

С.В. Сёмкин¹
В.П. Смагин²

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса.
Владивосток. Россия

Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете*

Рассмотрена модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете с произвольным координационным числом. Методом самосогласованных уравнений для этой модели найдена температура фазового перехода, температурная зависимость параметра порядка, парная корреляционная функция и корреляционная длина. Показано, что фазовый переход является переходом первого рода, корреляционная длина не имеет расходимости в точке фазового перехода, но принимает в этой точке максимальное значение.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы, перколяционная кривая, модель Поттса, решетка Бете.

S.V. Semkin
V.P. Smagin

Vladivostok State University of Economics and Service.
Vladivostok. Russia

Potts model with three states on a Bethe lattice

The three-state Potts model on a Bethe lattice with arbitrary coordination number is reviewed. By the method of self-consistent equations for this model the phase transition temperature, the temperature dependence of the order parameter, the pair correlation function and correlation length were found. It is shown that the phase transition is of first order, the correlation length has no divergence in the phase transition point, but at this point takes the maximum value.

Keywords: phase transitions, percolation curve, Potts model, Bethe lattice.

Введение

Модель Поттса [1] – одна из наиболее часто используемых моделей в статической физике, она является теоретическим инструментом, применяемым для изучения широкого класса явлений в физике конденсированных сред [2, 3]. Точных результатов для модели Поттса существует немного. Известно, что если число спиновых состояний в модели Поттса больше некоторого критического значения (зависящего от размерности решетки), наблюдается фазовый переход первого рода, а если меньше – второго рода [1].

¹ Сёмкин Сергей Викторович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры информационных технологий и систем; e-mail: Li15@rambler.ru.

² Смагин Виктор Павлович – д-р физ.-мат. наук, зав. лаб. геофизических полей; e-mail: Li15@rambler.ru.

В настоящей работе мы построим точное решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете с произвольным координационным числом методом самоогласованных уравнений [4, 7]. Метод самоогласованных уравнений позволяет строить различные приближенные решения для модели Изинга как чистого, так и разбавленного магнетиков [5, 6, 7]. Этим же методом можно строить и приближенные решения для модели Поттса, основываясь на том, что модель Поттса с тремя состояниями можно рассматривать как частный случай модели Изинга с подвижными немагнитными примесями [7]. Оказывается, что одно из таких решений можно интерпретировать как точное решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете. Для этого случая мы в настоящей работе найдем температуру фазового перехода, температурную зависимость параметра порядка, парную корреляционную функцию и корреляционную длину как функцию температуры.

Модель Изинга с подвижными примесями и модель Поттса с тремя состояниями

Рассмотрим кристаллическую решетку с координационным числом qq , в узлах которой могут находиться магнитные и немагнитные атомы (атомы типа 1 и 2 соответственно). Будем полагать, что магнитные атомы и атомы примеси могут перемещаться по узлам решетки. С каждым магнитным атомом связан изинговский спин $s_i = \pm 1s_i = \pm 1$, так что энергия обменного взаимодействия двух магнитных атомов со спинами $s_i s_i$ и $s_j s_j$ есть $-Js_i s_j - Js_i s_j$, если атомы расположены в соседних узлах решетки, и равна нулю в противном случае. Допустим, что в системе, кроме обменного взаимодействия, существуют межатомные силы с быстро спадающим на больших расстояниях потенциалом, так что радиус их действия ограничен первой координационной сферой. Обозначим потенциал этих сил $-U_{\alpha\beta} - U_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta = 1, 2, \alpha, \beta = 1, 2$. Если теперь сопоставить каждому узлу решетки переменную $\sigma_i \sigma_i$, равную $s_i s_i$, когда в данном узле находится магнитный атом, и нулю, когда немагнитный, то энергию обменного взаимодействия $E_{sx} E_{sx}$ и энергию $E_k E_k$ межатомного взаимодействия можно записать в виде сумм по всем упорядоченным парам соседних узлов:

$$E_{sx} = -\sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j E_{sx} = -\sum_{(i,j)} J \sigma_i \sigma_j,$$

$$E_k = -\sum_{(i,j)} \{U_{11} \sigma_i^2 \sigma_j^2 + U_{22} (1 - \sigma_i^2) (1 - \sigma_j^2) + U_{12} [\sigma_i^2 (1 - \sigma_j^2) + \sigma_j^2 (1 - \sigma_i^2)]\}$$

$$E_k = -\sum_{(i,j)} \{U_{11} \sigma_i^2 \sigma_j^2 + U_{22} (1 - \sigma_i^2) (1 - \sigma_j^2) + U_{12} [\sigma_i^2 (1 - \sigma_j^2) + \sigma_j^2 (1 - \sigma_i^2)]\}.$$

Последнее выражение, с точностью до аддитивной константы, можно записать в виде:

$$E_k = -\sum_{(i,j)} U \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sum_i f \sigma_i^2$$

где $U = U_{11} + U_{22} - 2U_{12}$, $f = q(U_{12} - U_{22})$.

