

# ВЛИЯНИЕ ВМОРОЖЕННЫХ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРЕХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

А. К. Муртазаев<sup>а</sup>, А. Б. Бабаев<sup>б\*</sup>

<sup>а</sup> *Институт физики им. Х. И. Амирханова  
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
367003, Махачкала, Россия*

<sup>б</sup> *Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук  
367000, Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 31 января 2021 г.,  
после переработки 10 февраля 2021 г.  
Принята к публикации 10 февраля 2021 г.

С помощью кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло исследуется влияние слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей, на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$ . Рассмотрены системы с линейными размерами  $L = 10\text{--}120$  при концентрациях спинов  $p = 1.00, 0.80$ . Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных, мы показали, что внесение в систему слабого замороженного беспорядка ( $p = 0.80$ ) в виде немагнитных примесей изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451021060055

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение влияния беспорядка, содержащегося в твердом теле в виде примесей или других дефектов структуры, на фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) представляет большой теоретический и экспериментальный интерес [1]. Это связано с тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их физические свойства и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при ФП. По этой причине существует серьезная необходимость знать закономерности влияния примесей на те или иные свойства твердых тел. Без предварительных теоретических и экспериментальных исследований ни один материал не может быть использован для практических целей. Поэтому в последнее время усилия многих исследователей были направлены на то, чтобы понять, как те или иные дефекты струк-

туры влияют на поведение различных систем при ФП.

Критерий Харриса [2] ответил на принципиальный вопрос о смене критического поведения при введении небольшого количества неподвижных («замороженных») примесей. Согласно этому критерию, если  $d\nu > 2$ , где  $d$  — размерность систем, а  $\nu$  — критический индекс (КИ) радиуса корреляции, то примеси не изменяют критических индексов. Критерий Харриса неприменим к двумерной модели Изинга в силу того, что  $d\nu = 2$ . В работе [3] было показано, что влияние примеси в двумерной модели Изинга затрагивает только поведение теплоемкости, в то время как остальные термодинамические и корреляционные функции не изменяют своего критического поведения. В случае двумерных моделей Поттса с числом состояний спина  $q \leq 4$  примеси могут изменить критические индексы и изменить класс универсальности критического поведения.

В то же время имеются основания предполагать, что примеси оказывают совершенно другое влияние вплоть до изменения рода ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [4, 5]. Такая смена ФП экспериментально наблюдается в жидких кристаллах в присутствии

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

аэрогеля [6]. Для низкоразмерных систем ( $d \leq 2$ ), описываемых моделью Поттса с  $q > q_c(d)$  ( $q_c = 4$ ,  $q_c$  — критическое число состояний спина,  $d$  — размерность), на основе аналитических методов было показано, что наличие сколь угодно малой величины беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода [7]. Для однородных систем с размерностью  $d \geq 3$ , описываемых моделями Поттса, для которых наблюдается ФП первого рода, ситуация может оказаться существенно другой. В этом случае внесение замороженного беспорядка может привести к трикритической точке  $p^*$ , ниже которой будет наблюдаться ФП второго рода, а выше ФП — первого рода [8–10].

В связи с этим целью настоящей работы является исследование на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК) влияния слабого беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей каноническим способом, на ФП в трехмерных системах, описываемых моделью Поттса с числом состояний спина  $q = 5$ , для которой в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе рассматривается трехмерная слабо разбавленная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 5$ . При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах кубической решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут находиться в одном из состояний  $q \geq 2$ , и немагнитные примеси (вакансии); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна  $|J|$ , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде

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

где

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

$$\rho_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ 0, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [11]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов  $p = 1.00, 0.80$ . Исследовались системы с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 10\text{--}120$ . Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси  $Z$ . Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0$  для системы с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 200\tau_0$ .

Для самой большой системы  $L = 120$ ,  $\tau_0 = 2.3 \cdot 10^3$  МК-шагов/спин. Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае  $p = 1.0$  для усреднения использовалось 10 начальных конфигураций. Для слабо разбавленных систем с концентрацией спинов  $p = 0.80$  осуществлялось конфигурационное усреднение по 1000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи  $\tau = 200\tau_0$ .

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [12]:

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

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

где  $K = |J|/(k_B T)$ ,  $N = pL^3$  — число магнитных узлов,  $U$  — внутренняя энергия,  $m_F$  — намагниченность системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности ( $m_F$ ), для ФМ-модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  использовалось следующее выражение [13]:

$$m_F = \frac{q(N_{max}/N) - 1}{q - 1}, \quad (4)$$

где  $N_{max} = \max[N_1, N_2, N_3, N_4, N_5]$ ,  $N_i$  — число спинов в состоянии с  $q = i$ ,  $N = pL^3$ .

