ЖЭТФ, 2019, том 156, вып. 3 (9), стр. 502–506

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДЕЛИ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 4$ НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов[*]*, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов*

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Республика Дагестан, Россия

Поступила в редакцию 14 марта 2019 г.,
после переработки 14 марта 2019 г.
Принята к публикации 8 апреля 2019 г.

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

DOI: 10.1134/S004445101909013X

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств магнетиков, описываемых двумерными решеточными моделями Изинга и Поттса, имеет большой научный интерес и открывает широкие перспективы для практического применения [1–3]. Такой интерес обусловлен тем, что 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 $q = 3$ [4, 11–13]. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ до сих пор изучена мало. 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 которой ФП происходит как переход первого рода [14]. Согласно результатам работ [4, 11, 12], для модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$, 3, 4 наблюдается ФП второго рода. Однако при $q = 4$ в рассматриваемой модели были обнаружены особенности термодинамического поведения. Кроме того, при исследовании модели Поттса основное внимание до сих пор уделялось спиновым системам на квадратной и треугольной решетках. ФП и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке практически не изучены.

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 гексагональной 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.

[*] E-mail: shikh77@mail.ru

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

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

$$H = -J \sum_{i,j} \cos\theta_{i,j}, \tag{1}$$

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

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [6, 7, 15, 16]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга – Ландау [13, 17], особенно в низкотемпературной области. Поэтому мы в данном исследовании использовали 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. Подобрав вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, мы можем 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

$$g(E_2) \to f g(E_2), \quad H(E_2) \to H(E_2) + 1,$$

иначе

$$g(E_1) \to f g(E_1), \quad H(E_1) \to H(E_1) + 1.$$

Если гистограмма стала плоской, то обнуляем гистограмму, $H(E) \to 0$, уменьшаем модификационный фактор, $f \to \sqrt{f}$, и продолжаем снова, пока $f \geq f_{min}$. В нашем случае $f_{min} = 1.000000000$. Более подробно алгоритм Ванга – Ландау изложен в работах [17, 18]. 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:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) \exp(-E/k_B T)}{\sum_E g(E) \exp(-E/k_B T)} \equiv \langle E \rangle_T, \tag{2}$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left[\sum_E g(E) \exp(-E/k_B T) \right], \tag{3}$$

$$C = N K^2 \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \tag{4}$$

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

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 мы использовали метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных метода МК [18, 19].

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.

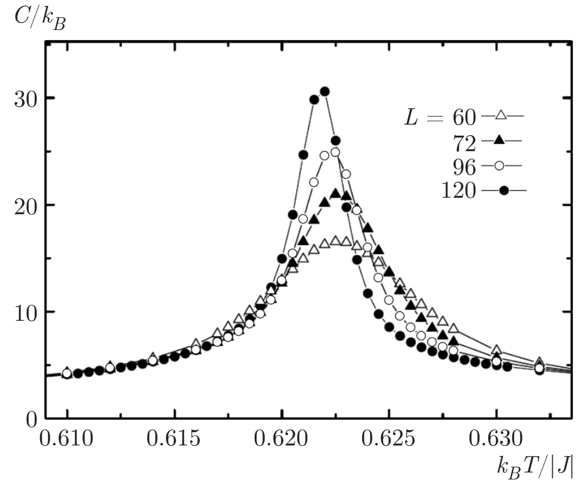

Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости C

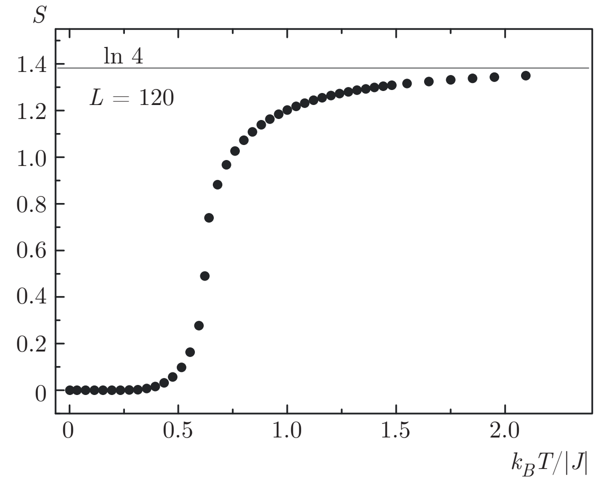

Рис. 2. Температурная зависимость энтропии S

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 символов, использованных для построения зависимостей). Отметим, что в температурных зависимостях теплоемкости C 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 к теоретически предсказанному значению $\ln 4 = 1.38629$. 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 [19]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4\rangle_L}{3\langle U^2\rangle_L^2}, \tag{6}$$

$$V_L = 1 - \frac{\langle m^4\rangle_L}{3\langle m^2\rangle_L^2}, \tag{7}$$

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

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

$$V_L = V^* + bL^{-d}, \tag{8}$$

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

В случае ФП второго рода кривые температурных зависимостей кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [19].

На рис. 3 представлены характерные зависимости U_L от температуры для разных значений L. Видно, что в критической области отсутствует четко выраженная точка пересечения, что свидетельствует в пользу наличия в системе ФП первого рода.

