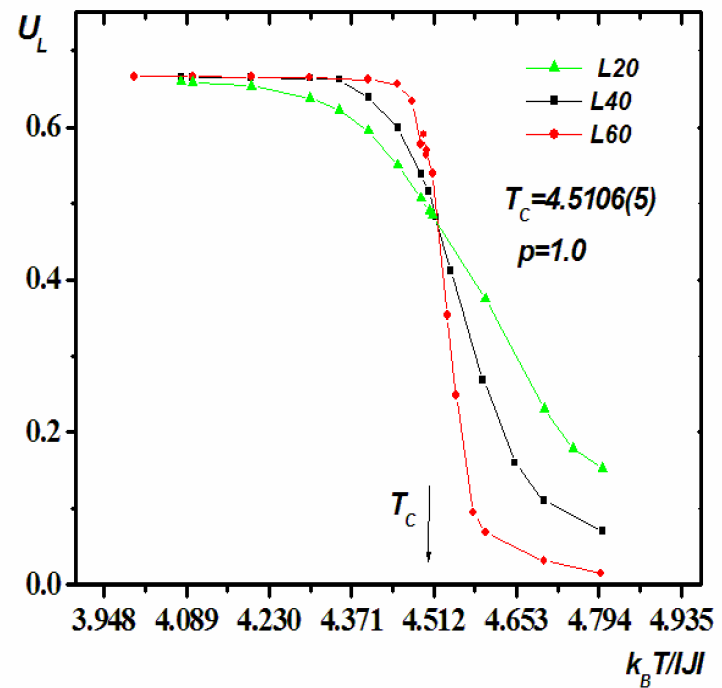
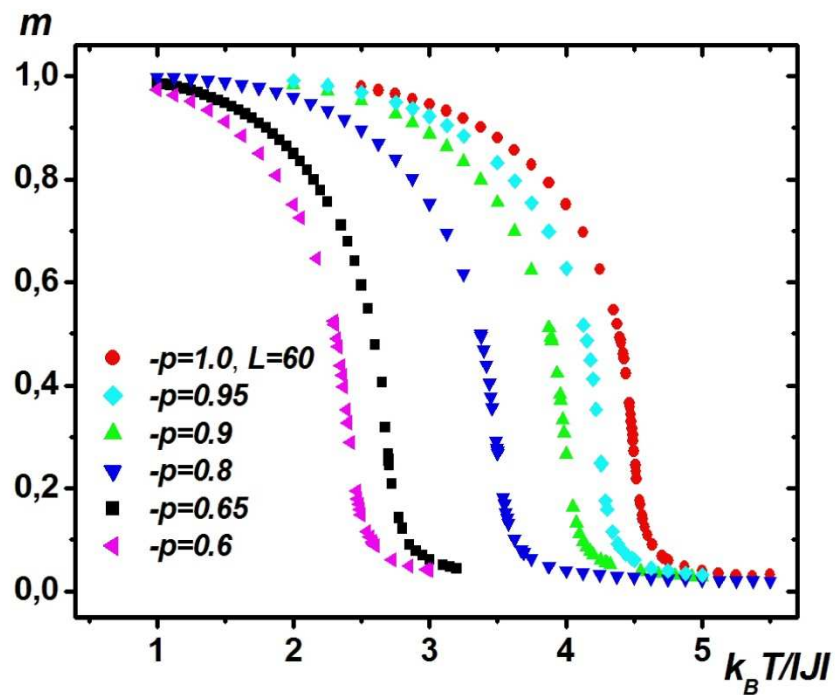
ACKNOWLEDGMENT

This work was supported by the NNSF of PRC (Grant No. 10625420).

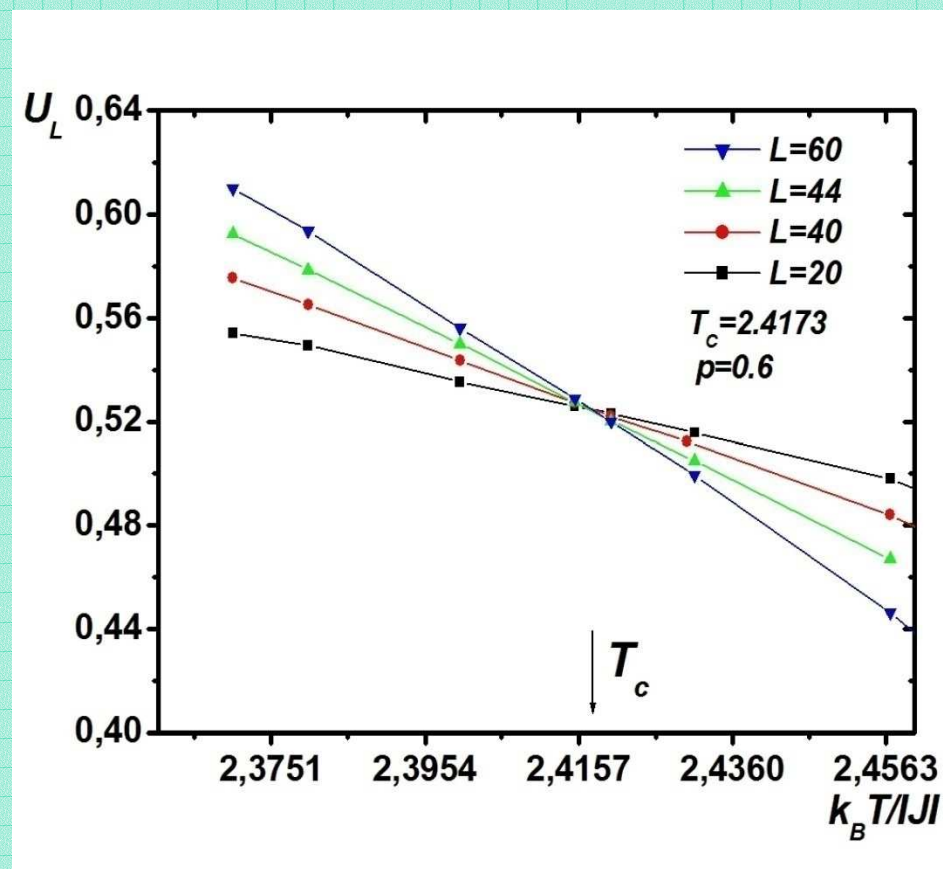
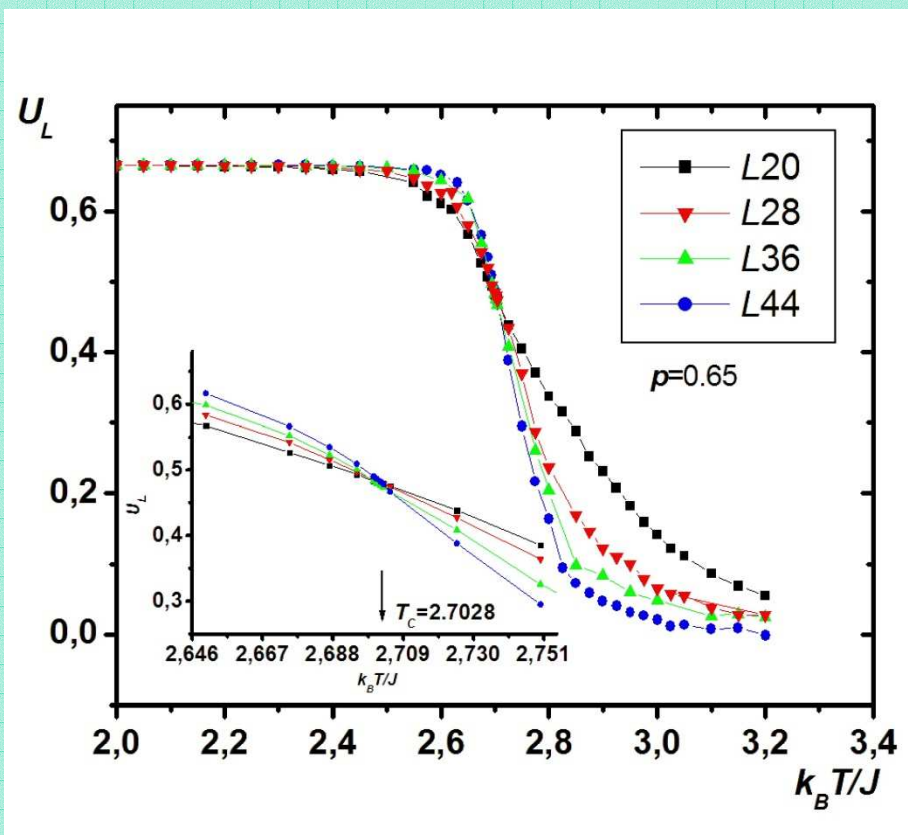
Теплоемкость и восприимчивость модели Изинга



Намагниченность и кумулянт Биндера!

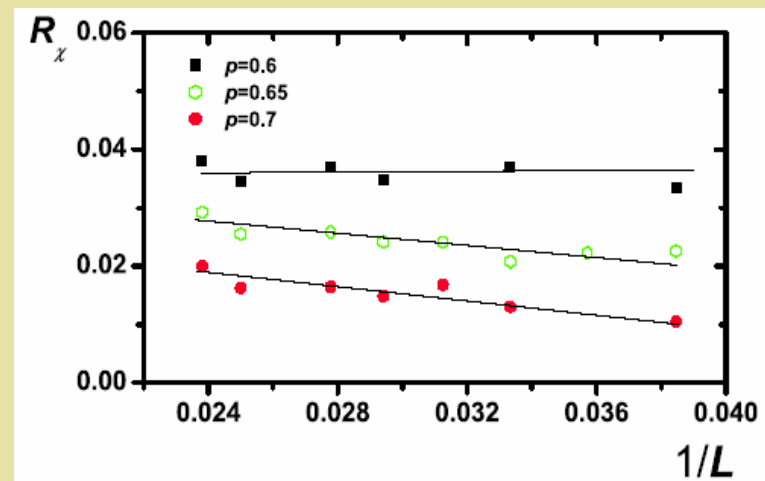
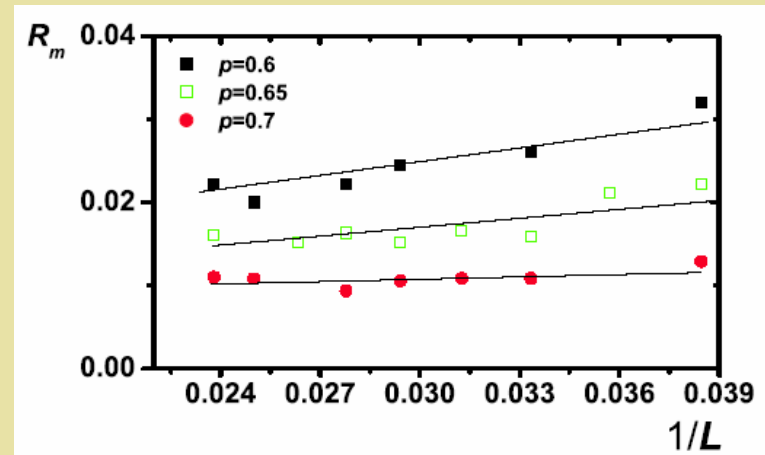
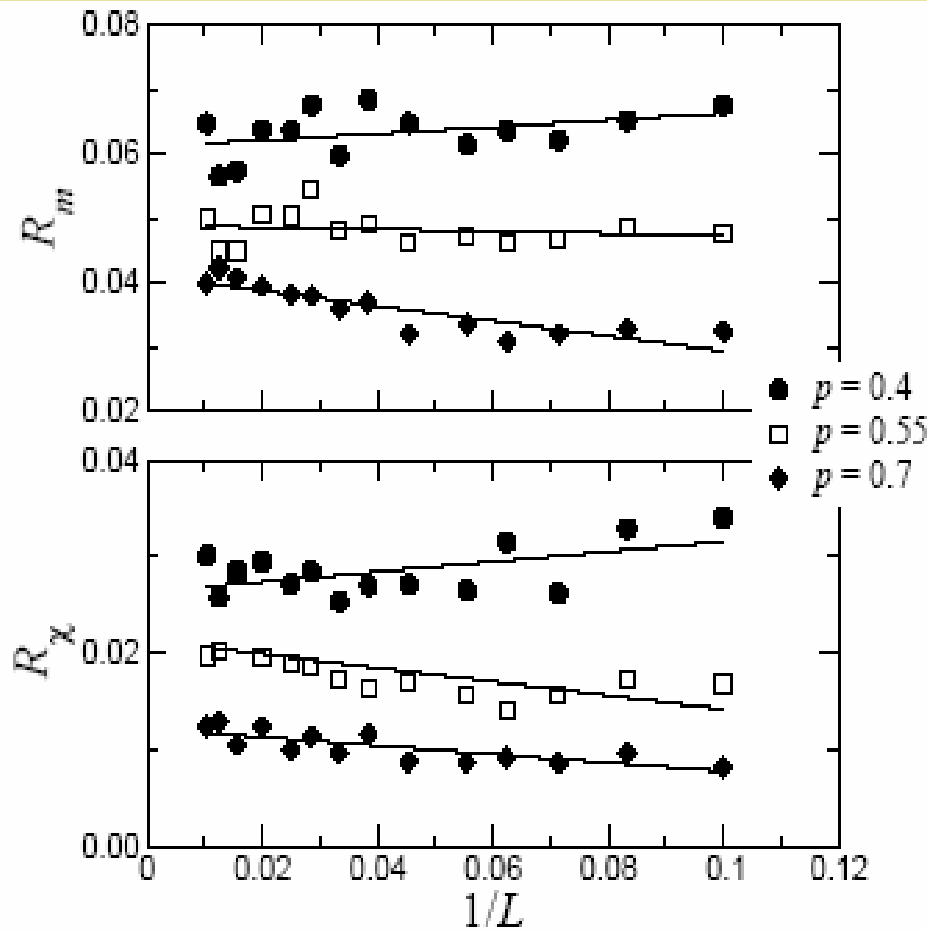


Зависимость кумулянта Биндера от температуры для разных концентрации спинов p !



