

10,11,05

Исследование влияния слабых магнитных полей на фазовые переходы четырехкомпонентной антиферромагнитной модели Поттса

© М.К. Рамазанов, М.К. Мазгаева, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН,
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 5 октября 2023 г.

В окончательной редакции 18 октября 2023 г.

Принята к публикации 3 ноября 2023 г.

Методом компьютерного моделирования проведены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке в слабых магнитных полях. Исследования проведены для интервала величины магнитного поля $0.0 \leq h \leq 5.0$ с шагом 0.5. Установлено, что в интервале поля $0.0 \leq h \leq 3.0$ наблюдается фазовый переход первого рода. Обнаружено, что в интервале $3.5 \leq h \leq 5.0$ система становится фрустрированной.

Ключевые слова: фрустрации, теплоемкость, метод Монте-Карло, энергия.

DOI: 10.61011/FTT.2023.12.56775.219

1. Введение

В физике конденсированного состояния наблюдается повышенный интерес к исследованию фазовых переходов (ФП) и связанных с ними критических явлений. Во всех конденсированных средах при определенных условиях происходят один или несколько ФП. Отдельный интерес имеет изучение факторов, влияющих на ФП в конденсированных средах. К таким факторам можно отнести внешнее магнитное поле, взаимодействие следующих за ближайшими соседями, примеси, тепловые и квантовые флуктуации и др. В настоящее время вопрос о влиянии внешних возмущающих факторов на ФП в магнитных спиновых системах имеет принципиальное значение. Включение этих возмущающих факторов может привести к большому разнообразию фаз и ФП в таких системах, а также к совершенно новому физическому поведению [1–5].

В настоящем исследовании нами изучается влияние внешнего магнитного поля на характер ФП и термодинамические свойства магнитных спиновых систем. Для решения такого рода задач успешно используют различные решеточные модели, такие как модель Изинга, Поттса, Гейзенберга и др. [6–11]. Несмотря на достигнутые успехи в данной области, модель Поттса до сих пор является малоизученной. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. На основе модели Поттса с различным числом состояний спина q могут быть описаны структурные ФП во многих материалах [2,4,11]. В качестве примера веществ, описываемых моделью Поттса и об-

ладающих структурой гексагональной решетки, можно привести адсорбированные пленки: адсорбированные атомы водорода (2×2) — $2\text{H|Ni}(111)$ на поверхности никеля $\text{Ni}(111)$ размещаются в узлах гексагональной решетки [12]. В таких адсорбированных структурах ФП описываются классом универсальности двумерных моделей Поттса с $q = 4$ [13]. Работ, посвященных изучению влияния внешнего магнитного поля как возмущающего фактора на ФП и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Поттса, практически нет, и этот вопрос все еще остается открытым и малоизученным.

В связи с этим, в настоящей работе нами на основе метода Монте Карло (МК) изучается влияние слабых магнитных полей на ФП и термодинамические свойства двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий первых и вторых соседей. Данная модель интересна еще и тем, что значение $q = 4$ является граничным, выше которого должен наблюдаться ФП первого рода [10].

В последние годы при изучении этой модели внимание в основном уделялось ферромагнитным системам [14–19]. В этих работах было показано, что величина взаимодействия следующих за ближайшими соседями, а также внешнее магнитное поле могут кардинально повлиять на ФП и термодинамическое поведение ферромагнитной модели Поттса. Природа ФП и особенности термодинамического поведения модели Поттса для антиферромагнитного случая на гексагональной решетке практически не изучались.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых соседей, а также внешнего

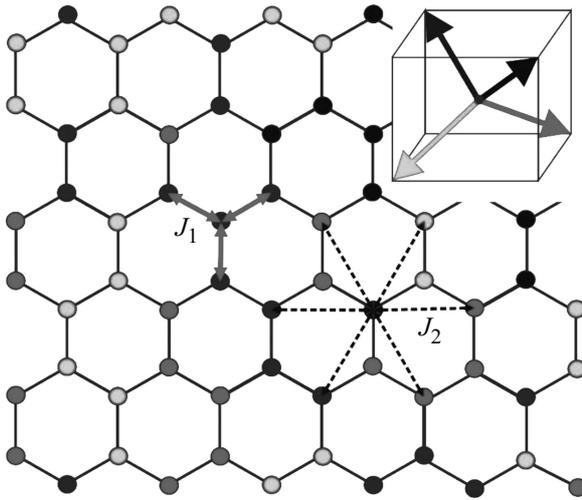


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке. На вставке для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее представление.

