

# ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

*В. А. Мутайламов\**, *А. К. Муртазаев*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
367003, Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 15 февраля 2021 г.,  
после переработки 15 марта 2021 г.  
Принята к публикации 15 марта 2021 г.

С использованием методов вычислительной физики исследовано статическое критическое поведение трехмерной декорированной модели Изинга на кубической решетке. Рассмотрен случай, когда обменное взаимодействие между узловыми спинами  $J_n = -1$  является антиферромагнитным, а взаимодействие  $J_d$  между узловыми спинами и декорированными изменяется в пределах  $[-3.0; 3.0]$ . Для различных значений  $J_d$  определено основное состояние модели, вычислены критические температуры и критические индексы, построена фазовая диаграмма. Показано, что при любых соотношениях обменных взаимодействий в модели при переходе из упорядоченного состояния в парамагнитное наблюдается фазовый переход второго рода, а критические индексы близки к значениям для стандартной модели Изинга.

DOI: 10.31857/S0044451021070129

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В современной физике конденсированного состояния интенсивно изучаются модели магнитных материалов, в которых помимо обменных взаимодействий учитываются различные усложняющие факторы, не учитываемые моделями первого приближения. Эти факторы могут оказывать значительное влияние на характер критического поведения магнетиков и приводить к появлению большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними.

В последние годы возрос интерес к исследованию декорированных структур благодаря разнообразию наблюдаемых в них новых явлений и особенностей по сравнению с исходными недекорированными решетками. В частности, декорирование порождает множество фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, существующих в недекорированных решетках, так и к возникновению новых фазовых переходов. Кроме того, появляются новые типы частичного упорядочения, а также дополнительные экстремумы тепло-

емкости. Богатство критического поведения декорированных решеток обусловлено возможностью многократного декорирования.

Понятие декорированная решетка, относящееся к магнитной модели Изинга, впервые предложено в 1951 г. в работе Сиози [1]. Суть его заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки. Это понятие можно обобщить и на другие типы кристаллических решеток. Фактически, подавляющее большинство реальных структур являются декорированными.

Большого прогресса достигло исследование планарных декорированных структур методами теоретической физики. Так, например, найдены точные решения для декорированных моделей со смешанными спинами на двумерной квадратной решетке [2, 3], точное решение для двукратно декорированной модели на квадратной решетке [4]. Исследованы магнитные и магнитокалорические свойства с построением фазовых диаграмм основного состояния модели Изинга со смешанными спинами на треугольной решетке [5]. Изучены декорированные структуры на квадратной решетке с многоспиновым взаимодействием [6, 7].

При изучении критических свойств моделей магнитных материалов успешно применяются и мето-

\* E-mail: vadim.mut@mail.ru

ды вычислительной физики. В частности, данные методы применялись нами ранее для изучения критических свойств двумерной декорированной модели Изинга на квадратной решетке [8, 9]. Методы численного эксперимента применимы для структур, для которых нет точного аналитического решения. Это, как правило, трехмерные модели, модели со сложным гамильтонианом, учитывающим влияние дополнительных факторов (внешнее поле, анизотропия и т. п.). Методы вычислительной физики строго математически обоснованы и позволяют исследовать критические свойства широкого спектра моделей магнитных материалов.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД

Нами методами численного эксперимента исследовано статическое критическое поведение трехмерной декорированной модели Изинга на кубической решетке. В данной модели декорированные спины располагаются между узлами исходной кубической решетки в  $x$ -,  $y$ - и  $z$ -направлениях. Рассмотрен случай, когда обменное взаимодействие присутствует как между спинами, расположенными в узлах решетки (узловые спины), так и между декорированными спинами и узловыми. Схематически структура решетки приведена на рис. 1.

Гамильтониан исследованной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J_n \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_d \sum_{k,l} S_k S_l, \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

где  $S_i$  — изинговский спин в узле решетки  $i$ , первая сумма учитывает обменное взаимодействие между

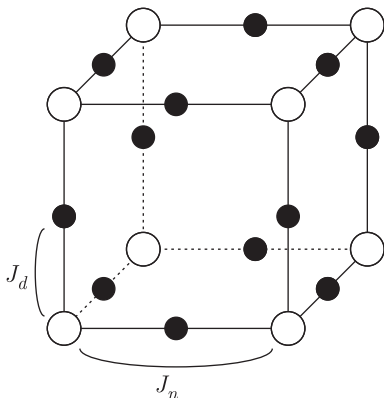


Рис. 1. Декорированная модель Изинга на кубической решетке (○ — узловые спины, ● — декорированные)

узловыми спинами, а вторая сумма — обменное взаимодействие между узловыми и декорированными спинами.

