

УДК 541.123:546.21

## ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННЫХ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА

© 2020 г. А. К. Муртазаев<sup>а, \*</sup>, А. Б. Бабаев<sup>б, с, \*\*</sup>

<sup>а</sup>Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, 367010 Россия

<sup>б</sup>Отдел математики и информатики ДФИЦ РАН, Махачкала, 367032 Россия

<sup>с</sup>Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, 367003 Россия

\*e-mail: akai2005@mail.ru

\*\*e-mail: b\_albert78@mail.ru

Поступила в редакцию 14.10.2019 г.

После доработки 24.11.2019 г.

Принята к публикации 27.11.2019 г.

На основе кластерного алгоритма метода Монте-Карло исследовано влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в низкоразмерных структурах, описываемых моделями Поттса. Рассмотрены системы с линейными размерами  $L = 20–160$  при концентрациях спинов  $p = 1.0, 0.9$ . С помощью метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммного метода анализа данных показано, что внесение в систему слабого замороженного беспорядка ( $p = 0.9$ ) в виде немагнитных примесей изменяет род фазового перехода с первого на второй.

**Ключевые слова:** беспорядок, фазовые переходы, модель Поттса, метод Монте-Карло.

**DOI:** 10.31857/S1028096020060151

### ВВЕДЕНИЕ

Изучение фазовых переходов и связанных с ними критических явлений традиционно привлекают к себе внимание физиков. Неидеальные черты, присущие реальным системам, оказывают значительное влияние на фазовые переходы и критические явления в магнитных системах. В частности, присутствие немагнитных примесей может изменить род фазового перехода, и эта проблема остается актуальной в течение последних двадцати лет [1]. Поскольку аналитические теоретические и экспериментальные методы при описании неупорядоченных систем сталкиваются с большими и труднопреодолимыми проблемами, большое значение приобретают методы компьютерного моделирования [2, 3]. С развитием вычислительной физики и с применением методов Монте-Карло стало возможно изучать более реалистичные модели и учитывать усложняющие факторы, всегда присутствующие в реальных материалах [4]. В качестве таких моделей реальных физических систем могут выступать модели Поттса, критическое поведение которых весьма богато и интересно само по себе. Особенностью модели Поттса является то, что от числа состоя-

ний спина  $q$  зависит род фазового перехода: при  $q > 4$  наблюдается переход первого рода, а при  $q \leq 4$  – второго. Критические точки модели с ферромагнитным упорядочением на квадратной решетке были определены Поттсом, а при антиферромагнитном упорядочении – Бакстером [5].

### ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

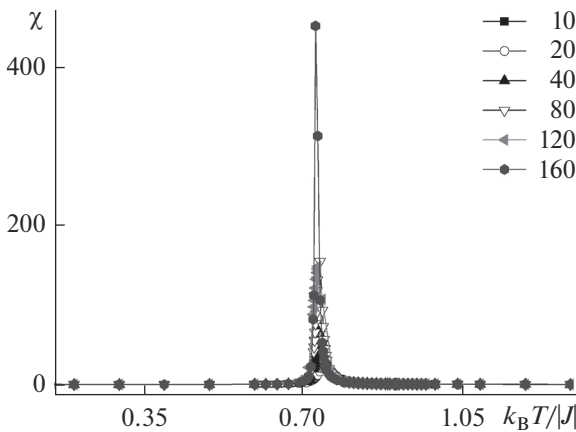
В настоящей работе на основе метода Монте-Карло исследовано влияние слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей, на фазовый переход в двумерных системах, описываемых моделями Поттса. В частности, приведены результаты для случая  $q = 5$  на квадратной решетке.

Гамильтониан спиновой системы, описываемой моделью Поттса с числом состояний спина  $q$ , имеет следующий вид:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, 4, 5, \quad (1)$$

где

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases} \text{ и } \rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь.} \end{cases}$$



**Рис. 1.** Температурная зависимость восприимчивости  $\chi$  для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке в случае систем с линейными размерами  $L = 10$ – $160$  при концентрации спинов  $p = 0.9$ . Указаны различные линейные размеры систем.

