

АНТИФЕРРОМАГНИТНАЯ МОДЕЛЬ ПОТТСА НА ОБЪЕМНО–ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

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

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

Поступила в редакцию 16 декабря 2022 г.,
после переработки 26 января 2023 г.
Принята к публикации 1 февраля 2023 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на объемно-центрированной кубической решетке. Исследования проведены с учетом обменных взаимодействий первых J_1 и вторых ближайших соседей J_2 . Гистограммным методом проведен анализ порядка фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели при $J_2 = 0$ наблюдается фазовый переход второго рода. Обнаружено, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к смене типа фазового перехода.

DOI: 10.31857/S004445102306007X
EDN: DFLBSC

1. ВВЕДЕНИЕ

При изучении характера фазовых переходов модели Поттса с различным числом состояний спина q в большинстве случаев рассматривались системы с ферромагнитными взаимодействиями между ближайшими соседями. В зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует температурный фазовый переход (ФП) первого или второго рода. Критические свойства ферромагнитной модели Поттса достаточно хорошо изучены в двумерном случае [1, 2]: при $q > 4$ система демонстрирует ФП первого порядка, в то время как при $q \leq 4$ переход непрерывен. Для трехмерного случая известно, что при $q > 3$ в системе наблюдается ФП первого рода. Поведение антиферромагнитной модели Поттса считается более сложной, поскольку сильно зависит от микроструктуры решетки. Результаты исследований трехмерной антиферромагнитной модели Поттса для $q = 3$ и $q = 4$ на простой кубической решетке показывают, что в данной модели наблюдается ФП второго рода, тогда как для $q = 5$ наблюдается нулевой темпера-

турный переход, а для $q = 6$ нет порядка ни при каких температурах [3].

В отличие от ферромагнитной модели Поттса, которая достаточно хорошо изучена благодаря ее универсальности, для антиферромагнитной модели ввиду большого разнообразия критического поведения системы многие вопросы должны быть исследованы в каждом конкретном случае отдельно. Эти вопросы связаны с изучением природы и характера ФП, влияния внешних возмущающих факторов на критические и термодинамические свойства и др.

Отдельный интерес представляет то, что в антиферромагнитной модели Поттса плотность энтропии основного состояния остается ненулевой без фрустрации. Ненулевая энтропия основного состояния $S_0 \neq 0$ является важным предметом статистической механики. Одним из физических примеров является спиновый лед. В работе [4] изучено (q, r) -состояние Поттса, которое представляет собой модель Поттса с различным числом состояний спина q с невидимыми состояниями r . Термин «невидимый» означает дополнительное энергетическое вырождение, которое влияет только на энтропию, но не вносит вклада в энергию взаимодействия. Эту модель можно рассматривать как прямое расширение стандартной ферромагнитной модели Поттса. Однако из-за эффекта невидимых состояний в двумерном случае для $q = 2$, $q = 3$ и $q = 4$ может возникнуть ФП первого рода со спонтанным нарушением сим-

* E-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

метрии. Для каждого значения q существует критическое значение r , которое может привести к смене типа ФП [5].

Повышенный интерес к изучению модели Поттса связан с тем, что эта модель описывает большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [3, 6, 7]. Результаты, полученные для двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$, $q = 3$ и $q = 4$ на разных типах решеток, показывают, что многие физические свойства модели Поттса также зависят от величины взаимодействия вторых соседей J_2 [8–18]. Исследование трехмерной антиферромагнитной модели Поттса на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом конкуренции обменных взаимодействий в литературе практически не встречается. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП и термодинамических свойств трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на ОЦК-решетке с антиферромагнитным взаимодействием первых и вторых ближайших соседей. Выбор ОЦК-решетки в данном исследовании связан еще с тем, что результаты исследований модели Изинга и Гейзенберга на ОЦК-решетке показали отсутствие фрустраций при различных соотношениях обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей [19–21]. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

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

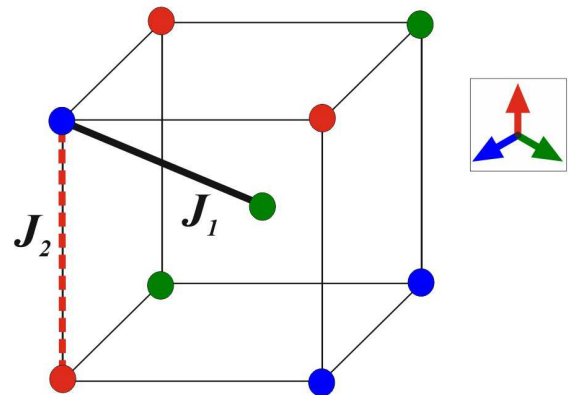


Рис. 1. Схематическое представление трехвершинной модели Поттса на ОЦК-решетке

где J_1 и J_2 – параметры обменных взаимодействий первых ($J_1 = -1$) и вторых ($J_2 = -1$) ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$.