3d bond-diluted Ising model
(P.E. Berche, cond-mat 0402596, 2006)

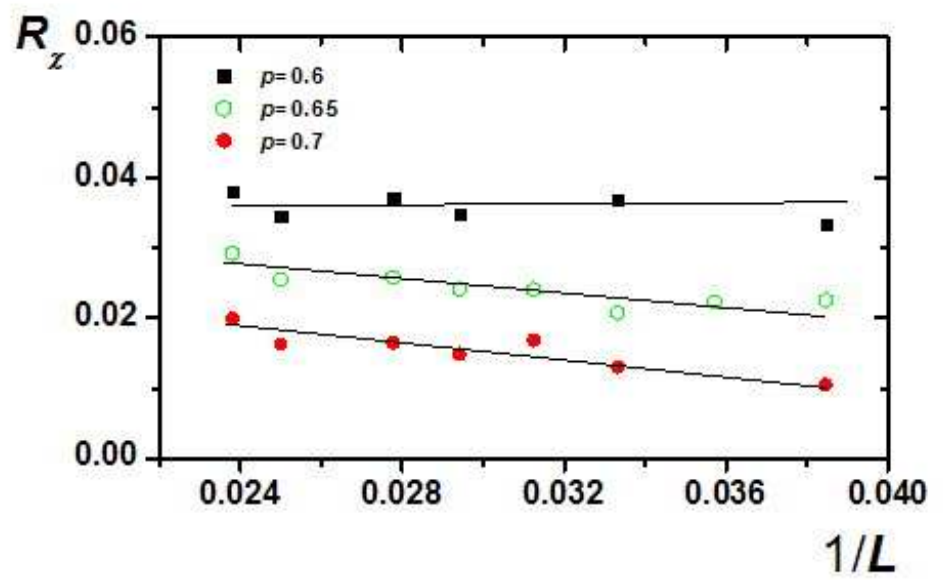
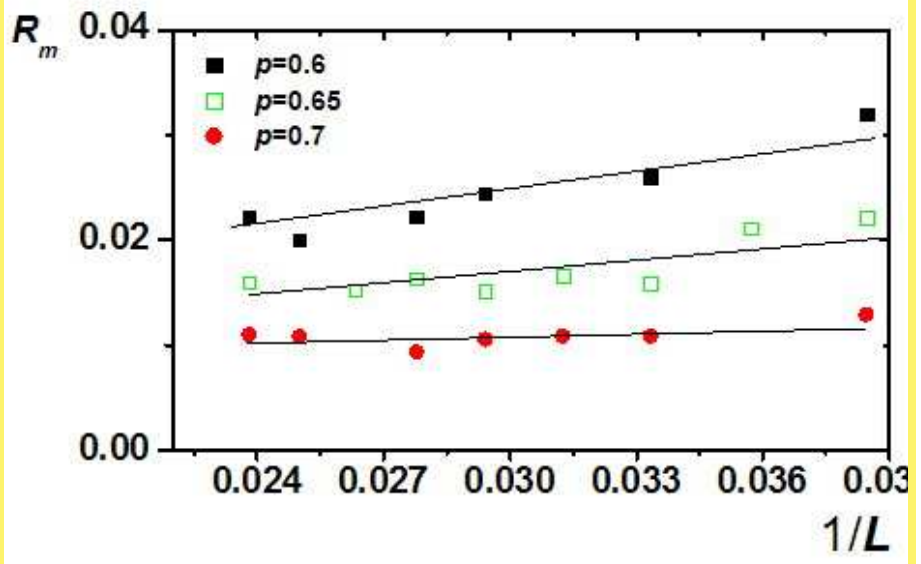
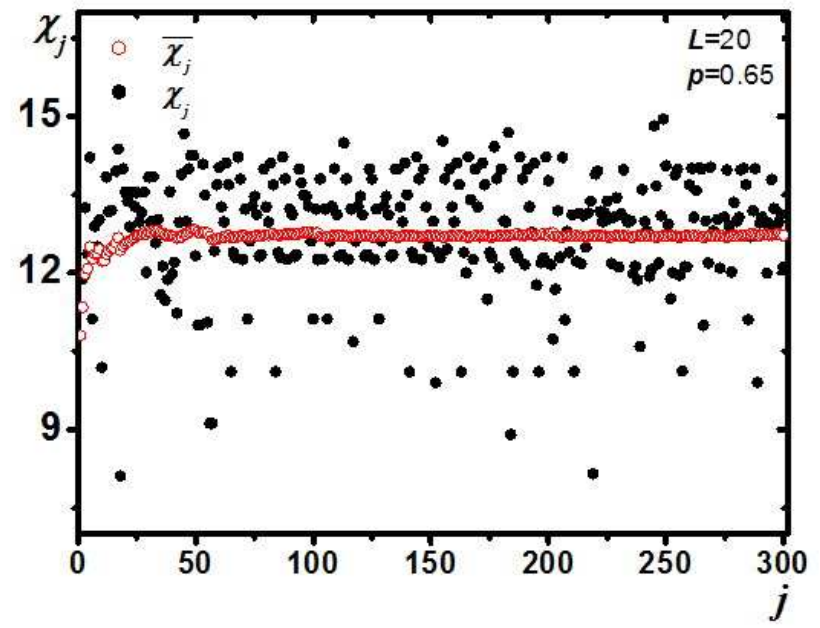
3d site-diluted Ising model (наши результаты)
A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, JMMM 321, p.2630 (2009)



$$R_x = \frac{[x^2] - [x]^2}{[x]^2} \quad R_x(L) \rightarrow 0 \quad L \rightarrow \infty$$

$$R_x = \frac{[x^2] - [x]^2}{[x]^2}$$

$$R_x(L) \rightarrow 0 \quad L \rightarrow \infty$$



Статическая теория конечно-размерного скейлинга

$$F(T, L) = L^{-d} F(tL^{1/\nu}) \quad m(T, L) \sim L^{-\beta/\nu} m_0(t L^{1/\nu}),$$

$$C(T, L) \sim L^{\alpha/\nu} C_0(t L^{1/\nu}), \quad U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$$

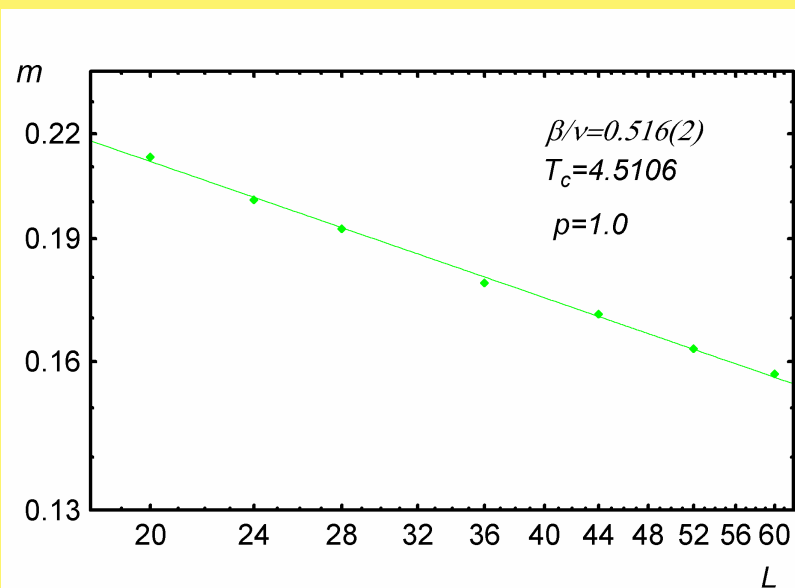
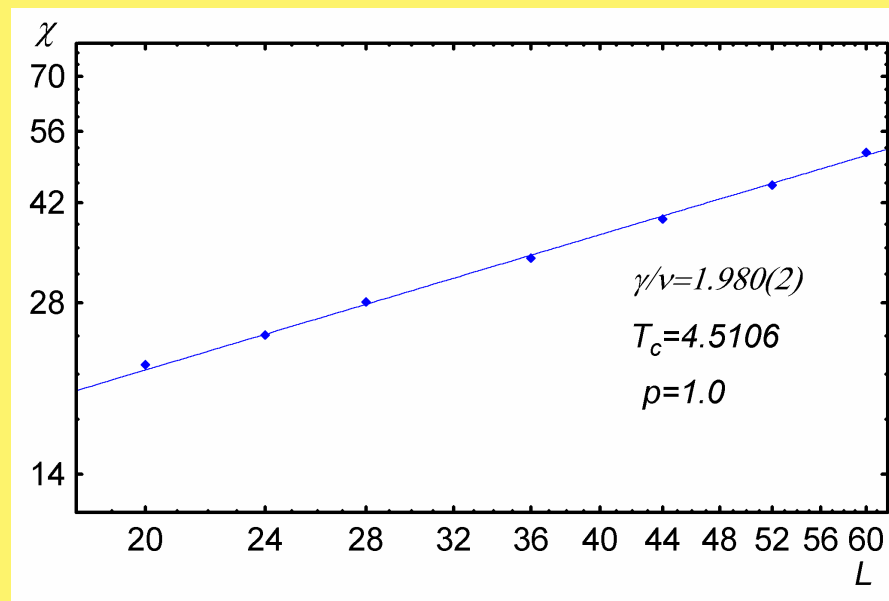
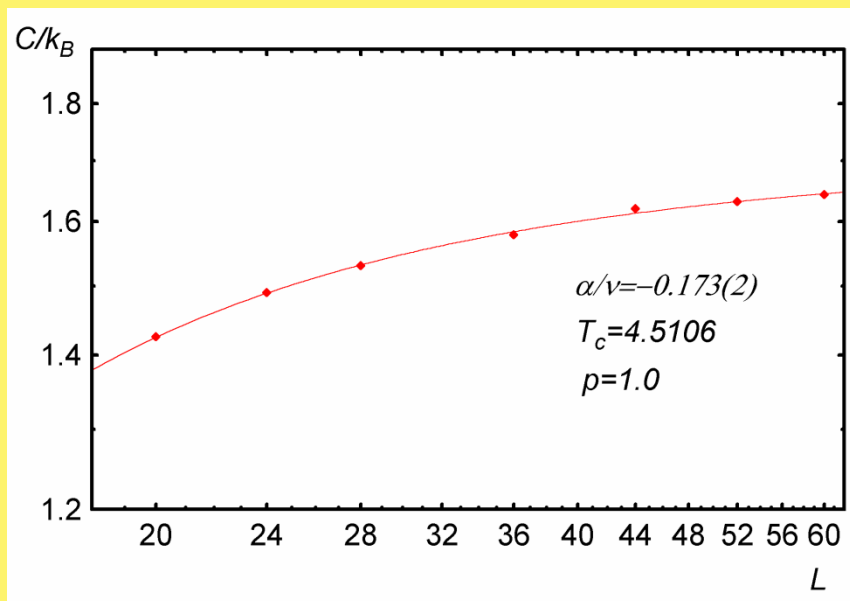
$$\chi(T, L) \sim L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad \frac{k_B T_c(L)}{J} = \frac{k_B T_c}{J} + aL^{-1/\nu},$$

Из этих выражений следует:

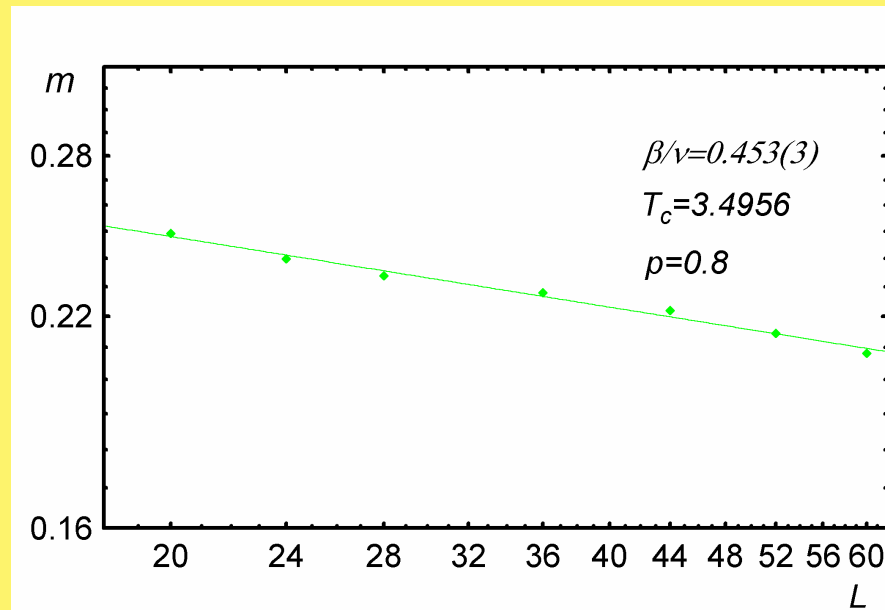
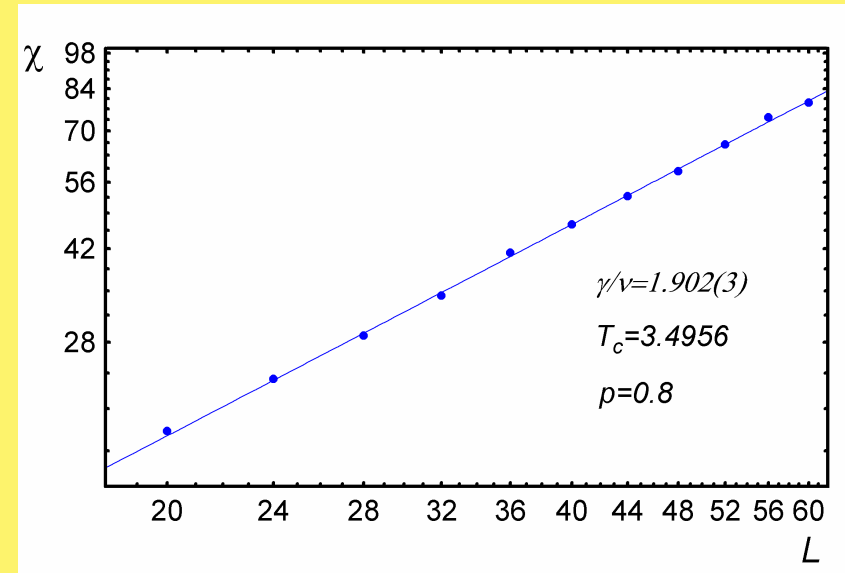
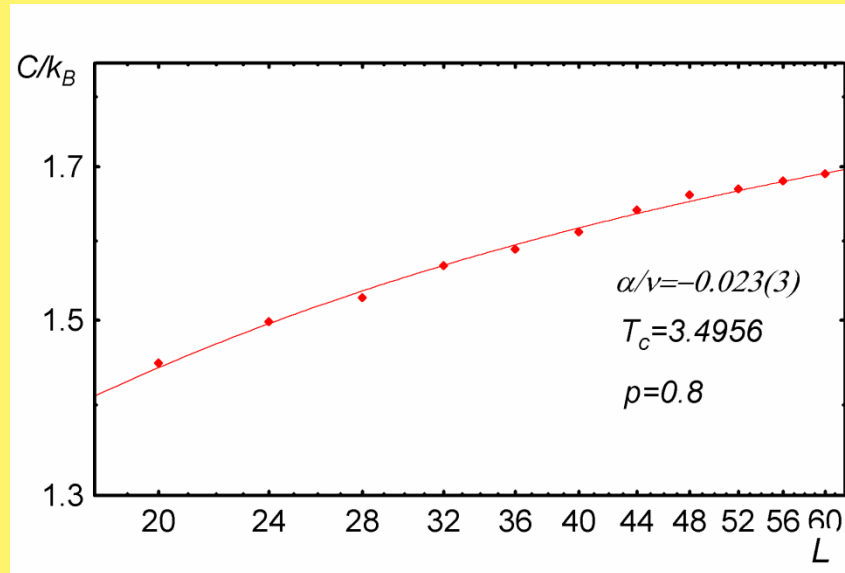
$$L \gg 1, \quad \tau = t \ll 1. \quad T = T_N \rightarrow m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad \chi \sim L^{\gamma/\nu}.$$

