ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2022, № 5, с. 37–41

УДК 537.9 538.913

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ТРЕХМЕРНЫХ СЛАБО РАЗБАВЛЕННЫХ СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ

А. К. Муртазаев[a], А. Б. Бабаев[b, *]

[a] *Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, Махачкала, 367010 Россия*

[b] *Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, 367032 Россия*

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

Поступила в редакцию 16.06.2021 г.
После доработки 27.08.2021 г.
Принята к публикации 30.08.2021 г.

Проведено компьютерное моделирование фазовых переходов в трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке. Расчеты проводились для спиновых систем с периодическими граничными условиями при концентрации спинов $p = 1.0$ и $p = 0.90$. При этом рассматривались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 10–80$. Получены температурные зависимости теплоемкости, восприимчивости и намагниченности в зависимости от линейных размеров изучаемых систем L. Методом кумулянтов Биндера четвертого порядка и с применением гистограммного анализа данных показано, что наличие слабого беспорядка в виде немагнитных примесей порядка $c = 10\%$ ($c = 1 - p$, p — концентрация спинов) не сказывается на фазовом переходе первого рода.

Ключевые слова: беспорядок, дефекты, модель Поттса, кубическая решетка, кластерный алгоритм, метод Монте-Карло, компьютерное моделирование, фазовый переход, кумулянты Биндера, гистограмма, распределение энергии.

DOI: 10.31857/S1028096022050156

ВВЕДЕНИЕ

Фазовые переходы (ФП) и связанные с ними критические явления (КЯ) чрезвычайно широко распространены в конденсированных средах. При определенных условиях во всех конденсированных средах происходят один или несколько фазовых переходов. На разработку эффективной теории ФП и КЯ были затрачены значительные усилия, и к настоящему моменту времени в этом направлении достигнут существенный прогресс [1–3]. С другой стороны, следует отметить, что большинство результатов в этой области получены для однородных, идеализированных и сильно упрощенных моделей. В реальном мире мы имеем дело со спиновыми системами и материалами, которые существенно отличаются от идеализированных систем. Как с точки зрения практики, так и с точки зрения теории, всегда возникает вопрос о влиянии дефектов и случайных структур, присутствующих в реальных системах, на различные тепловые и магнитные характеристики. В этом плане особенный интерес представляет определение трикритической точки p_c, отделяющей на фазовой диаграмме область ФП первого рода от области ФП второго рода [4, 5]. Кроме того, возникает вопрос уверены ли мы в том, что ФП первого рода наблюдаются в присутствии разбавления? Точная величина p_c имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении высоко температурной сверхпроводимости, возникающей при замещении небольшого количества магнитных атомов La немагнитными атомами стронция Sr в антиферромагнитном диэлектрике $LaCuO_4$ [6].

МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

В узлах i кубической решетки $L \times L \times L$ с периодическими граничными условиями расположены спины S_i, которые могут находиться в одном из следующих 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 [7]:

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

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

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:

$$p = \frac{(N_1 + N_2 + N_3 + N_4 + N_5)}{L^3}, \tag{2}$$

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 $q = 5$. При этом рассматривались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 10$–80.

Исследования проводили на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК) [8]. Расчеты проводили для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00$, 0.90. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси Z. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L. Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Для самой большой системы $L = 80$, $\tau_0 = 2.3\times10^3$ МК шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае $p = 1.0$ для усреднения использовалось 15 начальных конфигураций. Для слабо разбавленных систем с концентрацией спинов $p = 0.90$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 2000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 150\tau_0$.

РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Наблюдение за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости осуществлялось с использованием флуктуационных соотношений [9]:

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

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

где $K = |J|/k_\mathrm{B}T$, $N = p^*L^3$ – 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 $q = 5$ использовалось следующее выражение [10]

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

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

На рис. 1, 2 представлены характерные зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры T для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке для систем с линейными размерами $L = 10$–80 при концентрации спинов $p = 0.90$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы (в пределах погрешности) приходятся на одну температуру. Как видно из этих рисунков, представленные температурные зависимости восприимчивости и теплоемкости проявляют слабую размерную зависимость. Это связано с тем, что на исследуемую разбавленную систему накладывались периодические граничные условия. Кроме того, в рассматриваемой неупорядоченной модели Поттса с $q = 5$ наблюдается слабо выраженный фазовый переход первого рода, при этом размерные эффекты ярко не проявляются.

