

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ  
СВОЙСТВА

УДК 537.611.45

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНОЙ  
МОДЕЛИ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

© 2024 г. А. Б. Бабаев<sup>а, \*</sup>, А. К. Муртазаев<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,  
ул Ярагского, 94, Махачкала, 367030 Россия

\*e-mail: b\_albert78@mail.ru

Поступила в редакцию 30.01.2024 г.

После доработки 05.02.2024 г.

Принята к публикации 17.03.2024 г.

Методом Монте-Карло проведено компьютерное моделирование четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами  $L \times L = N$ ,  $L = 10–160$ . С применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка и метода гистограммного анализа данных исследованы фазовые переходы в рассматриваемой модели Поттса. Показано, что в четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке наблюдается фазовый переход II рода.

*Ключевые слова:* модель Поттса, фазовые переходы, метод Монте-Карло, кумулянты Биндера, треугольная решетка

**DOI:** 10.31857/S0015323024070027, **EDN:** JSCIEV

ВВЕДЕНИЕ

Большое значение в теоретическом исследовании фазовых переходов (ФП) имеет изучение точно решаемых моделей, которые обладают нетривиальным поведением, претерпевая фазовый переход I или II рода, и в то же время позволяют рассчитать точную статистическую сумму. Такие модели обычно редко дают возможность непосредственного сравнения с экспериментом, но очень полезны для понимания физики фазового перехода [1]. К настоящему времени имеются несколько точно решаемых моделей, среди которых двумерная модель Изинга на квадратной решетке [2]. Модель Поттса при  $q=2$  изоморфна модели Изинга, для которой точное аналитическое решение также было получено на треугольной и гексагональной решетках в работе [3] и на решетке Кагоме [4]. В то же время при попытках рассчитать критические параметры для моделей Поттса с числом состояний спина  $q>2$  на различных решетках аналитические методы сталкиваются с непреодолимыми трудностями. Это привело к разработке гипотез, позволяющих оценить с некоторой степенью точности значения критических точек [5, 6].

Для моделей Поттса при  $q>2$  на различных 2D- и 3D-решетках не имеется ни одного точно-

го решения до сегодняшнего дня. Изучение магнитных и тепловых свойств этих моделей имеет важное фундаментальное и прикладное значение. Это связано с тем, что многие объекты и явления, наблюдаемые в физике конденсированных сред, в частности адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита, могут описываться моделями решеточного газа Поттса [6, 7].

В случае адсорбции криптона на графите, центры адсорбции образуют треугольную решетку на базисной грани кристалла графита (см. рис. 1а). При этом адатомы криптона взаимодействуют попарно, и потенциал взаимодействия положителен для ближайших соседей и отрицателен для остальных. Такие свойства потенциала приводят к исключению ближайших соседей. Таким образом элементарный треугольник, состоящий из трех узлов криптонового решеточного газа, можно рассматривать как единое целое. Этот треугольник может находиться в одном из четырех состояний: он может не содержать ни одного адатома криптона или содержать один атом в положении  $a, b, c$  (см. рис. 1б). Узлы решеточного газа Поттса также образуют треугольную решетку. Фазовые переходы в таких адсорбированных структурах описываются классом универсальности четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке [1].

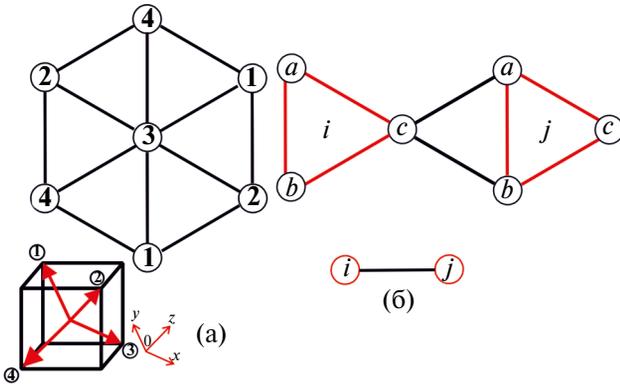


Рис. 1. Четырехкомпонентная модель Поттса на треугольной решетке (а); описание адсорбции на основе модели Поттса (б).

