

ФРУСТРИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 4$ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

Д. Р. Курбанова*, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Т. А. Таев

*Институт физики им. Х. И. Амиранова
Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367015, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 26 февраля 2020 г.,
после переработки 24 июня 2020 г.
Принята к публикации 25 июня 2020 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 взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к появлению фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. Установлено, что в исследуемой модели в точке фрустрации фазовый переход не наблюдается.

DOI: 10.31857/S0044451020120093

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение эффектов фрустрации в спиновых решеточных моделях представляет большой интерес в течение последних десятилетий. Интерес к таким системам обусловлен богатой природой фазовых переходов (ФП) и особенностью их термодинамического и критического поведения. Фрустрации могут быть обусловлены конкурирующими обменными взаимодействиями, которые не позволяют системе одновременно минимизировать все ее локальные взаимодействия, что приводит к бесконечно вырожденному основному состоянию [1–3].

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.

Большинство исследований спиновых систем с фрустрациями до сих пор ограничивалось моделями Изинга, XY 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 $q = 3$ [4–10]. Эта модель изучена достаточно хорошо и получены интересные результаты.

Модель Поттса демонстрирует температурный ФП первого или второго рода, в зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности. Критические свойства ферромагнитной модели Поттса известны лишь в двумерном случае [10, 11]: при $q > 4$ система демонстрирует ФП первого рода, в то время как при $q < 4$ переход непрерывен. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ довольно уникальна и до сих пор малоизучена. Эта модель может быть использована для описания поведения некоторых классов адсорбированных газов на графите [12]. Данная модель интересна 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 имеет место ФП первого рода [11]. Кроме того, в рассматриваемой модели было обнаружено неоднозначное псевдокритическое поведение [4].

Результаты исследований двумерной ферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной [13] и гексагональной [14, 15] решетках методом Монте-Карло (МК) показывают, что в данной модели наблюдается ФП первого рода. Исследование этой модели с учетом конкурирующих обменных взаимодействий может влиять

* E-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

на его термодинамические, магнитные и критические свойства. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей может привести к фрустрации и вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП. Исследования влияния антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей, а также эффектов фрустрации на ФП, термодинамические свойства и магнитные структуры основного состояния модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке в литературе практически не встречаются.

В связи с этим, в данной работе мы предприняли попытку на основе метода МК провести исследование ФП, термодинамических свойств и магнитных структур основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с ферромагнитным взаимодействием первых и антиферромагнитным взаимодействием вторых ближайших соседей. Известно, что $q = 3$ является особым значением для смешанной ферро-антиферромагнитной модели Поттса, где считается, что переход относится к типу Костерлица – Таулеса [16–18]. Поскольку поведение меняется при изменении q , естественно спросить, как изменится поведение при $q = 4$. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения фрустрированной модели Поттса на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 4$, и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП, термодинамическими и критическими свойствами спиновых систем с фрустрациями.

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:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных ферромагнитного ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействий соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$; $r = |J_2/J_1|$ —

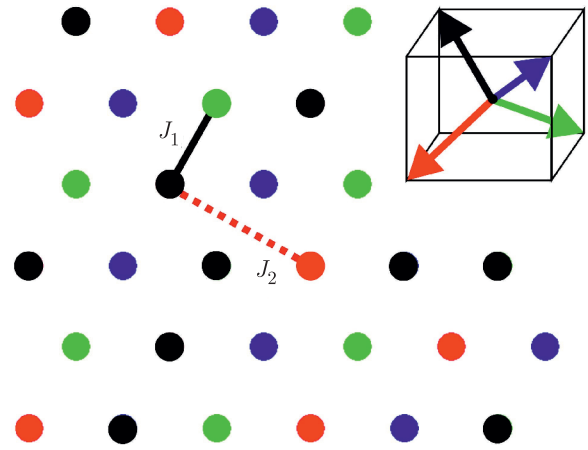


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке

величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Схематическое и цветное представления модели изображены на рис. 1. На вставке приведены направления спинов для каждого из четырех значений спина и соответствующее цветное представление. Также представлены взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Как видно на рисунке, направления векторов заданы таким образом, что выполняется равенство

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

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [19–22]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга – Ландау [9, 23, 24], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

В стандартный алгоритм Ванга – Ландау мы внесли 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. 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. Поскольку 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 мы использовали в следующем виде.