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.90$. Как видно из рис. 3, наблюдается монотонное уменьшение величины m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных "хвостов" при увеличении линейного размера L.

В случае компьютерного моделирования фазовых переходов при определении температуры ФП

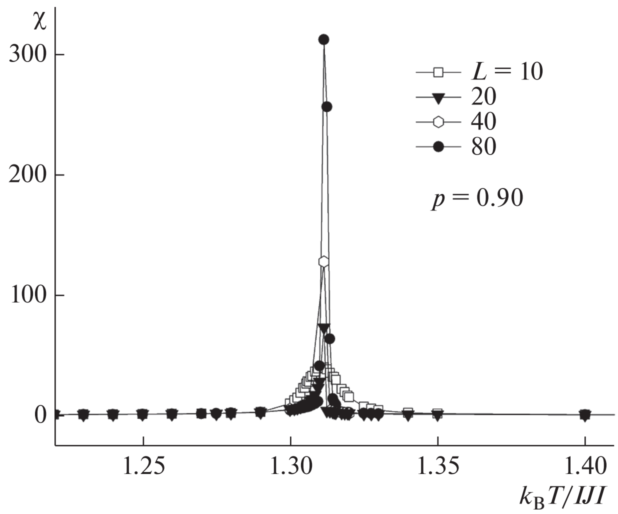

Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$.

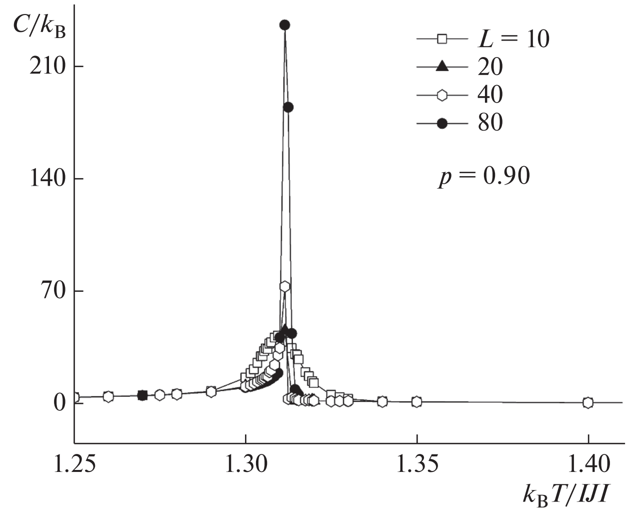

Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$.

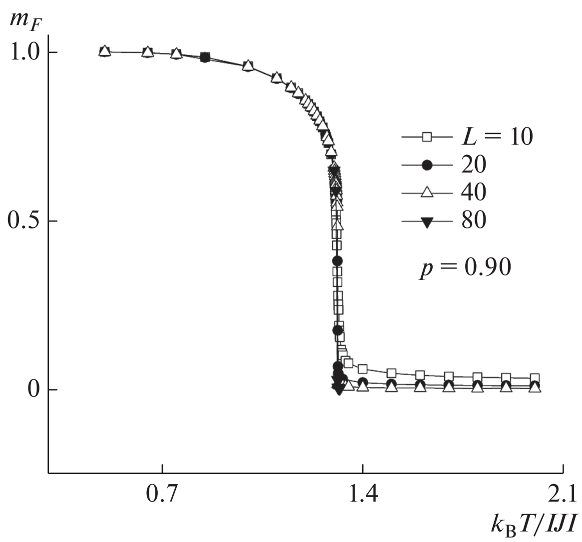

Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности m_F для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$.

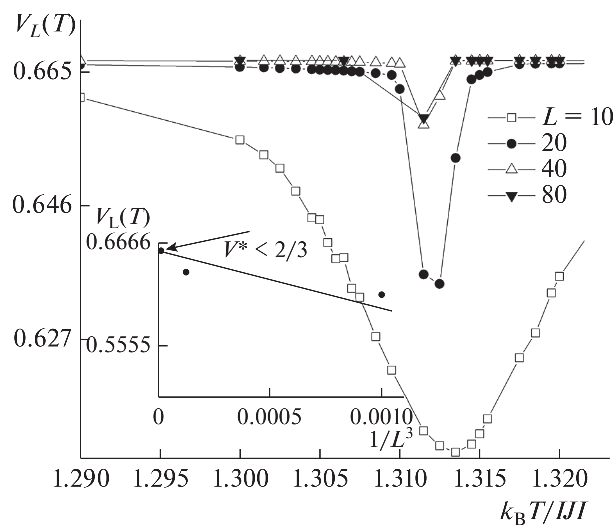

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.90$.