магнитного поля имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J_1 \sum_{i,j(i \neq j)} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - J_2 \sum_{i,k(i \neq k)} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_k - h \sum_i \mathbf{S}_i \\ &= -J_1 \sum_{i,j(i \neq j)} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k(i \neq k)} \cos \theta_{i,k} - h \sum_i \mathbf{S}_i, \end{aligned} \tag{1}$$

где J_1 и J_2 — параметры обменных антиферромагнитных ($J_1 < 0$ и $J_2 < 0$) взаимодействий соответственно для ближайших и следующих за ближайшими соседями, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_j$ и $\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_k$, h — величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). В данном исследовании рассматривается случай, когда $J_1/J_2 = 1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 5.0$ с шагом 0.5. Магнитное поле направлено вдоль одного из направлений спина.

Схематическое описание исследуемой модели представлено на рис. 1. Как видно на рисунке, у каждого спина есть три ближайших (сплошные линии) и шесть следующих за ближайшими (пунктирные линии) соседа. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее представление.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } \mathbf{S}_i = \mathbf{S}_j \\ -\frac{1}{3}, & \text{если } \mathbf{S}_i \neq \mathbf{S}_j \end{cases} \tag{2}$$

Согласно условию (2), для двух спинов \mathbf{S}_i и \mathbf{S}_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $\mathbf{S}_i = \mathbf{S}_j$. В случае, когда $\mathbf{S}_i \neq \mathbf{S}_j$, энергия $E_{i,j} = J_1/3$.

Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении, и принимает другое значение при несовпадении направлений спинов. Для модели Поттса с $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов как показано на вставке рис. 1.

Такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [18–23]. В последние годы разработано много новых алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [24].

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. одновременно моделируются N реплик X_1, X_2, \dots, X_N с температурами T_1, T_2, \dots, T_N ;
2. после выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик производится обмен данными между парой соседних реплик X_i и X_{i+1} в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{для } \Delta \geq 0 \\ \exp(-\Delta), & \text{для } \Delta > 0 \end{cases},$$

где $\Delta = (U_i - U_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1})$, U_i и U_{i+1} — внутренние энергии реплик.

Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 100\tau_0$ шагов МК на спин. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12-60$, где L — линейный размер решетки, N — количество спинов в системе.

3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости C нами использовалось выражение [25]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \tag{3}$$

где $K = |J_1|/(k_B T)$, U — внутренняя энергия.

На рис. 2 представлены температурные зависимости теплоемкости C для различных значений магнитного поля h при $L = 48$. Из рисунка видно, что в интервале $0.0 \leq h \leq 3.0$ вблизи критической области наблюдаются хорошо выраженные максимумы теплоемкости. Отметим, что с увеличением магнитного поля максимум теплоемкости смещается в сторону низких температур. Такое поведение теплоемкости объясняется тем, что увеличение величины магнитного поля приводит к быстрому упорядочению системы и уменьшению флуктуаций, и соответственно уменьшается температура ФП. Как

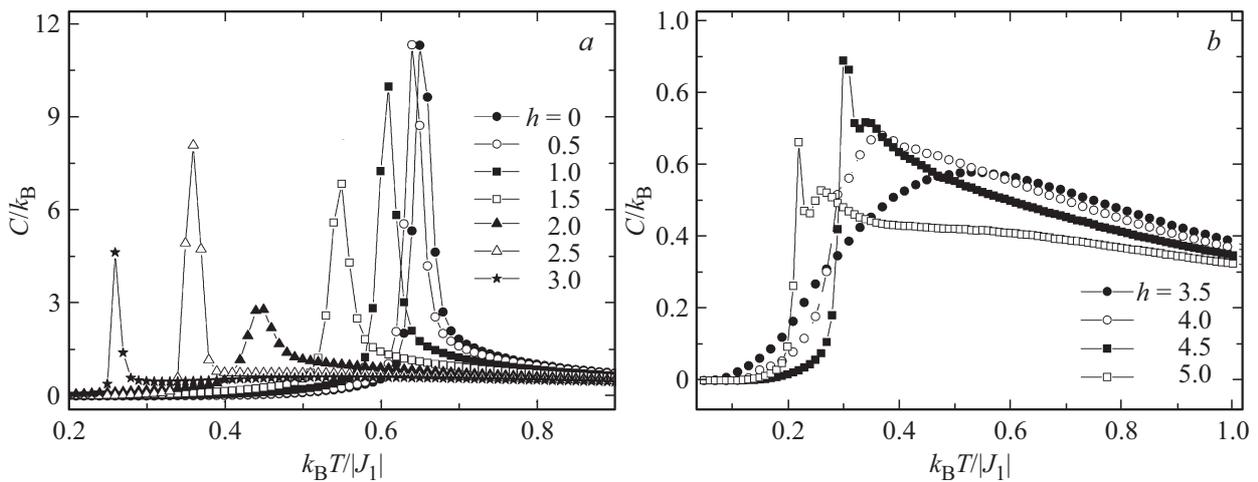


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости.

