

# Eksperyment komputerowy o dużej skali dla złożonego układu: trójwymiarowy model Ashkina-Tellera

2020

1920

1920-2020



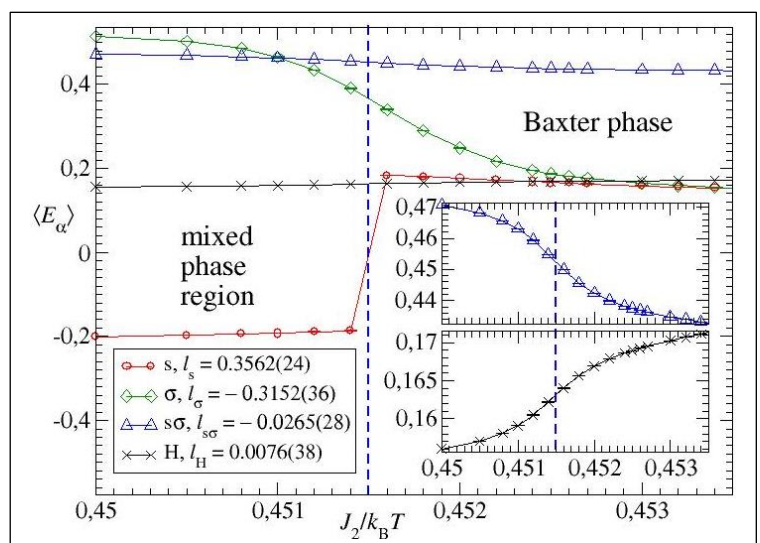
100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

G. Musiał, Z. Wojtkowiak, D. Jeziorek-Knioła  
Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Chociaż model Ashkina-Tellera (AT) będący nietrywialnym uogólnieniem szeroko wykorzystywanego modelu Isinga jest jednym z najważniejszych w fizyce statystycznej, to wciąż przyciąga duże zainteresowanie i rodzi wiele nowych zastosowań, jak też intrygujących pytań, które dotąd nie znalazły satysfakcjonujących odpowiedzi. Powstaje on poprzez nałożenie na siebie dwóch modeli Isinga ze spinami  $s_i$  oraz  $\sigma_i$  na każdym węźle  $i$  sieci regularnej. W każdym z tych modeli mamy takie same oddziaływania o stałej energii  $J_2$  tylko pomiędzy najbliższymi sąsiadującymi węzłami. Te dwa modele Isinga są sprzężone przez czterospinowe oddziaływanie o stałej wielkości  $J_4$  między parami najbliższej sąsiadujących spinów  $s$  i  $\sigma$ . W konsekwencji parametr porządku tego układu zawiera 3 składowe  $\alpha = \langle s \rangle, \langle \sigma \rangle, \langle s\sigma \rangle$ , z których każda wykazuje niezależne uporządkowanie, gdzie symbol  $\langle \dots \rangle$  oznacza średnią temperaturową. Układ ten wykazuje interesujący i bardzo złożony diagram fazowy zawierający przemiany fazowe ciągłe i pierwszego rodzaju od dowolnie słabych do silnych, wiele punktów trójkrytycznych i bifurkacji, trudny do badania obszar faz mieszanych, jak również szeroki obszar typu *crossover* [1,2].

Nasza praca prezentuje autorską koncepcję eksperymentu komputerowego typu Monte Carlo do pomiaru różnych wielkości termodynamicznych, jak namagnesowanie, energia wewnętrzna  $E$ , czy ciepło przemiany  $l$ , jak również kumulant Bindera, typu Challi i Lee-Kosterlitz oraz histogramu energii wewnętrznej, ze starannym wyznaczeniem ich niepewności, by pozwalały badać zachowanie nie tylko całego układu, ale również poszczególnych składowych  $\alpha$  parametru porządku. Z powodu obecności stanów metastabilnych i niestabilnych [1] nasze eksperymenty bazują nie tylko na algorytmie Metropolis, ale również na naszym algorytmie klastrowym typu Wolffa [2] z przetwarzaniem równoległym o dużej skali w rozproszonym środowisku komputerowym, co umożliwia rozpatrywanie dużo większych układów.

Rysunek pokazuje skokową zmianę energii wewnętrznej  $E$  (rozmiar układu to  $38^3$ ) na granicy (pionowa linia przerywana) obszaru faz mieszanych ( $\langle s\sigma \rangle = 0, \langle s \rangle \neq 0$  i  $\langle \sigma \rangle = 0$  albo  $\langle s \rangle = 0$  i  $\langle \sigma \rangle \neq 0$ ) i fazy Baxtera ( $\langle s \rangle = \langle \sigma \rangle \neq 0, \langle s\sigma \rangle \neq 0$ ) dla wszystkich trzech składowych  $\alpha$  parametru porządku i dla całego układu wraz wartościami ciepła przemiany  $l$  wskazanymi w okienku legendy. Dwie składowe  $\alpha$  porządkują się przez zmniejszenie ich energii wewnętrznej kosztem jej wzrostu dla składowej  $\alpha$  uporządkowanej po obydwu stronach przemiany fazowej.



## Literatura:

1. J. P. SANTOS, J. A. J. AVILA, D. S. ROSA, R. M. FRANCISCO, J. MAGN. MATER. 469 (2019) 35
2. Z. WOJTKOWIAK, G. MUSIAŁ, J. MAGN. MATER., 500 (2020), 166365

Słowa kluczowe: eksperyment komputerowy, model Ashkina-Tellera, przemiany fazowe

