

Фазовые переходы в двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке

© А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев¹

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

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия

E-mail: b_albert78@mail.ru

Поступила в Редакцию 3 марта 2023 г.

В окончательной редакции 3 марта 2023 г.

Принята к публикации 27 марта 2023 г.

Методом Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов в двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L = 21 \div 336$, при концентрации спинов $p = 1.00, 0.90$. Использование метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммного анализа данных показало, что внесение немагнитных примесей оказывает стабилизирующую роль при реализации фазового перехода второго рода в исследуемой модели Поттса на гексагональной решетке.

Ключевые слова: модель Поттса, метод Монте-Карло, термодинамические параметры, беспорядок.

DOI: 10.21883/FTT.2023.05.55505.29

1. Введение

Большое значение в теоретическом исследовании фазовых переходов (ФП) имеет изучение точно решаемых моделей, которые обладают нетривиальным поведением, претерпевая ФП первого или второго рода, и в то же время позволяют рассчитать точную статистическую сумму. Такие модели обычно редко дают возможность непосредственного сравнения с экспериментом, но очень полезны для понимания физики ФП [1]. К настоящему времени имеются несколько точно решаемых моделей, среди которых — двумерная модель Изинга на квадратной решетке [2]. Модель Поттса при $q = 2$ изоморфна модели Изинга, для которой на гексагональной решетке было получено точное решение более семидесяти лет тому назад [3]. Однако при попытках рассчитать критические параметры для четырехкомпонентной ($q = 4$) модели Поттса на различных решетках аналитические методы сталкиваются с непреодолимыми трудностями. Это привело к разработке некоторых гипотез, позволяющих приблизительно оценить значение критических точек согласно полиномиальным выражениям, справедливость которых не доказана [4,5].

Для моделей Поттса на различных решетках не имеется ни одного точного решения до сегодняшнего дня. 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 щелочных металлов в решетку графита, а также адсорбция инертных газов на ад-

сорбентах типа графита описываются низкоразмерными моделями Поттса на гексагональной решетке [1,4], и их исследование к настоящему времени является актуальным. Таким образом, интерес к моделям Поттса на гексагональной решетке [4,5] связана с многообразием ее структурных свойств. В качестве примера веществ, обладающих структурой гексагональной решетки, можно привести адсорбированные пленки: адсорбированные атомы водорода (2×2) — 2H/Ni(111) на поверхности никеля Ni(111) размещаются в узлах гексагональной решетки [6]. Фазовые переходы в таких адсорбированных структурах описываются классом универсальности двумерных моделей Поттса с $q = 4$ [7]. Кроме того, следует отметить, что на моделях Поттса можно проверить особенности влияния примесей на фазовые переходы и определить их роль при реализации конкретного рода ФП. В соответствии с критерием Харриса [8] в случае двумерных моделей Поттса с $q = 3$ или $q = 4$ примеси должны повлиять и на их критическое поведение, так как для этих моделей в чистом режиме $\alpha = 1/3$ и $\alpha = 2/3$ соответственно. В работе [9] для четырехкомпонентной ($q = 4$) стандартной, а в [10] — для вершинной модели Поттса при концентрации примесей $c = 0.1$ ($c = 1 - p$) на квадратной решетке было показано, что критическое поведение этой модели подвергается незначительному влиянию слабого беспорядка, реализованного в виде немагнитных примесей. В то же время для модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке практически не имеется сведений в литературе о том, как влияет замороженный беспорядок на фазовые переходы, и о его критическом поведении. Не определены значения критических температур и не выявлены особенности влияния

беспорядка на термодинамические параметры, такие как намагниченность m , восприимчивость χ , энергия E , теплоемкость C и кумулянты Биндера U_L и V_L , в зависимости от линейных размеров L исследуемых систем.

В связи с этим основной целью настоящей работы является изучение влияния немагнитных примесей на фазовые переходы и на различные термодинамические параметры в стандартной двумерной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке в зависимости от L .

2. Двумерная слабо разбавленная четырехкомпонентная модель Поттса

Приведем здесь формулировку двумерной стандартной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса, используемую для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. Примеси в рассматриваемой нами модели распределены каноническим способом [11]. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах гексагональной решётки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в 4-х симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве с размерностью $q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1). Немагнитные примеси распределены случайно и фиксированы на различных узлах решетки (quenched disorder).