Исследования проводили на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [6] для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов  $p = 1.0, 0.9$ . Рассматривали системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 20$ – $160$ . Начальные конфигурации задавали таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси  $Z$ . Для вывода системы в равновесное состояние вычисляли время релаксации  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной  $\tau = 190\tau_0$ . Для повышения точности расчетов проводили усреднение по 10 различным начальным конфигурациям. Затем эти данные использовали для расчета средних значений термодинамических параметров. В случае слабо разбавленных систем осуществляли усреднение по 1000 неупорядоченным конфигурациям с различными примесями.

## РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ВЫВОДЫ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовали флуктуационные соотношения [7]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (2)$$

$$\chi = (NK)(\langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2), \quad (3)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N = pL^2$  – число магнитных узлов,  $U$  – внутренняя энергия,  $m_F$  – намагниченность системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности ( $m_F$ )

для ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  использовали выражение [8]:

$$m_F = \frac{\left[ q \left( \frac{N_{\max}}{N} \right) - 1 \right]}{q - 1}, \quad (4)$$

где  $N_{\max} = \max \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$ ,  $N_i$  – число спинов в состоянии с  $q = i$ ,  $N = pL^2$ .

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  от температуры  $T$  для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке в случае систем с линейными размерами  $L = 10$ – $160$  при концентрации спинов  $p = 0.9$ . Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что на температурных зависимостях восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  всех исследуемых систем наблюдаются четко выраженные максимумы – в пределах погрешности при одной и той же температуре.

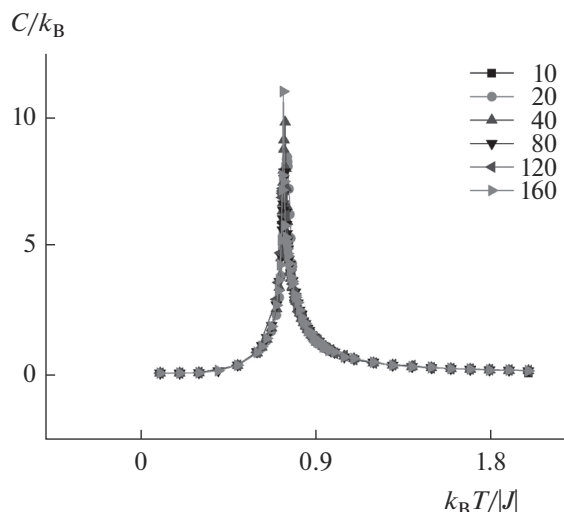
Для установления рода фазового перехода был использован гистограммный анализ данных [9]. Процедура определения рода фазового перехода этим методом и путем анализа кумулянтов Биндера четвертого порядка приведена в [10–14]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы с энергией  $U$  и параметром порядка  $m$  определяется выражением [9]:

$$\overline{P(U, m)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m) \exp[KU], \quad (5)$$

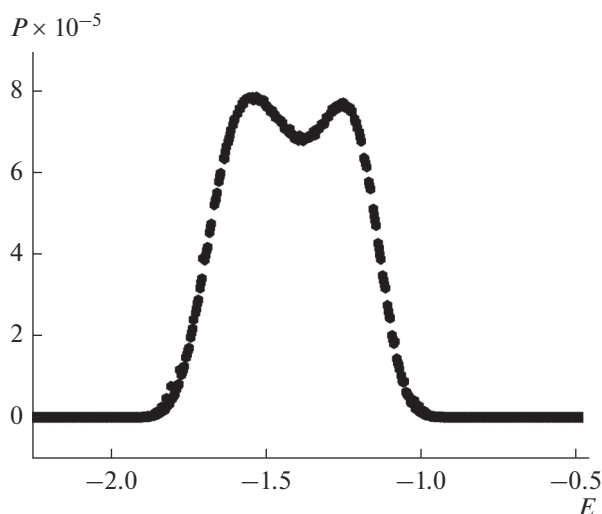
где  $W(U, m)$  – число конфигураций с энергией  $U$  и параметром порядка  $m$ ,  $Z(K)$  – функция распределения энергии всей системы,  $K$  – обратная температура.

Гистограммный анализ данных, проведенный для двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке, свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Это продемонстрировано на рис. 3, где представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода  $T_f$  для систем с линейным размером  $L = 60$ . Как видно из рис. 3, на зависимости вероятности  $P$  от энергии  $U$  для системы с  $L = 60$  наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Бимодальность в распределении энергии является надежным признаком фазового перехода первого рода.

