

ФИЗИКА

УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2021-36-3-7-13

Г.Я. Атаева¹, А.К. Муртазаев^{1, 2}, А.Б. Бабаев^{2, 3}

Гистограммный анализ данных для трехмерной слabo разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН; Россия, Республика Дагестан, 367030, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; *ataeva20102014@mail.ru*;

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН; Россия, Республика Дагестан, 367000, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45; *akai2005@mail.ru*;

³ Дагестанский государственный педагогический университет; Россия, Республика Дагестан, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 57; *b_albert78@mail.ru*

Методом Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов и термодинамических параметров трехмерной слabo разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$, также проведен гистограммный анализ данной системы. Построены температурные зависимости намагниченности m , восприимчивости χ , теплоемкости C , а также графики температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T)$ и $V_L(T)$. Исследования проведены на основе кластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло. Полученные на основе кумулянтов Биндера четвертого порядка и методом гистограммного анализа численные данные свидетельствуют о том, что внесение незначительного беспорядка в виде немагнитных вмороженных примесей ($p = 0,90$) в трехмерной модели Поттса с $q = 5$ не приводят к смене фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.

Ключевые слова: *примесь, модель Поттса, метод Монте-Карло, термодинамические параметры, критические явления.*

Вектор исследования фазовых переходов (ФП) и критических свойств магнитных систем под воздействием беспорядка сместился в сторону применения вычислительных методов. Это обусловлено тем, что моделирование с использованием методов Монте-Карло (МК) позволяет изучать более реалистичные модели и учитывать усложняющие факторы, всегда присутствующие в реальных материалах [1–5]. Этому способствуют и серьезно возросшие вычислительные возможности современных компьютеров, и множество новейших и мощных алгоритмов, специально разработанных для использования в этой области. Поэтому метод Монте-Карло с использованием современных алгоритмов зарекомендовал себя как мощный инструмент для систематического изучения магнитных систем, особенно при изучении фазовых переходов и магнитных явлений [1].

Одной из моделей, применяемых для описания реальных физических систем, является модель Поттса. Очевидно, что решеточная структура данной модели изоморфна таким системам, как слоистый магнетик, аэрогели, пленки жидкого

гелия, сверхпроводящие пленки и т. д. [6]. Изучение этой модели в присутствии немагнитного беспорядка позволяет определить точные значения концентраций немагнитных примесей c , $c = 1 - p$, где p – концентрация спинов, при которых в рассматриваемой системе может происходить смена рода фазового перехода. Определение точных значений концентраций немагнитных примесей имеет большое значение при создании различных новых магнитных материалов, а также при изучении высокотемпературных сверхпроводников, образующихся при замещении небольшого количества магнитных атомов *La* немагнитными атомами стронция *Sr* в антиферромагнитном диэлектрике LaCuO_4 [7]. Кроме того, к настоящему времени остается открытым вопрос: наблюдаются ли фазовые переходы первого рода в присутствии беспорядка? Выяснение ответа на этот вопрос является главной целью данной работы.

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 решётки расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из $q \geq 2$ состояний, и немагнитные примеси (ваканции); немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы (канонический способ) на различных узлах решетки (*quenched disorder*); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (не важно, в каких именно) или же если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [6]

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

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

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь} \end{cases}$$

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [8]. Методика реализации этого алгоритма приведена в работе [9]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями при концентрациях спинов $p = 1.00; 0.90$. Исследовались системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 10 \div 120$. 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 $\tau = 160 \tau_0$. Для самой большой системы $L = 120$, $\tau_0 = 2.3 \times 10^3$ 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 $p = 0.90$ осуществлялось конфигурационное усреднение по 2000 различным конфигурациям, причем для каждой примесной конфигурации выполнялось усреднение по длине цепи $\tau = 200 \tau_0$.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости C , восприимчивости χ и намагниченности m_F нами использовались следующие соотношения [10; 11]:

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

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

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

где $K = /J/k_B T$, $N_{max} = \max\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}N_i$ – число спинов в состоянии с $q = i$, $N = pL^3$ – число магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, квадратные скобки означают усреднение по примесным конфигурациям.

