

11,05

## Компьютерное моделирование фазовых переходов в низкоразмерных моделях Поттса

© А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, А.Б. Бабаев<sup>1,2</sup>, М.А. Магомедов<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 30 марта 2022 г.

В окончательной редакции 30 марта 2022 г.

Принята к публикации 31 марта 2022 г.

Методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы в двумерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на квадратной и гексагональной решетках. Рассмотрены системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 21 \div 102$ . Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в рассмотренной модели Поттса наблюдается фазовый переход второго рода в соответствии с аналитической теорией. Методом кумулянтов Биндера четвертого порядка определены значения критических точек модели Поттса на различных решетках.

**Ключевые слова:** фазовые переходы, модель Поттса, Монте-Карло, термодинамические параметры, критическая температура.

DOI: 10.21883/FTT.2022.07.52573.325

### 1. Введение

В статистической физике модель Поттса является одной из широко применяемых при описании различных объектов и явлений. Эта модель была предложена в 1952 г. Домбом [1] и до сегодняшнего дня является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений и объектов в физике конденсированных сред.

К настоящему времени известно, что в модели Поттса с числом состояний спина  $q > q_c(D)$ , где  $D$ -размерность системы, наблюдается ФП первого рода, а ФП второго рода в случае  $q < q_c(d)$  [2,3]. Для 2D-модели Поттса величина  $q_c = 4$ , в то время как для 3D-модели  $q_c = 2.45$  [1,3]. Причем для  $q_c(d = 2) = 4$  наблюдается ФП второго рода, а для  $q_c(d = 3) = 2.45$  — слабо выраженный ФП первого рода. Кроме того, для двумерных моделей Поттса с числом состояний спина  $q$  из соображений дуальности квадратной, треугольной и гексагональной решеток были получены простые полиномиальные выражения, позволяющие определить критическую точку [4,5]

$$v = \sqrt{q}, \quad (1)$$

$$v^3 + 3v^2 = q, \quad (2)$$

$$q^2 + 3qv = v^3, \quad (3)$$

где  $v = e^{J/k_B T} - 1$ . Справедливость этих выражений строго была установлена только для ферромагнитных моделей Поттса с  $q \geq 4$  и  $q = 2$  [5].

Отдельный интерес представляет модель Поттса на гексагональной решетке [6] связанный с многообразием ее структурных свойств. В качестве примера веществ обладающей структурой гексагональной решетки можно привести адсорбированные пленки, в частности адсорбированные атомы водорода ( $2 \times 2$ ) —  $2\text{H}/\text{Ni}(111)$  на поверхности никеля  $\text{Ni}(111)$  размещаются в узлах гексагональной решетки [6]. Фазовые переходы в таких адсорбированных структурах описываются классом универсальности двумерной модели Поттса с  $q = 4$ .

Модель Поттса при  $q = 2$  превращается в модель Изинга для которой на гексагональной решетке было получено точное решение более пятидесяти лет тому назад [7]. В то же время при попытках рассчитать критические параметры для модели Поттса аналитические методы сталкиваются с непреодолимыми трудностями, в частности справедливость выражения (3) для этой модели при  $q = 3$  на гексагональной решетке к настоящему моменту не доказана [5]. Представляет большой интерес определить значение критических точек методом Монте-Карло (МК) и сравнить их с теоретическими значениями вытекающие из выражений (1)–(3).

В связи с этим целью настоящей работы является исследование термодинамических свойств модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на гексагональной и квадратной решетках, определение их критических точек и сравнение полученных данных с данными аналитических методов там, где это возможно.

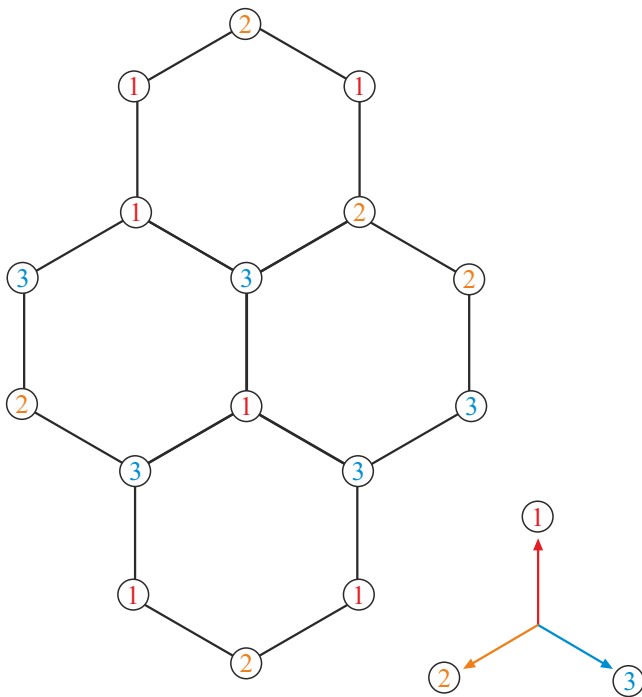


Рис. 1. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на гексагональной решетке.

