ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2023, том 124, № 7, с. 577–583

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.611.45

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРЕХКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

© 2023 г. А. Б. Бабаев[a, b, *], А. К. Муртазаев[a, b]

[a] *Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, ул. Ярагского, 94, Махачкала, 367010 Россия*

[b] *Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, ул. Гаджиева, 45, Махачкала, 367032 Россия*

**e-mail: b_albert78@mail.ru*

Поступила в редакцию 24.03.2023 г.
После доработки 17.05.2023 г.
Принята к публикации 26.05.2023 г.

Методом Монте-Карло проведено компьютерное моделирование трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20$–320 в единицах межатомной длины. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β и индекса радиуса корреляции ν. Полученные данные подтверждают, что в рассматриваемой модели Поттса на гексагональной решетке наблюдается фазовый переход второго рода с критическими показателями, соответствующими классу универсальности трехкомпонентной модели Поттса.

Ключевые слова: модель Поттса, критические индексы, метод Монте-Карло, термодинамические параметры, фазовые переходы

DOI: 10.31857/S0015323023600454, **EDN:** VOJFQH

ВВЕДЕНИЕ

В физике конденсированных сред огромный интерес вызывают как фазовые переходы (ФП), так и связанные с ними критические явления (КЯ). На разработку эффективной теории ФП и КЯ были затрачены колоссальные усилия, и к настоящему моменту времени в этом направлении достигнут существенный прогресс. Наиболее плодотворными в этой области оказались идеи, заложенные в гипотезах скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы [1–5]. На их основе получено большинство важнейших результатов современной теории ФП и КЯ [2, 3]: установлены основные закономерности, наблюдающиеся в критической области, получены соотношения между критическими параметрами, построены уравнения состояния и рассчитаны значения критических индексов и амплитуд [1, 4]. Кроме того, развит мощный математический аппарат, оказавшийся полезным не только для теории критических явлений, но и ряда весьма далеких от нее областей физики.

Существенный вклад в строгую количественную теорию кооперативных явлений в спиновых системах внесли также методы высоко- и низкотемпературных разложений [6, 7]. Было показано, что критические индексы (КИ) не зависят от величины спина, а если и зависят, то настолько слабо, что этой зависимостью даже в хорошем приближении можно пренебречь [6]. Полученные закономерности позволили сформулировать гипотезу универсальности для статического критического поведения: критическое поведение (КП) зависит от размерности пространства (решетки), топологии параметра порядка, симметрии гамильтониана, радиуса характерного взаимодействия.

Из этой гипотезы следует, что в рамках одного класса универсальности для всех спиновых систем, испытывающих фазовый переход второго рода, критические индексы являются одинаковыми. В один и тот же класс универсальности попадают столь непохожие, на первый взгляд, системы как жидкости, магнетики, сегнетоэлектрики, сверхпроводники и другие. Кроме того, в построении общей микроскопической теории фазовых переходов играют важную роль точные аналитические решения, которые получены для весьма ограниченного числа решеточных моделей. В 1925 г. Изинг нашел решение для случая одномерной цепочки (в цепочке фазовый переход происходит при $T = 0$) [8]. В 1944 г. Онзагер получил аналитическое решение для двумерной модели Изинга в нулевом внешнем поле и доказал существование фазового перехода [9]. Точное аналитическое решение также было получено для

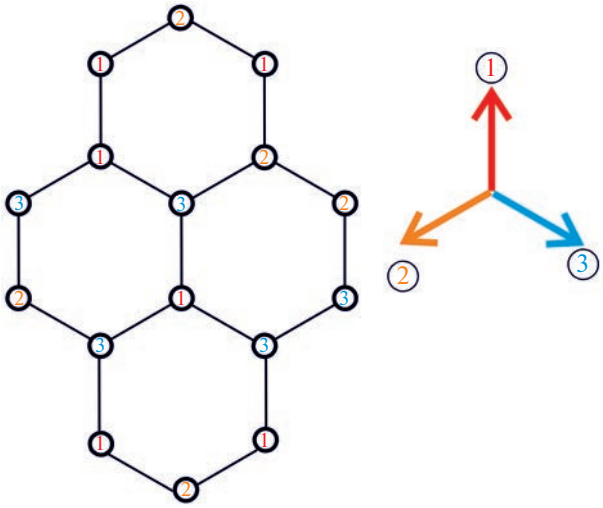

Рис. 1. Трехкомпонентная стандартная модель Поттса на гексагональной решетке.

