

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОДЕЛИ ПОТТСА С ФРУСТРАЦИЯМИ НА РЕШЕТКЕ КАГОМЕ

М. К. Рамазанов^{}, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, Т. Р. Ризванова*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук
367015, Матачкала, Россия*

Поступила в редакцию 8 сентября 2023 г.,
после переработки 18 октября 2023 г.
Принята к публикации 18 октября 2023 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с взаимодействиями первых J_1 и вторых J_2 соседей. Исследования проведены для величины взаимодействия вторых соседей в интервале $0 \leq r = |J_2/J_1| \leq 1$. Обнаружено, что при значении $r = 0$ в системе наблюдается беспорядок и сильное вырождение основного состояния. Показано, что учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей снимет вырождение основного состояния. Проведен анализ характера фазовых переходов в рассмотренном интервале r . Показано, что в интервале $0.2 \leq r \leq 1$ наблюдается фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451024030106

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП) и термодинамических свойств соединений, имеющих решетку кагоме привлекает большое внимание. Это связано с тем, что в таких соединениях вследствие особой геометрии решетки могут возникать фрустрации. В антиферромагнитных соединениях, имеющих решетку кагоме, фрустрации наблюдаются при учете обменных взаимодействий ближайших соседей. В ферромагнетиках с решеткой кагоме с антиферромагнитными взаимодействиями вторых соседей фрустрации возникают из-за конкуренции обменных взаимодействий между первыми и вторыми соседями. Эффекты фрустрации играют важную роль в магнитных спиновых системах. Фрустрированные магнетики проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных магнитных систем, что вызывает повышенный интерес к изучению явлений фрустрации в магнитных системах [1–3]. Для изучения физических свойств та-

ких магнетиков широко используются модели Изинга, Гейзенберга, Поттса и др. Эти модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др [1, 4, 5]. На сегодняшний день классические модели Изинга и Гейзенберга достаточно хорошо изучены и многие их свойства известны [6–10]. В отличие от моделей Изинга и Гейзенберга, для модели Поттса существует совсем немного надежно установленных фактов. В последние годы исследованию спиновых систем, описываемых моделью Поттса, было посвящено значительное число работ [4, 11–16], в которых были получены ответы на многие вопросы. Было показано, что физические свойства модели Поттса зависят от пространственной размерности решетки, числа состояний спина q , величины взаимодействия вторых соседей и от геометрии решетки [11–19]. Большинство имеющихся результатов получены для модели Поттса с числом состояний спина $q = 2$ и $q = 3$ [11–13]. В зависимости от числа состояний спина q и пространственной размерности модель Поттса демонстрирует ФП первого или второго рода. Двумерная модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ довольно уникальна и до сих пор мало изученна. Эта модель может быть использована для

^{*} E-mail: sheikh77@mail.ru

описания поведения некоторых классов адсорбированных газов на графите [20]. 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 ФП происходит как переход первого рода [4]. В данной работе нами проводится исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с учетом ферромагнитных обменных взаимодействий вторых соседей. Данная модель даже без учета взаимодействий вторых соседей является фрустрированной вследствие особой геометрии решетки. Учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей в данной модели может привести к изменению вырождения основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические и магнитные свойства. Исследование влияния величины ферромагнитного взаимодействия вторых соседей на ФП и термодинамические свойства двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме в литературе практически не встречается. В связи с этим в данной работе нами проводится исследование ФП и термодинамических свойств этой модели в широком интервале значений величины взаимодействия вторых соседей. Исследование рассматриваемой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с физикой фрустрированных спиновых систем и систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых соседей может быть представлен в следующем виде [21, 22]:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных антиферромагнитного ($J_1 < 0$) и ферромагнитного ($J_2 > 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых соседей, $r = |J_2/J_1|$ — величина взаимодействия вторых соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$. В данной работе рассматривается интервал значений $0 \leq r \leq 1$ с шагом 0.1. Суммирование в уравнении (1) проводится для каждой пары соседних спинов. В данной модели каждый спин имеет четыре ближайших соседа, поэтому суммирование проводилось $4N$ раз.

