05,07,10

Фазовые переходы в модели Изинга со смешанным спином на квадратной решетке

© М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, С.Ш. Гасанов

Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Махачкала, Россия

E-mail: magomedov_ma@mail.ru

Поступила в Редакцию 13 мая 2025 г.
В окончательной редакции 8 октября 2025 г.
Принята к публикации 22 октября 2025 г.

Высокоэффективными репличным-обменным алгоритмом метода Монте-Карло исследована модель Изинга со смешанным спином $S = (1/2, 1)$ на квадратной решетке. Изучена система с фиксированными параметрами обменных взаимодействий и анизотропии: $J_1 = -1$ (между спинами в подрешетках A и B), $J_2 = -0.5$ (между спинами в подрешетке B) и $D = 1.0$ (анизотропия для спинов в подрешетке B). Рассчитаны температурные и полевые зависимости основных термодинамических характеристик (энергии, теплоемкости, энтропии, намагниченности). Визуализированы структуры основного состояния. Обнаружено наличие двух последовательных фазовых переходов: при $T_{C1} = 0.285$ происходит переход в частично разупорядоченное состояние, а при $T_{C2} = 0.35$ — переход в парамагнитное состояние. Детальный анализ полевых зависимостей выявил сложную, многоступенчатую кривую намагничивания, указывающую на множественные фазовые переходы, индуцированные полем. Обнаружена серия плат намагниченности, для каждой из которых определена магнитная структура. Рассчитаны критические значения поля, соответствующие переходам между этими фазами, что способствовало всестороннему пониманию фазовой диаграммы системы и ее реакции на внешние воздействия.

Ключевые слова: модель Изинга со смешанным спином, структура основного состояния, фазовые переходы, репличный-обменный алгоритм, метод Монте-Карло.

DOI: 10.61011/FTT.2025.11.62134.116-25

1. Введение

Исследование магнитных свойств низкоразмерных спиновых систем остается одной из центральных задач физики конденсированного состояния. Эти системы не только демонстрируют богатое разнообразие критических явлений и фазовых переходов, но и представляют значительный интерес для прикладных областей, таких как спинтроника, хранение информации и разработка новых магнитных материалов [1–3]. Среди множества теоретических моделей, используемых для описания таких систем, модель Изинга занимает особое место благодаря своей концептуальной простоте и одновременно способности описывать сложные физические явления, включая кооперативное поведение, возникновение дальнего порядка и влияние беспорядка [4,5]. Несмотря на существование точных решений для одномерного и двумерного случая однородной модели, более сложные модификации, такие как модели со смешанным спином, до сих пор представляют собой нерешенную и актуальную проблему.

Особый интерес в этом контексте представляют модели Изинга со смешанным спином, в которых кристаллическая решетка состоит из двух или более подрешеток с разными значениями спинов [4–18]. Такие системы являются естественными моделями для описания ферримагнетиков, в которых компенсация магнитных моментов приводит к появлению уникальных термодинамических характеристик, таких как точка компенсации. Комбинации целых и полуцелых спинов, например, $S = (1/2, 1)$ и $S = (3/2, 2)$, являются особенно интересными, так как в них сочетаются эффекты квантовой и классической природы, что приводит к сложному конкурентному поведению между обменными взаимодействиями, анизотропией и внешними полями [9–11].

Значительное количество работ было посвящено изучению моделей со смешанным спином с использованием различных теоретических и вычислительных подходов, включая метод среднего поля, теорию эффективного поля и метод Монте-Карло (ММК) [12–16]. В частности, для системы $S = (1/2, 1)$ на квадратной решетке была исследована фазовая диаграмма и критическое поведение [12,13]. Было показано, что введение следующего за ближайшим соседом обменного взаимодействия (J_2) и одноионной анизотропии (D) может приводить к появлению новых фаз, включая частично упорядоченные состояния, и влиять на последовательность фазовых переходов [14,15].

Несмотря на значительный прогресс в изучении моделей со смешанным спином, их фазовое поведение и, в особенности, тонкие эффекты, связанные с последовательностью фазовых переходов, требуют дальнейшего углубленного исследования. Применение современных вычислительных методов, в частности, высокоэффектив-

ных алгоритмов Монте-Карло, открывает новые возможности для детального анализа таких систем, позволяя преодолевать ограничения, связанные с их сложным энергетическим ландшафтом и сильными флуктуациями.

