

# Компьютерное моделирование критического поведения в спиновых моделях с немагнитными примесями

А.Б. Бабаев<sup>1,2</sup>, А.К. Муртазаев<sup>1,3</sup>

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

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

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

E-mail: b\_albert78@mail.ru

Статья поступила в редакцию 17 февраля 2015 г., после переработки 10 апреля 2015 г., опубликована онлайн 23 июня 2015 г.

Обсуждаются результаты, полученные на основе компьютерного моделирования критического поведения трехмерных структур, описываемых неупорядоченными моделями Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$ . Рассмотрены системы с линейными размерами  $L$ , равными 20–60, при концентрациях спинов  $p = 1,00, 0,95, 0,90, 0,80, 0,70, 0,65$ . Показано, что в трехмерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  внесение немагнитных примесей приводит к фазовому переходу второго рода. В то время как в модели Поттса с  $q = 4$  смена фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода наблюдается в сильно разбавленном режиме ( $p = 0,65$ ). На основе теории конечно-размерного скейлинга определены численные значения критических параметров и показано, что они образуют класс универсальности, соответствующий неупорядоченным системам.

Обговорюються результати, які отримано на основі комп'ютерного моделювання критичної поведінки тривимірних структур, що описуються неупорядкованими моделями Поттса з числом станів спіна  $q = 3$  та  $q = 4$ . Розглянуто системи з лінійними розмірами  $L$ , які рівні 20–60, при концентраціях спінів  $p = 1,00, 0,95, 0,90, 0,80, 0,70, 0,65$ . Показано, що в тривимірній моделі Поттса з числом станів спіна  $q = 3$  внесення немагнітних домішок призводить до фазового переходу другого роду. Тоді як в моделі Поттса з  $q = 4$  зміна фазового переходу першого роду на фазовий перехід другого роду спостерігається в сильно розбавленому режимі ( $p = 0,65$ ). На основі теорії кінцево-розмірного скейлінга визначено чисельні значення критичних параметрів та показано, що вони утворюють клас універсальності, що відповідає неупорядкованим системам.

PACS: 75.40.Cx Статические свойства (параметр порядка, статическая восприимчивость, теплоемкость, критические индексы и т.д.);

75.40.Mg Численное моделирование.

Ключевые слова: модель Поттса, немагнитные примеси, фазовые переходы, критическое поведение.

## 1. Введение

В последние годы большое число теоретических и экспериментальных работ было посвящено исследованию магнитных систем с замороженным немагнитным беспорядком [1]. Это обусловлено тем, что большинство реальных твердых тел всегда содержит примеси и другие дефекты структуры, присутствие которых влияет на их тепловые и магнитные характеристики и, в частности, может существенно влиять на поведение систем при фазовых переходах (ФП). Критерий Харри-

са ответил на принципиальный вопрос о смене критического поведения при введении небольшого количества замороженных примесей [2]. Согласно этому критерию, слабый беспорядок влияет на критическое поведение только в тех случаях, когда теплоемкость соответствующей чистой системы испытывает расходимость в критической точке. Критический индекс теплоемкости  $\alpha$  для трехмерной модели Изинга в отсутствие структурного беспорядка положителен, поэтому критерий Харриса применим к этой модели. Исследованию критических свойств неупорядоченной

модели Изинга в последнее время посвящено значительное число работ [3–6], в которых получены ответы на многие вопросы. В отличие от трехмерной разбавленной модели Изинга весьма запутанной остается ситуация с трехмерной (3D) моделью Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$ , в которой замороженный беспорядок внесен в виде замороженных немагнитных примесей. В этих двух моделях в чистом состоянии наблюдается ФП первого рода. В связи с тем, что эти модели могут быть использованы для описания многих систем, в том числе наноструктур, сверхрешеток и биологических объектов, исследование влияния примесей на их критические и термодинамические свойства имеет важное прикладное значение [7].