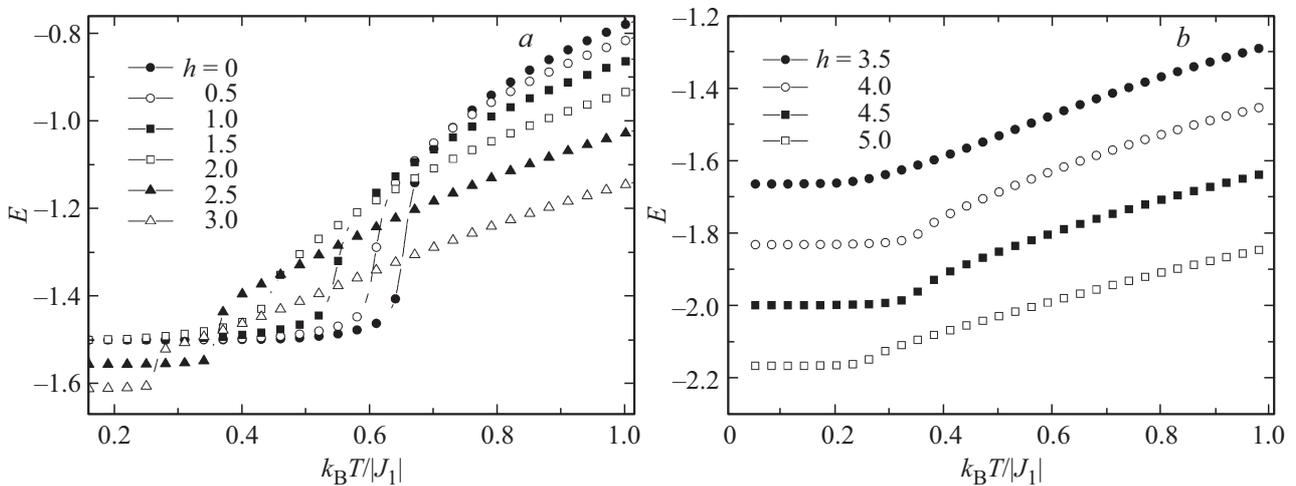


Рис. 3. Температурные зависимости энергии.

видно на рисунке, для значения поля $h = 3.5$ наблюдается плавный куполообразный максимум. Это говорит о том, что магнитное поле приводит к подавлению ФП в системе. Можно предположить, что такое поведение теплоемкости связано с изменением магнитного упорядочения. Дальнейший рост поля ($h = 4.5$ и 5.0) приводит к расщеплению теплоемкости. Расщепление теплоемкости является особым свойством, присущим фрустрированным моделям. Такое поведение теплоемкости позволяет говорить о том, что для значений поля $h \geq 3.5$ в данной модели возникают фрустрации.

На рис. 3 приведены температурные зависимости полной энергии спиновой системы E для различных значений магнитного поля. На рисунке видно, что в интервале $0.0 \leq h \leq 3.0$ вблизи критической области энергия изменяется скачкообразно. Такое поведение энергии характерно для ФП первого рода. Для значений поля в интервале $3.5 \leq h \leq 5.0$ вблизи критической области энергия системы меняется плавно. Можно предположить, что изменился характер ФП.

Для анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [26,27]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [16].

Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 4, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для $h = 1.0$ и 2.0 . Графики построены при температурах, близких к критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности P от энергии E для всех значений температур и полей наблюдаются два максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Отметим, что двойные пики на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдаются для значений поля в интервале $0.0 \leq h \leq 3.0$. Это позволяет