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

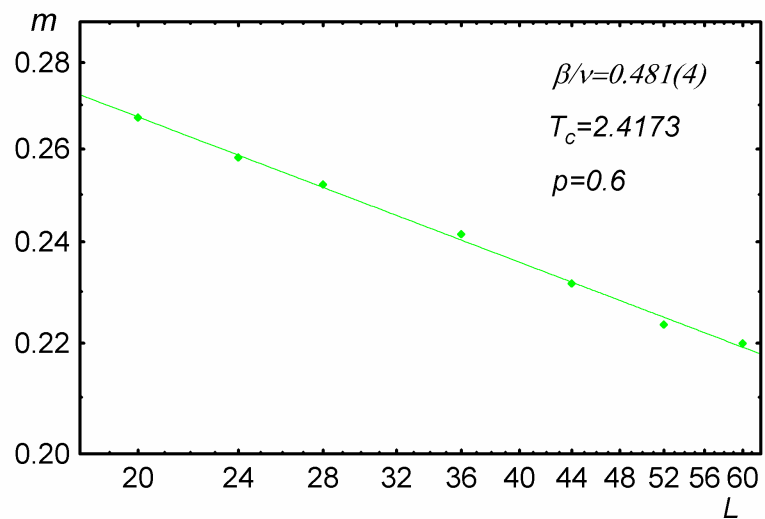
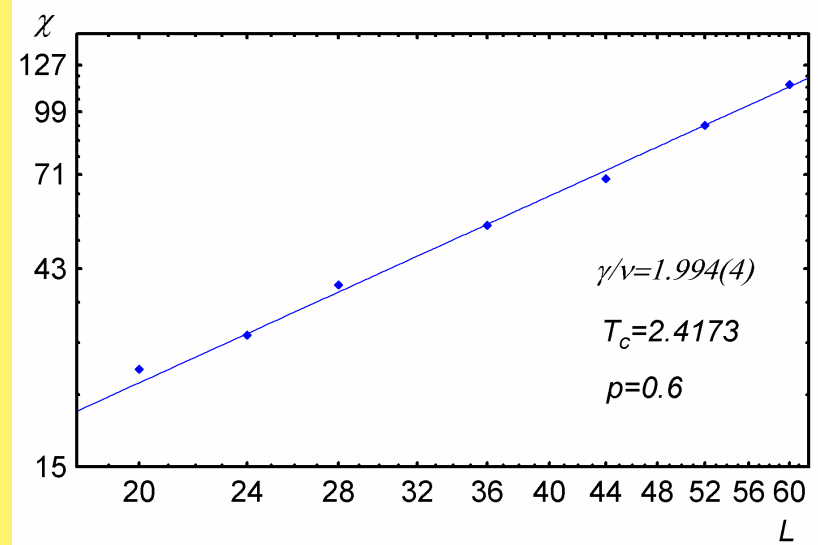
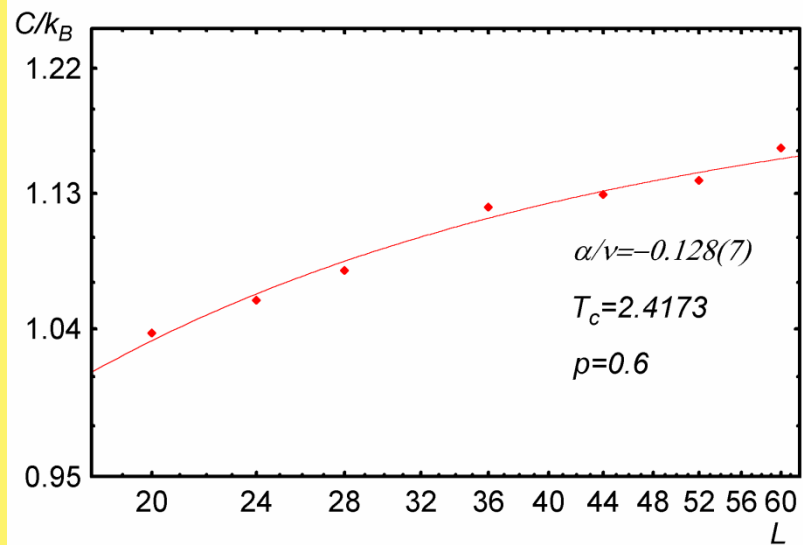
Зависимость теплоемкости, восприимчивости и намагниченности от размеров системы L при $\rho=1.0$, $T=T_c$.



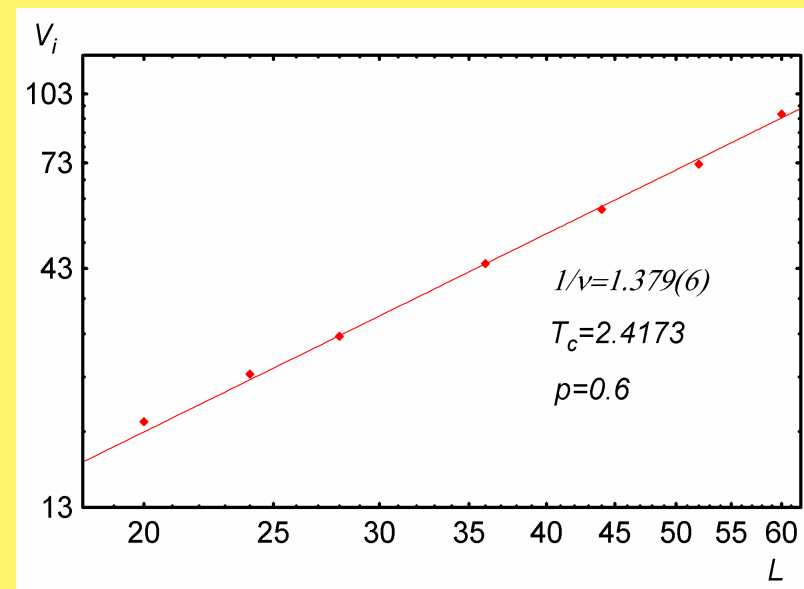
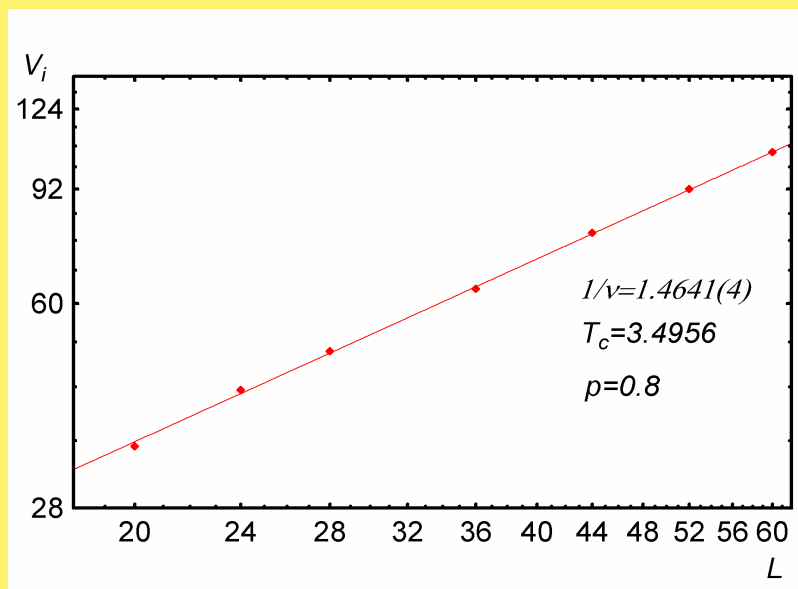
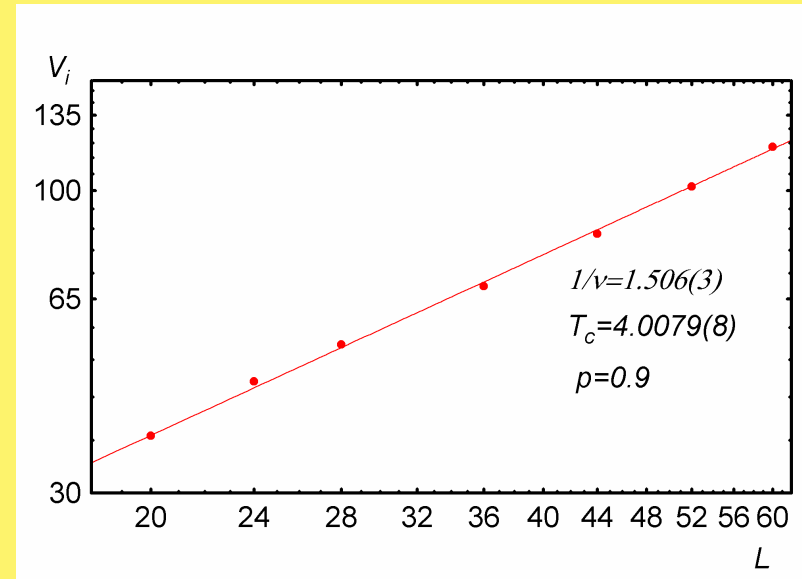
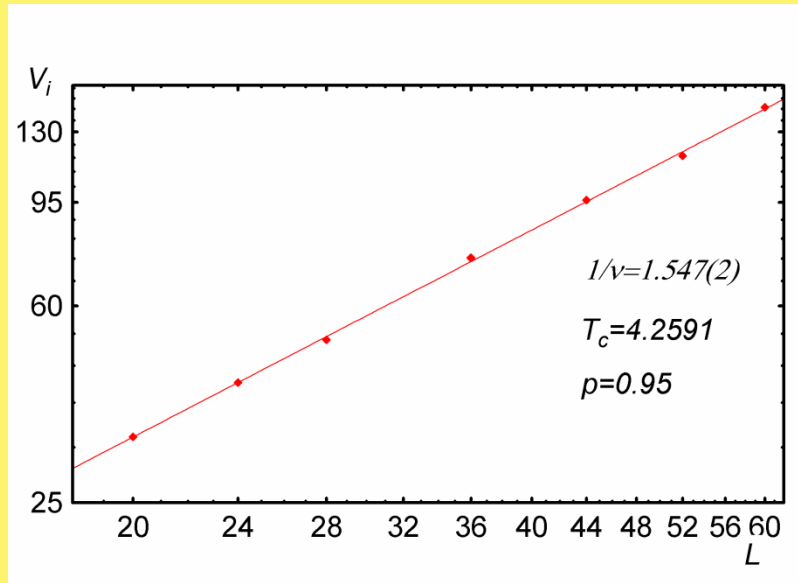
Зависимость теплоемкости, восприимчивости и намагниченности от размеров системы L при $p=0.80$, $T=T_c$.



Зависимость теплоемкости, восприимчивости и намагниченности от размеров системы L при $p=0.60$, $T=T_c$.



Зависимость параметра V_i от размеров системы L для разных значений ρ , при $T=T_c$.



Результаты МК исследований !!!

ρ	ω	ν	$1/\nu$	α	γ	γ/ν	β	β/ν	$\frac{2\beta/\nu + \gamma/\nu}{=3}$
1.00	-	0.624(2)	1.602	0.108(2)	1.236(2)	1.980	0.322(3)	0.511	3.002
0.95	0.25	0.681(2)	1.468	-0.010(2)	1.344(2)	1.975	0.339(2)	0.497	2.969
0.90	0.25	0.687(2)	1.682	-0.014(3)	1.347(2)	1.961	0.344(2)	0.504	2.968
0.80	0.25	0.683(3)	1.463	-0.016(3)	1.349(2)	1.975	0.338(2)	0.515	3.005
0.70	0.37	0.713(3)	1.403	-0.087(4)	1.425(3)	1.998	0.356(3)	0.499	2.996
0.65	0.37	0.711(7)	1.406	-0.091(5)	1.424(3)	2.004	0.354(3)	0.498	2.999
0.60	0.37	0.712(8)	1.404	-0.093(9)	1.426(5)	2.004	0.353(8)	0.497	2.998

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

**3D модель Изинга с замороженным беспорядком
(наши результаты)¹**

1. Класс универсальности критического поведения 3D модели Изинга с замороженным беспорядком при малых концентрациях примесей ($p \geq 0.8$) характеризуется новым набором критических индексов и этот набор отличаются от соответствующего для чистой модели Изинга ($p=1.0$);
2. Сильно разбавленные системы ($p \leq 0.65$) характеризуется другим набором критических индексов и образует свой класс универсальности;

Тогда, очевидно, что существуют и две кроссоверные области:

1. Область между чистой ($p=1.0$) и слабаразбавленной ($p \geq 0.8$) системами;
2. Область между слабаразбавленной ($p \approx 0.8$) и сильноразбавленной ($p \leq 0.65$) системами;

Из этого следует !!!

Противоречивый характер и несогласованность результатов исследований объясняется наличием и растянутостью кроссоверных областей, на которые приходится большинство исследований!!!

