

10,11,05

Энергетический анализ магнитных структур основного состояния модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями

© М.К. Рамазанов¹, А.К. Муртазаев¹, М.А. Магомедов¹, Д.Р. Курбанова¹,
К.М. Рамазанов², М.-Ш.С. Хизриев^{1,3}

¹ Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный технический университет,
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 13 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 27 апреля 2022 г.

Принята к публикации 29 апреля 2022 г.

На основе алгоритма Ванга–Ландау методом Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с учетом обменных взаимодействий первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей. Исследования проведены для величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$. Построены магнитные структуры основного состояния в рассмотренном интервале. Проведен энергетический анализ магнитных структур основного состояния. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины J_2 . Показано, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к возникновению фрустраций и нарушению магнитного упорядочения.

Ключевые слова: фрустрации, магнитные структуры, метод Монте-Карло, модель Поттса.

DOI: 10.21883/FTT.2022.08.52706.348

1. Введение

Низкоразмерные решеточные модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. В этих системах из-за конкуренции обменных взаимодействий, геометрических или энергетических ограничений могут возникать фрустрации. Магнитные материалы, имеющие треугольную решетку, вследствие особой геометрии, сильно фрустрированы. С понижением температуры процесс упорядочения в таких системах происходит гораздо медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Такое поведение обусловлено тем, что в системах с меньшим координационным числом возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и локально вырожденные состояния [1–4].

Большинство исследований спиновых систем с фрустрациями до сих пор ограничивалось моделями Изинга, ХУ и Гейзенберга. Для фрустрированной модели Поттса существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [5–11]. Физические свойства модели Поттса сильно отличаются в зависимости от q , типа и пространственной размерности решетки [11–13].

В настоящей работе нами изучается двумерная модель Поттса на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 4$. Эта модель довольно уникальна и до сих пор малоизучена. Модель Поттса может быть использована для описания поведения некоторых классов адсорбированных газов на графите [14]. Данная модель интересна еще и тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается фазовые переходы (ФП) второго рода и области значений $q > 4$, в котором ФП происходит как переход первого рода [12]. Анализ результатов, полученных при исследовании двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной [15], гексагональной [16,17] и кагоме решетках [18], показывает, что в данной модели наблюдается переход, имеющий признаки ФП первого рода.

Исследование двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей в литературе практически не встречается. Конкуренция обменного взаимодействия в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению новых магнитных структур основного состояния, а также влиять на его термодинамические свойства. В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) провести энергетический анализ магнитных структур основного со-

стояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с ферромагнитным взаимодействием первых и антиферромагнитным взаимодействием вторых ближайших соседей. Известно, что при значении $q = 3$ для смешанной ферро-антиферромагнитной модели Поттса наблюдается переход типа Костерлица–Таулеса [19–21]. Поскольку поведение модели Поттса зависит от величины q , особый интерес представляет изучение магнитных и термодинамических свойств для $q = 4$ при различных соотношениях величины антиферромагнитного взаимодействия вторых ближайших соседей. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить закономерности изменения термодинамического поведения фрустрированной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с физикой фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

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

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \delta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \delta_{i,k}, \quad (1)$$

где $\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{если } S_i = S_j \\ 0 & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases}$ (дельта функция), $S_i = 1, 2, 3, 4$, J_1 и J_2 — параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей. В данном исследовании величина взаимодействия вторых ближайших соседей меняется в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$, а $J_1 = 1$.

Схематическое и символьное представление модели приведено на рис. 1. На вставке показано символьное представление для каждого из четырех значений спина. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми J_1 и вторыми J_2 ближайшими соседями.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [22–29]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [30,31], особенно в низкотемпературной области.

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

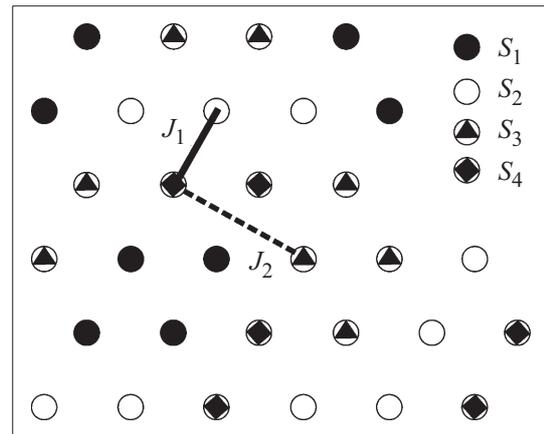


Рис. 1. Схематическое представление модели Поттса.

