

13,07,05

Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Поттса на решетке кагоме

© М.К. Рамазанов¹, М.А. Магомедов¹, А.К. Муртазаев¹, Т.Р. Ризванова¹ Р.М. Рамазанов²

¹ Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 19 октября 2023 г.

В окончательной редакции 19 октября 2023 г.

Принята к публикации 27 декабря 2023 г.

Методом компьютерного моделирования проведены исследования фазовых переходов двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 соседей. Исследования проведены для величины обменного взаимодействия вторых соседей в диапазоне $0 \leq J_2 \leq 1$. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействий вторых соседей. Проведен анализ характера фазовых переходов. Обнаружено, что для значений $J_2 = 0$ и 0.1 в данной модели фазовый переход отсутствует. Показано, что в диапазоне $0.2 \leq J_2 \leq 1$ наблюдается фазовый переход второго рода.

Ключевые слова: фрустрации, фазовые переходы, метод Монте-Карло, модель Поттса.

DOI: 10.61011/FTT.2024.02.57255.234

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств соединений, имеющих решетку кагоме привлекает большое внимание. Это связано с тем, что в антиферромагнитных соединениях, имеющих решетку кагоме, вследствие особой геометрии решетки могут возникать фрустрации. Эффекты фрустрации играют важную роль в магнитных системах. Экспериментальные, теоретические и численные исследования позволили установить, что магнитные системы с фрустрациями во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем, что вызывает повышенный интерес к изучению явлений фрустрации в магнитных системах [1–3]. Для изучения физических свойств таких систем широко используют спиновые решеточные модели.

Одной из спиновых решеточных моделей, к которой в последнее время наблюдается повышенный интерес, является модель Поттса. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств в физике конденсированных сред. К их числу относятся некоторые классы адсорбированных газов на графите, сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, различные многослойные магнитные системы, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и др. [1,4,5]. В качестве примера веществ, описываемых моделью Поттса, можно привести адсорбированные пленки: адсорбированные атомы водорода (2×2)– $2\text{H}/\text{Ni}(111)$ на поверхности никеля $\text{Ni}(111)$ раз-

мешаются в узлах гексагональной решетки [6]. В таких адсорбированных структурах ФП описываются классом универсальности двумерных моделей Поттса с $q = 4$ [7].

В последние годы исследованию спиновых систем, описываемых моделью Поттса было посвящено значительное число работ [4,8–16], в которых было показано, что физические свойства модели Поттса зависят от пространственной размерности решетки, числа состояний спина q , величины взаимодействия вторых соседей и от геометрии решетки. Анализ данных, полученных в этих работах показывает, что в зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует ФП первого или второго рода. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ довольно уникальна и до сих пор малоизучена. Данная модель интересна и тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q > 4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [4].

В настоящей работе нами проводится исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с учетом ферромагнитных обменных взаимодействий вторых соседей J_2 . Данная модель при $J_2 = 0$ является фрустрированной. Учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей в данной модели может привести к появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его физические свойства. Исследование влияния величины ферромагнитного взаимодействия вторых соседей на ФП в рассматриваемой модели в литературе практически не встречается. В связи с этим, в настоящей работе нами

проводится исследование ФП этой модели в широком интервале значений величины взаимодействия вторых соседей.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых соседей может быть представлен в следующем виде [17,18]:

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k}, \end{aligned} \quad (1)$$

где J_1 и J_2 — параметры обменных антиферромагнитного ($J_1 < 0$) и ферромагнитного ($J_2 > 0$) взаимодействия, соответственно, для первых и вторых соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. В данной работе рассматривается интервал значений $0 \leq J_2 \leq 1$ с шагом 0.1.

Схематическое описание исследуемой модели представлено на рис. 1. Как видно на рисунке, у каждого спина есть четыре ближайших (J_1) и четыре следующих за ближайшими (J_2) соседа. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление. Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\cos \theta_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \quad (2)$$

Согласно условию (2) для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $S_i = S_j$. В случае когда $S_i \neq S_j$, 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 не совпадении направлений спинов. Для модели Поттса с $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов как показано на вставке рис. 1.

