

11,12

Исследование влияния фрустраций на термодинамические свойства низкоразмерной модели Поттса методами компьютерного моделирования

© А.Б. Бабаев^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,3}, Э.М. Сулейманов¹, Т.Р. Ризванова¹

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный педагогический университет, Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: b_albert78@mail.ru

(Поступила в Редакцию 14 марта 2016 г.)

Методом Монте-Карло исследуется влияние беспорядка, реализованного в виде фрустрации, на термодинамическое поведение двумерной трехвершинной модели Поттса с учетом первых и вторых ближайших соседей. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L = N$ ($L = 9-48$) на треугольной решетке. Показано, что для случая $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в спиновой системе фрустрации возникают в интервале изменений величины $0.5 \leq |r| \leq 1.0$. Вне этого диапазона в данной модели наблюдается фазовый переход.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-02-00214.

Исследование особенностей влияния беспорядка на фазовые переходы (ФП) и критические явления в магнитных системах на основе микроскопических гамильтонианов все еще является важной задачей современной теории ФП и критических явлений [1,2]. Такого рода исследования особенно актуальны для спиновых систем, в которых беспорядок реализован в виде фрустрации, т.е. такого пространственного расположения магнитных моментов атомов в кристалле, при котором невозможно одновременное антиферромагнитное упорядочение всех взаимодействующих спинов. Основное состояние таких систем оказывается вырожденным. В результате этого в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния, которые благодаря своей большой энтропии могут вносить конечный вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [2].

Влияние фрустраций, возникающих при конкурирующих взаимодействиях, а также вследствие внешнего магнитного поля, на ФП и особенности термодинамических и магнитных свойств низкоразмерных систем исследовано в работах [3,4].

На основе точных решений для двумерной модели Изинга на квадратной [5], на треугольной и гексагональной решетках [6], а также на решетке кагоме [7] исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости от величины отношения взаимодействий $r = J_2/J_1$, где J_1 и J_2 — величины обменных интегралов для первых и вторых ближайших соседей соответственно.

В настоящей работе изучается влияние фрустраций на термодинамическое поведение теплоемкости для магнитной структуры, описываемой двумерной трехвершинной моделью Поттса с величинами взаимодействий

$J_1 > 0$ и $J_2 < 0$. Исследования проведены на основе стандартного алгоритма Метрополиса метода Монте-Карло. В [8–10] нами было показано, что при учете вторых ближайших соседей в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ возможны фрустрации. В этих работах не изучалось влияние фрустраций на температурное поведение теплоемкости при различных соотношениях r . Исследование влияний фрустраций на термодинамические свойства имеет большое значение при создании различных синтетических метаматериалов и изучении упорядочения для антиферромагнитных материалов с треугольной структурой.

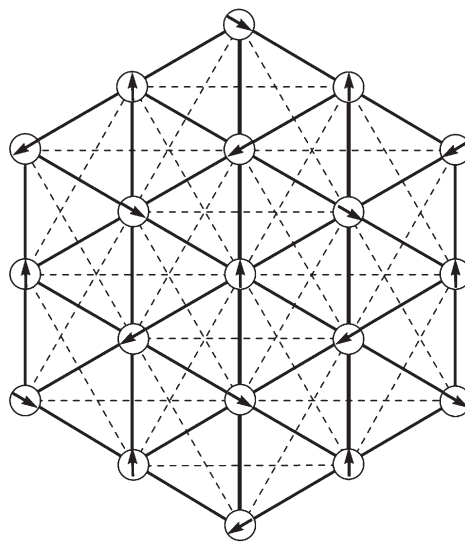


Рис. 1. Трехвершинная антиферромагнитная модель Поттса с учетом вторых ближайших соседей.

