

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДВУМЕРНЫХ МОДЕЛЯХ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев^а, А. Б. Бабаев^{а,б*}

^а Институт физики им. Х. И. Амирханова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия

^б Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
367000, Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 31 января 2022 г.,
после переработки 5 февраля 2022 г.
Принята к публикации 7 февраля 2022 г.

Методом компьютерного моделирования проведены исследования фазовых переходов в двумерных моделях Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами L , где $L = 21$ –180. Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в двумерной модели Поттса на гексагональной решетке наблюдается фазовый переход первого рода для числа состояний спина $q = 5$ и фазовый переход второго рода при $q = 4$.

DOI: 10.31857/S0044451022060086
EDN: DUMNTF

1. ВВЕДЕНИЕ

Фазовые переходы (ФП) и связанные с ними критические явления чрезвычайно широко распространены в конденсированных средах. При определенных условиях во всех конденсированных средах происходят один или несколько фазовых переходов. На разработку эффективной теории фазовых переходов и критических явлений были затрачены колоссальные усилия, и к настоящему моменту времени в этом направлении достигнут существенный прогресс [1]. Флуктуационная теория фазовых переходов, а также идеи, заложенные в гипотезах скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы лежат в основе современного понимания физики этих явлений [2, 3].

Следует отметить, что большой успех в теоретическом исследовании ФП имеет изучение точно решаемых моделей, которые обладают нетривиальным поведением, претерпевая ФП первого или второго рода, и в то же время позволяют получить точную статистическую сумму. Такие модели обычно не допускают непосредственного сравнения с экспериментом, но полезны для понимания физики фазо-

вого перехода [4]. К настоящему времени получено несколько точно решаемых моделей, среди которых двумерная модель Изинга на квадратной [5], треугольной и гексагональной [6] решетках и на решетке кагоме [7]. В то же время, несмотря на огромные усилия, затраченные в этой области, для моделей Поттса до сегодняшнего дня не имеется ни одного точного решения. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей на различных двумерных решетках имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Это связано с тем, что многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности, интеркаляция атомов шлочных металлов в решетку графита, описываются моделью Поттса с числом состояний спина $q = 4$, а адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита достаточно хорошо описывается низкоразмерными моделями Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на треугольной и гексагональной решетках [8, 9], и их исследование к настоящему времени является своевременным. Модель Поттса на квадратной решетке эквивалентна модели типа льда на линии ФП, и для нее в работе [10] вычислена свободная энергия. Кроме того, для модели Поттса на квадратной, треугольной и гексагональной решетках, исходя из аргумента дуальности, получены полиномиальные выражения, позволяющие получить значения критических

* E-mail: b_albert78@mail.ru

точек [11, 12]. Отдельно модель Поттса с $q = 4$ интересна тем, что значение $q = 4$ является граничным, выше которого должен наблюдаться ФП первого рода. Однако к настоящему моменту при изучении этой модели внимание в основном уделялось системам на квадратной и треугольной решетках, и особенности критического и термодинамического поведения этой модели на гексагональной решетке практически не изучались.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

При построении модели Поттса, в частности с числом состояний спина $q = 4$, необходимо иметь в виду следующие особенности: в узлах гексагональной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в четырех симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1); энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) 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 [9]

