

## Влияние немагнитного беспорядка на фазовые переходы первого рода

© А.Б. Бабаев<sup>1,2</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия

<sup>2</sup> Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия

E-mail: b\_albert78@mail.ru

Поступила в Редакцию 16 июня 2022 г.

В окончательной редакции 31 января 2023 г.

Принята к публикации 1 февраля 2023 г.

С применением метода Монте-Карло исследованы слабо разбавленные магнитные системы, описываемые двумерной пятикомпонентной моделью Поттса. Численные исследования выявили, что незначительный замороженный беспорядок, реализованный в виде немагнитных примесей может изменить род фазового перехода в магнитных системах, описываемых двумерной пятикомпонентной моделью Поттса на квадратной решетке, для которой в однородном состоянии наблюдается фазовый переход первого рода. Показано, что такая смена фазового перехода обусловлена тем, что немагнитный беспорядок препятствует сосуществованию локальных фаз характерных для фазового перехода первого рода при  $T = T_i$ .

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

DOI: 10.21883/FTT.2023.04.55302.407

### 1. Введение

В последние годы большой интерес вызывают исследования фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в магнитных системах, содержащих беспорядок в виде замороженных немагнитных примесей. С одной стороны, это связано с тем, что современная микроэлектроника и спинтроника достигла такого уровня миниатюризации, что влиянием различных дефектов структуры на поведение приборов и элементов микроэлектроники невозможно пренебречь. В то же время, влияние замороженного беспорядка на различные характеристики магнитных систем представляет и фундаментальный научный интерес [1].

Работа Харриса [2] посвященная влиянию замороженного беспорядка на критические свойства магнетиков вызвала значительный интерес к исследованию критического поведения структурно-неупорядоченных систем. Согласно этому критерию дефекты, реализованные в виде замороженных немагнитных примесей, существенны в том случае, если в однородном варианте теплоемкость расходится в критической точке, т. е. критический индекс теплоемкости положителен  $\alpha > 0$ . К настоящему моменту, в понимании особенностей влияния замороженного беспорядка, реализованного как в виде немагнитных примесей, случайных связей, так и в виде случайных магнитных полей [1–4] на критическое поведение магнитных систем, достигнут существенный прогресс.

Однако, в отличии от влияния замороженного беспорядка на непрерывные ФП гораздо меньше известно о его влиянии на переходы первого рода. В част-

ности, имеются основания предполагать, что беспорядок может оказать совершенно другое влияние вплоть до изменения рода ФП в случае спиновых систем, испытывающих в однородном состоянии ФП первого рода [5–7]. Для ФП первого рода характерно сосуществование различных локальных фаз [6,7]. Такая смена ФП экспериментально наблюдается в жидких кристаллах в присутствии аэрогеля [8]. Кроме того, знание точных значений концентраций немагнитных примесей  $c$ ,  $c = 1 - p$ , где  $p$  — концентрация спинов, при которых в рассматриваемых системах могут заметно изменяться их физические свойства имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов. В качестве примера можно рассмотреть высокотемпературные сверхпроводники, образующие при замещении небольшого количества магнитных атомов La немагнитными атомами Sr в антиферромагнитном диэлектрике  $\text{LaCuO}_4$  [9]. Также для оксидов с колоссальным магнитосопротивлением важное значение имеет сочетание сосуществования фаз и определенного химического беспорядка [10]. Поэтому, очевиден вопрос — как беспорядок влияет на фазовый переход первого рода, возможны ли сосуществования различных фаз при наличии в рассматриваемой системе беспорядка? Попытка ответить на этот вопрос исходя из данных вычислительного эксперимента путем анализа магнитных конфигураций описываемых однородными и примесными моделями Поттса является главной целью настоящей работы.