## 2. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на гексагональной решетке

Ферромагнитная (ФМ) модель Поттса представляет собой естественное обобщение модели Изинга. В модели Изинга имеется  $N$  дискретных объектов, называемых узлами решетки, каждый из которых может находиться в одном из двух состояний. В модели Поттса каждый узел может находиться уже в одном из  $q \geq 2$ -состояний. Поэтому, при построении двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$ , в частности на гексагональной решетке необходимо иметь в виду следующие особенности [1].

1) В узлах гексагональной решётки расположены спины  $S_i$ , которые могут ориентироваться в 3-х симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности  $q - 1$ , так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1). Заметим, что гексагональная решетка представляет собой треугольную решетку, из которой регулярным образом удалена треть узлов.

2) 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 [5]:

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

где

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

При компьютерном моделировании нами использовался кластерный алгоритм Вольфа метода Монте-Карло [8]. При этом на каждом шаге Монте-Карло сначала строится кластер, затем его переворачивают. Более подробно этот алгоритм рассмотрен в работе [9]. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одинаковых состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной  $\tau = 160\tau_0$ . Для самой большой системы  $L = 102$ ,  $\tau_0 = 2 \times 10^8$  МК шагов/спин. Кроме того, для повышения точности расчетов проводилось усреднение по 15-ти различным начальным конфигурациям. Затем эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров.

## 3. Результаты численного эксперимента

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [10]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5)$$

$$\chi = (NK)(\langle m_F^2 \rangle - \langle m_F \rangle^2), \quad (6)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N = 0.75 \cdot L^2$  — число магнитных узлов на гексагональной решетке и  $N = L^2$  — число магнитных узлов на квадратной решетке,  $U$  — внутренняя энергия,  $m_F$  — параметр порядка системы, угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве намагниченности ( $m_F$ ), для ФМ модели Поттса использовалось следующее выражение [11,12]:

$$m_F = \frac{[q(\frac{N_{\max}}{N}) - 1]}{q - 1}, \quad (7)$$

где,  $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3\}$ ,  $N_1$  — число спинов в состоянии с  $q = 1$ ,  $N_2$  — число спинов в состоянии с  $q = 2$ ,  $N_3$  — число спинов в состоянии с  $q = 3$ , угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

На рис. 2 и 3 представлены температурные зависимости для восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  для двумерной ФМ модели Поттса на гексагональной и квадратной решетках для систем с линейными размерами  $L = 120$ . Здесь и далее на всех рисунках

погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, характерные для фазовых переходов. На рис. 4 представлены зависимости намагниченности  $m_F$  от температуры  $T$  для рассмотренной модели Поттса на различных решетках. Как видно из рис. 4 наблюдается монотонное уменьшение величины  $m_F$  с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных „хвостов“.

Для определения критических температур и анализа характера фазового перехода использовался метод куму-

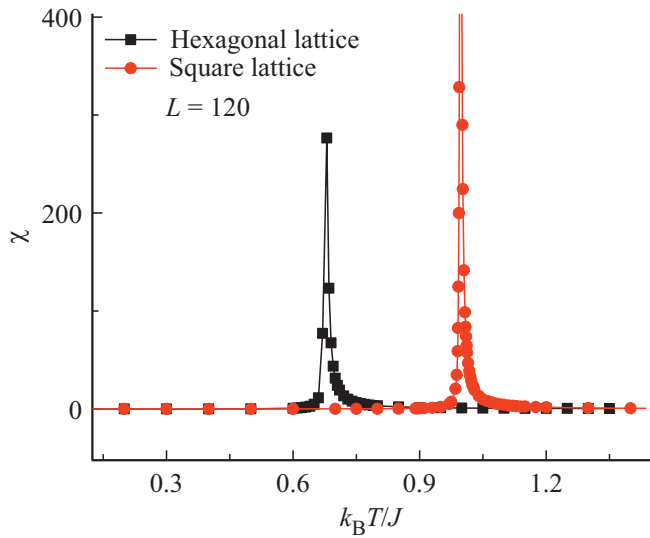


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости  $\chi$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на различных решетках.

