

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЯТИКОМПОНЕНТНОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО В ЧИСТОМ И РАЗБАВЛЕННОМ РЕЖИМАХ

© 2024 г. Г. Я. Атаева^{a,*}, А. Б. Бабаев^a, А. К. Муртазаев^a

^aИнститут физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, ул. Ярагского, 94, Махачкала, 367030 Россия

*e-mail: ataeva20102014@mail.ru

Поступила в редакцию 15.03.2024 г.

После доработки 25.04.2024 г.

Принята к публикации 05.05.2024 г.

Методом Монте-Карло проведено моделирование пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 20 \div 120$ в единицах межатомной длины при концентрации спинов $p = 1.00, 0.90$. Полученные численные данные свидетельствуют о том, что в пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с теорией. Внесение незначительного немагнитного беспорядка в рассматриваемую модель приводит к фазовому переходу второго рода. Методом кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммным анализом данных уточнено значение локализации для температуры T_l фазового перехода первого рода в неразбавленном режиме.

Ключевые слова: кумулянты Биндера, модель Поттса, метод Монте-Карло, фазовый переход

DOI: 10.31857/S0015323024080028 **EDN:** JWXSM

ВВЕДЕНИЕ

Использование новейших алгоритмов методов Монте-Карло, позволяющих имитировать поведение систем при различных условиях и взаимодействиях, а также возросшие вычислительные возможности современных компьютеров позволяют исследователям получить углубленное понимание фазовых переходов (ФП) и критических явлений в различных системах, проверить и уточнить теоретические модели [1]. Модель Поттса, основываясь на методах статистической механики, позволяет исследовать различные аспекты физических явлений, предсказать поведение сложных систем в зависимости от условий, анализировать их структуру и динамику, исследовать магнитные и критические свойства материалов. Интерес к модели Поттса обусловлен тем, что она служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред [2]. К их числу относятся сложные магнетики, сегнетоэлектрики, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси, а также адсорбция благородных газов на адсорбентах типа графита. Модель Поттса проста, но не три-

виальна в содержании и полностью отвечает основополагающему требованию, позволяющему изучать фазовые переходы и мультикритические явления [3]. Теория предполагает [2, 4], что в пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке должен наблюдаться ФП первого рода при температуре $T_l = 1.3445$. Однако справедливость этого значения T_l до настоящего времени для этой модели не была проверена. Кроме того, на этой модели можно проверить влияние немагнитного беспорядка на фазовый переход первого рода и изучить его особенности. В связи с этим основной целью настоящей работы является проверка справедливости теоретического предположения о роде и локализации температуры T_l ФП в пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

СЛАБО РАЗБАВЛЕННАЯ ПЯТИКОМПОНЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

В настоящей работе рассматривается слабо разбавленная пятикомпонентная ферромагнитная модель Поттса на треугольной решетке.

При построении этой модели необходимо иметь в виду следующие особенности [3]:

1. В узлах рассматриваемой решетки расположены спины S_i , которые могут ориентироваться в q -симметричных направлениях гипертетраэдра с размерностью $q-1$, так что углы между любыми двумя направлениями спинов равны.

2. Энергия связи между двумя узлами равна нулю, если они находятся в разных состояниях (безразлично, в каких именно) или хотя бы в одном узле размещен немагнитный атом, и равна $|J|$, если взаимодействующие узлы находятся в одинаковых состояниях (опять же, все равно, в каких именно). С учетом этих особенностей гамильтониан пятикомпонентной модели Поттса может быть представлен в следующем виде [3, 4]:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{i,j} \rho_i \rho_j \delta(S_i, S_j), \quad S_i = P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, \quad (1)$$

где J – параметр обменного ферромагнитного взаимодействия ближайших спинов, P_i – число различных состояний спина S_i , ρ_i – случайная величина, равная 1, если узел i занят магнитным атомом, и 0, если узел занят немагнитной примесью. Суммирование в выражении (1) ведется по ближайшим соседям. При компьютерном моделировании нами использован кластерный алгоритм Вольфа метода Монте-Карло [5]. Начальные конфигурации задавали таким образом, чтобы все спины находились в одинаковых состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние отсекали неравновесный участок длиной τ_0 для системы с линейным размером L . Этот неравновесный участок отбрасывали. В каждой цепи усреднение проводили по участку марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$. Для самой большой системы $L=120$, $\tau_0 = 1.8 \times 10^5$ МК шагов/спин в неразбавленном режиме и $\tau_0 = 2.2 \times 10^5$ МК шагов/спин в слабо разбавленном режиме при концентрации спинов $p=0.90$.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для наблюдения за температурным ходом внутренней энергии U , намагниченности m , магнитного вклада в теплоемкость C и магнитной восприимчивости χ использованы следующие соотношения [6, 7]:

