

11,05

Критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке

© Г.Я. Атаева, А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев

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

E-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в Редакцию 8 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 14 апреля 2024 г.

Принята к публикации 16 апреля 2024 г.

С применением метода Монте-Карло проведено исследование критического поведения трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10 \div 320$. На основе теории конечно-размерного скейлинга, рассчитаны статические критические индексы: теплоемкости α , восприимчивости χ , намагниченности β и критический индекс радиуса корреляции ν . Обнаружено, что полученные критические индексы для трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке достаточно хорошо совпадают с данными для модели жестких гексагонов, к которой может быть сведена двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 3$.

Ключевые слова: модель Поттса, критические индексы, гипотеза скейлинга, метод Монте-Карло, термодинамические параметры.

DOI: 10.61011/FTT.2024.05.58085.82

1. Введение

Критические явления, связанные с фазовыми переходами второго рода, подразделяются на ограниченное число классов универсальности в зависимости от специфических параметров материала, фундаментальной симметрии системы, ее пространственной размерности и числа компонент параметра порядка [1,2]. Идеи заложенные в гипотезе скейлинга и универсальности являются фундаментальными для понимания фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в различных системах. Теоретические и экспериментальные методы исследования сталкиваются с рядом проблем при вычислении критических параметров, определении особенностей, характера и механизмов критического поведения для сложных систем [3,4]. Это и ряд других причин привели к тому, что ФП и КЯ в таких системах предпочтительнее исследовать методами Монте-Карло (МК), этому способствуют и серьезно возросшие вычислительные возможности современных компьютеров, и множество новейших алгоритмов.

Одной из моделей, применяемых для описания реальных физических систем, является модель Поттса. Очевидно, что решеточная структура данной модели изоморфна многим системам таким как: сложные магнетики, сегнетоэлектрики, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси, а так же адсорбция благородных газов на адсорбентах типа графита. Модель Поттса проста, но не тривиальна в содержании и полностью отвечает основополагающему требованию, позволяющему изучать фазовые переходы и мультикритические явления [5]. Несмотря на интенсивные теоретические исследования спиновых решеточных систем описываемых различными

моделями Поттса, в течение последних тридцати лет, к настоящему времени эта модель для $q > 2$ непосредственно не решена на различных двумерных и трехмерных решетках. Изучение магнитных и критических свойств этих моделей имеет важное фундаментальное и прикладное значение. С одной стороны это связано с тем, что рассматриваемая модель имеет широкое прикладное значение. Из результатов теоретических исследований [6] следует, что в модели Поттса при $q > 4$ ФП будет первого рода, и ФП второго рода при $q \leq 4$. Эти результаты ничего не говорят о критических индексах при $q \leq 4$, так как эта модель не решена точно для произвольной температуры. В то же время эту модель с $q = 3$ и $q = 4$ можно свести к другим моделям, критическое поведение которых хорошо изучено. В связи с этим, основной целью настоящей работы является непосредственное исследование критического поведения трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке с применением кластерного алгоритма Вольфа метода МК [7], и провести сравнение полученных критических данных с имеющимися литературными данными.

2. Трехкомпонентная модель Поттса на квадратной решетке и методика исследования

Приведем формулировку трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке.

При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах квадратной решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в трех симметричных

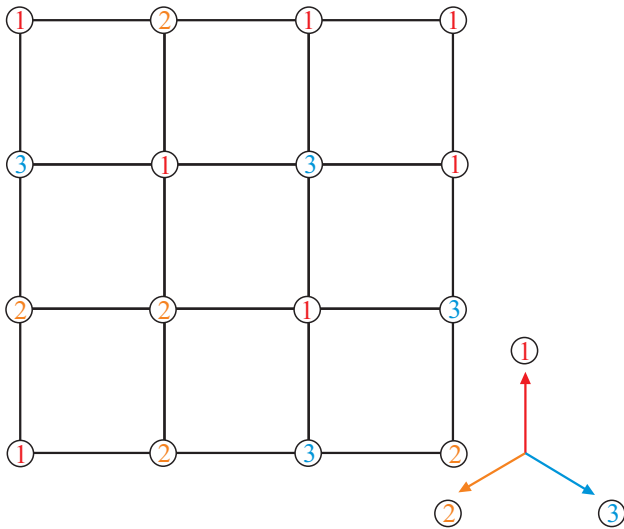


Рис. 1. Стандартная трехкомпонентная модель Поттса на квадратной решетке.