Учитывая, что число магнитных атомов в решетке есть $\sum_i \sigma_i^2$, запишем большую статистическую сумму системы следующим образом:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{(\sum_{(i,j)}(J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i)/kT\right\}$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left\{(\sum_{(i,j)}(J\sigma_i\sigma_j + U\sigma_i^2\sigma_j^2) + (f + \mu) \sum_i \sigma_i^2 + H_e \sum_i \sigma_i)/kT\right\} \quad (1)$$

где μ – химический потенциал, $H_e H_e$ – внешнее магнитное поле, а суммирование производится по всем возможным конфигурациям $\{\sigma\}$.

Введем величины $p = \langle \sigma_i^2 \rangle = \langle \sigma_i^2 \rangle$ и $M = \langle \sigma_i \rangle / pM = \langle \sigma_i \rangle / p$. Ясно, что эти величины не зависят от i , поскольку все узлы решетки эквивалентны (в термодинамическом пределе) и имеют простой смысл: pp – вероятность того, что в данном узле находится магнитный атом (концентрация), MM – среднее значение его спина.

Модель Поттса [1] формулируется следующим образом. Каждому узлу решетки поставим в соответствие величину $\sigma_i \sigma_i$ («спин»), которая может принимать n различных значений, скажем, $1, 2, \dots, n$. Два соседних спина $\sigma_i \sigma_i$ и $\sigma_j \sigma_j$ взаимодействуют с энергией $-J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j) - J_p \delta(\sigma_i, \sigma_j)$ где

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases}$$

Поэтому полная энергия равна

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j) E = -J_p \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j),$$

где суммирование распространяется на все ребра решетки. Статистическая сумма имеет вид

$$Z = \sum \exp\left\{\frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j)\right\} Z = \sum \exp\left\{\frac{J_p}{kT} \sum_{(i,j)} \delta(\sigma_i, \sigma_j)\right\} \quad (2)$$

Нетрудно показать [1], что модель Поттса с $n = 2n = 2$ эквивалентна обычной модели Изинга в отсутствие внешнего поля. Покажем, что статистическая сумма модели Поттса (2) с $n = 3n = 3$ является частным случаем (1). Действительно, пусть каждый спин $\sigma_i \sigma_i$ может принимать значения -1, 0, 1. Тогда энергию взаимодействия двух спинов можно записать так:

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\}$$

$$E_{ij} = -J_p \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 - \sigma_i^2 - \sigma_j^2 + 1 \right\} \quad (3)$$

а энергию всей системы (с точностью до постоянной):

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + qJ_p \sum_i \sigma_i^2$$

$$E = -J_p \sum_{(i,j)} \left\{ \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j + \frac{3}{2} \sigma_i^2 \sigma_j^2 \right\} + qJ_p \sum_i \sigma_i^2 \quad (4)$$

То есть, если в (1) принять $J = J_p/2J = J_p/2$, $U = 3J_p/2U = 3J_p/2$ и $f + \mu = -qJ_p f + \mu = -qJ_p$, то как раз получим из (1) статсумму модели Поттса

са с $n = 3n = 3$. Обозначим вероятность того, что в данном узле решетки спин будет обнаружен в состоянии $\alpha\alpha$, через $p_{(\alpha)}p_{(\alpha)}$ ($\alpha = -1, 0, 1$). Тогда, если $Mp = \langle \sigma_i \rangle Mp = \langle \sigma_i \rangle$, $p = \langle \sigma_i^2 \rangle p = \langle \sigma_i^2 \rangle$, то $p_{(+1)} = p \frac{1+M}{2} p_{(+1)} = p \frac{1+M}{2}$, $p_{(-1)} = p \frac{1-M}{2} p_{(-1)} = p \frac{1-M}{2}$, $p_{(0)} = 1 - pp_{(0)} = 1 - p$.