двумерной модели Изинга на треугольной и гексагональной решетках в работе [10] и на решетке кагоме [11].

Теоретические исследования показывают, что в двумерных (q-компонентных) моделях Поттса фазовый переход будет первого рода (со скрытой теплотой перехода) при $q > 4$, и непрерывным (без скрытой теплоты) при $q \le 4$. Результаты теоретических исследований [12, 13] ничего не говорят о том, каковы критические показатели при $q \le 4$. Это связано с тем, что теоретические подходы при рассмотрении модели Поттса сталкиваются с большими и труднопреодолимыми проблемами. Двумерная модель Поттса с $q = 3$ и $q = 4$ до настоящего времени не решена точно. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей на различных двумерных решетках имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности, интеркаляция атомов шелочных металлов в решетку графита, а также адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита описываются низкоразмерными моделями Поттса на гексагональной решетке [12, 13]. Исследование этих моделей к настоящему времени является своевременным.

ТРЕХКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Приведем формулировку трехкомпонентной стандартной модели Поттса на двумерной (гексагональной) решетке, используемую для описания широкого ряда объектов и явлений в физике конденсированных сред. При построении такой модели необходимо учесть следующие особенности:

1. В узлах гексагональной решетки расположены спины S_i, которые могут ориентироваться в трех симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности $q-1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (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 (опять же все равно в каких именно).

С учетом этих особенностей микроскопический гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [13]:

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

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальнейшем считаем $J = 1$ и работаем с безразмерной температурой); P_i – обозначение состояний узла с номером i.

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

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Алгоритм Вольфа один из наиболее эффективных кластерных алгоритмов метода Монте-Карло на сегодняшний день [14]. Методика ее реализация подробно рассмотрена в работах [15–17]. В данной работе этот алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Два случайных числа задают координаты i, j узла на решетке.

2. Рассматриваются все ближайшие соседи S_j данного спина S_i. Если соседний узел занят магнитным спином, то с вероятностью

$$P = 1 - \exp(-K), \tag{2}$$

где $K = J/k_B T$, k_B – постоянная Больцмана, T – температура, активируется связь между S_i и S_j, если S_i и S_j имеют одинаковые значения при $J > 0$. Заметим, что в случае модели Поттса для выражения вероятности включения спина в кластер (2) показатель 2 в экспоненте, характерный для соответствующей вероятности модели Изинга, исчезает. Таким образом, можно утверждать, что модель Поттса с состоянием спина $q = 2$ эквивалентна модели Изинга с точностью численного фактора 2 в обменной константе J.

3. Если связь между спинами S_i и S_j активируется, то спин в узле j включается в кластер. Следует отметить, что так же, как и для модели Изинга, один и тот же спин может быть включен в кластер только один раз, тогда как проверен на включение в кластер несколько раз.

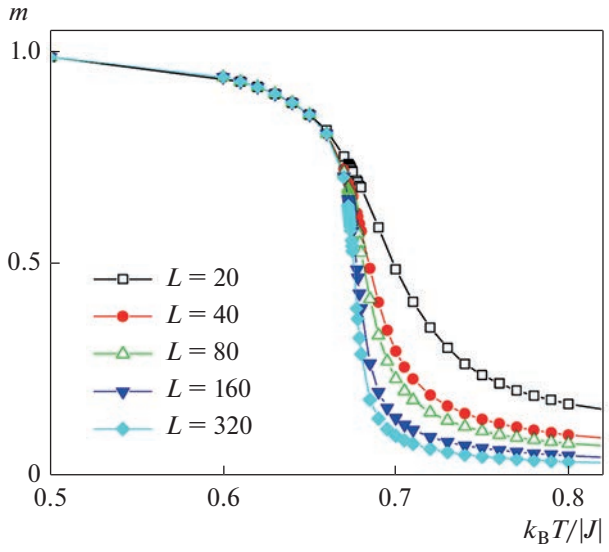

Рис. 2. Температурная зависимость намагниченности m для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

