

УДК 239.2

Рамазанов М.К., Муртазаев А.К.

Компьютерное моделирование модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке

На основе алгоритма Ванга-Ландау методом Монте-Карло выполнены исследования термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к появлению фрустрации.

Библиография: 11 названий.

Based on the Wang-Landau algorithm, the Monte Carlo method is used to study the thermodynamic properties of the two-dimensional Potts model with the number of spin states $q = 4$ on a triangular lattice, taking into account the interactions of the first and second nearest neighbors. It is shown that taking into account antiferromagnetic interactions of the second nearest neighbors leads to frustration.

Bibliography: 11 items.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, алгоритма Ванга-Ландау, фрустрации.

Keywords: Monte Carlo method, Wang-Landau algorithm, frustration.

Введение

Изучение эффектов фрустрации в спиновых решеточных моделях представляет большой интерес в течение последних десятилетий. Интер-

⁰Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-02-00153 а.

рес к таким системам обусловлен богатой природой фазовых переходов (ФП) и особенностью их термодинамического и критического поведения. Фruстрации могут быть обусловлены конкурирующими обменными взаимодействиями, которые не позволяют системе одновременно минимизировать все ее локальные взаимодействия, а в некоторых частных случаях может привести к бесконечно вырожденному основному состоянию [1, 2].

Интерес к двумерной ферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке обусловлен тем, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей может привести к возникновению фruстраций. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения фruстрированной модели Поттса на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 4$ и эти вопросы до сих пор остаются открытыми.

В связи с этим, в настоящей работе нами на основе метода Монте-Карло (МК) проводятся исследования термодинамических свойств этой модели на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой фruстрированных спиновых систем.

1. Постановка задачи и результаты

В данной работе, нами предпринята попытка на основе метода МК провести исследование термодинамических свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с ферромагнитным взаимодействием первых и антиферромагнитным взаимодействием вторых ближайших соседей.

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 ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых

ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$; $r = |J_2/J_1|$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей.

В последние годы термодинамические свойства фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [3–9]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга-Ландау [10, 11], особенно в низкотемпературной области.

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, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (2)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (3)$$

$$C = \left(\frac{(|J_1|/k_B T)^2}{N} \right) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (5)$$

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

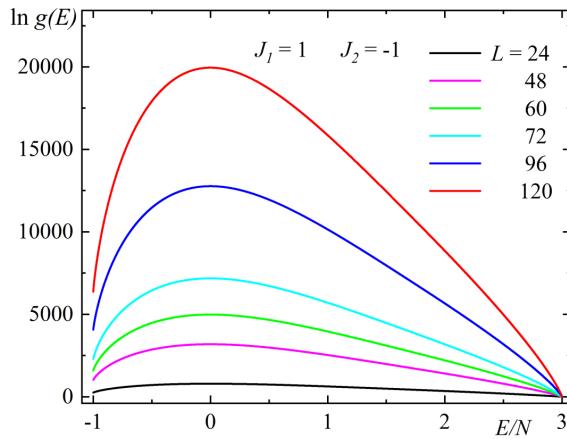


Рис. 1: Плотность состояний $g(E)$ при $r = 1.0$.

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

На рис. 2 приведены температурные зависимости энтропии S для систем с различными линейными размерами при $r = 1.0$ (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для построения зависимостей). На рисунке видно, что с увеличением температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически

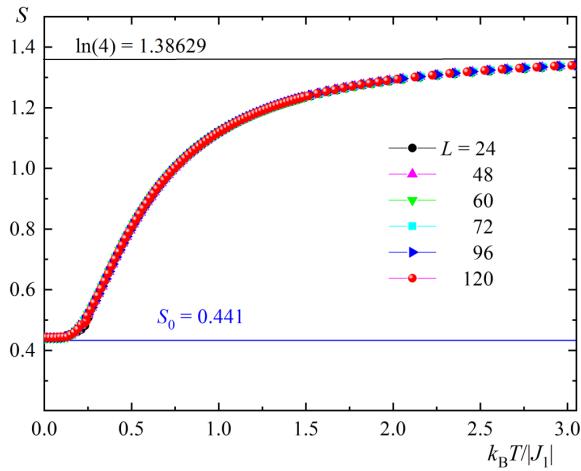


Рис. 2: Температурная зависимость энтропии S при $r = 1.0$.