пространстве энергий с вероятностями обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав 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 $\ln g(E)$.

Алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде.

Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний $g(E) = 1$, гистограммы распределений по энергиям $H(E) = 0$, стартовый модификационный фактор $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$. Многократно совершаем шаги в фазовом пространстве, пока не получим относительно плоскую гистограмму $H(E)$ (т.е. пока не будут посещены примерно одинаковое количество раз все возможные энергетические состояния системы). При этом, вероятность перехода из состояния с энергией E_1 в состояние с энергией E_2 определяется по формуле $p = g(E_1)/g(E_2)$. Если переход в состояние с энергией E_2 состоялся, то $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$, $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$ иначе $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$, $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$. Если гистограмма стала „плоской“ то обнуляем гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$, и продолжаем снова, пока $f \geq f_{\min}$. В нашем случае $f_{\min} = 1.0000000001$. Гистограмма считается достаточно плоской, если в ней значение для всех возможных энергетических состояний принимают не менее 90% от общего среднего значения. В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами внесены дополнения, которые позволяют получить магнитную структуру основного состояния системы. При достижении состояния с минимальной

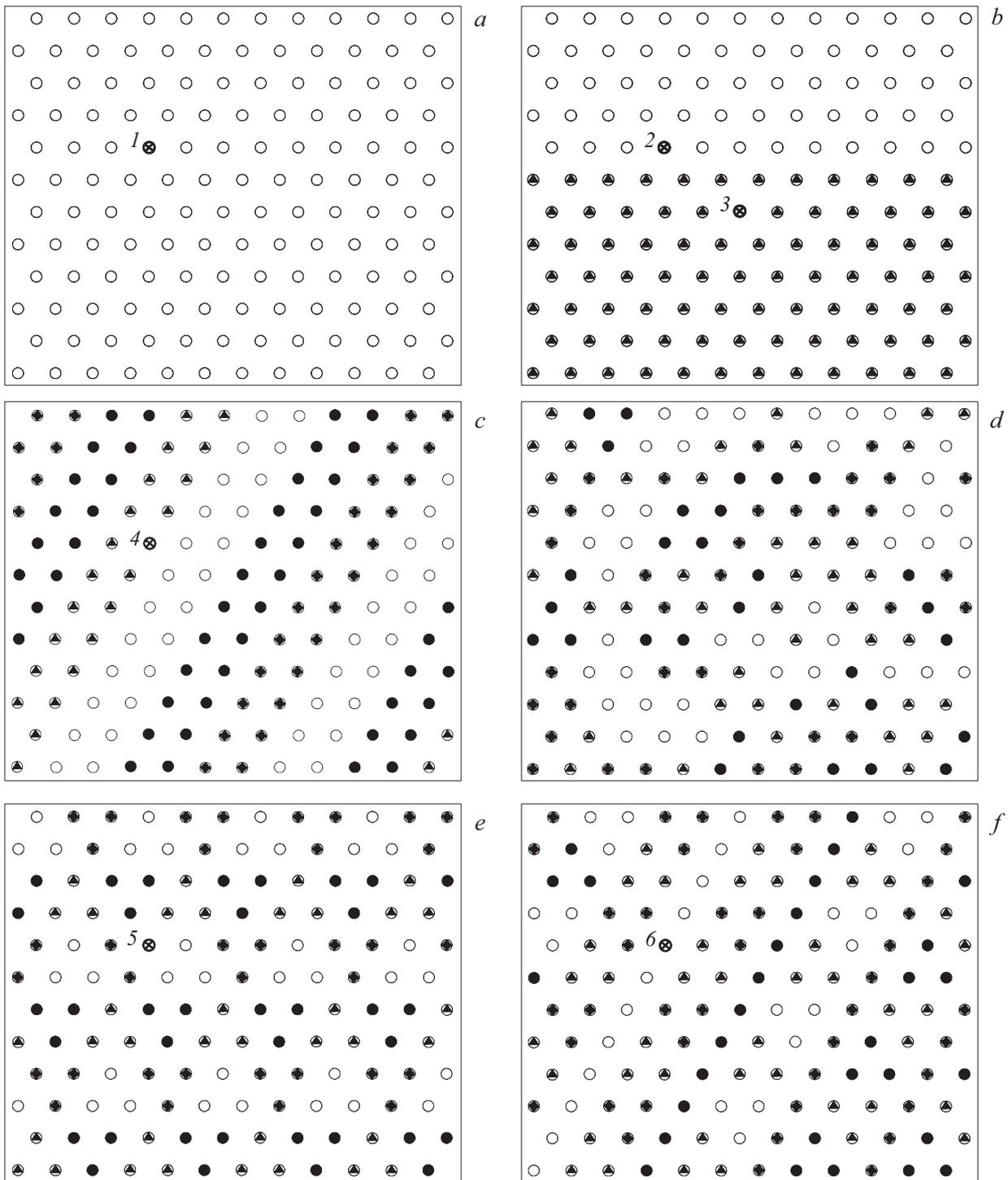


Рис. 2. Конфигурация спинов в одном из основных состояний, реализуемых в системе при $J_1 = 1$ и различных J_2 : (a) $-0.5 \leq J_2$, (b) $J_2 = -0.5$, (c) $-1 < J_2 < -0.5$, (d) $J_2 = -1$, (e) и (f) $J_2 \leq -1$.

энергией (предположительно, основного состояния системы) магнитная структура сохраняется в памяти в виде строки, содержащей значения всех спинов. Определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную

энергию F , удельную теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

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

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

$$C = \left(\frac{(|J_1|/k_B T)^2}{N} \right) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