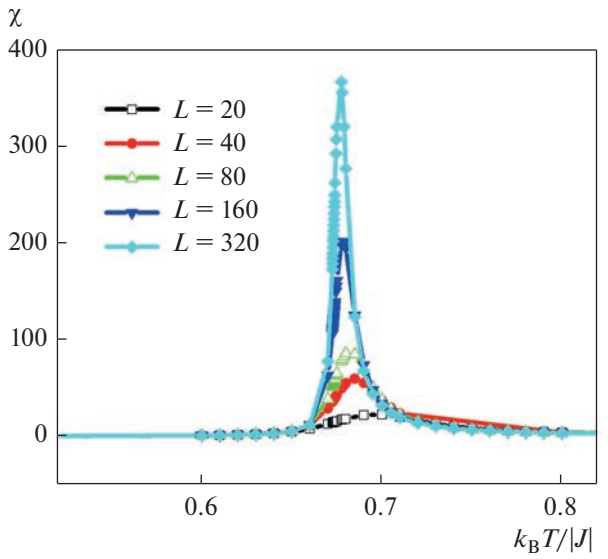

Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости χ для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

4. После проверки всех ближайших соседей выбранного спина S_i, первый включенный в кластер спин становится "центральным", и начинается процесс активации связей этого спина с ближайшими соседями. Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут проверены все ближайшие соседи всех вошедших в кластер спинов или достигнуты границы системы.

5. Все спины, между которыми установлена связь, образуют "кластер".

6. Полученный кластер переворачивается с вероятностью, равной 1. Переворот кластера в случае модели Поттса означает присвоение всем спинам, вошедшим в кластер, новое значение спина S_i', с равной вероятностью среди всех его состояний q, которое отлично от старого значения S_i. Затем переходим к п. 2.

Об эффективности однокластерного алгоритма Вольфа применительно к модели Поттса можно судить по критическому индексу z, характеризующему эффективность используемого алгоритма. В частности, исследование чистой двумерной модели Поттса с $q = 4$ на основе однокластерного алгоритма Вольфа показало, что критический индекс $z = 0.60 \pm 0.02$, в то время как использование классического алгоритма Метрополиса дает значение $z \approx 2$ [18]. По описанному выше алгоритму Вольфа [14] реализовался марковский процесс для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ). Расчеты проведены для систем с линейными размерами $L = 20$–320, и числом спинов $N = 2 \times L \times L/3$, где L измеряется в единицах межатомной длины. Изначально конфигурации задавали таким образом, чтобы все спины находились в одном состоянии. Для вывода системы в равновесное состояние вычисляли время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L. Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной $\tau = 400\tau_0$. Для самой большой системы $L = 320$, $\tau_0 = 2.1 \times 10^3$ МК шагов/спин.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для наблюдения за температурным ходом внутренней энергии U, намагниченности m, теплоемкости C и восприимчивости χ использованы следующие выражения [12, 19]:

$$U = \frac{1}{N}[\langle H \rangle], \tag{3}$$

$$m = \frac{\left[q\left(\frac{N_{\max}}{N}\right) - 1\right]}{q-1}, \tag{4}$$

$$C = (NK^2)\left[\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2\right], \tag{5}$$

$$\chi = (NK)\left[\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2\right], \tag{6}$$

где $K = J/k_BT$, $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3\}$, N_i – число спинов в состоянии с $q = i$, угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости намагниченности m и восприимчивости χ для трехкомпонентной модели Поттса, соответственно, от температуры. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превышает размеров символов, используемых для построения