Несмотря на интенсивные теоретические исследования спиновых решеточных систем с замороженным беспорядком в течение последних двадцати лет, к настоящему времени существует совсем немного надежно установленных фактов о поведении систем, для которых в чистом состоянии наблюдается слабо выраженный ФП первого рода. Известно, 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 величина  $q_c = 4$  [8], в то время как для 3D модели Поттса  $q_c = 2,45$  [9]. При этом для первой модели наблюдается ФП второго рода, а для второй — слабо выраженный ФП первого рода. В ряде работ [10,11] было строго доказано, что для низкоразмерных систем ( $D \leq 2$ ), описываемых моделью Поттса с  $q > q_c(D)$ , наличие сколь угодно малой величины замороженного беспорядка достаточно, чтобы изменить ФП первого рода на ФП второго рода. Кроме того, в работе [12] исследована 3D модель Поттса с  $q = 4$ , в которой замороженный беспорядок внесен в виде замороженных связей и показано, что внесение в систему замороженного беспорядка в виде замороженных связей может привести к смягчению ФП первого рода вплоть до индуцирования ФП второго рода.

Влияние замороженного беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей, на ФП в 3D разбавленной модели Поттса с  $q = 4$  было изучено в работе [13]. В этой работе показано, что в сильно разбавленном режиме ( $p \sim 0,65$ ) в четырехкомпонентной модели Поттса может наблюдаться ФП второго рода. В то же время для этой модели не был установлен класс универсальности критического поведения и не определены критические индексы в зависимости от концентрации немагнитных примесей, особенно когда беспорядок реализован в виде замороженных немагнитных примесей. Единственно надежно установленным фактом является то, что в чистой модели Поттса с  $q = 4$  происходит ФП первого рода [14,15].

В настоящей работе приведены результаты, полученные при исследовании ФП и критических явлений в

3D разбавленных моделях Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  с применением методов вычислительной физики. Исследования проведены на основе однокластерного алгоритма Вольфа метода Монте-Карло (МК). Огромный интерес к модели Поттса обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, модель Поттса служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. В частности, гамильтониан модели Поттса с  $q = 3$  изоморфен магнитной симметрии реальной системы  $\text{SrTiO}_3$ . Поэтому структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких как  $\text{SrTiO}_3$ , могут описываться моделью Поттса с состоянием спина  $q = 3$  [14]. В этой магнитной системе обменное взаимодействие является короткодействующим. Кроме того, адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита может описываться моделями решеточного газа Поттса с числом состояний спина  $q$ .

Во-вторых, исследование влияния замороженного беспорядка на универсальные характеристики критического поведения, помимо практического, имеет и большой академический интерес [1].

В-третьих, первые попытки исследования этой модели 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 методика исследования

При построении 3D модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  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, 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 же, если хотя бы в одном узле находится немагнитный атом, 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 [15]

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

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

$$\rho_i = \begin{cases} 1, & \text{если в узле расположен спин,} \\ 0, & \text{если в узле расположена немагнитная примесь,} \end{cases}$$
  
 суммирование в гамильтониане (1) проводится только по ближайшим соседям.

Следует отметить, что в 3D модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  при отсутствии замороженного беспорядка ( $p = 1,00$ ) наблюдаются ФП первого рода. Поэтому нами первоначально проведены контрольные исследования термодинамических параметров для чистой неразбавленной 3D модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$ , затем — для чистой модели с  $q = 4$ . Исследования проведены на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [16]. Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями. При этом для модели Поттса с  $q = 3$  рассматривались концентрации спинов  $p$ , равные 1,00; 0,95; 0,90; 0,80; 0,70; 0,65, а для модели Поттса с  $q = 4$  для концентрации  $p = 1,00; 0,90; 0,65$ . Исследованы системы с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 20-44$ . Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Затем проводилось усреднение 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 10 начальных конфигураций. Для систем с концентрацией  $0,95 \geq p \geq 0,65$  осуществлялось конфигурационное усреднение по 100–1000 различным конфигурациям.

### 3. Результаты численного эксперимента

#### 3.1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использованы флуктуационные соотношения [17]

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

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

где  $K = J/k_B T$ ,  $N = pL^3$  — число магнитных узлов,  $U$  — внутренняя энергия,  $m$  — намагниченность системы, угловые скобки означают усреднение по каноническому ансамблю.

В качестве намагниченности для ферромагнитной модели Поттса использовали следующее выражение:

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

где  $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, \dots, N_q\}$ ,  $N_1$  — число спинов в состоянии  $q = 1$ ,  $N_2$  — число спинов в состоянии  $q = 2$ ,  $N_3$  — число спинов в состоянии  $q = 3$  и т.д.,  $N = pL^3$ . На рис. 1 представлены температурные зависимости намагниченности  $m$  для 3D разбавленной модели Поттса с  $q = 3$  при концентрации спинов  $p = 0,9$ . Как видно на рис. 1, наблюдается монотонное уменьшение величины  $m$  с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных «хвостов» при увеличении линейного размера  $L$ .