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости для восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$

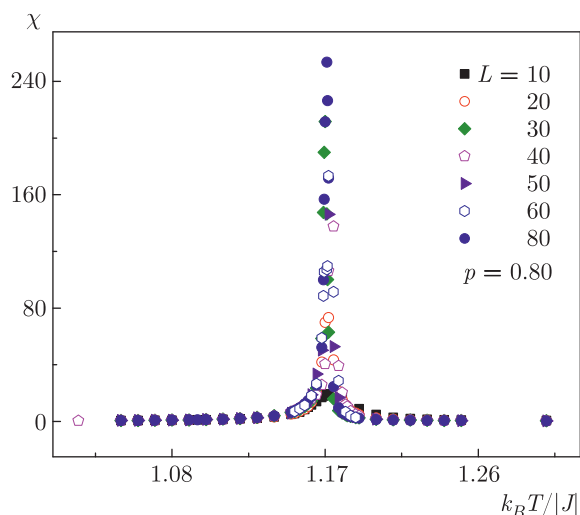


Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости  $\chi$  для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке

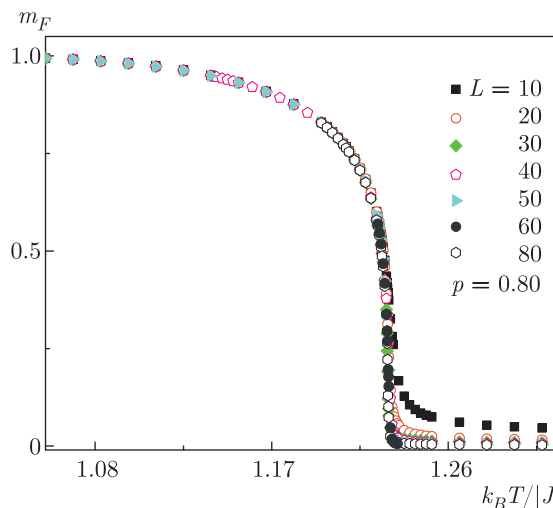


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности  $m_F$  для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке

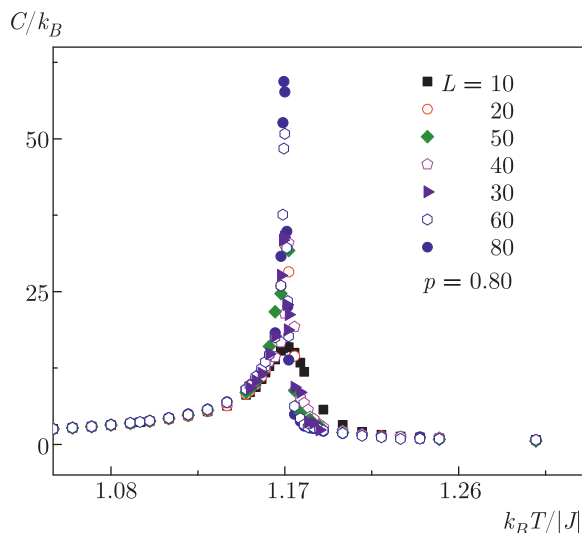


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости  $C$  для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке

от температуры  $T$  для трехмерной слабо разбавленной ФМ-модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке для систем с линейными размерами  $L = 10-80$  при концентрации спинов  $p = 0.80$ . Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные мак-

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

На рис. 3 представлены температурные зависимости намагниченности  $m_F$  для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с  $q = 5$  при  $p = 0.80$ . Как видно на рис. 3, наблюдается монотонное уменьшение величины  $m_F$  с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов» при увеличении линейного размера  $L$ .

