

ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ ТРЕХВЕРШИННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

А. Б. Бабаев^{a,b}, А. К. Муртазаев^{a,c}, Ф. А. Кассан-Оглы^d*

^a *Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия*

^b *Дагестанский государственный педагогический университет
367003, Махачкала, Россия*

^c *Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Россия*

^d *Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 15 февраля 2018 г.

Исследуется основное состояние спиновых структур, описываемых антиферромагнитной трехвершинной моделью Поттса на треугольной решетке с учетом вторых ближайших соседей. На основе численных данных, полученных методом Монте-Карло, выявлены диапазоны существования упорядоченных и неупорядоченных фаз в рассмотренных системах.

DOI: 10.1134/S0044451018080151

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время наблюдается все возрастающий интерес к фазовым переходам и критическим явлениям в фрустрированных магнитных структурах, описываемых моделями Изинга и Поттса на различных решетках [1–4]. Это обусловлено фундаментальными проблемами, возникающими при изучении систем, содержащих наноразмерные слои магнитных материалов. Спиновые решеточные модели на различных решетках описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1, 5, 6]. Фрустрации играют важную роль в различных магнитных системах. Результаты экспериментальных [7] и теоретических исследований [8] позволили установить, что фрустрированные системы проявляют необычные свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Антиферромагнетики (АФ) на треугольной решетке являются примерами фруст-

рированных спиновых систем. Однако необходимо отметить, что в случае трехвершинной АФ-модели Поттса на треугольной решетке при учете взаимодействия только между ближайшими соседями в основном состоянии фрустрации, обусловленные геометрией решетки, как в случае модели Изинга, отсутствуют и магнитная система упорядочена при конечной температуре. При учете вторых ближайших соседей конкуренция обменных взаимодействий может привести к фрустрациям, т.е. такому пространственному расположению магнитных моментов атомов в кристалле, при котором невозможно одновременное упорядочение всех взаимодействующих спинов (см. рис. 1).

Для моделей Изинга со взаимодействиями на квадратной решетке [9], на треугольной и гексагональной [10], а также на решетке кагоме [11] изучены явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости от знака обменного интеграла между ближайшими соседями. Для двумерной трехвершинной модели Поттса не получено ни одного точного решения, вследствие чего для исследования термодинамических и магнитных свойств, а также фазовых переходов в этой модели используются самые разнообразные приближенные и чис-

* E-mail: b_albert78@mail.ru

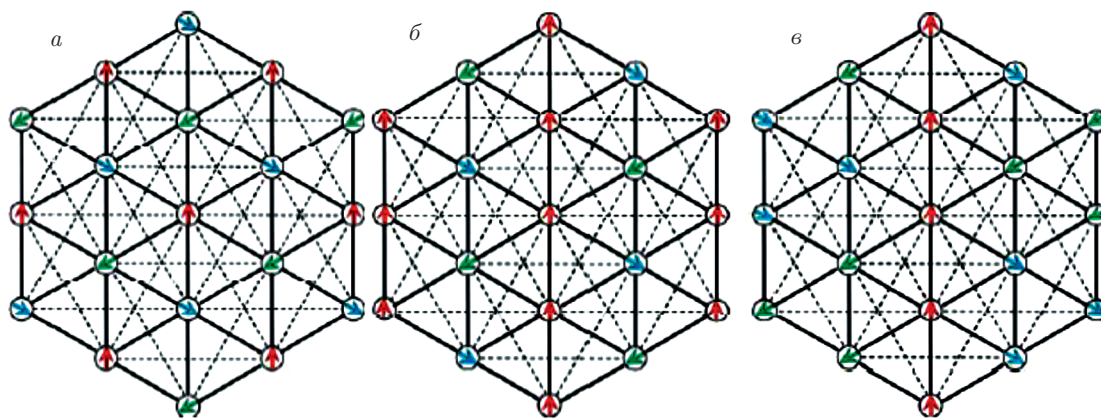


Рис. 1. (В цвете онлайн) Магнитные структуры в трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке. Исходная фаза (а) соответствует параметру $r = J_2/J_1$ в диапазоне $0 < r < 0.2$; промежуточная фаза (б) — в диапазоне $0.2 < r < 1.0$; конечная фаза (в) — в диапазоне $r > 1.0$

ленные методы: кластерный метод [12], низкотемпературные разложения [13], исследование нулей статистической суммы [14], разные ренормгрупповые подходы [15, 16], многочисленные варианты моделирования методом Монте-Карло [17, 18], в которых определяются класс универсальности, род перехода, расчет критических индексов, определение фазовых диаграмм, нахождение мультикритических точек и даже уточнение точек фазовых переходов до шестого знака [19].