Задаем произвольную начальную конфигурацию 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

$$g(E_2) \rightarrow f \cdot g(E_2), \quad H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1,$$

иначе

$$g(E_1) \rightarrow f \cdot g(E_1), \quad H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1.$$

Если гистограмма стала «плоской», то приравняем нулю гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$ и продолжаем снова, пока $f \geq f_{min}$. В нашем случае $f_{min} = 1.0000000001$. Таким образом, 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:

$$U(T) = \sum_E E g(E) e^{-E/k_B T} / \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right) \equiv \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

$$C(T) = \frac{(|J_1|/k_B T)^2}{N} (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (5)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (6)$$

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 $L \times L = N$, $L = 12-120$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Анализ данных, полученных в данной работе, показывает, что для исследуемой модели наблюдается большое количество различных магнитных структур основного состояния. Некоторые из них представлены на рис. 2. На этом рисунке спины обозначены кружками различных цветов. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. Видно, что в рассматриваемой модели они могут быть упорядочены в четырех направлениях. Конфигурации получены для разных значений r . На рис. 2а представлены магнитные структуры основного состояния для $r = 0.0$. Основное состояние является ферромагнитным, в котором все спины ориентированы вдоль одного из четырех направлений — система четырехкратно вырождена. На рис. 2б и 2в приведены примеры основных состояний для случаев $r = 0.5$ и $r = 0.75$. Эти структуры имеют полосовую структуру, причем ширина, цвет и направление полос может быть произвольным. Количество состояний пропорционально $\ln(N_{GS}) \propto L$. Для случая $r = 1.0$ (рис. 2г) учет антиферромаг-

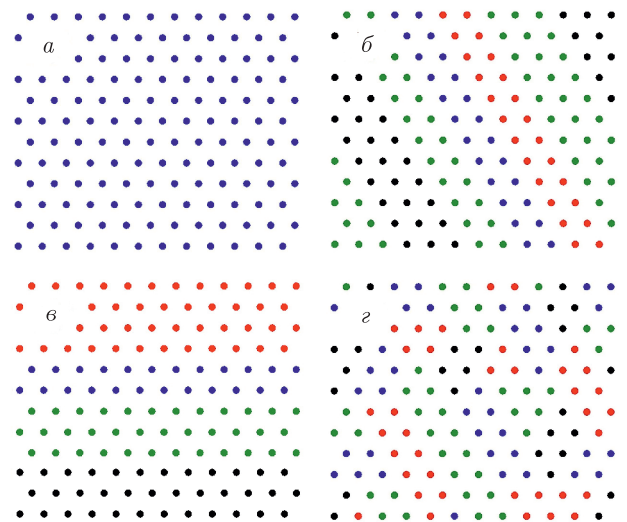


Рис. 2. Магнитные структуры основного состояния: а — $r = 0$, б — $r = 0.5$, в — $r = 0.75$, г — $r = 1.0$

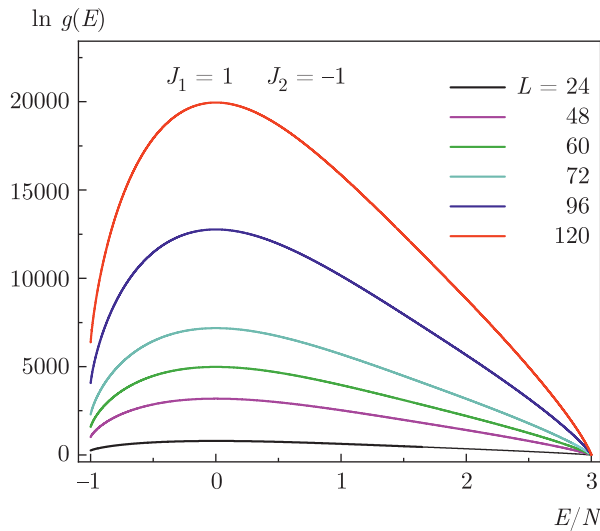


Рис. 3. Плотность состояний $g(E)$ при $r = 1.0$

нитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к полному нарушению магнитного упорядочения. Степень вырождения основного состояния в данном случае $\ln(N_{GS}) \propto L^2$. Таким образом, при $r < 0.5$ система имеет ферромагнитно упорядоченное основное состояние; при $0.5 \leq r < 1$ основное состояние имеет полосовую структуру; при $r = 1$ основное состояние сильно вырождено, полосовая структура разрушена.

