

## Фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса при $q = 3$ на треугольной решетке

А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, А.Б. Бабаев<sup>1,3</sup>, Г.Я. Атаева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН  
ул. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия

<sup>2</sup>Дагестанский государственный университет, ул. М. Гаджиева, 43а, г. Махачкала, 367025, Россия

<sup>3</sup>Дагестанский государственный педагогический университет, г. Махачкала, 367003, Россия  
E-mail: b\_albert78@mail.ru

Статья поступила в редакцию 11 июня 2012 г., после переработки 9 августа 2012 г.

Методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке. Рассмотрены системы с линейными размерами  $L = 20$ – $120$ . Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка, показано, что в двумерной ферромагнитной модели Поттса наблюдается фазовый переход второго рода. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ , намагниченности  $\beta$  и индекса радиуса корреляции  $\nu$ .

Методом Монте-Карло досліджено фазові переходи в двовимірній ферромагнітній моделі Поттса з числом станів спіна  $q = 3$  на трикутній ґратці. Розглянуто системи з лінійними розмірами  $L = 20$ – $120$ . Використовуючи метод кумулянтів Біндера четвертого порядку, показано, що в двовимірній ферромагнітній моделі Поттса спостерігається фазовий перехід другого роду. На основі теорії кінцево-розмірного скейлінга розраховано статичні критичні індекси теплоємності  $\alpha$ , сприйнятливості  $\gamma$ , намагніченості  $\beta$  та індексу радіуса кореляції  $\nu$ .

PACS: 75.40.Cx Статические свойства (параметр порядка, статическая восприимчивость, теплоемкость, критические индексы и т.д.);  
75.40.Mg Численное моделирование.

Ключевые слова: модель Поттса, фазовый переход, критические явления.

### Введение

Современная теория фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в основном базируется на идеях, заложенных в гипотезе скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы [1,2]. Несмотря на серьезные результаты, полученные при исследовании ФП и КЯ в трехмерных спиновых системах, низкоразмерные системы все еще остаются слабоизученными. В частности, много вопросов вызывают критические свойства двумерных спиновых решеточных систем, описываемых моделями Поттса. Отметим, что успехи, достигнутые в последние годы при изучении ФП и КЯ в спиновых системах, во многом связаны с применением методов вычислительной физики [3,4].

В настоящей работе методом Монте-Карло (МК) исследованы фазовые переходы и термодинамические

свойства двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке.

Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого ряда разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, многокомпонентные сплавы, жидкие смеси и различные адсорбированные пленки. В частности, адсорбция инертных газов на адсорбентах типа графита может описываться моделями решеточного газа Поттса. Такие физически адсорбированные пленки дают экспериментальную реализацию ФП в двумерных системах [5,6].

Несмотря на интенсивные теоретические исследования двумерных спиновых решеточных систем, описываемых моделями Поттса в течение последних тридцати лет, к настоящему времени существует совсем

немного надежно установленных фактов. Известно, что в чистой модели Поттса с состоянием  $q > q_c(d)$ , где  $d$  — размерность системы, наблюдается ФП первого рода, а ФП второго рода в случае  $q < q_c(d)$  [5,7]. Для двумерной модели Поттса величина  $q_c(d=2) = 4$  [7], в то время как для трехмерной модели  $q_c(d=3) = 2,45$  [8]. Причем для  $q_c(d=2) = 4$  наблюдается ФП второго рода, а для  $q_c(d=3) = 2,45$  — слабовыраженный ФП первого рода.

Приведем формулировку двумерной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке.

При построении такой модели необходимо иметь в виду следующие особенности.

1. В узлах двумерной треугольной решетки расположены спины  $S_i$ , которые могут находиться в одном из  $q \geq 2$  состояний.