За последние тридцать лет исследованию спиновых систем, описываемых моделями Поттса на треугольной решетке с взаимодействием между ближайшими соседями, было посвящено значительное число работ [17–22], в которых были получены ответы на многие вопросы. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что существенно усложняет решение этой модели. Для спиновых систем, в которых возникают фрустрации, основными являются следующие вопросы: какие условия необходимы для существования фрустраций и в каких решетках они могут существовать? Каковы самые общие качественные и количественные критерии? Какое основное состояние спиновой системы? Кроме того, следует иметь в виду, что при исследовании спиновых систем, в которых возможны фрустрации, очень важно, что в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния. Эти состояния, благодаря ненулевой энтропии S , могут вносить конечный вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [23]. В результате многочисленных исследований антиферромагнитных моделей Пот-

тса на разнообразных решетках было выявлено, что треугольная решетка является единственной, в которой наблюдается фазовый переход при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями.

В работах [24–27] на основе метода Монте-Карло исследовались термодинамические свойства трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействий $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ в диапазоне значений $r = 0-1.0$, $r = J_2/J_1$. Было обнаружено, что в этой модели в интервале изменений величины $0.0 \leq r < 0.2$ наблюдается фазовый переход первого рода, в то время как в интервале изменений $0.2 \leq r \leq 1.0$ в системе возможны фрустрации, из-за которых и отсутствует упорядочение. В этих работах не был рассмотрен вопрос основного состояния магнитной структуры в зависимости от параметра r в диапазоне изменений r от 1.0 до 2.0 и не проводился анализ основного состояния в широком температурном интервале. Определение основного состояния магнитной структуры, описываемой трехвершинной моделью Поттса, и исследование температурных зависимостей энергии в широком диапазоне изменений r являются главной целью этой работы.

2. ДВУМЕРНАЯ АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ ТРЕХВЕРШИННАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Антиферромагнитная трехвершинная ($q = 3$) модель Поттса на треугольной решетке с учетом

взаимодействия вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом [5]:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных антиферромагнитных ($J_1 < 0$, $J_2 < 0$) взаимодействий соответственно для ближайших и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами соответственно $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, причем $\theta_{i,j}$ принимают три значения: 0 , 120° , 240° . Модель Поттса с гамильтонианом вида (1) также хорошо описывает физические свойства многих неупорядоченных структур (см. [5, 28, 29]).

При компьютерном моделировании мы использовали кластерный алгоритм Вольфа [30] в сочетании с классическим алгоритмом Метрополиса методом Монте-Карло [31]. При этом на каждом шаге Монте-Карло сначала строится кластер, затем его переворачивают. После этого N раз (N — число спинов в рассматриваемой спиновой системе) совершаются перевороты спинов обычным алгоритмом Метрополиса. Такая процедура позволяет избежать возможных нарушений в выполнении условий эргодичности [23] для АФ-моделей на треугольной решетке, в которых возможны фрустрации. Более подробно эти алгоритмы рассмотрены в работах [32, 33]. Полученные результаты проверялись с помощью этих независимых алгоритмов и была достигнута хорошая сходимость. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в разных состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L . Этот неравновесный участок отбрасывался. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 150\tau_0$. Для самой большой системы $L = 72$, $\tau_0 = 1.5 \cdot 10^8$ МК шагов/спин. Кроме того, для повышения точности расчетов проводилось усреднение по десяти различным начальным конфигурациям. Затем эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Для наблюдения за температурным ходом энергии E и теплоемкости C использовались следующие соотношения [34]:

