

# ГИСТОГРАММНЫЙ АНАЛИЗ ДАННЫХ ДЛЯ ТРЕХМЕРНОЙ РАЗБАВЛЕННОЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $Q = 3$ И $Q = 4$

А. К. Муртазаев<sup>a,b</sup>, А. Б. Бабаев<sup>a,c\*</sup>

<sup>a</sup>Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук  
367003, Магачкала, Россия

<sup>b</sup>Дагестанский государственный университет  
367025, Магачкала, Россия

<sup>c</sup>Дагестанский государственный педагогический университет  
367003, Магачкала, Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2012 г.

На основе гистограммного анализа данных проведены исследования фазовых переходов в трехмерной разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$ . Изучены системы с линейными размерами  $L = 20$ – $60$  при концентрациях спинов  $p = 1.00, 0.95, 0.65$ . Показано, что внесение слабого беспорядка ( $p \sim 0.95$ ) в систему для трехмерной модели Поттса с  $q = 3$  достаточно для изменения фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода, в то время как для трехмерной модели Поттса с  $q = 4$  смена фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода происходит только при наличии сильного беспорядка ( $p \sim 0.65$ ).

DOI: 10.7868/S0044451013010116

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние три десятилетия усилия многих исследователей были направлены на понимание того, как примеси и другие дефекты структуры сказываются на поведении различных систем, описываемых такими моделями, как модель Изинга, модель Гейзенберга и модель Поттса при фазовых переходах (ФП) [1–3]. Особенно интересно влияние замороженных немагнитных примесей на магнитные системы, описываемые трехмерными моделями Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$ . Эти модели могут быть использованы при изучении широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы, жидкие смеси и другие системы [4–6]. В связи с тем, что эти модели могут быть использованы для описания наноструктур и сверхрешеток, исследование

влияния примесей на ФП, критические и термодинамические свойства имеет важное значение [7].

В настоящей работе проведен гистограммный анализ данных, полученных методом Монте-Карло (МК) при исследовании фазовых переходов в трехмерной разбавленной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$ . Критические свойства рассматриваемых моделей ранее исследовались нами [8–14] на основе метода кумулянтов Биндера. Использование гистограммного анализа данных позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом кумулянтов Биндера, но и определить ряд других критически важных параметров. Например, минимальное значение величины  $L$  ( $L$  — линейный размер системы), которое необходимо использовать в вычислительном эксперименте для правильного определения рода ФП.

Огромный интерес к этим моделям обусловлен тем, что ФП в моделях Поттса с немагнитными примесями изучены не достаточно полно, а их критические свойства вызвали широкую дискуссию [4, 15, 16]. Кроме того, первые попытки исследова-

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

ния критических свойств этих моделей методами вычислительной физики предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

При построении трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q$  на простой кубической решетке необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут находиться в одном из  $q \geq 2$  состояний (рис. 1), 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 [5]

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

где

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

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

Следует отметить, что в трехмерной модели Поттса с  $q = 3$  и  $q = 4$  при отсутствии замороженного беспорядка ( $p = 1.00$ ) наблюдается ФП первого рода [4].

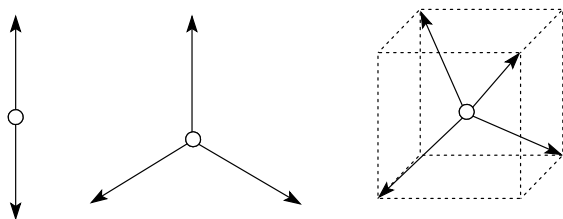


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина  $q = 2, q = 3$  и  $q = 4$

В ряде работ [17, 18] было показано, что присутствие замороженного беспорядка в модели Поттса с состоянием  $q > q_c$  ( $q_c$  — критическое число состояний спина) может изменить порядок ФП. Для двумерной неразбавленной модели Поттса  $q_c = 4$  [19], в то время как для трехмерной модели Поттса  $q_c = 2.45$  [20]. При этом для первой модели наблюдается ФП второго рода, а для второй — слабо выраженный ФП первого рода.