В настоящее время одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга-Ландау метода Монте-Карло (МК) [19], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм. Данный алгоритм позволяет вычислить функцию плотности состояний системы и выдает конфигурации спинов в системе. Более подробно алгоритм Ванга-Ландау изложен в работе [10]. Определив плотность состояний системы $g(E)$, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности,

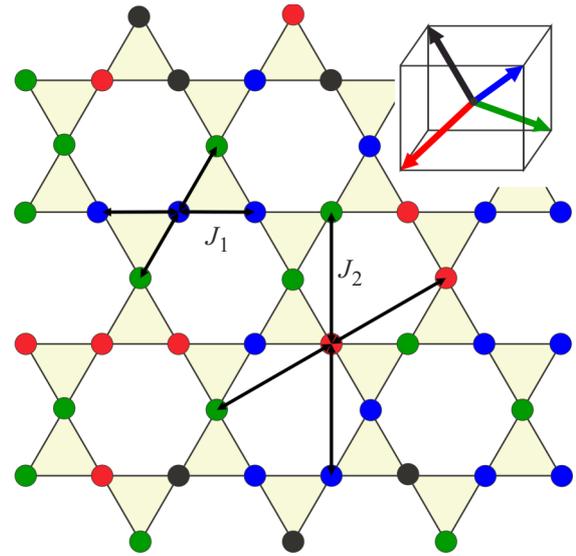


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме. На вставке для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление.

внутреннюю энергию U , свободную энергию F , теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

$$C = \left(\frac{(|J_1|/k_B T)^2}{N} \right) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2) \quad (5)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (6)$$

где $K = |J_1|/k_B T$, N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), (U является нормированной величиной). Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 72$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки.

3. Результаты моделирования

На рис. 2 представлены температурные зависимости энтропии S для разных значений J_2 , полученные для системы с линейным размером $L = 24$ (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке с увеличением температуры энтропия

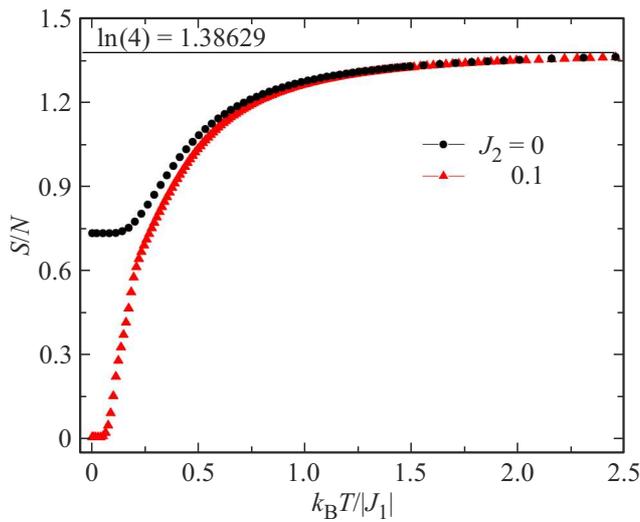


Рис. 2. Температурная зависимость энтропии S .

стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. Для случая $J_2 = 0$ в низкотемпературной области энтропия стремится к отличному от нуля значению. При этом, это значение энтропии сильно отличается от нуля. Такое поведение энтропии свидетельствует о том, что при $J_2 = 0$ основное состояние системы сильно вырождено. Такое поведение энтропии характерно для спиновых систем с фрустрациями. При включении вторых соседей ($J_2 \geq 0.1$) в низкотемпературной области энтропия стремится к нулю. Это значит, что обменное взаимодействие вторых соседей в данной модели снимает вырождение основного состояния, даже при малых значениях J_2 .

Температурные зависимости теплоемкости C для разных значений J_2 и линейных размеров L представлены на рис. 3. Как видно на рисунке, для значения $J_2 = 0.1$ на температурной зависимости теплоемкости отсутствует острый пик, а наблюдается сглаженный пик. Отсутствие ярко выраженного пика теплоемкости объясняется тем, что при $J_2 \leq 0.1$ в данной модели отсутствует порядок. Для значений $J_2 = 0.2$ и $J_2 = 0.3$ наблюдается расщепление теплоемкости. На графике видны два пика и один плавный „горб“ (рис. 3, *a*). Наличие „горба“ свидетельствует о низкоразмерности системы, а расщепление теплоемкости обычно наблюдается для фрустрированных спиновых систем [2,20]. Для исследуемой нами модели расщепление теплоемкости связано с тем, что учет обменных взаимодействий вторых соседей приводит к появлению частично упорядоченного магнитного состояния. При увеличении величины J_2 плавный „горб“ и низкотемпературный пик исчезают и остается один ярко выраженный пик (рис. 3, *b*). На этом рисунке видно, что в зависимости теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну

и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления ПГУ, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами параметров.

Для анализа характера ФП и определения критической температуры T_N нами использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [21]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2} \quad (7)$$

где U_L — магнитный кумулянт.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле

$$m = \frac{1}{N} \left(\frac{4N_{\max} - N_1 - N_2 - N_3 - N_4}{3} \right) \quad (8)$$

где N_1, N_2, N_3, N_4 — число спинов, соответствующих одному из 4 направлений спина соответственно.

