

11,05

# Фазовые переходы в двумерной слабо разбавленной пятивершинной модели Поттса

© А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, А.Б. Бабаев<sup>1,3</sup>, Г.Я. Атаева<sup>1,¶</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

<sup>3</sup> Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

¶ E-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в Редакцию 26 февраля 2020 г.

В окончательной редакции 26 февраля 2020 г.

Принята к публикации 12 марта 2020 г.

Методом компьютерного моделирования проведено исследование фазовых переходов в двумерной слабо разбавленной модели Поттса на квадратной решетке при  $q = 5$ . Рассмотрены системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 10-120$ . На основе кумулянтов Биндера четвертого порядка и методом гистограммного анализа данных, показано, что введение немагнитных примесей в спиновую систему, описываемой двумерной моделью Поттса с  $q = 5$ , приводит к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода

**Ключевые слова:** примесь, метод Монте-Карло, магнитная система, модель Поттса.

DOI: 10.21883/FTT.2020.07.49478.051

## 1. Введение

В настоящее время хорошо известно, что присутствие немагнитных примесей и дефектов структуры оказывает влияние на тепловые и магнитные характеристики систем, и в частности оказывает существенное влияние на поведение систем при фазовых переходах (ФП), 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 ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [2].

В настоящей работе исследованы ФП в двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке при концентрации спинов  $p = 1.00, 0.90, 0.80$ . Исследования проведены на основе кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК). Касательно двумерной разбавленной модели Поттса с  $q = 5$ , до сих пор нет достоверных данных о влиянии немагнитных примесей на тепловые и магнитные свойства, не исследовано их влияние на фазовые переходы, нет сведений о зависимости критических индексов от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей [3]. Единственным надежно установленным фактом является, то, что в чистой модели происходит ФП первого рода согласно аналитическим методам [4].

Гамильтониан двумерной слабо разбавленной модели Поттса может быть, представлен в следующем виде [4]:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \cos \Theta_{i,j}, \quad (1)$$

$\Theta_{i,j}$  — угол между взаимодействующими спинами  $S_i - S_j$ , где  $J$  — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей,  $\rho_i = 1$ , если узел  $i$  занят магнитным атомом, и  $\rho_i = 0$ , если в  $i$ -узле немагнитная примесь. Исследовались системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 10 \div 120$ .

## 2. Результаты численного эксперимента

Для анализа характера фазового перехода был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [5]:

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

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

где  $E$  — энергия и  $m$  — намагнитченность системы с линейным размером  $L$ . Выражения (2) и (3) позволяют определить  $T_c(p)$  с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Данный метод, хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП [6–10]. Характерные зависимости кумулянтов

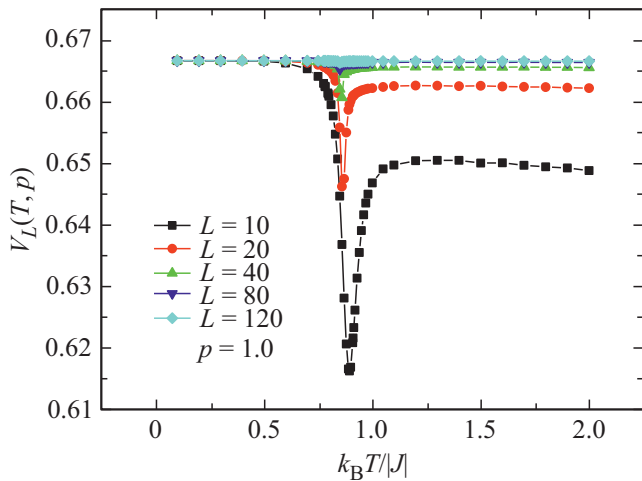


Рис. 1. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  для модели Поттса при  $p = 1.00$ .