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

где N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$). Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 120$ в диапазоне $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$.

3. Результаты моделирования

На рис. 2, *a* представлена магнитная структура основного состояния для $J_2 = 0$. Основное состояние является ферромагнитным, в котором все спины ориентированы вдоль одного из четырех направлений — система четырехкратно вырождена. Такая картина наблюдается в интервале $-0.4 \leq J_2 \leq 0$. На рис. 2, *b* приведены магнитные структуры основного состояния для случая $J_2 = -0.5$. Как видно на рисунке происходит нарушение ферромагнитного упорядочения. Наблюдаются полосовые структуры разной ширины. На рис. 2, *c* приведены магнитные структуры основного состояния для случая $J_2 = -0.7$. На рисунке наблюдаются полосовые структуры, причем эти структуры могут отличаться направлением полос. Такая картина наблюдается в интервале $-1 \leq J_2 < -0.5$. Количество состояний $\ln(N_{GS}) \propto L$. Для случая $J_2 = -1$ (рис. 2, *d*) наблюдается нарушение магнитного упорядочения типа полосовых структур. В системе на фоне полосовых структур возникают области с триплетным упорядочением. Степень вырождения основного состояния в данном случае $\ln(N_{GS}) \propto L^2$. В интервале $-2.0 \leq J_2 \leq -1$ (рис. 2, *e, f*) в системе возникают триплетные и страйпово-триплетные структуры. Количество состояний $\ln(N_{GS}) \propto L$.

Для энергетического анализа магнитных структур основного состояния нами отмечены узлы на решетке размерами 12×12 , приведенной на рис. 2. Каждый узел имеет 6 ближайших соседей и 6 следующих ближайших соседей. Энергетический вклад узла i определяется как

$$E_i = -\frac{J_1}{2} \sum_j \delta_{i,j} - \frac{J_2}{2} \sum_k \delta_{i,k} = -\frac{J_1}{2} n - \frac{J_2}{2} m, \quad (6)$$

где n — число ближайших соседей, имеющих то же значение, что и данный спин, m — число следующих ближайших соседей, имеющих то же самое значение.

В зависимости от структуры и положения спина на решетке возможны следующие варианты, приведенные на рис. 2.

1. Все соседи спина имеют то же самое значение ($n = 6$ и $m = 6$).

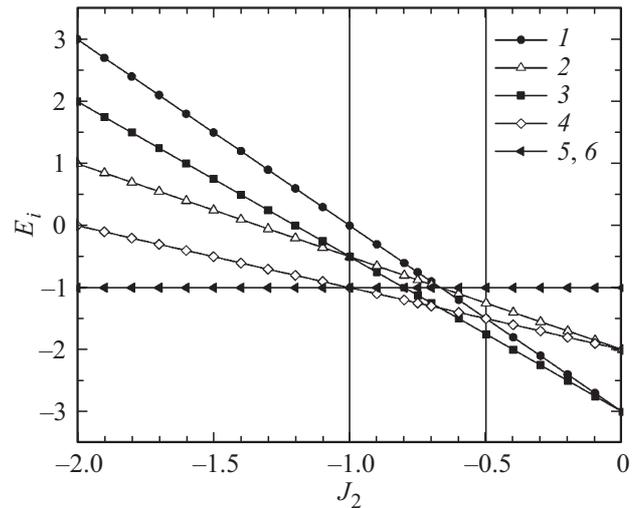


Рис. 3. Энергетический анализ магнитных структур основного состояния.