Решение задачи с гамильтонианом (1) на решетке Бете можно получить следующим способом [7]. Рассмотрим некоторый ii -й узел решетки. Определим локальное обменное $h_i h_i$ и кристаллическое $\varphi_i \varphi_i$ поля ii -го узла как $h_i = \sum \sigma_j$, $h_i = \sum \sigma_j$ и $\varphi_i = \sum \sigma_j^2 \varphi_i = \sum \sigma_j^2$ (суммирование производится по всем соседним к ii -му узлам). Величины $h_i h_i$ и $\varphi_i \varphi_i$ будем рассматривать как значения случайных величин hh и $\varphi\varphi$ с совместной функцией распределения $W(h, \varphi)W(h, \varphi)$. Тогда средние по ансамблю $\langle \sigma_i \rangle = pM \langle \sigma_i \rangle = pM$ и $\langle \sigma_i^2 \rangle = p \langle \sigma_i^2 \rangle = p$ вычисляются так:

$$\langle \sigma_i \rangle = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh+h_g)}{\text{ch}(Kh+h_g)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)} \langle \sigma_i \rangle = \left\langle \frac{\text{sh}(Kh+h_g)}{\text{ch}(Kh+h_g)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)} \quad (5)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh+h_g)}{\text{ch}(Kh+h_g)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)} \langle \sigma_i^2 \rangle = \left\langle \frac{\text{ch}(Kh+h_g)}{\text{ch}(Kh+h_g)+e^{-L\varphi-r/2}} \right\rangle_{W(h,\varphi)} \quad (6)$$

где $K = J/kTK = J/kT$, $L = U/kTL = U/kT$, $h_g = H_g/kTh_g = H_g/kT$, $r = (f + \mu)/kTr = (f + \mu)/kT$.

Рассмотрим теперь кластер, состоящий из двух соседних узлов, и введем обменные $h_1 h_1$ и $h_2 h_2$ и кристаллические $\varphi_1 \varphi_1$ и $\varphi_2 \varphi_2$ поля для каждого узла кластера. Найдем средние значения величин $(\sigma_1 + \sigma_2)/2$ и $(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)/2$ по ансамблю с гамильтонианом

$$E_2(\sigma_1, \sigma_2) = -J\sigma_1\sigma_2 - Jh_1\sigma_1 - Jh_2\sigma_2 - U\sigma_1^2\sigma_2^2 - U\varphi_1\sigma_1^2 - U\varphi_2\sigma_2^2 - \mu(\sigma_1^2 + \sigma_2^2) - H_g(\sigma_1 + \sigma_2)$$

рассматривая $h_1 h_1, h_2 h_2, \varphi_1 \varphi_1$ и $\varphi_2 \varphi_2$ как постоянные. Затем введем совместную функцию распределения $W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)$ и усредним результат по этой функции:

$$pM = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}$$

$$pM = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1 + \sigma_2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (7)$$

$$p = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)}$$

$$p = \left\langle \frac{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)}{\sum_{\sigma_1, \sigma_2} \exp(-E_2(\sigma_1, \sigma_2)/kT)} \right\rangle_{W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2)} \quad (8)$$

Используем следующие выражения для функций распределения полей:

$$W(h, \varphi) = \delta(h - q\rho m) \delta(\varphi - q\rho) W(h, \varphi) = \delta(h - q\rho m) \delta(\varphi - q\rho),$$

$$W_2(h_1, h_2, \varphi_1, \varphi_2) = \delta(h_1 - (q-1)\rho m) \delta(h_2 - (q-1)\rho m) \delta(\varphi_1 - (q-1)\rho) \delta(\varphi_2 - (q-1)\rho)$$

где mm и $\rho\rho$ некоторые неизвестные параметры.

Тогда из (5)–(8) получим

$$M = \text{th}\left(\frac{qW-h_\varepsilon}{q-1}\right) M = \text{th}\left(\frac{qW-h_\varepsilon}{q-1}\right) \quad (9)$$

$$p = \frac{2y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}} p = \frac{2y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}}{2y^2 e^{(1+\gamma)K} + 4y \text{ch}(w) + \text{ch}(2w) + e^{-2K}} \quad (10)$$

$$\mu = -kT \ln(2y^q e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1} (1-M^2)^{\frac{q-1}{2}})$$

$$\mu = -kT \ln(2y^q e^{q(1+\gamma)K} \left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1} (1-M^2)^{\frac{q-1}{2}}) \quad (11)$$

где

$$y = \frac{1}{2}(1 - e^{-2K}) \frac{\text{sh}\left(\frac{qW-h_\varepsilon}{q-1}\right)}{\text{sh}\left(\frac{W-h_\varepsilon}{q-1}\right)} - \text{ch}(w) y = \frac{1}{2}(1 - e^{-2K}) \frac{\text{sh}\left(\frac{qW-h_\varepsilon}{q-1}\right)}{\text{sh}\left(\frac{W-h_\varepsilon}{q-1}\right)} - \text{ch}(w) \quad (12)$$

$$w = K(q-1)\rho m + h_\varepsilon w = K(q-1)\rho m + h_\varepsilon, \quad y = e^{-K-L-L(q-1)\rho-r/2}$$

$$y = e^{-K-L-L(q-1)\rho-r/2}, \quad \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J} \gamma = \frac{L}{K} = \frac{U}{J}.$$

Эти уравнения представляют собой параметрические зависимости $M = M(w, h_\varepsilon)$, $p = p(w, h_\varepsilon, K)$ и $\mu = \mu(w, h_\varepsilon, K)$. Параметр w меняется в пределах от h_ε до такого значения w^* , при котором y (формула 12) обращается в ноль.