Обменное взаимодействие между узловыми спинами являлось антиферромагнитным и его величина  $J_n = -1$  не менялась в ходе моделирования. При этом обменное взаимодействие между узловыми спинами и декорированными изменялось в широких пределах от антиферромагнитного с величиной  $J_d = -3$  до ферромагнитного  $J_d = 3$ .

В процессе исследований нами моделировались частицы кубической формы с периодическими граничными условиями, содержащие  $L \times L \times L$  элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Как видно на рис. 1, на каждую кристаллографическую ячейку приходится один узловой спин и три декорированных. Частица ориентировалась в пространстве таким образом, чтобы оси координат совпадали с кристаллографическими осями.

Вычисления проводились как стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [10, 11], так и методом Ванга–Ландау [12]. Метод Ванга–Ландау использовался для определения основного состояния спиновой системы при различных значениях  $J_d$ , для получения температурных зависимостей теплоемкости, модуля намагниченности и энтропии, для построения фазовой диаграммы. Результаты получены в температурном интервале от  $T = 0.01$  до  $T = 10$  с шагом  $\Delta T = 0.01$  (температура приведена в единицах обменного интеграла  $k_B T / |J_n|$ , где  $k_B$  — постоянная Больцмана). Исследовались частицы с линейным размером  $L = 6$ , содержащие  $N = 864$  спина. Выбранного размера достаточно для получения достоверной качественной картины за приемлемое время вычислений. Для улучшения статистики проводилось пять процессов моделирования при каждом значении  $J_d$ . Полученные результаты усреднялись между собой.

Алгоритм Метрополиса использовался для определения критических индексов и критических температур при нескольких значениях  $J_d$ . Моделировались частицы с линейными размерами от  $L = 10$  до  $L = 30$ , содержащие соответственно от  $N = 4000$  до  $N = 108000$  спинов. Вычисления проводились при температурах вблизи точки фазового перехода. В ходе моделирования для приведения спиновой системы в состояние термодинамического равновесия отбрасывался начальный неравновесный участок Марковской цепи в  $5 \cdot 10^4$  шагов Монте-Карло на спин, заведомо больший, чем время релаксации исследуемой частицы. В равновесном состоянии вы-

числялись средние по ансамблю значения термодинамических величин. Длина равновесного участка составляла  $1.5 \cdot 10^5$  шагов Монте-Карло на спин. Для улучшения статистики при каждой температуре  $T$  для всех линейных размеров  $L$  и значений обменного взаимодействия  $J_d$  проводилось десять процессов моделирования при различных начальных спиновых конфигурациях. Полученные результаты усреднялись между собой.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

#### 3.1. Основное состояние

Для определения основного состояния анализировались спиновые конфигурации, получаемые в ходе моделирования методом Ванга – Ландау, соответствующие минимуму энергии. Всего было получено четыре типа основного состояния в зависимости от величины обменного взаимодействия  $J_d$ .

При значениях  $J_d < -1$  спиновая система упорядочена антиферромагнитно: все узловые спины направлены в одну сторону, а все декорированные в другую. Число узловых спинов составляет  $1/4$  от общего числа спинов, число декорированных  $3/4$ . В результате суммарный магнитный момент оказывается нескомпенсированным на величину  $1/2$ . Модель фактически является ферромагнитной.

При значениях  $J_d > 1$  система находится в ферромагнитном состоянии: узловые и декорированные спины направлены в одну сторону.

В области значений  $-1 < J_d < 1$  в основном состоянии подрешетка узловых спинов упорядочена антиферромагнитно, а подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Суммарный магнитный момент в данном случае равен нулю. При этом в спиновой системе наблюдается вырождение в основном состоянии и появляются фрустрации, обусловленные конкуренцией обменных взаимодействий между узловыми и декорированными спинами. Строго говоря, модель не является полностью фрустрированной, так, здесь мы имеем дело с вырождением не всей спиновой системы, а лишь ее части. Такое состояние спиновой системы часто называют частично разупорядоченным.