В нашей предыдущей работе [18] с использованием репличного обменного алгоритма Монте-Карло были проведены исследования модели Изинга со смешанным спином $S = (1/2, 1)$ на квадратной решетке. Исследование, выполненное для системы с линейным размером $L = 10$, позволило идентифицировать четыре различные магнитные фазы (AF, $B{-}AF$, $0I$ и $0II$) и построить общую фазовую диаграмму в зависимости от параметров обмена и анизотропии. Для каждой из идентифицированных фаз были рассчитаны температурные зависимости ключевых термодинамических параметров.

Последующие, более детальные расчеты на системах с увеличенными линейными размерами ($L = 20$, 40 и 100) в целом подтвердили установленную ранее картину. Однако ключевым отличием и основным предметом настоящего исследования стало поведение системы в фазе $0I$. Было обнаружено, что при $L > 20$ в этой фазе наблюдается не один, а два последовательных фазовых перехода, ранее не идентифицированных. С повышением температуры система претерпевает переход из упорядоченной фазы $0I$ в промежуточную частично разупорядоченную фазу, а затем — в парамагнитное состояние.

В рамках данной работы проведены детальные исследования двухэтапного механизма фазового перехода в фазе $0I$, который проявляется только при корректном учете конечно-размерных эффектов с использованием достаточно больших систем.

Настоящая статья посвящена всестороннему изучению этого сложного явления. Мы фокусируемся на наборе параметров ($J_1 = -1$, $J_2 = -0.5$, $D = 1.0$), соответствующем фазе $0I$, с целью установить физическую природу каждого из двух фазовых переходов и охарактеризовать свойства возникающей промежуточной частично разупорядоченной фазы. Нами, используя расчеты термодинамических величин и визуализацию спиновых конфигураций, дано микроскопическое описание процесса разрушения магнитного порядка при нагревании.

2. Модель и метод исследования

Модель Изинга со смешанным спином $S{=}(1/2, 1)$ может быть задана следующим гамильтонианом [6–11,18]:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle \in B} S_i S_j + D \sum_{j \in B} S_j^2 - h \sum_{i \in A} \sigma_i - h \sum_{i \in B} S_i,$$

$$\sigma_i = \pm 1/2, \quad S_i = 0, \pm 1, \qquad (1)$$

где первая сумма учитывает обменное взаимодействие между спинами в подрешетке A и подрешетке B, вторая сумма — обмен только между спинами в подрешетке B, третья — одноионную анизотропию спинов в подрешетке B, четвертая и пятая — влияние внешнего магнитного поля.

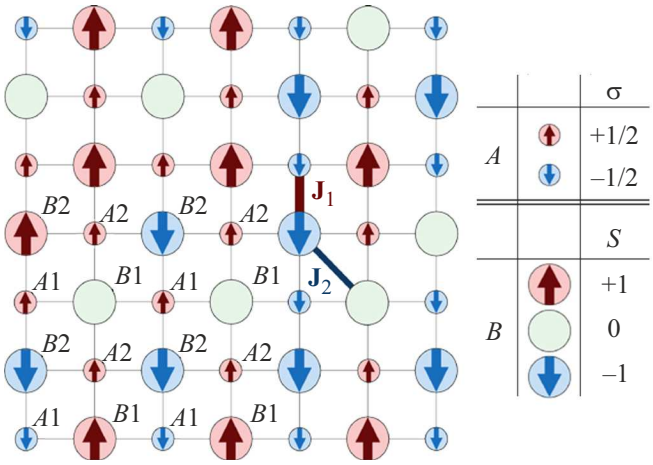


Рис. 1. Модель Изинга со смешанным спином.

Решетка со спинами в узлах, условные обозначения различных состояний спинов и обменные взаимодействия между спинами приведены на рис. 1. Квадратная решетка разбивается на две подрешетки A и B, каждая из которых также делится на две подподрешетки $A1$, $A2$, $B1$ и $B2$. На рис. 1 для части узлов указаны и соответствующие подрешетки.