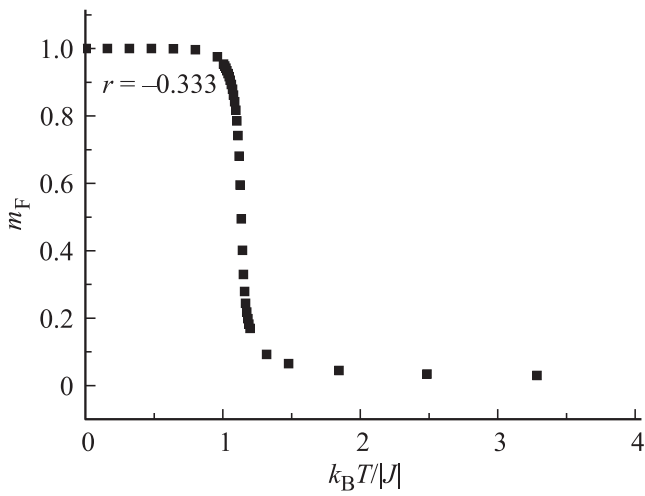


Рис. 2. Температурная зависимость параметра порядка m_F для двумерной трехвершинной модели Поттса при $r = -0.333$.

Исследовались системы с линейными размерами $L \times L = N$ ($L = 9-48$). Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L . Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями. Для каждой спиновой конфигурации выполнялось усреднение по длине марковской цепи $\tau = 180\tau_0$.

Двумерная трехвершинная модель Поттса с учетом вторых ближайших соседей показана на рис. 1. Рассматриваемая модель описывается следующим микроскопическим гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 — параметры обменного ферро- ($J_1 > 0, J_2 > 0$) или антиферромагнитного ($J_1 < 0, J_2 < 0$) взаимодействия для ближайших и вторых ближайших соседей соответственно, $\theta_{i,j}, \theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами S_i-S_j и S_i-S_k .