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 микроскопической гамильтониан такой системы может быть представлен в виде [6]

$$H = -\frac{1}{2} J \sum_{i,j} \delta(S_i, S_j), \quad S_i = 1, 2, 3, \quad (1)$$

где  $J$  — параметр обменного ферромагнитного ( $J > 0$ ) взаимодействия,

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

Кластерные алгоритмы метода МК [9,10] хорошо зарекомендовали себя при изучении критических явлений в различных системах и моделях [11,12]. Критические параметры, рассчитанные на основе данных, которые получены с помощью кластерных алгоритмов, обладают высокой точностью и надежностью [11]. Из всех вариантов кластерных алгоритмов метода МК наиболее эффективным на сегодняшний день, по-видимому, является алгоритм Вольфа [9]. Этот алгоритм был использован нами для исследования двумерной ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке. Более подробные сведения о реализации алгоритма Вольфа даны нами в следующих работах [4,13–16].

Исследованы системы с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 20$ –120. Начальные конфигурации задавали таким образом, чтобы все спины были в одинаковом состоянии. Для вывода системы в равновесное состояние вычисляли время релаксации  $\tau_0$  для всех систем с линейными размерами  $L$ . Затем усреднение проводили по участку марковской цепи длиной

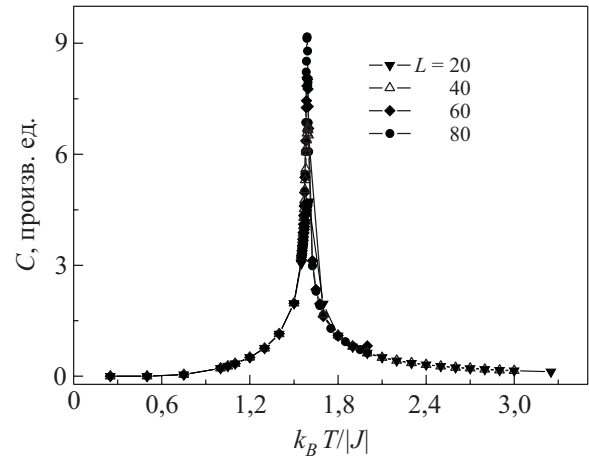


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости  $C$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке.

$\tau = 150\tau_0$ . Кроме того, для повышения точности расчетов усредняли по 10-ти различным начальным конфигурациям.

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовали флуктуационные соотношения [17]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (2)$$

$$\chi = (NK)(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (3)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N = L^3$  — число магнитных узлов,  $U$  — внутренняя энергия,  $m$  — намагниченность, угловые скобки означают термодинамическое усреднение. В качестве намагниченности для ферромагнитной модели Поттса использовали следующее выражение [18]:

$$m = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha=1}^3 \left( \frac{N_{\alpha}}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \quad (4)$$

где  $N_{\alpha} = \{N_1, N_2, N_3\}$ ,  $N_{\alpha}$  — число спинов в состоянии с  $q = \alpha$ .  $N = L^3$ .

На рис. 1 представлены характерные зависимости теплоемкости  $C$  от температуры  $T$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  для систем с линейными размерами  $L = 20$ ; 40; 60; 80. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превосходит размеров символов, используемых для обозначения зависимости. Отметим, что в температурных зависимостях теплоемкости  $C$  для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну температуру.

Для анализа характера фазового перехода использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [19,20]:

$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (5)$$

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

где  $E$  — энергия и  $m$  — намагниченность системы с линейным размером  $L$ . Выражения (5) и (6) позволяют определить  $T_c$  с большой точностью в фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип фазового перехода в системе. Известно, что фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [21]: усредненная величина  $V_L(T)$  стремится к некоторому нетривиальному значению  $V^*$  согласно выражению

$$V(T) = V^* + bL^{-d} \quad (7)$$

при  $L \rightarrow \infty$  и  $T = T_c(L)$ , где  $V^*$  отлична от  $2/3$ , а минимальная величина  $V_{L,\min}(T = T_{\min})$  расходится:  $V_{L,\min}(T = T_{\min}) \rightarrow -\infty$  при  $L \rightarrow \infty$ . Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса от температуры для систем с разными линейными размерами  $L$  приведены на рис. 2. Как видно на рисунке, в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения, что и свидетельствует о ФП второго рода. Кроме того, этот рисунок демонстрирует, насколько точно можно определить критическую температуру  $T_c$ . На рис. 3 представлены температурные зависимости  $V_L(T)$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса. Как видно на