В работах [8–11] на основе кумулянтов Биндера [21, 22] исследовались термодинамические свойства трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$ , для которой в отсутствие структурного беспорядка наблюдается слабо выраженный ФП первого рода. В этих работах с использованием метода кумулянтов Биндера было показано, что в режиме слабого разбавления ( $0.70 \leq p < 1.00$ ) внесение в систему замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей  $c$  ( $c = 1 - p$ ) может индуцировать поведение, характерное для ФП второго рода, в то время как для трехмерной модели Поттса с  $q = 4$  такое поведение возможно лишь при концентрации спинов  $p \sim 0.70$  [12–14]. В этих работах проверялись и другие критерии, приведенные в работе [23] для определения рода ФП.

Для анализа характера ФП и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях весьма эффективным и информативным является гистограммный метод анализа данных, полученных методом Монте-Карло [24, 25]. Гистограммный анализ данных позволяет надежно определить не только концентрации спинов  $p$ , при которых возможна смена ФП первого рода на ФП второго рода, но и минимальные размеры систем, в которых возможно правильно определить род ФП на основе МК-данных. Поэтому нами проведен тщательный гистограммный анализ данных, полученных методом МК при исследовании ФП в разбавленной модели Поттса для значений концентраций спинов  $p$ , при которых возможна смена ФП первого рода на второй. В гистограммном анализе данных [24] вероятность обнаружения системы со значением энергии  $U$  и параметром порядка  $m$  определяется выражением

$$\overline{P(U, m)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m) \exp(KU), \quad (2)$$

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

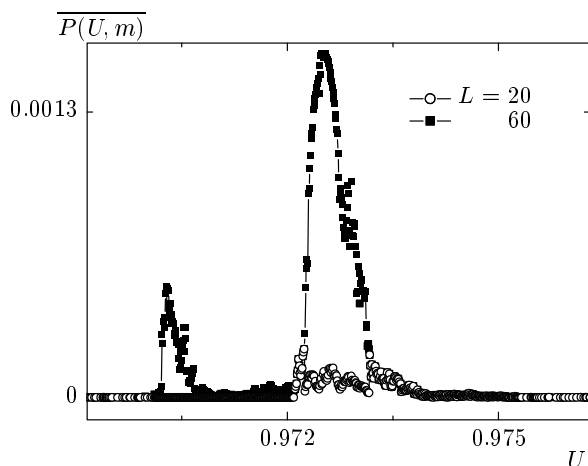


Рис. 2. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с  $q = 3$ ,  $p = 1.00$

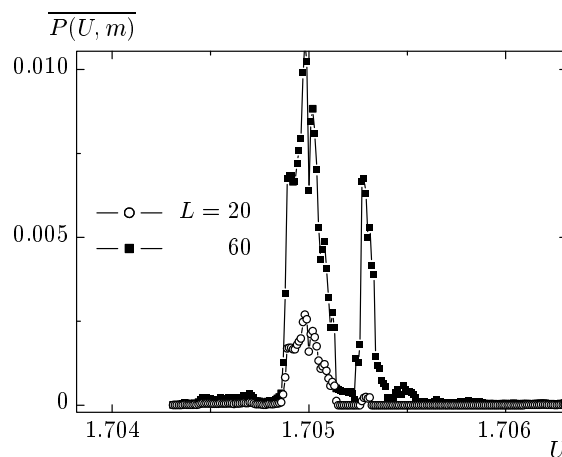


Рис. 3. Гистограмма распределения энергии для трехмерной модели Поттса с  $q = 4$ ,  $p = 1.00$

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями. При этом для модели Поттса с  $q = 3$  рассматривались концентрации спинов  $p = 1.00, 0.95$ , а для модели Поттса с  $q = 4$  — концентрации  $p = 1.00, 0.90, 0.65$ . Исследовались системы с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 20-60$ . Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации  $\tau_0$ , соответствующее для каждой системы с линейными размерами  $L$ . Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 150\tau_0$ . Кроме того, проводилось усреднение по различным начальным конфигурациям. В случае  $p = 1.0$  для усреднения использовалось десять начальных конфигураций. Для систем с концентрацией  $0.95 \geq p \geq 0.65$  осуществлялось конфигурационное усреднение по 800–3000 различным конфигурациям. Методика усреднения по ансамблю неупорядоченных систем с различной реализацией замороженного беспорядка нами подробно рассмотрена в работе [26].

Для определения критической температуры использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [21, 22]. Методика определения критической температуры и критерии определения рода ФП на основе кумулянтов Биндера четвертого порядка в рассматриваемых моделях Поттса те же, что и в работах [8, 12].

