

10,11,05

Фазовые переходы и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке

© А.К. Муртазаев, Д.Р. Курбанова[✉], М.К. Рамазанов

Институт физики Дагестанского научного центра РАН,
Махачкала, Россия

[✉] E-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

Поступила в Редакцию 18 июня 2019 г.

В окончательной редакции 18 июня 2019 г.

Принята к публикации 18 июня 2019 г.

На основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке. Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный анализ данных проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

Ключевые слова: фазовые переходы, критические явления, модель Поттса, метод Монте-Карло.

DOI: 10.21883/FTT.2019.11.48428.520

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств магнетиков, описываемых двумерными решеточными моделями Изинга и Поттса имеет большой научный интерес, поскольку открывает широкие перспективы для практического применения [1–3]. Низкоразмерные решеточные модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1,4,5].

В настоящее время двумерная модель Изинга изучена достаточно хорошо и известны практически все ее свойства [6–10]. Для двумерной модели Поттса с различным числом состояний спина q существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [11–14]. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ до сих пор малоизучена. Данная модель интересна тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q > 4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [15]. Согласно результатам работ [11–13], для модели Поттса с числом состояний спина $q = 2, 3$ и 4 наблюдается ФП второго рода. Однако, при $q = 4$ в рассматриваемой модели были обнаружены особенности термодинамического поведения. В связи с этим, в данной работе, нами предпринята попытка на основе метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП и термодинамических свойств двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности

изменения термодинамического поведения данной модели и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследование двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП и термодинамическими свойствами низкоразмерных решеточных систем.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний $q = 4$ может быть представлен в следующем виде:

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

где J — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия для ближайших соседей, $\theta_{i,j}$ — угол между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [6,7,16,17]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [14,18,19], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Алгоритм Ванга–Ландау основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем

равномерное распределение по энергиям. Подобрал вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$, зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$.

Алгоритм Ванга-Ландау был использован нами в следующем виде.

Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний $g(E) = 1$, гистограммы распределений по энергиям $H(E) = 0$, стартовый модификационный фактор $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$. Многократно совершаем шаги в фазовом пространстве, пока не получим относительно плоскую гистограмму $H(E)$ (т.е. пока не будут посещены примерно одинаковое количество раз все возможные энергетические состояния системы). При этом вероятность перехода из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 определяется по формуле $p = g(E_1)/g(E_2)$. Если переход в состояние с энергией E_2 состоялся, то $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$, $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$, иначе $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$. Если гистограмма стала „плоской“ то обнуляем гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$, и продолжаем снова, пока $f \geq f_{\min}$. В нашем случае $f_{\min} = 1.0000000001$. Более подробно алгоритм Ванга-Ландау изложен в работах [18,19]. Таким образом, определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E f(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (2)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (3)$$

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

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (5)$$

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), U — внутренняя энергия (U является нормированной величиной).

Для анализа характера ФП нами был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный анализ данных метода МК [20,21].

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 - 120$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки.

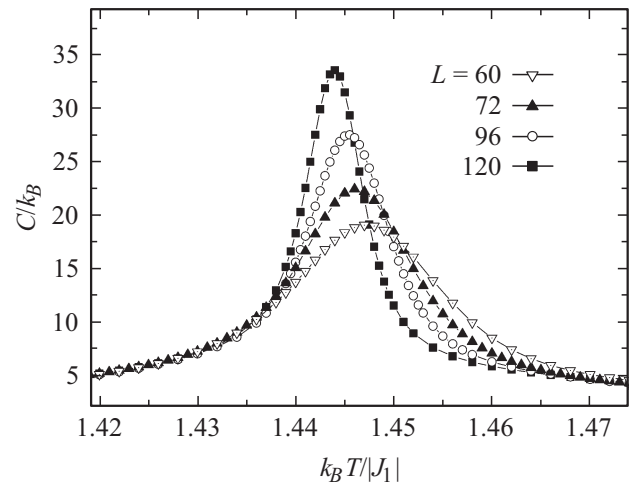


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B .