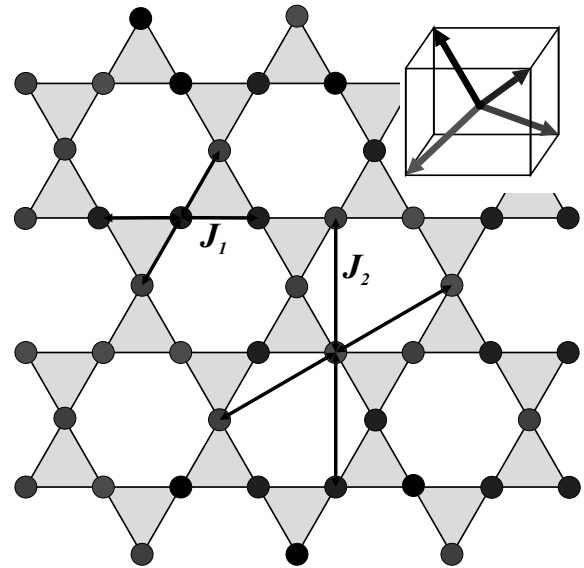


Рис. 1. Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме. На вставке для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление

$N = L \times L$ — количество спинов в системе, $L = 12 - 72$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Такая же процедура проводится и для следующих ближайших соседей. Схематическое описание исследуемой модели представлено на рис. 1. Как видно на рисунке, у каждого спина есть четыре ближайших (J_1) и четыре следующих за ближайшими (J_2) соседа. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление. Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство

$$\theta_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j; \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases}$$

или

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

Согласно условию (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 $E_{i,j} = J_1/3$. Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении и принимает другое значение при несовпадении направлений спинов. Для модели Поттса с $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов, как показано на вставке рис. 1.

В настоящее время одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) [23], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами в данном исследовании был использован этот алгоритм. 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. Подобрав 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 $\ln g(E)$. Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работе [13]. Определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

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

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

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

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

где $K = |J_1|/k_B T$, N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U является нормированной величиной. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 представлены температурные зависимости теплоемкости C для разных значений r , полученные для системы с линейным размером $L = 24$