¹**А.К. Murtazaev, А.В. Babaev, JMMM 321, p.2630 (2009)**

МОДЕЛЬ

**Трехмерная разбавленная
модель Поттса с числом
состояний спина $q=3$**

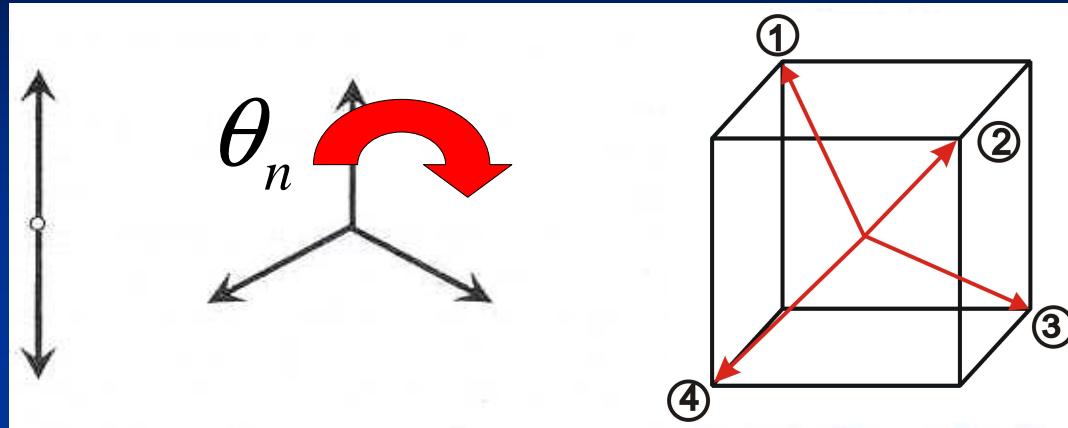
ИНТЕРЕС К МОДЕЛИ ПОТТСА обусловлен



тем, что она служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся:

- Сложные магнетики, например анизотропные ферромагнетики кубической структуры $DyAl_2$ в сильном магнитном поле
- Сегнетоэлектрики
- Спиновые стекла
- Многокомпонентные сплавы и жидкости в пористой среде.
- Адсорбция благородных газов на адсорбентах типа графита
- Фазовые переходы на границах раздела
- Структурные фазовые переходы в материалах $SrTiO_3$, $Pb_3(PO_4)_2$ относятся к классу универсальности модели Поттса с $q=3$
- Перколяционные явления

Схематическое изображение модели Поттса с числом состояний спина q



$q=2$ (модель
Изинга)

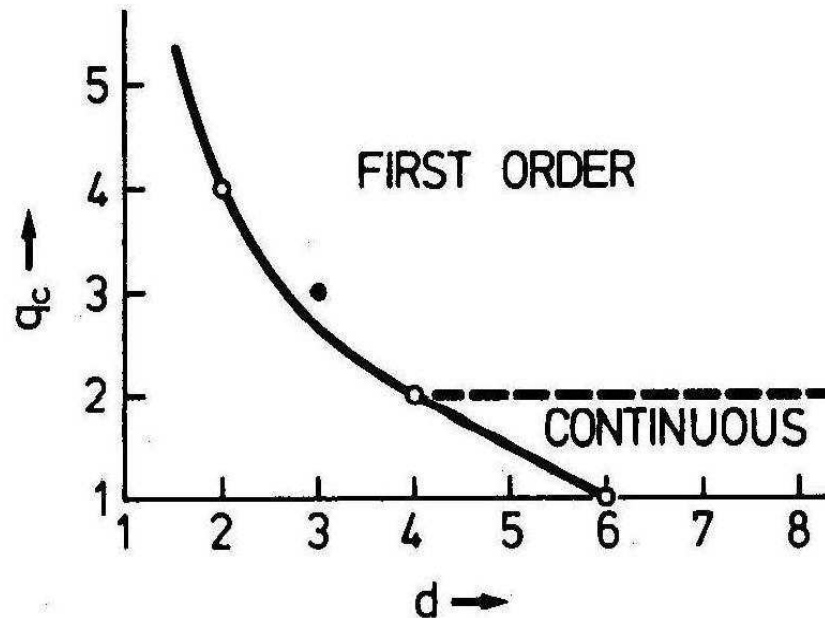
$q=3$

$q=4$

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q}, n = 0, 1, 2, \dots, q-1$$

- $\theta = 2\pi n/q; n=0, 1, 2, \dots, q-1$
- $q=3, n=0,1,2; \theta=0; 2\pi/3; 4\pi/3$
- $q=4, n=0,1,2,3; \theta=0; \pi/2; \pi; 3\pi/2$

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА



- Если $q > q_c(d)$ - в чистой модели Поттса наблюдается ФП 1-го рода, d - размерность системы, q_c – критическое число состояний спина
- Если $q < q_c(d)$ - в чистой модели Поттса наблюдается ФП 2-го рода.
- Для чистой 2d модели Поттса $q_c(d=2)=4$ и наблюдается ФП 2-го рода
- Для чистой 3d модели Поттса $q_c(d=3)=2.45$ наблюдается слабо выраженный ФП 1-го рода

- [1] Y. Imry and M. Wortis, Phys. Rev. B 19, 3580 (1979)
- [2] K. Hui and A.N. Berker, Phys. Rev. Lett. 62, 2507 (1989)
- [3] N. Clark, Phys. Phys. Rev. Lett. 71, 3505, (1993)

Что дает МК эксперимент (наши данные)???

Гамильтониан примесной модели Поттса имеет вид:

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

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

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ($J > 0$)

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

- Кластерный алгоритм (алгоритм - Wolf);
- Для системы $p=1.0$ отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 \sim 2 \times 10^6$ МКшагов/спин;
- Усреднение выполнялось по цепи длиной ($\tau \sim 300\tau_0$);
- Рассматривались системы с концентрацией спинов $p=0.95, 0.9, 0.8, 0.7, 0.65$
- Усреднение выполнялось по 60-1000 различным конфигурациям примесей;
- Изучались системы с размерами $L=20 \div 60$.

РАССЧИТЫВАЕМЫЕ ПАРАМЕТРЫ

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

намагниченность

$$N_{\max} = \max \{ N_1, N_2, N_3, \dots, N_q \},$$

где $N = pL^3$,

N_1 – число спинов в состоянии $q=1$,

N_2 – число спинов в состоянии $q=2$,

N_3 – число спинов в состоянии $q=3$,

.....

N_q – число спинов в состоянии q

Кумулянты Биндера

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3 \langle m^2 \rangle^2}$$

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

РАССЧИТЫВАЕМЫЕ ПАРАМЕТРЫ

$$C = (NK^2) \left[\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right]$$

теплоемкость

$$\chi = (NK) \left[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right],$$

$$\text{где } N = pL^3, K = J / k_B T$$

восприимчивость

$$N_{cluster} = \langle N_{cluster} \rangle = \left[\left\langle \sum_{i=1}^N \rho_i S_i \right\rangle \right]$$

$$S_i = \begin{cases} 1, & i \in Cluster \\ 0, & i \notin Cluster \end{cases}$$

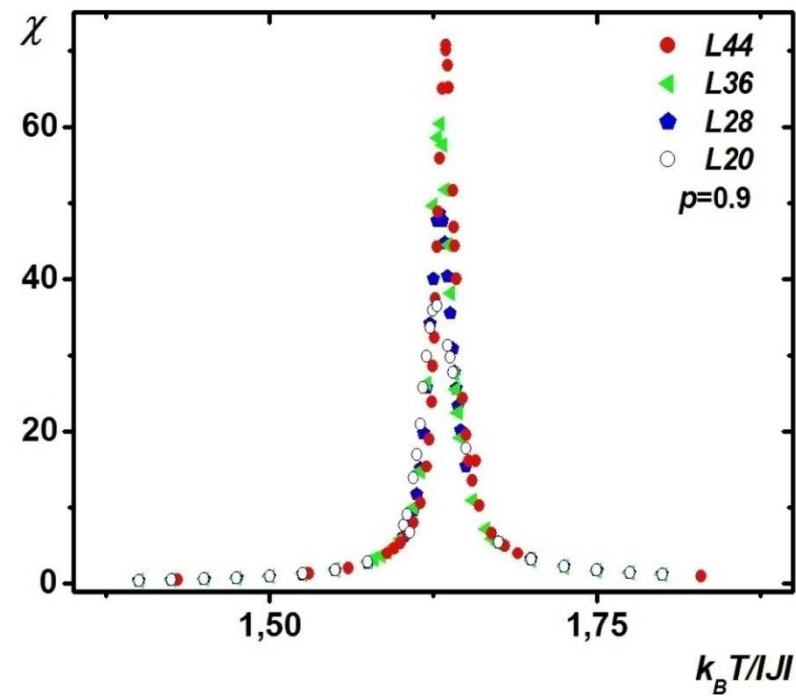
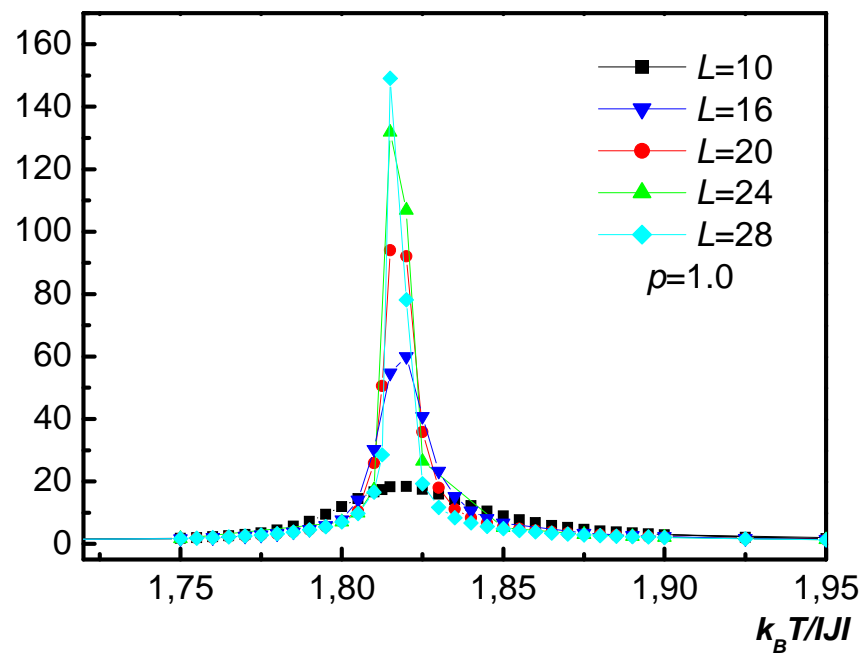
размер кластера

$$V_i = \frac{\langle m^i U \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle U \rangle, \quad i = 1, 2, 3, 4$$

параметр для определения ν

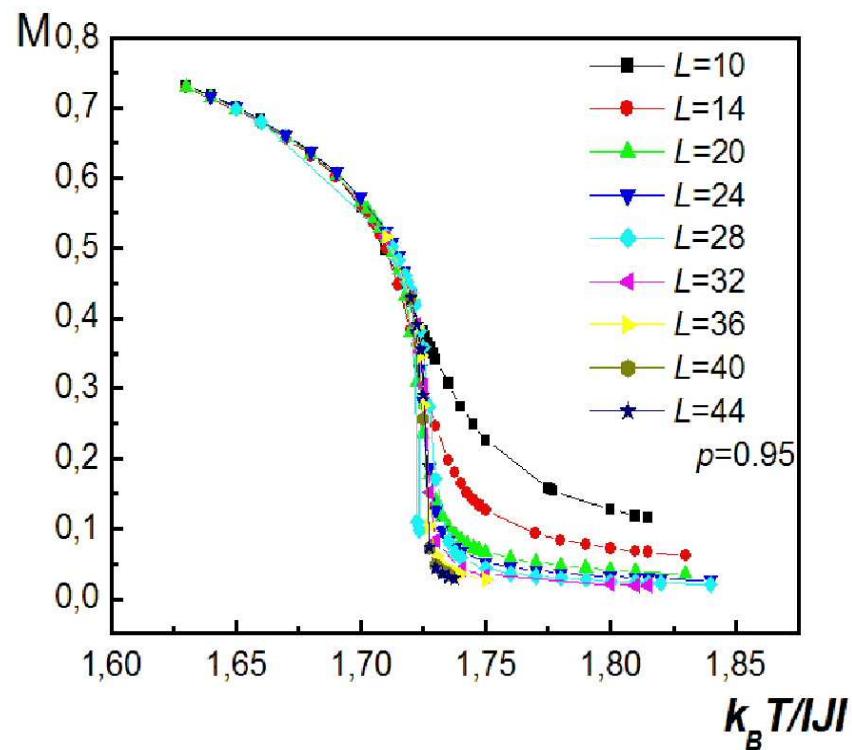
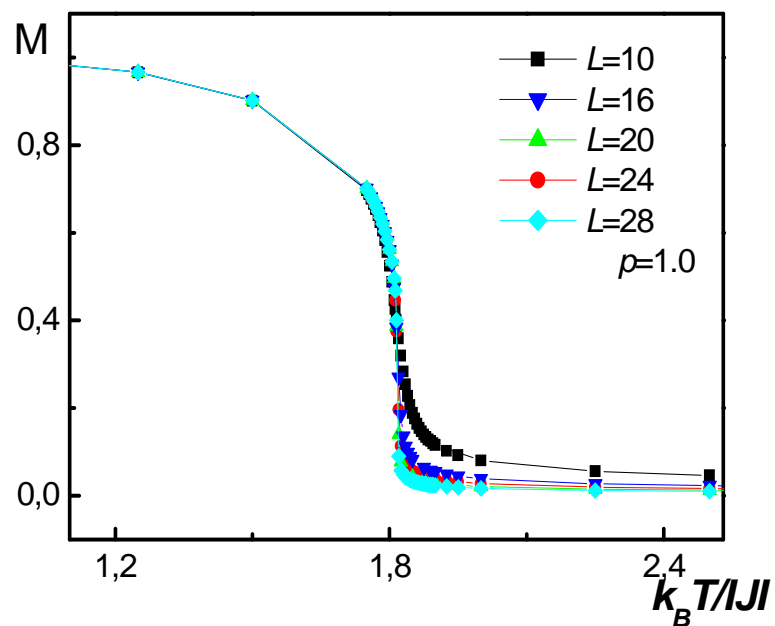
$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}$$

Восприимчивость: модель Поттса с $q=3$ при $p=1.0$ и $p=0.9$



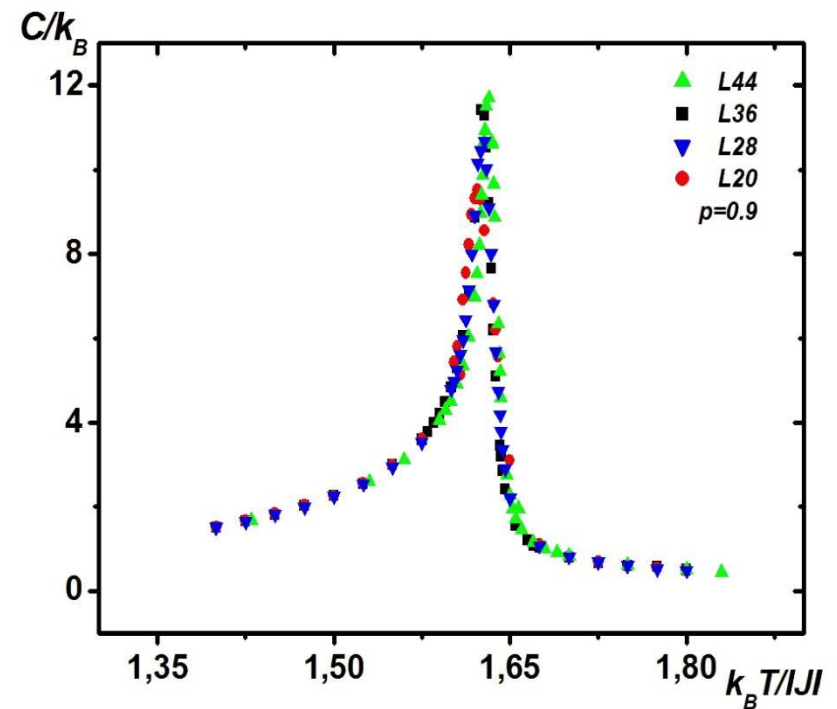
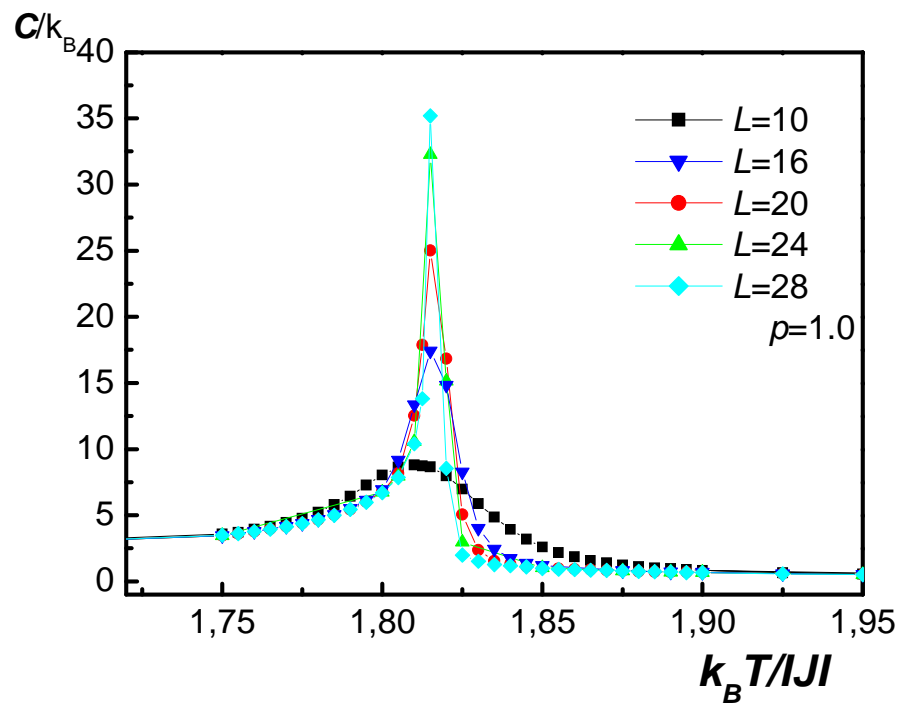
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=3$

