

隨機缺陷導致一階相變轉變至二階相變

施嘉佶¹ 姜一民²

國立中山大學物理系

¹email: d8923804@student.nsysu.edu.tw

²email: jiang@mail.phys.nsysu.edu.tw

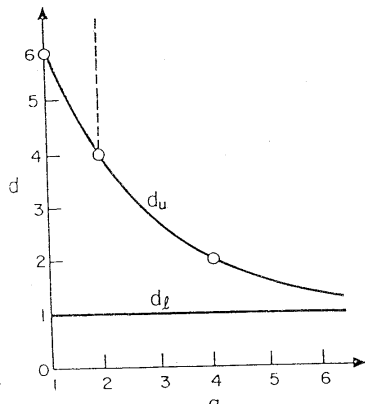
摘要

本文介紹利用 Monte Carlo 模擬方法，探討 q 階 Potts 模型由於隨機缺陷的因素使系統由一階相變轉變為二階相變。文中並舉例：反鐵磁性二維三角晶格 3 階 Potts 模型的模擬結果

關鍵字: q 階 Potts 模型，Monte Carlo 模擬方法，隨機缺陷。

隨機的缺陷對相變化的影響是一個非常有趣的問題。我們知道在排列整齊的純晶格中，隨機加入了缺陷鍵 (quenched bond) 或加不均勻的外加場 (field randomness) 將會使得系統的相變化產生明顯的改變。例如，對於具有正臨界指數 (critical exponent) α 的系統，隨機鍵缺陷將會改變其臨界指數^[1]。另外我們也知道一階相變會伴隨著潛熱及明顯的體積變化，而二階相變則沒有潛熱及明顯的體積變化，但比熱、壓縮率、磁化率等會在隨溫度變化曲線上出現躍變或無窮尖峰，兩種相變是相當不同的變化，但由於隨機缺陷的因素，卻能造成非常特殊的轉變；改變系統由一階相變轉變為二階相變。許多的實驗也發現鍵缺陷對系統相變化有影響，例如在 nCB 液晶中若加入了鍵缺陷將使得等方相 (isotropic) 到向列相 (nematic) 的相變溫度降低，且使得原來一階相變轉變成了二階相變^[2-5]。 q 階 Potts 模型^[6]是研究隨機缺陷導致相變化

改變非常好的模型，因為隨著階數 q 及系統維度的不同，系統存在著一階相變或二階相變。若將系統的熱力學性質表示成晶格維度 (d) 與階數 (q) 的函數，我可以定義臨界維度 (critical dimension)，臨界維度可分為下臨界維度 d_l 與上臨界維度 d_u 。鐵磁性系統，一維沒有相變發生，所以對任何 q ， $d_l=1$ 。已知 $d_u(q)$ 通過點 $(q,d) = (1,6), (2,4), (4,2)$ ，由這三個點我們畫出 $d_u(q)$ (圖一)。對於大於一維的系統， d_u 將相變化分成二個區域， $d < d_u$ 時為二階相變， $d \geq d_u$ 而 $q < 2$ 仍為二階相變， $d \geq d_u$ 且 $q \geq 2$ 為一階相變。對於二維的系統。



圖一. 鐵磁性 q 階 Potts 模型下臨界維度 d_c 與上臨界維度 d_u , 區域 為一階相變, 區域 為二階相變^[7]。

已知 5 階及 8 階 Potts 模型在二維整齊排列純晶格時為一階相變 S. Chen, A. M. Ferrenberg 與 D. P. Landau 曾探討二維 8 階 Potts 模型^[8], 當系統加入了 50% 鍵強度為原來鍵強度 1/2 的隨機鍵缺陷後會導致一階相變轉變為二階相變。Richrdo Paredes V 與 Johnny Valbuena 的研究也發現對於 5 階 Potts 模型^[9], 當系統加入了 20% 鍵強度為 0 的隨機鍵缺陷或 50% 鍵強度為原來鍵強度 1/10 的隨機鍵缺陷後, 原來的一階相變轉變為二階相變。

對於加入隨機鍵缺陷的 q 階 Potts 模型, 在隨機分佈的外加場下, 它的總能函數(Hamiltonian)可以寫成:

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} K_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + h \sum_i \delta_{\sigma_i, h_i}$$

上式中 $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$; δ 為 Kronecker delta function; $\langle i, j \rangle$ 表示對晶格點的所有最近鄰求和; 係數 K_{ij} 是最近鄰的鍵耦合常數, 對於鐵磁性系統取負數, 對於反鐵磁性系統取正數; h 為外加場強度, h_i 表示外加場只作用隨機選擇的晶格點 i 上。當我們討論

隨溫度產生的相變時, 通常只加入鍵缺陷而令外加場 $h = 0$ 。加入鍵缺陷的方法我們可以隨機地選擇耦合常數為以下的分佈:

$$P(J_{ij}) = f\delta(J_{ij} - J_2) + (1-f)\delta(J_{ij} - J_1)$$

J_1, J_2 分別為缺陷鍵強度及原來鍵強度, f 為缺陷鍵與正常鍵數量的比值。

對於 q 階的 Potts 模型在選定的晶格與邊界條件及系統(順磁或反磁性)上, 利用 Monte Carlo 模擬方法, 記錄每個溫度的比熱與系統能量, 先求出發生相變的溫度, 再記錄接近相變溫度時的能量分佈統計圖 (energy histogram)。接著固定缺陷鍵強度逐漸增加鍵缺陷的數量, 或是固定缺陷鍵的數量改變缺陷鍵強度, 同樣記錄臨界溫度及能量分佈曲線。若原來系統是屬於弱一階相變, 當加入了一定比率的隨機鍵缺陷, 我們將可以發現原來的一階相變轉變為二階相變。為免除缺陷鍵的位置會影響系統的臨界現象的疑慮, 我們必須模擬多種隨機鍵缺陷分佈的結果, 及要執行夠多的 Monte Carlo step (MCS) 才能更精準的模擬系統的行為。