$$U = \langle U \rangle = \frac{1}{N} \langle H \rangle, \quad (2)$$

$$m = \frac{q \left(\frac{N_{\max}}{N} \right) - 1}{q - 1}, \quad (3)$$

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

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

где $K=|J|/k_B T$, $N_{\max} = \max\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$, N_i – число спинов в состоянии с P_i , $N=pL^2$ – число магнитных узлов, угловые скобки означают термодинамическое усреднение. На рис. 1 представлены температурные зависимости внутренней энергии для пятикомпонентной модели Поттса для спиновых систем с линейными размерами $L \times L$, где $L=120$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превосходит размеров символов, используемых для обозначения зависимости. Как видно из рис. 1 для чистой системы ($p=1.0$) в области ФП наблюдается конечный скачок внутренней энергии, что характерно для ФП первого рода. Наличие незначительного беспорядка подавляет ФП первого рода.

На рис. 2, рис. 3 и рис. 4 представлены температурные зависимости теплоемкости C , восприимчивости χ и намагниченности m для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах соответственно.

Как видно из рис. 2 и рис. 3, в зависимостях теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры T в однородной системе, описываемой пятикомпонентной моделью Поттса, в точке фазового перехода проявляются “всплески”, характерные для фазового перехода первого рода. Внесение в систему немагнитных примесей приводит к уменьшению максимумов восприимчи-

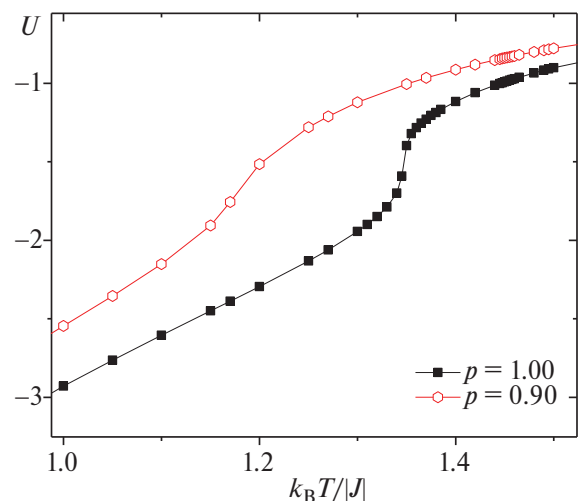


Рис. 1. Температурная зависимость внутренней энергии для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

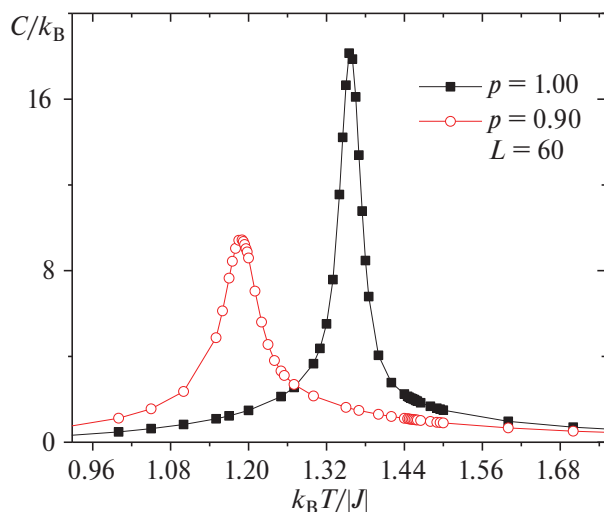


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

вости и теплоемкости и их смещению в сторону низких температур. Температурные зависимости намагниченности m для двух значений p приведены на рис. 4. Как видно из рисунка, наблюдается монотонное уменьшение намагниченности с ростом температуры и смещение их спада в сторону низких температур с внесением слабого беспорядка.