При изучении влияния беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей на фазовые переходы пер-

вого рода, экспериментальные и теоретические методы исследования, сталкиваются с большими и труднопреодолимыми проблемами. Дело не только в том, что результаты экспериментальных исследований, сильно зависят от метода и конкретного образца, но и от способа приготовления образца (см. ссылки в [3]). Кроме того, практически нет экспериментальных исследований, выполненных на основе единого методического подхода, на сериях однотипных образцов при строго контролируемом содержании количества примесей. А теоретические подходы, практически все основаны на использовании тех или иных схем вычислений в рамках теоретико-полевого ренормализационно-группового метода. Ситуация с применимостью этих схем, для моделей с замороженным беспорядком значительно сложнее, чем для чистых систем. Это привело к тому, что фазовые переходы и критические явления в разбавленных системах, в настоящее время интенсивно исследуются различными вариантами метода Монте-Карло (МК) [3,11]. Важным достоинством этих методов является то, что в ходе эксперимента все параметры находятся под строгим контролем исследователя.

## 2. Модель и методика численного исследования

В настоящей работе рассматривается двумерная пятикомпонентная ( $q = 5$ ) модель Поттса на квадратной решетке в чистом (при концентрации спинов  $p = 1.00$ ) и слабо разбавленном режиме ( $p = 0.95, 0.90$ ). В этой модели в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода [12,13]. При построении ферромагнитных моделей Поттса с числом состояний спина  $q$  необходимо иметь в виду следующие особенности [12]:

— в узлах рассматриваемой решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут ориентироваться в  $q$  симметричных направлениях гипертетраэдра с размерностью  $q - 1$ , так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны;

— энергия связи между двумя узлами равна нулю если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или же, если хотя бы в одном узле размещен немагнитный атом и равна  $J$ , если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей гамильтониан пятикомпонентной ( $q = 5$ ) модели Поттса может быть представлен в следующем виде:

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

$$S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, \quad (1)$$

где  $J$  — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов,  $P_q$  — число различных состояний спина  $S_i$ ,  $\rho_i = 1$ , если узел  $i$  занят магнитным

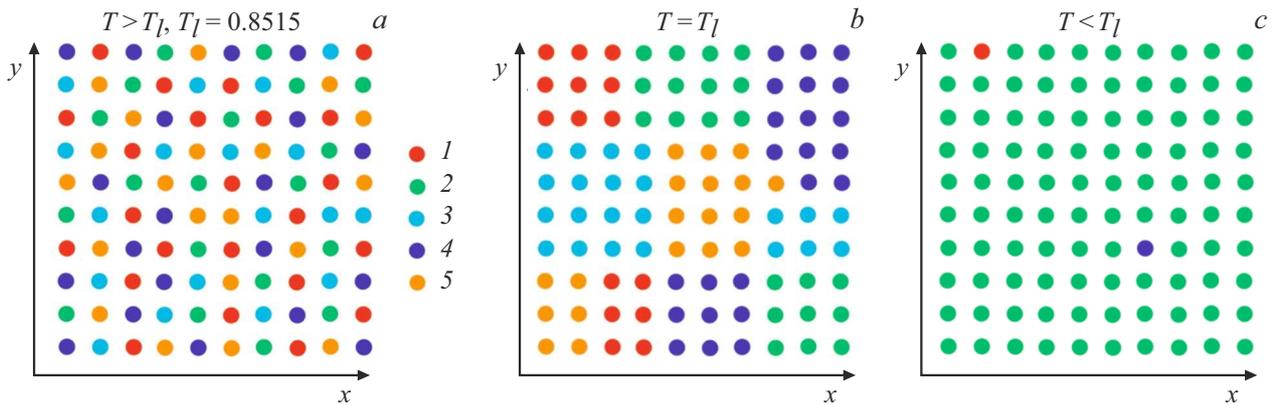
атомом, и  $\rho_i = 0$  если в узле  $i$  содержится немагнитная примесь и

