

11,12

Критическая температура трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме

© А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,2}

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский научный центр РАН, Махачкала, Россия

E-mail: b_albert78@mail.ru

Поступила в Редакцию 26 февраля 2019 г.

В окончательной редакции 26 февраля 2019 г.

Принята к публикации 26 февраля 2019 г.

Рассматривается модель Поттса на решетке Кагоме. Методом Монте-Карло получены температурные зависимости термодинамических параметров теплоемкости C , параметра порядка m и восприимчивости χ . Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями. Рассматривались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20-90$. На основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка рассчитана критическая температура (T_c) для трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме. Показано, что полученное значение T_c в пределах статистической ошибки находится в хорошем согласии с результатами полученных методами трансфер-матриц и полиномиального приближения.

Ключевые слова: Модель Поттса, решетка Кагоме, критическая температура, Монте-Карло.

DOI: 10.21883/FTT.2019.07.47848.400

1. Введение

Одной из часто используемых моделей в статистической физике является модель Поттса, которая была предложена в 1952 г. Домббом [1] и является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений и объектов в физике конденсированных сред.

Несмотря на интенсивные теоретические исследования двумерных спиновых решеточных систем, описываемых моделями Поттса, в течение последних пятидесяти лет, к настоящему времени существует совсем немного надежно установленных фактов. Известно, что в чистой модели Поттса с состоянием $q > q_c(D)$, 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 $q_c(d=2) = 4$, в то время как для 3D модели $q_c(d=3) = 2.45$ [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 на квадратной, треугольной и гексагональных решетках были получены простые полиномиальные выражения [4], позволяющие оценить точное значение критической температуры. Справедливость этих выражений строго была доказана для ферромагнитных моделей Поттса с $q \geq 4$ и $q = 2$ [5]. Отдельный интерес представляет модель Поттса на решетке Кагоме [6] связанный с многообразием ее структурных свойств. В качестве примера вещества обладающего структурой решетки Кагоме можно приве-

сти минерал — гербертсмитит с химической формулой $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ [7]. Решетка Кагоме является одной из простых двумерных структур, принадлежащих к Архимедовым решеткам. Для случая $q = 2$ эта модель была решена точно более пятидесяти лет тому назад [8]. В то же время при попытках рассчитать критические параметры для трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме аналитические методы сталкиваются с непреодолимыми трудностями, что привело к разработке классических гипотез, позволяющих приблизительно оценить значение критической температуры, справедливость которых в последнее десятилетие не доказана для случая $q = 3$ [9]. В связи с этим целью настоящей работы является исследование методом Монте-Карло (МК) термодинамических свойств модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на решетке Кагоме, вычисление критической температуры и сравнение полученных данных для этой модели с данными аналитических методов.

2. Двумерная трехвершинная модель Поттса на решетке Кагоме

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 $q = 3$ на

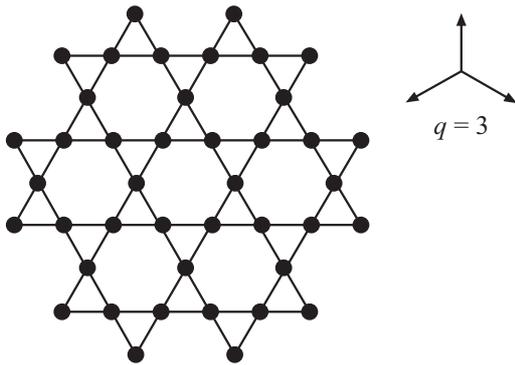


Рис. 1. Двумерная трехвершинная модель Поттса на решетке КагOME.

решетке КагOME необходимо иметь в виду следующие особенности [1]:

1) в узлах решетки КагOME расположены спины S_i , которые могут находиться в одном из $q \geq 2$ состояний (см. рис. 1). Заметим, что решетка КагOME представляет собой треугольную решетку, из которой регулярным образом удалена четверть узлов;

2) энергия парного взаимодействия принимает одно значение, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (безразлично в каких именно), и другое значение, если они находятся в разных состояниях (опять же, все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [1]:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j}, \quad (1)$$

где J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ($J > 0$) между ближайшими соседями, $\theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$, причем $\theta_{i,j} = \frac{2\pi n}{q}$, $n = 0, 1, 2, \dots, q-1$ и при $q = 3$ принимает три значения 0° , 120° и 240° . Модель Поттса с гамильтонианом вида (1) также хорошо описывает физические свойства многих упорядоченных и неупорядоченных структур (см. [10–13]).

При компьютерном моделировании нами использовался кластерный алгоритм Вольфа метода МК. При этом на каждом МК шаге сначала строится кластер, затем его переворачивают. Более подробно этот алгоритм рассмотрен в работе [15]. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одинаковых состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 190\tau_0$. Для самой большой системы $L = 90$, $\tau_0 = 2 \cdot 10^8$ МК step/spin. 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 [16]:

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

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

где $K = |J|/k_B T$, $N = 0.75L^2$ — число магнитных узлов, 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 [17,18]

$$m_F = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{N_\alpha}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \quad (4)$$

где $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3\}$, 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 $q = 3$.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости для восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры T для двумерной трехвершинной ФМ модели Поттса на решетке КагOME для систем с линейными размерами $L = 10-90$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимости восприимчивости χ и теплоемкости C от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходят на одну температуру.

