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 γ, 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

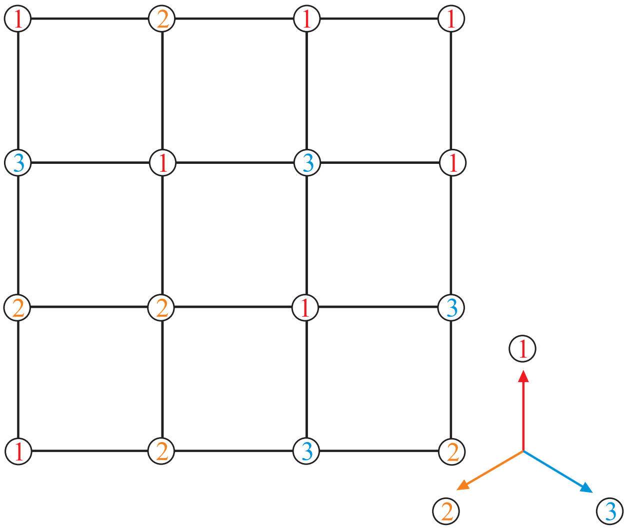

Рис. 1. Стандартная трехкомпонентная модель Поттса на квадратной решетке.

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]:

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

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 $\tau = 100\tau_0$. Для самой большой системы $L = 320$, $\tau_0 = 1.8 \cdot 10^3$ 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

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

3. Результаты моделирования

В рассматриваемой работе на основе теории конечно-размерного скейлинга [11] рассчитывались статические критические индексы (КИ): теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности 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]:

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

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 намагниченности, приходящихся на один спин

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

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

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

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

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{6}$$

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

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

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

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 значений 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.

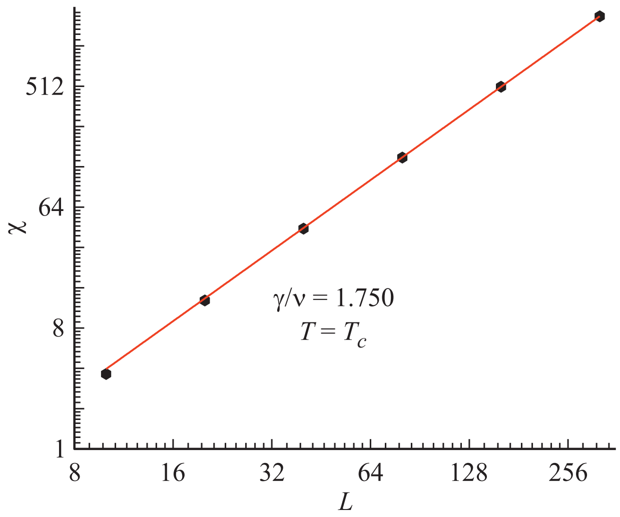

Рис. 2. Характерная зависимость восприимчивости χ от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

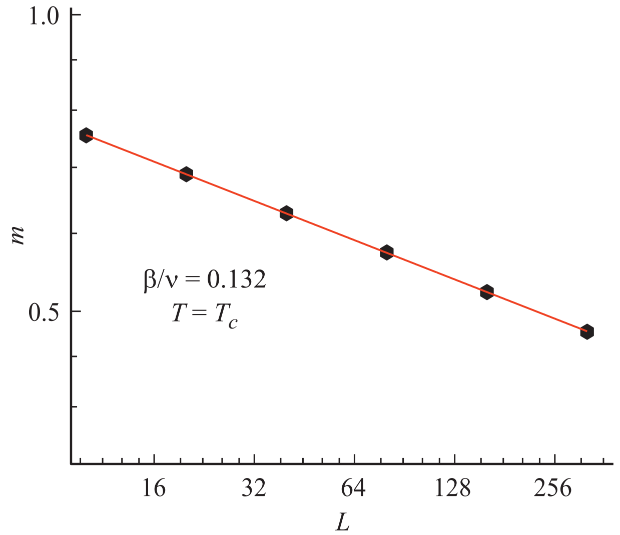

Рис. 3. Характерная зависимость намагниченности m от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

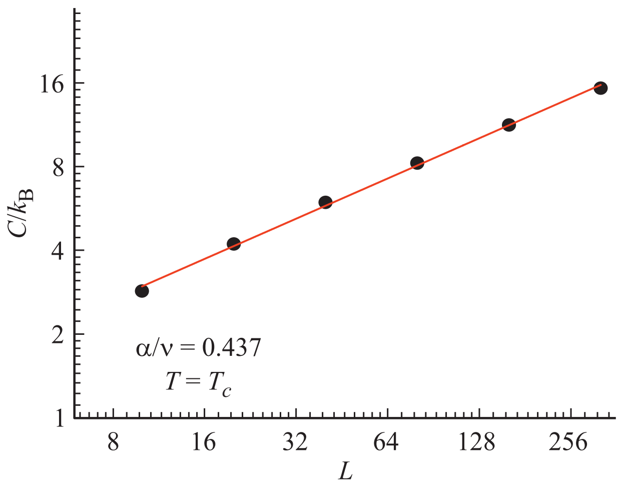

Рис. 4. Характерная зависимость теплоемкости C от линейных размеров решетки L при $T = T_c$

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

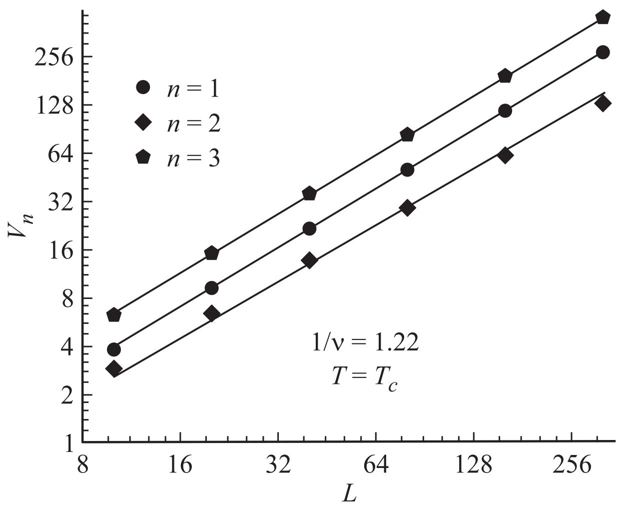

Рис. 5. Характерная зависимость V_n от линейных размеров решетки L при $T = T_c$.

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. Щур. 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. Камилов, 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. Камилов, 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