Схематическое представление модели Поттса с $q = 3$ на ОЦК-решетке приведено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из 3 значений спина и соответствующее цветовое представление. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми J_1 и вторыми J_2 ближайшими соседями.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\begin{aligned}
 \theta_{i,j} &= \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j, \\ 120^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j, \end{cases} \\
 \cos \theta_{i,j} &= \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j, \\ -1/2, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Согласно уравнению (2), для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $S_i = S_j$. В случае, когда $S_i \neq S_j$, энергия $E_{i,j} = J_1/2$. Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении и принимает другое значение при не совпадении направлений спинов.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [22–24]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [25] и алгоритм Ванга–

Ландау [26, 27]. Репличный обменный алгоритм эффективен для исследования систем с большими линейными размерами и в критической области, а алгоритм Ванга–Ландау – в низкотемпературной области. В данном исследовании были использованы оба алгоритма.

Алгоритм Ванга–Ландау позволяет получить магнитные структуры 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 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 $f_{min} = 1.0000000001$. 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, ис-

пользуя следующие выражения:

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

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

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

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

где $K = |J_1|/k_B T$, N – число частиц, T – температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$).

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде [25]:

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 проводится обмен данными между парой соседних реплик X_i и X_{i+1} в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

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

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

Главное преимущество этого алгоритма в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности процедура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по «температурному интервалу», которая, в свою очередь, стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 * L \times L \times L = N$, $L = 8 - 64$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 приведены температурные зависимости теплоемкости C при $J_1 = -1$ и $J_2 = -1$, по-

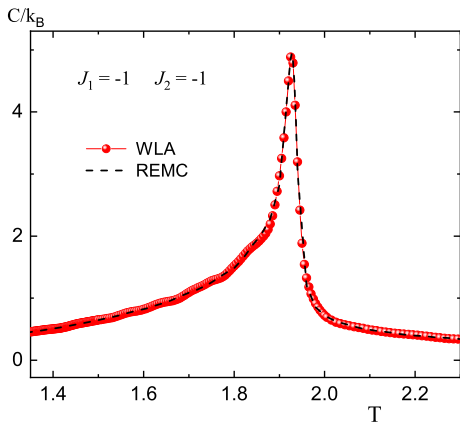


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости C при $J_1 = -1$ и $J_2 = -1$ с линейными размерами $L = 24$, полученные репличным алгоритмом (REMC) и алгоритмом Ванга–Ландау (WLA)

лученные на основе репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода МК (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, вблизи критической температуры наблюдается ярко выраженные максимумы теплоемкости. Данные, полученные разными алгоритмами, достаточно хорошо соответствуют друг другу, что позволяет говорить о надежности полученных результатов.

На рис. 3 а приведены плотности состояний системы для $J_2 = 0$ при различных линейных размерах $L = 8, 16, 24$. С ростом линейных размеров системы плотность состояний $g(E)$ значительно возрастает, что связано с вырождением основного состояния, причем вырождение наблюдается как с учетом взаимодействий вторых соседей, так и без них. На рис. 3 б видно, что вырождение основного состояния уменьшается при учете взаимодействия вторых соседей $J_2 = -1$.

На рис. 4 приведены температурные зависимости энтропии S/N для разных величин обменного взаимодействия J_2 . Видно, что при увеличении температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 3$. При низких температурах энтропия стремится к ненулевому значению. Ненулевая остаточная энтропия является следствием вырождения основного состояния.