Можно показать, что уравнения (9)–(12) дают точное решение задачи об изинговском магнетике с подвижными примесями на решетке Бете. Статистическую сумму (1) на решетке Бете можно вычислить тем же способом, что и статсумму обычной модели Изинга на этой решетке [1]. Оказывается, что такой расчет приводит к уравнениям, эквивалентным (9)–(12).

Для того чтобы перейти к модели Поттса с тремя состояниями нужно, в соответствии со сказанным выше, сделать в (9)–(12) замену $K = K_p/2$, $\gamma = 3\gamma$, $r = -qK_p r$, $h_\varepsilon = 0$. Анализ уравнений, полученных в результате этой замены, дает следующее. Существует критическая температура T_c , такая, что при $T > T_c$ имеется только симметричное решение $p_{(+1)} = p_{(-1)} = p_{(0)} = \frac{1}{3}$. При $T < T_c$ появляются решения двух типов. В решении первого типа одна из концентраций, например $p_{(0)}$, делается больше $p_{(+1)}$ и $p_{(-1)}$, причем $p_{(+1)} = p_{(-1)}$, а при понижении температуры $p_{(0)} \rightarrow 1$, $p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow 0$. В решении второго типа две концентрации, например, $p_{(+1)}, p_{(-1)}$

и $p_{(-1)}p_{(-1)}$, равны и при малых $TT p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow \frac{1}{2}p_{(+1)}, p_{(-1)} \rightarrow \frac{1}{2}, p_{(0)} \rightarrow 0$
 $p_{(0)} \rightarrow 0$. Поскольку только решение первого типа имеет минимальную энергию
 при $T \rightarrow 0T \rightarrow 0$, его и следует считать истинным при $T < T_c T < T_c$. Найти это
 решение можно следующим образом. Примем в (9) и (11) $M = 0M = 0$ и $w = 0$
 $w = 0$. Из (11) и (12) получим

$$qK_p = \ln(2y^q e^{2qK_p} \left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1}) qK_p = \ln(2y^q e^{2qK_p} \left(\frac{p}{1-p}\right)^{q-1}) \quad (13)$$

$$p = \frac{2y+1+e^{-K_p}}{2y^2 e^{2K_p} + 4y+1+e^{-K_p}} p = \frac{2y+1+e^{-K_p}}{2y^2 e^{2K_p} + 4y+1+e^{-K_p}} \quad (14)$$

а из (13) и (14):

$$F(y) = ye^{qK_p} \left[\frac{2y+1+e^{-K_p}}{ye^{2K_p}+1} \right]^{q-1} - 2^{q-2} = 0$$

$$F(y) = ye^{qK_p} \left[\frac{2y+1+e^{-K_p}}{ye^{2K_p}+1} \right]^{q-1} - 2^{q-2} = 0 \quad (15)$$

Решая (15) относительно y и подставляя решение в (14), получим $p = p(K_p)$
 $p = p(K_p)$.

Критическая температура, параметр порядка и спиновые корреляции в модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете

Для того чтобы построить решение модели Поттса при $T < T_c T < T_c$ и найти
 само значение $T_c T_c$, проанализируем поведение функции $F(y)F(y)$, определяемой
 уравнением (15).