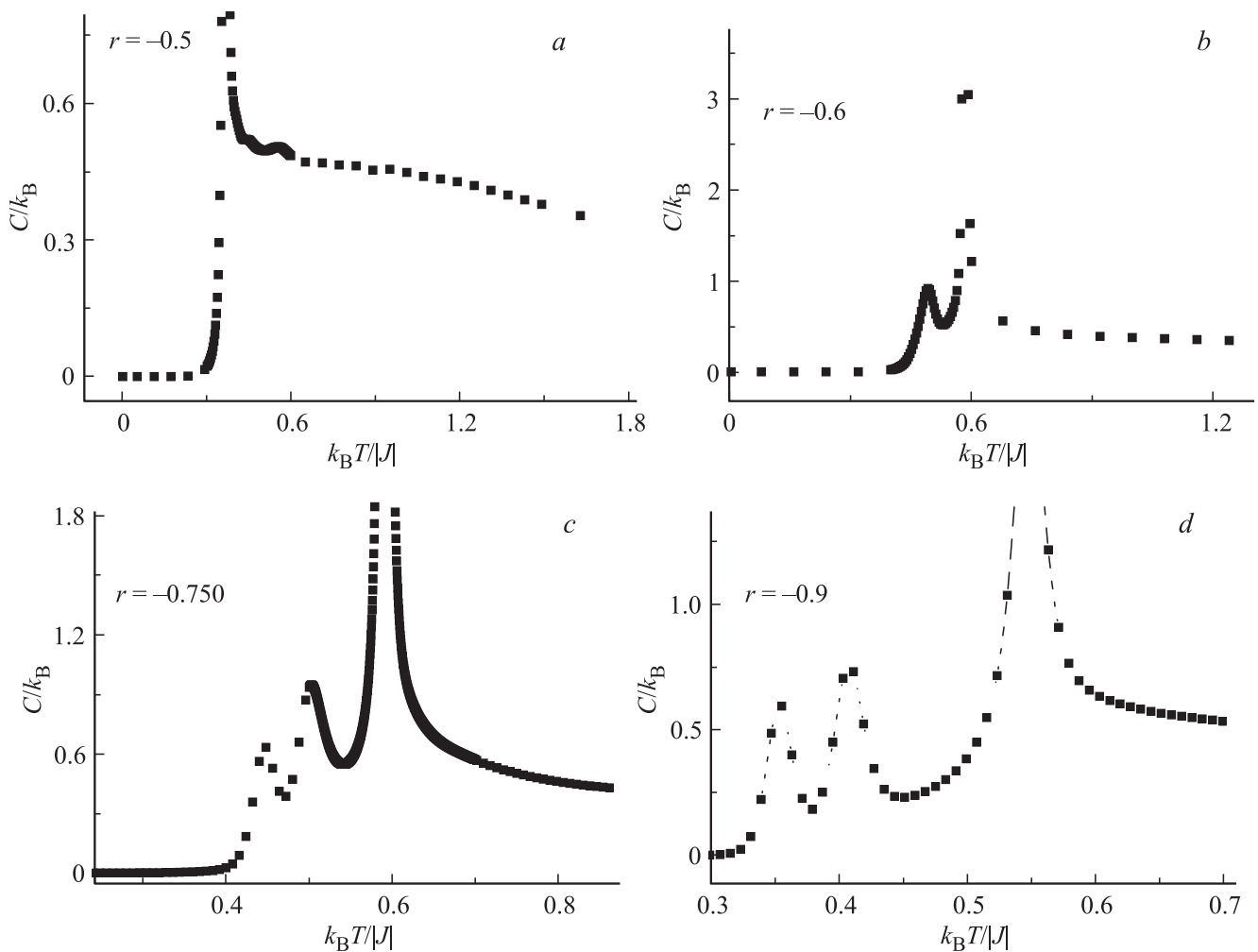


Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкости C для двумерной трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса при $r = -0.5$ (a), -0.6 (b), -0.750 (c), -0.9 (d), -1.0 (e), -0.333 (f), -1.1 (g).