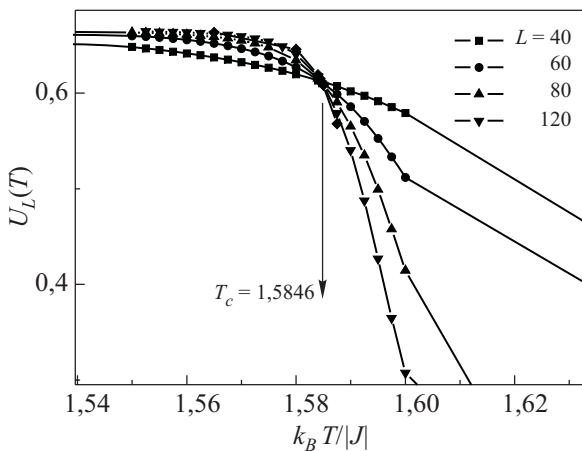


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянтов Биндера  $U_L(T)$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$ .

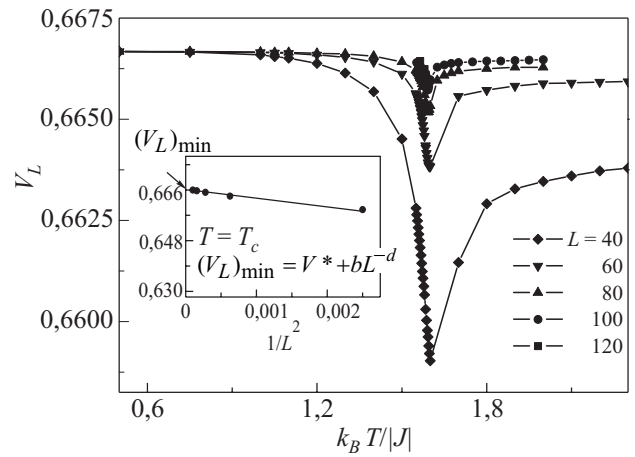


Рис. 3. Температурная зависимость энергетических кумулянтов Биндера  $V_L(T)$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$ .

вставке этого рисунка, в критической области  $V_L(T)$  не стремится к нетривиальному значению  $V_L^*(T)$ , а стремится к  $2/3$ , что и характерно для ФП второго рода.

Для всех рассмотренных систем, в которых наблюдается ФП второго рода, нами на основе теории конечноразмерного скейлинга (КРС) рассчитывались статические критические индексы (КИ) теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$  и намагниченности  $\beta$ . Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре  $T$ , близкой к  $T_c$  бесконечно большой системы, может быть представлена в виде [22]

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \quad (8)$$

где  $t = |T - T_c|/T_c$ ,  $T_c = T_c(L = \infty)$  и  $\nu$  — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ( $L = \infty$ ).

Уравнение (8) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящихся на один спин

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \quad (9)$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \quad (10)$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \quad (11)$$

где  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\beta$  — статические критические индексы для системы с  $L = \infty$ , связанные соотношением гиперскейлинга:  $2 - \alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$  [1,23].

Кроме того, в настоящее время на основе теории конечноразмерного скейлинга предложен целый ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции  $\nu$  [24]. В соответствии с этой теорией в точке фазового перехода выполняется соотношение

$$V_n = L^{1/\nu} gV_n, \quad (12)$$

где  $gV_n$  — некоторая постоянная, а в качестве  $V_n$  могут выступать:

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i = 1, 2, 3), \quad (13)$$

$$V_3 = \frac{dU_L}{d\beta} = \frac{1}{3\langle m^2 \rangle^2} \left[ \langle m^4 \rangle \langle E \rangle - 2 \frac{\langle m^4 \rangle \langle m^2 E \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} + \langle m^2 E \rangle \right], \quad (14)$$

где  $\beta = 1/T$ ,  $T$  — температура.