направлениях гипертетраэдра в пространстве с размерностью $d = q - 1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (см. рис. 1).

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 (не имеет значения в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть, представлен в виде [8]:

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

где J — параметр обменного ферромагнитного ($J > 0$) взаимодействия, P_i — обозначение состояний узла с номером i ,

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

Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 10 \div 320$. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в одинаковом состоянии. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялась время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$. Для самой большой системы $L = 320$, $\tau_0 = 1.8 \cdot 10^4$ МК шагов/спин. Кроме того, для повышения точности расчетов проводилось усреднение по 10 различным начальным конфигурациям.

Фазовые переходы в трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке в различных режимах разбавления были тщательно исследованы в работе [9].

В этой работе [9] с хорошей точностью с применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка была определена критическая температура T_c . Следует отметить, что температура ФП $T_c = 0.994(1)$ полученная для рассматриваемой модели Поттса достаточно хорошо согласуется с аналитическим значением, полученным Поттсом [10] по формуле

$$\frac{k_B T_c}{|J|} = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{3})} = 0.99497 \dots$$

3. Результаты моделирования

В рассматриваемой работе на основе теории конечно-размерного скейлинга [11] рассчитывались статические критические индексы (КИ): теплоемкости α , восприимчивости γ , намагнитченности β и критический индекс ν радиуса корреляции. Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре T близкой к критической температуре T_c бесконечно большой системы, может быть представлена в виде [11]:

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (2)$$

где $t = |T - T_c|/T_c$, $T_c = T_c(L = \infty)$ и ν — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$).

Уравнение (2) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагнитченности, приходящихся на один спин

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (3)$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (4)$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (5)$$

где α , γ , β — статические критические индексы для системы с $L = \infty$, связанные соотношением гиперскейлинга $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [12,13].

Кроме того, на основе теории конечно-размерного скейлинга предложен целый ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции ν [14]. В соответствии с этой теорией в точке фазового перехода выполняется соотношение

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (6)$$

где g_{V_n} — некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i = 1, 2), \quad (7)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[\langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} + \langle m^4 E \rangle \right], \quad (8)$$

где $\beta = 1/T$, T — температура.

Из соотношений (4)–(5) следует, что в системе с размерами $L \times L$ при $T = T_c$ и достаточно больших L восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим аналитическим выражениям

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{9}$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}. \tag{10}$$

Эти соотношения использовались нами для определения величин γ и β . Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работах [14,15]. Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L как правило используются другие выражения, например [16]:

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

где A — некоторый коэффициент.

Для расчета КИ α , β , γ и ν строились зависимости C , m , χ , и V_n от L при $T = T_c$. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения α/ν , β/ν , γ/ν и $1/\nu$. Затем, с использованием усредненного значения ν при $n = 1, 2$ и 3 , полученных в рамках данного исследования, определялись индексы α , β и γ .

На рис. 2–5 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости восприимчивости, намагниченности, теплоемкости и параметра V_n для определения критического индекса радиуса корреляции ν от линейных размеров решетки L для трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке. Обратим внимание на то, что все полученные данные не отклоняются от прямой, даже при малых значениях L . Очевидно, что использованное нами для усреднения количество различных начальных конфигураций и размеры $L \geq 10$ изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима.