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости восприимчивости χ и намагниченности m_F для систем с разными линейными размерами L при концентрации спинов $p = 1.0$ и $p = 0.9$.

Как видно из рис. 1, для восприимчивости χ от температуры T для всех исследуемых нами однородных и слабо разбавленных систем, описываемых трехмерной моделью Поттса с $q = 5$, в точке фазового перехода проявляются «всплески», которые характерны для фазового перехода первого рода. Температурные зависимости намагниченности m_F при $p = 1.0$ и $p = 0.9$ испытывают скачок в области фазового перехода (рис. 2).

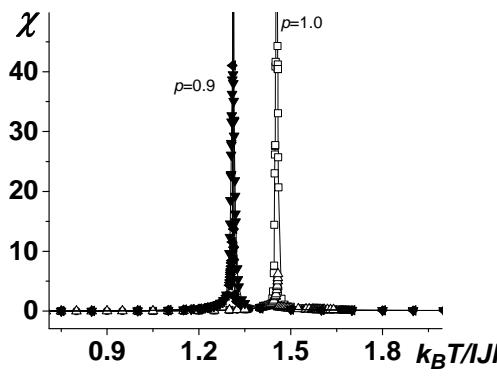


Рис. 1. Температурная зависимость восприимчивости χ для модели Поттса при $p = 1.00$ и $p = 0.90$

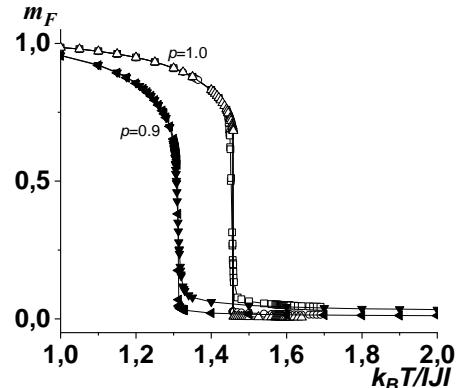


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности m_F для модели Поттса при $p = 1.00$ и $p = 0.90$

При моделировании системы для определения температуры фазового перехода $T_l(p)$ часто используют метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [12]:

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

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

где E – энергия и m_F – намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (5) и (6) позволяют определить $T_l(p)$ с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Также данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Анализ численных данных с применением этого метода представлен в работах [13–15].

Отличительная черта, характерная для ФП первого рода [10]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

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

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где V^* отлична от $2/3$, что и продемонстрировано на рис. 3 и 4 соответственно для модели Поттса с $q = 5$ при концентрации спинов $p = 1.0$ и $p = 0.9$. Кроме того, при фазовых переходах первого рода минимальная величина $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p)$ расходится $U_{L,\min}(T = T_{\min}, p) \rightarrow -\infty$, при $L \rightarrow \infty$. Аналогичное поведение наблюдалось при концентрации спинов $p = 1.0$. Ранее в работе [16] для трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ нами было показано, что наличие слабого беспорядка в виде немагнитных примесей с концентрацией $c = 0.05$ достаточно для смены фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода. В то время как для случая $q = 4$ [17] такая смена рода фазового перехода в слабо разбавленном режиме не наблюдалась. По-видимому, вмороженный беспорядок оказывается на разных моделях по-разному.

