

10,11,05

Исследование влияния слабых магнитных полей на термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке

© М.К. Рамазанов^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,2}, М.А. Магомедов^{1,2}, М.К. Мазагаева¹,
М.Р. Джамалудинов¹

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 22 октября 2021 г.

В окончательной редакции 22 октября 2021 г.

Принята к публикации 24 октября 2021 г.

Репличным обменным алгоритмом метода Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке в слабых магнитных полях. Исследования проведены для интервала величины магнитного поля $0.0 \leq H \leq 3.0$ с шагом 1.0. Установлено, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдается фазовый переход первого рода.

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

DOI: 10.21883/FTT.2022.02.51935.226

1. Введение

В последние годы в физике конденсированного состояния наблюдается повышенный интерес к исследованию влияния различных возмущающих факторов на фазовые переходы (ФП), магнитные структуры основного состояния, критические, магнитные и термодинамические свойства спиновых систем. На сегодняшний день вопрос о влиянии внешнего магнитного поля, взаимодействий вторых ближайших соседей, немагнитных примесей, тепловых и квантовых флуктуаций имеет принципиальное значение. Включение этих возмущающих факторов может привести к большому разнообразию фаз и ФП в магнитных спиновых системах [1–7]. Особый интерес имеет исследование влияния внешних факторов на спиновые системы с фрустрациями. Это связано с тем, что фрустрированные спиновые системы обладают свойствами отличными от соответствующих нефрустрированных систем. Фрустрированные системы обладают высокой чувствительностью к внешним возмущающим факторам. Внесение внешних возмущений в такие системы может привести к совершенно новому физическому поведению. В связи с этим, в данном исследовании нами изучается влияние слабых магнитных полей на характер ФП и термодинамические свойства спиновых систем с фрустрациями. При решении такого рода задач успешно используют различные решеточные модели, такие как модель Изинга, Поттса, Гейзенберга и др.

К настоящему моменту времени влияние внешних возмущающих факторов, в том числе и магнитного

поля в модели Изинга и Гейзенберга достаточно хорошо изучено [8–13]. Совсем иначе обстоит дело с моделью Поттса. Модель Поттса 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 кубической структуры, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. На основе модели Поттса с различным числом состояний спина могут быть описаны структурные ФП во многих материалах [13]. Работ, посвященных изучению влияния внешнего магнитного поля, как возмущающего фактора, на ФП и термодинамические свойства 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 модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Данная модель интересна еще 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 наблюдается ФП первого рода [14]. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq k} S_i S_k - H \sum_{\langle i \rangle} S_i \\ &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - H \sum_{\langle i \rangle} S_i \end{aligned} \quad (1)$$

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 $S_i - S_k$, H — величина магнитного поля (приводится в единицах J_1). В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1| = |J_2| = 1$. Величина внешнего магнитного поля меняется в интервале $0.0 \leq H \leq 3.0$ с шагом 1.0. Магнитное поле направлено вдоль одного из направлений спина.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\begin{aligned} \theta_{i,j} &= \begin{cases} 0 & \text{if } S_i = S_j \\ 109.47^\circ, & \text{if } S_i \neq S_j \end{cases} \Rightarrow \cos \theta_{i,j} \\ &= \begin{cases} 1 & \text{if } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{if } S_i \neq S_j. \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

Такие системы в настоящее время успешно изучаются на основе метода МК микроскопических гамильтонианов [15–20]. В последние годы разработано много новых алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем являются репличный обменный алгоритм [21].

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

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

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

Для анализа природы и характера ФП использовались метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный метод анализа данных [22–24]. 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 $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 12 \div 60$, 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]:

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

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

На рис. 1 представлены температурные зависимости теплоемкости C для различных значений магнитного поля при $L = 24$. Из рисунка видно, что в интервале $0.0 \leq H \leq 3.0$ вблизи критической области наблюдаются хорошо выраженные максимумы. При включении слабого магнитного поля ($H = 1.0$) максимум теплоемкости смещается в сторону высоких температур. Дальнейший рост поля приводит к сдвигу максимума теплоемкости в сторону низких температур. Такое поведение теплоемкости объясняется тем, что увеличение величины магнитного поля приводит к быстрому упорядочению системы, уменьшению флуктуаций и соответственно уменьшается температура ФП. Для значений поля $H = 2.0$ максимум теплоемкости становится более плавными. Можно предположить, что такое поведение теплоемкости связано с изменением магнитного упорядочения.

