ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2021, № 10, с. 84–88

УДК 537.9:538.913

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДВУМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ, ОПИСЫВАЕМЫХ ПРИМЕСНЫМИ МОДЕЛЯМИ ПОТТСА

А. К. Муртазаев[a], А. Б. Бабаев[b, c, *], Г. Я. Атаева[a], А. А. Муртазаева[a]

[a] *Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, 367010 Россия*

[b] *Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, 367000 Россия*

[c] *Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, 367003 Россия*

**e-mail: b_albert78@mail.ru*

Поступила в редакцию 12.12.2020 г.
После доработки 22.02.2021 г.
Принята к публикации 25.02.2021 г.

На основе численных методов вычислительной физики исследованы фазовые переходы в двумерной примесной модели Поттса на квадратной решетке. Расчеты проводились для слабо разбавленных систем с периодическими граничными условиями при концентрации спинов $p = 0.95$. Были рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10$–160. Изучено влияние незначительного беспорядка, реализованного в виде вмороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы первого рода. Приведены температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и намагниченности в зависимости от линейных размеров изучаемых систем. С применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммного анализа данных показано, что небольшая концентрация примесей $c = 5\%$ ($c = 1 - p$) достаточна для изменения рода фазового перехода – с первого на второй.

Ключевые слова: немагнитная примесь, беспорядок, модель Поттса, квадратная решетка, алгоритм Вольфа, метод Монте-Карло, численные методы, фазовый переход, кумулянты Биндера, аппроксимация численных данных

DOI: 10.31857/S1028096021090119

ВВЕДЕНИЕ

К настоящему моменту известно, что немагнитные примеси и дефекты структуры влияют на тепловые и магнитные характеристики спиновых систем, если критический индекс теплоемкости, соответствующий “чистой” системе, положителен, т.е. $\alpha > 0$. В противоположном случае, когда $\alpha < 0$, слабый беспорядок не влияет на критическое поведение (критерий Харриса [1]). В то же время имеются основания предполагать, что примеси оказывают совершенно другое влияние, вплоть до изменения рода фазового перехода в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии фазовый переход первого рода [2].

В работе исследованы фазовые переходы в двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.95$. Исследования проведены на основе кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло [3]. Для двумерной модели Поттса с $q = 5$ до сих пор нет достоверных данных о влиянии незначительной концентрации немагнитных примесей на тепловые и магнитные свойства, не исследовано их влияние на фазовые переходы, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей [4]. Единственным надежно установленным фактом является, то, что в “чистой” модели реализуется фазовый переход первого рода согласно аналитическим методам [5].

МОДЕЛЬ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

В узлах i квадратной решетки $L \times L$ с периодическими граничными условиями расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из состояний $q = 1, 2, 3, 4, 5$, и немагнитные примеси ($S_i = 0$). Немагнитные примеси неподвижны. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если хотя бы в одном узле находится немагнитная примесь или если взаимодействующие спины находятся в различных состояниях, и равна J, если оба узла заняты магнитными атомами, находящимися в одинаковых состояниях. Гамильтониан такой системы можно записать в следующем виде [5]:

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

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

и J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальнейшем считаем $J = 1$ и работаем с безразмерной температурой). Концентрация магнитных атомов определяется суммированием всех состояний атомов во всех узлах решетки:

$$p = \frac{(N_1 + N_2 + N_3 + N_4 + N_5)}{L^2}, \tag{2}$$

где $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$, N_1 – число спинов в состоянии с $q = 1$, N_2 – число спинов в состоянии с $q = 2$, N_3 – число спинов в состоянии с $q = 3$, N_4 – число спинов в состоянии с $q = 4$, N_5 – число спинов в состоянии с $q = 5$. Были рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10–160$.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

За температурным поведением теплоемкости и восприимчивости наблюдали с использованием флуктуационных соотношений [6]:

$$C = (NK^2)\left(\left\langle U^2\right\rangle - \left\langle U\right\rangle^2\right), \tag{3}$$

$$\chi = (NK)\left(\left\langle m_F^2\right\rangle - \left\langle m_F\right\rangle^2\right), \tag{4}$$

где $K = |J|/k_BT$, $N = pL^2$ – 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 следующее выражение [7]:

$$m_F = \frac{\left[q\left(\frac{N_{\max}}{N}\right) - 1\right]}{q - 1}, \tag{5}$$