Плотность состояний $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L при $r = 1.0$ представлена на рис. 3. Энергия на рисунке и далее приведена в единицах $|J_1|$. На рисунке видно, что плотность состояний $g(E)$ значительно возрастает с ростом линейных размеров системы. Такое поведение связано с вырождением основного состояния системы. Можно предположить, что при $r = 1.0$ система становится сильно фрустрированной. Для данной модели область фрустраций (область, в которой конкуренция обменных взаимодействий приводит к разрушению упорядочения основного состояния) находится в интервале $0.5 \leq q \leq 1$. При этом точка $r = 1.0$ является точкой сильной фрустрации.

На рис. 4 приведены температурные зависимости энтропии S для систем с различными линейными размерами при $r = 1.0$ (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, энтро-

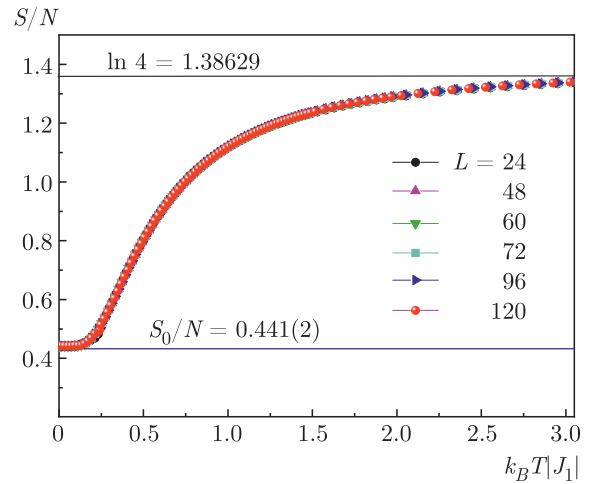


Рис. 4. Температурная зависимость энтропии S при $r = 1.0$

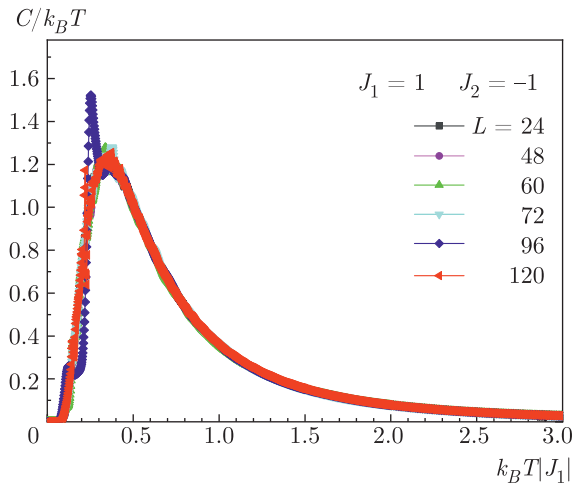


Рис. 5. Температурные зависимости удельной теплоемкости C при $r = 1.0$

пия не меняется в зависимости от линейных размеров системы и стремится к ненулевому значению ($S_0/N = 0.441(2)$). Ненулевая остаточная энтропия является следствием вырождения основного состояния. Такое поведение энтропии свидетельствует о возникновении в системе фрустраций.