2. Спин находится на границе двух широких полос ($n = 4$ и $m = 3$).

3. Спин находится на второй линии от границы двух широких полос ($n = 6$ и $m = 5$).

4. Спин в страйповой структуре с шириной 2 полосы ($n = 4$ и $m = 2$).

5. Любой из узлов на триплетной структуре ($n = 2$ и $m = 0$).

6. Любой из узлов на триплетной структуре ($n = 2$ и $m = 0$).

7. Спины на решетке с фрустрациями имеют случайное число n и m .

Зависимость энергии этих узлов от величины J_2 приведена на рис. 3 (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для построения зависимостей). В зависимости от структуры основного состояния система может содержать разное количество узлов типа 1–7. Структуры, приведенные на рис. 2 для решетки 12×12 содержат:

a) все 144 спина типа 1;

b) 96 спина типа 1, 24 спина типа 2, 24 спина типа 3. При наличии в системе нескольких полос данное соотношение спинов может меняться, при этом всегда выполняется условие равенства числа узлов типа 2 и типа 3;

c) все 144 спина типа 4;

d) все 144 спина типа 7. Фрустрированное неупорядоченное состояние;

e) все 144 спина типа 5;

f) все 144 спина типа 5 или 6.

Энергетический анализ различных конфигураций спинов основных состояний при $J_1 = 1$ и различных J_2 изображен на рис. 4. Таким образом, в зависимости от

величины J_2 энергетически выгодными являются

- $-0.5 \leq J_2$ $a,$
- $J_2 = -0.5$ $a, b, c,$
- $-1 \leq J_2 \leq -0.5$ $c,$
- $J_2 = -1$ $c, d, e, f,$
- $J_2 \leq -1$ $e, f.$

На рис. 5 приведены температурные зависимости энтропии S/N для разных значений обменного взаимодействия J_2 . На рисунке видно, что при увеличении температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия для некоторых значений J_2 стремится к ненулевому значению S_0 . Ненулевая остаточная энтропия является следствием вырождения основного состояния. Зависимость величины S_0 для разных значений обменного взаимодействия J_2 представлена на рис. 6. Как видно на рисунке, в интервале $-0.4 \leq J_2 \leq 0.0$ при низких температурах энтропия S_0 стремится к нулевому значению. В этом интервале система не вырождена и в системе сохраняется порядок. В интервалах $-0.9 \leq J_2 \leq -0.5$ и $-2.0 \leq J_2 \leq -1.2$ энтропия при низких температурах стремится к ненулевому значению. Это связано со слабым вырождением основного состояния. Такое поведение связано с частичным упорядочением системы. Следует отметить, что для значения $J_2 = -1.0$ энтропия в низкотемпературной области принимает большое значение, что обусловлено сильным вырождением основного состояния. Такая картина обычно наблюдается для фрустрированных спиновых систем [32]. Можно предположить, что при значении $J_2 = -1.0$ система становится сильно фрустрированной.

Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей приведена на рис. 7. Для построения фазовой диаграммы нами строились температурные зависимости теплоемкости при различных значениях величины обменного взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$. Для каждого значения J_2 определялась температура $T(C_{max})$, при котором теплоемкость принимает максимальное значение. Температуру, соответствующую максимуму теплоемкости можно считать близкой к критической температуре. На рисунке видно, что температура $T(C_{max})$ меняется с изменением значения J_2 . На диаграмме наблюдаются несколько различных фаз: ферромагнитная (FM), парамагнитная (PM), Phase1 (страйпово-триплетная) и Phase2 (страйповая). При значении $J_2 = -1.0$ критическая температура равна нулю и ФП отсутствует. Это объясняется тем, что конкуренция обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей для данного значения J_2 приводит к возникновению полной фрустрации. Фрустрация нарушает порядок в системе и приводит к исчезновению ФП.