При значениях  $J_d = -1$  и  $J_d = 1$  модель является полностью фрустрированной: разупорядочена не только декорированная подрешетка, но и узловая. Соответственно, фрустрации в данном случае обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий как между узловыми и декорированными спинами, так и между узловыми спинами.

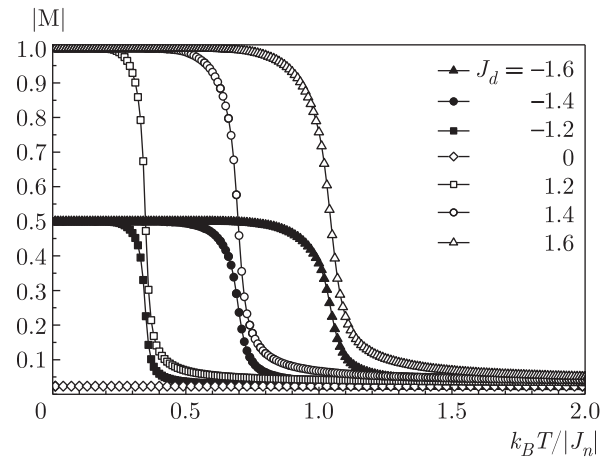


Рис. 2. Зависимость модуля вектора намагниченности от температуры при различных значениях обменного взаимодействия  $J_d$

#### 3.2. Термодинамические функции

На рис. 2 представлена зависимость модуля намагниченности  $M$  от температуры для различных значений обменного взаимодействия  $J_d$  (здесь и далее все величины приведены в относительных единицах). Для всех значений обменного взаимодействия в интервале  $-1 \leq J_d \leq 1$  кривые намагниченности лежат вблизи нулевого значения и накладываются друг на друга, поэтому на графике для наглядности приведена только одна кривая для случая  $J_d = 0$ . При остальных значениях обменного интеграла наблюдается переход в парамагнитное состояние с ростом температуры. С ростом по модулю величины  $J_d$  область перехода смещается в сторону более высоких температур. Как следует из графика, температуры перехода совпадают для одинаковых значений  $|J_d|$ .

Температурные зависимости энтропии  $S$  приведены на рис. 3. Кривые энтропии для равных по модулю значений  $J_d$  точно накладываются друг на друга. В области значений  $|J_d| \leq 1$  для наглядности на рисунке приведен лишь один график, так как все кривые при таких значениях  $J_d$  расположены близко друг к другу. Как видно на графике, энтропия стремится к нулю при  $T \rightarrow 0$  для значений обменного интеграла  $|J_d| > 1$ . При значениях  $|J_d| \leq 1$  энтропия стремится к отличному от нуля значению, что также указывает на наличие вырождения в основном состоянии. При  $|J_d| = 1$  для линейного размера  $L = 6$  это значение составило  $0.525(1)$ , а при  $|J_d| < 1$  находится в диапазоне от  $0.520(1)$  до  $0.521(1)$ . С ростом температуры энтропия для всех значений обменного интеграла стремится к величине  $S = \ln(2)$ .

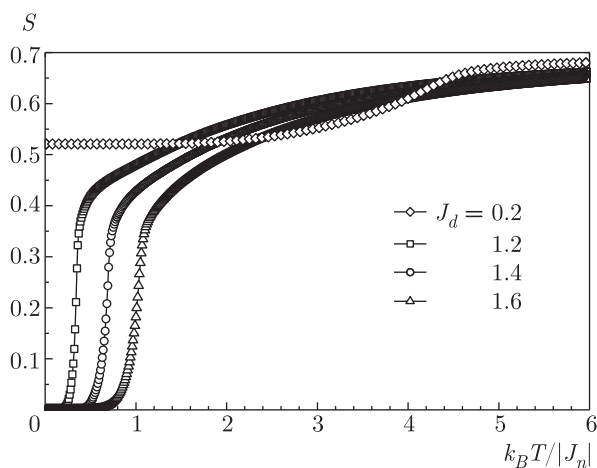


Рис. 3. Зависимость энтропии от температуры при различных значениях обменного взаимодействия  $J_d$