Для анализа характера ФП и особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях наиболее эффективно зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [18]:

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

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

где  $E$  — энергия и  $m$  — намагниченность системы с линейным размером  $L$ . Выражения (5) и (6) позволяют с большой точностью определить  $T_c(p)$  в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Методика определения критической температуры на основе кумулянтов Биндера четвертого порядка в различных моделях подробно описана нами в работах [19–23]. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в спиновой системе.

Известно, что фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [24]: усредненная величина  $V_L(T, p)$  стремится

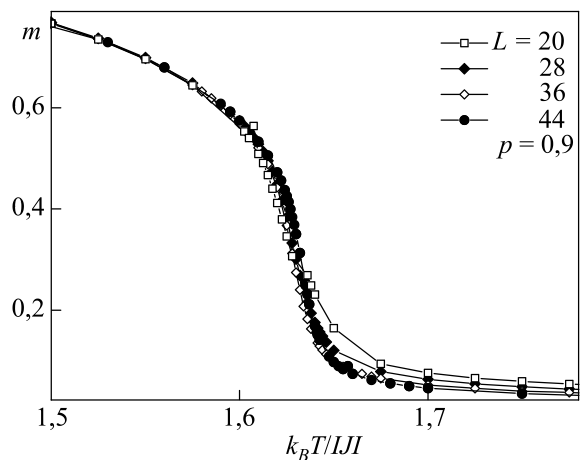


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности  $m$  для 3D модели Поттса с  $q = 3$  при концентрации спинов  $p = 0,9$ .

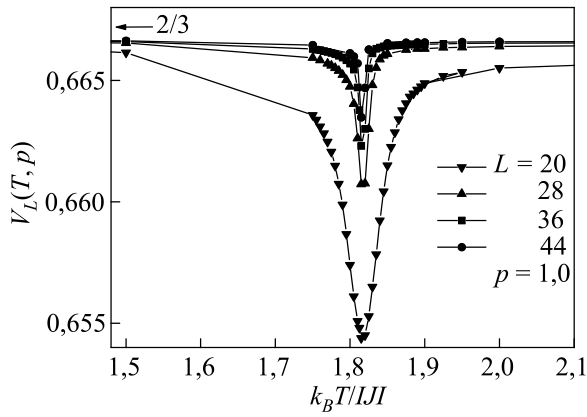


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  для 3D модели Поттса с  $q = 3$ .

к некоторому нетривиальному значению  $V^*$ , согласно выражению

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

при  $L \rightarrow \infty$  и  $T = T_c(L)$ , где  $V^*$  отлична от  $2/3$ , а минимальная величина  $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p)$  расходится ( $U_{L, \min}(T = T_{\min}, p) \rightarrow -\infty$ ) при  $L \rightarrow \infty$ , что и продемонстрировано на рис. 2 и 3 соответственно для модели Поттса с  $q = 3$  при отсутствии структурного беспорядка ( $p = 1,0$  здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превосходит размеров символов, используемых для обозначения зависимости); максимумы теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  пропорциональны объему  $L^D$ . Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные температурные зависимости кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  и  $U_L(T, p)$  для 3D модели Поттса с  $q = 3$  для систем с разными линейными размерами при  $p = 0,95$  определены в работах [20–22] и приведены на рис. 4 и 5 соответственно.

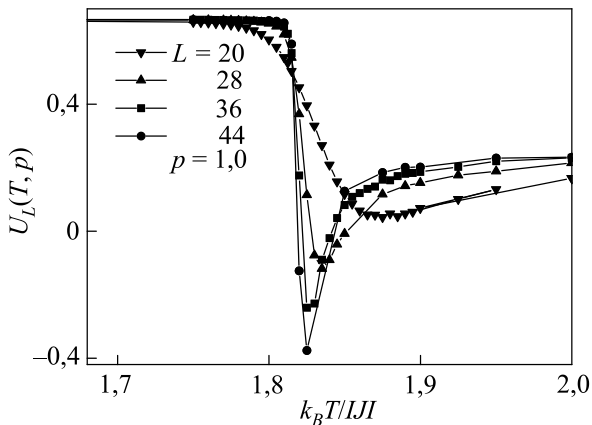


Рис. 3. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  для 3D модели Поттса с  $q = 3$ .