Данная модель обладает достаточно богатой картиной фаз, в которых система оказывается в зависимости от значений J_1, J_2 и D. В настоящей работе нами приводятся результаты моделирования для случая фиксированного значения $J_1 = -1$, $J_2 = -0.5$, $D = 1.0$. При данных значениях параметров в основном состоянии система находится в фазе, обозначаемой как $0I$, в которой спины в подрешетке A направлены вверх, спины в подрешетке $B1$ принимают нулевые значения, а спин в подрешетке $B2$ направлены вниз. В отсутствии внешнего магнитного поля основное состояние системы вырождено четырехкратно. Одно из четырех возможных структур основного состояния системы приведено на рис. 2. Энергия основного состояния системы при этом определяется как

$$E_{0I} = \frac{1}{2} J_1 + \frac{1}{4} D = -0.25.$$

Температурные и зависимости модели Изинга со смешанным спином $S = (1/2, 1)$ исследованы с помощью репличного обменного алгоритма Монте-Карло. Выбор данного метода обусловлен его доказанной эффективностью при изучении систем с конкурирующими взаимодействиями и сложной энергетической структурой. Подробности реализации и обоснование применимости репличного обмена Монте-Карло можно найти в работах [18–20] и ссылках в них. Расчеты проводились

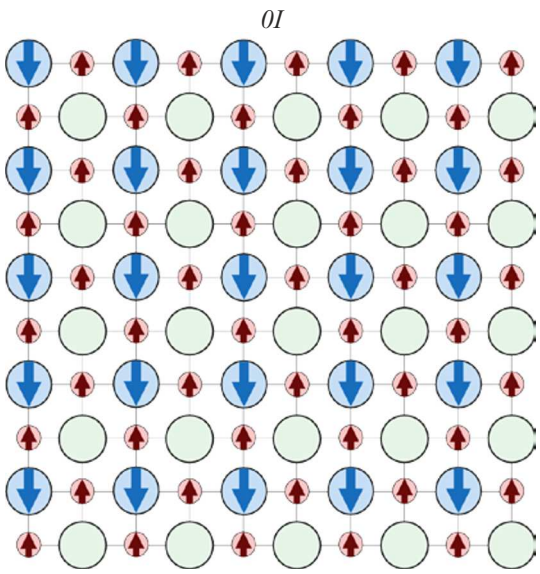


Рис. 2. Магнитная структура основного состояния при $J_1 = -1$, $J_2 = -0.5$, $D = 1.0$.

одновременно для 300 реплик с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, где L — линейный размер решетки ($L = 10$, 20, 40 и 100), N — количество спинов в системе. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 2 \cdot 10^4$ шагов ММК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 50\tau_0$.

Основные термодинамические параметры (энергия E, теплоемкость C, энтропия S, намагниченность системы m и магнитные моменты подрешеток m_A и m_B, а также параметр порядка q) были вычислены по формулам:

$$\langle E \rangle = \langle H \rangle, \tag{2}$$

$$C = \frac{1}{Nk_B T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right), \tag{3}$$

$$S = \int_0^T \frac{C}{T} dT, \tag{4}$$

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \in A} \sigma_i + \sum_{j \in B} S_j \right\rangle, \tag{5}$$

$$m_A = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j \in A} \sigma_i \right\rangle, \tag{6}$$

$$m_B = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j \in B} S_j \right\rangle, \tag{7}$$

$$q = |m_{B1} - m_{B2}| = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{j \in B1} S_j - \sum_{j \in B2} S_j \right| \right\rangle, \tag{8}$$

где E — энергия системы. Температура дана в единицах $|J_1|$.

3. Результаты моделирования

Температурная зависимость внутренней энергии системы для различных линейных размеров решетки представлена на рис. 3. Следует отметить, что для удобства сравнения и обобщения результаты представлены в безразмерных единицах, нормированных на обменное взаимодействие J_1. Такая нормировка позволяет сравнивать результаты для систем с разными J_1 и выявлять общие закономерности.

Температурная зависимость теплоемкости для систем с различными линейными размерами приведена на рис. 4. Анализ этой зависимости позволяет получить информацию о том, как система аккумулирует и высвобождает энергию при изменении температуры, а также о наличии фазовых переходов.