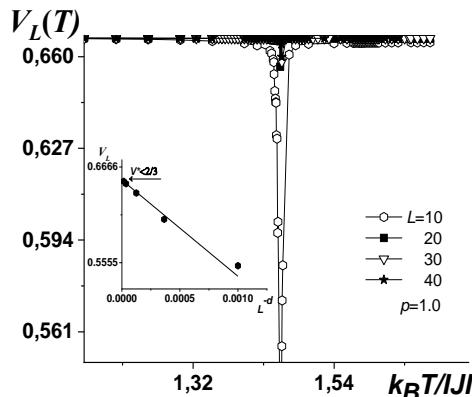


Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для чистой неразбавленной ($p = 1.0$) модели Поттса

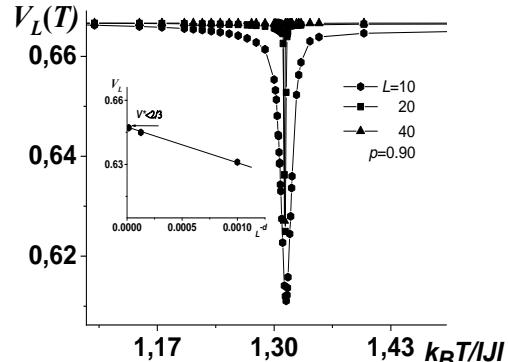


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для слабо разбавленной ($p = 0.9$) модели Поттса

Кроме кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [18]. Гистограммный анализ данных, проведенный нами для трехмерной чистой модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$, также свидетельствует о наличии ФП первого рода (рис. 5).

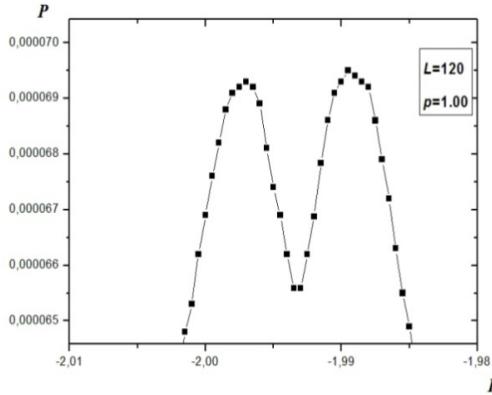


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 1.00$

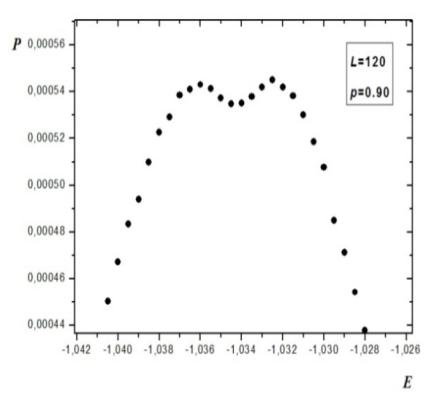


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с $q = 5$ при $p = 0.90$

На рис. 6 представлена гистограмма распределения энергии вблизи точки фазового перехода T_l для слабо разбавленной системы с линейным размером $L = 120$. Как видно из рисунка, на зависимости вероятности P от энергии системы U для системы $L = 120$ наблюдается два хорошо выраженных максимума. Наличие бимодальности в распределении энергии является важным признаком ФП первого рода.

Исследованы фазовые переходы в трехмерной слабо разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на простой кубической решетке. Полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что в трехмерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ на простой кубической решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [6] и внесение слабого беспорядка ($p = 0.90$) в виде вмороженных немагнитных примесей в рассматриваемую модель не приводит к подавлению фазового перехода первого рода.

Литература

1. Шур Л.Н. Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний // УФН. – 2012. – Т. 182, № 7. – С. 787.
2. Vasilyev O., Berche B., Dudka M. and Holovatch Yu. Monte Carlo study of anisotropic scaling generated by disorder // Phys. Rev. E. – 2015. – Vol. 92. – P. 042118.
3. Landau D.P., Binder K. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. – Cambridge: Cambridge University Press, 2014.
4. Murtazaev A.K., Babaev A.B. Influence of quenched non-magnetic impurities on phase transitions in the two-dimensional Potts model with $q = 5$ // Materials Letters. – 2020. – Vol. 258. – P. 126771.
5. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Ataeva G.Y. Phase transitions and thermodynamic properties of triangular strongly diluted antiferromagnetic Potts model // J. Magn. Magn. Mater. – 2017. – Vol. 440. – P. 101.
6. Wu F.Y. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. – London: World Scientific, 2009.