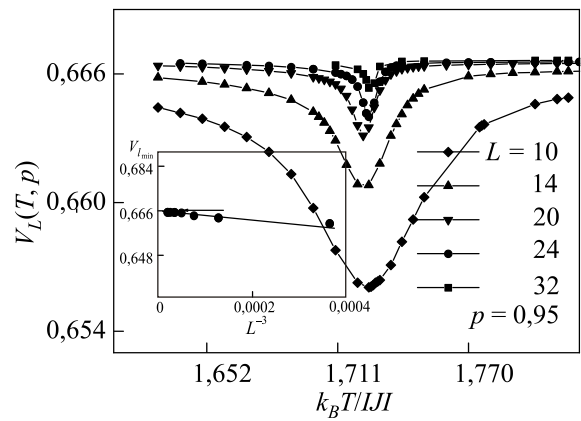


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  для 3D слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 3$ .

Заметим, что на вставке к рис. 4 наглядно видно, что нетривиальная величина  $V^* \rightarrow 2/3$  при  $L \rightarrow \infty$ . Аппроксимация данных  $(V_L)_{\min}$  от  $L$  проведена на основе выражения (7). Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода. Аналогичное поведение температурных зависимостей кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  и  $U_L(T, p)$  для трехмерной модели Поттса с  $q = 3$  наблюдалось и для систем с концентрацией спинов  $p = 0,90; 0,8; 0,70; 0,65$ . Определенные методом кумулянтов Биндера критические температуры для 3D модели Поттса с  $q = 3$  приведены в табл. 1. Таким образом, очевидно, что немагнитные примеси с концентрацией  $c = 0,05$  ( $c = 1 - p$ ) приводят к смене ФП с первого рода на второй. Отметим, что в работе [25], где исследована 3D разбавленная модель Поттса с  $q = 3$ , случай с концентрацией спинов  $p = 0,95$  не рассматривался.

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, на фазовой диаграмме для модели Поттса с  $q = 3$  и  $q = 4$  нами на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [26,27] рассчитаны статические критические индексы (КИ) теп-

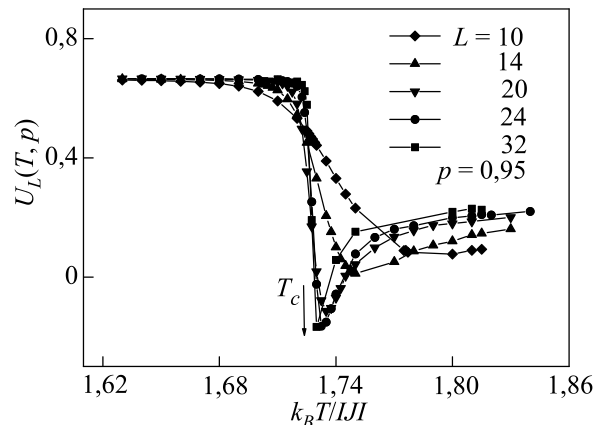


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  для 3D слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 3$ .

Таблица 1. Критические индексы трехмерной примесной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$ , определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга

$p$	$T_c$	$\nu$	$\alpha$	$\gamma$	$\beta$	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
0,95	1,724(2)	0,697(13)	-0,001(12)	1,273(14)	0,364(14)	2,000
0,90	1,634(3)	0,671(15)	-0,008(15)	1,275(15)	0,365(15)	1,997
0,80	1,449(4)	0,679(17)	-0,018(16)	1,279(15)	0,372(15)	2,005
0,70	1,245(6)	0,684(18)	-0,025(19)	1,281(16)	0,374(16)	2,004
0,65	1,127(9)	0,688(24)	-0,027(20)	1,284(20)	0,376(20)	2,009

лоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\chi$ , намагниченности  $m$ , и критический индекс радиуса корреляции  $\nu$ . Из соотношений теории КРС следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T = T_c$  и достаточно больших  $L$  намагниченность, восприимчивость и параметр  $V_n$  для определения критического индекса  $\nu$  удовлетворяют следующим аналитическим выражениям:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (8)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (9)$$

$$V_n \sim L^{1/\nu}, \quad (10)$$

где в качестве  $V_n$  может выступать

$$V_i = \left( \langle m^i E \rangle / \langle m^i \rangle \right) - \langle E \rangle, \quad (i = 1, 2, 3).$$

Эти соотношения использованы нами для определения величин  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\nu$ .