Выражение (7) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью для ФП второго

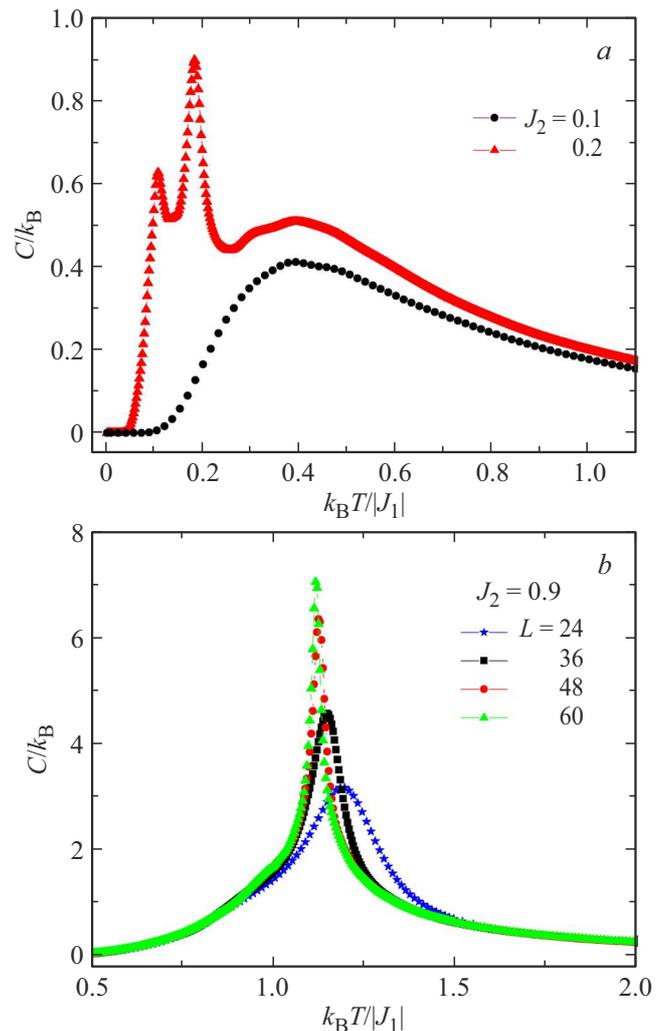


Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкости C .

рода. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [21].

На рис. 4 представлена характерная зависимость U_L от температуры для $J_2 = 0.5$ при разных значениях L . Из графика видно, что в критической области температурные зависимости U_L пересекаются в одной точке ($T_N = 0.662$). Это свидетельствует в пользу наличия в данной модели ФП второго рода. Аналогичная картина наблюдается для всех значений в диапазоне $0.2 \leq J_2 \leq 1.0$.

На рис. 5 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих за ближайшими соседями. На диаграмме вид-

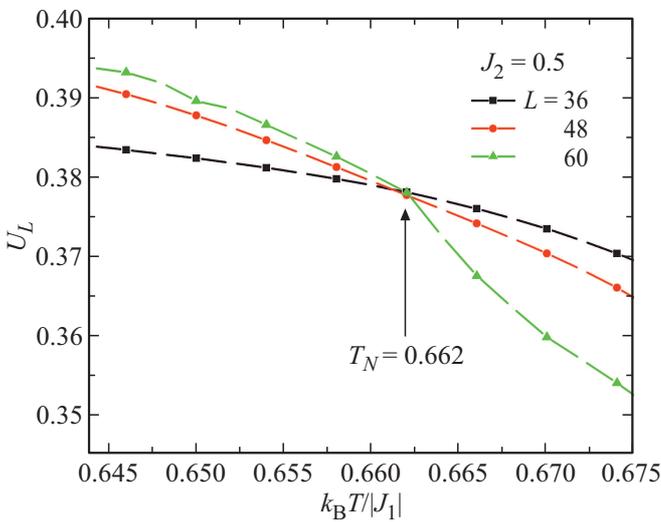


Рис. 4. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера U_L .

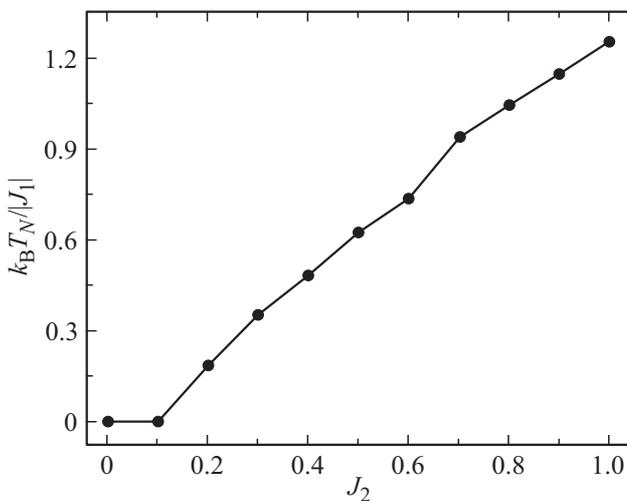


Рис. 5. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих за ближайшими соседями.