Кроме того, следует отметить, что значение  $q=4$  для модели Поттса является граничным, выше которого наблюдается ФП I рода, ниже — ФП II рода. Поэтому изучение особенностей фазовых переходов и термодинамических свойств четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в зависимости от линейных размеров исследуемых систем имеет отдельный практический интерес.

### ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Приведем здесь формулировку четырехкомпонентной стандартной модели Поттса на треугольной решетке, используемой для описания различных объектов и явлений в физике конденсированных сред. При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности:

1. В узлах треугольной решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут ориентироваться в 4-х симметричных направлениях гипертетраэдра в пространстве размерности  $q-1$ , так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны (рис. 1а).

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 [12]:

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \delta(S_i, S_j); \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, \quad (1)$$

где  $J$  — параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей (в дальней-

шем считаем  $|J/k_B|=1$  и работаем с безразмерной температурой),  $P_i$  — обозначение состояния спина с номером  $i$ , суммирование в выражении (1) производится по ближайшим соседям:

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

### МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алгоритм Вольфа один из наиболее эффективных кластерных алгоритмов метода Монте-Карло на сегодняшний день [8]. Методика ее реализации подробно рассмотрена в работах [9–11]. Основная суть алгоритма заключается в следующем:

1. Два случайных числа задают координаты  $i, j$  спина  $S_i$  и в дальнейшем рассматривается началом роста кластера, к которому присоединяются ближайшие соседние спины с вероятностью

$$P = 1 - \exp(-K), \quad (2)$$

где  $K=J/k_B T$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура, если оба спина находятся в одинаковых состояниях при  $J>0$ . Рост кластера продолжается до тех пор, пока список непроверенных спинов исчерпывается.

2. 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  $S_i$ .

По вышеописанному алгоритму Вольфа [8] реализовали марковский процесс для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ). Расчеты проведены для систем с линейными размерами  $L=10-160$ , и числом спинов  $N=L \times L$ , 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  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Этот неравновесный участок отбрасывали. Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной  $\tau = 450\tau_0$ , где  $\tau_0 = 2.1 \times 10^4$  МК шагов/спин.

### РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом поведения энергии  $E$  использовано выражение:

$$E = \langle \frac{H}{N} \rangle, \quad (3)$$

угловые скобки означают термодинамическое усреднение. Температурные зависимости энер-

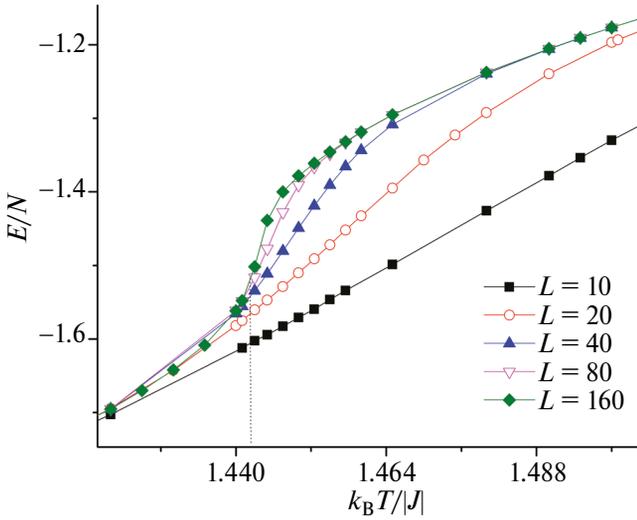


Рис. 2. Зависимость удельной энергии  $E$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

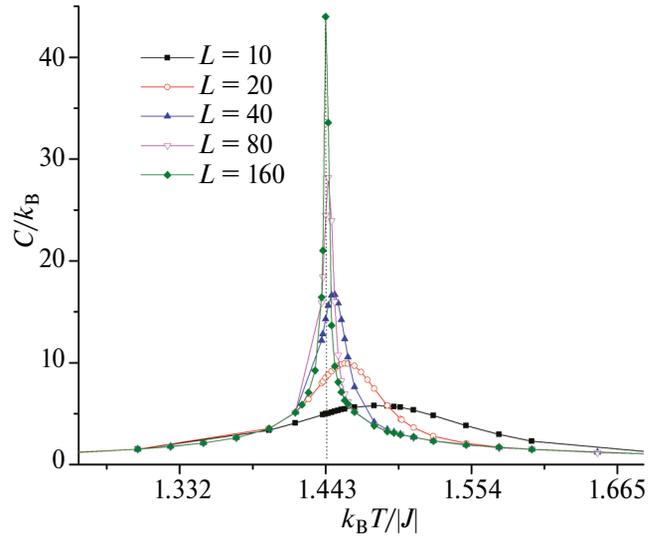


Рис. 3. Зависимость удельной теплоемкости  $C$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

