

10,11,15

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с $C_q = 4$ на гексагональной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей

© М.К. Рамазанов^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,2}, М.А. Магомедов^{1,2}, М.К. Мазагаева¹

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

² Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН, Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 31 октября 2019 г.

В окончательной редакции 31 октября 2019 г.

Принята к публикации 07 ноября 2019 г.

На основе алгоритма Ванга–Ландау методом Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния, фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к появлению фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

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

DOI: 10.21883/FTT.2020.03.49011.621

1. Введение

При количественном описании фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств в современной физике конденсированного состояния используются различные решеточные модели. Одними из таких моделей являются модели Изинга и Поттса. Эти модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1–3].

В настоящее время двумерная модель Изинга изучена достаточно хорошо и известны практически все ее свойства [4–7]. Для двумерной модели Поттса с различным числом состояний спина q существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [8–10]. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ до сих пор мало изучена. Данная модель интересна 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 [11].

В работе [12] нами методом Монте-Карло (МК) была исследована двумерная ферромагнитная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке. Было показано, что в данной модели при взаимодействии только ближайших соседей наблюдается ФП первого рода. Особый интерес представляет исследование этой модели с учетом взаимодействий вторых

ближайших соседей. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на термодинамическое, магнитное и критическое поведение.

В настоящее время исследованию спиновых систем с фрустрациями уделяют большое внимание. Это связано с тем, что фрустрации играют важную роль в различных магнитных системах. Кроме того, фрустрированные спиновые системы проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем.

При исследовании модели Поттса основное внимание до сих пор уделялось спиновым системам с взаимодействиями ближайших соседей. Численное исследование на основе метода МК модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей на треугольной решетке проведено в работе [3]. В этой работе изучены магнитные и критические свойства данной модели. Исследования влияния антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей, а также эффектов фрустрации на ФП, термодинамические свойства и магнитные структуры основного состояния модели Поттса с $q = 4$ на гексагональной решетке в литературе практически не встречаются.

В связи с этим, в данной работе, нами предпринята попытка на основе метода МК провести исследование ФП, термодинамических свойств и магнитных структур основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

с ферромагнитным взаимодействием первых и антиферромагнитным взаимодействием вторых ближайших соседей.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения данной модели и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследование рассматриваемой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП и термодинамическими свойствами фрустрированных спиновых систем и систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, $r = J_2/J_1$ — величина взаимодействия вторых ближайших соседей. В данной работе рассматривается случай, когда $r = 1.0$.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [13–16]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау метода МК [11,17], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Алгоритм Ванга–Ландау основан на том, что совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подобрать вероятности перехода такими, что посещение всех энергетических состояний стало бы равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$, зная которую можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре. Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$. Более подробно

алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [13,17,18]. Таким образом, определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} = \langle E \rangle_T, \quad (2)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (3)$$

$$C = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (4)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (5)$$

где $K = |J_1|/k_B T$, N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U — внутренняя энергия (U является нормированной величиной).

Для анализа характера ФП нами был использован метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных метода МК [18,19].

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 96$.

3. Результаты моделирования

Анализ данных полученных в рамках данной работы показывает, что для исследуемой модели наблюдается большое количество различных магнитных структур основного состояния. Некоторые из них представлены на рис. 1. На этом рисунке спины обозначены различными кружками.

Спины, обозначенные одинаковыми кружками и имеют одинаковое направление. Видно, что спины могут быть упорядочены в четырех направлениях. В работе [12] для модели Поттса с ферромагнитным взаимодействием первых ближайших соседей было обнаружено, что наблюдается магнитное упорядочение. Из рис. 1 видно, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели приводит к нарушению магнитного упорядочения.

Температурные зависимости энтропии S для систем с линейными размерами $L = 24, 48$ и 72 приведены на рис. 2 (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). На рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия для всех рассмотренных значений L стремится