Наши результаты, полученные на основе гистограммного анализа МК-данных в беспримесных трехмерных моделях Поттса с числом состояний

спина  $q = 3$  и  $q = 4$  показали, что действительно в случае отсутствия примесей в обеих моделях наблюдается ФП первого рода. Эти результаты согласуются с выводами теории среднего поля [4] и данными, полученными методом МК на основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка [8–13]. Это продемонстрировано на рис. 2 и 3 для систем с линейным размером  $L = 20$  и  $L = 60$  вблизи критической температуры. На этих рисунках приведены гистограммы распределения энергии для модели Поттса соответственно с  $q = 3$  и с  $q = 4$ . Как видно на зависимости вероятности  $P$  от энергии  $U$ , для системы с  $L = 60$  для обеих моделей наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Бимодальность распределения энергии является важным критерием, свидетельствующим в пользу ФП первого рода. В то же время, распределение энергии для системы с  $L = 20$  проявляет лишь слабо выраженные признаки бимодальности. Таким образом, по нашим данным, для однозначного детектирования рода ФП в рассматриваемых моделях необходимо изучать системы с  $L \geq 60$ .

Вопрос об особенностях влияния немагнитных примесей на ФП в спиновых решеточных моделях продолжает вызывать повышенный интерес [1, 4, 5, 15, 16]. В более узком формате, применительно к модели Поттса с  $q = 3$  и  $q = 4$ , этот вопрос можно сформулировать так: есть ли различие в поведении модели Поттса с  $q = 3$  и  $q = 4$  при наличии немагнитных примесей и зависит ли оно от концентрации немагнитных примесей  $c$  ( $c = 1 - p$ )?

Результаты наших исследований показывают, что в модели Поттса с  $q = 3$  внесение небольшой до-

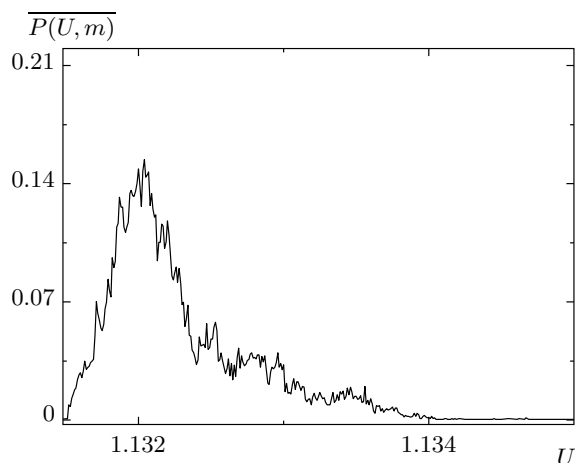


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для трехмерной слабо разбавленной модели Поттса с  $q = 3$  при  $p = 0.95$ ,  $L = 60$

ли немагнитных примесей (теоретически сколь угодно малой) приводит к смене ФП с первого рода на второй. Об этом свидетельствуют гистограммы распределения энергии. Для всех значений концентраций спинов от  $p = 0.95$  до  $p = 0.69$ , т. е. до порога перколяции по примесям в этой модели наблюдается распределение энергии с одним максимумом. Характерная картина такого распределения показана на рис. 4 при  $p = 0.95$  (т. е. 5% немагнитных примесей). При дальнейшем уменьшении концентраций спинов  $p$  в системе вплоть до  $p = 0.65$  (предел исследованных нами концентраций) наблюдается ФП второго рода. Следует отметить, что в отличие от наших исследований, в работе [27], где исследовалась разбавленная  $3d$ -модель Поттса с  $q = 3$  на основе теории конечно-размерного скейлинга, использованная ими методика не позволила выявить смену ФП при концентрации спинов  $p = 0.95$ .

В модели Поттса с  $q = 4$  ситуация существенно другая. В этом случае бимодальность распределения энергии наблюдается и при наличии немагнитных примесей вплоть до значений концентраций спинов  $p \sim 0.70$ , т. е. в системе происходит ФП первого рода. Уменьшение концентраций спинов до порога, при котором в системе происходит перколяционный переход, приводит к исчезновению бимодальной картины распределения энергии, что свидетельствует о смене ФП с первого рода на второй при уменьшении концентрации спинов ниже порога  $p \approx 0.70$ . Характерная картина распределения энергии при  $p = 0.65$  показана на рис. 5.