Очень важным моментом является и то, что индекс ν вычислялся непосредственно из результатов численного эксперимента в рамках данного исследования, тогда как во многих других работах этот индекс определялся из различных скейлинговых соотношений.

Значения критических индексов, полученные в результате наших исследований, представлены в таблице. Как видно из таблицы полученные численные значения КИ для намагниченности β , восприимчивости γ и критического индекса радиуса корреляции ν достаточно хорошо совпадают с теоретическими значениями, полученными в работах [6,17] исходя из соображений в пользу того, что модель Поттса с $q = 3$ и модель жестких гексагонов должны относиться к одному классу универсальности. Следует отметить, что для определения КИ α использовалось выражение (11). Кроме того, в таблице приведены значения КИ, полученные в работе [18] для модели Поттса с $q = 3$ на гексагональной решетке.

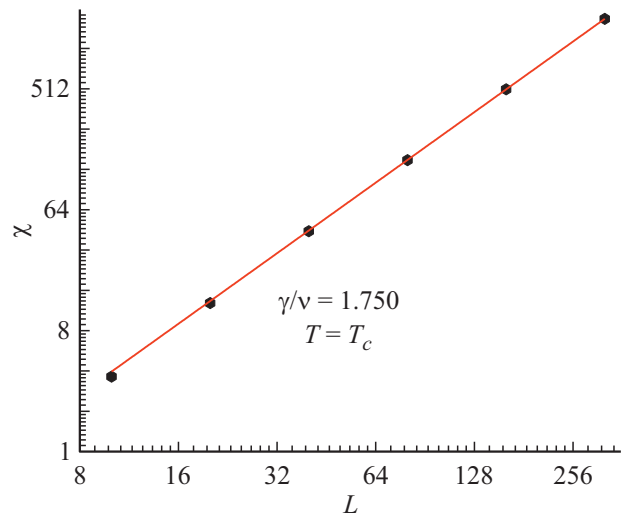


Рис. 2. Характерная зависимость восприимчивости χ от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

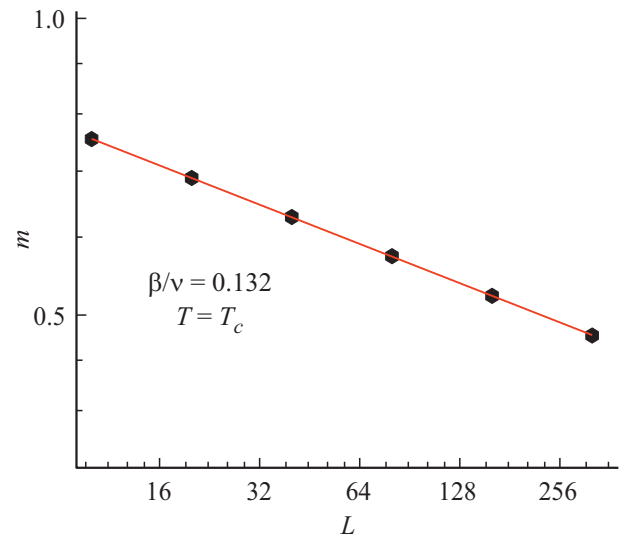


Рис. 3. Характерная зависимость намагниченности m от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

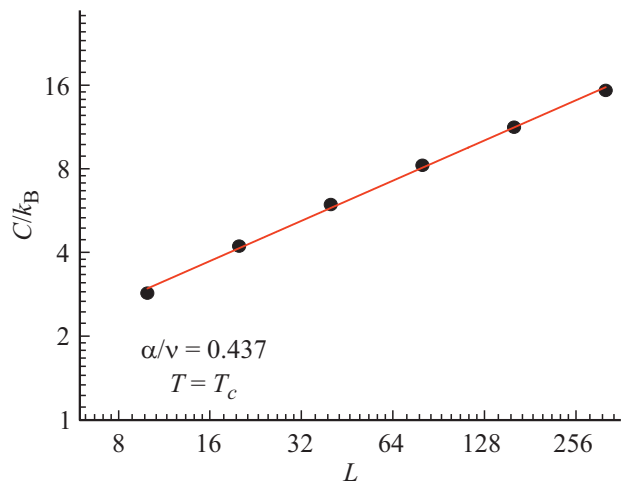


Рис. 4. Характерная зависимость теплоемкости C от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