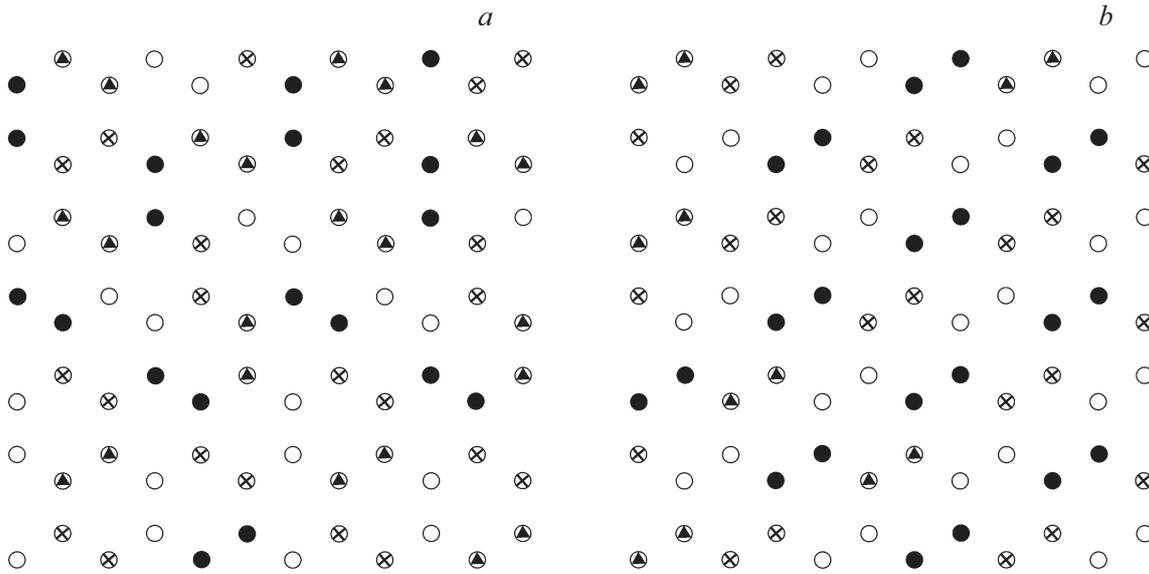


Рис. 1. Магнитные структуры основного состояния.

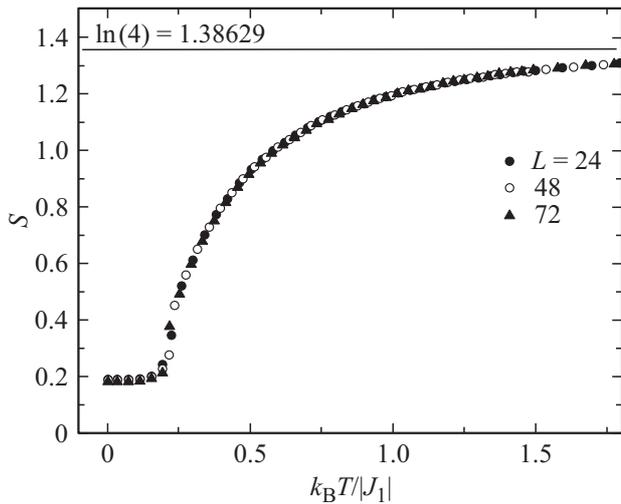


Рис. 2. Температурная зависимость энтропии S .

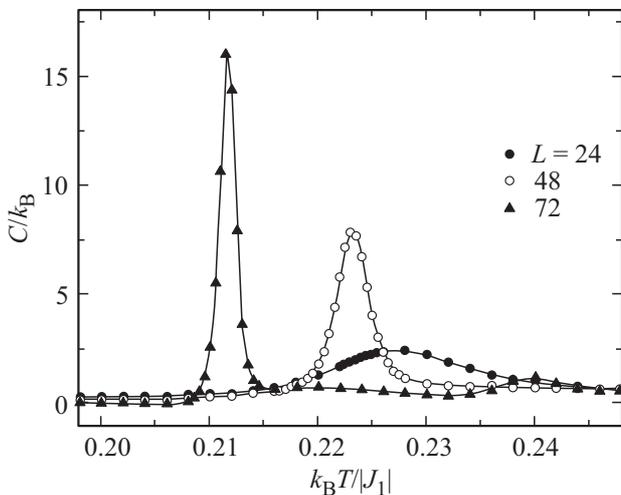


Рис. 3. Температурные зависимости теплоемкости C .

к отличному от нуля значению. Такое поведение энтропии позволяет говорить о том, что в данной модели возникают фрустрации и наблюдается вырождение основного состояния.

На рис. 3 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с линейными размерами $L = 24, 48$ и 72 . Отметим, что в зависимости теплоемкости от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы смещаются в сторону низких температур.

Для анализа характера ФП и определения критической температуры T_C нами использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [19]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \tag{6}$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \tag{7}$$

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (6) и (7) позволяют определить критическую температуру T_C с большой точностью для ФП первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что ФП первого рода характеризуются тем, что величина V_L стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d}, \tag{8}$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_C(L)$, где величина V^* отлична от $2/3$, а минимальная величина $U_{L \min}(T = T_{\min})$ расходится $U_{L \min}(T = T_{\min}) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$.