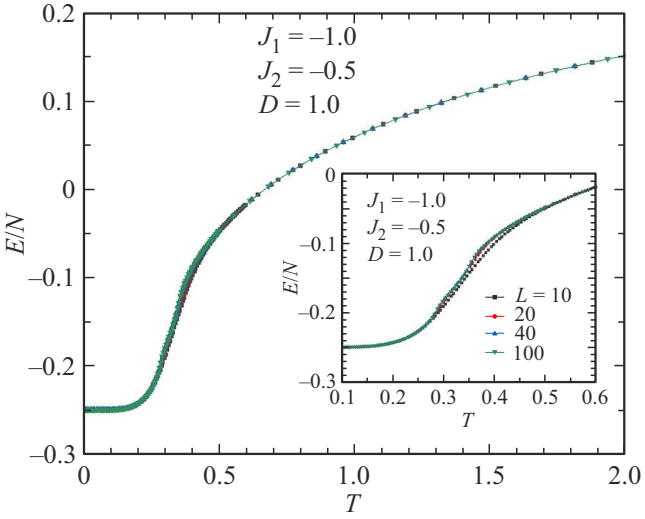


Рис. 3. Температурная зависимость внутренней энергии системы E.

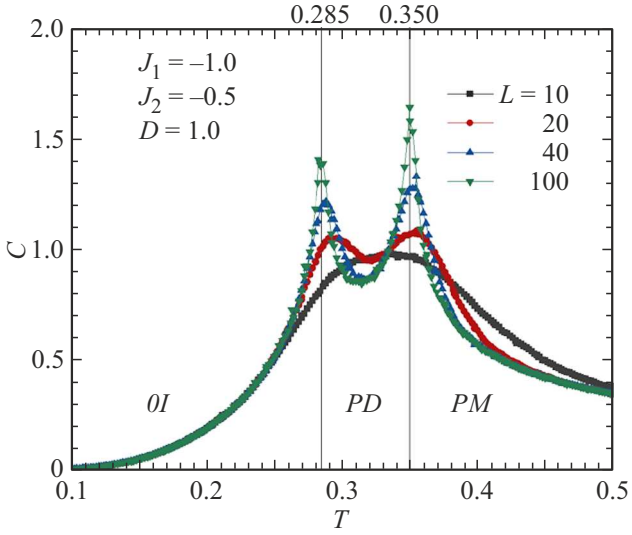


Рис. 4. Температурная зависимость теплоемкости системы C.

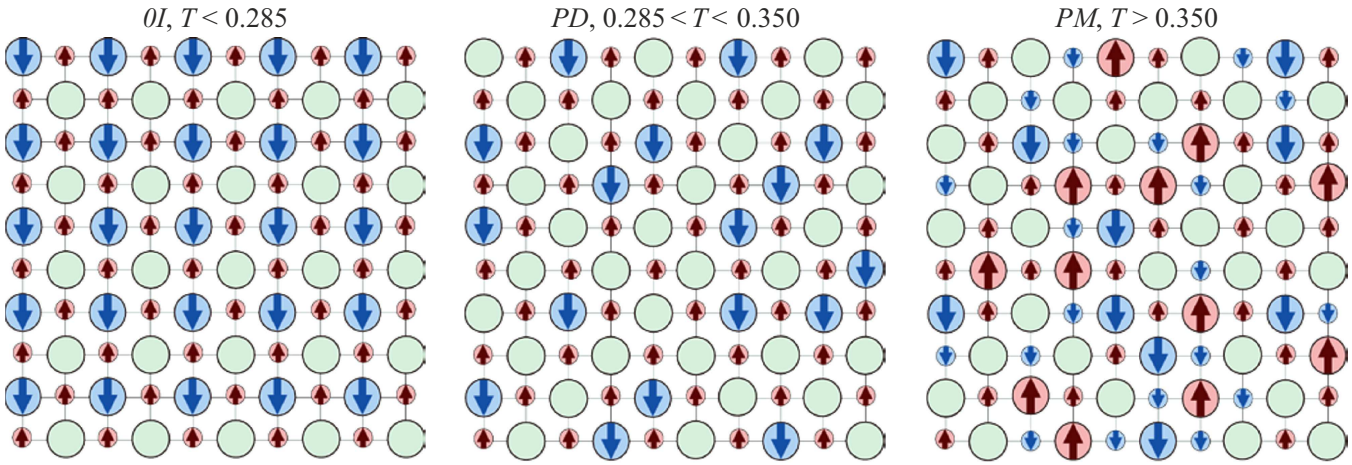


Рис. 5. Магнитные структуры системы при различных температурах.