Значения критических индексов

Метод	$k_B T_c / J$	ν	α	γ	β	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Теория [6,17]		5/6	1/3	13/9	1/9	2.00
		0.833	0.333	1.444	0.111	
Квадратная решетка (наши данные)	0.994(2)	0.82(1)	0.36	1.44	0.10	2.00
Гексагональная решетка, МК метод [18]	0.621(2)	0.84	0.33	1.44	0.11	1.99

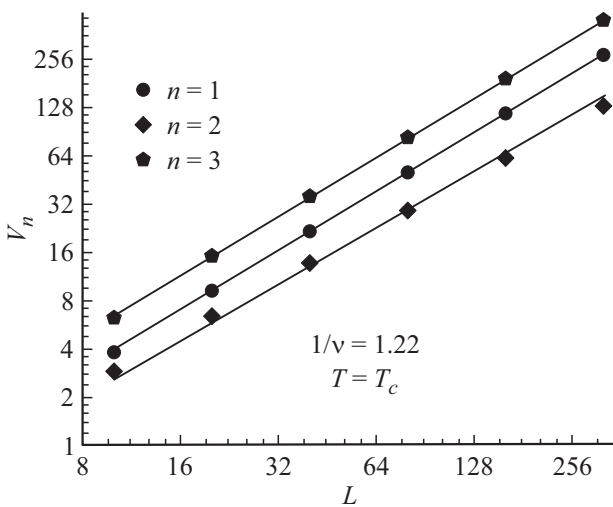


Рис. 5. Характерная зависимость V_n от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

Как видно из этой таблицы КИ для трехкомпонентной модели Поттса на различных двумерных решетках описываются одним классом универсальности характерной для двумерной модели Поттса с $q = 3$.

4. Заключение

В настоящей работе с соблюдением единой методики исследовано критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке. С применением теории конечно-размерного скейлинга определен основной набор критических индексов для рассматриваемой модели Поттса. Анализ полученных значений КИ для трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке выявил, что критические индексы для данной модели находятся в хорошем соответствии с данными, для модели жестких гексагонов [17], к которой может быть сведена двумерная модель Поттса с $q = 3$ и с данными полученными на гексагональной решетке [18,19]. Показано, что критическое поведение трехкомпонентной модели Поттса на квадратной решетке описывается классом универсальности характерным для двумерной модели Поттса с $q = 3$.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Л.Н. Шур. УФН **182**, 7, 787 (2012).
- [2] O. Vasilyev, B. Berche, M. Dudka, Yu. Holovatch. Phys. Rev. E **92**, 042118 (2015).
- [3] В.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [4] И.К. Камиллов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
- [5] А.Н. Ермилов. Физика элементарных частиц и атомного ядра **20**, 6, 1379 (1989).
- [6] Р. Бекстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985).
- [7] U. Wolff. Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
- [8] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [9] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева, М.А. Бабаев. ФТТ **64**, 6, 639 (2022).
- [10] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey In Statistical Mechanics. World Scientific (2009).
- [11] M.E. Fisher, M.N. Barber. Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
- [12] Ш. Ма. Современная теория критических явлений. Мир, М. (1980).
- [13] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
- [14] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [15] А.К. Муртазаев, И.К. Камиллов, А.К. Магомедов. ЖЭТФ **120**, 6 (12), 1535 (2001).
- [16] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [17] S. Alexander. Phys. Lett. A **54**, 353 (1975).
- [18] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев. ФММ **124**, 7, 577 (2023).
- [19] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов. Физматлит, М. (2023).

Редактор Т.Н. Василевская