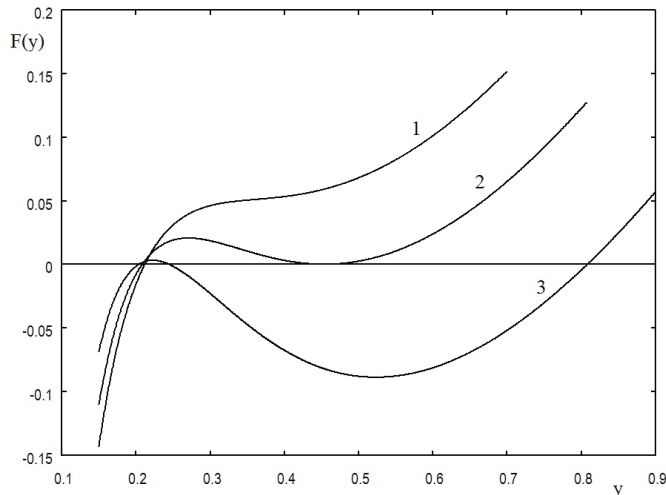


Рис. 1. Функции $F(y)F(y)$ (формула (15)) при различных значениях $K_p K_p$: по горизонтальной оси – параметр y , по вертикальной – значения $F(y)F(y)$ для $q = 4q = 4$.
 Кривая 1 – $K_p = 0,86K_p = 0,86$, кривая 2 – $K_p = 0,877K_p = 0,877$, кривая 3 – $K_p = 0,9K_p = 0,9$

На рис. 1 приведены графики функций $F(y)F(y)$ для различных значений T : кривая 1 - $T > T_c T > T_c$, кривая 3 - $T < T_c T < T_c$ и кривая 2 - $T = T_c$. При $T < T_c T < T_c$ термодинамически устойчивому решению соответствует максимальный из корней уравнения $F(y) = 0$ (кривая 3 на рис.1), а при $T > T_c T > T_c$ устойчиво только решение $p_{(+1)} = p_{(-1)} = p_{(0)} = \frac{1}{3}$ (отброшенное при выводе уравнений (13) – (15)). Следовательно, температура фазового перехода $T_c T_c$ определяется из решения системы

уравнений
$$\begin{cases} F(y) = 0 \\ F'(y) = 0 \end{cases} \text{ где}$$

$$F'(y) = e^{qK_p} \left[\frac{2y + 1 + e^{-K_p}}{ye^{2K_p} + 1} \right]^{q-1} + y(q-1)e^{qK_p} \left[\frac{2y + 1 + e^{-K_p}}{ye^{2K_p} + 1} \right]^{q-2} \left(\frac{2 - e^{2K_p} - e^{K_p}}{(ye^{2K_p} + 1)^2} \right)$$

Приравняв $F'(y)F'(y)$ нулю, получим

$$\begin{aligned} 2e^{2K_p}y^2 - \{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\}y + (1+e^{-K_p}) &= 0 \\ 2e^{2K_p}y^2 - \{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\}y + (1+e^{-K_p}) &= 0 \end{aligned} \quad (16)$$

Решение (16):

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{\{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\} + \sqrt{\{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\}^2 - 8e^{2K_p}(1+e^{-K_p})}}{4e^{2K_p}} \\ y_1 &= \frac{\{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\} + \sqrt{\{(q-2)e^{2K_p}(1+e^{-K_p}) - 2q\}^2 - 8e^{2K_p}(1+e^{-K_p})}}{4e^{2K_p}} \end{aligned} \quad (17)$$

Находя теперь корень $K_{pc}K_{pc}$ уравнения $F(y_1) = 0$, получим значения критической температуры $T_c = 1/K_{pc}T_c = 1/K_{pc}$ для различных q (таблица 1, второй столбец).

Графики функций $p_{(0)}(T)p_{(0)}(T)$ для разных значений q приведены на рис. 2: кривая 1 - $q = 3$, кривая 2 - $q = 4$ и кривая 3 - $q = 6$. Для всех q происходит скачок параметра $p_{(0)}$ в критической точке – то есть фазовый переход первого рода. Величина скачка слабо зависит от q , и ее значения приведены в таблице 1 (третий столбец).

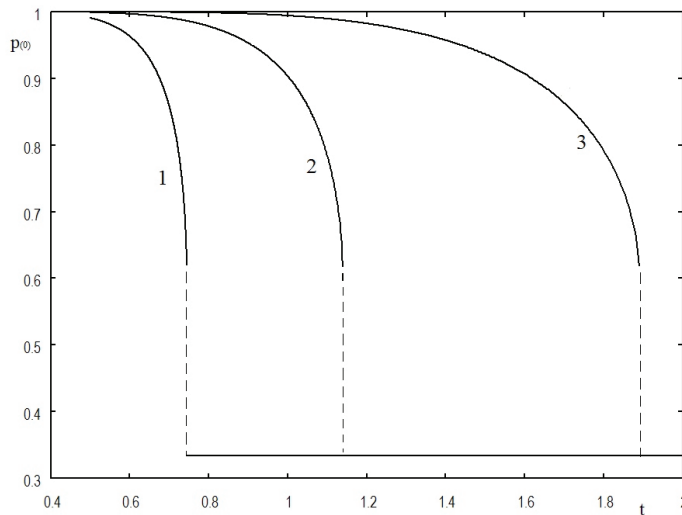


Рис. 2. Температурная зависимость параметра порядка $p_{(0)}p_{(0)}$ для различных значений q : по горизонтальной оси – безразмерная температура $t = 1/K_p t = 1/K_p$, по вертикальной – значения $p_{(0)}p_{(0)}$. Кривая 1 – $q = 3q = 3$, кривая 2 – $q = 4q = 4$, кривая 3 – $q = 6q = 6$