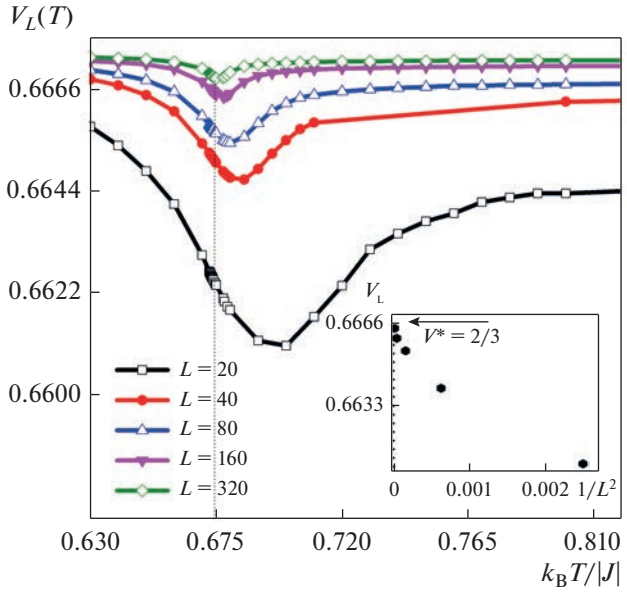

Рис. 4. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

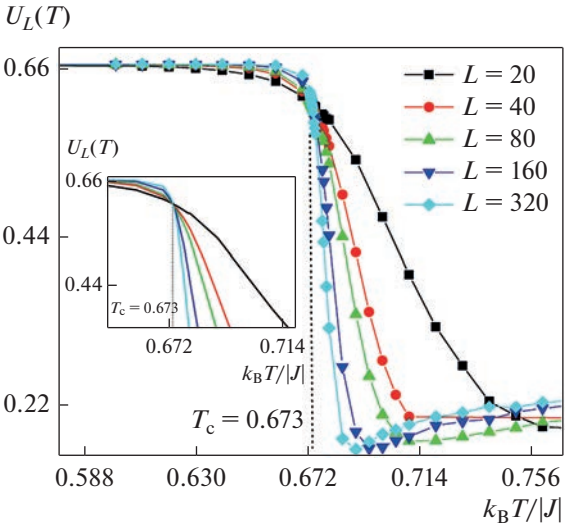

Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке.

графиков. Как видно из этих рисунков, для всех рассмотренных систем наблюдается поведение, характерное для фазового перехода второго рода.

В численных методах для определения температуры и рода ФП хорошо зарекомендовал метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [20]:

$$V_L(T) = 1 - \frac{\left\langle E^4(T;L)\right\rangle_L}{3\left\langle E^2(T;L)\right\rangle_L^2}, \qquad (7)$$

$$U_L(T) = 1 - \frac{\left\langle m^4\right\rangle_L}{3\left\langle m^2\right\rangle_L^2}, \qquad (8)$$

где E и m – энергия и намагниченность рассматриваемой системы с линейным размером L. Выражения (7) и (8) позволяют определить температуру T_L фазового перехода с большой точностью в ФП первого и второго рода соответственно. Как известно, ФП второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [21]: усредненная величина $V_L(T)$ стремится к тривиальному значению V^* согласно выражению:

$$V(T) = V^* + bL^{-d}, \qquad (9)$$

при $L \to \infty$ и $T = T_c(L)$, где $V^* = 2/3$, а кумулянты Биндера $U_L(T)$ в критической области имеют четко выраженную точку пересечения. Указанные особенности для кумулянтов Биндера четвертого порядка $V_L(T)$ и $U_L(T)$ продемонстрированы на рис. 4 и 5 для ферромагнитной трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке. Методика определения рода фазового перехода этим методом подробно описана в работах [21–24]. Как видно из рис. 5, температура ФП в трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке $T_c = 0.673(2)$. Следует отметить, что для двумерных моделей Поттса с числом состояний спина q из соображений дуальности квадратной, треугольной и гексагональной решетки были получены простые полиномиальные выражения, позволяющие определить критическую температуру (см. [13]). Однако эти выражения справедливы только для моделей Поттса с $q > 3$ и $q = 2$ [13].