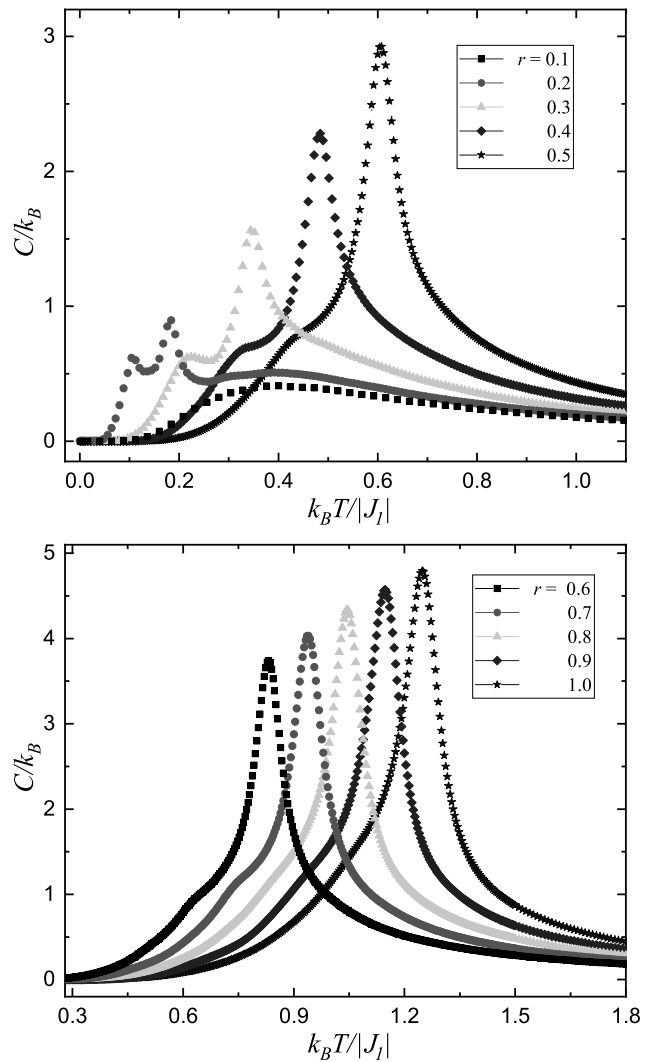


Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости C

(здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, для значения $r = 0.1$ на температурной зависимости теплоемкости отсутствует острый пик, а наблюдается сглаженный пик. Отсутствие ярко выраженного пика теплоемкости объясняется тем, что при $r \leq 0.1$ в данной модели отсутствует порядок. Для значений $r = 0.2$ и $r = 0.3$ наблюдается расщепление теплоемкости. Наблюдаются два пика и один плавный «горб». При увеличении величины r плавный «горб» и низкотемпературный пик исчезают и на температурной зависимости теплоемкости остается один ярко выраженный пик. Наличие «горба» свидетельствуют о низкоразмерности системы, а расщепление теплоемкости обычно наблюдается для фрустрированных спиновых систем [2, 24]. Для исследуемой нами модели расщепление теплоемкости связано с

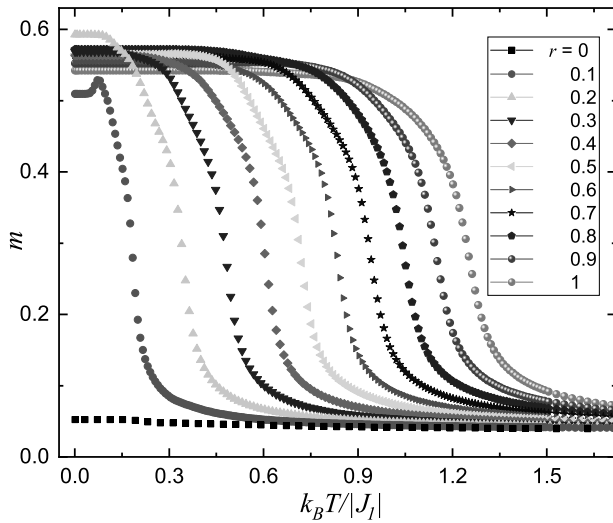


Рис. 3. Температурная зависимость намагниченности m

тем, что учет обменных взаимодействий вторых соседей приводит к появлению частично упорядоченного магнитного состояния. Рост r сопровождается сдвигом максимумов в сторону высоких температур и увеличению значения максимумов. Увеличение абсолютных значений максимумов теплоемкости происходит за счет роста вклада обменных взаимодействий вторых соседей.

Намагниченность системы m вычислялась по формуле

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (7)$$

где S_i — трехкомпонентный единичный вектор $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Он может принимать одно из четырех направлений, представленных на вставке рис. 1.

На рис. 3 представлены графики зависимости намагниченности m от температуры для разных значений r . При отсутствии взаимодействий вторых соседей в системе отсутствует порядок и значение намагниченности близко к нулю. При учете взаимодействий вторых соседей в системе наблюдается частичное упорядочение и намагниченность в низкотемпературной области имеет отличные от нуля значения. Это объясняется тем, что взаимодействие вторых соседей приводит к изменению магнитной структуры основного состояния, и в системе возникает частичный порядок. На рисунке видно, что для $r \geq 0.1$ с ростом температуры намагниченность m плавно снижается, что свидетельствует в пользу ФП второго рода.