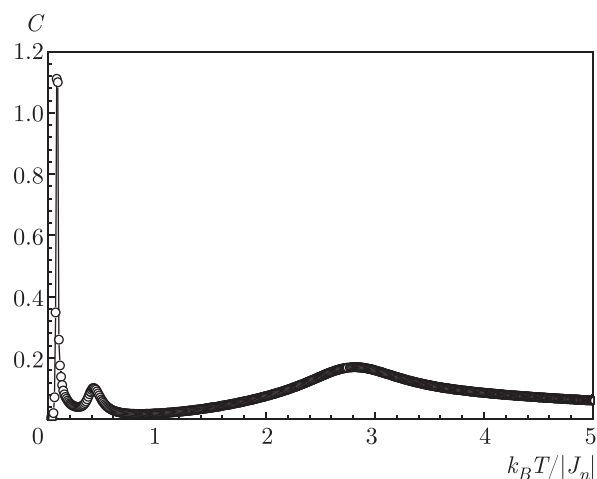


Рис. 5. Дополнительные экстремумы теплоемкости при величине обменного взаимодействия  $|J_d| = 1.05$

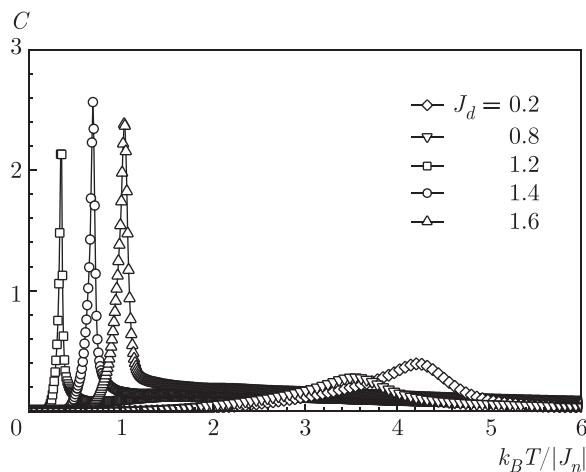


Рис. 4. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия  $J_d$

На рис. 4 приведена зависимость теплоемкости  $C$  от температуры для различных значений  $|J_d|$ . Как и в случае с энтропией, графики для равных по модулю значений  $J_d$  накладываются друг на друга. На рисунке видно, что при  $|J_d| > 1$  теплоемкость имеет ярко выраженные максимумы, соответствующие переходу из упорядоченного состояния в парамагнитное. С увеличением  $|J_d|$  максимумы смещаются в сторону более высоких температур. Максимумы при  $|J_d| \leq 1$  соответствуют переходу из частично разупорядоченного состояния в парамагнитное. По сравнению с  $|J_d| > 1$  они имеют более широкую форму пика, меньше по абсолютному значению и с увеличением  $|J_d|$  смещаются в сторону более низких температур.

### 3.3. Дополнительные экстремумы теплоемкости

Отдельно необходимо выделить небольшую область значений обменного интеграла  $1 < |J_d| \leq 1.2$ , в которой на графике теплоемкости наблюдаются три экстремума. Пример такой зависимости приведен на рис. 5 для случая  $|J_d| = 1.05$ . Первый максимум имеет ярко выраженный характер и соответствует переходу из упорядоченного состояния в парамагнитное. Второй и третий максимумы более широкие и меньше первого по высоте. С увеличением обменного взаимодействия  $J_d$  второй и третий максимумы еще больше уменьшаются по высоте и нам не удалось их обнаружить при значениях  $|J_d| > 1.2$ . Появление этих максимумов связано с особенностями упорядочения магнитных подрешеток исследуемой модели.

После перехода в парамагнитное состояние с ростом температуры подрешетка декорированных спинов все время остается в разупорядоченном состоянии. В подрешетке же узловых спинов начинает наблюдаться антиферромагнитное упорядочение, которое возрастает с ростом температуры. Таким образом, спиновая конфигурация становится похожа на спиновую конфигурацию в частично разупорядоченном состоянии, характерную для области  $|J_d| < 1$ : декорированные спины разупорядочены, узловые упорядочены антиферромагнитно. Дальнейший рост температуры приводит к разупорядочению уже и узловой подрешетки.