Для анализа характера ФП и определения критической температуры ТС нами использовался метод куму-

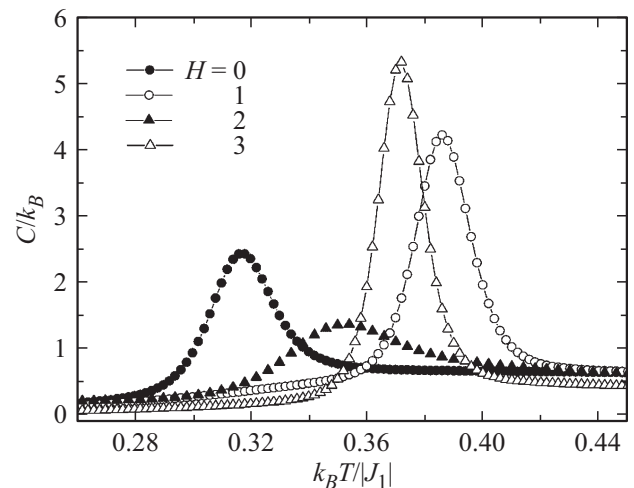


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости C/k_B .

лянтов Биндера четвертого порядка [22]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3\langle U^2 \rangle_L^2} \quad (4)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (5)$$

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле:

$$m = \frac{1}{N} \left(\frac{4N_{\max} - N_1 - N_2 - N_3 - N_4}{3} \right), \quad (6)$$

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

Выражения (4) и (5) позволяют определить критическую температуру T_C с большой точностью для ФП первого и второго рода соответственно. 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

$$V_L = V^* + bL^{-d} \quad (7)$$

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 $L \rightarrow \infty$.

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [22].

На рис. 2 представлена характерная зависимость U_L от температуры для поля $H = 3.0$ при разных значениях L . Из графика видно, что в критической области температурные зависимости U_L не пересекаются в одной точке. Это свидетельствует в пользу наличия в данной модели ФП первого рода. Аналогичная картина наблюдается для всех значений поля в диапазоне $0.0 \leq H \leq 3.0$.

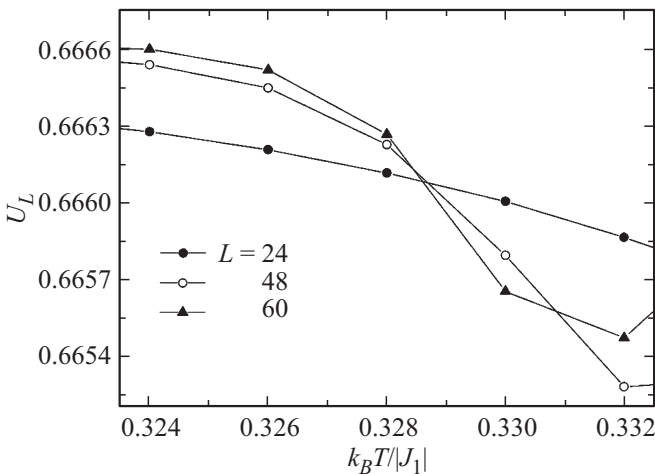


Рис. 2. Температурные зависимости магнитного кумулянта Биндера U_L .

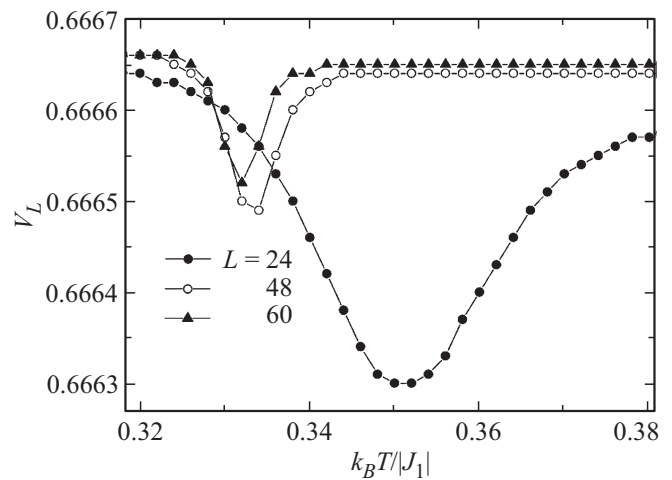


Рис. 3. Температурные зависимости энергетического кумулянта Биндера V_L .