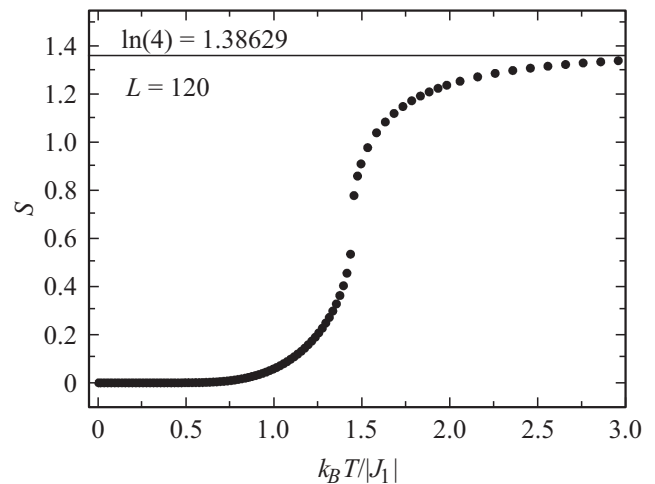


Рис. 2. Температурная зависимость энтропии S .

3. Результаты моделирования

На рис. 1 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с линейными размерами $L = 60; 72; 96; 120$ (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для построения зависимостей). Отметим, что в зависимости теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления ПГУ, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами параметров.

Температурная зависимость энтропии S для системы с $L = 120$ приведена на рис. 2. На рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия системы стремится

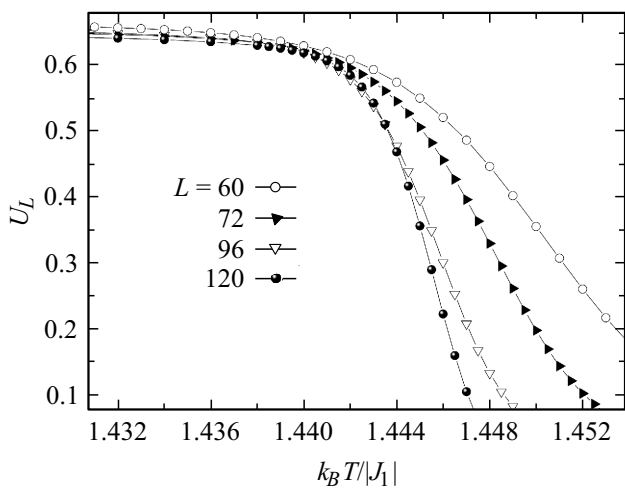


Рис. 3. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера U_L .

к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия системы стремится к нулю. Аналогичные зависимости наблюдаются для всех рассмотренных значений L . Такое поведение энтропии позволяет говорить о том, что в данной модели вырождение основного состояния отсутствует.

Для анализа характера ФП, особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки и определения критической температуры T_C наиболее эффективным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [21]:

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

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

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (6) и (7) позволяют определить критическую температуру T_T с большой точностью для ФП первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что ФП первого рода характеризуются тем, что величина V_L стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

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

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_C(L)$, где величина V^* отлична от $2/3$, а минимальная величина $U_{L \min}(T = T_{\min})$ расходится $U_{L \min}(T = T_{\min}) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$.

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [21].

На рис. 3 представлена характерная зависимость U_L от температуры для разных значений L . Из графика видно, что в критической области отсутствует четко выраженная точка пересечения, что свидетельствует в пользу наличия в системе ФП первого рода.

Температурная зависимость энергетического кумулянта V_L для разных значений L представлена на рис. 4. Как видно из графика величина V_L стремится к $2/3$, а величина $V^* = 2/3$, что характерно для ФП второго рода. Эта величина рассчитана используя выражение (8). Из рис. 4 видно, что для исследуемой модели $V^* = 0.6660(1)$.

Поэтому, для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [22,23].

Результаты нашей работы, полученные на основе гистограммного анализа, показывают, что ФП в данной модели является переходом первого рода. Это проде-

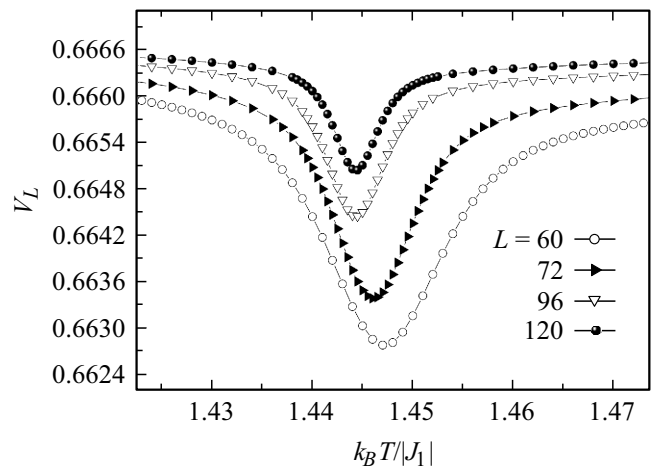


Рис. 4. Температурные зависимости энергетического кумулянта Биндера V_L .