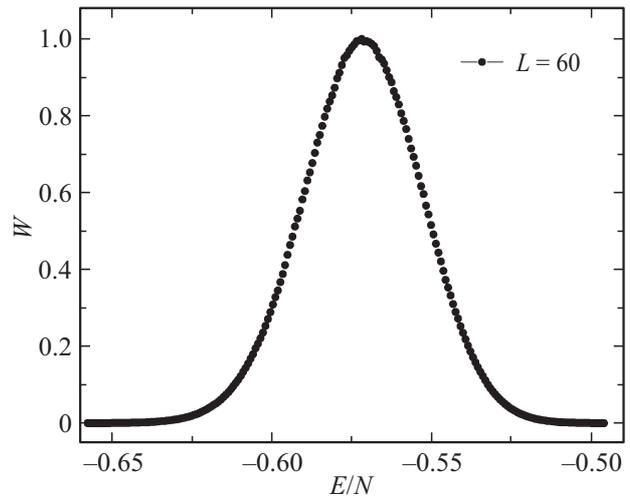


Рис. 6. Гистограммы распределения энергии для $J_2 = 0.5$.

но, что для значений $J_2 = 0.0$ и 0.1 критическая температура равна нулю и ФП отсутствует. Это объясняется отсутствием магнитного упорядочения в данной модели при $J_2 \leq 0.1$. Увеличение вклада влияния обменного взаимодействия следующих за ближайшими соседями в данной модели приводит к появлению ФП.

Для определения рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [19,22]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [23,24]. Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели в интервале $0.2 \leq J_2 \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 6. На этом рисунке представлена гистограмма распределения энергии для системы с линейным размером $L = 60$ для значения $J_2 = 0.5$. График построен для температуры близкой к критической температуре ($T_N = 0.622$). Из рисунка видно, что в зависимости вероятности W от энергии наблюдается один максимум, который свидетельствует о ФП второго рода. Наличие одного максимума на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП второго рода. Отметим, что один максимум на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдается для значений J_2 в интервале $0.2 \leq J_2 \leq 1.0$. Это позволяет нам утверждать о том, что в этом интервале значений J_2 наблюдаются ФП второго рода.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов в двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с учетом ферромагнитных взаимодействий вторых соседей выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Проведен анализ характера фазовых переходов

в широком интервале значений величины взаимодействия вторых соседей J_2 . Показано, что в интервале $0.2 \leq J_2 \leq 1$ наблюдается фазовый переход второго рода. Для значений $J_2 \leq 0.1$ в системе отсутствует порядок и наблюдаются фрустрации. Показано, что при значении $J_2 = 0$ основное состояние системы сильно вырождено. Учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей приводит к снятию вырождения основного состояния для значений $J_2 \geq 0.1$.

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). P. 624.
- [2] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. JMMM **384**, 247 (2015).
- [3] A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **65**, 1455 (2023).
- [4] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [5] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
- [6] L. Schwenger, K. Budde, C. Voges, H. Pfner. Phys. Rev. Lett. **73**, 296 (1994).
- [7] K. Budde, L. Schwenger, C. Voges, H. Pfner. Phys. Rev. B **52**, 9275 (1995).
- [8] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
- [9] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
- [10] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Phys. A **521**, 543 (2019).
- [11] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [12] F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. Phys. Solid State. **60**, 1090 (2018).
- [13] М.А. Фадеева, Л.Н. Шур. ЖЭТФ **162**, 909 (2022).
- [14] A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
- [15] Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев. ЖЭТФ **163**, 816 (2023).
- [16] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФММ **124**, 339 (2023).
- [17] M.G. Townsend, G. Longworth, E. Roudaut. Phys. Rev. B **33**, 4919 (1986).
- [18] Y. Chiaki, O. Yutaka. J. Phys. A **34**, 8781 (2001).
- [19] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 0561011–1 (2001).
- [20] F.A. Kassan-Ogly F.A., B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. JMMM **24**, 3418 (2012).
- [21] K. Binder, D. Heermann. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction. Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
- [22] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [23] М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
- [24] A.K. Муртазаев, Т.Р. Ризванова, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов. ФТТ **62**, 1278 (2020).

Редактор Ю.Э. Китаев