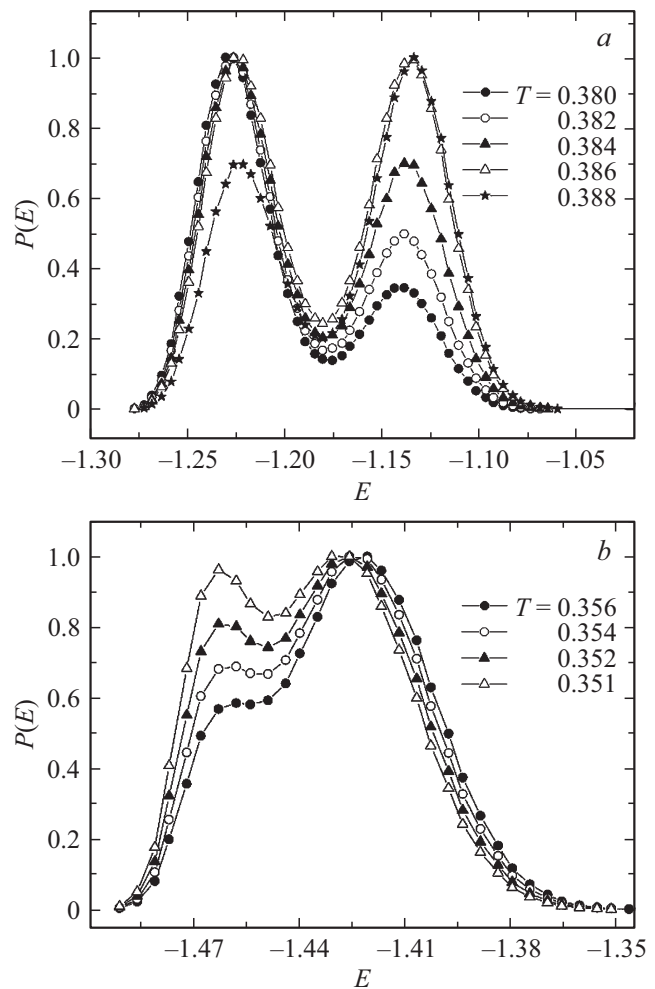


Рис. 4. Гистограммы распределения энергии для $L = 60$ при различных температурах.

Температурная зависимость энергетического кумулянта V_L для поля $H = 3.0$ при разных значениях L представлена на рис. 3. 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 (7).

Для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [23,24]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [17].

Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 4. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для $H = 1.0$ и 2.0 . Графики построены при различных температурах близких критической температуре. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности P от энергии E для всех температур 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 H в интервале $0.0 \leq H \leq 3.0$. Это позволяет нам утверждать о том, что в рассмотренном интервале значений H наблюдаются ФП первого рода.

Результаты данной работы показывают, что слабое внешнее магнитное поле не приводит к смене ФП в исследуемой модели. Исследование ФП данной 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 вторых ближайших соседей выполнено с использованием репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в интервале значений $0.0 \leq H \leq 3.0$ наблюдается фазовый переход первого рода.

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] R.J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic, N.Y. (1982). Mir, Moscow (1985).
- [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**, 235 (1982).
- [5] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
- [6] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
- [7] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. Phys. B: Condens. Matter **476**, 1 (2015).
- [8] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).
- [9] M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
- [10] J.L. Cardy, M. Nauenberg, D.J. Scalapino. Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
- [11] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов. Phys. A **521**, 543 (2019).
- [12] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [13] F.A. Kassan-Ogly, A.I. Proshkin. Phys. Solid State **60**, 1090 (2018).
- [14] H. Feldmann, A.J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, S.-H. Tsai. J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
- [15] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
- [16] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. ФТТ **62**, 442 (2020).
- [17] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
- [18] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФТТ **61**, 1898 (2019).
- [19] А.К. Муртазаев, Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов. ФТТ **61**, 2195 (2019).
- [20] R. Masrour, A. Jabar. Physica A **491**, 926 (2018).
- [21] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- [22] K. Binder, D. Heermann. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction. Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
- [23] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 0561011-1 (2001).
- [24] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [25] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).

Редактор Т.Н. Василевская