При компьютерном моделировании спиновой системы, для определения температуры фазового перехода T_i часто используют метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [8]:

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

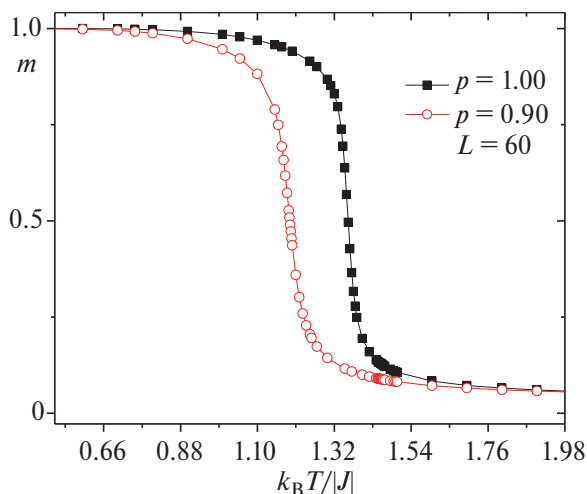


Рис. 4. Температурная зависимость намагниченности m для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

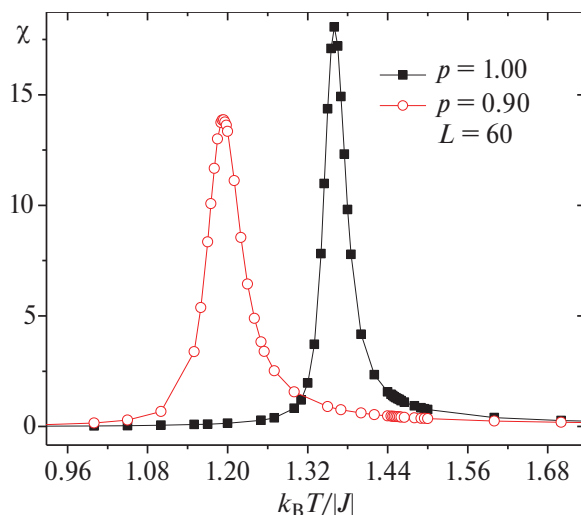


Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости χ для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в чистом и разбавленном режимах.

$$U_L(T, p) = 1 - \frac{\langle m^4(T, p; L) \rangle_L}{3 \langle m^2(T, p; L) \rangle_L^2}, \quad (7)$$

где E — энергия и m — намагниченность системы с линейным размером L . Выражения (6) и (7) позволяют определить T_i с большой точностью для фазовых переходов первого и второго рода соответственно. Также данный метод хорошо зарекомендовал себя и при определении рода ФП. Анализ численных данных с применением этого метода представлен в работах [9–11]. Отличительные черты, характерные для ФП первого рода [12]: величина $V_L(T)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению:

$$V(T, p) = V^* + bL^{-d}, \quad (8)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_i(L)$, где V^* отлична от $2/3$, что и продемонстрировано на рис. 5, вставка, для пятикомпонентной модели Поттса в неразбавленном режиме. Кроме того, из рис. 5 также видно, что положение минимумов кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ также стремится к значению $T_i = 1.344(1)$. Это значение в рамках погрешности находится в хорошем приближении с теоретическим значением $T_i = 1/K_c = 1.3445$, приведенным в работе [3]. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для пятикомпонентной модели Поттса от температуры для систем с разными линейными размерами L приведены на рис. 6. Как видно из рисунка, кумулянты Биндера не имеют ярко выраженной точки пере-

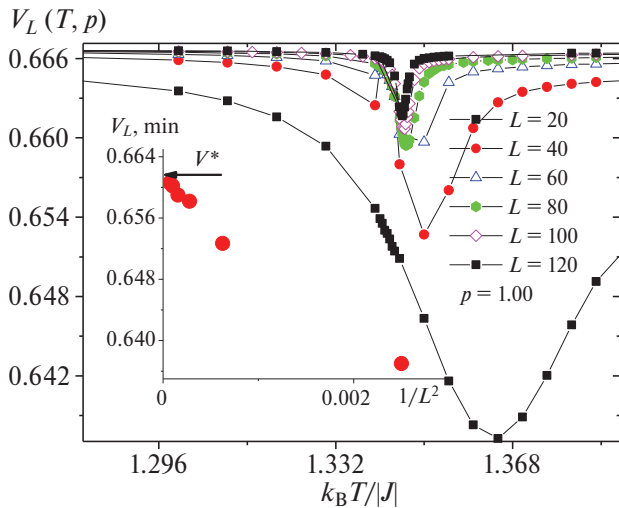


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T, p)$ для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке при $p=1.0$.