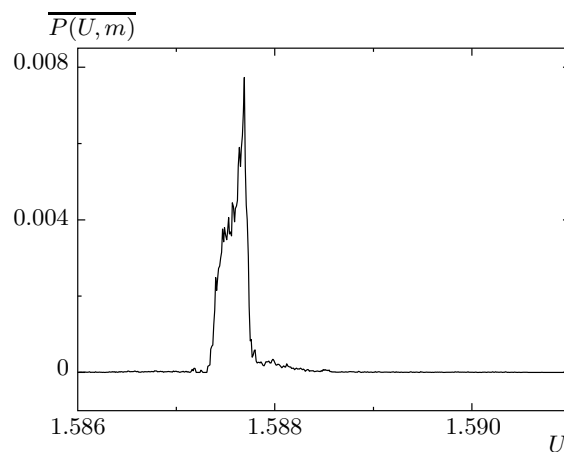


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для трехмерной сильно разбавленной модели Поттса с  $q = 4$  при  $p = 0.65$ ,  $L = 60$

Таким образом, метод гистограммного анализа данных позволяет определить не только род ФП в такого типа системах, но и другие характеристики, которые позволяют однозначно ответить на вопрос о ФП, например, минимальные значения  $L$ . Данные, полученные на основе гистограммного анализа, находятся в хорошем соответствии с результатами работ [8–14], определенными нами ранее на основе другого подхода метода кумулянтов Биндера четвертого порядка, и результатами теории среднего поля, полученными другими авторами для неразбавленной модели Поттса [4].

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики впервые на основе гистограммного метода анализа данных исследованы фазовые переходы в трехмерной разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  в широком интервале разбавлений  $p$ . Полученные данные свидетельствуют о следующем:

- 1) в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  в отсутствие структурного беспорядка ( $p = 1.0$ ) наблюдается ФП первого рода;
- 2) в трехмерной модели Поттса с  $q = 3$  смена ФП первого рода на ФП второго рода происходит в слабо разбавленной области при концентрации немагнитных примесей с порядка 5% ( $c = 1 - p$ ,  $p = 0.95$ );
- 3) в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  в области разбавления ( $0.65 < p < 1.00$ ) наблюдается ФП первого рода и смена ФП с первого рода на второй происходит в области разбавлений ( $p \leq 0.65$ ).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00130-а) и в рамках Федеральных целевых программ «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (госконтракт № П559 и № 02.270.11.03.97), «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России» на 2007–2013 гг. (госконтракт № 16.552.11.7051).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
2. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, УФН **173**, 175 (2003).
3. В. В. Прудников, П. В. Прудников, А. Н. Вакилов, А. С. Криницин, ЖЭТФ **132**, 417 (2007).
4. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
5. А. Н. Ермилов, Физика элементарных частиц и атомного ядра **20**, 1479 (1989).
6. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Москва (1985).
7. S. A. Safran, P. S. Sahni, and G. S. Grest, Phys. Rev. B **28**, 2693 (1983).
8. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ЖЭТФ **136**, 516 (2009).
9. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФТТ **50**, 703 (2008).
10. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya. Aznaurova, Diffusion and Defect Data Pt. B: Sol. St. Phenom. **152–153**, 571 (2009).
11. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, Изв. РАН, Сер. физ. **74**, 720 (2010).
12. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, ФНТ **37**, 167 (2011).
13. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Азнаурова, Изв. РАН, Сер. физ. **75**, 723 (2011).
14. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya. Aznaurova, Diffusion and Defect Data Pt. B: Sol. St. Phenom. **168–169**, 357 (2011).
15. W. Xiong, F. Zhonga, and Sh. Fan, Computer Phys. Comm. **183**, 1162 (2012).
16. Ch. Chatelain and B. Berche, Nucl. Phys. B **719/3**, 275 (2005).
17. M. Aizenman and J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989).
18. K. Hui and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989).
19. M. Loulidi, Physica A **287**, 177 (2000).
20. A. J. Guttmann and I. G. Enting, J. Phys. A **27**, 5801 (1994).
21. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
22. K. Binder, Phys. Rev. Lett **47**, 693 (1981).
23. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
24. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
25. E. P. Munger and M. A. Novotny, Phys. Rev. B **43**, 5773 (1991).
26. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, J. Magn. Mater. **321**, 2630 (2009).
27. H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, and A. Muñoz Sudupe, Phys. Rev. B **61**, 3215 (2000).