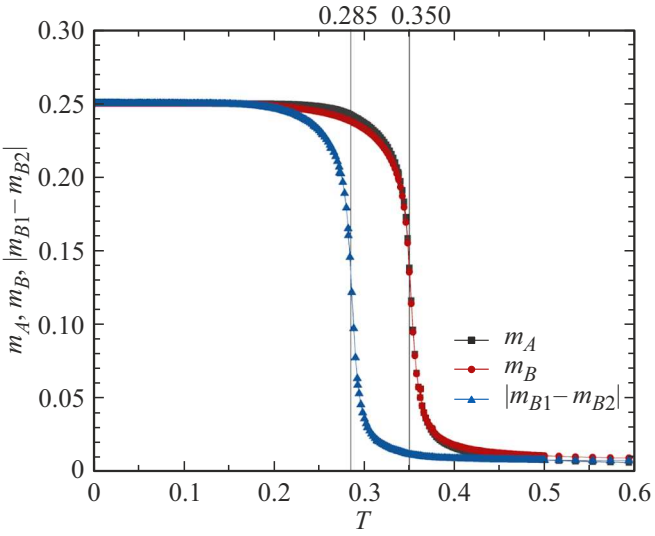


Рис. 6. Температурные зависимости магнитных моментов подрешеток m_A, m_B и параметра порядка $q = |m_{B1}-m_{B2}|$.

Визуально, на графике наблюдаются два максимума теплоемкости — в системе происходят два фазовых перехода. Первый фазовый переход происходит в критической точке $T_{C1} = 0.285$, соответствующей первому максимуму теплоемкости. При этом система переходит из упорядоченного состояния (фаза *0I*), в частично разупорядоченное состояние (фаза *PD*). В этом состоянии спины в подрешетке A сохраняют порядок и принимают значения $+1/2$, а спины в подрешетке B принимают случайные значения -1 или 0, при этом доля спинов с значением -1 равняется доле спинов со значением 0. Таким образом расчет значений намагниченности подрешеток не дают информации о фазовом переходе. Для обнаружения данного фазового перехода следует воспользоваться параметром порядка q, заданным формулой (8). При достижении температуры $T_{C2} = 0.35$ происходит второй фазовый переход: система из частичной разупорядоченной фазы переходит в парамагнитное состояние (фаза *PM*).

Более наглядно данный процесс приведен на рис. 5, на котором приведены типичные магнитные структуры при $T < T_{C1}$, $T_{C1} < T < T_{C2}$ и $T > T_{C2}$.

На рис. 6 приведены температурные зависимости магнитных моментов подрешеток m_A, m_B и параметра порядка $q = |m_{B1}-m_{B2}|$. Для наглядности на рисунке приведены данные только для систем с линейными размерами $L = 100$. Как видно из рисунка, величины m_A, m_B хорошо описывают фазовый переход из частично разупорядоченного состояния в парамагнитное состояние при $T_{C2} = 0.35$, в то время как параметр порядка q является чувствительным к фазовому переходу из упорядоченного состояния в частично разупорядоченное состояние при $T_{C1} = 0.285$.

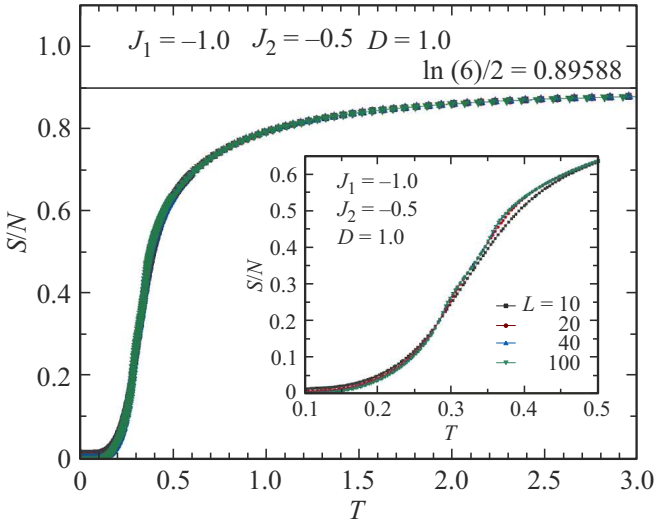


Рис. 7. Температурная зависимость энтропии системы S.