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

где

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

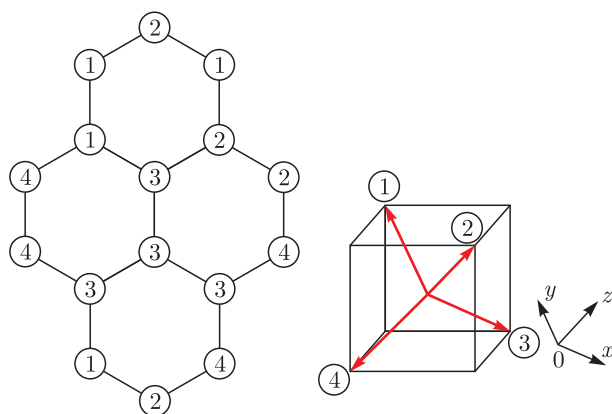


Рис. 1. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

Исследования проводились на основе высокоэффективного кластерного алгоритма Вольфа [13]. Методика реализации этого алгоритма приведена в работе [14]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями для систем с линейными размерами $L = 10-180$ и числом узлов $N = 2 \times p \times L \times L/3$. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль одной из осей X, Y или Z . Усреднение термодинамических параметров осуществлялось по трем независимым марковским цепям, каждая из которых стартует из разных случайных начальных конфигураций. Причем для контроля точности вычислений число случайных начальных конфигураций доводилось и до десяти. Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывался. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 160\tau_0$. Для самой большой системы $L = 180, \tau_0 = 2 \cdot 10^3$ МК шагов/спин. В конце полученные данные по независимым марковским цепям усреднялись и между собой.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Наблюдение за температурным ходом энергии U , намагниченности m_F , теплоемкости C и восприимчивости χ осуществлялось с использованием следующих выражений [15, 16]:

$$U = \frac{1}{N} [\langle U \rangle], \quad (2)$$

$$m_F = \frac{q(N_{max}/N) - 1}{q - 1}, \quad (3)$$

$$C(T) = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

$$\chi = (NK) (\langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2), \quad (5)$$

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 — число узлов решетки, угловые скобки обозначают термодинамическое усреднение.

На рис. 2 представлены температурные зависимости энергии U для моделей Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ для спиновых систем с линейными размерами $L = 45$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает

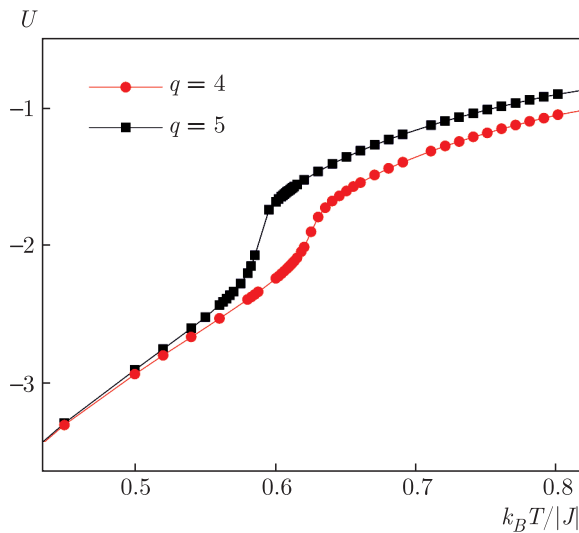


Рис. 2. Температурная зависимость энергии U для двумерных моделей Поттса

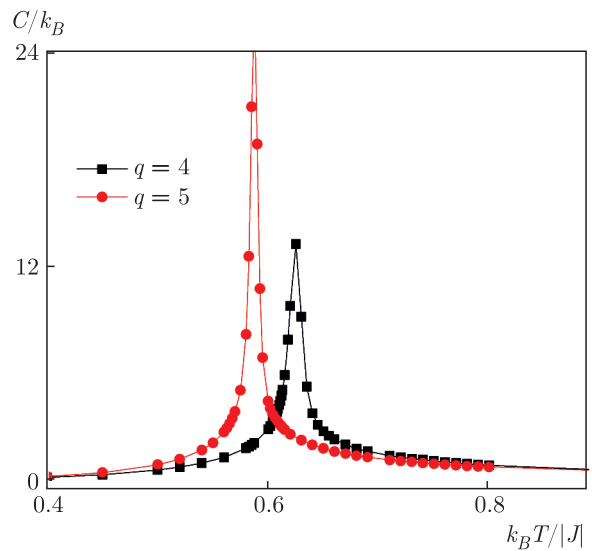


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости C для двумерных моделей Поттса

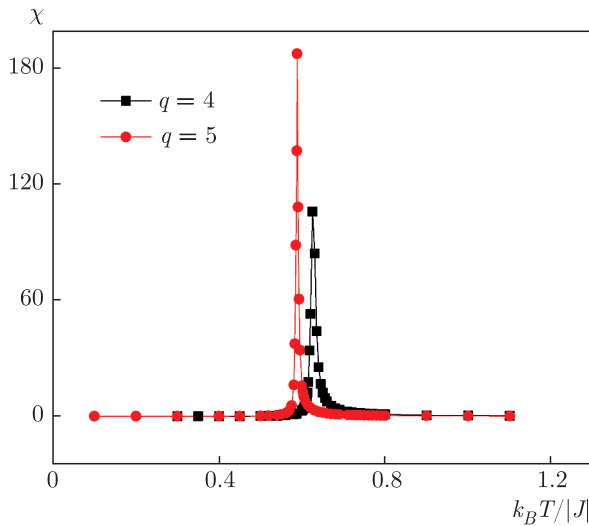


Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости χ для двумерных моделей Поттса