2. 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, 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 [4]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, \quad (1)$$

где суммирование проводится по всем ближайшим соседям, J — параметр обменного взаимодействия ($J > 0$), P_q — число различных состояний выбранного спина S_i , $\rho_i = 1$, если узел i занят магнитным атомом, и $\rho_i = 0$, если в узле i содержится немагнитная примесь,

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

Концентрация магнитных спинов определяется выражением

$$p = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \rho_i \delta(S_i, q). \quad (2)$$

Тогда значение $p = 1$ соответствует чистой модели Поттса, а $p = 0$ — пустой, чисто примесной решетке.

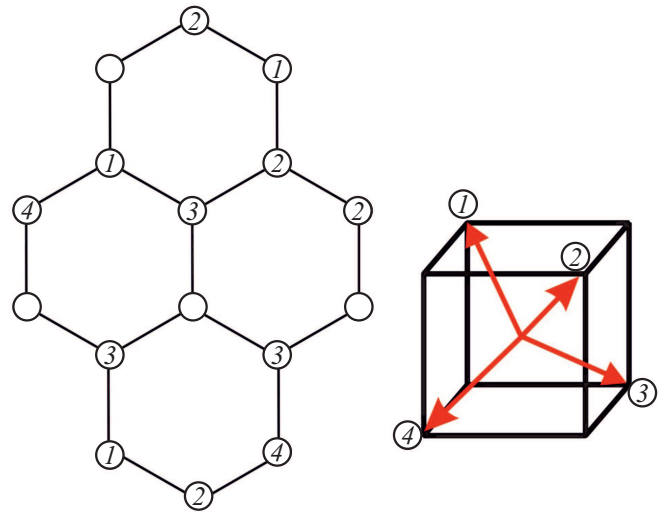


Рис. 1. Двумерная стандартная четырехкомпонентная слабо разбавленная модель Поттса на гексагональной решетке.

3. Методика исследования

Алгоритм Вольфа — один из наиболее эффективных кластерных алгоритмов метода Монте-Карло (МК) на сегодняшний день [12]. Методика его реализации подробно рассмотрена в работах [13,14]. В настоящей работе этот алгоритм был использован нами в следующем виде.

1. Два случайных числа задают координаты i, j узла на гексагональной решетке. Если в этом узле находится немагнитная примесь, то генерируются новые случайные числа, до тех пор, пока не будут сгенерированы координаты магнитного спина S_i .

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i . Если соседний узел занят магнитным спином, то с вероятностью

$$P = 1 - \exp(-K), \quad (3)$$

где $K = J/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана, T — температура, активируется связь между S_i и S_j , если S_i и S_j имеют одинаковые значения при $J > 0$. Заметим, что в случае модели Поттса для выражения вероятности включения спина в кластер (3) показатель 2 в экспоненте, характерный для соответствующей вероятности модели Изинга, исчезает. Таким образом, можно утверждать, что модель Поттса с состоянием спина $q = 2$ эквивалентна модели Изинга с точностью численного фактора 2 в обменной константе J .

3. Если связь между спинами S_i и S_j активируется, то спин в узле j включается в кластер. Следует отметить, что, как и для модели Изинга с примесями, один и тот же спин может быть включен в кластер только один раз, а проверен на включение в кластер несколько раз.

4. После проверки всех ближайших соседей выбранного спина i первый включенный в кластер спин становится „центральной“, и начинается процесс активации

связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут проверены все ближайшие соседи всех вошедших в кластер спинов или достигнута граница системы.

5. Все спины, между которыми установлена связь, образуют „кластер“.

6. Полученный кластер переворачивается с вероятностью, равной 1. Переворот кластера в случае модели Поттса означает присвоение всем спинам, вошедшим в кластер, новое значение спина S'_i , с равной вероятностью среди всех его состояний q , которое отлично от старого значения S_i . Затем переходим к пункту 2.