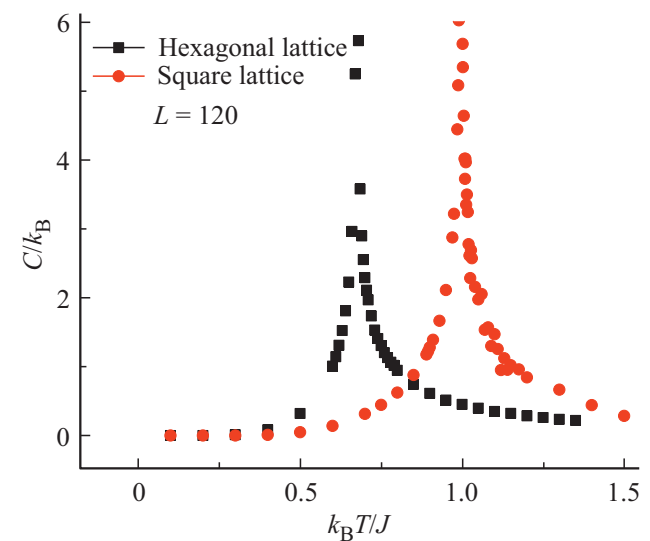


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости  $C$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на различных решетках.

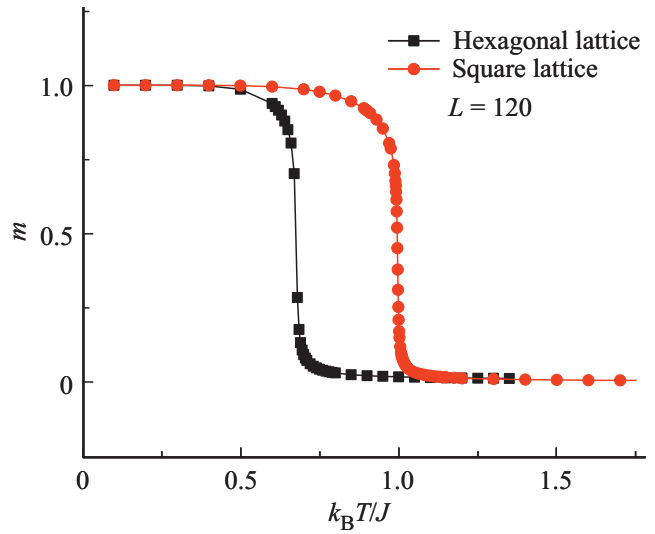


Рис. 4. Температурная зависимость намагниченности  $m_F$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на различных решетках.

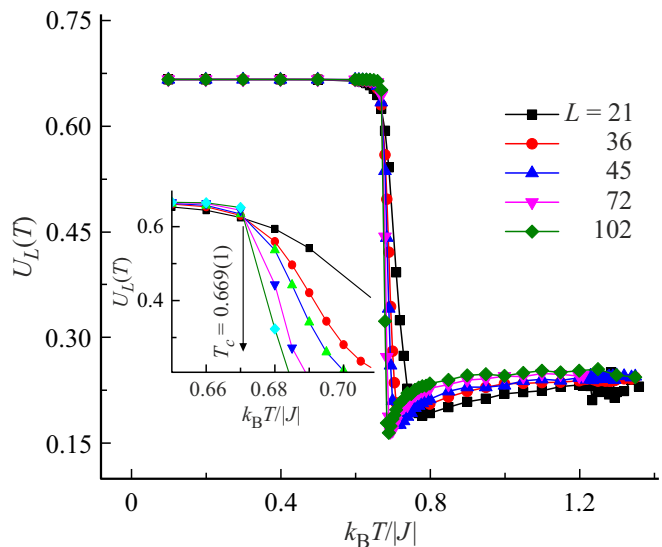


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на гексагональной решетке. На вставке показана точка пересечения кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  соответствующая критической температуре  $T_c$ .