На рис. 5 представлены зависимости удельной теплоемкости C от температуры для $r = 1.0$, полученные при различных линейных размерах системы. Отметим, что для теплоемкости наблюдается необычное поведение, которое характеризуется отсутствием ярко выраженного пика. Максимумы теплоемкости в данном случае вместо острых λ -образных пиков имеют сглаженные пики. На рисунке видно, что температурные зависимости теплоемкости

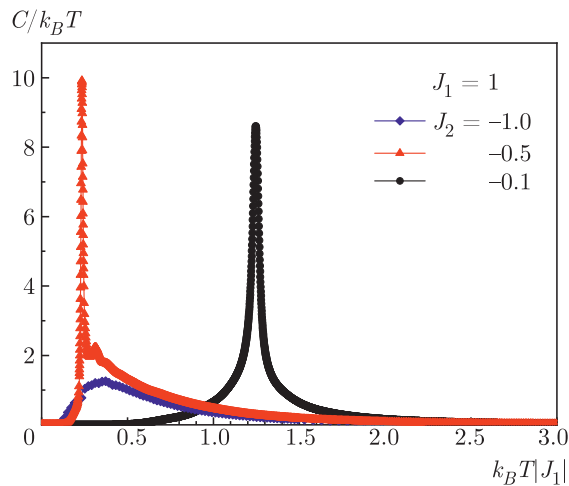


Рис. 6. Температурные зависимости удельной теплоемкости C при различных значениях r

не зависят от линейных размеров системы, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L . Такая картина температурной зависимости теплоемкости обычно наблюдается для фрустрированных спиновых систем [25]. Известно, что в точке фрустрации появляется сглаженный пик и положение максимума этого пика зависит от значения r , но его величина при изменении L остается практически постоянной. Исходя из этого можно предположить, что значение $r = 1.0$ является точкой фрустрации. Результаты этой работы показывают, что в точке фрустрации в исследуемой модели ФП отсутствует. Для аналогичной модели на гексагональной решетке [15] было установлено, что при $r = 1.0$ наблюдается ФП первого рода.

Для более лучшего понимания термодинамического поведения данной модели на рис. 6 приведены температурные зависимости теплоемкости для разных значений r . На рисунке видно, что для $r = 0.1$ теплоемкость имеет острый пик, положение которого соответствует температуре ФП. Для $r = 0.5$ наблюдаем расщепление теплоемкости (один максимум является острым, а второй — плавным), что является характерной особенностью фрустрированных систем вблизи точек фрустраций. Такое поведение объясняется частичным упорядочением системы (рис. 2б и 2в). Для значения $r = 1.0$ эффекты фрустрации наиболее сильно выражены: отсутствует острый пик, наблюдается только сглаженный максимум, система переходит в сильно фрустрированное состояние, т. е. в системе отсутствует порядок (рис. 2г).

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 методом Монте-Карло. Получены магнитные структуры основного состояния. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к фрустрации и нарушению магнитного упорядочения. Установлено, что значение $r = 1.0$ является точкой фрустрации для исследуемой модели. Показано, что в точке фрустрации в данной модели фазовый переход отсутствует.

Финансирование. Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-02-00153) и фонда Гаджи Махачева по поддержке науки, образования и культуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2**, 115 (1977).
2. J. Villain, *J. Phys.* **46**, 1840 (1985).
3. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing, Singapore (2004).
4. N. Schreiber, R. Cohen, and S. Haber, *Phys. Rev. E* **97**, 032106 (2018).
5. D. P. Foster and C. Gérard, *Phys. Rev. B* **70**, 014411 (2004).
6. I. Puha and H. T. Diep, *J. Appl. Phys.* **87**, 5905 (2000).
7. M. Nauenberg and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 837 (1980).
8. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **22**, 2560 (1980).
9. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, *Physica A* **521**, 543 (2019).
10. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
11. R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6**, 445 (1973).
12. E. Domany, M. Schick, and J. S. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **38**, 1148 (1977).

13. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, ФТТ **61**, 2195 (2019).
14. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
15. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, ФТТ **62**, 442 (2020).
16. S. Ostlund, Phys. Rev. B **24**, 398 (1981).
17. M. Quartin and S. L. A. de Queiroz, J. Phys. A **36**, 951 (2003).
18. D. P. Foster and C. Gérard, J. Phys. A **35**, 75 (2002).
19. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Кассан-Оглы, Д. Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
20. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
21. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, D. R. Kurbanova, M. A. Magomedov, and K. Sh. Murtazaev, Mat. Lett. **236**, 669 (2019).
22. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **156**, 980 (2019).
23. A. K. Murtazaev, D. R. Kurbanova, and M. K. Ramazanov, Physica A **545**, 123548 (2020).
24. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
25. F. A. Kassin-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Magn. Mater. **324**, 3418 (2012).