Об эффективности однокластерного алгоритма Вольфа применительно к модели Поттса можно судить по динамическому критическому индексу z , характеризующему эффективность используемого алгоритма. В частности, исследование чистой двумерной модели Поттса с $q = 4$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа показало, что критический индекс $z = 0.60 \pm 0.02$, тогда как использование классического алгоритма Метрополиса дает значение $z \approx 2$ [15]. По вышеописанному алгоритму Вольфа [12] реализовался марковский процесс для систем с периодическими граничными условиями. Расчеты проводились для систем с линейными размерами $L = 21 \div 336$ и числом спинов $N = 2 \times p \times L \times L/3$. Изначально конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль одной из осей X, Y или Z . Для вывода системы в равновесное состояние отсекался неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейным размером L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 360\tau_0$. Для самой большой системы $L = 336$, $\tau_0 = 2 \cdot 10^3$ МК-шагов/спин. Кроме того, проводилось конфигурационное усреднение по 1000 различным примесным конфигурациям.

4. Результаты моделирования

При численном исследовании фазовых переходов вычислялись термодинамические характеристики U , m , C , χ отдельно взятого образца по следующим формулам [1,16]:

$$U = \frac{1}{N} [\langle H \rangle], \tag{4}$$

$$m = \frac{[q(\frac{N_{\max}}{N}) - 1]}{q - 1}, \tag{5}$$

$$C = (NK^2) [\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2], \tag{6}$$

$$\chi = (NK) [\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2], \tag{7}$$

где $K = J/k_B T$, $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, N_4\}$, N_i — число спинов в состоянии $s = q = i$, $N = (2/3)pL^2$ — число

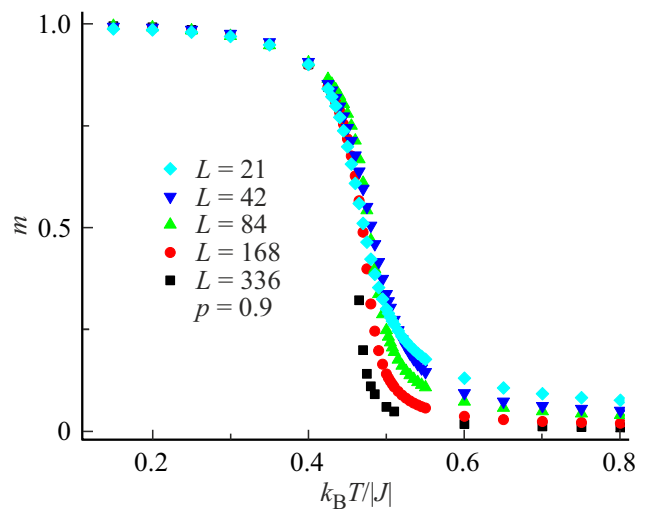


Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности m для слабо разбавленной модели Поттса при концентрации спинов $p = 0.90$ на гексагональной решетке.

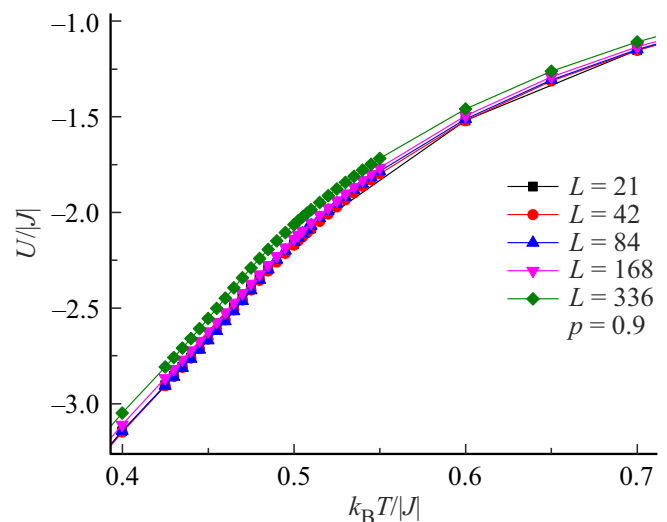


Рис. 3. Температурная зависимость энергии $U/|J|$ для слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса при концентрации спинов $p = 0.90$.

магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, квадратные скобки означают усреднение по примесным конфигурациям.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости намагниченности и энергии для слабо разбавленной ($p = 0.90$) модели Поттса от температуры соответственно. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения графиков. Как видно из этих рисунков, для всех рассмотренных систем наблюдается поведение, характерное для ФП второго рода.