В работе [9] мы рассмотрели модель Поттса с тремя состояниями в приближении среднего поля. Оказывается, что это приближение получается из приведенного в настоящей работе путем предельного перехода $q \rightarrow \infty q \rightarrow \infty$ $J_p \rightarrow 0 J_p \rightarrow 0$ так, что произведение $qJ_p qJ_p$ остается постоянным.

Действительно, перейдем в уравнениях (15) и (16) к пределу $q \rightarrow \infty q \rightarrow \infty$. Обозначим $x = \lim_{q \rightarrow \infty} q K_{pc}(q)x = \lim_{q \rightarrow \infty} q K_{pc}(q)$ и $\tilde{y} = \lim_{q \rightarrow \infty} y(q)$ $\tilde{y} = \lim_{q \rightarrow \infty} y(q)$. Тогда из (16) получим

$$2\tilde{y}^2 - \{3x - 4\}\tilde{y} + 2 = 0 \quad 2\tilde{y}^2 - \{3x - 4\}\tilde{y} + 2 = 0 \quad (18)$$

а из (15)

$$\tilde{y} \exp \left[x \frac{1-2\tilde{y}}{2(1+\tilde{y})} \right] = \frac{1}{2} \tilde{y} \exp \left[x \frac{1-2\tilde{y}}{2(1+\tilde{y})} \right] = \frac{1}{2} \quad (19)$$

Из (18)

$$x = \frac{2(1+\tilde{y})^2}{3\tilde{y}} x = \frac{2(1+\tilde{y})^2}{3\tilde{y}} \quad (20)$$

Подставив это выражение в (19), получим выражение для \tilde{y} :

$$\tilde{y} \exp \left[\frac{(1+\tilde{y})(1-2\tilde{y})}{3\tilde{y}} \right] = \frac{1}{2} \tilde{y} \exp \left[\frac{(1+\tilde{y})(1-2\tilde{y})}{3\tilde{y}} \right] = \frac{1}{2}$$

Решив это уравнение, найдем скачок $\delta p_{(0)} = 0.25147 \delta p_{(0)} = 0.25147$ и значение $x = 2,747 x = 2,747$, что в точности совпадает с результатами, полученными в [9].

Таблица 1

Критические температуры и скачки величин в точке фазового перехода (ФП)

q	$T_{c(mf)}$	T_c	$\delta p_{(0)}$	δg_{12}	$\delta \lambda$
3	1,092	0,745	0,25245	0.01348	0.05962
4	1,456	1,140	0,25230	0.01006	0.03562
5	1.820	1,519	0,25217	0.00802	0.02685
6	2,184	1,892	0,25208	0.00666	0.02215
7	2,548	2,261	0,25201	0.00570	0.01916
8	2,912	2,630	0,25195	0.00498	0.01706

Примечание: qq – координационное число, $T_{c(mf)}$ – температура ФП по методу среднего поля, T_c – температура ФП для решетки Бете, $\delta p_{(0)}$ – скачок параметра порядка, δg_{12} – скачок корреляционной функции для ближайших соседей и $\delta \lambda$ – скачок корреляционной длины.

Рассмотрим теперь спиновые корреляции в модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете. Определим корреляционную функцию следующим образом.

Обозначим $p_{(0,0)}^{ij}$ вероятность того, что атомы, находящиеся в ii -ом и jj -ом узлах решетки, находятся в состоянии (0). (jj -й узел находится на $(j - i)(j - i)$ -й оболочке ii -го узла в решетке Бете.) Тогда корреляционной функцией будем считать такую величину:

$$g_{ij} = p_{(0,0)}^{ij} - p_{(0)}^2 = p_{(0,0)}^{ij} - p_{(0)}^2 \quad (21)$$

Тогда при $K_p > K_{pc} K_p > K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{1 + e^{-K_p}}{2y^2 e^{2K_p} + 4y + 1 + e^{-K_p}} - p^2 = \frac{2y^2 (e^{2K_p} + e^{K_p} - 2)}{(2y^2 e^{2K_p} + 4y + 1 + e^{-K_p})^2}$$

$$g_{12} = \frac{1 + e^{-K_p}}{2y^2 e^{2K_p} + 4y + 1 + e^{-K_p}} - p^2 = \frac{2y^2 (e^{2K_p} + e^{K_p} - 2)}{(2y^2 e^{2K_p} + 4y + 1 + e^{-K_p})^2}, \quad (22)$$

где y определяется из решения (15), а p – по формуле (14).