Для определения температуры фазового перехода  $T_l(p)$  и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [14]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle_L}, \quad (5)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m_F^4 \rangle}{3 \langle m_F^2 \rangle_L}, \quad (6)$$

где  $E$  — энергия, и  $m_F$  — намагниченность системы с линейным размером  $L$ . Выражения (5) и (6) позволяют определить температуру фазового перехода  $T_l(p)$  с большой точностью в фазовых переходах соответственно первого и второго рода. Методика определения температуры ФП этим методом рассмотрена в работах [15–17]. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [18]: усредненная величина  $V_L(T, p)$

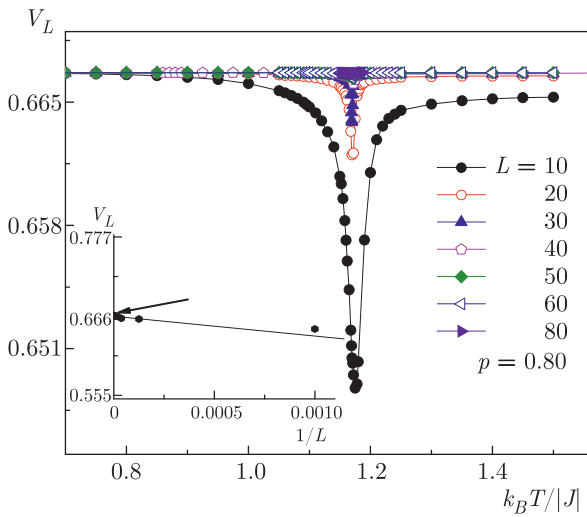


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T)$  для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке

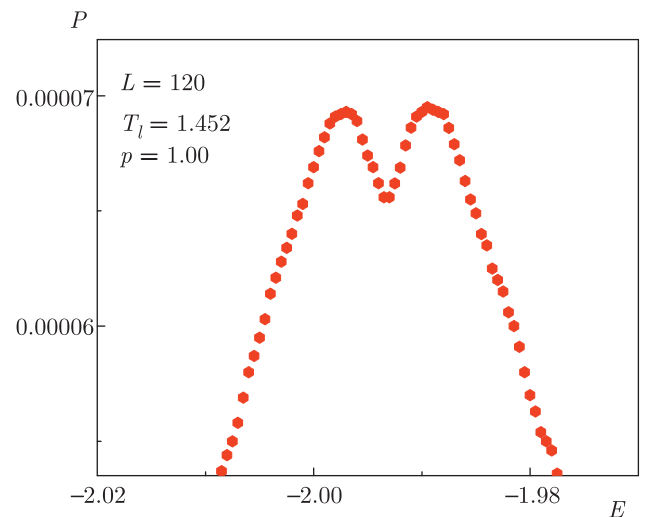


Рис. 6. Гистограмма распределении энергии для трехмерной чистой модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке при  $p = 1.0$  и  $T = T_l$

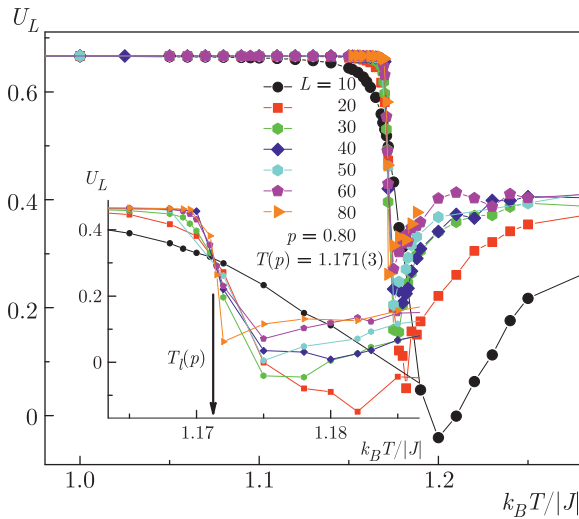


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке

стремится к тривиальному значению согласно выражению

$$V_L(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (7)$$

при  $L \rightarrow \infty$  и  $T = T_l(L)$ , где  $V^* = 2/3$ .

Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера

$V_L(T, p)$  и  $U_L(T, p)$  от температуры для систем с разными линейными размерами при  $p = 0.80$  приведены соответственно на рис. 4 и 5. Заметим, что на вставке к рис. 4 наглядно видно, что тривиальная величина  $V^* \rightarrow 2/3$  в соответствии с выражением (7) при  $L \rightarrow \infty$ . Такое поведение выше, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 5 видно, что в критической области для  $U_L(T, p)$  наблюдается четко выраженная точка пересечения и  $U_L(T, p)$  не проявляет тенденции стремления к  $-\infty$  при  $L \rightarrow \infty$ , что также свидетельствует о ФП второго рода. Определенные методом кумулянтов Биндера температуры фазовых переходов  $T_l(p)$  в единицах  $|J|/k_B$  равны:  $T_l(1.0) = 1.452(1)$ ,  $T_l(0.80) = 1.171(3)$ .