Для анализа характера ФП наиболее эффективным методом зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера

четвертого порядка [17]:

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

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

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (8) и (9) позволяют с большой точностью определить температуру ФП $T_l(p)$ в ФП первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род ФП в рассматриваемой спиновой системе. Фазовые переходы второго рода

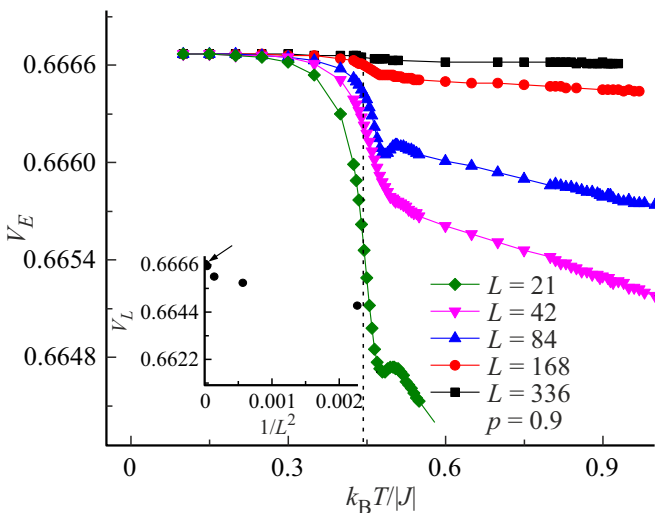


Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса при концентрации спинов $p = 0.90$.

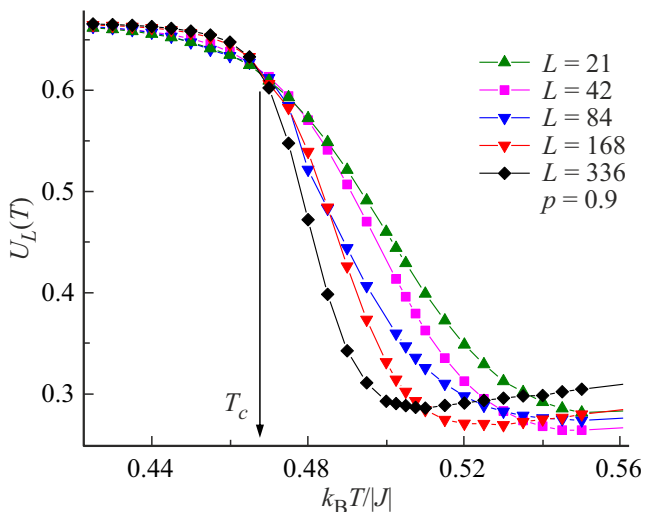


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса при концентрации спинов $p = 0.90$.

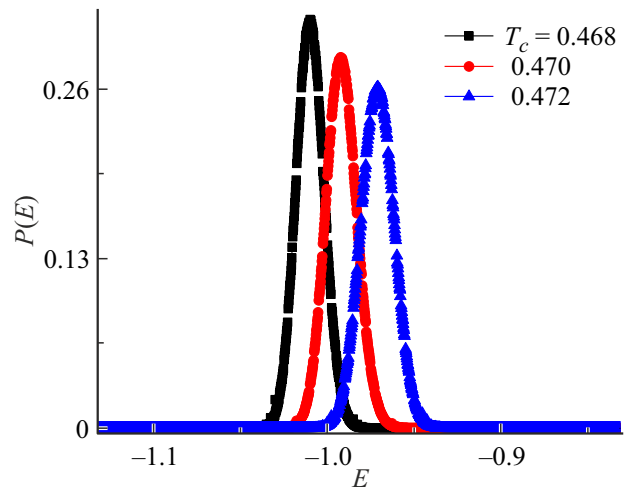


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

характеризуются следующими отличительными особенностями [18]: усредненная величина $V_L(T, p)$ стремится к тривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d} \quad (10)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_l(L)$, где $V^* = 2/3$, а кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ в критической области имеют четко выраженную точку пересечения. Указанные особенности для кумулянтов Биндера четвертого порядка $V_L(T, p)$ и $U_L(T, p)$ продемонстрированы на рис. 4 и 5 соответственно для ферромагнитной слабо разбавленной модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке при концентрации спинов $p = 0.90$. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [9,10].

Гистограммный анализ данных, проведенный для двумерной слабо разбавленной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке при $p = 0.90$, также свидетельствует о наличии ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 6 для спиновой системы с линейным размером $L = 336$. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для спиновых систем при трех различных значениях температуры вблизи критической температуры T_c (температура Кюри). Как видно из рис. 6, на зависимостях вероятности P от энергии системы E для трех различных значений температуры вблизи T_c наблюдается один хорошо выраженный максимум. Такое поведение, как известно, характерно для ФП второго рода.