Гистограммный анализ данных был также проведен для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса на квадратной решетке, но бимодальность в распределении энергии



**Рис. 2.** Температурная зависимость теплоемкости  $C$  для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке в случае систем с линейными размерами  $L = 10$ – $160$  при концентрации спинов  $p = 0.9$ . Указаны различные линейные размеры систем.



**Рис. 3.** Гистограмма распределения энергии для двумерной чистой модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке при концентрации спинов  $p = 1.0$  вблизи точки фазового перехода  $T_f$ .

для этой модели обнаружить не удалось. На зависимости вероятности  $P$  от энергии системы  $U$  для системы с  $L = 120$  наблюдался один хорошо выраженный максимум, что является характерным признаком фазового перехода второго рода.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 5$  в отсутствие структур-

ного беспорядка реализуется фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями теории [1]. В то же время в недавней теоретической работе [15] с применением масштабно-инвариантной теории рассеяния было показано, что при  $q = 5$  в чистой неразбавленной антиферромагнитной модели Поттса возможен фазовый переход второго рода. Подтверждение этой гипотезы в случае чистой неразбавленной антиферромагнитной модели Поттса требует дополнительных тщательных расчетов, что станет целью дальнейшего исследования. Внесение слабого замороженного беспорядка ( $c = 0.10$ ,  $c = 1 - p$ ) в виде немагнитных примесей каноническим способом в рассматриваемую модель приводит к фазовому переходу второго рода.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wu F.Y.* Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. London: World Scientific, 2009.
2. *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования. М.: Физматлит, 2009. 224 с.
3. *Прудников В.В., Прудников П.В., Вакилов А.Н.* Теоретические методы описания неравновесного критического поведения структурно неупорядоченных систем. М.: Физматлит, 2013. 313 с.
4. *Vasilyev O., Berche B., Dudka M., Holovatch Yu.* // Phys. Rev. E. 2015. V. 92. P. 042118.
5. *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 488 с.
6. *Wolff U.* // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361.
7. *Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 6087.
8. *Chatelain C., Berche B.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 1670.
9. *Alves N.A., Berg B.A., Villanova R.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 383.
10. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Касан-Оглы Ф.А., Прошкин А.И.* // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100. С. 267.
11. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б.* // ЖЭТФ. 2016. Т. 149. С. 357.
12. *Бабаев А.Б., Муртазаев А.К.* // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 105. С. 363.
13. *Бабаев А.Б., Муртазаев А.К.* // Физика твердого тела. 2016. Т. 58. С. 2001.
14. *Бабаев А.Б., Муртазаев А.К.* // Физика низких температур. 2015. Т. 41. С. 784.
15. *Delfino G., Selke W., Squarcini A.* // J. Stat. Mech. 2018. V. 5. P. 053203.

## Influence of Quenched Non-Magnetic Impurities on Phase Transitions in Low-Dimensional Potts Models

A. K. Murtazaev<sup>1, \*</sup>, A. B. Babaev<sup>2, 3, \*\*</sup>

<sup>1</sup>*Amirkhanov Institute of Physics of the Daghestan Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences,  
Makhachkala, 367010 Russia*

<sup>2</sup>*Department of Mathematics and Computer Science of Daghestan Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences,  
Makhachkala, 367032 Russia*

<sup>3</sup>*Dagestan State Pedagogical University, Makhachkala, 367003 Russia*

\**e-mail: akai2005@mail.ru*

\*\**e-mail: b\_albert78@mail.ru*

The effect of quenched non-magnetic impurities on phase transitions in low-dimensional Potts model structures is investigated by the Monte Carlo method using a cluster algorithm. Systems with linear dimensions  $L = 20-160$  and spin concentrations  $p = 1.0, 0.9$  are considered. Using the fourth-order Binder cumulant method and the histogram data analysis method, the introduction of a weak quenched disorder ( $p = 0.9$ ) in the form of non-magnetic impurities is shown to change the order of phase transition from the first to the second.

**Keywords:** disorder, phase transitions, Potts model, Monte Carlo method.