Намагниченность: модель Поттса с $q=3$ при $p=1.0$ и $p=0.95$

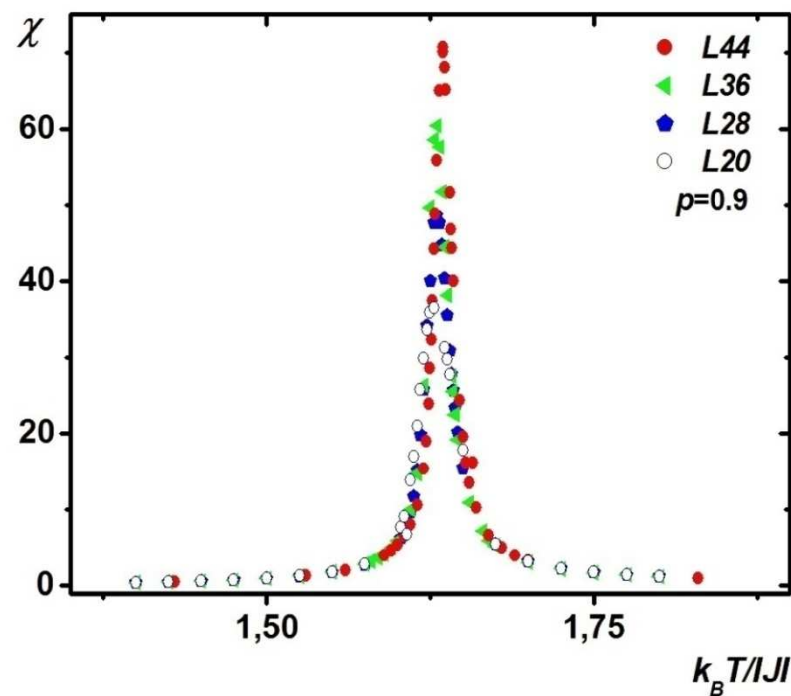
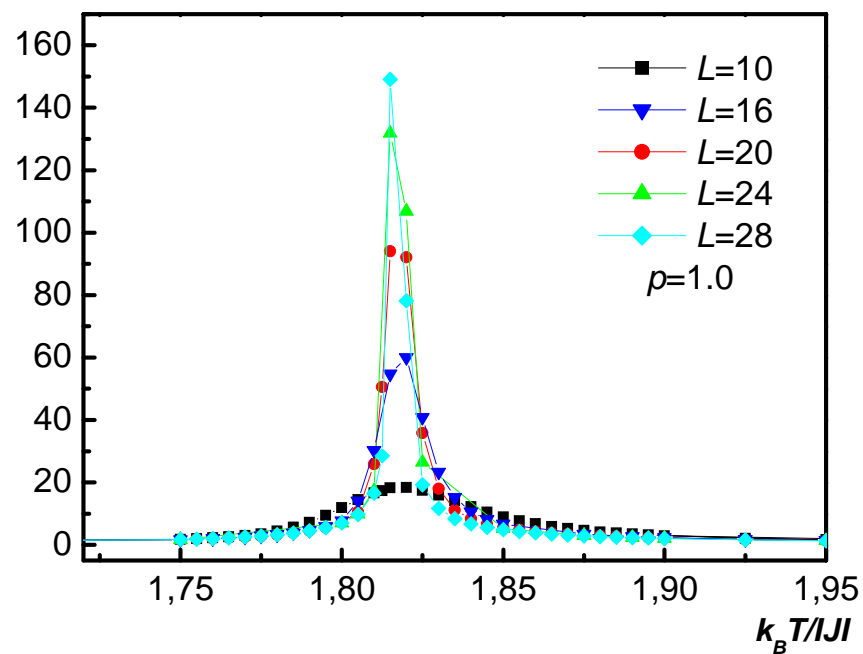


3D модель Поттса с числом состояний спина $q=3$

Теплоемкость: модель Поттса с $q=3$ при $\rho=1.0$ и $\rho=0.9$



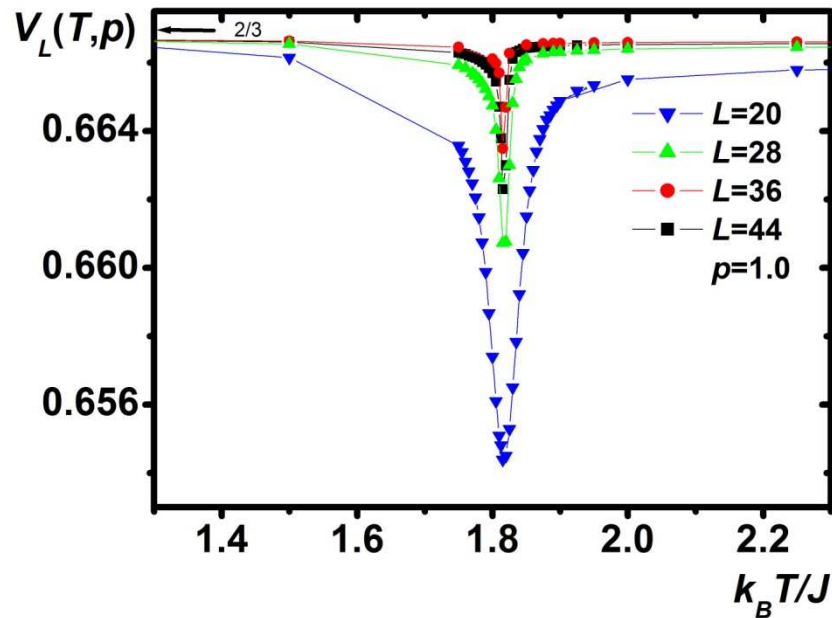
Восприимчивость: модель Поттса с $q=3$ при $p=1.0$ и $p=0.9$



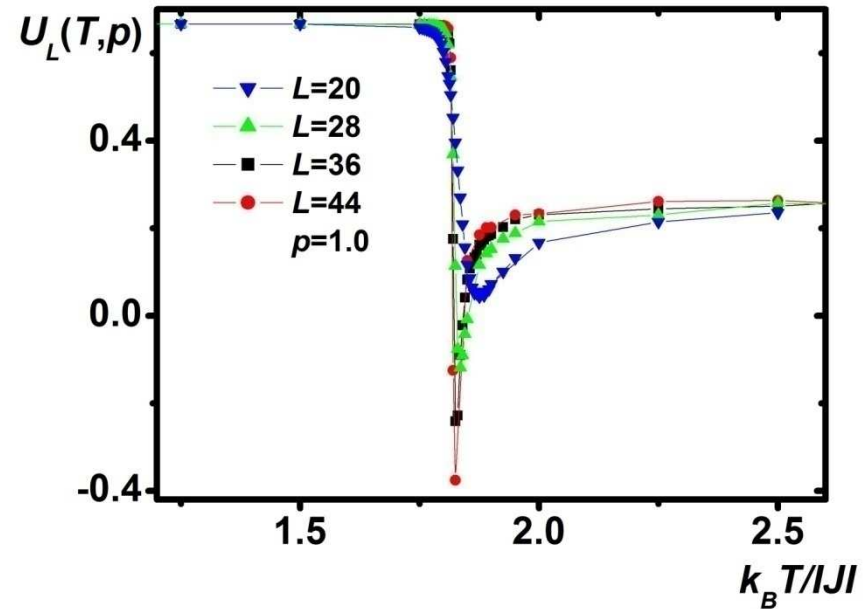
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=3$

Температура фазового перехода

Куммулянты Биндера:



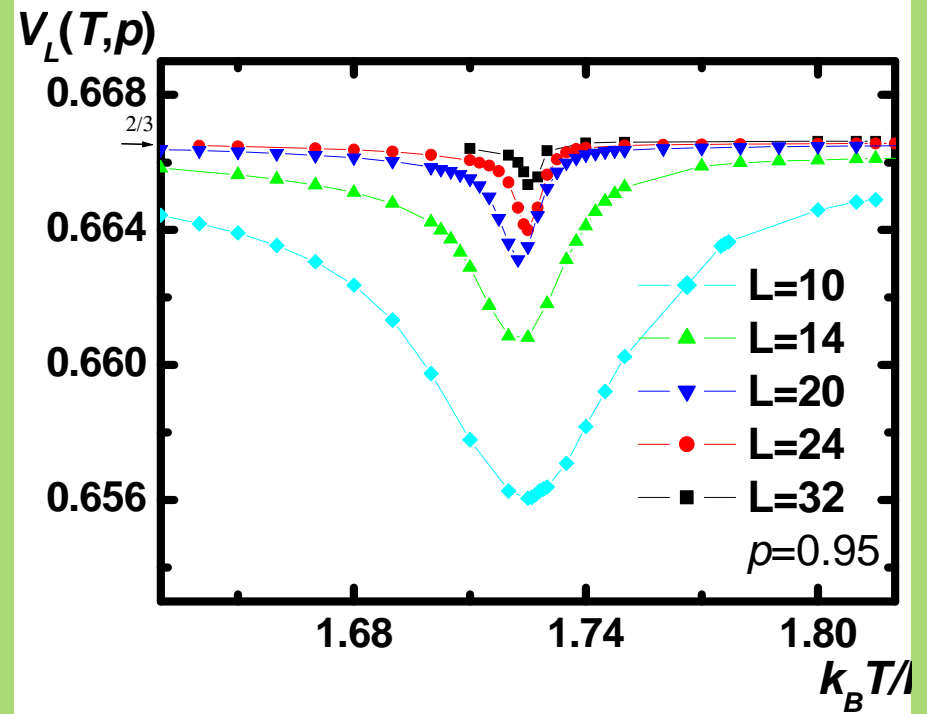
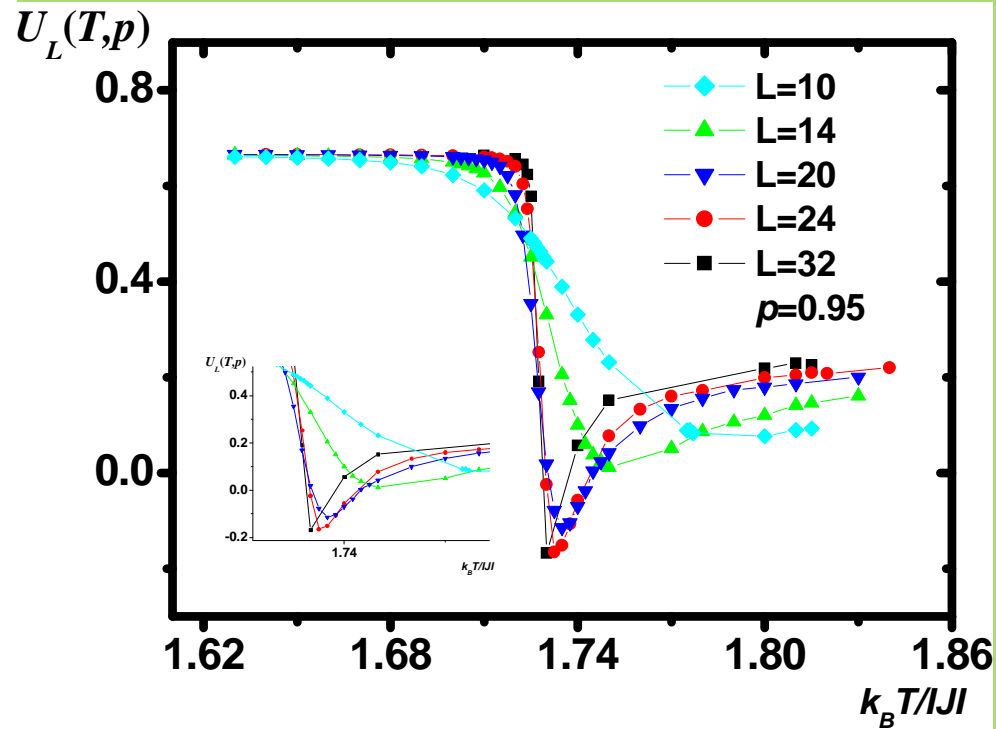
$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}$$



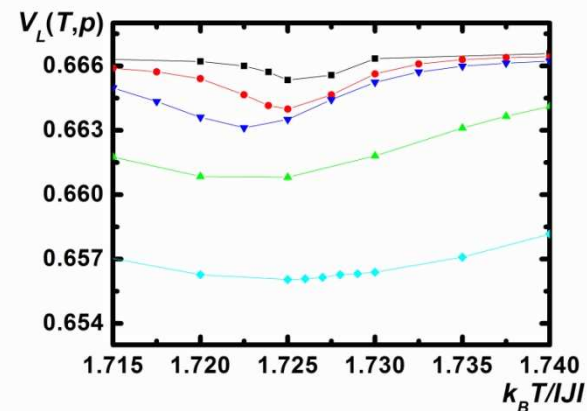
$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}$$