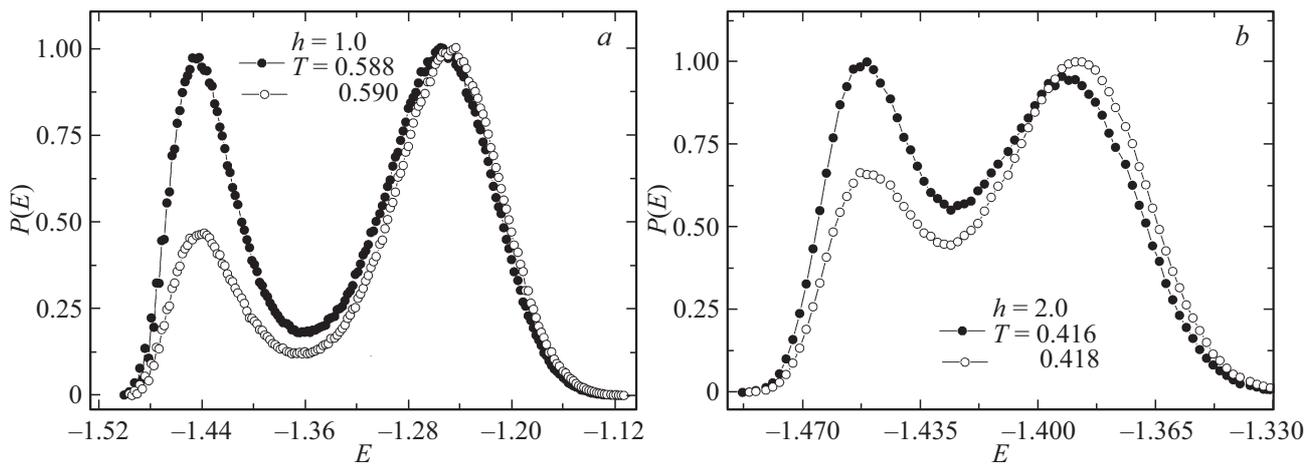


Рис. 4. Гистограммы распределения энергии.

нам утверждать о том, что в этом интервале значений h наблюдаются ФП первого рода. Результаты настоящей работы показывают, что слабое внешнее магнитное поле не приводит к смене ФП, но приводит к возникновению фрустраций в исследуемой модели. Для ферромагнитной модели Поттса с $q = 4$ было обнаружено, что слабое внешнее магнитное поле приводит к смене ФП первого рода на переход второго рода [16]. Исследование ФП антиферромагнитной модели в широком интервале значений h в литературе не встречается.

4. Заключение

Исследование влияния слабого внешнего магнитного поля на фазовые переходы и термодинамические модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с взаимодействиями первых и вторых соседей выполнено с использованием репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в интервале значений $0.0 \leq h \leq 3.0$ наблюдается фазовый переход первого рода. Обнаружено, что в интервале $3.5 \leq h \leq 5.0$ система становится фрустрированной.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] H.T. Diep. Frustrated Spin Systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004). 624 p.
- [2] Р. Бэкстер. Точно решаемые модели в статистической механике. Мир, М. (1985). [R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic, N.Y. (1982)].
- [3] F.Y. Wu. Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics. World Scientific, New Jersey (2008).
- [4] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 1, 235 (1982).
- [5] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 3, 031103 (2008).
- [6] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).
- [7] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 13, 837 (1980).
- [8] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 5, 2560 (1980).
- [9] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica A **521**, 543 (2019).
- [10] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [11] Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ФТТ **60**, 6, 1078 (2018). [F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. Phys. Solid State **60**, 6, 1090 (2018)].
- [12] L. Schwenger, K. Budde, C. Voges, H. Pfnur. Phys. Rev. Lett. **73**, 2, 296 (1994).
- [13] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfnur. Phys. Rev. B **52**, 13, 9275 (1995).
- [14] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 3, 502 (2019). [A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Mazagaeva, M.A. Magomedov. JETP **129**, 3, 421 (2019)].
- [15] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 3, 442 (2020). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva. Phys. Solid State **62**, 3, 499 (2020)].
- [16] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. Письма в ЖЭТФ **114**, 11–12, 762 (2021). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva. JETP Lett. **114**, 11, 693 (2021)].
- [17] А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева. ФТТ **63**, 5, 622 (2021). [A.K. Murtazaev, M.K. Mazagaeva, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov, A.A. Murtazaeva. Phys. Solid State **63**, 5, 742 (2021)].
- [18] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.Р. Джамалудинов. ФТТ **64**, 2, 237 (2022). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Mazagaeva, M.R. Dzhamaludinov. Phys. Solid State **64**, 2, 231 (2022)].

- [19] М.А. Фадеева, Л.Н. Шчур. *ЖЭТФ* **162**, 6, 909 (2022). [M.A. Fadeeva, L.N. Shchur. *JETP* **135**, 6, 869 (2022)].
- [20] А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов. Письма в *ЖЭТФ* **107**, 4, 265 (2018). [A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Ramazanov. *JETP Lett.* **107**, 4, 259 (2018)].
- [21] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в *ЖЭТФ* **109**, 9, 610 (2019). [M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev. *JETP Lett.* **109**, 9, 589 (2019)].
- [22] А.К. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева. *ФММ* **122**, 5, 460 (2021). [A.K. Murtazaev, M.K. Mazagaeva, M.K. Ramazanov, M.A. Magomedov, A.A. Murtazaeva. *Phys. Met. Metallogr.* **122**, 5, 428 (2021)].
- [23] R. Masrour, A. Jabar. *Physica A* **491**, 926 (2018).
- [24] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. *Biopolymers (Peptide Sci.)* **60**, 2, 96 (2001).
- [25] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. *Phys. Rev. B* **43**, 7, 6087 (1991).
- [26] F. Wang, D.P. Landau. *Phys. Rev. E* **64**, 5, 056101 (2001).
- [27] F. Wang, D.P. Landau. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 10, 2050 (2001).

Редактор Е.В. Толстякова