7. *Fernandez L.A., Gordillo-Guerrero A., Martin-Mayor V. and Ruiz-Lorenzo J.J.* Numerical test of the Cardy-Jacobsen conjecture in the site-diluted Potts model in three dimensions // *Phys. Rev.* – 2012. – Vol. 86. – P. 184428.
8. *Wolff U.* Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems // *Phys. Lett.* – 1989. – Vol. 62. – P. 361.
9. *Бабаев А.Б., Муртазаев А.К.* Расчет относительных дисперсий намагниченности и восприимчивости в неупорядоченной модели Изинга. Результаты компьютерного моделирования // *Математическое моделирование*. – 2018. – Т. 30, № 12. – С. 55.
10. *Бекстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. – М.: Мир, 1985. – 488 с.
11. *Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // *Phys. Rev.* – 1991. – Vol. 43. – P. 6087.
12. *Eichhorn K., Binder K.J.* Monte Carlo investigation of the three-dimensional random-field three-state Potts model // *Phys.: Cond. Matter.* – 1996. – Vol. 8. – P. 5209.
13. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я.* Влияние вмороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке // *Физика твердого тела*. – 2015. – Т. 57, вып. 7. – С. 1410.
14. *Бабаев А.Б., Ризванова Т.Р., Муртазаев А.К.* Термодинамические и магнитные свойства трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, вып. 12. – С. 2416.
15. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я.* Фазовые переходы в двумерной слабо разбавленной пятивершинной модели Поттса // *Физика твердого тела*. – 2020. – Т. 62, вып. 7. – С. 1088.
16. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б.* Триkritическая точка трехмерной неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на простой кубической решетке // *Письма в ЖЭТФ*. – 2017. – Т. 105, № 6. – С. 363.
17. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б.* Триkritическая точка трехмерной модели Поттса ($q = 4$) с вмороженным немагнитным беспорядком // *Письма в ЖЭТФ*. – 2014. – № 99. – С. 618.
18. *Munger E.P., Novotny M.A.* Reweighting in Monte Carlo and Monte Carlo renormalization-group studies // *Phys. Rev.* – 1991. – Vol. 43. – P. 5773.

Поступила в редакцию 16 июня 2021 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2021-36-3-7-13

**Histogram Data Analysis Forthree-Dimensional Weakly Diluted Potts Model
With the Number of Spin States $q = 5$**

G.Ya. Ataeva¹, A.K. Murtazaev^{1, 2}, A.B. Babaev^{2, 3}

¹ Institute of Physics after H.I. Amirkhanov of the Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; Russia, Republic of Dagestan, 367030, Makhachkala, M. Yaragsky st., 94; ataeva20102014@mail.ru;

² Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; Russia, Republic of Dagestan, 367000, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 45; akai2005@mail.ru;

³ Dagestan State Pedagogical University; Russia, Republic of Dagestan, 367003, Makhachkala, M. Yaragsky st., 57; b_albert78@mail.ru

Monte Carlo method was used to study phase transitions and thermodynamic parameters of a three-dimensional weakly diluted Potts model with the number of spin states $q = 5$, and a histogram analysis of this system was also carried out. The temperature dependences of magnetization m , susceptibility χ , heat capacity C , as well as graphs of the temperature dependence of the Binder cumulants $U_L(T)$ and $V_L(T)$ are plotted. The research was carried out on the basis of the Wolf cluster algorithm of the Monte Carlo method. The numerical data obtained on the basis of the fourth-order Binder cumulants and the method of histogram analysis indicate that the introduction of insignificant disorder in the form of nonmagnetic quenched-in impurities ($p = 0.90$) in the three-dimensional Potts model with $q = 5$ does not lead to a change in the first-order phase transition to a phase transition of the second kind.

Keywords: *impurity, Potts model, Monte Carlo method, thermodynamic parameters, critical phenomena.*

Received 16 June 2021