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$ , как правило, используются другие выражения, например [17]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (11)$$

где  $A$  — некоторый коэффициент.

Для расчета КИ  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\nu$  строились зависимости  $C$ ,  $m$ ,  $\chi$ , и  $V_n$  от  $L$ . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $1/\nu$  и  $\alpha/\nu$  для разбавленной модели Поттса с  $q = 3$  и  $q = 4$ . Затем, с использованием значений  $\nu$ , полученных в рамках данного исследования, определялись индексы  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\alpha$ .

На рис. 6 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость восприимчивости трехмерной слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 3$  от линейных размеров решетки  $L$  для концентраций спинов  $p = 0,9$  при  $T = T_c$ . Обратим внимание на то, что данные, полученные для восприимчивости, ложатся на прямую даже при самых малых значениях  $L$ . Очевидно, что использованное нами для усреднения количество примесных конфигураций и размеры

$L \geq 20$  изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима. Очень важным моментом является и то, что нами индекс  $\nu$  вычислен непосредственно из результатов численного эксперимента в рамках данного исследования, тогда как во многих других работах этот индекс определен из различных скейлинговых соотношений.

Результаты для КИ радиуса корреляции  $\nu$  для 3D разбавленной модели Поттса с состоянием  $q = 3$  при концентрациях  $p$ , равных 0,95; 0,90; 0,80; 0,70; 0,65, удовлетворяют также соотношению  $\nu \geq 2/D \approx 0,667$ , которое характерно для неупорядоченных D-мерных систем (см. [3]) и близки к значению 0,690(5), полученному в работе [25] для 3D неупорядоченной модели Поттса с  $q = 3$ , в которой замороженные немагнитные примеси внесены большим каноническим способом.

Значения КИ для разбавленной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  при различных значениях концентраций спинов  $p$ , полученные при соответствующем  $\nu(p)$ , представлены в табл. 1. Как видно из табл. 1, полученные значения КИ для трехмерной разбавленной модели Поттса с  $q = 3$  достаточно хорошо согласуются друг с другом. Численные значения лишь слегка выходят за пределы погрешности, что, по видимому, связано с недостаточной точностью численных экспериментов.

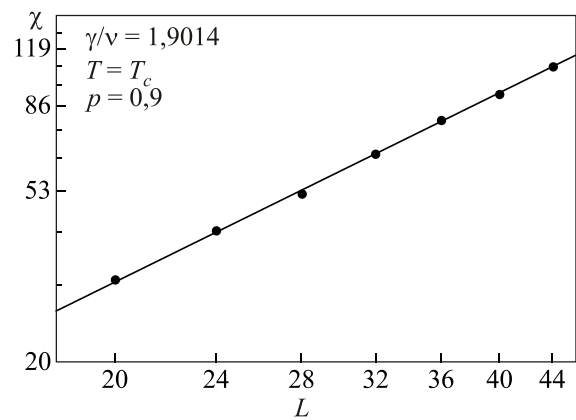


Рис. 6. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  для трехмерной слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 3$  при  $T = T_c$ .

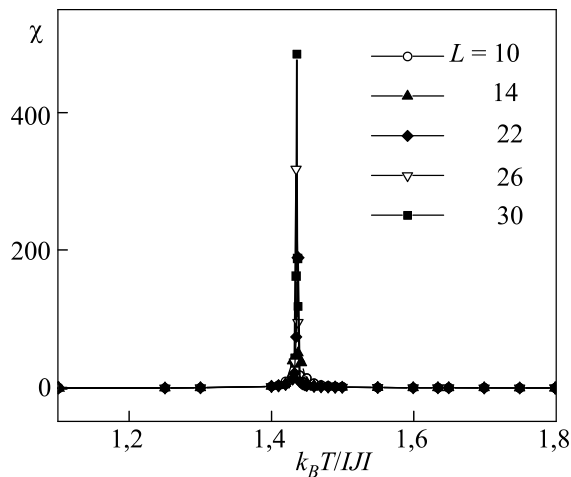


Рис. 7. Температурная зависимость восприимчивости  $\chi$  для трехмерной слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

### 3.2. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$

На рис. 7 представлены характерные зависимости восприимчивости  $\chi$  от температуры  $T$  для 3D разбавленной модели Поттса с числом состояний  $q = 4$  при  $p = 0,9$  для систем с линейными размерами  $L = 10, 14, 22, 26, 30$ . Отметим, что в зависимостях восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру.

