**Исследование фазовых переходов в модели Поттса методом Ванг-Ландау**

***М.А. Фадеева***

***НИУ ВШЭ,***

***Департамент прикладной математики***

***МИЭМ НИУ ВШЭ***

**Аннотация**

Представлены результаты исследования фазового перехода алгоритмом Ванг-Ландау в модели Поттса q=4 и 5 на квадратной и гексагональной решетках.

**Введение**

Модель Поттса - это одна из простейших моделей в статистической механике. Была впервые описана Р.Поттсом в 1951 году. Представляет собой модель взаимодействия спинов, расположенных на решетке. Каждый спин может принимать одно из q -значений, которые равномерно распределены по кругу:

$$θ\_{n}= \frac{2πn}{q}$$

где q – количество компонент, n = 0, …, q-1.

Спины взаимодействую только со своими соседями на решетке и гамильтониан системы выглядит следующим образом

$$H=J\_{c}\sum\_{<i,j>}^{}cos⁡(θ\_{s\_{i}}-θ\_{s\_{j}})$$

Позднее был сформулирован более простой вид гамильтониана:

$$Р= -J\_{p}\sum\_{<i,j>}^{}δ(s\_{i},s\_{j})$$

$δ$ – символ Кронекера, т.е. взаимодействие спинов равно единице, если они сонаправлены $s\_{i}=s\_{j}$, и нулю – если нет.

Моделирование проводилось алгоритмом Ванг-Ландау[1], а именно его 1/t-модификацией [3]. Этот алгоритм используется для вычисления плотности состояний спектра энергии (DOS) [2,3]. Алгоритм достаточно популярен (существует более тысячи статей о применении и модификации алгоритма) и активно используется в разных областях статистической физики.



Рис. 1 Плотность состояний энергии, вычисленная методом Ванг-Ландау, для модели Поттса q=5 L=150 на квадратной решетке

 **Основная часть**

Для начала мы смоделировали модель Поттса с q=5 на квадратной решетке c периодическими граничными условиями размером L=150 и L=200 и получили значения плотности состояний $g(E)$ (рис.1). На рис.2 изображен график функции распределения энергии в критической точке $1/k\_{b}T\_{c}$ , вычисленный по формуле:

$$P\left(E\right)=g(E)e^{\frac{E}{k\_{b}T\_{c}}}$$

График имеет два пика при критической температуре, что характерно для фазового перехода первого рода. При этом провал между пиками растет с увеличением размера системы. Точное значение критической температуры можно найти по формуле $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}}= ln⁡(1+√q)$. Чтобы найти критическую точку смоделированной системы возле точки, в котором теплоемкость принимает пиковое значение, была найдена температура, при которой функция распределения имеет два пика одинаковой высоты. Таким образом, получили критическую температуру равную $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}≈1.173375$ для системы размером L=150 и $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}≈1.174104$ для системы размером L=200.



Рис. 2 Функция распределения энергии$ P(E)$ при критической температуре для модели Поттса q=5 L=150(слева) и L=200(справа) на квадратной решетке

Аналогичные упражнения повторили для модели Поттса q=4 на квадратной решетке размером L=100 и L=200 и двумерной гексагональной решетке размера L=102 и L=204 с периодическими граничными условиями. Для систем более маленького размера L=100 и L=102 удалось найти точки, в которых появляются еле различимые пики (рис.3a, рис.4а), а для больших размеров – нет (рис.3b, рис.4b), что закономерно, т.к. модель Поттса имеет фазовый переход первого рода при q > 4[1].

****

Рис. 3 Функция распределения энергии P(E) для модели Поттса q=4 L=100(слева) в точке $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}=1.09695$ и L=200(справа)в точке $ \frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}=1.0979 $на квадратной решетке

****

Рис. 4 Функция распределения энергии P(E) для модели Поттса q=4 L=102(слева)в точке $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}=0.68545$ и L=204(справа) в точке $\frac{1}{k\_{b}T\_{c}^{sim}}=0.69215$ на гексагональной решетке

**Заключение**

Методом Ванг-Ландау вычислена плотность состояний для модели Поттса q=5 и q=4 на двумерной решетке с периодическими граничными условиями. Для q=5 четко виден переход первого рода. Для q=4 нельзя говорить о существовании в системе фазового перехода первого рода.

Постановка задачи и научное руководство – Щур Л.Н.

Работа выполнена в рамках проекта 18-05-0024 Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» в 2018--2019 гг. и в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5-100».

**Список литературы**

1. F. Wang, D. P. Landau, Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states, Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001)
2. F. Wang, D. P. Landau, Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram, Phys. Rev. E 64, 056101 (2001)
3. L. Yu. Barash, M. A. Fadeeva, and L. N. Shchur, Control of accuracy in the Wang-Landau algorithm, Phys. Rev E 96, 043307 (2017).