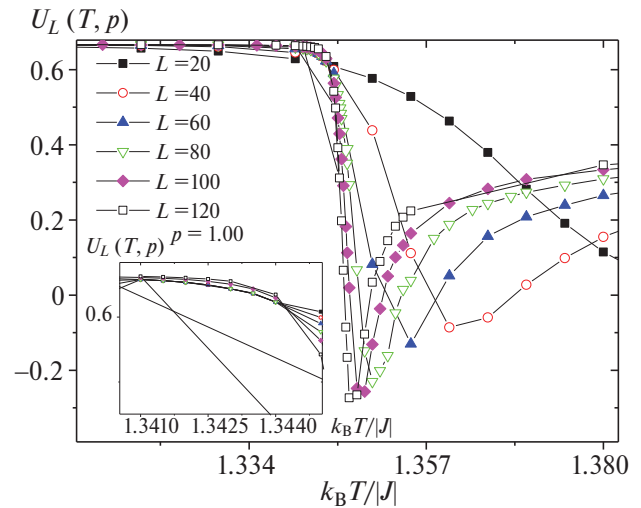


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке при $p=1.0$.

сечений в области фазового перехода, что свойственно для ФП первого рода.

Зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для пятикомпонентной модели Поттса от температуры для систем с разными линейными размерами L при наличии примесей $p=0.90$ приведены на рис. 7. Как видно из рисунка (см. вставку), все температурные зависимости $U_L(T, p)$ в критической области пересекаются в одной точке T_c , что является характерным для ФП второго рода.

Независимо от метода кумулянтов Биндера четвертого порядка нами проведен гистограмм-

ный анализ данных [7] для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке. Использование этого метода позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом кумулянтов Биндера четвертого порядка, но и определить ряд других критически важных параметров. В частности, минимальное значение величины L , которое необходимо использовать в вычислительном эксперименте для правильного определения рода фазового перехода.

Гистограммный анализ данных, проведенный для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке вблизи T_c , свидетельствует о фазовом переходе первого рода. Это продемонстрировано на рис. 8. Как видно из рисунка, бимодальность в распределении энергии наблюдается для систем с $L \geq 80$ и отсутствует для систем с $L=20$ и $L=40$, что говорит о целесообразности гистограммного анализа данных для систем, линейные размеры которых не меньше $L=80$. Наличие бимодальности в распределении энергии свойственно для фазового перехода первого рода. Отдельно проведен гистограммный анализ данных также для трех различных значений температуры вблизи T_c для системы с достаточно большим линейным размером $L=180$. Как видно из рис. 9, на зависимости вероятности P от энергии системы E наблюдается два ярко выраженных пика для всех рассмотренных значений температур.

Гистограммный анализ данных был проведен для пятикомпонентной модели Поттса в слабо

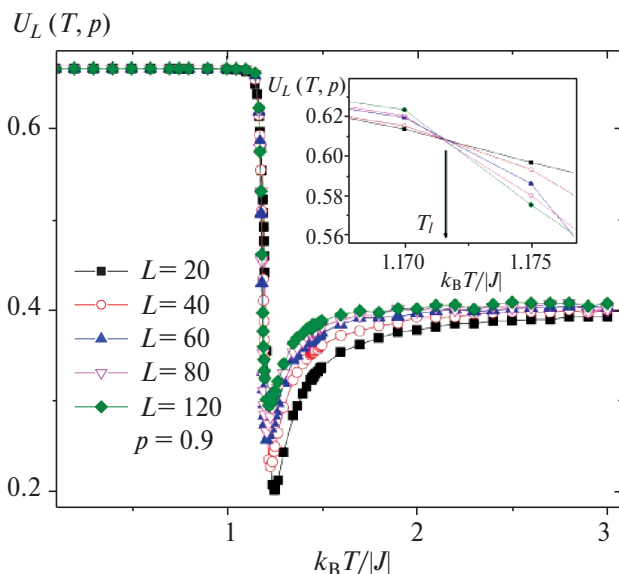


Рис. 7. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T, p)$ для слабо разбавленной пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке при $p=0.9$.