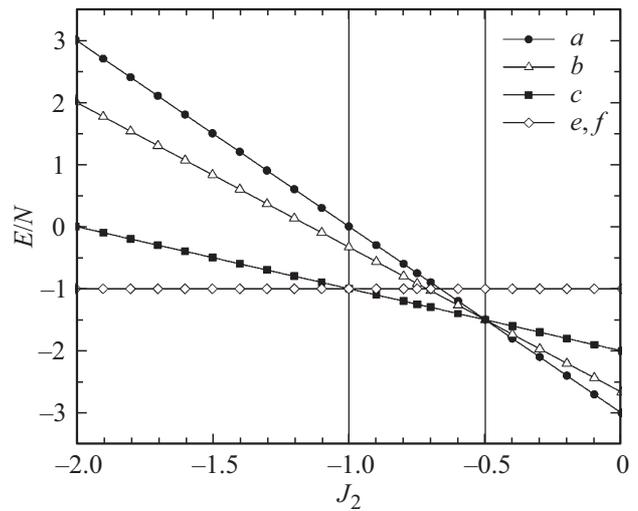


Рис. 4. Энергетический анализ различных конфигураций спинов основного состояния.

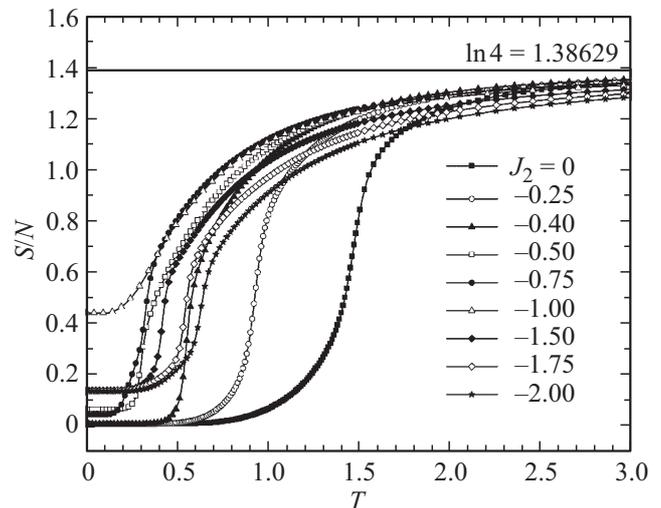


Рис. 5. Температурные зависимости энтропии S/N для разных величин обменного взаимодействия J_2 .

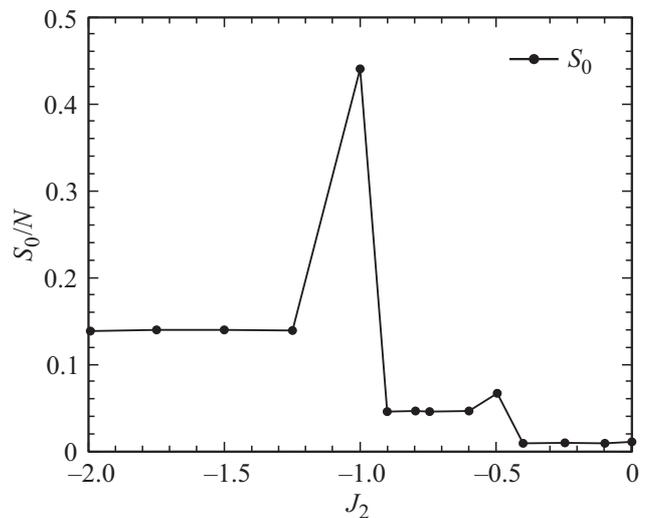


Рис. 6. Зависимость энтропии S_0 для разных величин обменного взаимодействия J_2 .

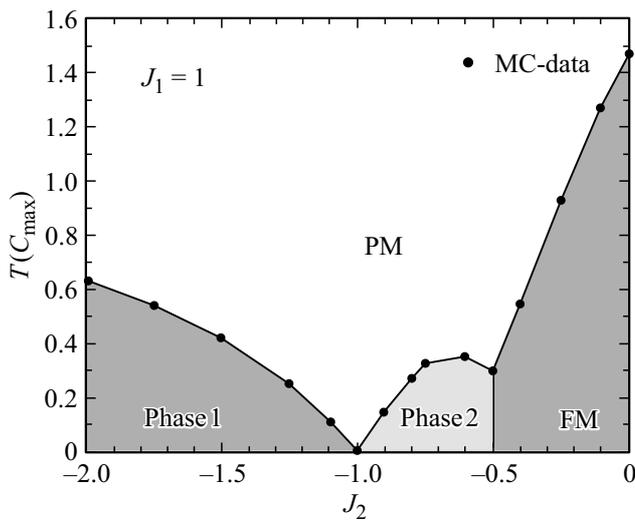


Рис. 7. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

Появление различных фаз на диаграмме обусловлено изменением магнитной структуры основного состояния. Каждой фазе соответствуют различные магнитные структуры.