Для анализа порядка ФП нами использован гистограммный анализ данных метода МК. Гистограммный анализ — один из наиболее точных ме-

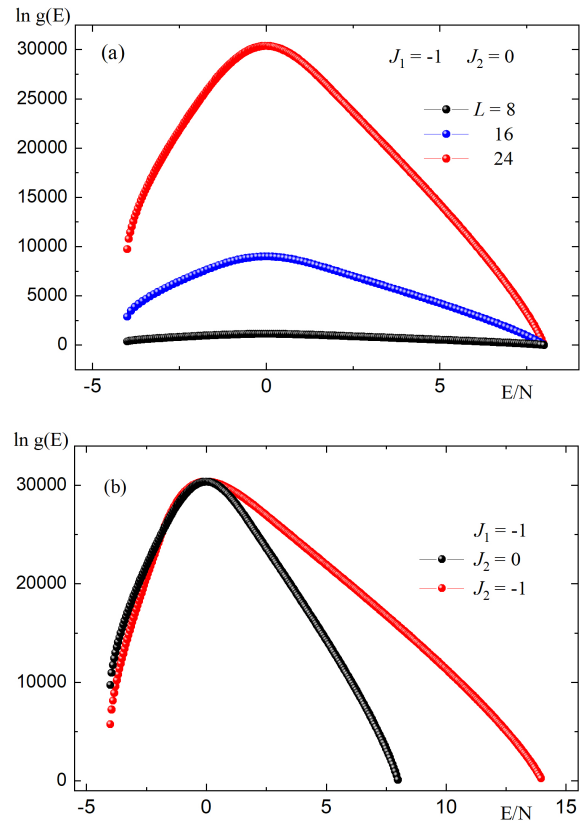


Рис. 3. Плотность состояний $g(E)$ для разных значений J_2

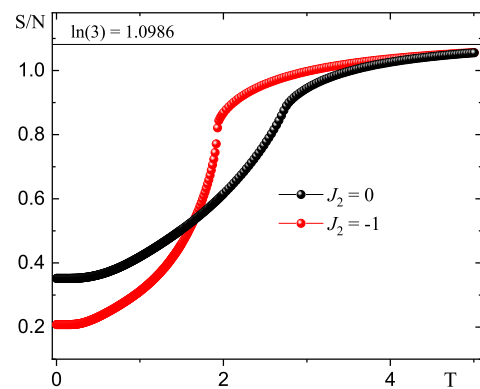


Рис. 4. Температурная зависимость энтропии S при $J_1 = -1$ и разных значениях J_2

тодов, позволяющих установить род ФП [26,28,29].

На рис. 5 и 6 представлены гистограммы распределения энергии для случаев $J_2 = 0$ и $J_2 = -1$ с различными линейными размерами. Графики по-

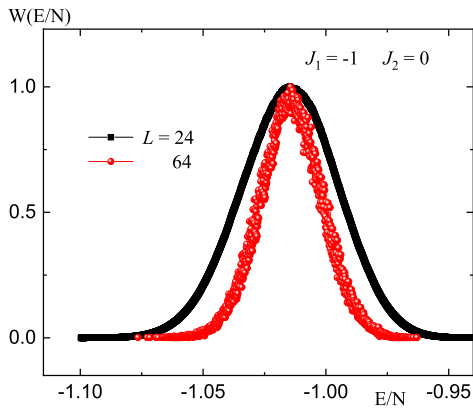


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для $J_2 = 0$ при $L = 24, 64$

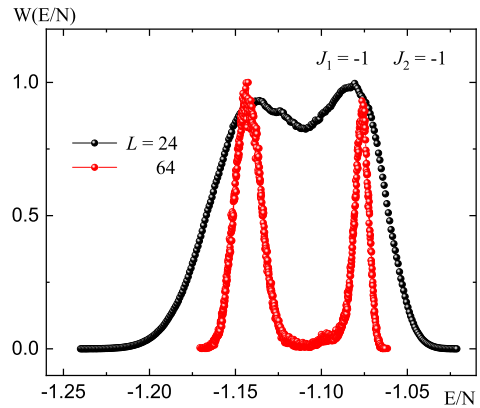


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для $J_2 = -1$ при $L = 24, 64$

строены при критической температуре. На рис. 5 видно, что в зависимости вероятности W от энергии E/N для $J_2 = 0$ при $L = 24$ и 64 наблюдается один максимум, что характерно для ФП второго рода ($T_N = 2.728(5)$). На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 24$ и 64 при $J_2 = -1$. Наблюдается бимодальное распределение энергии. С ростом линейных размеров системы мы наблюдаем увеличение расстояния между пиками. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является характерным признаком ФП первого рода ($T_N = 1.925(2)$). Таким образом, учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в данной модели приводит к смене типа фазового перехода, что также подтверждает поведение энтропии. На рис. 4 продемонстрировано типичное непрерывное поведение энтропии при фазовом переходе второго рода для $J_2 = 0$ и характерное скачкообразное поведение в критической точке при фазовом переходе первого рода для $J_2 = -1$.