T_L наилучшим образом зарекомендовал метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [11]:

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

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

где E – энергия и m – намагниченность системы с линейным размером L. Выражения (6) и (7) позволяют определить температуру ФП $T_L\,(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода. Кроме того, изучение кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ очень полезно для определения рода ФП [12–16]. Характерные зависимости энергетических кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ от температуры для слабо разбавленных систем с разными линейными размерами при концентрации спинов $p = 0.90$ приведены на рис. 4. Как следует из вставки на рис. 4, нетривиальная величина V^* не стремится к 2/3 в соответствии с выражением $V(T, p) = V^* + bL^{-d}$ при $L \to \infty$. Такое поведение, как известно, характерно для ФП пер-

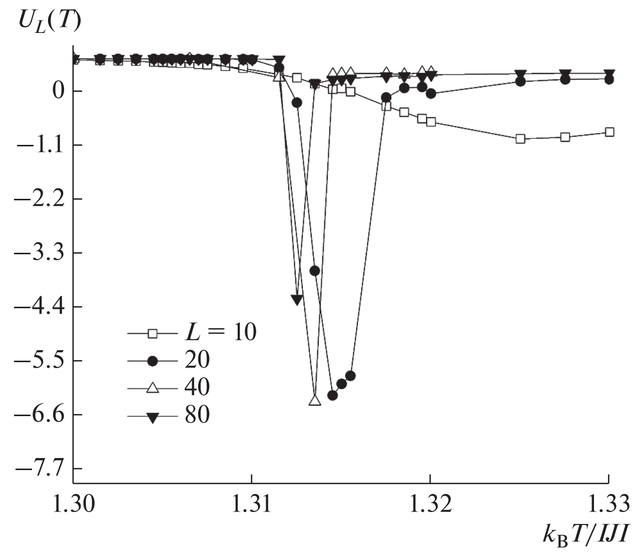

Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса при $p = 0.90$.

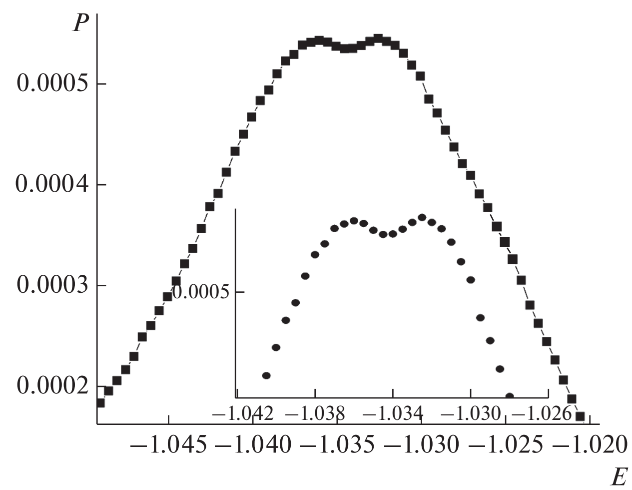

Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 0.90$.

вого рода. Кроме того, для кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ (рис. 5) в точке ФП не наблюдается четко выраженная точка пересечения, что также свидетельствует о ФП первого рода. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов $T_L(p)$ в единицах $|J|/k_B$ равны: $T_L(1.00) = 1.452$ (1) и $T_L(0.90) = 1.31(1)$.

Параллельно с методом кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода Монте-Карло [17, 18]. Гистограммный анализ данных, проведенный нами для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке, также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 6. На данном рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_L для систем с линейным размером $L = 80$ при концентрации спинов $p = 0.90$. Как видно из вставки на рис. 6, наблюдается бимодальность в распределении энергии, характерная для ФП первого рода. Для этой модели при концентрации спинов $p = 0.8$ в работе [19] было выявлено распределение энергии с одним максимумом. По-видимому, трикритическая точка для трехмерной модели Поттса с $q = 5$ находится в интервале изменения концентраций спинов $0.80 < p_c < 0.9$. Определение точного значения трикритической точки p_c требует отдельного рассмотрения. Значение p_c также зависит от числа состояний спина q рассматриваемой модели Поттса. В частности, в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ наличие незначительных количества немагнитных примесей (порядка 5%) оказывается существенным, при этом происходит смена фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода [20].