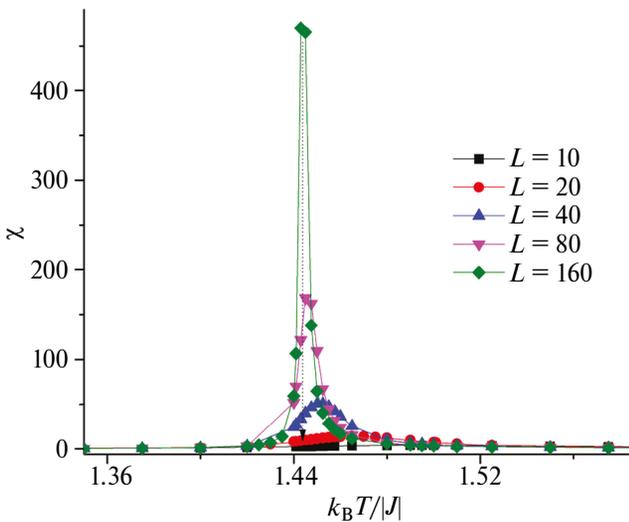


Рис. 4. Зависимость удельной магнитной восприимчивости  $\chi$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

гии  $E$  на один узел приведены на рис. 2. Как видно из рисунка, температурная зависимость энергии  $E$  для четырехкомпонентной модели Поттса при  $L=160$  демонстрирует слабо выраженный скачок энергии. Это обусловлено тем, что для модели Поттса число состояний спина  $q=4$  является граничным, и для конечных  $L$  может наблюдаться фазовый переход II рода, близкий к фазовому переходу I рода. Для полного выяснения особенностей рода фазового перехода в решеточных моделях Поттса следует комплексно исследовать температурные зависимости всех термодинамических параметров.

В рассматриваемой работе численно исследованы теплоемкость и магнитная восприимчивость с применением следующих флуктуационных соотношений [12]:

$$C = (NK^2) \left[ \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right], \quad (4)$$

$$\chi = (NK) \left[ \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right], \quad (5)$$

где  $K=J/k_B T$ ,  $N_{\max} = \max \{N_1, N_2, N_3, N_4\}$ ,  $N_i$  — число спинов в состоянии с  $P_i$ ,  $N=L^2$  — число магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение, нормированное на  $N^2$ ,  $m = (q(N_{\max} / N) - 1) / (q - 1)$  — спонтанная намагниченность рассматриваемой системы с линейным размером  $L$ . В частности, с увеличением линейного размера системы  $L$  максимум теплоемкости и магнитной восприимчивости достаточно хорошо приближается к критическому значению и для температурных зависимостей рассматриваемых параметров наблюдаются ярко выраженные максимумы (см. рис. 3 и рис. 4).

Температурная зависимость спонтанной намагниченности  $m$  приведена на рис. 5. Как видно из рисунка, для всех рассмотренных систем наблюдается поведение, характерное для ФП II рода.

Исследование температурных зависимостей кумулянтов Биндера четвертого порядка  $U_L(T)$  [13]:

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

выявило ярко выраженную точку пересечения для решеток разных размеров  $L$  (см. рис. 6).

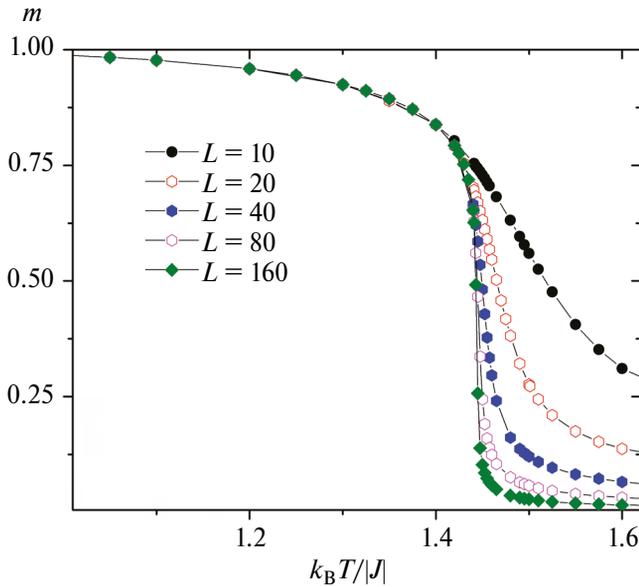


Рис. 5. Зависимость спонтанной намагниченности  $m$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