размеров символов, используемых для обозначения зависимости. Как видно на рис. 2, температурные зависимости энергии для модели Поттса с $q = 5$ демонстрируют поведение, характерное для фазового перехода первого рода (в точке фазового перехода T_l проявляется отчетливый скачок энергии), в то время как для модели Поттса с $q = 4$ такого скачка не проявляется. На рис. 3 и 4 представлены характерные температурные зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C для спиновых систем, описываемых двумерными моделями Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Как видно на рис. 3 и 4,

в зависимостях восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры T для двумерной модели Поттса с $q = 5$ в точке фазового перехода проявляются «всплески», которые характерны для фазового перехода первого рода. В случае модели Поттса с $q = 4$ такие резкие «всплески» не наблюдаются. При компьютерном моделировании ФП для определения температуры фазового перехода T_l часто используют метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [17, 18]:

$$V_L(T, p) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m_F^4 \rangle}{3 \langle m_F^2 \rangle_L^2}, \quad (7)$$

где E — энергия, и m_F — намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (6) и (7) позволяют определить температуру фазового перехода $T_l(p)$ с большой точностью соответственно в фазовых переходах первого и второго рода. Так же данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Анализ численных данных с применением этого метода представлен в работах [19–22]. Отличительные черты, характерные для ФП [23]: для ФП первого рода характерно то, что усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_L(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (8)$$