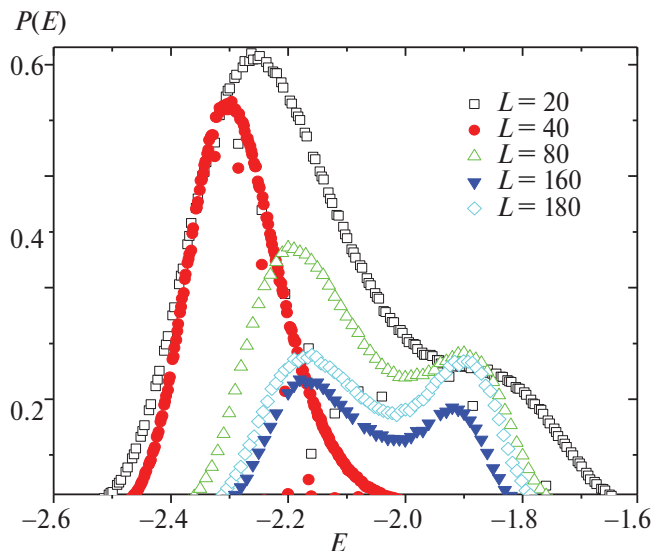


Рис. 8. Гистограмма распределения энергии для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке для различных размеров решетки L при $p=1.0$.

разбавленном режиме при концентрации спинов $p=0.90$. При этом бимодальность в распределении энергии обнаружить не удалось (рис. 10).

Таким образом, результаты моделирования пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке демонстрируют, что в ней наблюдается фазовый переход первого рода в чистом режиме. При этом с применением кумулянтов Биндера четвертого порядка уточнено значение температуры T_l для фазового перехода первого

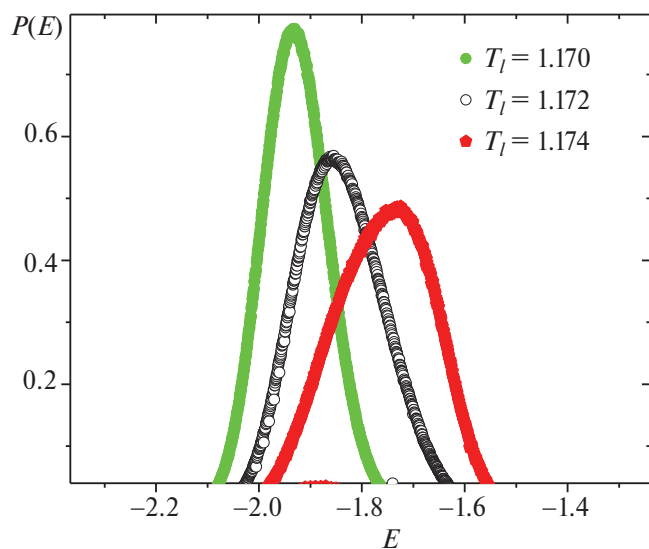


Рис. 10. Гистограмма распределения энергии для слабо разбавленной пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке для различных значений температур вблизи T_l при $p=0.9$.

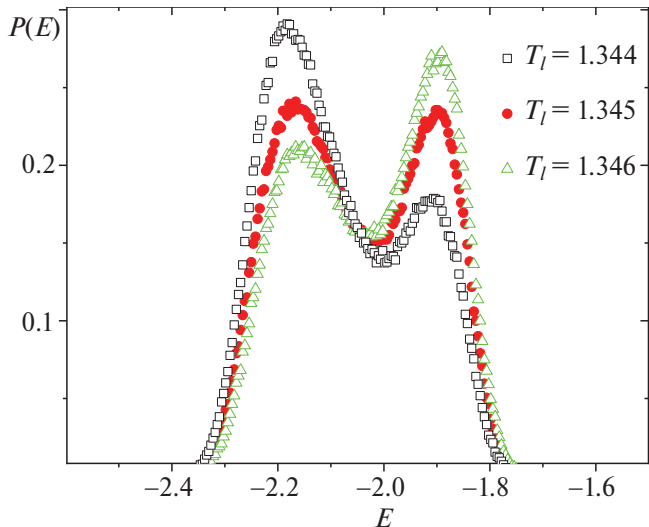


Рис. 9. Гистограмма распределения энергии для пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке для различных значений температур вблизи T_l при $p=1.0$.