1. Упорядоченной ферромагнитной фазе ($J_2 < -0.5$) соответствует магнитная структура, представленная на рис. 2, *a*.

2. Страйповой фазе ($-1 < J_2 \leq -0.5$) — магнитные структуры, представленные на рис. 2, *b, c*.

3. Фрустрированной неупорядоченной фазе ($J_2 = -1$) — магнитная структура, представленная на рис. 2, *d*.

4. Страйпово-триплетной фазе ($-2.0 \leq J_2 \leq -1$) — магнитные структуры, представленные на рис. 2, *f*.

4. Заключение

Исследование магнитных структур основного состояния и термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Определены магнитные структуры основного состояния при различных значениях величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Обнаружено, что изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей в данной модели приводит к изменению магнитного упорядочения. Проведен энергетический анализ магнитных структур основного состояния. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины обменного взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что при значении $J_2 = -1$ наблюдаются сильные эффекты фрустрации, что приводит к нарушению магнитного упорядочения.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых — кандидатов наук (№ МК-5223.2022.1.2).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] G. Toulouse. *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).
- [2] J. Villain. *J. Phys.* **10**, 4793 (1977).
- [3] H.T. Diep. *Frustrated Spin Systems*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
- [4] Zh. Fu, W. Guo, H.W.J. Blöte. *Phys. Rev. E* **101**, 012118 (2020).
- [5] N. Schreiber, R. Cohen, S. Haber. *Phys. Rev. E* **97**, 032106 (2018).
- [6] D.P. Foster, C. Gérard. *Phys. Rev. B* **70**, 014411 (2004).
- [7] I. Puha, H.T. Diep. *J. Appl. Phys.* **87**, 5905 (2000).
- [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] F.Y. Wu. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [12] R.J. Baxter. *J. Phys. C* **6**, 445 (1973).
- [13] C. Yamaguchi, Y. Okabe. *J. Phys. A* **34**, 8781 (2001).
- [14] E. Domany, M. Schick, J.S. Walker. *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1148 (1977).
- [15] A.K. Муртазаев, Д.Р. Курбанова, М.К. Рамазанов. *ФТТ* **61**, 2195 (2019).
- [16] A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. *ЖЭТФ* **156**, 502 (2019).
- [17] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева. *ФТТ* **62**, 442 (2020).
- [18] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, T.R. Rizvanova, A.A. Murtazaeva. *Low Temp. Phys.* **47**, 396 (2021).
- [19] S. Ostlund. *Phys. Rev. B* **24**, 398 (1981).
- [20] M. Quartin, S.L.A. de Queiroz. *J. Phys. A* **36**, 951 (2003).
- [21] D.P. Foster, C. Gérard. *J. Phys. A* **35**, L75 (2002).
- [22] D.P. Landau, K. Binder. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [23] M.K. Рамазанов, А.К. Муртазаев. *Письма в ЖЭТФ* **109**, 610 (2019).
- [24] M.K. Рамазанов, А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Мазагаева, М.Р. Джамалудинов. *ФТТ* **64**, 237 (2022).
- [25] A.K. Муртазаев, М.К. Мазагаева, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, А.А. Муртазаева. *ФТТ* **63**, 622 (2021).
- [26] А.О. Сорокин. *Письма в ЖЭТФ* **109**, 423 (2019).
- [27] А.О. Сорокин. *Письма в ЖЭТФ* **111**, 34 (2020).
- [28] M.K. Рамазанов, А.К. Муртазаев. *Письма в ЖЭТФ* **106**, 72 (2017).
- [29] A.K. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов. *Письма в ЖЭТФ* **107**, 265 (2018).
- [30] F. Wang, D.P. Landau. *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
- [31] C. Zhou, R.N. Bhatt. *Phys. Rev. E* **72**, 025701 (2005).
- [32] F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiiev. *J. Mag. Mag. Mater.* **324**, 3418 (2012).

Редактор Т.Н. Василевская