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [19, 20]. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии  $U$  и параметром порядка  $m_F$  определяется выражением [19]

$$\overline{P(U, m_F)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m_F) \exp[KU], \quad (8)$$

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

Гистограммный анализ данных проведенный нами для чистой неразбавленной трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина

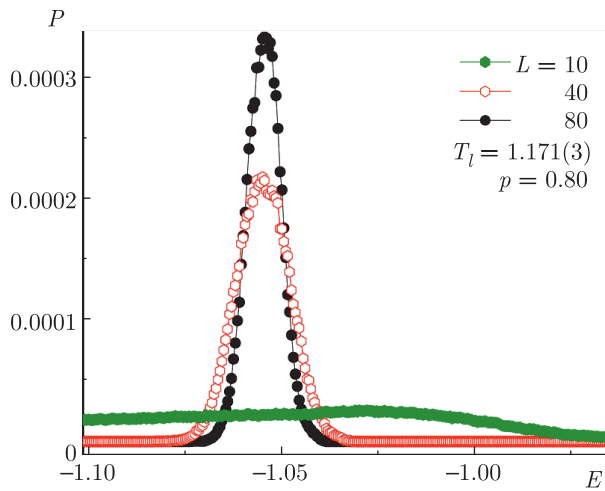


Рис. 7. Гистограмма распределении энергии для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке при  $p = 0.80$  и  $T = T_l$

$q = 5$  на простой кубической решетке также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 6. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода  $T_l$  для систем с линейным размером  $L = 120$ . Как видно на рисунке, на зависимости вероятности  $P$  от энергии системы  $U$  для системы  $L = 120$  наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является достаточным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса на простой кубической решетке при концентрации спинов  $p = 0.80$ , но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности  $P$  от энергии системы  $U$  с достаточно большим линейным размером  $L$  наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 7), что является характерным признаком для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные свидетельствуют о том, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 5$  в отсутствие структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [21]. Внесение слабого замороженного беспорядка ( $c = 0.20$ ,  $c = 1 - p$ ) в виде немагнитных примесей каноническим способом в рассматриваемую модель приводит к ФП второго рода. Отметим, что в работах [13, 22]

такая смена ФП наблюдалась и для спиновых систем, в которых беспорядок внесен в виде случайных связей.

Определение точного значения трикритической точки  $p_c$ , отделяющей на фазовой диаграмме область ФП первого рода от ФП второго рода для трехмерной модели Поттса с  $q = 5$  на простой кубической решетке, — предмет отдельного рассмотрения. Точная величина трикритической точки имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении влияния замороженного беспорядка на различные термодинамические характеристики.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики исследовано влияние слабого замороженного беспорядка, реализованного в виде замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на простой кубической решетке. Данные полученные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что:

1. В трехмерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 5$  на простой кубической решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [21].
2. Внесение слабого беспорядка ( $p = 0.80$ ) в виде замороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель приводит к фазовым переходам второго рода.

**Финансирование.** Исследование выполнено при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-02-00153.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, and Yu. Holovatch, Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
2. A. V. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
3. Vik. Dotsenko and Vl. Dotsenko, Adv. Phys. **32**, 129 (1983).
4. A. Bailly-Reyre and H. T. Diep, Physics Procedia **75**, 557 (2015).
5. J. Cardy and J. L. Jacobsen, Phys. Rev. Lett. **79**, 4063 (1997).

6. G. S. Iannacchione, G. P. Crawford, S. Zumer et al., *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2595 (1993).
7. M. Aizenman and J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
8. C. J. Q. Yin, B. Zheng, and S. Trimper, *Phys. Rev. E* **72**, 036120 (2001).
9. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *Письма в ЖЭТФ* **99**, 618 (2014).
10. А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 363 (2017).
11. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
12. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
13. C. Chatelain and B. Berche, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1670 (1998).
14. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
15. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ФТТ* **61**, 1342 (2019).
16. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ФНТ* **46**, 818 (2020).
17. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, *Mater. Lett.* **258**, 126771 (2020).
18. D. Loison and K. D. Schotte, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
19. N. A. Alves, B. A. Berg, and R. Villanova, *Phys. Rev. B* **41**, 383 (1990).
20. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, *ФТТ* **62**, 1088 (2020).
21. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
22. J. Q. Yin, B. Zheng, V. V. Prudnikov, and S. Trimper, *Eur. Phys. J. B* **49**, 195 (2006).