Таким образом, полученные в результате наших исследований данные свидетельствуют о том, что в трехмерных структурах, описываемых ферромагнитной моделью Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке, слабый беспорядок, реализованный в виде немагнитных примесей концентрацией 10%, не оказывается существенным, и в рассматриваемой спиновой системе наблюдается фазовый переход первого рода, как и в случае однородной модели Поттса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики исследованы фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке методами компьютерного моделирования. С использованием кумулянтов Биндера четвертого порядка определены температуры фазового перехода в зависимости от концентрации спинов p. Показано, что температурные зависимости для намагниченности, теплоемкости и восприимчивости не проявляют конечно-размерные эффекты. Полученные данные на основе вычислительного эксперимента свидетельствуют о том, что в рассматриваемой модели Поттса внесение небольшого беспорядка в виде немагнитных примесей в количестве $c = 10\%$ ($c = 1 - p$) каноническим способом не существенно для фазового перехода первого рода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Паташинский А.З., Покровский В.А.* Флуктуационная теория фазовых переходов, М.: Наука, 1982. 154 с.
2. *Прудников В.В., Вакилов А.Н., Прудников П.В.* Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования, М.: Физматлит, 2009. 254 с.
3. *Henkel M., Pleimling M.*, Nonequilibtium Phase Transitions, Springer, 2010. P. 320.
4. *Cardy J., Jacobsen J.L.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. P. 4063.
5. *Fernandez L.A., Gordillo-Guerrero A., Martin-Mayor V., Ruiz-Lorenzo J.J.* // Phys. Rev. B. 2012. V. 86. P. 184428. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.184428
6. *Sen C., Alvarez G., Dagotto E.* // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 127202.
7. *Wu F.Y.* Exactly Solved Models. London: World Scientific, 2009.
8. *Wolff U.* // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.361
9. *Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 6087. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.6087
10. *Chatelain C., Berche B.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 1670. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1670
11. *Eichhorn K., Binder K.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1996. V. 8. P. 5209. https://doi.org/10.1088/0953-8984/8/28/005
12. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2020. V. 14. № 4. P. 727. https://doi.org/10.1134/S1027451020030350
13. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // Physics of the Solid State. 2020. V. 62. № 5. P. 851. https://doi.org/10.1134/S1063783420050042
14. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // Materials Letters. 2020. V. 258. P. 126771. https://doi.org/10.1016/j.matlet.2019.126771
15. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* // Low Temperature Physics. 2020. V. 46. P. 688. https://doi.org/10.1063/10.0001365
16. *Murtazaev A.K., Babaev A.B., Ataeva G.Ya.* // Physics of the Solid State. 2020. V. 62. № 7. P. 1228. https://doi.org/10.1134/S1063783420070185
17. *Alves N.A., Berg B.A., Villanova R.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 383. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.383
18. *Wang F., Landau D.P.* // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. P. 056101. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.056101
19. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* // J. Experimental and Theoretical Physics. 2021. V. 132. P. 917. https://doi.org/10.1134/S1063776121060054
20. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* // Low Temperature Physics. 2015. V. 41. P. 608. https://doi.org/10.1063/1.4929595

Computer Simulation of Phase Transitions in Three-Dimensional Weakly Diluted Spin Systems

A. K. Murtazaev[1], A. B. Babaev[2, *]

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

[2]*Daghestan Federal Research Centre of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, 367032 Russia*

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

A computer simulation of phase transitions in a three-dimensional weakly diluted 5-state Potts model on a simple cubic lattice is performed. Calculations were performed for spin systems with periodic boundary conditions at spin concentrations $p = 1.0$ and $p = 0.90$. Systems with linear dimensions $L \times L \times L = N$, $L = 10$–80 were considered. The temperature dependences of the specific heat, susceptibility, and magnetization as a function of the linear dimensions of the studied systems are obtained. Using the fourth-order Binder cumulants and using histogram data analysis, it is shown that the presence of a weak disorder in the form of nonmagnetic impurities of the order $c = 10\%$ ($c = 1 - p$, p — spin concentration) does not affect the phase transition of the first-order.

Keywords: disorder, defects, Potts model, cubic lattice, cluster algorithm, Monte Carlo method, computer simulation, phase transition, Binder cumulants, histogram, energy distribution.