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, нами на основе теории конечно-размерного скейлинга (КРС) рассчитаны статические критические индексы намагниченности β, восприимчивости γ и теплоемкости α. Из соотношений этой теории следует, что для достаточно большой системы с ПГУ при температуре $T = T_c$ намагниченность m и восприимчивость χ удовлетворяют следующим аналитическим выражениям [25–27]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \qquad (10)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}. \qquad (11)$$

Эти соотношения были нами использованы для определения β/ν и γ/ν. Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работе [19]. Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L, как правило, используют другие выражения, например, [19, 27]

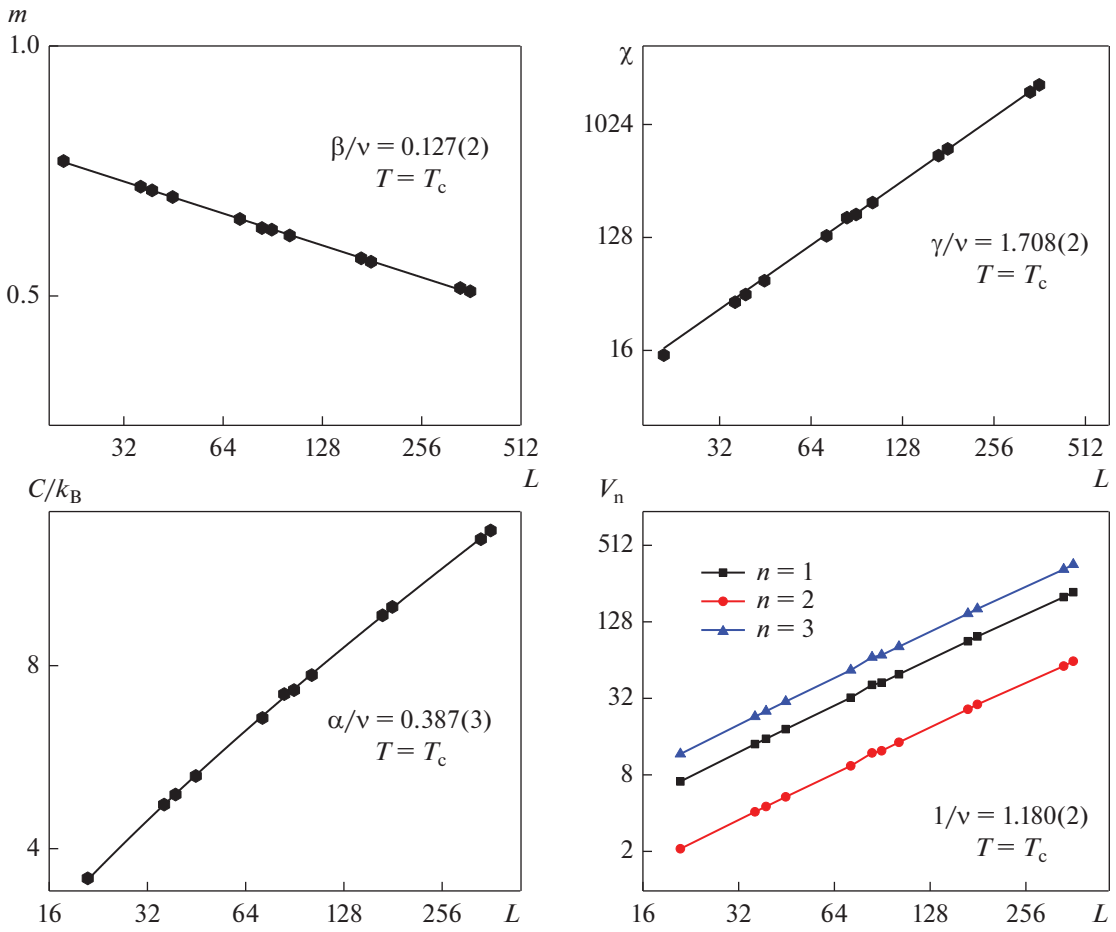

Рис. 6. Зависимость намагниченности m, восприимчивости χ, теплоемкости C, для трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке от линейных размеров системы L при $T = T_c$.

$$C = A + BL^{\alpha/\nu}, \tag{12}$$

где A, B – некоторые коэффициенты.