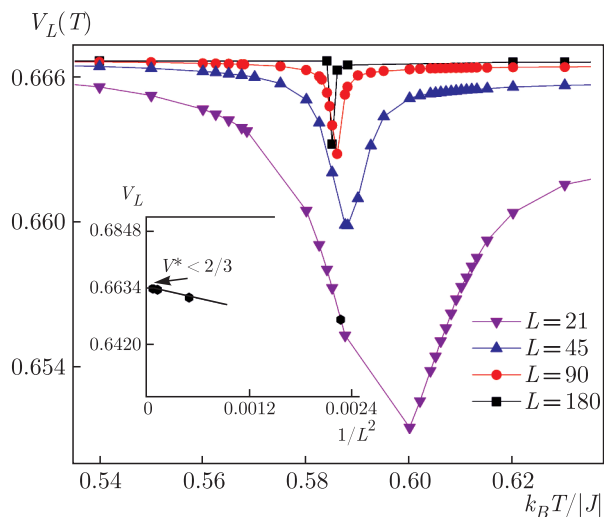


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке

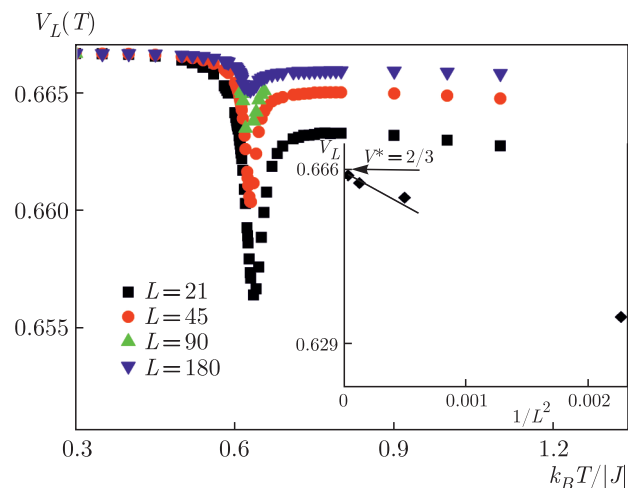


Рис. 7. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

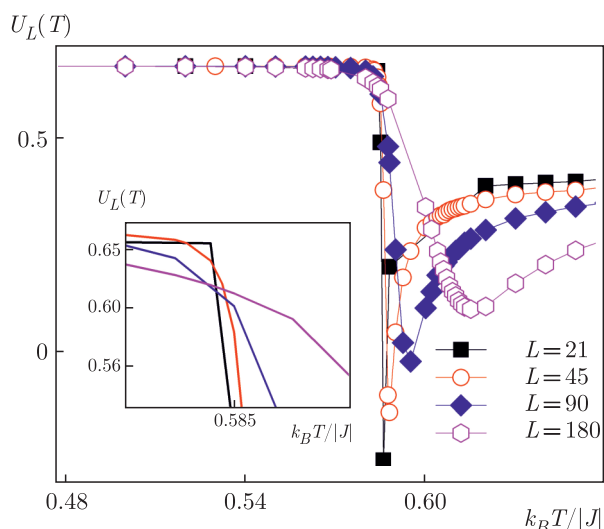


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке

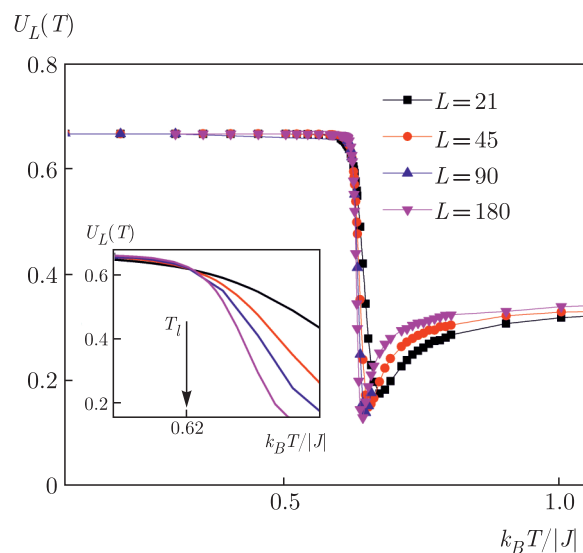


Рис. 8. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* \neq 2/3$, что и продемонстрировано на рис. 5 (см. вставку) для модели Поттса с $q = 5$. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ от температуры для систем с разными линейными размерами L приведены на рис. 6. Как видно на рис. 6, кумулянты Биндера не имеют ярко выраженной точки пересечений в области фазового перехода, что является характерным признаком ФП первого рода. В то же время для модели Поттса с $q = 4$ наблюдается противоположная

картина: усредненная величина кумулянта Биндера $V_L(T)$ (см. рис. 7) при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, V^* стремится к $2/3$, что характерно для ФП второго рода, а температурные зависимости $U_L(T)$ в критической области пересекаются в одной точке T_l , что также закономерно для ФП второго рода (см. рис. 8). Как видно на рис. 8, температура ФП $T_l = 0.620$ в единицах J/k_B и достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением $T_l = 1/\ln(5) \approx 0.6213$, полученным по формуле $T_l = 1/\ln(1 + v)$, в которой $v = 4$ согласно полиномиальному выражению $q^2 +$

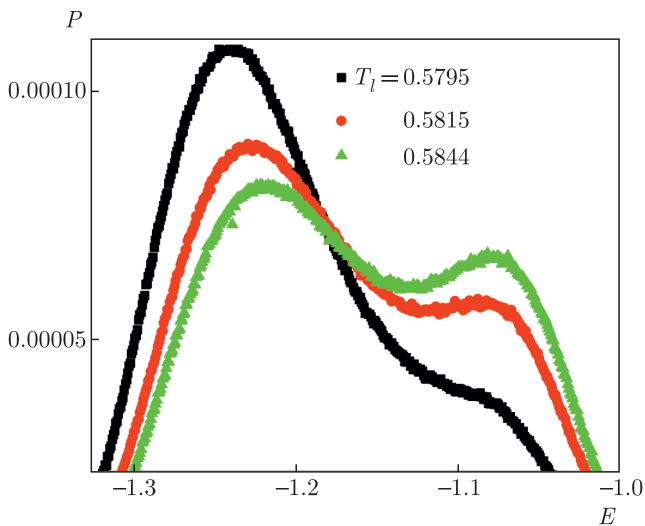


Рис. 9. Гистограмма распределения энергии двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке при $T = T_l$

+ $3qv = v^3$, выведенному из соображений дуальности гексагональной решетки [12].