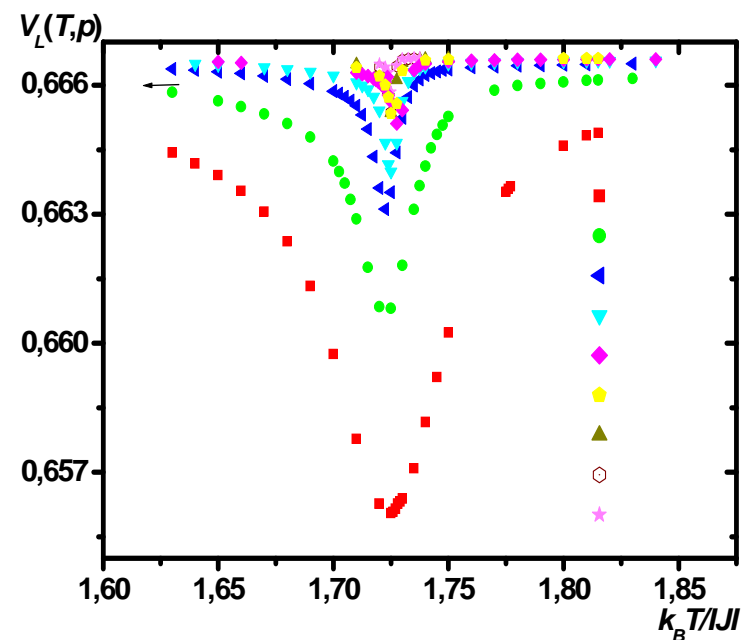
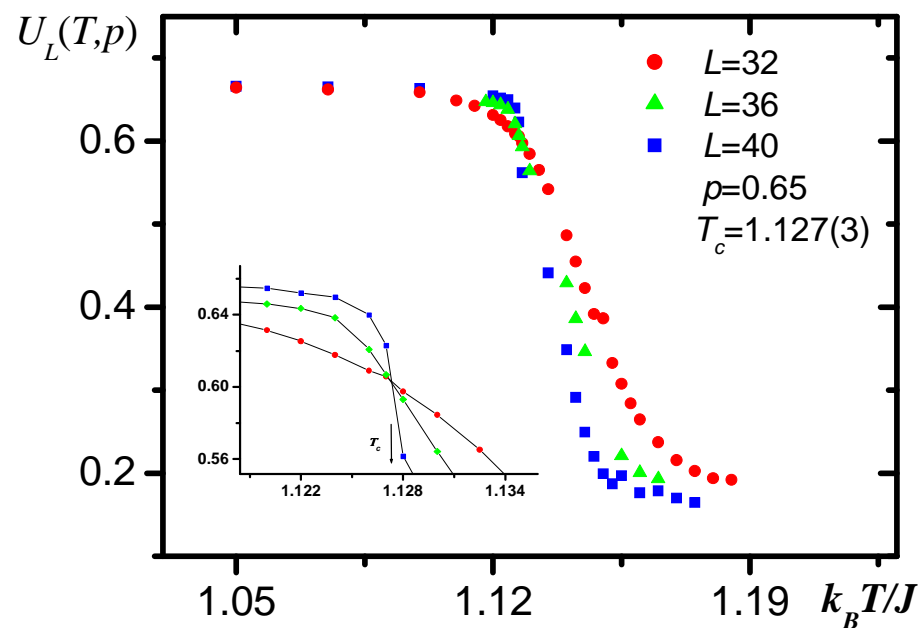
Кумулянты Биндера для систем с $\rho=0.95$



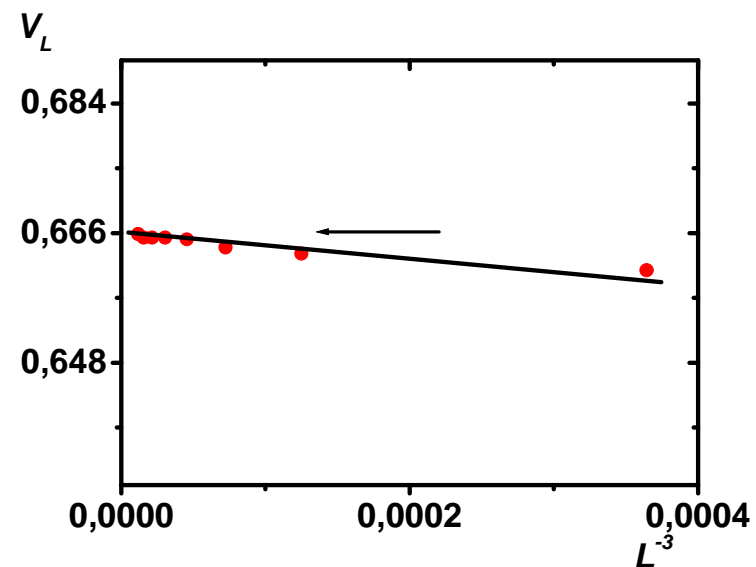
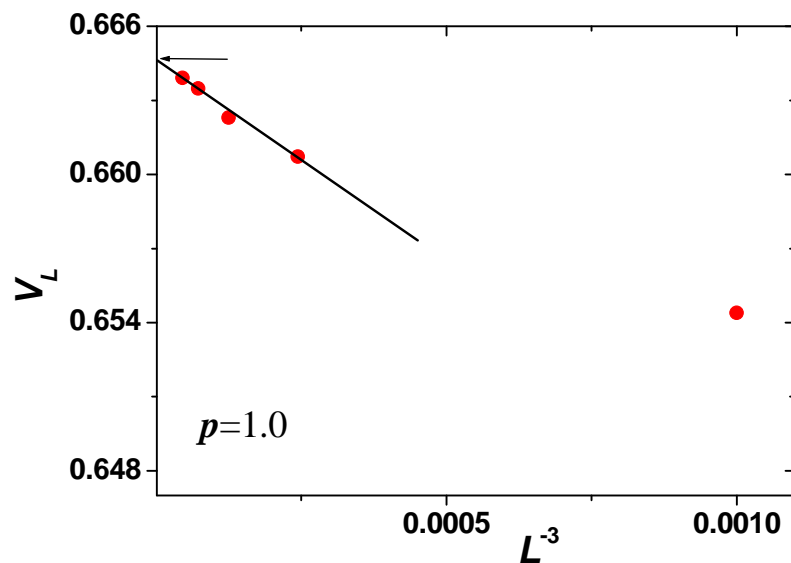
3D модель Поттса с числом состояний
спина $q=3$



Кумулянты Биндера для систем с $\rho=0.65$



Зависимость кумулянтов Биндера $(V_L)_{min}$ от L при $p=1.0$ и $p=0.95$.

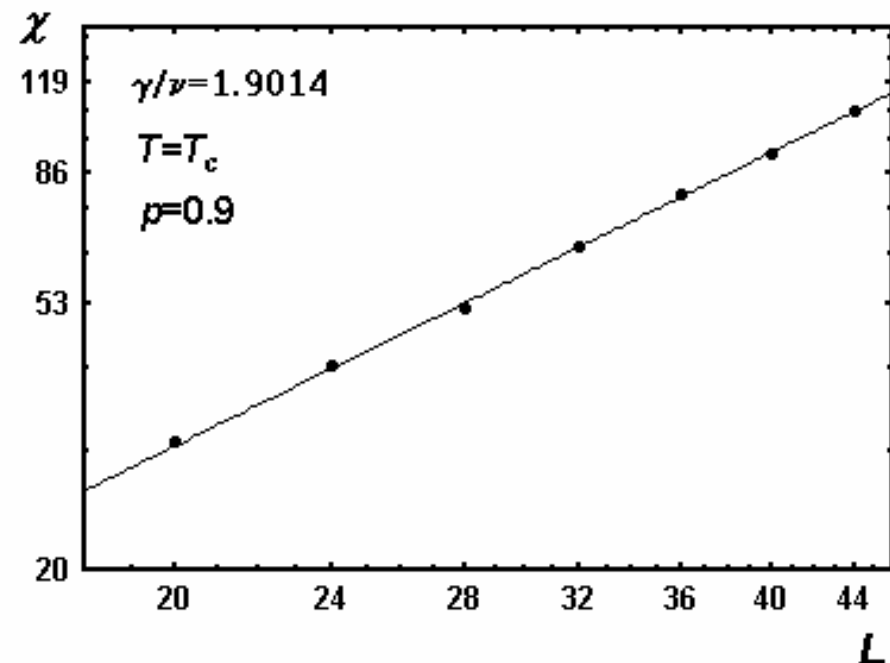
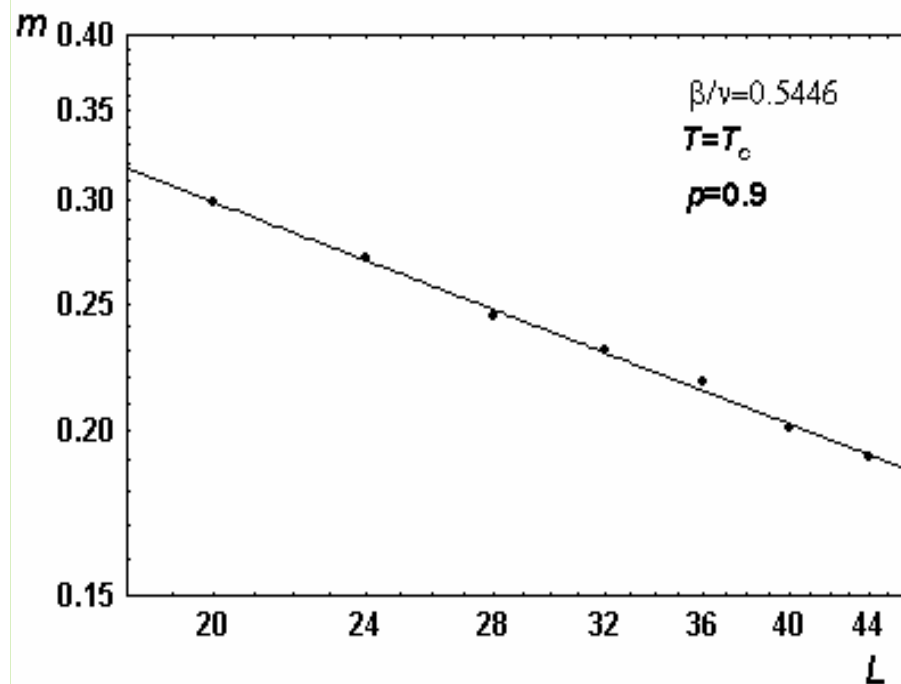


$$V(T, p) = V^* + bL^{-d}$$

3D модель Поттса с числом состояний спина $q=3$

•D. Loison, arxiv:cond-matt,0504326 v1, 2005

Зависимость намагниченности и восприимчивости от размеров системы L при $p=0.9$ и $T=T_c$



Результаты МК исследований

Статические критические индексы трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний $q=3$
(данные наших численных экспериментов)

p	T_c	ν	α	γ	β	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
0.95	1.724(2)	0.683(3)	-0.001(3)	1.273(3)	0.364(3)	2.000
0.90	1.634(2)	0.671(4)	-0.008(4)	1.275(4)	0.365(4)	1.997
0.80	1.449(2)	0.679(4)	-0.018(4)	1.279(4)	0.372(4)	2.005
0.70	1.245(3)	0.684(6)	-0.025(6)	1.281(6)	0.374(6)	2.004
0.65	1.127(4)	0.688(8)	-0.027(8)	1.284(8)	0.376(8)	2.009

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ:

В 3D модели Поттса с $q=3$ в отсутствии структурного беспорядка наблюдается поведение характерное для фазового перехода первого рода.

Внесение в систему беспорядка в виде немагнитных примесей с, $s=1-p$, где $p=0.95; 0.9; 0.8; 0.7; 0.65$ в трехмерной разбавленной модели Поттса с $q=3$ изменяет фазовый переход с первого рода на второй.

Значения КИ при концентрации $p=0.95; 0.9; 0.8; 0.7; 0.65$ достаточно хорошо согласуются друг с другом и не проявляют зависимость от значений p .

МОДЕЛЬ

**Трехмерная разбавленная
модель Поттса с числом
состояний спина $q=4$**

Трехмерная слабо разбавленная модель Поттса
с числом состояния $q=4$.

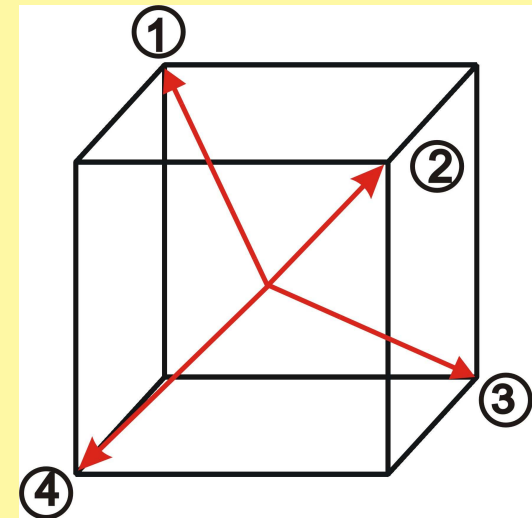
• Гамильтониан

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4$$

ГДЕ J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия

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

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



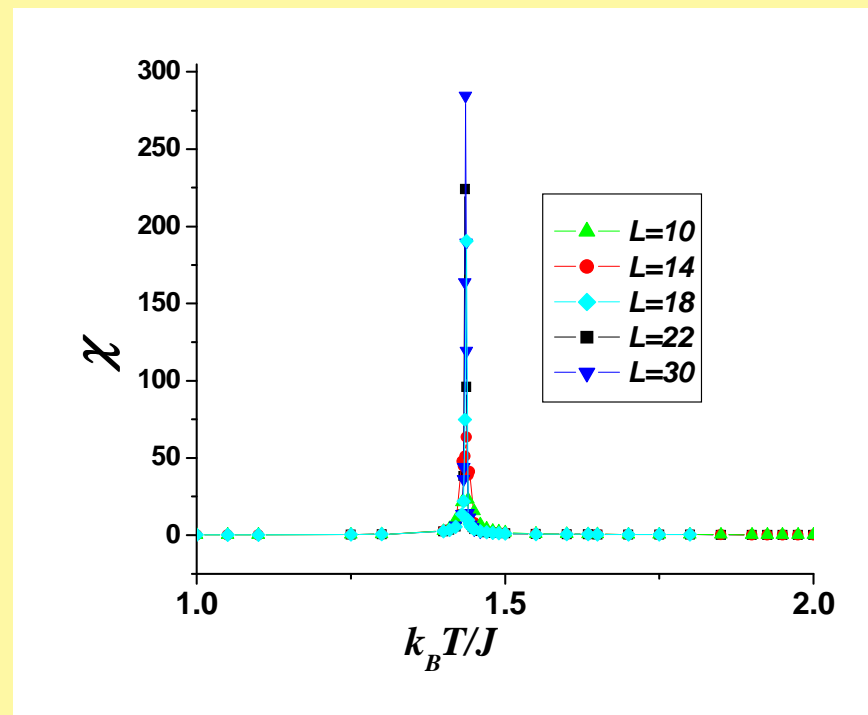
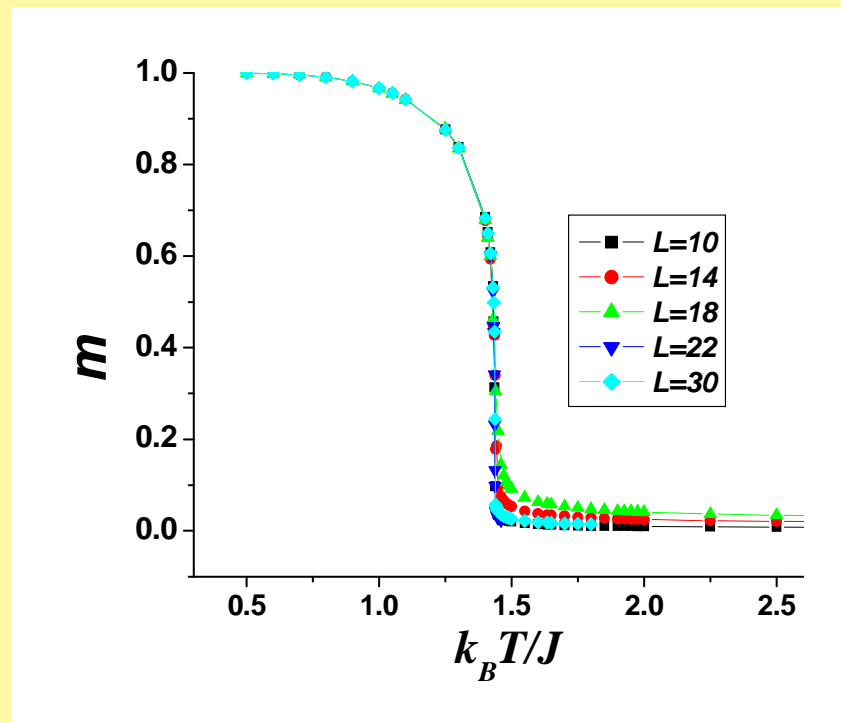
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

Что и как исследовалось ?!!