Температурные зависимости кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  и  $U_L(T, p)$  для 3D модели Поттса с  $q = 4$  при  $p = 0,90$  представлены на рис. 8 и 9. Заметим, что на вставке к рис. 8 наглядно видно, что нетривиальная величина  $V^*$  для модели Поттса с  $q = 4$ , полученная при аппроксимации в соответствии с выражением (7), не стремится к  $2/3$  при  $L \rightarrow \infty$ , что характерно для ФП первого рода. Кроме того, из температурной зависимости  $U_L(T, p)$  (рис. 8) видно, что  $U_L(T, p)$  стремится к  $-\infty$  при  $L \rightarrow \infty$ , что также является подтверждением ФП первого рода.

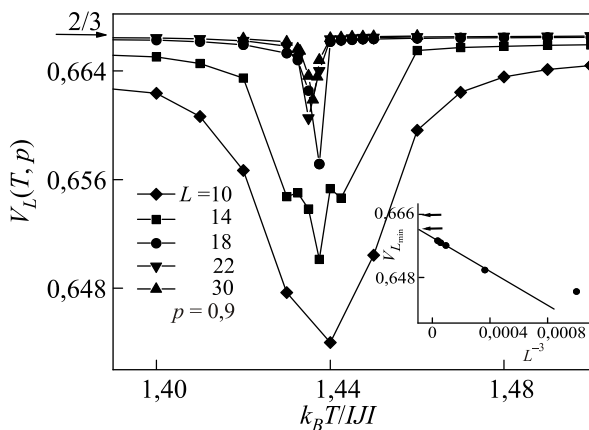


Рис. 8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  для 3D слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

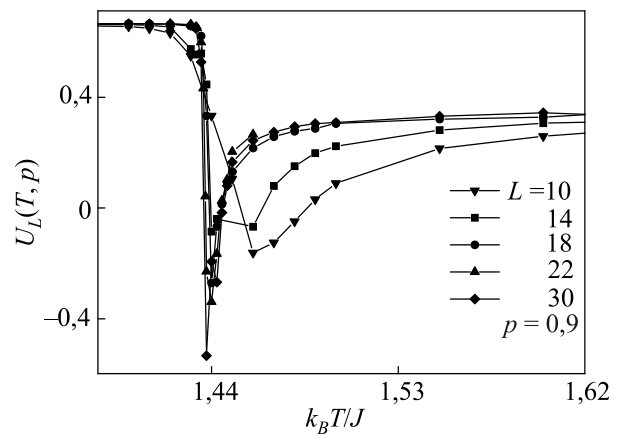


Рис. 9. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  для 3D слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

На рис. 10 в двойном логарифмическом масштабе представлена зависимость  $\chi_{\max}$  от  $L$  для 3D слабо разбавленной модели Поттса при концентрации спинов  $p = 0,90$ . Как нами отмечено выше, для фазовых переходов первого рода максимум восприимчивости  $\chi_{\max}$  должен быть масштабирован с размером системы, как  $L^D$  [24]. На рисунке видно, что угол наклона  $b = 2,99(2)$ , что примерно соответствует  $D = 3$ . Полученное значение  $b$  свидетельствует в пользу наличия в системе фазового перехода первого рода. Такая оценка значения  $b$  проведена и для всех других рассмотренных нами систем.

Температурные зависимости кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  и  $U_L(T, p)$  для сильно разбавленной модели Поттса с  $q = 4$  при  $p = 0,65$  для систем с различными линейными размерами  $L$  приведены на рис. 11 и 12.

