

11,05

Термодинамическое поведение двумерной часовой модели с числом состояний спина $q = 5$

© А.К. Муртазаев, М.К. Бадиев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов

Институт физики ДФИЦ РАН,
Махачкала, Россия

E-mail: m_zagir@mail.ru

Поступила в Редакцию 4 мая 2023 г.

В окончательной редакции 4 мая 2023 г.

Принята к публикации 3 июня 2023 г.

Методом Монте-Карло проведено исследование термодинамических свойств и фазовых переходов в двумерной ферромагнитной часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 24 \div 120$. На температурной зависимости теплоемкости обнаружены два максимума, которые свидетельствуют о наличии в исследуемой модели двух фазовых переходов типа Березинского–Костерлица–Таулеса.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, фазовые переходы, часовая модель, термодинамические параметры, ферромагнетика.

DOI: 10.21883/FTT.2023.08.56161.78

1. Введение

В последние годы исследование фазовых переходов (ФП), критических и термодинамических свойств в магнитных системах успешно проводится с использованием методов Монте-Карло (МК) [1–3]. Это связано с тем, что эти методы позволяют изучать реалистичные модели, в которых учитываются факторы, присутствующие в реальных материалах. Увеличение вычислительных возможностей современных компьютеров, появление новых алгоритмов, специально разработанных для решения широкого круга задач привело к тому, что метод МК зарекомендовал себя как мощный инструмент для исследования ФП и термодинамических свойств моделей магнитных систем [4–6].

Одной из моделей применяемых для описания реальных физических систем, является часовая модель с числом состояний спина q . Многие физические свойства этой модели зависят от значения q . В случае, когда $q = 2, 3, 4$ эта модель имеет точное решение. Часовая модель сводится к модели Изинга и Z_3 модели Поттса при $q = 2$ и 3 , соответственно. Эта модель при $q = 4$ эквивалентна двум копиям модели Изинга. Установлено, что для этих трех случаев в системе наблюдается ФП второго рода из высокотемпературной парамагнитной фазы в низкотемпературную ферромагнитную упорядоченную фазу. Когда $q \rightarrow \infty$ данная модель сводится к стандартной XY модели. В этом случае спонтанного нарушения симметрии не наблюдается, но происходит ФП из низкотемпературной фазы Березинского–Костерлица–Таулеса (БКТ) в высокотемпературную парамагнитную фазу. Для часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ имеется очень мало точно установленных фактов. К настоящему моменту времени остается открытым вопрос о роде ФП при значении $q = 5$.

Для получения ответа на этот вопрос, в данной работе нами проводится исследование двумерной часовой модели на треугольной решетке с $q = 5$. Исследование этой модели на треугольной решетке в литературе практически не встречается. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка провести исследование ФП и термодинамических свойств этой модели на треугольной решетке.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан для часовой модели с q -состояниями, которая представляет собой дискретизированную спиновую XY модель, можно записать в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (1)$$

где спиновые состояния q в узле i обозначены плоским углом $\theta_i = 2\pi k_i/q$, $k_i = 1, \dots, q$, J — параметр ферромагнитного обменного взаимодействия.

В последние десятилетия часовая модель с q -состоянием широко исследовалась как аналитически [7–13], так и численно [14–25]. Тем не менее, до сих пор неясна природа ФП для малых q , таких как $q = 5$ и 6 . При значении $q = 2$ эта модель сводится к классической модели Изинга со спиновой симметрией вверх-вниз, а в предельном случае, при $q \rightarrow \infty$ — XY модели, где ориентации спинов непрерывны внутри плоскости. В случае двумерной XY — модели ($q \rightarrow \infty$) не существует дальнеупорядоченной фазы при конечных температурах, как утверждает теорема Мермина–Вагнера [26]. Вместо этого система претерпевает БКТ переход бесконечного порядка из парамагнитной фазы в БКТ-фазу.