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

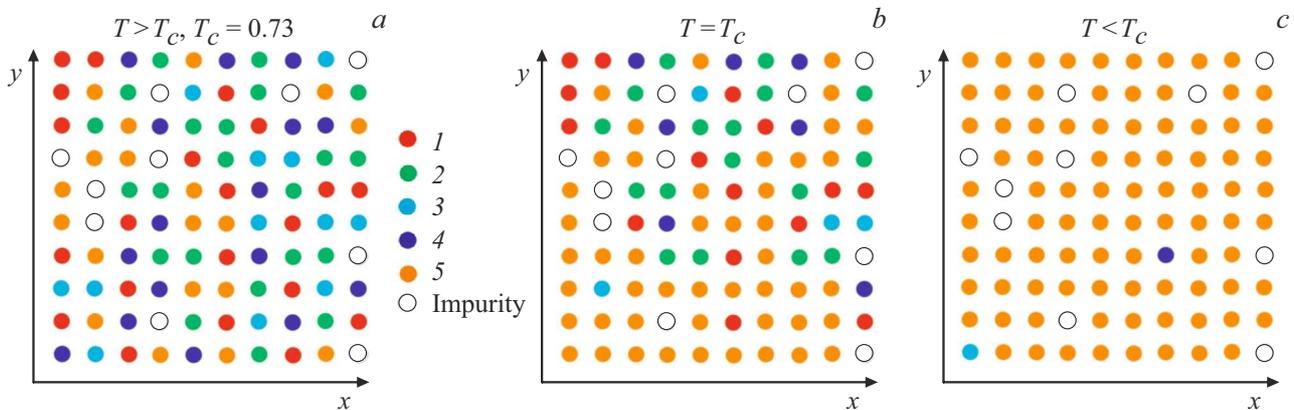
При компьютерном моделировании нами использовался кластерный алгоритм Вольфа метода Монте-Карло [14]. Более подробно этот алгоритм рассмотрен в работе [15]. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одинаковых состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной  $\tau_0$  для системы с линейным размером  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 500\tau_0$ . Для самой большой системы  $L = 160$ ,  $\tau_0 = 1.8 \cdot 10^3$  MC steps/spin. Кроме того, проводилось конфигурационное усреднение по 1000 различным примесным конфигурациям. Затем эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров. Во время моделирования для двумерных чистых и примесных образцов анализировались всевозможные отдельные уникальные конфигурации спиновых структур, полученные путем визуализации численных данных в графическом режиме. Вывод данных в графическом режиме осуществлялся в конце конфигурационного усреднения.

## 3. Результаты численного исследования

В работах [16,17] с применением кумулянтов Биндера четвертого порядка и метода гистограммного анализа данных было установлено, что в двумерной пятикомпонентной модели Поттса в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода в соответствии с аналитическими предсказаниями [12,13], а внесение немагнитного беспорядка приводит к смене ФП первого рода на ФП второго рода. Однако в этих работах не проводился анализ спиновых конфигураций, наблюдаемых в вычислительном эксперименте и не выяснялись причины смены ФП первого рода на ФП второго рода. Визуализация магнитных структур для пятикомпонентной модели Поттса на квадратной решетке в однородном состоянии ( $p = 1.0$ ) и при концентрации спинов  $p = 0.9$  приведены на рис. 1 и 2 соответственно. Как видно из рис. 1 спиновые структуры соответствующие различным температурным режимам —  $T > T_i$ ,  $T = T_i$  и  $T < T_i$ , где  $T_i$  — температура соответствующая ФП первого рода (см. рис. 1, *a*, рис. 1, *b* и рис. 1, *c*) позволяют наглядно проследить за последовательными изменениями в магнитных конфигурациях происходящие как при изменении температурного режима, так и при внесении немагнитного беспорядка (см. рис. 2). Как видно из рис. 1 для однородных ( $p = 1.0$ ) магнитных



**Рис. 1.** Магнитные структуры, описываемые пятикомпонентной однородной ( $p = 1.0$ ) моделью Поттса на квадратной решетке при различных температурных режимах. При  $T = T_l$  одновременно сосуществуют различные спиновые фазы.



**Рис. 2.** Магнитные структуры, описываемые примесной пятикомпонентной моделью Поттса на квадратной решетке в слабо разбавленном режиме ( $p = 0.90$ ). При  $T = T_c$  ( $b$ ) происходит перколяция одного из пяти всевозможных состояний спина.