Заметим, что на вставке к рис. 11 наглядно видно, что нетривиальная величина  $V^*$ , в отличие от слабо разбавленного режима ( $p = 0,90$ ),  $V^* \rightarrow 2/3$  при  $L \rightarrow \infty$ . Такое поведение, как отмечалось, характерно для ФП второго рода. Кроме того, на рис. 12 видно, что в кри-

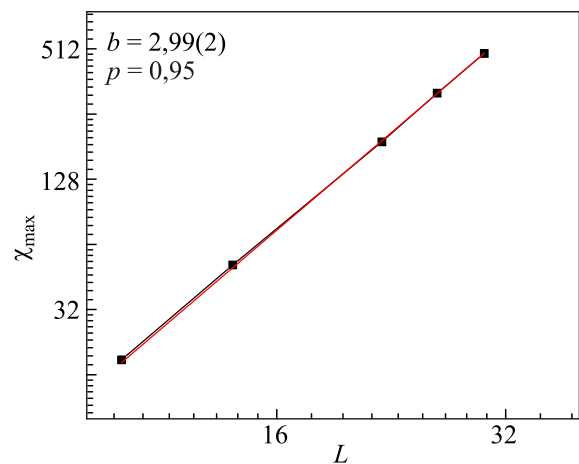


Рис. 10. (Онлайн в цвете) Зависимость восприимчивости  $\chi_{\max}$  от линейных размеров системы  $L$  для трехмерной слаборазбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

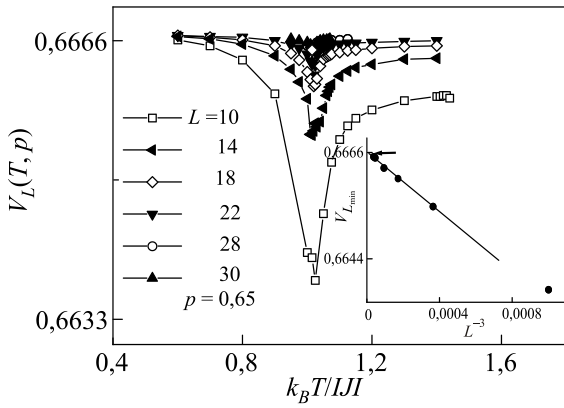


Рис. 11. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T, p)$  для 3D сильно разбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

тической 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. Определенные методом кумулянтов Биндера критические температуры  $T_c(p)$  равны  $T_c(1,00) = 1,5925$ ;  $T_c(0,90) = 1,4375$ ;  $T_c(0,65) = 1,0222$  в единицах  $J/k_B$ .

По описанной выше методике нами также проведен расчет КИ и для 3D модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  в области фазовой диаграммы, соответствующей сильно разбавленному режиму ( $p = 0,65$ ). Для расчета КИ  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\nu$  построены зависимости в соответствии с выражениями (8)–(11)  $m$ ,  $\chi$ ,  $V_n$  и  $C$ , от  $L$ . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить следующие значения:  $\beta/\nu = 0,691(24)$ ,  $\gamma/\nu = 1,521(30)$ ,  $1/\nu = 1,342(13)$ ,  $\alpha/\nu = -0,187(11)$ . Затем, с использованием значений  $\nu$ , полученных в рамках данного исследования, для 3D разбавленной модели Поттса с  $q = 4$  были получены следующие индексы:  $\alpha = -0,139(11)$ ,  $\beta = 0,514(24)$  и  $\gamma = 1,133(30)$ .

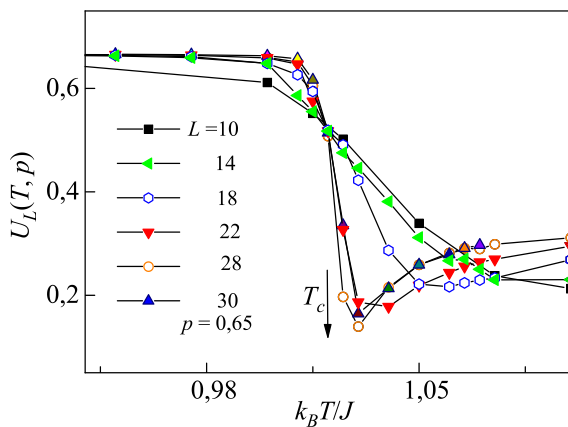


Рис. 12. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T, p)$  для 3D сильно разбавленной модели Поттса с  $q = 4$ .

#### 4. Заключение

В данной работе обсуждаются результаты, полученные при изучении фазовых переходов и критических явлений в трехмерных разбавленных моделях Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  и  $q = 4$  в широком интервале изменения концентрации немагнитных примесей на основе метода Монте-Карло. Полученные численные данные свидетельствуют о следующем.