Сказанное демонстрирует рис. 6, на котором приведены температурные зависимости параметров порядка  $\eta$  спиновых подрешеток. График получен ал-

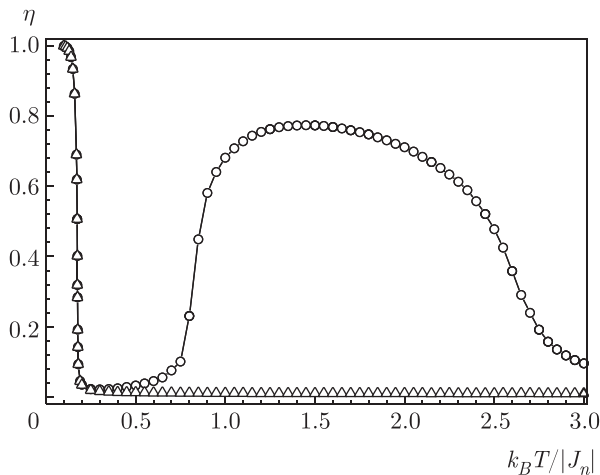


Рис. 6. Зависимость параметров порядка узловой подрешетки (○) и декорированной подрешетки (△) от температуры.  $L = 14$ ,  $J_d = 1.10$

горитмом Метрополиса для линейного размера  $L = 14$  при величине обменного взаимодействия  $J_d = 1.10$ . В качестве параметра порядка для декорированной подсистемы использовался модуль ее вектора намагниченности, а для узловой подсистемы — модуль ее вектора антиферромагнетизма. Рост параметра порядка подрешетки узловых спинов соответствует второму максимуму теплоемкости, а спад параметра порядка — третьему.

Нам не удалось установить причину такого аномального поведения параметра порядка. Величина обменного взаимодействия  $J_d$  близка к области значений, при которых модель находится в частично разупорядоченной фазе. Вероятно, при небольших температурах часть спиновой системы из-за тепловых флуктуаций может легко переходить из парамагнитного состояния в частично разупорядоченное и обратно. Поскольку этим состояниям соответствуют различные значения энергии, то переходы между ними увеличивают энергетические флуктуации. Рост флуктуаций энергии приводит к закономерному росту теплоемкости и появлению второго экстремума на ее температурной зависимости.

Таким образом, в модели при данных условиях одновременно присутствуют две фазы: парамагнитная и частично разупорядоченная. С ростом температуры доля частично разупорядоченной фазы увеличивается и достигает своего максимального значения. Хотя при этом, как видно на рис. 6, она не полностью вытесняет парамагнитную фазу, так как параметр порядка подрешетки узловых спинов не достигает единицы. Количество переходов между

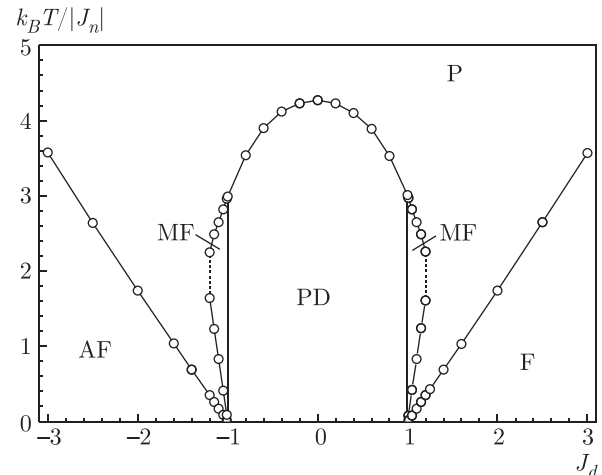


Рис. 7. Фазовая диаграмма, построенная по максимумам теплоемкости для линейного размера  $L = 6$ : AF — антиферромагнитная фаза, F — ферромагнитная, PD — частично разупорядоченная, MF — смешанная, P — парамагнитная

фазами уменьшается, что приводит к уменьшению энергетических флуктуаций и спаду второго экстремума теплоемкости.

Дальнейшее повышение температуры приводит к уменьшению доли частично разупорядоченной фазы и полному переходу системы в парамагнитное состояние. Количество переходов спиновой системы из одного фазового состояния в другое опять увеличивается, возрастают флуктуации энергии, до тех пор пока вся спиновая система не перейдет в полностью парамагнитную фазу. Данный процесс формирует третий экстремум на температурной зависимости теплоемкости.