$$E = \frac{1}{N} [\langle H \rangle], \quad (2)$$

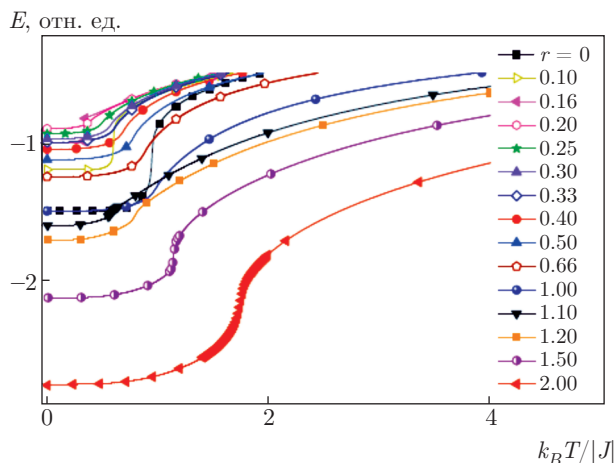


Рис. 2. (В цвете онлайн) Температурная зависимость энергии двумерной антиферромагнитной модели Поттса при различных параметрах $r = J_2/J_1$

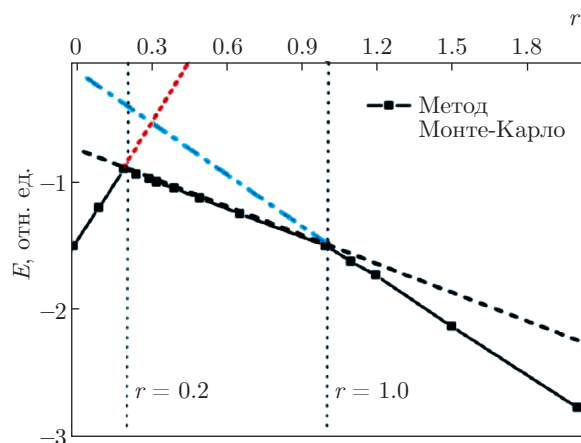


Рис. 3. (В цвете онлайн) Энергии фаз как функция параметра r : исходная фаза — красный пунктир; промежуточная фаза — штриховая линия; конечная фаза — голубая штрихпунктирная линия. Энергия основного состояния — сплошная линия (данные численного метода)

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

где $K = |J|/k_B T$, $N = L^2$ — число узлов решетки с линейным размером L , E — внутренняя энергия.

На рис. 2 представлены температурные зависимости энергии рассматриваемой модели для различных соотношений r . Энергии основных состояний для каждого r представлены на рис. 3. На рис. 3 представлены энергии трех фаз как функции параметра r : исходной (а) с превалярованием ближайшего взаимодействия J_1

$$E_a(r) = 3J_1(0.5 - r), \quad (4)$$

промежуточной (δ)

$$E_{\delta}(r) = (1 + r) \cdot 3J_1/4 \quad (5)$$

и конечной (ϵ) с превалированием второго взаимодействия J_2

$$E_{\epsilon}(r) = 3rJ_1/2. \quad (6)$$

На основе анализа численных данных для энергии основного состояния (см. рис. 2) можно выделить следующие диапазоны существования фаз в основном состоянии: $0 < r < 0.2$ для исходной (a); $0.2 < r < 1.0$ для промежуточной (δ) и $1.0 < r < 2.0$ для конечной (ϵ). Из рис. 3 следует, что существуют две особые точки, $r = 0.2$ и $r = 1.0$, в которых происходит смена структур.

При сильном (превалирующем) взаимодействии между ближайшими соседями J_1 ($r \ll 1$) в основном состоянии должна реализовываться фаза, в которой угол между любыми двумя ближайшими соседями не должен быть равным нулю, так как это энергетически невыгодно. Таким образом, любая пара ближайших спинов не должна быть параллельна. Энергия, приходящаяся на один узел, равна в этом случае

$$3J_1/2 - 3J_2 = 3J_1(0.5 - r). \quad (7)$$

Магнитная структура, соответствующая этим требованиям, изображена на рис. 1а. Красная стрелка означает одно из трех направлений под углом 0 , 120° или 240° относительно произвольно выбранного направления. Синяя стрелка означает любое из этих трех направлений, но не совпадающее с красным. Направление зеленой стрелки не должно совпадать ни с красной, ни с синей. Из-за перестановок красных, синих и зеленых стрелок магнитная структура реализуется в шести изоэнергетических конфигурациях.