При $K_p < K_{pc} K_p < K_{pc}$

$$g_{12} = \frac{2}{3} \frac{1 + e^{-K_p}}{1 + 2e^{-K_p}} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \frac{1 - e^{-K_p}}{1 + 2e^{-K_p}} g_{12} = \frac{2}{3} \frac{1 + e^{-K_p}}{1 + 2e^{-K_p}} - \left(\frac{2}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} \frac{1 - e^{-K_p}}{1 + 2e^{-K_p}} \quad (23)$$

Как было сказано выше, мы рассматриваем модель Поттса с тремя состояниями как частный случай модели Изинга с подвижными примесями, решение которой на решетке Бете дается уравнениями (9)–(12). Расчет показывает, что для этой модели корреляционная функция является в общем случае суммой двух убывающих геометрических прогрессий $g_{ij} = ax_1^{j-i} + bx_2^{j-i}$ (Для линейной цепочки ($q = 2q = 2$) этот результат можно доказать строго и

предположить его справедливость для произвольного qq). Предполагая такой же вид корреляционной функции для модели Поттса с тремя состояниями, можно убедиться, что в данном случае одна из геометрических прогрессий исчезает, и корреляционная функция принимает вид:

$$g_{ij} = g_0 e^{-|j-i|/\lambda}$$

где $g_0 = p(1-p)g_0 = p(1-p)$, а корреляционная длина $\lambda\lambda$:

$$\lambda = \begin{cases} -1/\ln\left(\frac{y(e^{2Kp} + e^{-Kp} - 2)}{(2y+1+e^{-Kp})(ye^{2Kp}+1)}\right), & K_p > K_{pc} \\ -1/\ln\left(\frac{1-e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}}\right), & K_p < K_{pc} \end{cases}$$

$$\lambda = \begin{cases} -1/\ln\left(\frac{y(e^{2Kp} + e^{-Kp} - 2)}{(2y+1+e^{-Kp})(ye^{2Kp}+1)}\right), & K_p > K_{pc} \\ -1/\ln\left(\frac{1-e^{-Kp}}{1+2e^{-Kp}}\right), & K_p < K_{pc} \end{cases} \quad (24)$$

Как видно из формул (23) и (24), корреляционная функция и корреляционная длина не зависят от qq при $K_p < K_{pc}$ $K_p < K_{pc}$ ($T > T_c$ $T > T_c$). На рис. 3 показаны графики корреляционной функции $g_{12}g_{12}$ для $q = 3q = 3$ (кривая 1), $q = 4q = 4$ (кривая 2) и $q = 6q = 6$ (кривая 3). На рис. 4 приведены графики корреляционной длины $\lambda\lambda$ для тех же значений qq . Видно, что и корреляционная функция, и корреляционная длина имеют в точке фазового перехода разрывы, величина которых убывает с ростом qq . В таблице 1 приведены величины скачков корреляционной функции (столбец 4) и корреляционной длины (столбец 5) для различных qq .

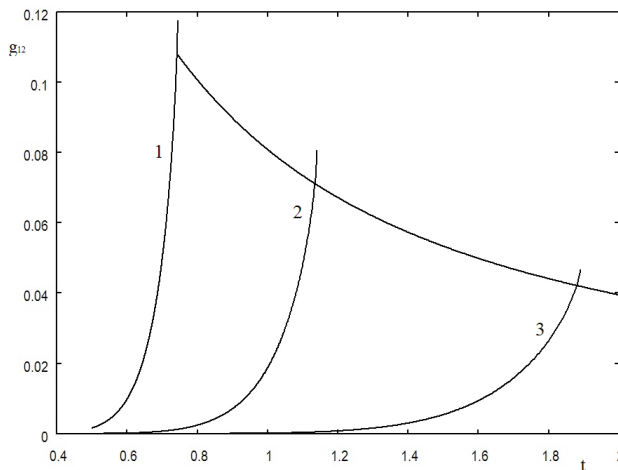


Рис. 3. Температурная зависимость корреляционной функций ближайших соседей $g_{12}g_{12}$ для различных значений qq : по горизонтальной оси – безразмерная температура $t = 1/K_p t = 1/K_p$, по вертикальной – значения $g_{12}g_{12}$. Кривая 1 – $q = 3q = 3$, кривая 2 – $q = 4q = 4$, кривая 3 – $q = 6q = 6$