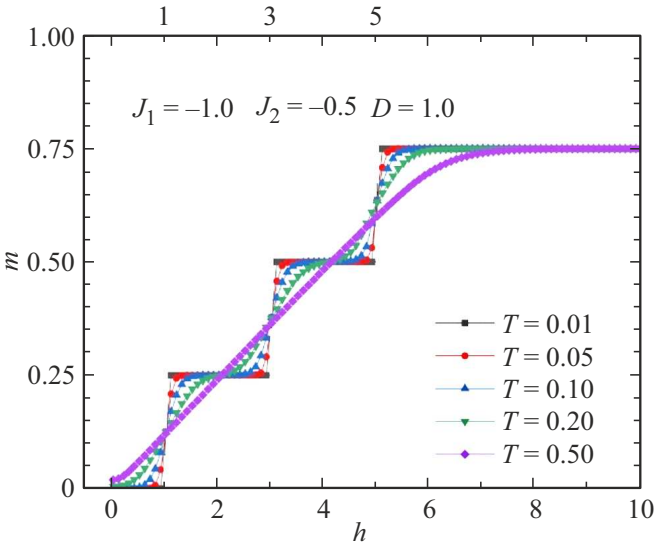


Рис. 8. Полевая зависимость намагниченности m.

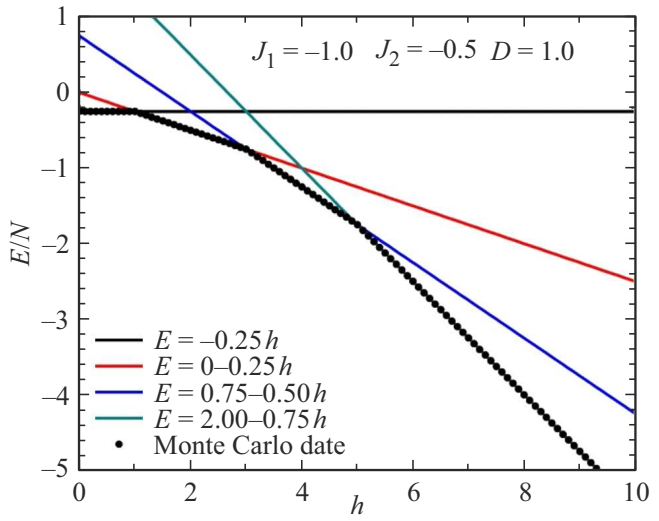


Рис. 9. Полевая зависимость энергии системы E.

На рис. 7 приведена температурная зависимость энтропии S для систем с различными линейными размерами. С понижением температуры энтропия стремится к значению $\ln(4)/N$, что связано с четырехкратным вырождением основного состояния. С повышением температуры энтропия постепенно возрастает, стремясь к теоретическому пределу $\ln(6)/2 \approx 0.89588$. Эта величина соответствует максимально возможной неупорядоченности для системы, учитывая количество доступных спиновых конфигураций. Как видно из рисунка, размерные эффекты проявляются в основном вблизи фазовых переходов.

Значительный фундаментальный интерес представляет также исследование поведения системы во внешнем магнитном поле. Полевые зависимости намагниченности при различных температурах приведены на рис. 8. Как видно из рисунка, с ростом магнитного поля происходят несколько скачков намагниченности. При достижении значения магнитного поля $h = 1$ система из фазы *0I* переходит в ферримагнитное состояние с намагниченностью $m = 0.25$. Следующий скачок намагниченности до значения $m = 0.5$ происходит при $h = 3$. Наконец, при достижении значения магнитного поля $h = 5$ система переходит в полностью упорядоченное состояние (индуцированное полем ферромагнитное состояние). Ступенчатый характер намагниченности является следствием конкуренции между Зеемановской энергией (стремящейся выстроить спины по полю) и энергиями обменного взаимодействия и анизотропии (стремящимися сохранить антиферромагнитный порядок). Система переходит в новое состояние, когда выигрыш в энергии от взаимодействия с полем начинает превышать энергию, необходимую для „переворота“ очередной группы спинов.