лянтов Биндера четвертого порядка [13]:

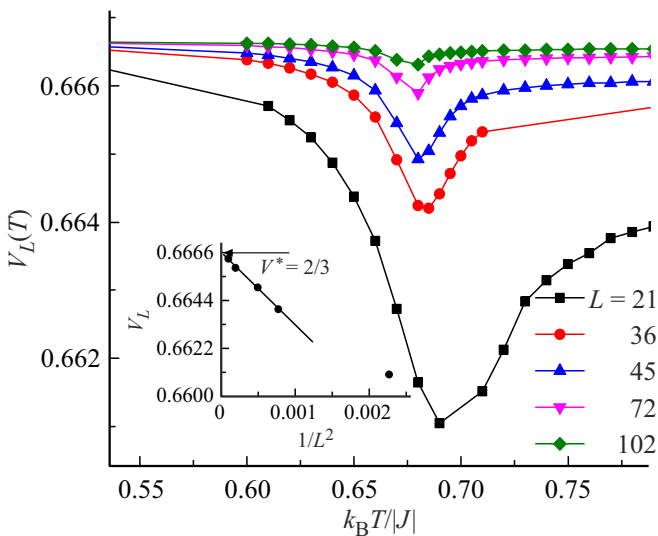
$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \tag{8}$$

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m^4(T, L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, L) \rangle_L^2}, \tag{9}$$

где  $E$  — энергия и  $m$  — параметр порядка системы с линейными размерами  $L$ . Выражения (8) и (9) позволяют с хорошей точностью определить температуру фазового перехода  $T_f$  при фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Методика определения критических точек этим методом приведена в работах [14,15].

Критическая температура 2D ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на различных решетках, определенные методом кумулянтов Биндера четвертого порядка

Модель	Метод			
	Монте-Карло (наши данные)		Классическая гипотеза $W_u$ conjecture[4]	
Обычная модель Поттса с $q = 3$	квадратная	гексагональная	квадратная	гексагональная
		0.994(1)	0.669(1)	$\frac{1}{\ln(1+\sqrt{3})} = 0.9949$



**Рис. 6.** Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T)$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на гексагональной решетке. На вставке показано стремление  $V_L(T)$  к  $2/3$  с увеличением линейного размера системы  $L$  в критической области.

Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род фазового перехода в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для 2D ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$  на гексагональной решетке от температуры для систем с разными линейными размерами  $L$  приведены на рис. 5. Как видно из рис. 5 в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения, что и свидетельствует о ФП второго рода. На рис. 6 представлены температурные зависимости  $V_L(T)$ . Как видно из вставки на этом рисунке в критической области  $V_L(T)$  стремиться к  $2/3$  с увеличением линейного размера системы  $L$ , что также характерно для ФП второго рода. Аналогичное поведение наблюдалось для кумулянтов Биндера четвертого порядка в случае модели Поттса с

$q = 3$  на квадратной решетке. Эта модель нами частично исследована в работе [16].

Определенные методом кумулянтов Биндера значения критических температур  $T_c$  в единицах  $J/k_B$  для двумерной модели Поттса с  $q = 3$  на квадратной, гексагональной решетках и их сравнение с аналитическими значениями из литературы приведены в таблице. Как видно из таблицы вычисленное значение  $T_c$  методом МК на квадратной решетке с большой точностью совпадает со значением, полученным в работе Wu [4,5], чем для гексагональной решетки исходя из предположений дуальности решеток.

## 4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе исследована двумерная модель Поттса с числом состояний спина  $q = 3$ . На основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определены значения критических точек для модели Поттса с  $q = 3$  на квадратной и гексагональной решетках. Показано, что значение критической точки, полученное методом Монте-Карло на квадратной решетке с высокой точностью, совпадает со значением критической точки, полученное из соображения аргумента дуальности [4,5], чем для гексагональной решетки.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

## Список литературы

- [1] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [2] A.J. Guttmann, I.G. Enting. J. Phys. A **27**, 5801 (1994).
- [3] M. Loulidi. Physica A **287**, 177 (2000).
- [4] F.Y. Wu. J. Phys. C **12**, L317 (1979).
- [5] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, London (2009). 641 p.
- [6] L. Schwenger, K. Budde, C. Voges, H. Pfner. Phys. Rev. Lett. **73**, 2, 296 (1994).
- [7] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 351 с.
- [8] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).

- [9] A.B. Babaev, A.K. Murtazaev. *Math. Mod. Comp. Simul.* **11**, 4, 575 (2019).
- [10] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. *Phys.Rev. B* **43**, 6087 (1991).
- [11] Y. Saito. *J. Phys. A* **15**, 1885 (1982).
- [12] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. *J. Surf. Investigation: X-ray, Synchrotron and neutron techniques* **14**, 4, 727 (2020).
- [13] K. Eichhorn, K. Binder. *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
- [14] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Агаева. *ФТТ* **62**, 7, 1088 (2020).
- [15] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. *ФТТ* **62**, 5, 757 (2020).
- [16] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Агаева, М.А. Бабаев. *ФТТ* **64**, 6, 628 (2022).

*Редактор Т.Н. Василевская*