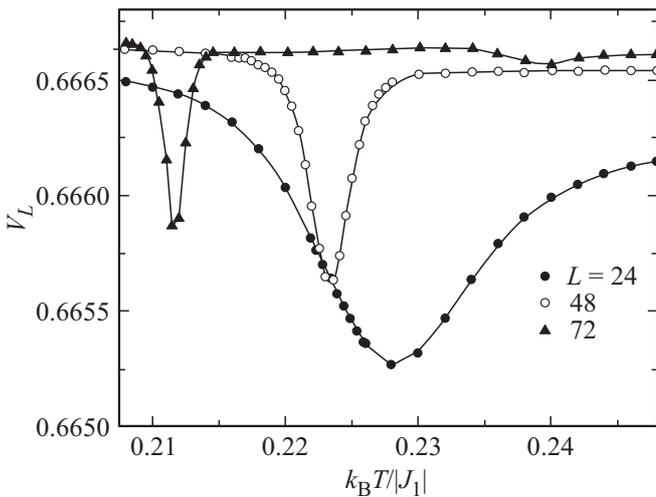


Рис. 4. Температурные зависимости энергетического кумулянта Биндера V_L .

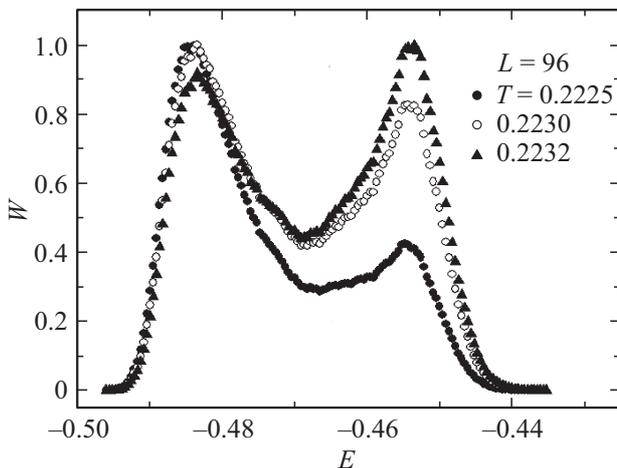


Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для $L = 96$ при различных температурах.

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [19]. Анализ данных полученных в настоящей работе показывает, что температурные зависимости U_L для различных L в критической области не пересекаются в одной точке. Это свидетельствует в пользу наличия в данной модели ФП первого рода.

Температурная зависимость энергетического кумулянта V_L для разных значений L представлена на рис. 4. Как видно из графика величина V_L стремится к $2/3$, а величина $V^* = 2/3$, что характерно для ФП второго рода. Эта величина рассчитана используя выражение (8).

Поэтому, для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [16,17]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [20,21].

Результаты нашей работы, полученные на основе гистограммного анализа, показывают, что ФП в данной модели является переходом первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5.

На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 96$. Графики построены при различных температурах близких критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности W от энергии E для всех температур наблюдаются два максимума, которые свидетельствует в пользу ФП первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределение энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Отметим, что двойные пики для исследуемой модели наблюдаются для систем даже с малыми линейными размерами ($L = 24$).

4. Заключение

Исследование магнитных структур основного состояния, фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Получены магнитные структуры основного состояния. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в системе наблюдается фазовый переход первого рода.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 19-02-00153-а и 18-32-20098-мол-а-вед.

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.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [3] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
- [4] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Phys. B: Condens. Matter. **476**, 1 (2015).
- [5] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).

- [6] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. *Solid State Commum.* **233**, 35 (2016).
- [7] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, M.K. Badiiev. *Phase Transitions* **91**, 610 (2018).
- [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. *Physica A* **521**, 543 (2019).
- [11] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. *J. Phys. A* **31**, 2287 (1998).
- [12] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
- [13] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. *ФТТ* **61**, 1898 (2019).
- [14] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.А. Магомедов, К.Ш. Муртазаев. *Mater. Lett.* **236**, 669 (2019).
- [15] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. *Письма в ЖЭТФ* **109**, 610 (2019).
- [16] А.К. Муртазаев, Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов. *ФТТ* **61**, 2195 (2019).
- [17] F. Wang, D.P. Landau. *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
- [18] F. Wang, D.P. Landau. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
- [19] K. Binder, D.W. Heermann. *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. Springer_Verlag, Berlin (1988); Nauka, Moscow (1995). P. 214.
- [20] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев, М.К. Мазагаева. *ФТТ* **61**, 1170 (2019).
- [21] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. *Письма в ЖЭТФ* **106**, 72 (2017).

Редактор Т.Н. Василевская