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 χ и теплоемкости C от температуры T для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке для систем с линейными размерами $L = 10–160$ при концентрации спинов $p = 0.95$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что на зависимостях восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры всех исследуемых систем проявляются четко выра-

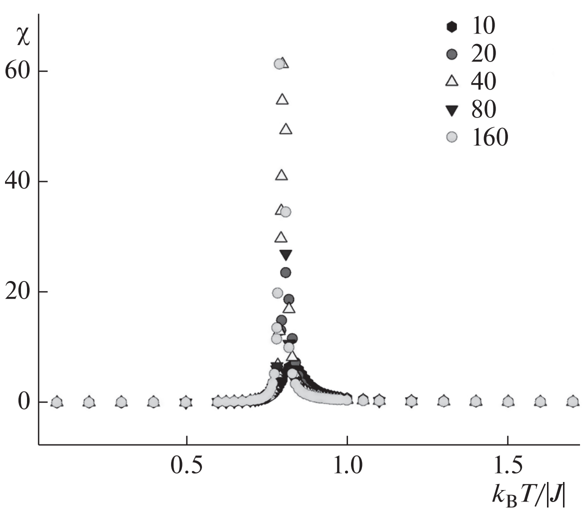

Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ для систем с линейными размерами $L = 10–160$ при концентрации спинов $p = 0.95$.

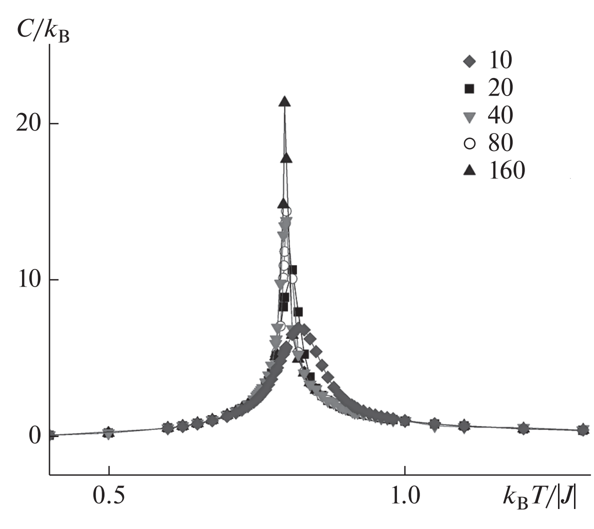

Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C для двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ для систем с линейными размерами $L = 10–160$ при концентрации спинов $p = 0.95$.

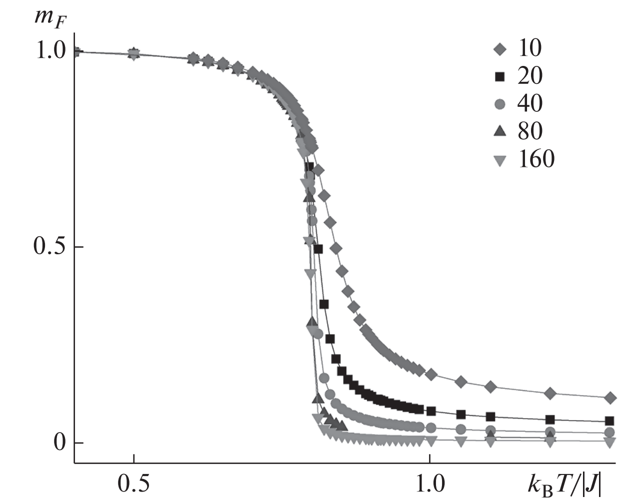

Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности m_F для двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ для систем с линейными размерами $L = 10–160$ при концентрации спинов $p = 0.95$.

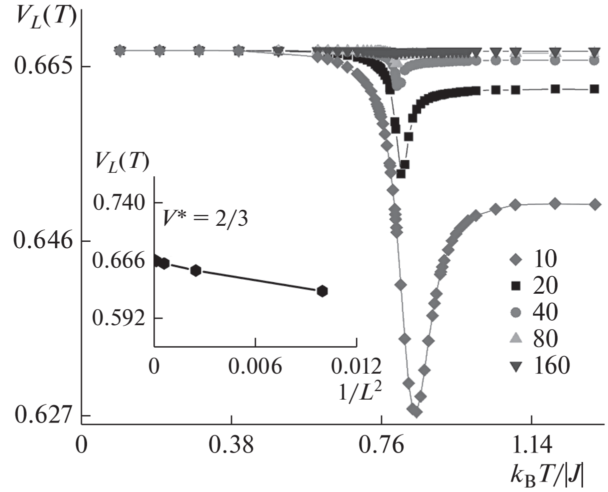

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ для примесной модели Поттса для систем с линейными размерами $L = 10–160$ при концентрации спинов при $p = 0.95$. На вставке – аппроксимация кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ в соответствии с выражением (8).