Температурные зависимости энергетических кумулянтов V_L для разных значений L представлены на рис. 4. Видно, что величина V_L стремится к $2/3$, а величина $V^* = 2/3$, что характерно для ФП второго рода. Эта величина рассчитана с использованием

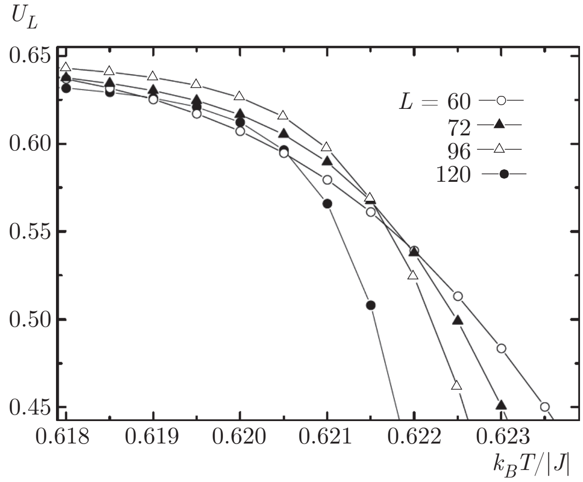

Рис. 3. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера U_L

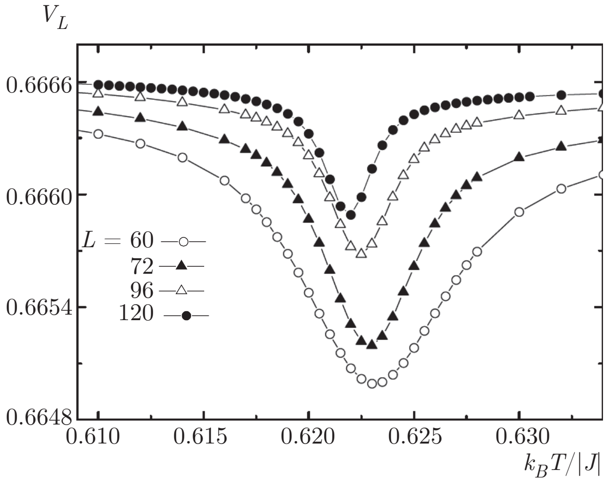

Рис. 4. Температурные зависимости энергетического кумулянта Биндера V_L

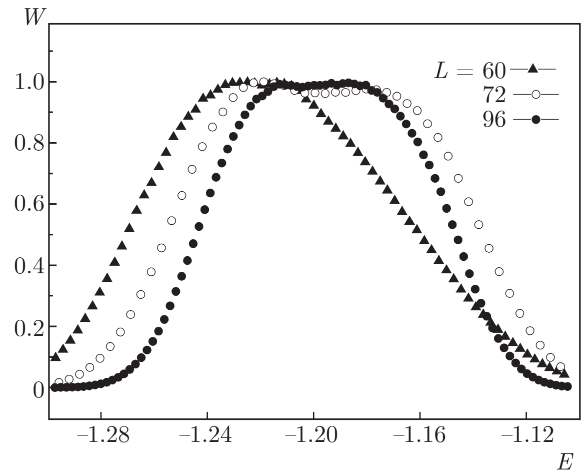

Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для $L = 60$, 72, 96

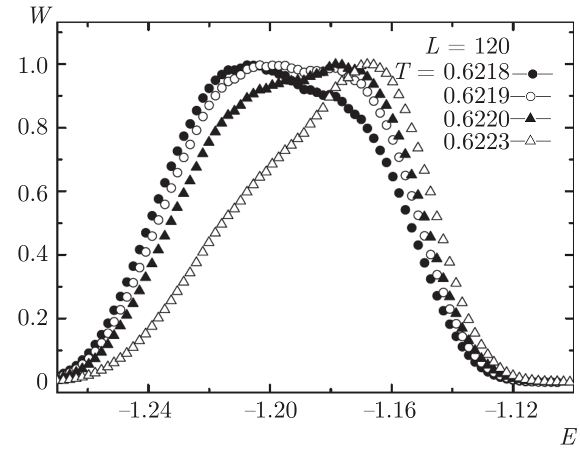

Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для $L = 120$ при различных температурах

выражения (8). На рис. 4 видно, что для исследуемой модели $V^* = 0.6660(1)$.

Для более подробного анализа рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [20, 21].

Результаты нашей работы, полученные на основе гистограммного анализа, показывают, что ФП в данной модели является переходом первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 60$, 72, 96. Графики построены вблизи критической температуры. На рисунке видно, что в зависимости вероятности W от энергии E для всех систем наблюдаются два максимума, которые свидетельствуют 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 наблюдаются 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 к критической. Как видно на рисунке, двойные пики наблюдаются в маленьком интервале температур $0.6217 < T < 0.6223$. 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 гексагональной 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 Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов №№ 19-02-00153-а, 18-32-20098-мол-а-вед.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Sci., Singapore (2004).

2. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).

3. F. Y. Wu, *Exactly Solved Models*: *A Journey in Statistical Mechanics*, World Sci., New Jersey (2008).

4. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).

5. W. Zhang and 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. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Physica B **476**, 1 (2015).

8. F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, and A. I. Proshkin, J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).

9. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Sol. St. Comm. **233**, 35 (2016).

10. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, and M. K. Badiev, Phase Transitions **91**, 610 (2018).

11. M. Nauenberg and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).

12. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).

13. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).

14. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S.-H. Tsai, J. Phys. A **31**, 2287 (1998).

15. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, Д. Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 127 (2015).

16. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).

17. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

18. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).

19. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).

20. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).

21. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).