Отдельно нами проводился гистограммный анализ данных для моделей Поттса с $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. В гистограммном анализе данных вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m_F определяется выражением [24]

$$\overline{P(U, m_F)} = \frac{1}{Z(K)} W(U, m_F) \exp[KU], \quad (9)$$

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

Гистограммный анализ данных, проведенный нами для двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 5$ на гексагональной решетке, также свидетельствует о наличии ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 9 для спиновой системы с линейным размером $L = 120$. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для трех различных значений температуры вблизи T_l . Как видно на рисунке, на зависимости вероятности P от энергии системы U наблюдаются два хорошо выраженных максимума для всех рассмотренных значений температур. Наличие бимодальности в распределении энергии является достаточным признаком ФП первого рода. Соответствующий гистограммный анализ данных был проведен и для двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке вблизи

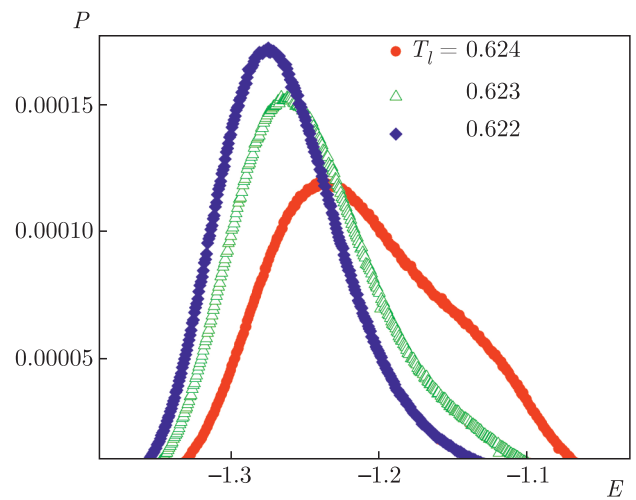


Рис. 10. Гистограмма распределения энергии для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке при $T = T_l$

точки фазового перехода T_l , но бимодальность в гистограмме распределения энергии для этой модели обнаружить не удалось. В этом случае в зависимости вероятности P от энергии системы U с достаточно большим линейным размером L для трех различных значений температуры вблизи T_l наблюдается один хорошо выраженный максимум (см. рис. 10), что характерно для ФП второго рода.

Таким образом, наши данные, полученные на основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и методом гистограммного анализа данных, свидетельствуют о том, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса с $q = 5$ наблюдается ФП первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [9, 12], в то время как в случае модели Поттса с $q = 4$ — ФП второго рода. Выяснение рода ФП в рассмотренных нами моделях Поттса в зависимости от немагнитного беспорядка — предмет отдельного исследования.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики на основе метода Монте-Карло рассмотрены фазовые переходы в двумерных ферромагнитных моделях Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и $q = 5$ на гексагональной решетке. Полученные данные в результате наших исследований свидетельствуют о том, что в двумерной модели Поттса с $q = 5$ на гексагональной решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [9], а в модели Поттса с $q = 4$ — ФП второго рода.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 19-02-00153.

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Стенли, *Фазовые переходы и критические явления*, Мир, Москва (1973).
2. А. З. Паташинский, В. А. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
3. Вик. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
4. И. К. Камиллов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
5. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
6. R. M. F. Houtappel, Physica **16**, 425 (1950).
7. К. Капô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
8. Г. В. Уймин, Письма в ЖЭТФ **35**, 473 (1982).
9. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
10. R. J. Baxter, J. Phys. C: Solid. State Phys. **6**, L445 (1973).
11. R. J. Baxter, H. N. V. Temperley, and S. E. Ashley, Proc. Roy. Soc. A **358**, 535 (1978).
12. F. Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*, World Scientific, London (2009).
13. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
14. A. B. Babaev and A. K. Murtazaev, Mathematical Models and Computer Simulations **11**, 575 (2019).
15. Р. Бекстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
16. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
17. D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2014).
18. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
19. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **159**, 1041 (2021).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ФТТ **63**, 1644 (2021).
21. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, Mater. Lett. **258**, 126771 (2020).
22. А. К. Муртазаев and А. В. Бабаев, J. Magn. Magn. Mater. **440**, 101 (2017).
23. D. Loison and K. D. Schotte, Euro. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
24. N. A. Alves, B. A. Berg and R. Villanova, Phys. Rev. B **41**, 383 (1990).