предсказанному значению $\ln 4$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия не меняется с линейными размерами 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 фruстраций.

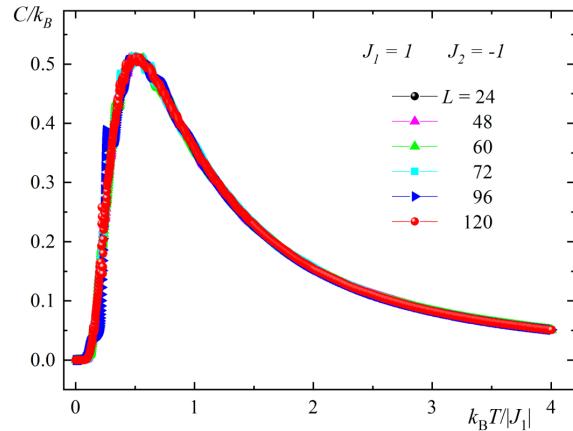


Рис. 3: Температурные зависимости удельной теплоемкости C при $r = 1.0$.

На рис. 3 представлены зависимости удельной теплоемкости C от температуры для $r = 1.0$, полученные при различных линейных размерах системы. Отметим, что для теплоемкости наблюдается необыч-

ное 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 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 фruстрированных спиновых систем. Известно, что в точке фruстрации 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 фruстрации. Данные этой работы показывают, что в точке фruстрации в исследуемой модели ФП отсутствует. Для аналогичной модели на гексагональной решетке [10, 11] было показано, что при $r = 1.0$ наблюдается ФП первого рода.

Заключение

Компьютерное моделирование 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 метода Монте-Карло. Показано, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к фruстрации. Установлено, что значение $r = 1.0$ является точкой фruстрации для исследуемой модели. Показано, что в точке фruстрации в данной модели фазовый переход отсутствует.

Список литературы

- [1] Dotsenko V. S. Critical phenomena and quenched disorder // Phys. Usp. 1995. V. 38. N. 5. P. 457–496.
- [2] Korshunov S. E. Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // Phys. Usp. 2006. V. 49. N. 3. P. 225–262.
- [3] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K. Phase transitions and critical characteristics in the layered antiferromagnetic Ising model with next-

- nearest-neighbor intralayer interactions // JETP Lett. 2015. V. 101. N. 10. P. 714–718.
- [4] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. вып. 2. С. 72–77.
 - [5] Ramazanov M.K., Murtazaev A.K. Investigation of critical phenomena of the frustrated Ising model on a cubic lattice with next-nearest-neighbor intralayer interactions by the Monte Carlo method // Phase Transitions. 2018. V. 91. No. 1. P. 83–91.
 - [6] Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Фазовая диаграмма и структура основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 107. вып. 4. С. 265–269.
 - [7] Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Badiev M. K. Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions // Phys. B: Cond. Matt. 2015. V. 476. P. 1–5.
 - [8] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Phase transitions and critical phenomena in the antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. V. 507. P. 210–218.
 - [9] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Компьютерное моделирование критических свойств фрустрированной модели Изинга // Дагестанские электронные математические известия. 2018. Вып.9. С. 26–32.
 - [10] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Мазагаева М.К., Магомедов М.А. Фазовые переходы и термодинамические свойства модели Поттса с числом состояний спина $q=4$ на гексагональной решетке // ЖЭТФ. 2019. Т. 156. вып. 3. С. 502–506.
 - [11] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Мазагаева М.К. Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств модели Поттса с $Cq=4$ на гексагональной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // ФТТ. 2020. Т. 62. вып. 3. С. 442–446.

Рамазанов М.К. (Ramazanov M.K.)

Отдел математики и информатики Дагестанского феде-
рального исследовательского центра РАН

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в редакцию

02.06.2020

Муртазаев А.К. (Murtazaev A.K.)

Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН

E-mail: akai2005@mail.ru