Анализ данных, полученных с применением кластерного алгоритма метода МК для четырехкомпонентной чистой модели Поттса на квадратной решетке [14] и на гексагональной решетке [19], продемонстрировал ФП второго рода. В то же время исследование этой модели на гексагональной решетке в неразбавленном

режиме прямым методом Ванга–Ландау в [20] выявил ФП первого рода. Впоследствии с применением модифицированного варианта метода Ванга–Ландау была продемонстрирована [21] ошибочность утверждений, сделанных в [20], и показана важность контроля точности при оценке плотности состояний системы. Применение модифицированного варианта метода Ванга–Ландау позволило авторам [21] прийти к результатам, аналогичным [19,22], полученным на основе применения кластерных алгоритмов метода МК.

Таким образом, внесение беспорядка в виде немагнитных примесей в спиновую решеточную систему, описываемую четырехкомпонентной моделью Поттса на гексагональной решетке, приводит к стабилизации ФП второго рода. При этом большой интерес представляет исследование критического поведения неупорядоченной модели на гексагональной решетке, что будет являться предметом отдельного рассмотрения.

5. Заключение

В настоящей работе на основе кластерного алгоритма метода Монте-Карло исследованы фазовые переходы в двумерной четырехкомпонентной ферромагнитной модели Поттса в слабо разбавленном режиме на гексагональной решетке. Полученные данные в результате наших исследований с применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммного анализа данных свидетельствуют о том, что в рассматриваемой слабо неупорядоченной четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке наблюдается ФП второго рода, как и в чистой модели Поттса с $q = 4$ [10,17]. Внесение немагнитных примесей в рассматриваемую модель Поттса приводит к стабилизации ФП второго рода.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). 488 с.
- [2] L. Onsager. Phys. Rev. **65**, 3–4, 117 (1944).
- [3] R.M.F. Houtappel. Physica **16**, 5, 425 (1950).
- [4] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 1, 235 (1982).
- [5] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, London (2009).
- [6] L. Schwenger, K. Budde, C. Voges, H. Pfür. Phys. Rev. Lett. **73**, 2, 296 (1994).
- [7] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfür. Phys. Rev. B **52**, 13, 9275 (1995).
- [8] A.V. Harris. J. Phys. C **7**, 9, 1671 (1974).
- [9] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. ФТТ **62**, 5, 757 (2020). [A.V. Babaev, A.K. Murtazaev. Phys. Solid State **62**, 5, 851 (2020).]
- [10] A.V. Babaev, A.K. Murtazaev. J. Phys.: Conf. Ser. **1389**, 1, 01210 (2019).
- [11] Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский. УФН **173**, 2, 175 (2003). [R. Folk, Yu. Holovatch, T. Yavorskii. Phys. Usp. **46**, 2, 169 (2003).]
- [12] U. Wolff. Phys. Rev. Lett. **62**, 4, 361 (1989).
- [13] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Бабаев. ФТТ **64**, 6, 639 (2022). [A.K. Murtazaev, A.V. Babaev, G.Ya. Ataeva. Phys. Solid State **64**, 5, 264 (2022).]
- [14] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **162**, 3, 398 (2022). [A.K. Murtazaev, A.V. Babaev, G.Ya. Ataeva, M.A. Madomedov. JETP **135**, 3, 347 (2022).]
- [15] G.T. Barkema, M.E.J. Newman. <https://doi.org/10.48550/arXiv.cond-mat/9703179>
- [16] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 7, 6087 (1991).
- [17] D.P. Landau, K. Binder. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press (2014).
- [18] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 3, 735 (1998).
- [19] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **161**, 6, 847 (2022). [A.K. Murtazaev, A.V. Babaev. JETP **134**, 6, 720 (2022).]
- [20] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазгаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 3, 502 (2019). [A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Mazagaeva, M.A. Magomedov. JETP **129**, 3, 421 (2019).]
- [21] М.А. Фадеева, Л.Н. Шчур. ЖЭТФ **162**, 6, 909 (2022). [M.A. Fadeeva, L.N. Shchur. JETP **135**, 6, 869 (2022).]
- [22] J.S. Salas, A.D. Sokal. J. Statistic. Phys. **88**, 3–4, 567 (1996).

Редактор Е.В. Толстякова