На рис. 9 также приведена полевая зависимость полной энергии системы, состоящей из энергии обменного взаимодействия и вклада спин-полевого взаимодействия. Изломы на полевых зависимостях полной энергии соответствуют скачкам намагниченности.

На рис. 10 представлены магнитные конфигурации основного состояния, полученные при различных значениях внешнего магнитного поля и температуре $T = 0.01$, соответствующие различным плато намагниченности на рис. 8.

4. Заключение

В данной работе проведено комплексное компьютерное моделирование модели Изинга со смешанным спином $S = (1/2, 1)$ на квадратной решетке с использованием высокоэффективного репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. Исследование выполнено для модели, в которой учитывается обменное взаимодействие между спинами в подрешетке A и B $(J_1 = -1)$, обменное взаимодействие между спинами в подрешетке B $(J_2 = -0.5)$, а также анизотропия для спинов в подрешетке B $(D = 1.0)$.

Методом компьютерного моделирования определены магнитные структуры основного состояния системы. Рассчитаны температурные зависимости ключевых термодинамических характеристик системы: энергии E, теплоемкости C, энтропии S, намагниченности m. Показано, что в системе происходят два фазовых перехода. При температуре $T_{C1} = 0.285$ происходит фазовый переход из упорядоченного состояния в частично разупорядоченное состояние, а при достижении температуры $T_{C2} = 0.35$ происходит переход в парамагнитное состояние.

Изучено влияние внешнего магнитного поля на магнитную структуру системы. Показано, что наблюдается ступенчатый рост намагниченности с повышением