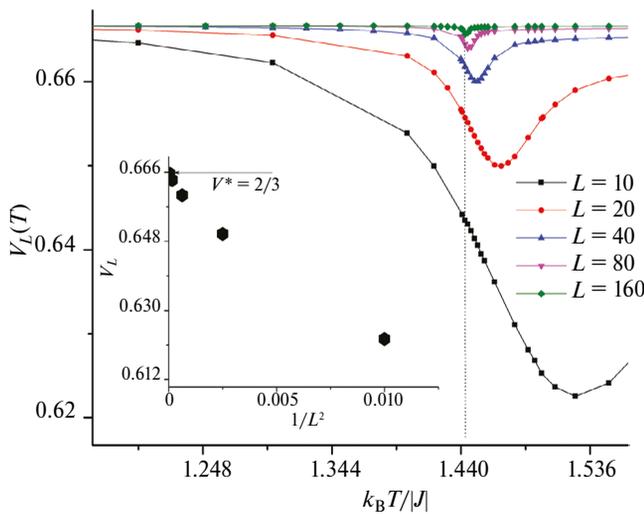


Рис. 7. Зависимость кумулянтов Биндера  $V_L(T)$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

Как видно из рисунка, эта точка соответствует критической температуре  $T_c=1.442(2)$ .

Вычисленное значение  $T_c$  находится в хорошем соответствии со значением  $T_c=1/\ln 2$ , которое получено из аналитического выражения [6]:

$$v^3 + 3v^2 = 4, \quad (7)$$

где  $v = e^{J/k_B T} - 1$ . Кроме того, значения кумулянтов Биндера, рассчитанные по энергии  $E$ :

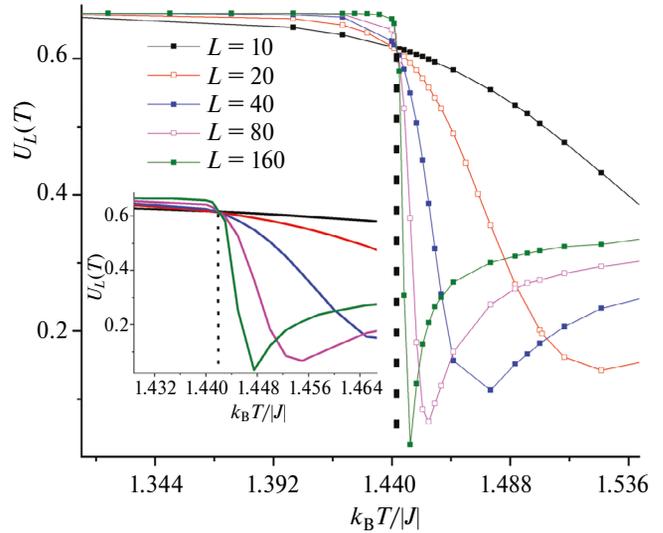


Рис. 6. Зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  от температуры для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4(T; L) \rangle_L}{3 \langle E^2(T; L) \rangle_L^2}, \quad (8)$$

для разных размеров решетки в зависимости от температуры  $T$  приведены на рис. 7. Как видно из вставки к рис. 7, значения  $V_L(T)$  при  $T=T_c$  и  $L \rightarrow \infty$  стремятся к тривиальному значению  $V^*=2/3$ :

$$V(T) = V^* + bL^{-2}, \quad (9)$$

что свойственно для фазового перехода II рода (см. рис. 7).

Аналогичную картину наблюдали для четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке в работах [15, 16]. Гистограммный анализ данных, проведенный для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке, также свидетельствует о наличии ФП II рода. Это продемонстрировано на рис. 8 для спиновой системы с  $L=160$ . В зависимости вероятности  $P$  от энергии  $E$  для всех трех различных значений температуры вблизи  $T_c$  наблюдается один хорошо выраженный максимум, что характерно для ФП II рода.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численные данные нашей статьи, полученные моделированием четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке, показали, что в рассматриваемой модели наблюдается фазовый переход II рода.