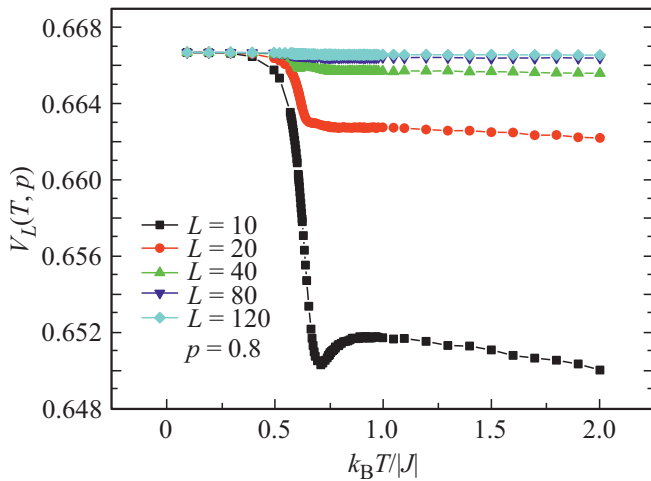


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  слабо разбавленной модели Поттса при  $p = 0.80$ .

Биндера  $V_L(T, p)$  от температуры для систем с разными линейными размерами при  $p = 1.00$  и  $p = 0.80$  приведены на рис. 1 и 2 соответственно. На рис. 2 наглядно видно, что нетривиальная величина  $V^* \rightarrow 2/3$  в соответствии с выражением  $V(T, p) = V^* + bL^{-d}$  при  $L \rightarrow \infty$ . Такое поведение как отмечалось выше характерно для ФП второго рода. На рис. 3 и 4 приведены зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  от температуры при  $p = 1.00$  и  $p = 0.80$ . На рис. 4 видно, что в критической области для  $U_L(T, p)$  наблюдается четко выраженная точка пересечения и  $U_L(T, p)$  не проявляет тенденцию стремления к  $-\infty$  при  $L \rightarrow \infty$ , что также свидетельствует о ФП второго рода. Полученные таким способом температуры фазовых переходов  $T_l(p)$  в единицах  $|J|/k_B$  равны:  $T_l(1.0) = 0.8515(1)$ ,  $T_l(0.90) = 0.731(2)$ ,  $T_l(0.80) = 0.57(2)$ . Как видно, температура ФП полученная для чистой спиновой системы при  $p = 1.0$  достаточно хорошо согласуется с аналити-

ческим значением, полученным Бакстером [4] по формуле  $\frac{k_B T_l}{|J|} = \frac{1}{\ln(1+\sqrt{5})} = 0.8515$ .

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [11–13]. Гистограммный анализ данных проведенный нами для двумерной чистой ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  на квадратной решетке также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода  $T_l$  для систем с линейным размером  $L = 60$ . Как видно из рисунка, на зависимости вероятности  $P$  от энергии системы  $U$  для системы  $L = 60$  наблюдается два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является важным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для двумерной слабо разбавленной ферро-

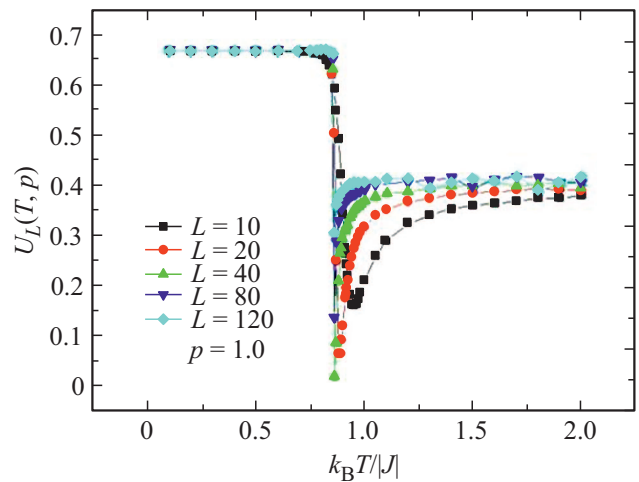


Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  для модели Поттса при  $p = 1.00$ .