Зависимости энтропии S от температуры представлены на рис. 4. Как видно на рисунке, для всего рассмотренного диапазона значений r с увеличением

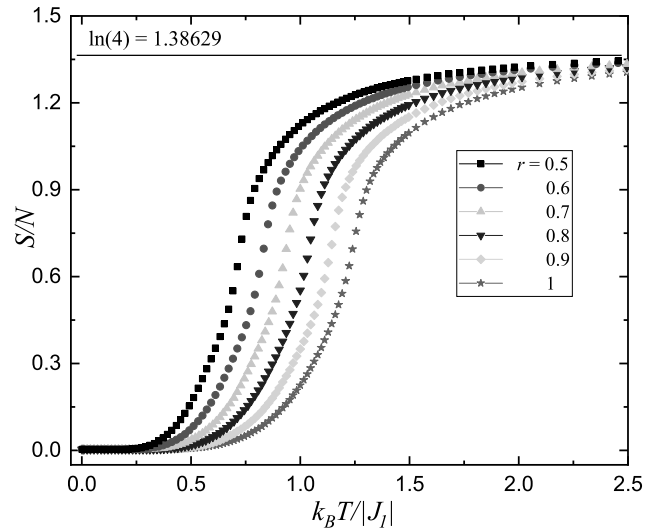
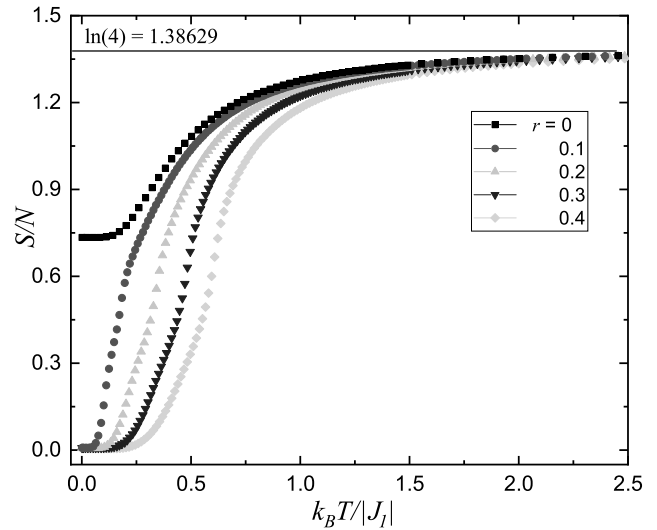


Рис. 4. Температурная зависимость энтропии S

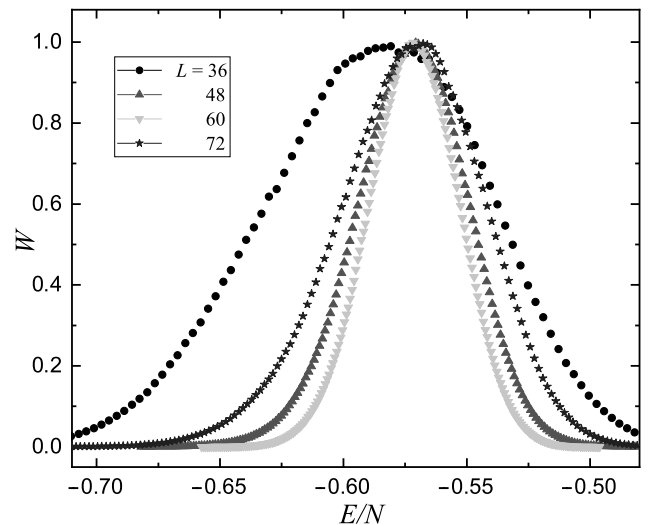


Рис. 5. Гистограммы распределения энергии для $r = 0.5$ при различных L

ем температуры энтропия стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 4$. Для случая $r = 0$ в низкотемпературной области энтропия стремится к отличному от нуля значению. При этом это значение энтропии сильно отличается от нуля. Такое поведение энтропии свидетельствует о том, что при $r = 0$ основное состояние системы сильно вырождено. Кроме того, известно, что в системах с фрустрациями энтропия S при низких температурах должна стремиться к отличному от нуля значению. В диапазоне $0.1 \leq r \leq 1$ в низкотемпературной области энтропия стремится к нулю. Это значит, что в данном диапазоне r отсутствует вырождение основного состояния. Таким образом, мы видим, что учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей приводит к снятию вырождения основного состояния, даже при малых значениях r .