С применением метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определена критическая температура  $T_c$ . Показано, что полученное зна-

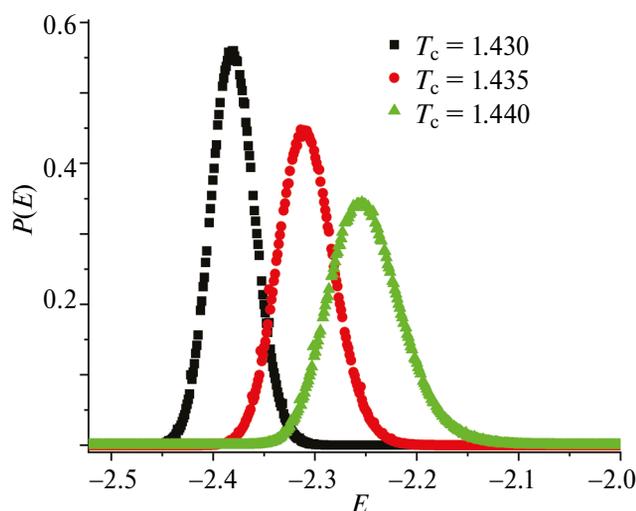


Рис. 8. Гистограмма распределения энергии для четырехкомпонентной модели Поттса на треугольной решетке.

чение критической температуры находится в хорошем соответствии с аналитическим значением, полученным Поттсом (см. [6]).

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Пер. с англ. Е.П. Вольско-го, Л.И. Дайхина; Под ред. А.М. Бродского. М.: Мир, 1985. 486 с.
2. Onsager L. Crystal statistics. 1: A two-dimensional model with an order-disorder transitions // Phys. Rev. 1944. V. 65. P. 117–149.
3. Houtappel R.M.F. Order-disorder in hexagonal lattices // Physica. 1950. V. 16. P. 425.
4. Kanô K., Naya S. Antiferromagnetism. The Kagome Ising Net // Prog. Theor. Phys. 1953. V. 10. P. 158.
5. Wu F.Y. The Potts model // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. № 1. P. 235–268.
6. Wu F.Y. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. London: World Scientific, 2009.
7. Ермилов А.Н. Аналитический метод исследования стохастической модели Поттса // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1989. Т. 20. № 6. С. 1479.
8. Wolff U. Collective Monte Carlo Updating for spin systems // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361.
9. 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.
10. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов. М.: Физматлит, 2023. 184 с.
11. Бабаев А.Б., Муртазаев А.К. Моделирование трехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Монте-Карло // ФММ. 2023. Т. 124. № 7. С. 577–583.
12. Peczak 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.
13. Eichhorn K., Binder K. Monte Carlo investigation of the three-dimensional random-field three-state Potts model // J. Phys.: Condens. Matter. 1996. V. 8. P. 5209.
14. Loison D., Schotte K.D. First and second order transition in frustrated XY systems // Eur. Phys. J. B. 1998. V. 5. P. 735.
15. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б. Фазовые переходы в двумерных моделях Поттса на гексагональной решетке // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2022. Т. 161. № 6. С. 847–852.
16. Фадеева М.А., Шур Л.Н. Моделирование четырехкомпонентной модели Поттса на гексагональной решетке методом Ванга–Ландау с контролируемой точностью // Журнал экспериментальной и теоретич. физики. 2022. Т. 162. С. 909–916.

## PHASE TRANSITIONS IN THE FOUR-COMPONENT POTTS MODEL ON A TRIANGULAR LATTICE

A. B. Babaev<sup>1,\*</sup> and A. K. Murtazaev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Amirkhanov Institute of Physics Dagestan Federal Research Center, Russian Academy of Sciences, Makhachkala, 367030 Russia

\*e-mail: b\_albert78@mail.ru

The Monte Carlo method is used to perform the simulation of four-component Potts model on a triangular lattice. Systems with linear dimensions of  $L \times L = N$  and  $L = 10–160$  are considered. Phase transitions in terms of the considered Potts model are studied using fourth-order Binder cumulants and histogram analysis of data. It is shown that, in the four-component Potts model on a triangular lattice, second-order transitions are observed.

**Keywords:** Potts model, phase transitions, Monte Carlo method, Binder cumulants, triangular lattice