рода. Внесение незначительного немагнитного беспорядка в рассматриваемую модель Поттса приводит к фазовому переходу второго рода. Показано, что гистограммный анализ данных является незаменимым инструментом для определения минимальных значений L и других критически важных параметров моделирования, позволяющих правильно определить род фазового перехода в пятикомпонентной модели Поттса.

Исследование термодинамических свойств пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке в широком интервале разбавления и выяснение причины смены фазового перехода первого рода на фазовый переход второго рода в этой модели будет являться предметом отдельного рассмотрения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с соблюдением единой методики на основе метода Монте-Карло исследованы термодинамические свойства чистой пятикомпонентной модели Поттса на треугольной решетке и фазовые переходы в различных режимах разбавления. Анализ полученных данных свидетельствует о том, что в рассматриваемой неразбавленной модели Поттса на треугольной решетке наблюдается фазовый переход первого рода в соответствии с предсказаниями аналитических теорий [3, 4, 14]. При этом уточнено значение температуры T_l для фазового перехода первого рода. Показано, что внесение слабого немагнитного беспорядка приводит к смене фа-

зового перехода первого рода на фазовый переход второго рода.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Шур Л.Н.* Вычислительная физика и проверка теоретических предсказаний // УФН. 2012. 182. Т. 7. С. 787–792.
2. *Wu F.Y.* Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. London: World Scientific, 2009. 660 p.
3. *Ермилов А.Н.* Аналитический метод исследования стохастической модели Поттса // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1989. Т. 20. Вып. 6. С. 1479–1544.
4. *Wu F.Y.* The Potts model // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. P. 235–268.
5. *Wolff U.* Collective Monte Carlo Updating for spin systems // Phys. Lett. 1989. V. 62. P. 361–364.
6. *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. 6087–6093.
7. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б.* Вычислительная физика и проблемы фазовых переходов. М.: Физматлит, 2023.
8. *Eichhorn K., Binder K.* Monte Carlo investigation of the three-dimensional random-field three-state Potts model // J. Phys.: Cond. Matter. 1996. V. 8. P. 5209–5227.
9. *Murtazaev A.K., Babaev A.B.* The critical behavior of the two-dimensional three-state Potts model on a triangular lattice with quenched disorder // Materials Letters. 2019. V. 238. P. 321–323.
10. *Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Атаева Г.Я.* Влияние замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке // ФТТ. 2015. Т. 57. № 7. С. 1410–1412.
11. *Бабаев А.Б., Ризванова Т.Р., Муртазаев А.К.* Термодинамические и магнитные свойства трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей // ФТТ. 2017. Т. 59. № 12. С. 2416–2419.
12. *Loison D. and Schotte K.D.* First and second order transition in frustrated XY systems // Euro. Phys. J. B. 1998. 5. P. 735–743.
13. *Alves N.A., Berg B.A. and Villanova R.* Ising-model Monte Carlo simulations: Density of states and mass gap // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 383–394.
14. *Бекстеп Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 486 с.

SIMULATION OF THE FIVE-COMPONENT POTTS MODEL ON TRIANGULAR LATTICE BY THE MONTE CARLO METHOD IN PURE AND DILUTED MODES

G. Ya. Ataeva^{1,*}, A. B. Babaev¹, and A. K. Murtazaev¹

¹*Amirkhanov Institute of Physics, Dagestan Federal Research Center, Russian Academy of Sciences, Makhachkala, 367030 Russia*

*e-mail: ataeva20102014@mail.ru

The Monte Carlo method is used to simulate the five-component Potts model on a triangular lattice in pure and diluted modes. Systems with linear dimensions $L \times L = N$ and $L = 20 \div 120$ in units of interatomic length are considered at spin concentration $p = 1.00$ and 0.90 . The obtained numerical data show that a phase transition of the first kind is observed in the five-component Potts model on a triangular lattice according to the theory. Introduction of an insignificant nonmagnetic order into the considered model leads to the phase transition of the second kind. The fourth-order method of Binder cumulants and the histogram analysis are used to refine the value of localization of the temperature T_l of phase transition of the first kind in the undiluted mode.

Keywords: Binder cumulants, Potts model, Monte Carlo method, phase transition