### 3.4. Фазовая диаграмма

Температурные зависимости теплоемкости для различных значений обменного взаимодействия  $J_d$  использовались нами для построения фазовой диаграммы. Границы фаз определялись по положению максимумов теплоемкости. Итоговая фазовая диаграмма исследуемой модели для линейного размера  $L = 6$  приведена на рис. 7. Как было сказано выше, нам не удалось обнаружить второй и третий максимумы теплоемкости при  $|J_d| > 1.2$ . Соответственно, нам не удалось определить точную границу между смешанной и парамагнитной фазами при данных значениях обменного взаимодействия. На графике эта граница указана пунктиром при  $|J_d| = 1.2$ . Вертикальные линии при значениях  $|J_d| = 1$  соответствуют полностью фрустрирован-

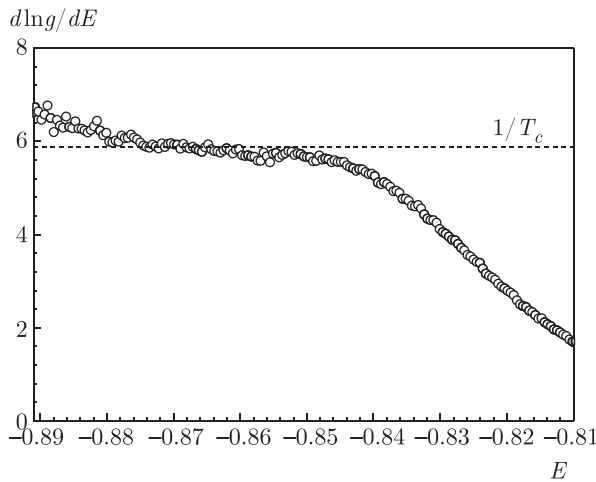


Рис. 8. Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии.  $L = 06$ ,  $J_d = 1.10$

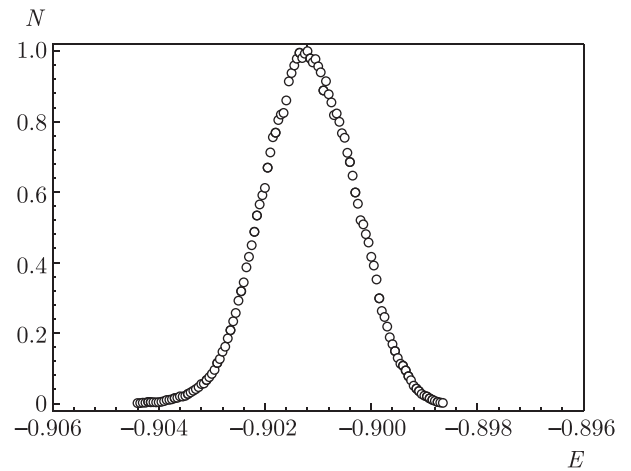


Рис. 9. Гистограмма энергии для величины обменного взаимодействия  $J_d = 1.15$ ,  $L = 48$ ,  $T = 0.26375$

ному состоянию исследуемой модели. Как видно на рисунке, фазовая диаграмма симметрична относительно линии  $J_d = 0$ . Различается лишь тип упорядочения при различных значениях обменного взаимодействия  $|J_d| > 1$ : антиферромагнитное при отрицательных значениях и ферромагнитное при положительных.

### 3.5. Тип фазового перехода

Отдельного внимания заслуживает изучение фазового перехода из упорядоченного состояния в парамагнитное. Для определения типа перехода мы использовали производную логарифма плотности состояний по энергии и гистограммы энергии.

Производная логарифма плотности состояний  $g(E)$  по энергии  $E$  позволяет получить зависимость обратной температуры от энергии. В случае фазового перехода первого рода эта зависимость имеет характерную  $S$ -образную форму, симметричную относительно горизонтальной линии, соответствующей обратной температуре фазового перехода  $1/T_c$  [13]. В случае фазового перехода второго рода график производной имеет горизонтальный участок, приходящийся на значение  $1/T_c$ . На рис. 8 приведена зависимость производной плотности состояний от энергии для значения обменного взаимодействия  $J_d = 1.10$ . Как видно на рисунке, в области  $1/T_c$  на графике отсутствует  $S$ -образная форма, но имеется горизонтальный участок. Аналогичные зависимости наблюдались и при других значениях обменного взаимодействия  $J_d$ .