В соответствии с теорией КРС в точке ФП для критического индекса радиуса корреляции ν выполняется соотношение [26]:

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{13}$$

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

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \ (i = 1,\ 2,\ 3). \tag{14}$$

Для расчета критических индексов β, γ, α, и ν построены зависимости m, χ, C, и V_n от L. Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения β/ν, γ/ν, α/ν, и $1/\nu$ (табл. 1). Затем, используя значения ν, полученное в рамках данного исследования, определяли все остальные индексы β, γ, и α. Точность критических индексов, согласно выражениям теории КРС (10)–(12), в большей степени зависит от правильности учета данных для разных линейных размеров L. В наших расчетах строго контролировали данные для всех рассмотренных систем, и при их незначительном отклонении от аппроксимирующей прямой процедуру фитирования проводили заново с отсеканием данных для $L < L_{\min}$. Такой отбор данных для разных L позволяет заметно уменьшить погрешность в определении КИ и заметно их приближает к известным теоретическим значениям для модели жестких гексагонов, находящейся в одном классе универсальности с исследуемой моделью Поттса (с $q = 3$) [12, 13] (см. табл. 1). Отметим, что трехкомпонентная модель Поттса ни на одной решетке прямым способом до настоящего времени не решена точно.

Следует отметить, что во многих работах, в отличие от нашей, эти индексы в основном определяли, используя критический индекс ν, полученный на основе различных скейлинговых соотношений. С другой стороны, для модели Поттса с $q = 4$ на квадратной решетке при определении

Таблица 1. Критические индексы двумерной трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке

Метод	ν	1/ν	α	α/ν	γ	γ/ν	β	β/ν	α + 2β + γ = 2
Теория, [13]	5/6 0.83	6/5 1.20	1/3 0.33	2/5 0.40	13/9 1.44	26/15 1.733	1/9 0.111	2/15 0.133	2.0
МК, гексагональная решетка (наши данные)	0.847(3)	1.180(2)	0.327(3)	0.387(3)	1.446(1)	1.708(3)	0.107(3)	0.127(3)	1.99
МК [28], квадратная решетка				0.46(8)		1.736(1)		0.131(1)	

критических показателей в работах [15, 28, 29] была продемонстрирована важность учета логарифмических поправок для всех выражений теории КРС. Аппроксимации данных m, χ и C выражениями теории КРС (10)–(12) для трехкомпонентной модели Поттса логарифмических поправок не выявили. На рис. 6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости намагниченности m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L. Как видно из рис. 6, полученные данные как для намагниченности, так и для восприимчивости не отклоняются от прямой даже при малых значениях L. При исследовании таких систем часто возникает вопрос о достижении режима асимптотического критического поведения. Очевидно, что для намагниченности m, восприимчивости χ, теплоемкости C и для параметра V_n использованные нами размеры $L \geq 20$ изучаемых систем позволяют достичь асимптотический критический режим.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данные нашей статьи, полученные в результате моделирования трехкомпонентной модели Поттса на двумерной (гексагональной) решетке свидетельствуют, что в ней наблюдается фазовый переход второго рода. При этом:

1. Критическое поведение не демонстрирует мультипликативные логарифмические поправки к намагниченности, восприимчивости и теплоемкости.