В противоположном случае, при превалирующем взаимодействии между вторыми соседями J_2 ($r \gg 1$) в основном состоянии, должна реализовываться фаза, в которой угол между любыми двумя вторыми соседями не должен быть равным нулю, а любая пара вторых спинов не должна быть параллельна. Энергия, приходящаяся на один узел, в этом случае равна

$$3J_2/2 = 3rJ_1/2, \quad (8)$$

а соответствующая структура изображена на рис. 1в. Эта структура реализуется также в конечном числе конфигураций, а именно, в $216 = (6^3)$ изоэнергетических конфигурациях.

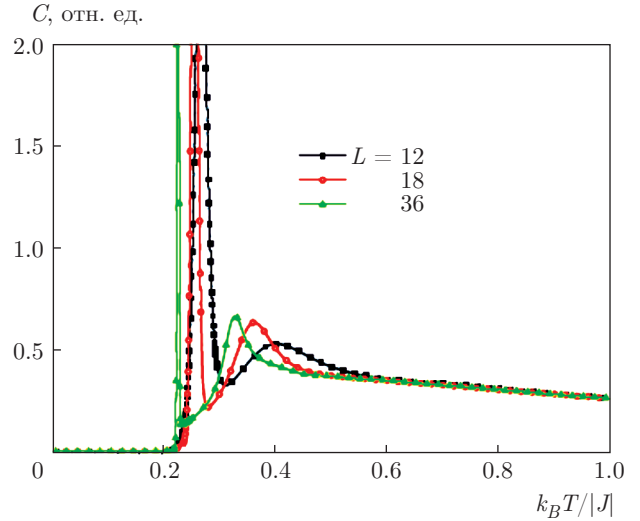


Рис. 4. (В цвете онлайн) Температурная зависимость теплоемкости для $r = 0.2$

Термодинамические свойства в диапазонах изменений r от нуля до единицы представлены в работах [24, 25]. Промежуточный случай $0.2 < r < 1.0$ требует тщательного рассмотрения. В этом случае конкуренция между взаимодействиями J_1 и J_2 порождает многочисленные разнообразные фазы. Мы выделили подмножество энергетических структур, одна из которых изображена на рис. 1б. Любой конфигурации этого бесконечного подмножества соответствует энергия

$$3J_1/4 + 3J_2/4 = (1 + r) \cdot 3J_1/4. \quad (9)$$

Исследование, проведенное нами для этого случая, показало, что теплоемкость испытывает расщепление только вблизи одной из основных точек $r \sim 0.2$ (см. рис. 4), что, по-видимому, может быть связано с вырождением основного состояния системы. В работе [26] аналогичное поведение было обнаружено и в трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ для случая $0.5 \leq |r| \leq 1.0$. Такое расщепление теплоемкости мы объяснили тем, что в этом интервале конкуренция первых и вторых ближайших соседей приводит к фрустрациям. Кроме того, анализ данных для случая $0.2 < r < 1.0$ показывает, что вырождение основного состояния системы не всегда может привести к расщеплению теплоемкости (см. рис. 5). Отсутствие расщепления теплоемкости связано с частичным упорядочением системы. Выяснение видов всевозможных отдельных уникальных конфигураций с частичным упорядочением требует вывода данных в графический файл и сравнения с другими конфигурациями, что представляет предмет отдельного рассмотрения.

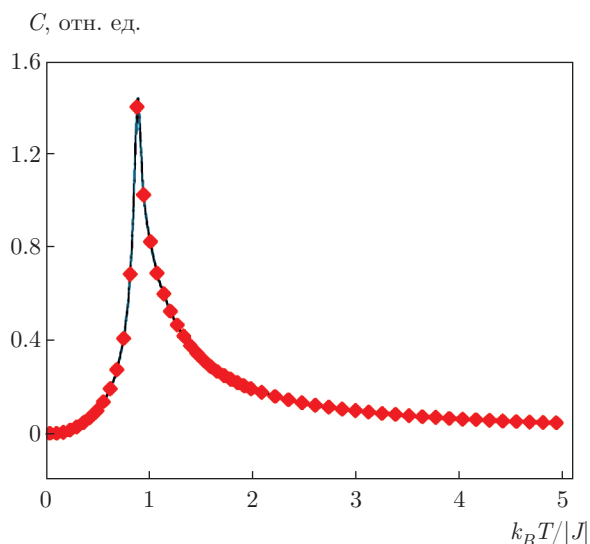


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости для параметра $r = 0.333$ (промежуточный случай $0.2 < r < 1.0$)