- ❖ Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 20 \div 32$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло
- ❖ Рассматривались системы с периодическими граничными условиями и с концентрацией спинов $p = 1.0, 0.9, 0.7, 0.65$
- ❖ немагнитные примеси распределялись по системе каноническим способом (фиксацией доли магнитных узлов)

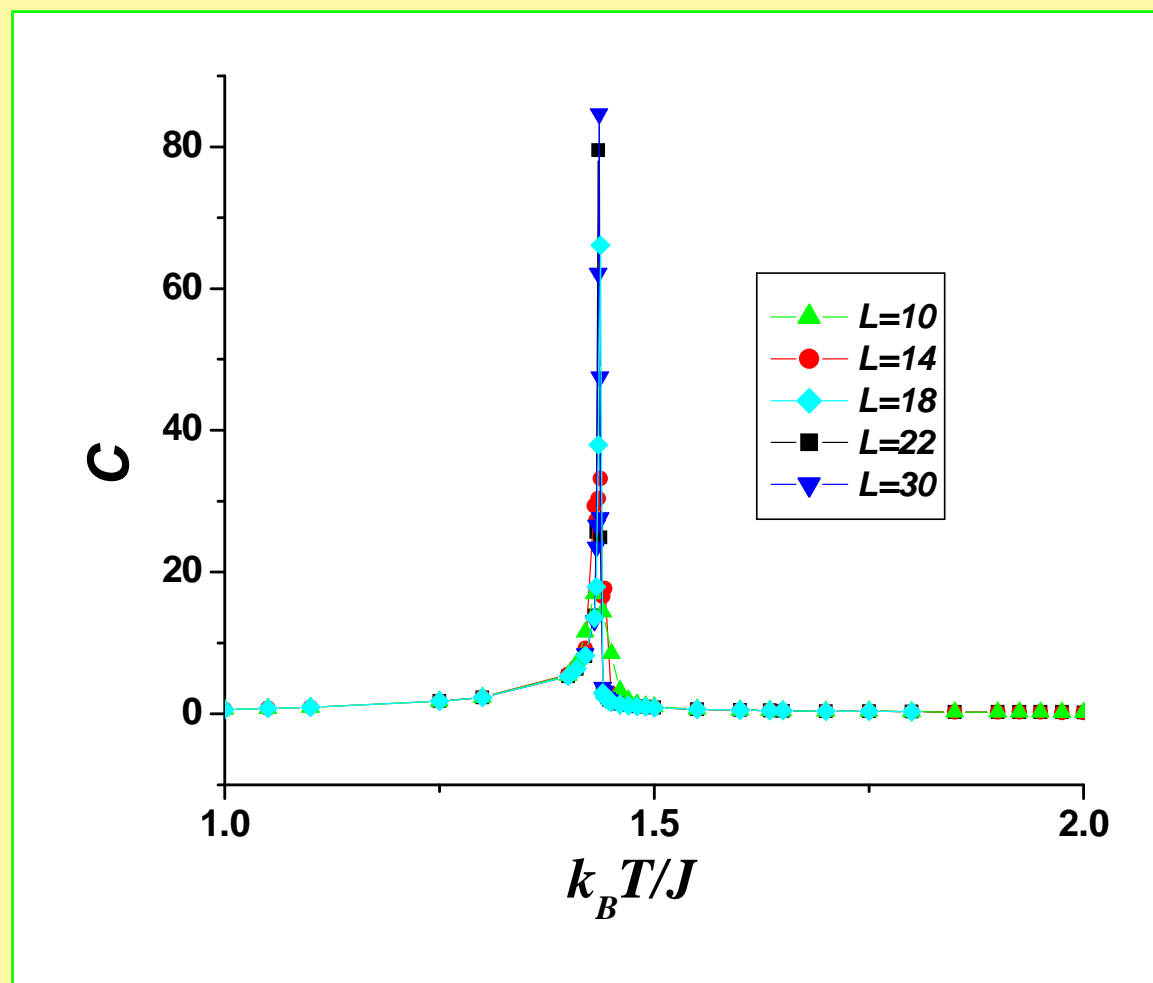
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

Температурная зависимость намагниченности и восприимчивости для различных L системы при $p=0.9$.



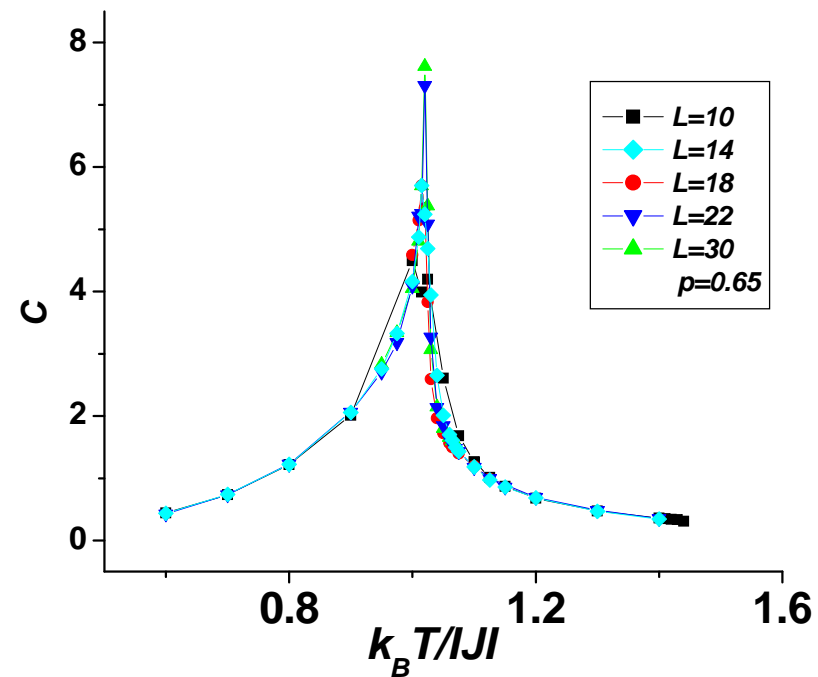
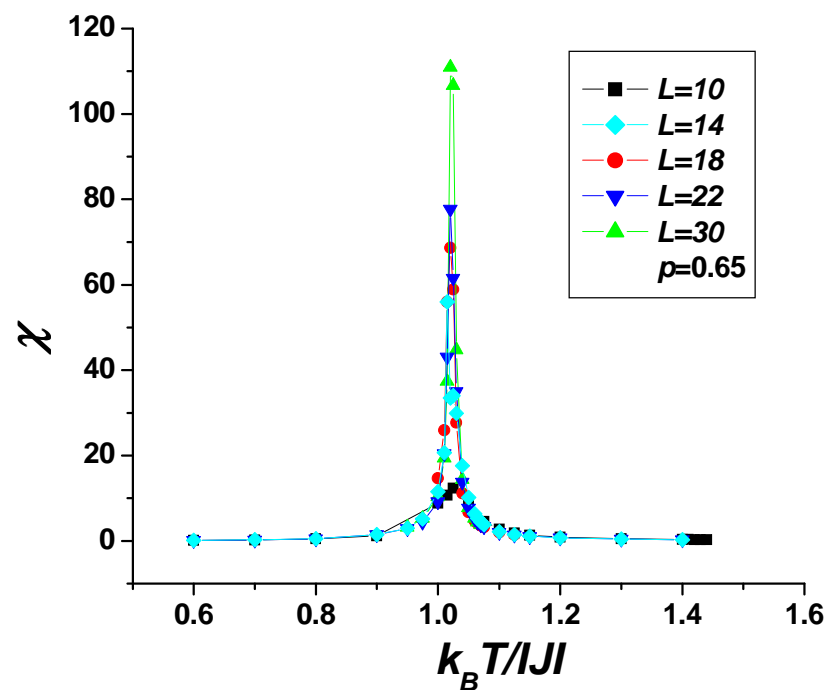
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

Температурная зависимость теплоемкости для различных L при $p=0.9$.



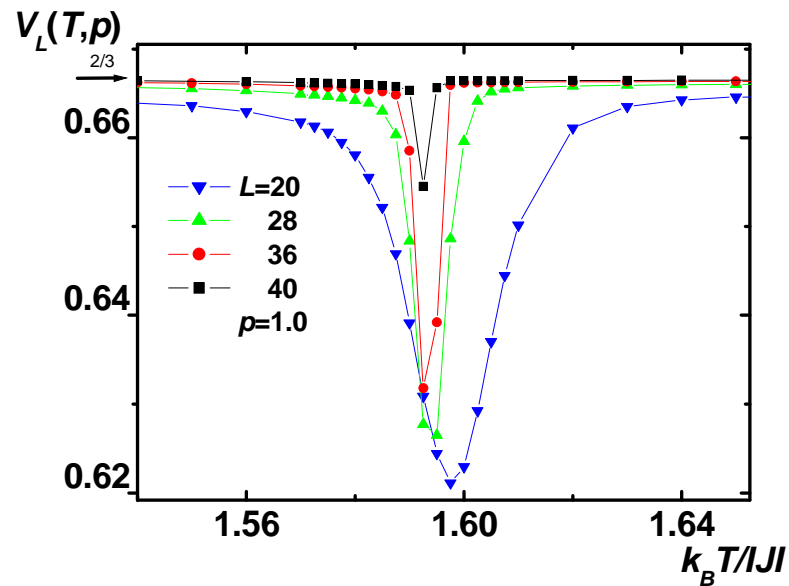
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

Температурная зависимость восприимчивости и теплоемкости для различных L при $p=0.65$



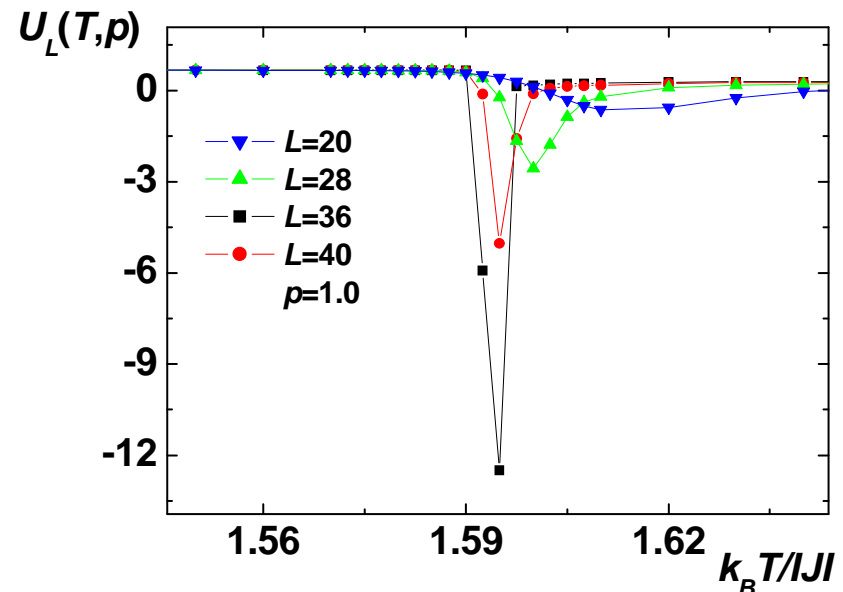
3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

Температура фазового перехода для систем с концентрацией спинов $p=1.00$

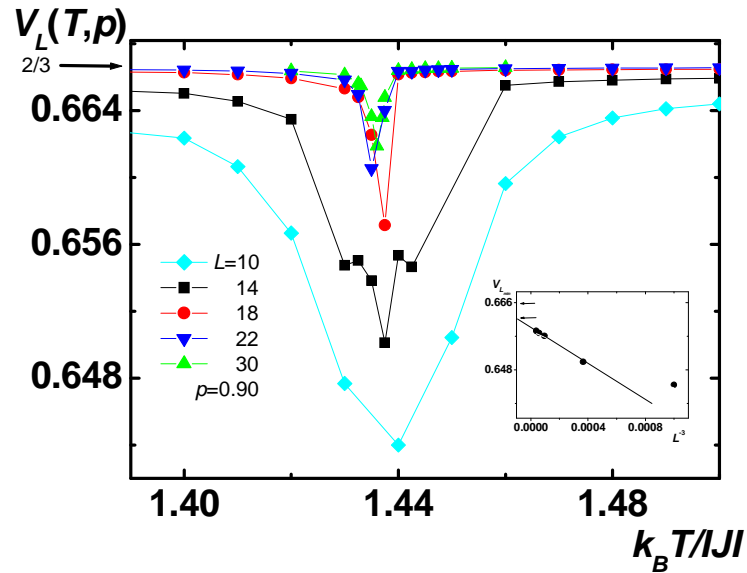


$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}$$

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



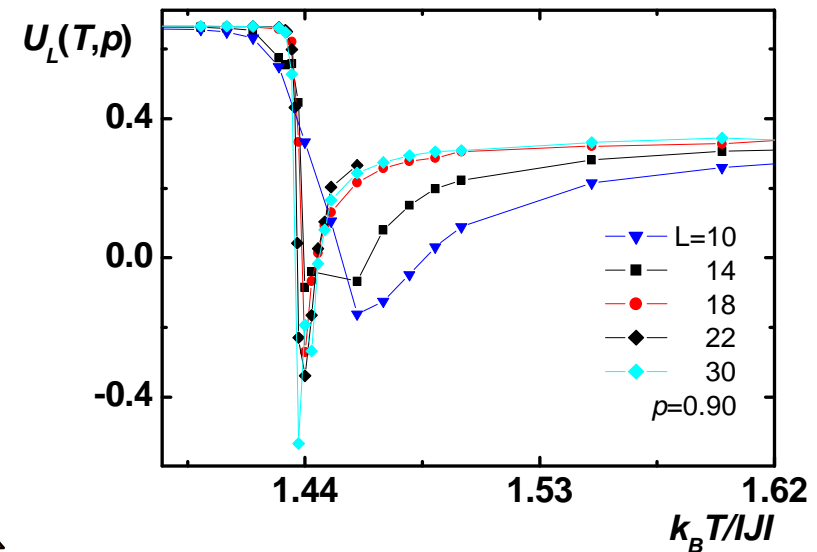
Температура фазового перехода для слабо разбавленной модели Поттса с $q=4$ при концентрации спинов $p=0.90$