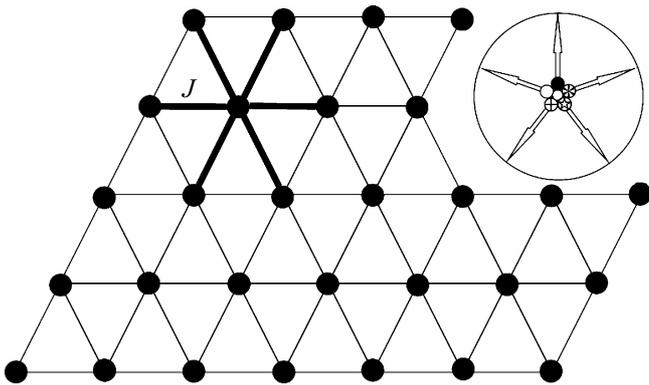


Рис. 1. Схематическое представление часовой модели с $q = 5$.

В данном исследовании нами рассматривается случай с $q = 5$ на треугольной решетке. Схематическое описание этой модели представлено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из 5 состояний спина. Как видно на рисунке, у каждого спина есть шесть ближайших соседа.

Решеточные магнитные системы на основе микроскопических гамилтонианов успешно изучаются на основе метода МК [27–32]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов для исследования подобных систем. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [33], особенно в низкотемпературной области.

Алгоритм Ванга–Ландау является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Данный алгоритм основан на том, что, совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подобрать 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. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , удельную теплоемкость C и энтропию S . Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел используются величиной $\ln g(E)$.

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 24 \div 120$, где L — линейный размер решетки, N — количество спинов в системе.

3. Результаты моделирования

Алгоритм Ванга–Ландау является эффективным методом для расчета плотности состояния энергии. Преимущество алгоритма заключается в том, что плотность

состояний $g(E)$ в системе не зависит от температуры. Зная плотность состояний системы, можно рассчитать температурную зависимость любого интересующего нас термодинамического параметра. На рис. 2 приведены плотности состояний $g(E)$ для разных линейных размеров системы (здесь и далее на графиках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Плотность состояний имеет куполообразную форму. С увеличением линейных размеров системы, плотность состояний $g(E)$ значительно возрастает, что обусловлено вырождением основного состояния.

На рис. 3 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с различными линейными размерами L .

Отметим, что на зависимостях теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые в пределах погрешности приходятся на

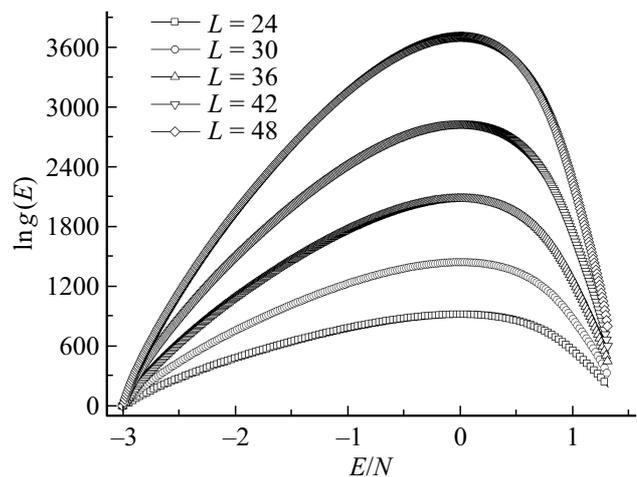


Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ при различных линейных размерах L .

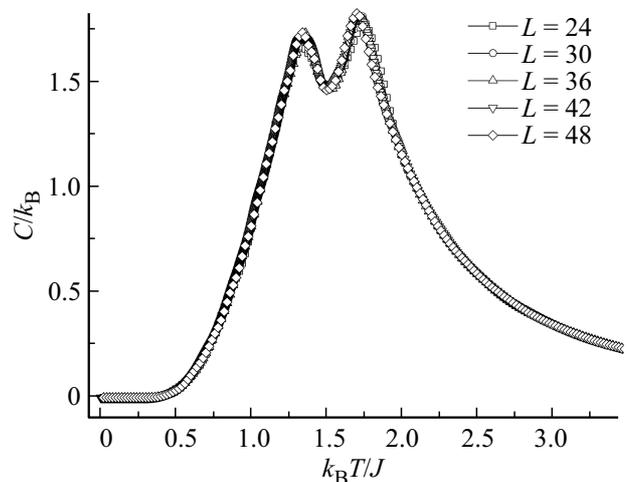


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для разных L .

одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во-вторых, о достижении насыщения по N для исследуемых нами параметров. Наличие двух максимумов на температурной зависимости теплоемкости позволяет говорить о двух последовательных ФП в данной модели. Аналогичный результат был получен в работах [23,34], где была исследована часовая модель с $q = 5$ на квадратной решетке.

На рис. 4 приведена температурная зависимость полной энергии спиновой системы E для разных линейных размеров решетки. На рисунке видно, что вблизи критической температуры энергия изменяется непрерывно. Такое поведение энергии характерно для ФП второго рода.

На рис. 5 приведены температурные зависимости энтропии S для систем с различными линейными размерами L . На рисунке видно, что с увеличением температуры

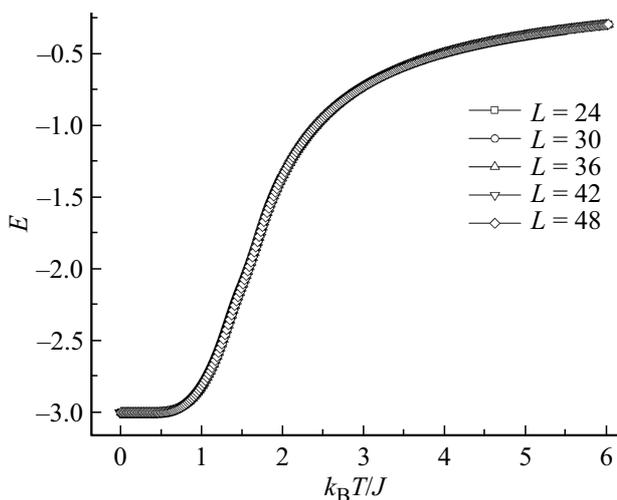


Рис. 4. Зависимость энергии E от температуры для разных L .

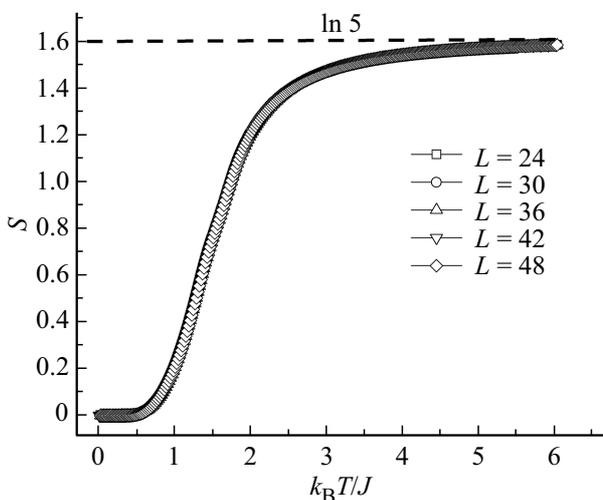


Рис. 5. Температурные зависимости энтропии S .

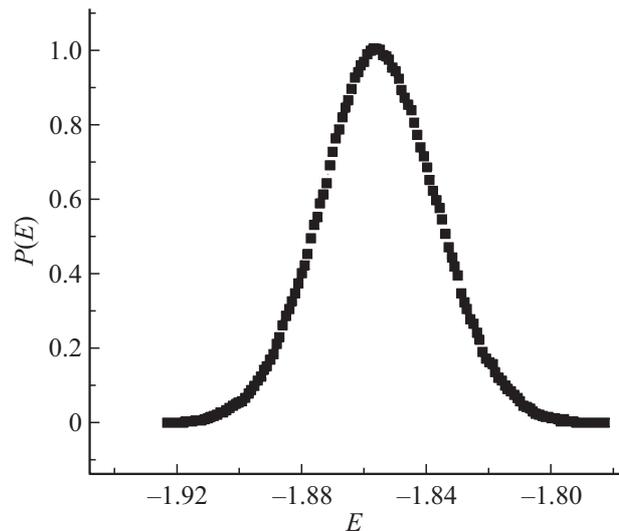


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии E .

энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 5$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия стремится к нулевому значению для всех значений L . Нулевая остаточная энтропия свидетельствует об отсутствии вырождения основного состояния.

Для анализа рода фазового перехода мы дополнительно использовали гистограммы распределения энергии. В случае фазового перехода первого рода на гистограмме распределения энергии при температуре перехода будет иметь два максимума расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии.

На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы $L = 120$. На графике зависимости вероятности P от энергии системы E наблюдается один хорошо выраженный максимум. Исходя из этого можно сделать вывод, что в системе не наблюдается поведение характерное фазовому переходу первого рода.

4. Заключение

Проведено исследование термодинамических свойств двумерной часовой ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 5$ с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Анализ полученных результатов показывает, что на температурной зависимости теплоемкости наблюдаются два максимума. Установлено, что в основном состоянии система не имеет вырождения. Обнаружено, что в системе происходят два фазовых перехода типа Березинского–Костерлица–Таулеса.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [2] А.О. Сорокин. Письма в ЖЭТФ **109**, 423 (2019).
- [3] А.О. Сорокин. Письма в ЖЭТФ **111**, 34 (2020).
- [4] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
- [5] А.К. Муртазаев, М.К. Бадиев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. ФТТ **63**, 8 (2021).
- [6] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 442 (2020).
- [7] F.Y. Wu. J. Phys. C **12**, 317 (1979).
- [8] F.C. Alcaraz, R. Koberle, J. Phys. A **13**, 153 (1980).
- [9] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [10] J.L. Cardy. J. Phys. A **13**, 1507 (1980).
- [11] K. Nomura. J. Phys. A **28**, 5451 (1995).
- [12] H. Matsuo, K. Nomura. J. Phys. A **39**, 2953 (2006).
- [13] G. Ortiz, E. Cobanera, Z. Nussinov. Nucl. Phys. B **854**, 780 (2012).
- [14] Y. Tomita, Y. Okabe. Phys. Rev. B **65**, 184405 (2002).
- [15] C.M. Lapilli, P. Pfeifer, C. Wexler. Phys. Rev. Lett. **96**, 140603 (2006).
- [16] A.F. Brito, J.A. Redinz, J.A. Plascak. Phys. Rev. E **81**, 031130 (2010).
- [17] S.K. Baek, H. Mäkelä, P. Minnhagen, B.J. Kim. Phys. Rev. E **88**, 012125 (2013).
- [18] Y. Kumano, K. Hukushima, Y. Tomita, M. Oshikawa. Phys. Rev. B **88**, 104427 (2013).
- [19] O.A. Negrete, P. Vargas, F.J. Peña, G. Saravia, E.E. Vogel. Entropy **20**, 933 (2018).
- [20] S. Chatterjee, S. Puri, R. Paul. Phys. Rev. E **98**, 032109 (2018).
- [21] T. Surungan, S. Masuda, Y. Komura, Y. Okabe. J. Phys. A **52**, 275002 (2019).
- [22] C. Chatelain. J. Stat. Mech. 11022 (2014).
- [23] Y. Chen, Z.-Y. Xie, J.-F. Yu. Chin. Phys. B **27**, 080503 (2018).
- [24] D.-H. Kim. Phys. Rev. E **96**, 052130 (2017).
- [25] S. Hong, D.-H. Kim. Phys. Rev. E **101**, 012124 (2020).
- [26] N.D. Mermin, H. Wagner. Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [27] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.П. Джамалудинов. ФТТ **64**, 237 (2022).
- [28] А.К. Murtazaev, M.K. Badiev, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov. Physica A **555**, 124530 (2020).
- [29] А.К. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica E **142**, 115320 (2022).
- [30] А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева. ФТТ **63**, 622 (2021).
- [31] H. Boudal, L. Bahmad, R. Masrour, A. Benyoussef, J. Supercond. Nov. Magn. **32**, 1837 (2019).
- [32] М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica E **140**, 115226 (2022).
- [33] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
- [34] Zi-Qian Li, Li-Ping Yang, Z.Y. Xie, Hong-Hao Tu, Hai-Jun Liao, T. Xiang. Phys. Rev. E **101**, 060105 (2020).

Редактор Д.В. Жуманов