Для определения рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [23, 25]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работах [26, 27]. Полученные на основе гистограммного анализа данных результаты показывают, что в данной модели в интервале $0.2 \leq r \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для систем с различными линейными размерами для значения $r = 0.5$. Графики построены для температуры близкой к критической ($T = 0.718$). На рисунке видно, что в зависимости вероятности W от энергии наблюдается один максимум для всех значений L , который свидетельствует о ФП второго рода. Наличие одного максимума на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП второго рода. Кроме того, на рисунке видно, что при увеличении линейных размеров системы ширина гистограммы уменьшается, что характерно для ФП второго рода. Отметим, что один максимум на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдается для значений r в интервале $0.2 \leq r \leq 1.0$. Это позволяет нам утверждать, что в этом интервале значений r наблюдаются ФП второго рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной антиферромагнитной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на решетке кагоме с учетом ферромагнитных взаимодействий вторых соседей выполнено с использованием

алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Проведен анализ характера фазовых переходов в широком интервале значений величины взаимодействия вторых соседей r . Показано, что в интервале $0.2 \leq r \leq 1$ наблюдается фазовый переход второго рода. Для значений $r \leq 0.1$ в системе отсутствует порядок и наблюдаются фрустрации. Показано, что при значении $r = 0$ основное состояние системы сильно вырождено. Учет ферромагнитных взаимодействий вторых соседей приводит к снятию вырождения основного состояния для значений $r \geq 0.1$.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific, Singapore (2004).
2. F. A. Kassar-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, and A. I. Proshkin, *J. Magn. Mater.* **384**, 247 (2015).
3. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, *ФТТ* **65**, 1455 (2023).
4. F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
5. W. Zhang and Y. Deng, *Phys. Rev. E* **78**, 031103 (2008).
6. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, D. R. Kurbanova, M. A. Magomedov, and K. Sh. Murtazaev, *Mater. Lett.* **236**, 669 (2019).
7. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 610 (2019).
8. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **161**, 753 (2022).
9. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, *ФНТ* **46**, 824 (2020).
10. А. К. Муртазаев, Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, *ЖЭТФ* **156**, 980 (2019).
11. M. Nauenberg and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 837 (1980).
12. J. L. Cardy, M. Nauenberg, D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **22**, 2560 (1980).
13. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, *Phys. A* **521**, 543 (2019).
14. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S.-H. Tsai, *J. Phys. A* **31**, 2287 (1998).
15. F. A. Kassar-Ogly and A. I. Proshkin, *Phys. Solid State*. **60**, 1090 (2018).
16. М. А. Фадеева, Л. Н. Щур, *ЖЭТФ* **162**, 909 (2022).

17. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
18. Д. Р. Курбанова, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев, ЖЭТФ **163**, 816 (2023).
19. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, ФММ **124**, 339 (2023).
20. E. Domany, M. Schick, and J. S. Walker. Phys. Rev. Lett. **38**, 1148 (1977).
21. M. G. Townsend, G. Longworth, and E. Roudaut, Phys. Rev. B **33**, 4919 (1986).
22. Y. Chiaki and O. Yutaka, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 8781 (2001).
23. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 0561011–1 (2001).
24. F. A. Kassin-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Magn. Magn. Mater **24**, 3418 (2012).
25. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
26. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
27. А. К. Муртазаев, Т. Р. Ризванова, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, ФТТ **62**, 1278 (2020).