由於一階相變在相變點會有兩相共存的過程, 我們分析能量分佈曲線可以發現有兩個能量分佈高峰, 而二階相變並無兩相共存的過程, 所以只會有一個能量分佈高峰, 我們可以藉此來判斷系統是一階或二階相變。另外, 我們也可以由 Binder cumulant^[10]來判斷:

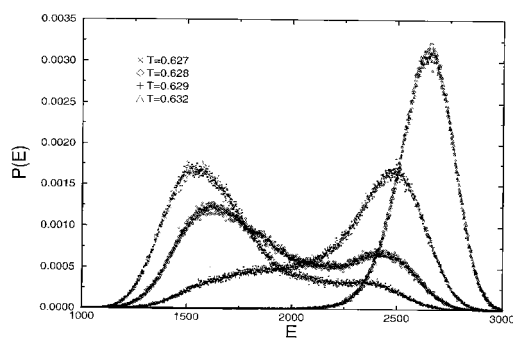
Binder cumulant 的定義為 $V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}$ 。當能量

分佈趨近高斯分佈時 V_L 趨近於 2/3, 但是能量分佈若偏離高斯分佈時則 V_L 也會偏離 2/3, 所以二階相

變時 $\lim_{L \rightarrow \infty} [\frac{2}{3} - V_L^{\min}] = 0$ ，而一階相變時

$$\lim_{L \rightarrow \infty} [\frac{2}{3} - V_L^{\min}] = \frac{(E_+ - E_-)^2 - (E_+ + E_-)^2}{3(E_+^2 + E_-^2)^2} \quad , \quad V_L \text{ 偏離 } 2/3 \text{。}$$

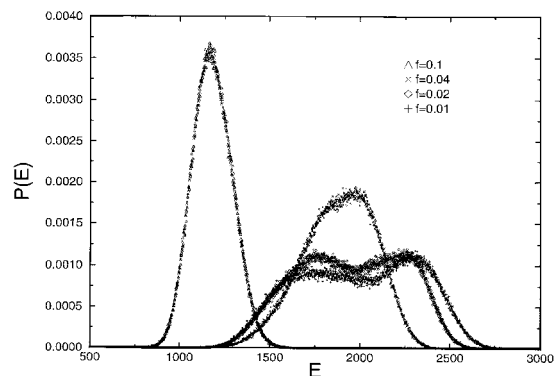
圖二及圖三為反鐵磁性二維三角晶格 3 階 Potts 模型 (3PAFT) 的模擬^[11]：我們模擬晶格數 90×90 的 3PAFT 系統，MCS 為一千萬步。圖二為排列整齊的純晶格；溫度未達到相變溫度時，系統的能量分佈趨近於高斯分佈，當溫度到達相變溫度 $T=0.628$ 時可以明顯的看到能量分佈出現 2 個高峰，為一階相變。圖三為加入了不同比率 f 強度為 0 的缺陷鍵；在相變溫度時，隨著缺陷鍵數量的增加，開始不能明顯分辨二個能量分佈高峰，當 f 達 0.1 時能量分佈變成一個峰且趨近於高斯分佈，發現 10% 隨機鍵缺陷導致系統由一階相變轉變為二階相變。



圖二 . 完整的 3PAFT 系統。分別為溫度 $T=0.627628, 0.629, 0.632$ 。 E 為系統總能量， $P(E)$ 為能量 E 出現機率。

藉由 Monte Carlo 模擬方法，我們可以發現一階相變的 Potts 模型由於隨機缺陷因素的加入而轉變為二階相變。我們曾探討過 3 階反鐵磁 Potts 模型在二維三角晶格的系統，也繼續研究對於不同

的隨機缺陷方式及不同階數 Potts 模型相變行為會有那些改變。



圖三 . 加入隨機鍵缺陷後系統能量分佈圖。加入隨機缺陷鍵比率分別為 $f = 0.01, 0.02, 0.04, 0.1$ 。

參考文獻

- [1] A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [2] X-I. Wu, W. I. Goldberg, M. X. Liu, and J. Z. Xue, Phys. Rev. Lett. **69**, 470 (1992).
- [3] T. Bellini, N. A. Clark, C. D. Muzny, L. Wu, C. W. Garland, D. W. Schaefer, and B. J. Olivier, Phys. Rev. Lett. **69**, 788 (1992).
- [4] G. S. Iannachione and D. Finotello, Phys. Rev. Lett. **69**, 2094 (1992).
- [5] N. A. Clark, T. Bellini, R. M. Malzbender, B. N. Thomas, A. G. Rappaport, C. D. Muzny, D. W. Schaefer, and L. Hrubesh, Phys. Rev. Lett. **71**, 3505 (1993).
- [6] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [7] F. Y. Wu, J. Appl. Phys. **55**, 2421 (1984).
- [8] S. Chen, A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **69**, 1213 (1992).
- [9] Ricardo Paredes V. and J. Valbuena, Phys. Rev. E **59**, 6275 (1999).
- [10] K. Binder and D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics (Springer-Verlag, New York, 1988).
- [11] C. S. Yang and I. M. Jiang, Physica A **281**, 282 (2000).