структур при температуре  $T > T_l$  отсутствуют отдельные упорядоченные кластеры атомов. Такая картина сохраняется до точки фазового перехода  $T_l$ . В самой точке фазового перехода  $T = T_l$  заметно сосуществование отдельных локальных фаз каждая из которых состоит из атомов, находящихся строго в одном из пяти различных состояний спина, что характерно для ФП первого рода.

Внесение в рассматриваемую двумерную структуру описываемой моделью Поттса с числом состояний спина  $q = 5$  беспорядка в виде немагнитных примесей приводит к заметному изменению наблюдаемой картины для ФП первого рода (см. рис. 2). В этом случае при концентрации спинов  $p = 0.90$  и  $T = T_c$  начинает образовываться протяженный кластер атомов, находящихся только в одном из пяти возможных состояний спина по всему образцу (см. рис. 2,  $b$ ). С понижением температуры  $T$  (при  $T < T_c$ ) рассматриваемая двумерная система полностью охватывается этим кластером в данном случае состоянием с  $q = 5$  (см. рис. 2,  $c$ ). Аналогичное поведение наблюдалось и при концентрации спинов  $p = 0.95$ .

В случае трехмерных структур описываемых моделями Поттса с числом состояний спина  $q > q_c$ ,  $q_c = 2.45$  [12,13] ситуация существенно другая. В этом случае наличие немагнитного беспорядка может привести к трикритической точке  $p_t$ . Анализ спиновых конфигураций для этого случая приведен в работе [18]

#### 4. Заключение

Таким образом, анализ магнитных конфигураций двумерной слабо разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 5$ , для которой в однородном состоянии наблюдается ФП первого рода показывает, что незначительный немагнитный беспорядок исключает сосуществование локальных фаз характерных для ФП первого рода. Немагнитный беспорядок понижает симметрию рассматриваемой спиновой системы: в точке фазового перехода образуется протяженный кластер, состоящий из магнитных атомов, находящихся только в одном из пяти возможных состояний спина (см. рис. 2). Ранее в своей ставшей классической работе [5] Имри

и Ма на основе простых энергетических соображений предсказали о возможном препятствии замороженного беспорядка макроскопическому фазовому сосуществованию в системах с размерностью  $d < 2$ . Более того, их аргументации в последующем были распространены и для слабо разбавленных систем содержащих сколь угодно малую величину беспорядка [6]. Справедливость этих аргументаций строго была доказана для систем с  $d \leq 2$  в работе [7]. Результаты вычислительного эксперимента настоящей работы подтверждают выводы теоретических работ [5–7].

### Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Вик. С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995). [Phys. Usp. **38**, 457 (1995)].
- [2] A.V. Harris. J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [3] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 175 (2003).
- [4] А.И. Морозов, А.С. Сигов. Письма в ЖЭТФ **90**, 818 (2009).
- [5] Y. Imry, S.-K. Ma. Phys. Rev. Lett. **35**, 1399 (1975).
- [6] Y. Imry, M. Wortis. Phys. Rev. B **19**, 3580 (1979).
- [7] M. Aizenman, J. Wehr. Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
- [8] G.S. Iannacchione, G.P. Crawford, S. Zumer, J.W. Doane, D. Finotello. Phys. Rev. Lett. **71**, 2595 (1993).
- [9] L.A. Fernandez, A. Gordillo-Guerrero, V. Martin-Mayor, J.J. Ruiz-Lorenzo. Phys. Rev. B **86**, 184428 (2012).
- [10] C. Sen, G. Alvarez, E. Dagotto. Phys. Rev. Lett. **98**, 127202 (2007).
- [11] O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
- [12] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [13] Р. Бекстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985).
- [14] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
- [15] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Mathem. Mod. Comp. Simul. **11**, 4, 575 (2019).
- [16] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. Low Temp. Phys. **46**, 7, 818 (2020).
- [17] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. Mater. Lett. **258**, 126771 (2020).
- [18] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. J. Magn. Magn. Mater. **563**, 169864 (2022).

Редактор Д.В. Жуманов