Из соотношений (10), (11) следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T = T_c$  и достаточно больших  $L$  восприимчивость и намагниченность удовлетворяют следующим аналитическим выражениям:

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (15)$$

$$m \sim L^{-\beta/\nu}. \quad (16)$$

Эти соотношения мы использовали для определения величин  $\gamma$  и  $\beta$ . Аналогичное выражение для теплоемкости не описывает наблюдаемые на практике результаты, что было продемонстрировано в работах [24,25]. Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$  как правило используются другие выражения, например [17]:

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \quad (17)$$

где  $A$  — некоторый коэффициент.

Для расчета КИ  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\nu$  построены зависимости  $C$ ,  $m$ ,  $\chi$ , и  $V_n$  от  $L$ . Анализ данных, выполненный с использованием нелинейного метода наименьших квадратов, позволил определить значения  $\alpha/\nu$ ,  $\beta/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  и  $1/\nu$ . Затем с использованием значений  $\nu$ , полученных в рамках данного исследования, определены индексы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ .

На рис. 4 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость восприимчивости от линейных размеров решетки  $L$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке.

Обратим внимание на то, что данные, полученные для восприимчивости, не отклоняются от прямой даже при малых значениях  $L$ . Очевидно, что использованное

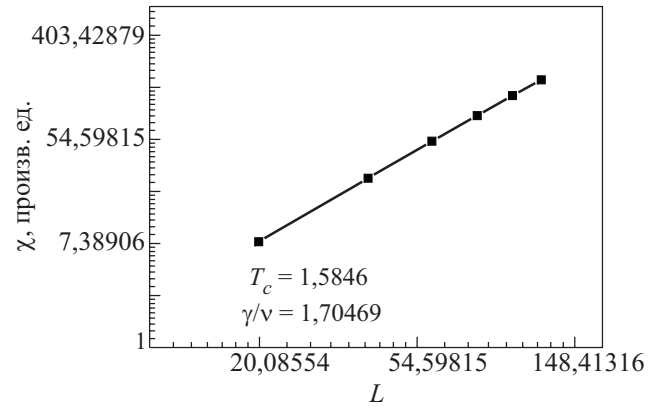


Рис. 4. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  для двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$  при  $T = T_c$ .

для усреднения количество различных начальных конфигураций и размеры  $L \geq 20$  изучаемых систем позволяют достичь асимптотического критического режима. Очень важным моментом является и то, что индекс  $\nu$  вычислялся непосредственно из результатов численного эксперимента в рамках настоящего исследования, тогда как во многих других работах этот индекс определялся из различных скейлинговых соотношений.

Значения КИ, полученные в результате исследований, представлены в табл. 1. Приведенные численные значения критических индексов для теплоемкости  $\alpha$  и намагниченности  $\beta$  вполне соответствуют известным данным, полученным в работах [5,18,26]. Критический индекс для восприимчивости  $\gamma$  для этой модели, по-видимому, вычислен впервые нами. Заметим, что критическая температура  $T_c = 1,5846$ , определенная в настоящей работе, практически совпадает с точным значением, полученным Бакстером [5,26] для вершинных моделей на треугольной решетке.

В данной работе с соблюдением единой методики исследованы фазовые переходы в двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке. Полученные данные свидетельствуют о следующем.

1. В двумерной ферромагнитной модели Поттса с  $q = 3$  на треугольной решетке наблюдается фазовый переход второго рода.