2. Конечномерный анализ полученных данных демонстрирует наличие фазового перехода второго рода с критическими показателями, соответствующими классу универсальности ранее детально исследованной модели Поттса с $q = 3$ на квадратной решетке [28].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Паташинский А.З., Покровский В.А.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982. 380 с.
2. *Вильсон К., Когут Д.* Ренормализационная группа и ε-разложение / Пер. с англ. В.А. Загребного; Под ред. Alves д. В.К. Федянина. М.: Мир, 1975. 256 с.
3. *Паташинский А.З., Покровский В.А.* Метод ренормгруппы в теории фазовых переходов. // УФН. 1977. Т. 121. С. 55.
4. *Ма Ш.* Современная теория критических явлений / Пер. с англ. А.Н. Ермилова, А.М. Курбатова / Под ред. Н.Н. Боголюбова (мл.), В.К. Федянина. М.: Мир, 1980. 298 с.
5. *Kadanoff L.P.* Scaling laws for Ising models near Tc // Physica. 1966. V. 2. P. 263.
6. *Стенли Г.* Фазовые переходы и критические явления / Пер. с англ. А.И. Мицека, Т.С. Шубиной / Под ред. С.В. Вонсовского. М.: Мир, 1973. 419 с.
7. *Фишер М.* Физика критического состояния / Пер.с англ. М.Ш. Гитермана. М.: Мир, 1968. 221 с.
8. *Ising E.* Report on the theory of ferromagnetism // Physik Z. 1925. V. Bd. 31. P. 253.
9. *Onsager L.* Crystal statistics. 1: A two-dimensional model with an order-disorder transitions // Phys. Rev. 1944. V. 65. C. 117.
10. *Houtappel R.M.F.* Order–disorder in hexagonal lattices // Physica. 1950. V. 16. P. 425.
11. *Kanô K., Naya S.* Antiferromagnetism. The Kagome Ising Net // Prog. Theor. Phys. 1953. V. 10. P. 158.
12. *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике / Пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина / Под ред. А.М. Бродского. М.: Мир, 1985. 486 с.
13. *Wu F.Y.* Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, London, 2009. 641 p.
14. *Wolff U.* Collective Monte Carlo Updating for spin systems // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361.
15. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я., Бабаев М.А.* Фазовые переходы в разбавленной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на квадратной решетке // ФТТ. 2022. Т. 64. С. 639.

16. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я., Магомедов М.А.* Фазовые переходы и критические явления в двумерной примесной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на квадратной решетке // ЖЭТФ. 2022. Т. 161. С. 847.
17. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* Computation of Relative Variances of Magnetization and Susceptibility in a Disordered Ising Model: The Results of Computer Simulation // Mathematical Models and Computer Simulations. 2019. V. 11. P. 575.
18. *Barkema G.T., Newman M.E.J.* New Monte Carlo algorithms for classical spin systems // Preprint cond-mat/9703179. 1997.
19. *Peczac P., Ferrenberg A.M., Landau D.P.* High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // Phys.Rev. B. 1991. V. 43. P. 6087.
20. *Eichhorn K., Binder K.* Monte Carlo investigation of the three-dimensional random-field three-state Potts model // J. Phys.: Condens. Matter. 1996. V 8. C. 5209.
21. *Loison D., Schotte K.D.* First and second order transition in frustrated XY systems // Eur. Phys. J. B. 1998. V. 5. P. 735.
22. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б.* Трикритическая точка трехмерной неупорядоченной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на простой кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 105. С. 363.
23. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* Computer simulation of the critical behavior in spin models with nonmagnetic impurities // Low Temperature Physics. 2015. V. 41. P. 608.
24. *Babaev A.B., Murtazaev A.K.* The tricritical point of the site-diluted three-dimensional 5-state Potts model // J. Magn. Magn. Mater. 2022. V. 324. P. 3870.
25. *Fisher M.E., Barber M.N.* Scaling theory for finite-size effects in the critical region // Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. P. 1516.
26. *Loison D.* Monte Carlo cluster algorithm for ferromagnetic Hamiltonians $H = J\Sigma (S_i S_j)^3$ // Phys. Lett. A. 1999. V. 257. P. 83.
27. *Wiseman S., Domany E.* Self-averaging, distribution of pseudocritical temperatures, and finite size scaling in critical disordered systems // Phys. Rev. E. 1998. V. 58. P. 2938.
28. *Kim J.-K., Landau D.P.* Corrections to finite-size-scaling in two dimensional Potts models // Physica A. 1998. V. 250. P. 362.
29. *Salas J.S., Sokal A.D.* Logarithmic Corrections and Finite-Size Scaling in the Two-Dimensional 4-State Potts Model // J. Stat. Phys. 1996. V. 88. P. 567.