1. В модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  в отсутствие структурного беспорядка ( $p = 1,0$ ) наблюдается фазовый переход первого рода. Внесение в трехмерную модель Поттса с  $q = 3$  замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей  $c$  ( $c = 1 - p$ ), где  $p = 0,95; 0,90; 0,80; 0,70; 0,65$  изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

2. В модели Поттса с числом состояний спина  $q = 4$  в отсутствие структурного беспорядка ( $p = 1,0$ ) и в области слабого разбавления ( $p = 0,90$ ) наблюдается поведение, характерное для ФП первого рода. В сильно разбавленной области ( $p = 0,65$ ) внесение в систему замороженного беспорядка в виде немагнитных примесей  $c$  изменяет фазовый переход первого рода на фазовый переход второго рода.

3. Численные значения критических индексов подтверждают универсальность критического поведения трехмерных неупорядоченных систем.

Работа поддержана грантом РФФИ (№13-02-00220).

1. Вик. С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995) [*Phys. Usp.* **38**, 457 (1995)].
2. А.В. Harris, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
3. R. Folk, Yu. Holovatch, and T. Yavorskii, *Usp. Fiz. Nauk* **173**, 175 (2003) [*Phys. Usp.* **46**, 169 (2003)].
4. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **126**, 1377 (2004) [*JETP* **99**, 1201 (2004)].
5. А.К. Murtazaev and А.В. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2630 (2009).
6. V.V. Prudnikov, P. Prudnikov, A. Vakilov, and A. Krinitsyn, *Sov. Phys. JETP* **105**, 371 (2007).
7. M. Monsivais-Alonso, *arxiv: physics/0603035v1* (2006).
8. M. Loulidi, *Physica A* **287**, 177 (2000).
9. A.J. Guttmann and I.G. Enting, *J. Phys. A* **27**, 5801 (1994).
10. M. Aizenman and J. Wehr, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2503 (1989).
11. A.N. Berker, S. Ostlund, and F.A. Putnam, *Phys. Rev. B* **17**, 3650 (1978).
12. Ch. Chatelain, B. Berche, W. Janke, and P.-E. Berche, *Nucl. Phys. B* **719/3**, 275 (2005).
13. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФНТ* **37**, 167 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 134 (2011)].
14. А.Н. Ермилов, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **20**, 1379 (1989).
15. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
16. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).

17. P. Peczas, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
18. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
19. A.K. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *Письма ЖЭТФ* **99**, 618 (2014) [*JETP Lett.* **99**, 535 (2014)].
20. A.K. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **142**, 1189 (2012) [*JETP* **115**, 1042 (2012)].
21. A.K. Murtazaev and A.B. Babaev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3870 (2012).
22. A.K. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФТТ* **50**, 703 (2008) [*Phys. Solid State* **50**, 733 (2008)].
23. A.K. Муртазаев, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **136**, 516 (2009) [*JETP* **109**, 442 (2009)].
24. D. Loison and K.D. Schotte, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
25. H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, G. Parisi, and J.J. Ruiz-Lorenzo, *Phys. Rev. B* **61**, 3215 (2000).
26. M.E. Fisher and M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
27. D. Loison, *Phys. Lett. A* **257**, 83 (1999).

## Computer simulation of the critical behavior in spin models with nonmagnetic impurities

A.B. Babaev and A.K. Murtazaev

We discuss the results obtained on the basis of computer simulation of the critical behavior of three-dimensional structures described by the disordered 3- and 4-state Potts models. The systems with linear dimensions  $L = 20-60$  are considered for spin concentrations  $p = 1.00, 0.95, 0.90, 0.80, 0.70, 0.65$ . It is shown that in the three-dimensional 3-state Potts model the introduction of nonmagnetic impurities leads to a phase transition of the second order, while in the 4-state Potts model the change of the first order phase transition to the second order one is observed in a highly dilute regime ( $p = 0.65$ ). Using the theory of finite-size scaling makes it possible to determine the numerical values of the critical parameters and to show that they form a universality class of the corresponding disordered systems.

PACS: 75.40.Cx Static properties (order parameter, static susceptibility, heat capacities, critical exponents, etc.);  
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: Potts model, nonmagnetic impurities, phase transitions, critical behavior.