2. Определен полный набор статических критических индексов для двумерной ферромагнитной моде-

Таблица 1. Критические индексы двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина  $q = 3$  на треугольной решетке, определенные на основе теории конечно-размерного скейлинга

Критический параметр	$k_B T_c / J$	$1/\nu$	$\nu$	$\alpha/\nu$	$\alpha$	$\gamma/\nu$	$\gamma$	$\beta/\nu$	$\beta$
Наши данные	1,5846	1,1723	0,8530	0,3519	0,3002	1,7047	1,4541	0,1245	0,1060
[18]	1,88503		1,3(2)		0,31(1)				0,10(1)
[5,26]	1,5849				0,3333				0,1111

ли Поттса с  $q = 3$  на треугольной решетке и показано, что они в пределах погрешности численного эксперимента достаточно хорошо согласуются с данными других авторов.

Работа поддержана грантом РФФИ (№10-02-00130-а, 12-02-96504-р-юг-а) и выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. (госконтракт №П559 и №02.270.11.03.97), «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России» на 2007–2013 гг. (госконтракт №16.552.11.7051).

1. А.З. Паташинский, В.Л. Покровский, *Флуктуационная теория фазовых переходов*, Наука, Москва (1982).
2. В.С. Доценко, *УФН* **165**, 481 (1995).
3. Р. Фольк, Ю. Головач, Т. Яворский, *УФН* **173**, 175 (2003).
4. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **126**, 1377 (2004) [*JETP* **99**, 1201 (2004)].
5. F.Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
6. А.Н. Ермилов, *Физика элементарных частиц и атомного ядра* **20**, 1379 (1989).
7. M. Loulidi, *Physica A* **287**, 177 (2000).
8. A.J. Guttmann and I.G. Enting, *J. Phys. A* **27**, 5801 (1994).
9. U. Wolff, *Phys. Lett.* **62**, 361 (1989).
10. J.-S. Wang and R.H. Swendsen, *Physica A* **167**, 565 (1990).
11. D. Loison, *Phys. Lett. A* **257**, 83 (1999).
12. В.В. Прудников, П.В. Прудников, А.Н. Вакилов, А.С. Криницин, *ЖЭТФ* **132**, 417 (2007).
13. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ЖЭТФ* **136**, 516 (2009) [*JETP* **109**, 442 (2009)].
14. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФТТ* **50**, 703 (2008) [*Phys. Solid State* **50**, 733 (2008)].
15. А.К. Муртазаев and А.В. Бабаев, *J. Magn. Magn. Mater.* **321**, 2630 (2009).
16. А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова, *ФНТ* **37**, 167 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 134 (2011)].
17. P. Peczac, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
18. Y. Saito, *J. Phys. A* **15**, 1885 (1982).
19. K. Binder, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 693 (1981).
20. K. Eichhorn and K. Binder, *J. Phys.: Condens. Matter* **8**, 5209 (1996).
21. D. Loison and K.D. Schotte, *Eur. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
22. M.E. Fisher and M.N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
23. Ш. Ма, *Современная теория критических явлений*, Мир, Москва (1980).
24. A. Mailhot, M.L. Plumer, and A. Caille, *Phys. Rev. B* **50**, 6854 (1994).
25. А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, А.К. Магомедов, *ЖЭТФ* **120**, 1535 (2001).
26. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).

### Phase transitions in two-dimensional ferromagnetic Potts model with $q = 3$ on a triangular lattice

A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, and G.Y. Ataeva

Phase transitions in the two-dimensional ferromagnetic Potts model with a number of spin states  $q = 3$  on a triangular lattice are studied by the Monte-Carlo method. The systems of linear size  $L = 20-120$  are considered. The method of fourth order Binder cumulants is used to show that the second order phase transition can be observed in the two-dimensional ferromagnetic Potts model. The static critical exponents of heat capacity  $\alpha$ , susceptibility  $\gamma$ , magnetization  $\beta$  and the correlation radius index  $\nu$  are calculated on the basis of the finite-size scaling theory.

PACS: 75.40.Cx Static properties (order parameter, static susceptibility, heat capacities, critical exponents, etc.);  
75.40.Mg Numerical simulation studies.

Keywords: Potts model, phase transition, critical phenomena.