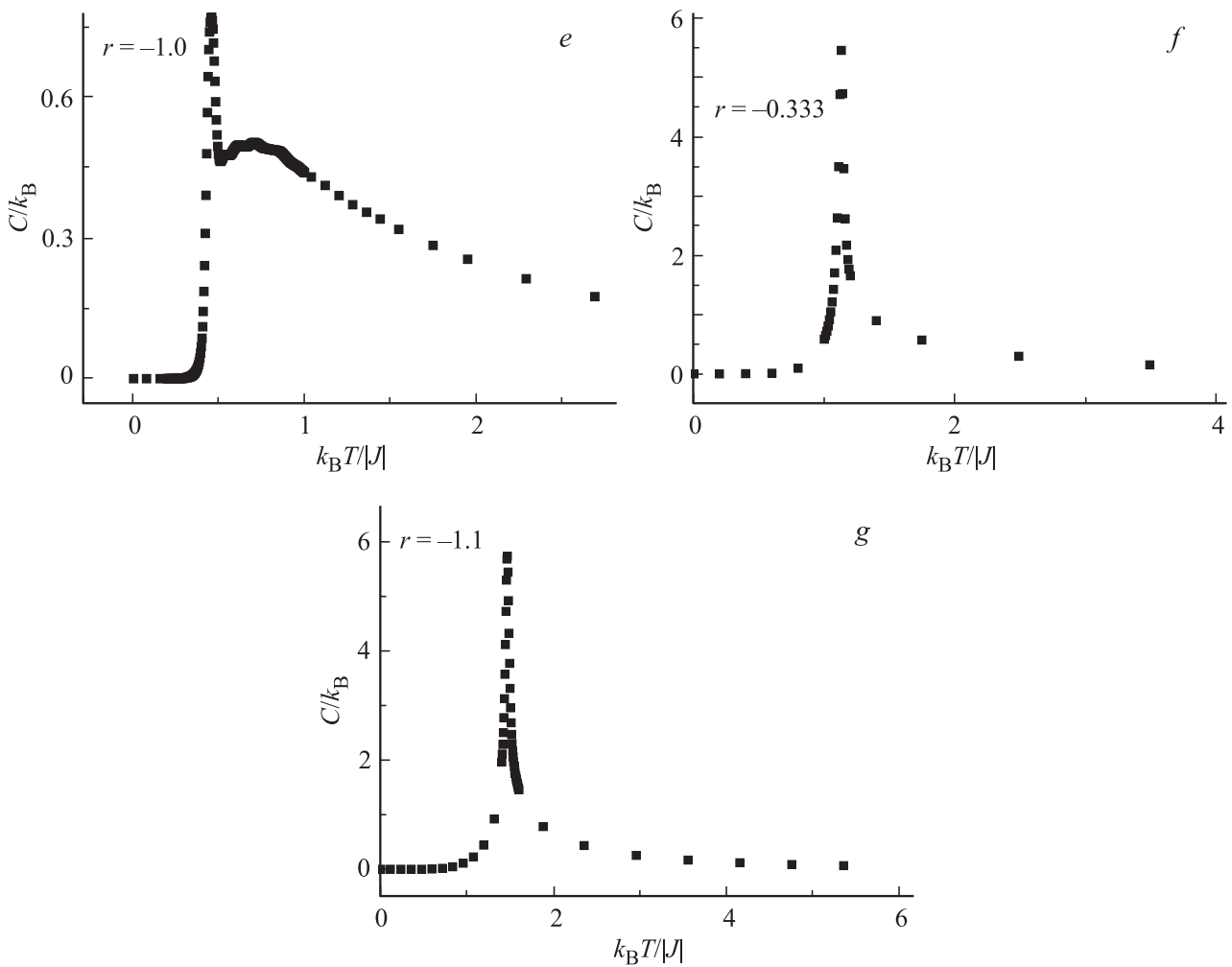


Рис. 3 (продолжение).

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались флуктуационные соотношения [11]

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

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

где $K = J/k_B T$, $N = L^2$ — число магнитных узлов, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка системы; угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю. В качестве параметра порядка для ферромагнитной (m_F) и антиферромагнитной (m_{AF}) модели Поттса использовались следующие выражения [12]:

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

$$m_{AF} = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha \neq \beta \neq \gamma} \left(\frac{N_\alpha + N_\beta + N_\gamma}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \quad (5)$$

где $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3\}$; N_1 — число спинов в состоянии с $q = 1$, N_2 — число спинов в состоянии с $q = 2$,

N_3 — число спинов в состоянии с $q = 3$; $N_\alpha, N_\beta, N_\gamma$ — число спинов в подрешетках A, B и C соответственно, $N = L^2$. На рис. 2 приведена температурная зависимость параметра порядка m_F для двумерной модели Поттса при $r = -0.333$. Приведенная зависимость демонстрирует поведение, характерное для ФП второго рода. Аналогичное поведение наблюдалось и при $r = -0.1, -0.2, -0.3$.

На рис. 3, *a-e* представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для двумерной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в диапазоне $0.5 \leq |r| \leq 1.0$ для систем с линейным размером $L = 48$. Как видно из этих рисунков, для всех рассмотренных систем наблюдается расщепление теплоемкости. Расщепление теплоемкости является характерным признаком фрустрации. Незначительное отклонение от диапазона изменений $0.5 \leq |r| \leq 1.0$ приводит к ФП (рис. 3, *f, g*).

Таким образом, наши данные, полученные для двумерной трехвершинной модели Поттса на треугольной

решетке с величинами взаимодействия $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ на основе алгоритма Метрополиса метода Монте-Карло в широком интервале изменений величины отношений вторых ближайших соседей к первым соседям r ($0 \leq |r| \leq 1.1$), свидетельствуют о том, что в диапазоне изменений $0.5 \leq |r| \leq 1.0$ наблюдается расщепление теплоемкости, что является характерным признаком фрустраций. Вне этого диапазона наблюдается фазовый переход.

Список литературы

- [1] H.T. Diep. Frustrated spin systems. World Scientific Publ. Co, Ltd., Singapore (2004). 599 p.
- [2] В.С. Доценко. УФН **163**, 1 (1993).
- [3] F.A. Kassan-Ogly, A. Proshkin, A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov. Mater. Sci. Forum. **845**, 111 (2016).
- [4] F.A. Kassan-Ogly. Phase Trans. **71**, 39 (2000).
- [5] L. Onsager. Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [6] R.M.F. Houtappel. Physica **16**, 425 (1950).
- [7] K. Kanô, S. Naya. Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
- [8] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev, F.A. Kassan-Ogly. Solid State Phenom. **215**, 52 (2014).
- [9] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. Письма в ЖЭТФ **100**, 267 (2014).
- [10] А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **149**, 357 (2016).
- [11] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [12] Y. Saito. J. Phys. A **15**, 1885 (1982).