женные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности соответствуют одной температуре.

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для двумерной трехвершинной слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.95$. Как видно из рисунка, наблюдается монотонное уменьшение m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных “хвостов” при увеличении линейного размера L.

Для анализа характера фазового перехода применялся метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [8]:

$$V_L(T,p) = 1 - \frac{\left\langle E^4(T,p;L)\right\rangle_L}{3\left\langle E^2(T,p;L)\right\rangle_L^2}, \tag{6}$$

$$U_L(T,p) = 1 - \frac{\left\langle m^4(T,p;L)\right\rangle_L}{3\left\langle m^2(T,p;L)\right\rangle_L^2}, \tag{7}$$

где E – энергия и m – намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (6) и (7) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$, соответственно, первого и второго рода с большой точностью. Данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода фазового перехода [9]. Характерные зависимости энергетических кумулянтов Биндера $V_L(T,p)$ от температуры для слабо разбавленных систем с разными линейными размерами при концентрации спинов $p = 0.95$ приведены на рис. 4. Из рисунка видно, что нетривиальная величина $V^* \to 2/3$ в соответствии с выражением $V(T,p) = V^* + bL^{-d}$ при $L \to \infty$. Такое поведение, как известно, характерно для фазового перехода второго рода. Кроме того, для кумулянтов Биндера $U_L(T,\ p)$ (рис. 5) в

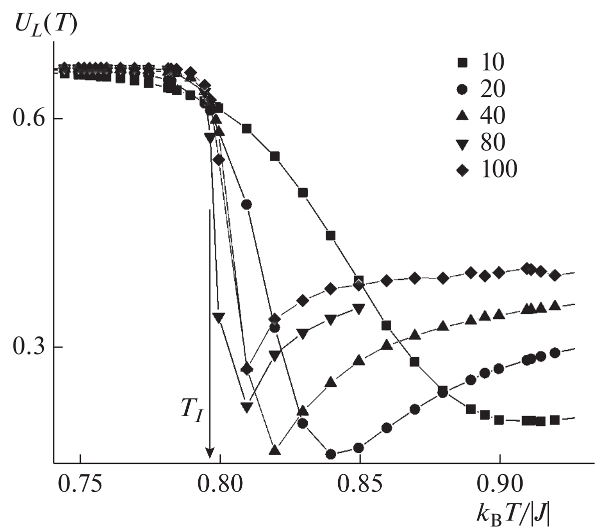

Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T,p)$ для примесной модели Поттса для систем с линейными размерами $L = 10–100$ при концентрации спинов $p = 0.95$. $T_l = 0.796$.

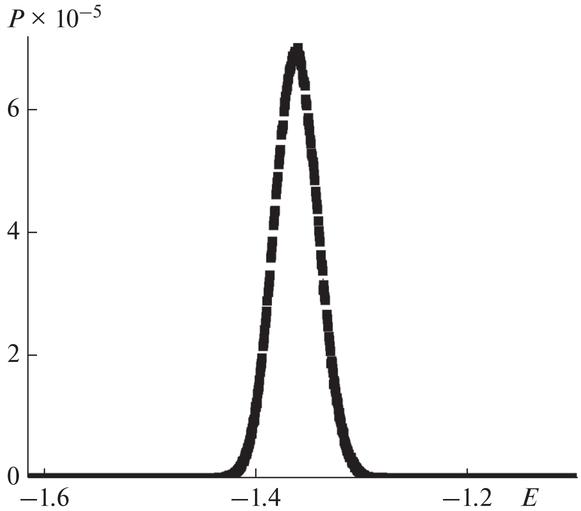

Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ при концентрации спинов $p = 0.95$. P – вероятность, $L = 120$.

критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения, и $U_L(T, p)$ не стремится к $-\infty$ при $L \to \infty$, что также свидетельствует о фазовом переходе второго рода. Определенная методом кумулянтов Биндера температура фазового перехода $T_l(p)$ при $p = 0.95$ в единицах $|J|/k_{\rm B}$ равна: $T_l(0.95) = 0.796(2)$. Температуры фазовых переходов для других концентраций спинов $p = 1.00$, 0.90, 0.80 были получены в [10, 11].

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода фазового перехода был использован и гистограммный анализ данных метода Монте-Карло [12, 13]. Гистограммный анализ, проведенный для двумерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на квадратной решетке при концентрации спинов $p = 0.95$, также свидетельствует о фазовом переходе второго рода. На рис. 6 представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для систем с линейным размером $L = 120$. Как видно из рисунка, бимодальность гистограммы распределения энергии, наблюдаемую в “чистой” неразбавленной двумерной модели Поттса [14, 15], в случае внесения незначительной концентрации примесей порядка 5% обнаружить не удалось. На зависимости вероятности P от энергии E системы с $L = 120$ наблюдается один хорошо выраженный максимум (рис. 6), что является одним из достаточных условий фазового перехода второго рода.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, данные, полученные на основе вычислительного эксперимента, свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ внесение небольшого беспорядка в виде немагнитных примесей концентрацией $c = 5\%$ ($c = 1 - p$) каноническим способом достаточно для изменения порядка фазового первого рода – с первого на второй.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Harris A.B.* // J. Phys. C. 1974. V. 7. P. 1671.
2. *Aizenman M., Wehr J.* // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2503. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.2503
3. *Wolff U.* // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.361
4. *Qian X., Deng Y., Blöte W.J.* // Phys. Rev. E. 2005. V. 72. P. 056132. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.72.056132
5. *Wu. F.Y.* Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. London: World Scientific, 2009.
6. *Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 6087. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.6087
7. *Chatelain C., Berche B.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 1670. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1670
8. *Eichhorn K., Binder K.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1996. V. 8. P. 5209. https://doi.org/10.1088/0953-8984/8/28/005
9. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech. 2020. V. 14. P. 727. https://doi.org/10.1134/S1027451020030350
10. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // Phys. Solid State. 2020. V. 62. № 5. P. 851. https://doi.org/10.1134/S1063783420050042
11. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // Mater. Lett. 2020. V. 258. P. 126771. https://doi.org/10.1016/j.matlet.2019.126771
12. *Alves N.A., Berg B.A., Villanova R.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 383. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.383
13. *Wang F., Landau D.P.* // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. P. 056101. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.056101
14. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* // Low Temp. Phys. 2020. V. 46. P. 688. https://doi.org/10.1063/10.0001365
15. *Murtazaev A.K., Babaev A.B., Ataeva G.Ya.* // Phys. Solid State. 2020. V. 62. № 7. P. 1228. https://doi.org/10.1134/S1063783420070185

Phase Transitions in Two-Dimensional Structures Described by Impurity Potts Models

A. K. Murtazaev[1, *], A. B. Babaev[2, 3, **], G. Y. Ataeva[1], and A. A. Murtazaeva[1]

[1]*H. Amirkhanov Institute of Physics of the Daghestan Federal Research Centre RAS, Makhachkala, 367010 Russia*

[2]*Daghestan Federal Research Centre RAS, Makhachkala, 367000 Russia*

[3]*Dagestan State Pedagogical University, Makhachkala, 367003 Russia*

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

***e-mail: b_albert78@mail.ru*

The phase transitions in the two-dimensional impurity Potts model on a square lattice were investigated on the basis of numerical methods of computational physics. The calculations were performed for weakly dilute systems with periodic boundary conditions at a spin concentration $p = 0.95$. Systems with linear dimensions $L \times L = N$, $L = 10$–160 were considered. The effect of insignificant disorder in the form of quenchend-in non-magnetic impurities on first-order phase transitions was studied. Temperature dependences of heat capacity, susceptibility, and magnetization are given as functions of the linear dimensions of the systems under study. Using the fourth-order Binder cumulant method and histogram analysis of the data, it was shown that a small impurity concentration of $c = 5\%$ ($c = 1 - p$) was sufficient to change the order of the phase transition from the first to the second.

Keywords: nonmagnetic impurity, disorder, Potts model, square lattice, Wolf algorithm, Monte Carlo simulation, numerical methods, phase transition, Binder cumulants, numerical data approximation.