Смена типа ФП также подтверждается данными, показанными на рис. 7, где приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами $L = 64$ при $J_2 = -1$. По горизонтальной оси отложено количество МК-шагов на спин (NMCS). Результаты приведены для трех температур: в точке ФП ($T_N = 1.925$), а также выше и ниже критической температуры ($T = 1.920$ и $T = 1.930$). В точке ФП имеются два метастабильных энергетических уровня $E_1 = -1.1426$ и $E_2 = -1.0769$. Система совершает случайные флук-

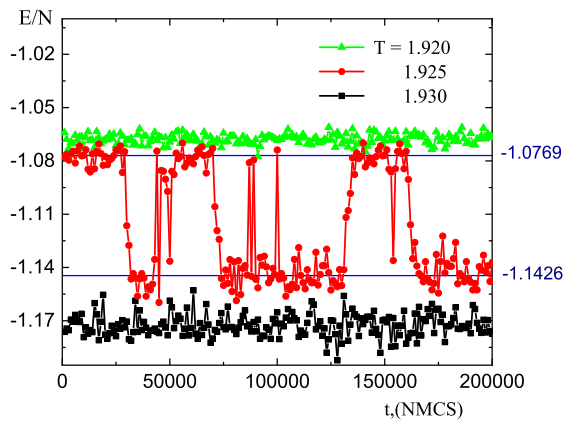


Рис. 7. Временная динамика изменения внутренней энергии при различных температурах для $J_2 = -1$ при $L = 64$

туации около этих двух энергетических состояний. Энергия E_1 соответствует первому максимуму на гистограмме распределения энергии, а E_2 — второму максимуму (рис. 6). Такое поведение временной динамики изменения внутренней энергии подтверждает наличие ФП первого рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние конкуренции обменных взаимодействий на фазовые переходы и термодинамические свойства трехмерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 3$ на объемно-центрированной кубической решетке с использованием репличного алгоритма и алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло. На основе

гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели при взаимодействии ближайших соседей наблюдается фазовый переход второго рода. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей приводит к фазовому переходу первого рода.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (№ МК-5223.2022.1.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
2. R. J. Baxter, J. Phys. C **6**, 445 (1973).
3. C. Yamaguchi and Y. Okabe, J. Phys. A **34**, 8781 (2001).
4. R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124**, 381 (2010).
5. T. Surungan, Y. Komura, and Y. Okabe, AIP Conference Proceedings **1617**, 79 (2014).
6. W. Zhang and Y. Deng, Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
7. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific Publishing, Singapore (2004).
8. I. Puha and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **87**, 5905 (2000).
9. Zh. Fu, W. Guo, and H. W. J. Blöte, Phys. Rev. E **101**, 012118 (2020).
10. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).
11. Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, ФТТ **60**, 1078 (2018).
12. Y. Panov and O. Rojas, Phys. Rev. E **103**, 062107 (2021).
13. Д. Р. Курбанова, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Т. А. Таев, ЖЭТФ **158**, 1095 (2020).
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, Письма в ЖЭТФ **114**, 762 (2021).
16. Д. Р. Курбанова, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Письма в ЖЭТФ **115**, 505 (2022).
17. M. Nauenberg, D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
18. J. L. Cardy, M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **22**, 2560 (1980).
19. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, D. R. Kurbanova, M. A. Magomedov, and K. Sh. Murtazaev, Mat. Lett. **236**, 669 (2019).
20. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, Д. Р. Курбанова, ФТТ **60**, 1798 (2018).
21. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, and М. К. Ramazanov, Physica A **545**, 123548 (2020).
22. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
23. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **109**, 423 (2019).
24. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **111**, 34 (2020).
25. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
26. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
27. C. Zhou and R. N. Bhatt, Phys. Rev. E **72**, 025701 (2005).
28. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
29. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E **85**, 010102 (2012).