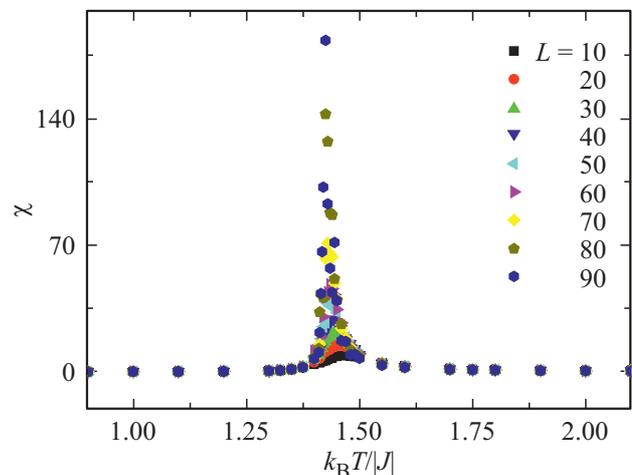


Рис. 2. Температурная зависимость восприимчивости χ для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке КагOME.

Критическая температура двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме

Модель	Метод			
	Монте-Карло (наши данные)	Низкотемпературное разложение [20]	Трансфер-матриц [9]	Классическая гипотеза (Wu conjecture) [4]
Вершинная	1.4186	1.41909	1.41975	0.6912
Обычная	—	0.94606	0.9465	

На рис. 4 представлены температурные зависимости намагниченности m_F для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме. Как видно из рис. 4 наблюдается монотонное уменьшение величины m_F с ростом температуры и заметное уменьшение высокотемпературных „хвостов“ при увеличении линейного размера L .

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

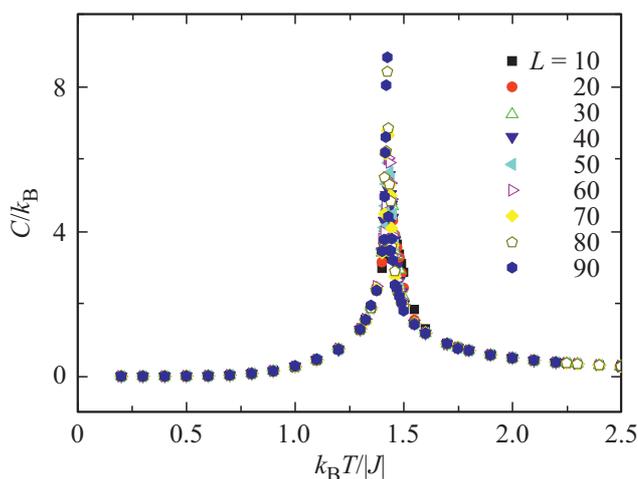


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости C для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме.

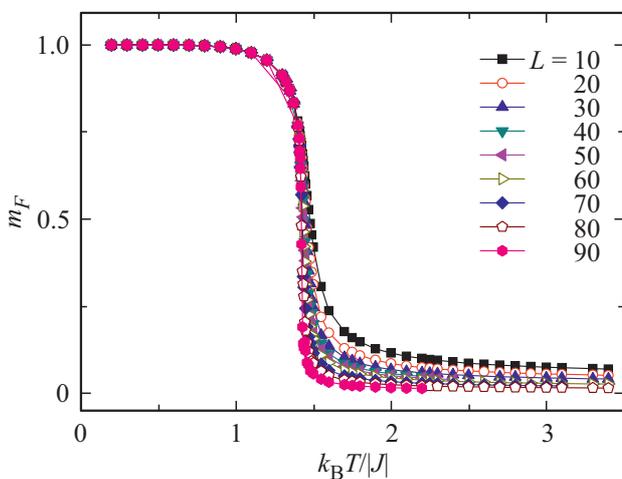


Рис. 4. Температурная зависимость намагниченности m_F для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме.

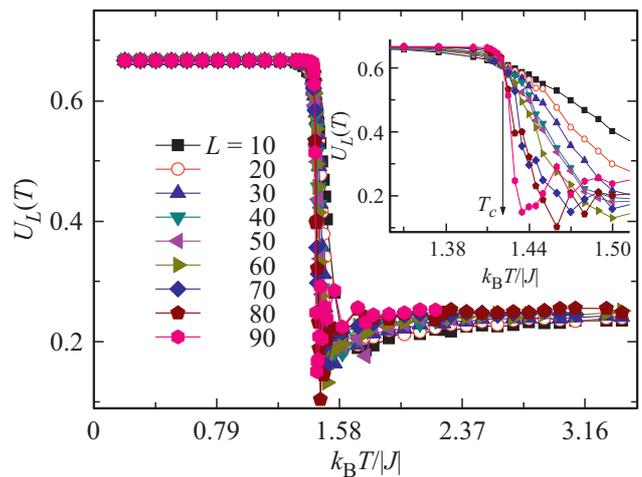


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме. На вставке показана точка пересечения кумулянтов Биндера $U_L(T)$, соответствующая критической температуре T_c .