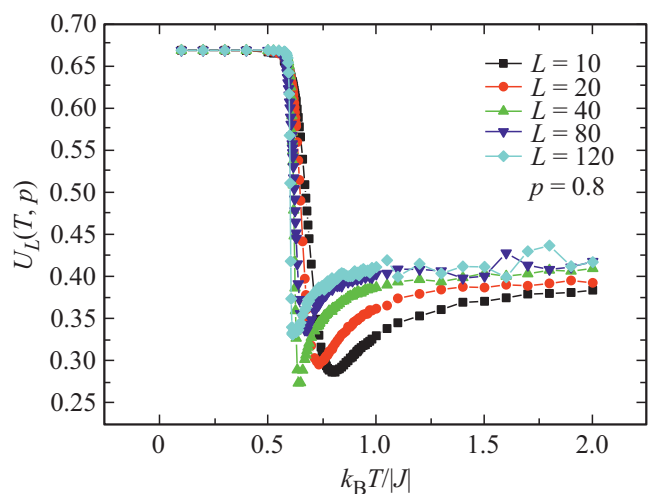
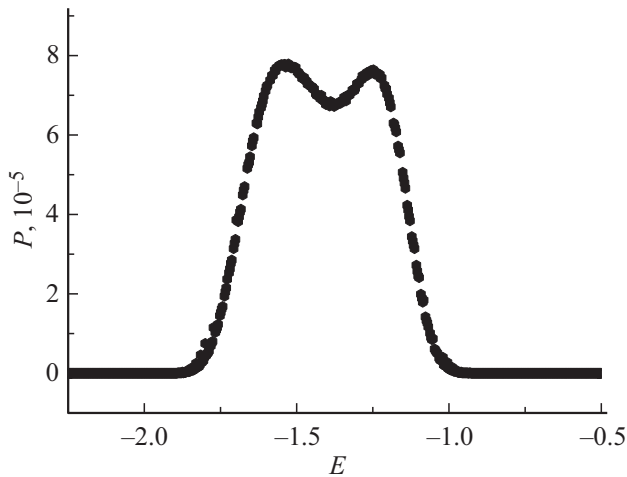
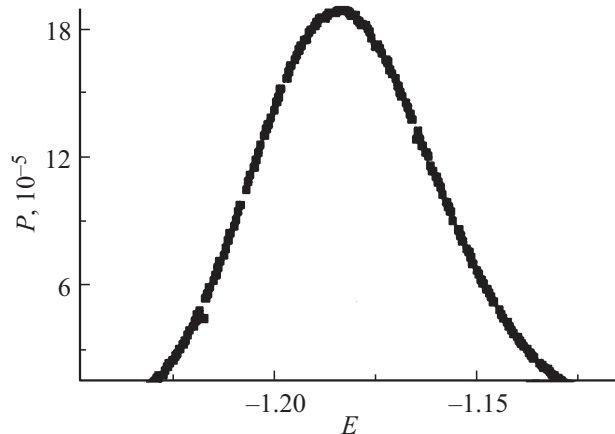


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  слабо разбавленной модели Поттса при  $p = 0.80$ .



**Рис. 5.** Гистограмма распределения энергии для двумерной модели Поттса с  $q = 5$  при  $p = 1.0$ .



**Рис. 6.** Гистограмма распределения энергии для двумерной слабо разбавленной модели Поттса с  $q = 5$  при концентрации спинов  $p = 0.80$ .

магнитной модели Поттса на квадратной решетке, но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности  $P$  от энергии системы  $U$  для системы с  $L = 120$  наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 6), что является характерным признаком для ФП второго рода.

### 3. Заключение

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 5$  в отсутствие структурного беспорядка происходит ФП первого рода в соответствии с предсказаниями теоретических методов [4]. Внесение замороженного беспорядка ( $c = 1 - p$ ) в виде немагнитных примесей, каноническим способом, в рассматриваемую модель, приводит к смене ФП первого рода на ФП второго рода.

### Фининсирование

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и рамках научного проекта № 18-32-20098 мол\_а\_вед.

### Список литературы

- [1] A.V. Harris. J. Phys. C 7, 1671 (1974).
- [2] M. Aizenman. J. Wehr. Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
- [3] X. Qian, Y. Deng, W.J. Blöte. Phys. Rev E **72**, 056132-1 (2005).
- [4] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics World Scientific, London (2009).
- [5] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
- [6] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, M.A. Magomedov, F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. JETP Lett. **100**, 242 (2014).
- [7] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. Физика низких температур **41**, 8, 784 (2015).
- [8] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. ФТТ **61**, 7, 1342 (2019).
- [9] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, G.Ya. Ataeva. Phys. Solid State **59**, 1, 141 (2017).
- [10] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. Письма в ЖЭТФ **100**, 3, 267 (2014).
- [11] А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **149**, 2, 357 (2014).
- [12] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
- [13] N.A. Alves, V.A. Berg, R. Villanova. Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).

Редактор Т.Н. Василевская