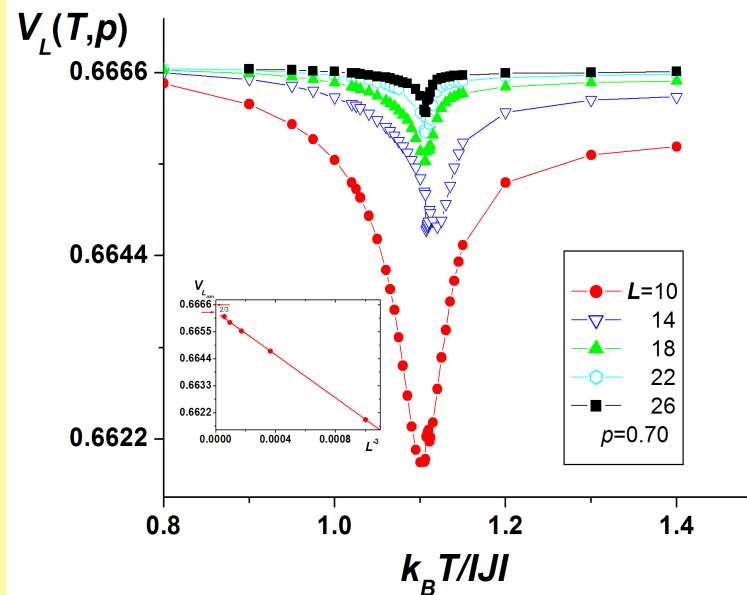
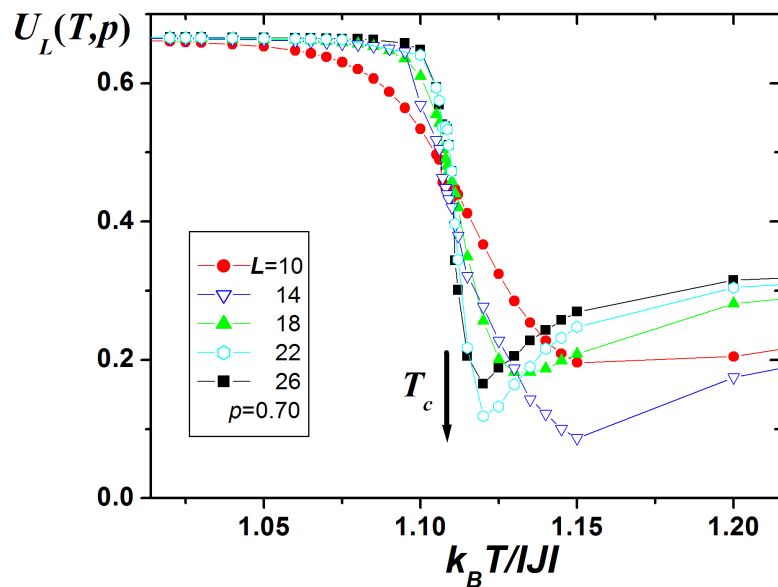
$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}$$



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

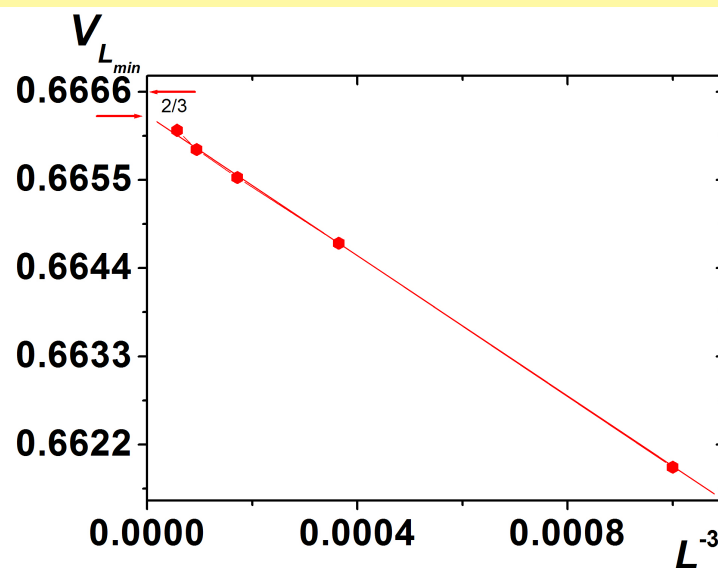


Температурная зависимость кумулянтов Биндера для сильно разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ при $p=0.70$

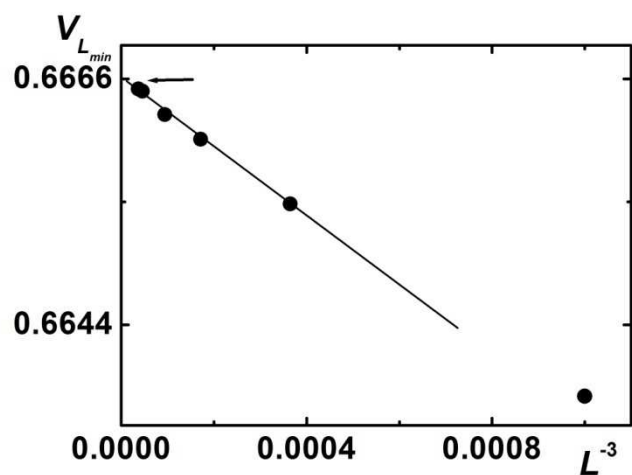
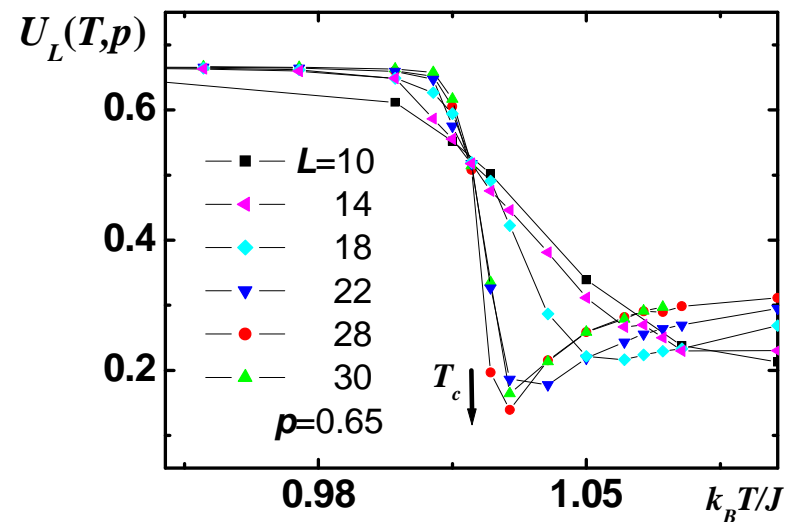
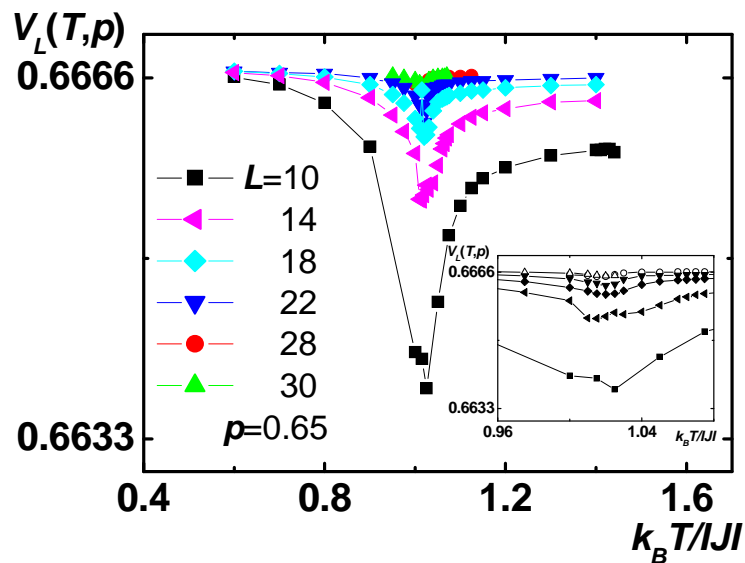


$$U_L(T, p) = \left[1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2} \right]$$

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



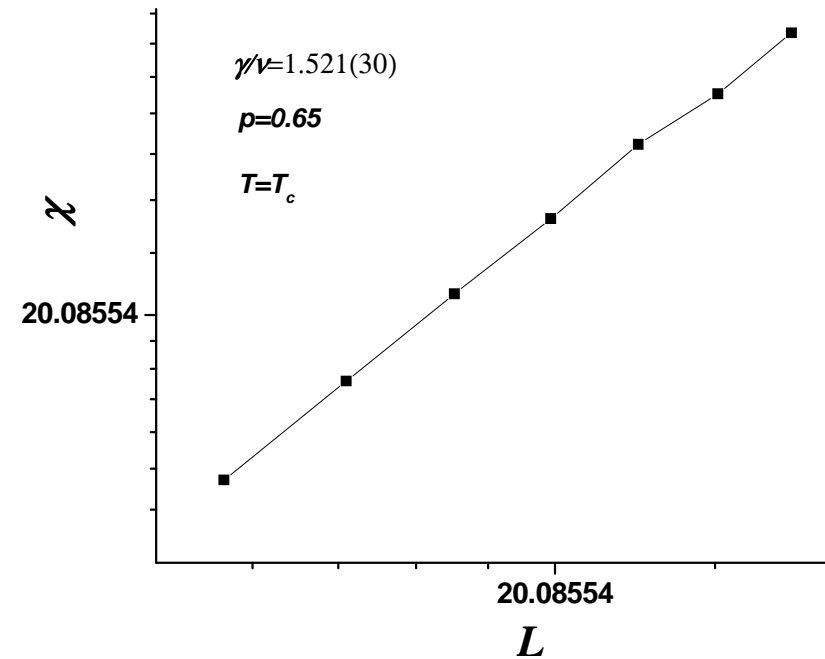
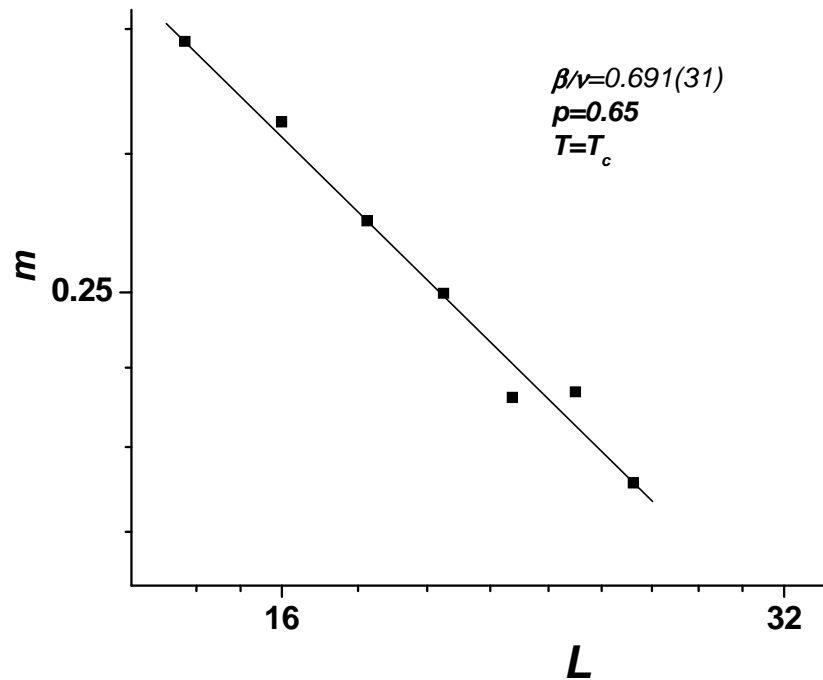
Температура фазового перехода для сильно разбавленной модели Поттса с $q=4$ при концентрации спинов $p=0.65$



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

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

Зависимость намагниченности, восприимчивости и теплоемкости от размеров системы L при $p=0.65$ и $T=T_c$.



3D модель Поттса с числом состояний спина $q=4$

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ:

- ❑ В модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ в отсутствие структурного беспорядка ($p=1.0$) и в области слабого разбавления ($p=0.90$) наблюдается поведение характерное для фазовых переходов первого рода.
- ❑ В сильно разбавленной области ($p=0.65$) внесение в систему замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей c , $c=1-p$ изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.
- ❑ Численные значения КИ, рассчитанные в сильно разбавленной области $p=0.65$ имеют значения $\alpha = -0.139(11)$, $\beta = 0.514(24)$, $\gamma = 1.133(30)$, $\nu = 0.745(13)$ и достаточно хорошо удовлетворяют скейлинговому соотношению:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$



$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2.02$$

1. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова. ФНТ, 2011, т. 37, №2, с.167-171
2. A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Y. Aznaurova. Solid State Phenomena, 2011, Vols. 168-169, p. 357-360

Глобальный вывод !!!



1.

Вмороженный беспорядок на разные спиновые модели влияет по разному !!!

2.

Критическое поведение спиновых моделей с вмороженным беспорядком зависит и от особенностей самого беспорядка!!

3.

Критическое поведение спиновых моделей с вмороженным беспорядком может зависеть и от чего-нибудь еще!!

Что мы не рассмотрели совсем ??

1. Системы с частично отождженным беспорядком!!
2. Системы, в которых примеси присутствуют в виде случайных магнитных полей!!
3. Динамику примесных систем!!

Спасибо за внимание !!!