лянтов Биндера четвертого порядка [19]:

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

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

где E — энергия и m — параметр порядка системы с линейными размерами L . Выражения (5) и (6) позволяют с хорошей точностью определить температуру фазового перехода T_f при фазовых переходах первого и второго рода соответственно.

Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип 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 трехвершинной ферромагнитной модели Поттса на решетке Кагоме 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. Кроме того, этот рисунок демонстрирует насколько точно можно определить критическую

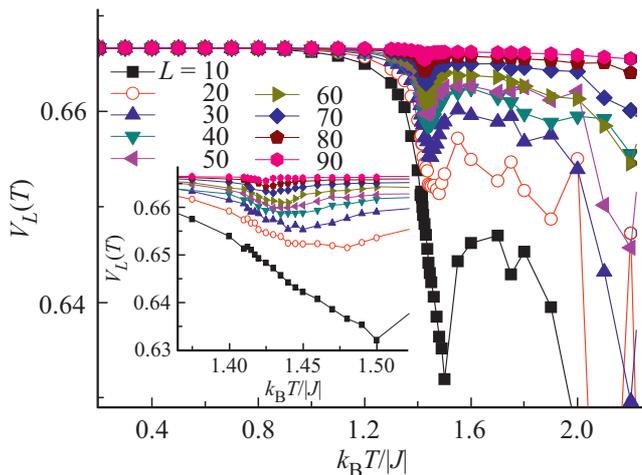


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме. На вставке показано стремление $V_L(T)$ к $2/3$ с увеличением линейного размера системы L в критической области.

температуру T_c . На рис. 6 представлены температурные зависимости $V_L(T)$. Как видно из вставки на этом рисунке в критической области $V_L(T)$ не стремится к нетривиальному значению $V_L^*(T)$, а стремится к $2/3$ с увеличением линейного размера системы L , что также характерно для ФП второго рода.

Определенное методом кумулянтов Биндера значение критической температуры T_c в единицах J/k_B для двумерной трехвершинной модели Поттса на решетке Кагоме и ее сравнение с аналитическими значениями из литературы приведены в таблице. Как видно из таблицы вычисленное значение T_c достаточно хорошо согласуется со значением, полученным с применением низкотемпературного разложения [20] и с применением метода трансфер-матриц [9]. В то же время, это значение заметно отличается от T_c , полученное в работе Wu [4], допустив предположение о дуальности решетки Кагоме. При $q = 3$ такое предположение дает некорректное значение, отличающееся как от данных метода трансфер-матриц и низкотемпературного разложения, так и от данных метода Монте-Карло. По-видимому предположение Wu [4] является верным только для случаев $q = 2$ и $q \geq 4$. При $q = 2$ модель Поттса на решетке Кагоме имеет точное решение [21].

4. Заключение

Таким образом, в настоящей работе с соблюдением единой методики, исследована двумерная трехвершинная модель Поттса на решетке Кагоме. На основе метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определена критическая температура T_c для этой модели и показано, что ее значение достаточно хорошо согласуется со значением критической температуры, полученным как на основе метода трансфер матриц, так и с применением метода низкотемпературного разложения.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет 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** (1979).
- [5] J.L. Monroe. Phys. Rev. E **67**, 017103 (2003).
- [6] Q. Chen, S.C. Bae, S. Granick. Nature (London) **469**, 381 (2011).
- [7] M.Ya. Amusia, K.G. Popov, V.R. Shaginyan, V.A. Stepanovich. *Theory of Heavy-Fermion Compounds*. Springer International Publishing, Switzerland (2015).
- [8] Р. Бэкстер. *Точно решаемые модели в статистической механике*. Мир, М. (1985). 351 с.
- [9] S.K. Baek, H. Makela, P. Minnhagen, B.J. Kim. Phys. Rev. E **83**, 061104 (2011).
- [10] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. Физика низких температур **39**, 2, 194 (2013).
- [11] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014) [JETP Lett. **99**, 535 (2014)].
- [12] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **143**, 116 (2013) [JETP **116**, 101 (2013)].
- [13] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **107**, 656 (2018) [JETP Letters **107**, 624 (2018)].
- [14] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
- [15] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **126**, 1377 (2004) [JETP **99**, 1201 (2004)].
- [16] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [17] Y. Saito. J. Phys. A **15**, 1885, (1982).
- [18] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, Э.М. Сулейманов, Т.Р. Ризванова. ФТТ **58**, 10, 2001 (2016).
- [19] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
- [20] H. Feldman, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, Sh. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [21] K. Kanō K., S. Naya. Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).

Редактор Д.В. Жуманов