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе исследовано основное состояние трехвершинной АФ-модели Поттса на треугольной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями первых (J_1) и вторых (J_2) ближайших соседей в широком диапазоне значений $r = J_2/J_1 = 0-2$. Полученные данные свидетельствуют о том, что при $J_1 \gg J_2$ в интервале изменений величины $0 \leq r \leq 0.2$, а также при $J_2 \gg J_1$ в интервале изменений величины $1.0 \leq r \leq 2.0$ конкуренция обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемых интервалах изменения r в системе возникают фазовые переходы. В то же время, в интервале изменений параметра r , $0.2 \leq r \leq 1$, конкуренция обменных взаимодействий приводит к вырождению основного состояния системы. В этом случае в системе возможны как фрустрации, так и частичное упорядочение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00214).

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Т. Диеп, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, (2004).
2. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).

3. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **142**, 1189 (2012).
4. F. Y. Wu, *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics*, World Scientific, New Jersey (2008).
5. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
6. W. Zhang and Y. Deng, *Phys. Rev. E* **78**, 031103 (2008).
7. D. Loison and K. D. Schotte, *Europhys. J. B* **5**, 735 (1998).
8. П. С. Гехт, *УФН* **159**, 261 (1989).
9. L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
10. R. M. F. Houtappel, *Physica* **16**, 425 (1950).
11. К. Kanô and S. Naya, *Progr. Theor. Phys.* **10**, 158 (1953).
12. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, *J. Phys. A: Math. Gen.* **28**, 5117 (1995).
13. I. G. Enting and F. Y. Wu, *J. Stat. Phys.* **28**, 351 (1982).
14. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S. Tsai, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 2287 (1998).
15. M. Schick and R. B. Griffiths, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10**, 2123 (1977).
16. G. S. Grest, *J. Phys. A* **14**, L217 (1981).
17. Y. Saito, *J. Phys. A* **15**, 1885 (1982).
18. H. Pack, *Phys. Rev. B* **49**, 12881 (1994).
19. M.-X. Wang, J.-W. Cai, Z.-Y. Xie, Q.-N. Chen, H.-H. Zhao, and Z.-C. Wie, *Chin. Phys. Lett.* **27**, 076402 (2010).
20. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Г. Я. Атаева, *ФТТ* **57**, 1410 (2015).
21. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, *ЖЭТФ* **143**, 116 (2013).
22. H. Fried and M. Schick, *Phys. Rev. B* **41**, 4389 (1990).
23. В. С. Доценко, *УФН* **163**, 1 (1993).
24. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, *Письма в ЖЭТФ* **100**, 267 (2014).
25. А. К. Муртазаев, А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, Ф. А. Кассан-Оглы, and А. И. Прошкин, *Sol. St. Comm.* **246**, 41 (2016).

26. А. Б. Бабаев, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ЖЭТФ **149**, 357 (2016).
27. А. Б. Бабаев, А. К. Муртазаев, Е. М. Сулейманов, Т. Р. Ризванова, ФТТ **58**, 2001 (2016).
28. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Aznaurova, Sol. St. Phenom. **152–153**, 571 (2011).
29. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Y. Aznaurova, Sol. St. Phenom. **168–169**, 357 (2011).
30. U. Wolff, Phys. Lett. **62**, 361 (1989).
31. N. Metropolis, W. Rosenbluth, N. Rosenbluth et al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
32. A. K. Murtazaev and A. B. Babaev, J. Magn. Magn. Mat. **324**, 3870 (2012).
33. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and F. A. Kassar-Ogly, Sol. St. Phenom. **215**, 52 (2014).
34. P. Peczac, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).