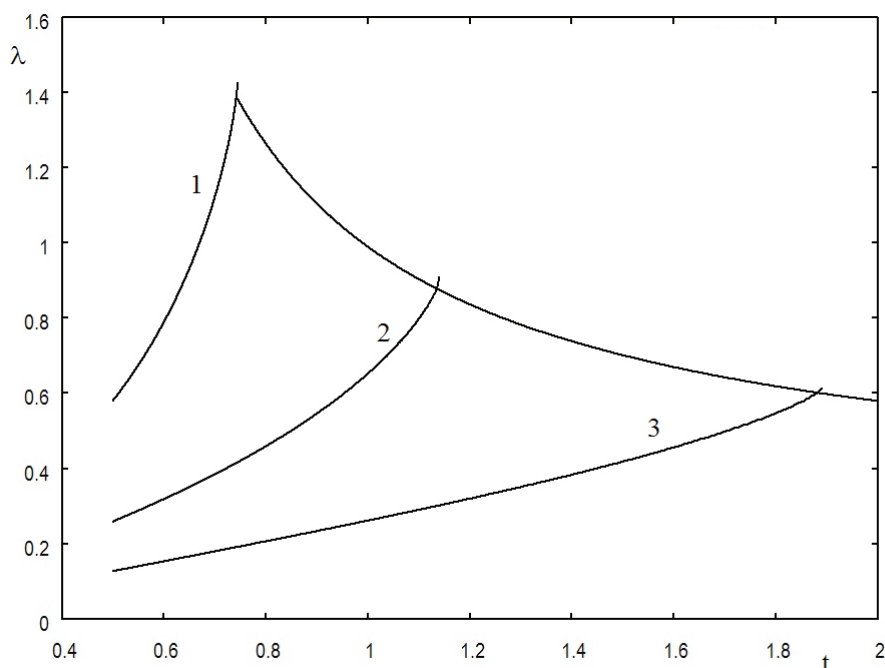


Рис. 4. Температурная зависимость корреляционной длины $\lambda\lambda$ для различных значений q : по горизонтальной оси – безразмерная температура $t = 1/K_p t = 1/K_p$, по вертикальной – значения $\lambda\lambda$. Кривая 1 – $q = 3q = 3$, кривая 2 – $q = 4q = 4$, кривая 3 – $q = 6q = 6$

Выводы

Основные результаты настоящей работы можно сформулировать следующим образом:

1. Нами получено решение модели Поттса с тремя состояниями на решетке Бете с произвольным координационным числом. Найдены критическая температура и температурная зависимость параметра порядка. Показано, что фазовый переход является переходом 1-го рода.

2. Величина скачка параметра порядка в точке фазового перехода слабо зависит от координационного числа решетки q и близка к его значению в пределе, соответствующем среднему полю.

3. Найдена парная корреляционная функция и корреляционная длина в рассматриваемой модели. Корреляционная длина не стремится к бесконечности в точке фазового перехода, однако имеет в этой точке максимальное значение. Корреляционная длина имеет разрыв в точке фазового перехода, величина разрыва убывает с ростом q .

1. Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. – Мир, М. – 1985. – 486 с.
2. F.Y. Wu. The Potts model, Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982)
3. Муртазаев, А.К. Исследование влияния замороженных немагнитных примесей на фазовые переходы в трехмерной модели Поттса / А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Азнаурова // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50. – С. 703.
4. Сёмкин, С.В. Самосогласованные уравнения в модели Изинга разбавленного магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Изв. вузов. Физика. – 2014. – Вып. 57. – С. 54.
5. Сёмкин, С.В. Модель Изинга разбавленного ферромагнетика в приближении самосогласованного поля / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – С. 1064.
6. Сёмкин, С.В. Корреляционные функции чистого и разбавленного изинговского магнетика в приближении эффективного поля / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – С. 1288.
7. Сёмкин, С.В. Применение метода среднего поля к модели Изинга с подвижными примесями и к модели Поттса с тремя состояниями / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – С. 2341.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ по заданию № 2014/292 на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках базовой части государственного задания.

© Семкин С.В., 2015

© Смагин В.П., 2015

Для цитирования: Семкин, С.В. Модель Поттса с тремя состояниями на решетке Бете / С.В. Семкин, В.П. Смагин // «Территория новых возможностей. Вестник Владивостокского государственного университета экономики и сервиса». – 2015; №4. – С. 171–182.

For citation: Semkin S.V. Potts model with three states on a Bethe lattice / S.V. Semkin, V.P. Smagin // The Territory Of New Opportunities. The Herald of Vladivostok State University of Economics and Service. – 2015; №4. – P. 171–182.