Моделирование алгоритмом Метрополиса генерирует ненормализованное каноническое распределение при заданной температуре. В случае фазового перехода первого рода распределение при температуре фазового перехода будет иметь два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии [14]. В случае фазового перехода второго рода должен наблюдаться один максимум, приходящийся на равновесное значение энергии. Форму канонического распределения воспроизводит гистограмма энергии, которая показывает, сколько раз в процессе моделирования выпадало то или иное энергетическое состояние спиновой системы. Отметим, что наличие двух максимумов однозначно указывает на фазовый переход первого рода, тогда как их отсутствие еще не служит доказательством фазового перехода второго рода. Два пика могут быть не обнаружены при малых линейных размерах модели, неточном определении критической температуры, слабой статистике.

Нами был получен только один максимум на гистограммах энергии при различных значениях обменного взаимодействия  $J_d$ . На рис. 9 приведена типичная нормированная на максимальное значение гистограмма, построенная для  $J_d = 1.15$ . Для ее получения использовалась частица с линейным размером  $L = 48$ , содержащая  $N = 442368$  спинов. Моделирование проводилось при температуре  $T = 0.26375$ . В ходе вычислений отбрасывался неравновесный участок в  $5 \cdot 10^4$  шагов Монте-Карло на спин, длина равновесного участка составила  $9 \cdot 10^5$  шагов Монте-Карло на спин.

Таким образом, при всех значениях  $J_d$  нам не удалось обнаружить признаков фазового перехода первого рода. По всей видимости в исследованном диапазоне обменных взаимодействий переход из упорядоченного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода. Исходя из этого, нами с использованием теории конечно-размерного скейлинга была произведена оценка значений критических индексов намагниченности  $\beta$ , восприимчивости  $\gamma$  и радиуса корреляции  $\nu$ . Для определения критических температур использовался метод куммулянтов Биндера четвертого порядка [15,16], а термодинамические функции вычислялись по флуктуационным соотношениям [16]. В результате нами было получено, что для всего диапазона  $|J_d| > 1$  значение критических индексов составило  $\beta = 0.33(1)$ ,  $\gamma = 0.25(1)$  и  $\nu = 0.64(2)$ . Эти значения совпадают со значениями индексов, полученных для «обычной» модели Изинга на простой кубической решетке:  $\beta = 0.32630(22)$ ,  $\gamma = 1.23701(28)$  и  $\nu = 0.629912(86)$  [16].

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Добавление декорированных спинов в антиферромагнитную модель Изинга на кубической решетке в значительной степени может изменять свойства модели. От величины и знака обменного взаимодействия между узловыми спинами и декорированными зависит тип упорядочения в основном состоянии, появляются фрустрационные эффекты, возникают дополнительные экстремумы теплоемкости. Появляется смешанная фаза в определенной области температур и значений обменного взаимодействия. При этом для любых значений обменного взаимодействия переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из ферромагнитной фазы в парамагнитную является фазовым переходом второго рода. Критические индексы вдоль всей линии фазового перехода второго рода соответствуют

критическим индексам изинговского класса универсальности статического критического поведения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. **35**, 306 (1951).
2. J. Strečka, M. Rebič, O. Rojas, and S. M. de Souza, J. Mag. Magn. Mater. **469**, 655 (2019).
3. J. Strečka, O. Rojas, and S. M. de Souza, Phys. Lett. A **383**, 2451 (2019).
4. H. Čenčariková, J. Strečka, and M. L. Lyra, J. Mag. Magn. Mater. **401**, 1106 (2016).
5. L. Gálisová and J. Strečka, Physica E **99**, 244 (2018).
6. M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szałowski et al., J. Mag. Magn. Mater. **417**, 92 (2016).
7. V. Štubňa and M. Jaščur, J. Mag. Magn. Mater. **442**, 364 (2017).
8. Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. К. Муртазаев и др., ФТТ **62**, 683 (2020).
9. V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, Low Temp. Phys. **46**, 1016 (2020).
10. D. P. Landau, Physica A **205**, 41 (1994).
11. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
12. D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler, Amer. J. Phys. **72**, 1294 (2004).
13. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E **85**, 010102(R) (2012).
14. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
15. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
16. A. M. Ferrenberg, J. Xu, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **97**, 043301 (2018).