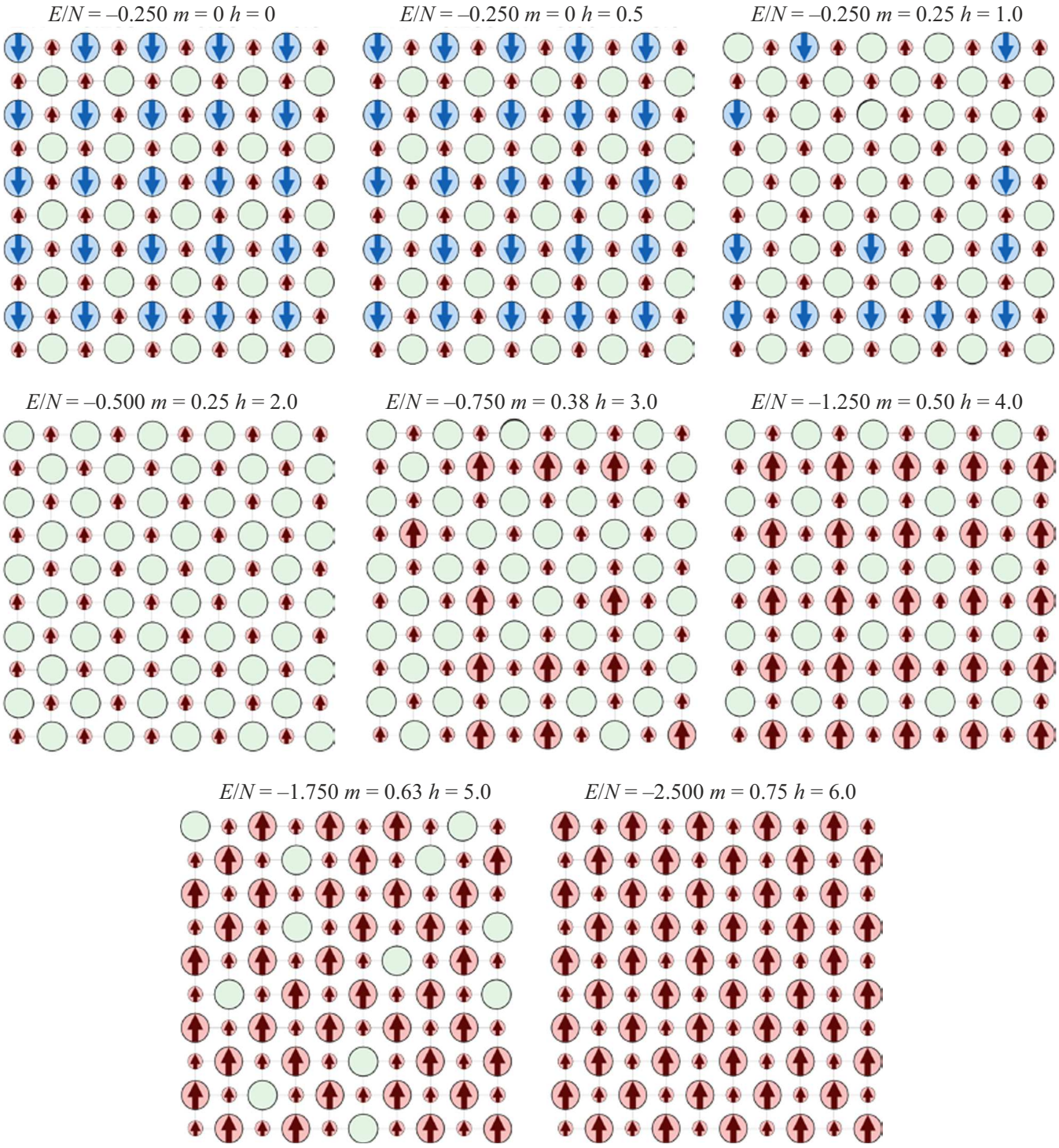


Рис. 10. Магнитные структуры основного состояния при различных значениях магнитного поля h (при $T = 0.01$).

магнитного поля. Определены магнитные структуры, соответствующие каждому плато намагниченности.

Финансирование работы

Исследование выполнено в 20 рамках научной программы НЦФМ (проект „Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях“).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] T.D. Schultz, D.C. Mattis, E.H. Lieb. Rev. Mod. Phys. **36**, 856–871 (1964).
[2] M. Hattori. Prog. Theor. Phys. **35**, *4*, 600–614 (1966).
[3] I. Syozi, H. Nakano. Prog. Theor. Phys. **13**, *1*, 69–78 (1955).
[4] G.M. Buendia, M.A. Novotny. J. Phys.: Condens. Matter. **9**, 5951 (1997).
[5] M. Godoy, W. Figueiredo. Phys. Rev. E **65**, 026111 (2002).
[6] J. Oitmaa, I.G. Enting. J. Phys. Condens. Matter. **18**, 10931 (2006).
[7] W. Selke, J. Oitmaa. J. Phys.: Condens. Matter. **22**, 076004 (2010).
[8] W. Selke, C. Ekiz. J. Phys.: Condens. Matter. **23**, 496002 (2011).
[9] C. Ekiz, R. Erdem. Phys Lett A. **352**, *4*, 291–295 (2006).
[10] M. Gharaibeh, A. Obeidat, M.-K. Qaseer, M. Badarneh. Physica A **550**, 124147 (2020).
[11] S.S. Akimenko, A.V. Myshlyavtsev, M.D. Myshlyavtseva. JMMM **530**, 167929 (2021).
[12] A. Jabar, R. Masrour, A. Benyoussef, M. Hamedoun. Chem Phys Lett. **670**, 16–21 (2017).
[13] J.S. da Cruz Filho, M. Godoy, A.S. de Arruda. Physica A **392**, 6247–6254 (2013).
[14] N. de la Espriella, G.M. Buendía, J.C. Madera. J. Phys. Commun. **2**, 025006 (2018).
[15] A. Özkan. Ph. Transit. **89**, 94–105 (2016).
[16] E. Albayrak. Int. J. Mod. Phys. B **34**, *13*, 2050129 (2020).
[17] A. Dakhama, N. Benayad. J. Magn. Magn. Mater. **213**, *1*, 117–125 (2000).
[18] М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, С.Ш. Гасанов. Вестник ДГУ. Серия I. Естественные науки **39**, 15–25 (2024).
[19] M. Hagen, B. Kim, P. Liu, L.A. Friesner, B.J. Berne. J. Phys. Chem. B **111**, 1416–1423 (2007).
[20] Y. Sugita, Y. Okamoto. Chem. Phys. Lett. **329**, *3–4*, 261–270 (2000).

Редактор А.Н. Смирнов