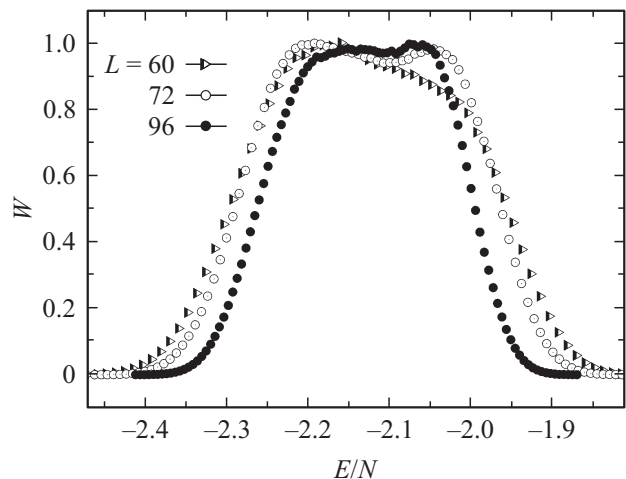


Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для $L = 60, 72$ и 96 .

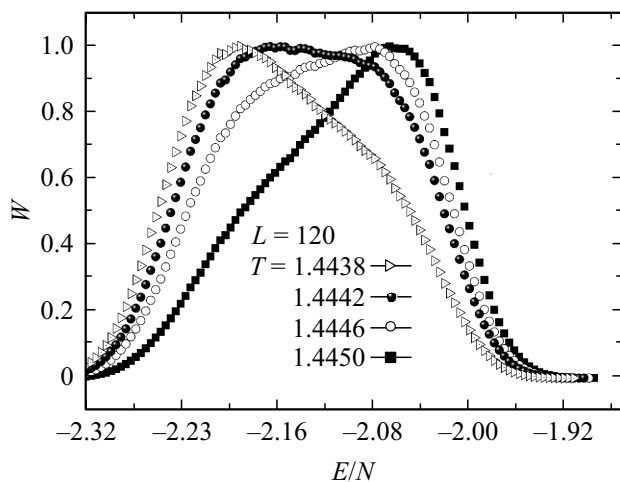


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для $L = 120$ при различных температурах.

монстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 60, 72$ и $L = 96$. Графики построены вблизи критической температуры. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности W от энергии E для всех систем наблюдаются два максимума, которые свидетельствует в пользу ФП первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Отметим, что двойные пики для исследуемой модели наблюдается только для систем с большими линейными размерами ($L > 60$). Кроме того, двойные пики в данной модели наблюдаются вблизи критической области только в очень узком температурном интервале. Это продемонстрировано на рис. 6. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 120$. Графики построены при различных температурах близких критической температуре. Как видно на рисунке, двойные пики наблюдаются в маленьком интервале температур $0.4438 < T < 0.4450$. Ниже и выше указанного интервала один пик исчезает, что усложняет определение типа ФП в таких системах. Такое поведение характерно для систем, в которых происходят ФП первого рода близкие к переходам второго рода.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в системе наблюдается фазовый переход первого рода.

Финансирование

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00391-мол-а

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Н.Т. Дир. Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
- [2] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985).
- [3] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, New Jersey (2008).
- [4] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [5] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
- [6] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
- [7] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. Phys. B: Condens. Matter. **476**, 1 (2015).
- [8] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).
- [9] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
- [10] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев. Phase Transitions **91**, 610 (2018).
- [11] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
- [12] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
- [13] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [14] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов. Physica A **521**, 543 (2019).
- [15] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [16] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
- [17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, Д.Р. Курбанова. ФТТ **60**, 1798 (2018).
- [18] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.А. Магомедов, К.Ш. Муртазаев. Mater. Lett. **236**, 669 (2019).
- [19] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
- [20] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [21] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995). 144 с.
- [22] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).
- [23] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63**, 1195 (1989).

Редактор К.В. Емцев