

УДК 239.2

Рамазанов М. К., Муртазаев А. К., Магомедов М. А.,
Курбанова Д. Р., Рамазанов К. М., Хизриев М. С.

Энергетический анализ магнитных структур основного состояния модели Поттса

На основе алгоритма Ванга-Ландау методом Монте-Карло проведен энергетический анализ магнитных структур основного состояния двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с учетом обменных взаимодействий первых J_1 и вторых J_2 ближайших соседей. Исследования проведены для величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$. Определены магнитные структуры основного состояния при различных значениях величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Обнаружено, что изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей в данной модели приводит к изменению магнитного упорядочения.

Библиография: 13 названий.

Based on the Wang-Landau algorithm, the Monte Carlo method was used to perform an energy analysis of the magnetic structures of the ground state of the two-dimensional Potts model with the number of spin states $q = 4$ on a triangular lattice, taking into account the exchange interactions of the first J_1 and second J_2 nearest neighbors. The studies were carried out for the value of the interaction of the second nearest neighbors in the interval $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$. The magnetic structures of the ground state are determined for different values of the interaction of the second nearest neighbors. It is found that a change in the magnitude of the interaction of the second nearest neighbors in this model leads to a change in the magnetic ordering.

Bibliography: 13 items.

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

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

Введение

Модель Поттса описывает большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. В этих системах из-за конкуренции обменных взаимодействий, геометрических или энергетических ограничений могут возникать фрустрации. Магнитные материалы, имеющие треугольную решетку, вследствие особой геометрии, сильно фрустрированы, что приводит к необычным физическим свойствам таких материалов [1–3].

В данной работе нами изучается двумерная модель Поттса на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 4$. Эта модель довольно уникальна и до сих пор малоизучена [4]. Исследование двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей в литературе практически не встречается. Конкуренция обменного взаимодействия в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению новых магнитных структур основного состояния, а также влиять на его термодинамические свойства [5]. В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло (МК) провести энергетический анализ 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.

Особый интерес представляет изучение магнитных свойств для модели Поттса с $q = 4$ при различных соотношениях величины антиферромагнитного взаимодействия вторых ближайших соседей. Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить закономерности изменения магнитных свойств фрустрированной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ и эти вопросы до сих пор остаются открытыми. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных

с физикой фruстрированных спиновых систем.

1. Постановка задачи и результаты

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может быть представлен в следующем виде:

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

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.

Схематическое и символное представление модели приведено на рисунке 1. На вставке показано символическое представление для каждого из четырех значений спина. На рисунке также представлены взаимодействия между первыми J_1 и вторыми J_2 ближайшими соседями.

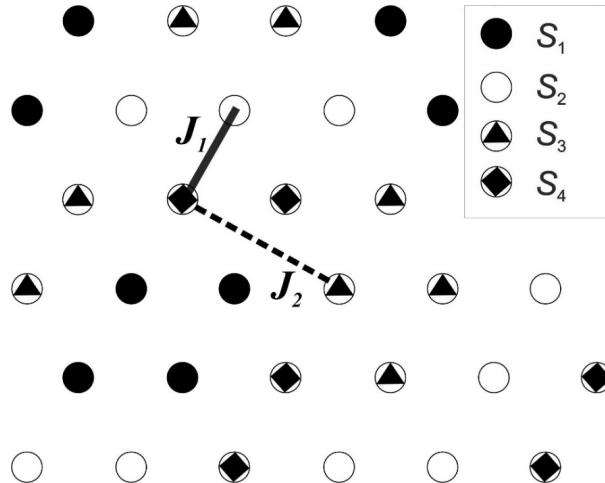


Рис. 1: Схематическое представление модели Поттса.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [6–11]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем

является алгоритм Ванга - Ландау метода МК [12, 13], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами, в данном исследовании был использован этот алгоритм.

В алгоритм Ванга-Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Более подробно алгоритм Ванга - Ландау изложен в работах [6]. Данный алгоритм позволяет 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:

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

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

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (4)$$

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

где $K = |J_1|/k_B T$, N – число матриц, T – температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U – внутренняя энергия (U является нормированной величиной).

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 12 \div 120$ в диапазоне $-2.0 \leq J_2 \leq 0.0$.

На рис. 2а представлена магнитная структура основного состояния для $J_2 = 0$. Основное состояние является ферромагнитным, в котором все спины ориентированы вдоль одного из четырех направлений – система четырехкратно вырождена. Такая картина наблюдается в интервале $-0.4 \leq J_2 \leq 0$. На рисунке 2б приведены магнитные структуры основного состояния для случая $J_2 = -0.5$. Как видно на рисунке происходит нарушение ферромагнитного упорядочения. Наблюдаются полосовые структуры разной ширины. На рисунке 2в приведены магнитные структуры основного состояния для случая $J_2 = -0.7$. На рисунке наблюдаются полосовые структуры, причем эти структуры могут отличаться направлением полос. Такая картина наблюдается в интервале

$-1 \leq J_2 < -0.5$. Для случая $J_2 = -1$ (рис. 2d) наблюдается нарушение магнитного упорядочения типа полосовых структур. В системе на фоне полосовых структур возникают области с триплетным упорядочением. В интервале $-2.0 \leq J_2 \leq -1$ (рис. 2e, 2f) в системе возникают триплетные и страйпово-триплетные структуры.

Для энергетического анализа магнитных структур основного состояния нами отмечены узлы на решетке размерами 12×12 , приведенной на рисунке 2. Каждый узел имеет 6 ближайших соседей и 6 следующих ближайших соседей. Энергетический вклад узла i определяется как:

$$E_i = \frac{J_1}{2} \sum_j \delta_{i,j} - \frac{J_2}{2} \sum_k \delta_{i,k} = -\frac{J_1}{2}n - \frac{J_2}{2}m, \quad (6)$$

где n – число ближайших соседей, имеющих то же значение, что и данный спин, m – число следующих ближайших соседей, имеющих то же самое значение.

В зависимости от структуры и положения спина на решетке возможны следующие варианты, приведенные на рисунке 2:

1. Все соседи спина имеют то же самое значение ($n = 6$ и $m = 6$).
2. Спин находится на границе двух широких полос ($n = 4$ и $m = 3$).
3. Спин находится на второй линии от границы двух широких полос ($n = 6$ и $m = 5$).
4. Спин в страйповой структуре с шириной 2 полосы ($n = 4$ и $m = 2$).
5. Любой из узлов на триплетной структуре ($n = 2$ и $m = 0$).
6. Любой из узлов на триплетной структуре ($n = 2$ и $m = 0$).
7. Спины на решетке с фрустрациями имеют случайное число n и m .

Зависимость энергии этих узлов от величины J_2 приведена на рисунке 3 (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). В зависимости от структуры основного состояния система может содержать разное количество узлов типа 1-7. Структуры, приведенные на рисунке 2 для решетки 12×12 содержат:

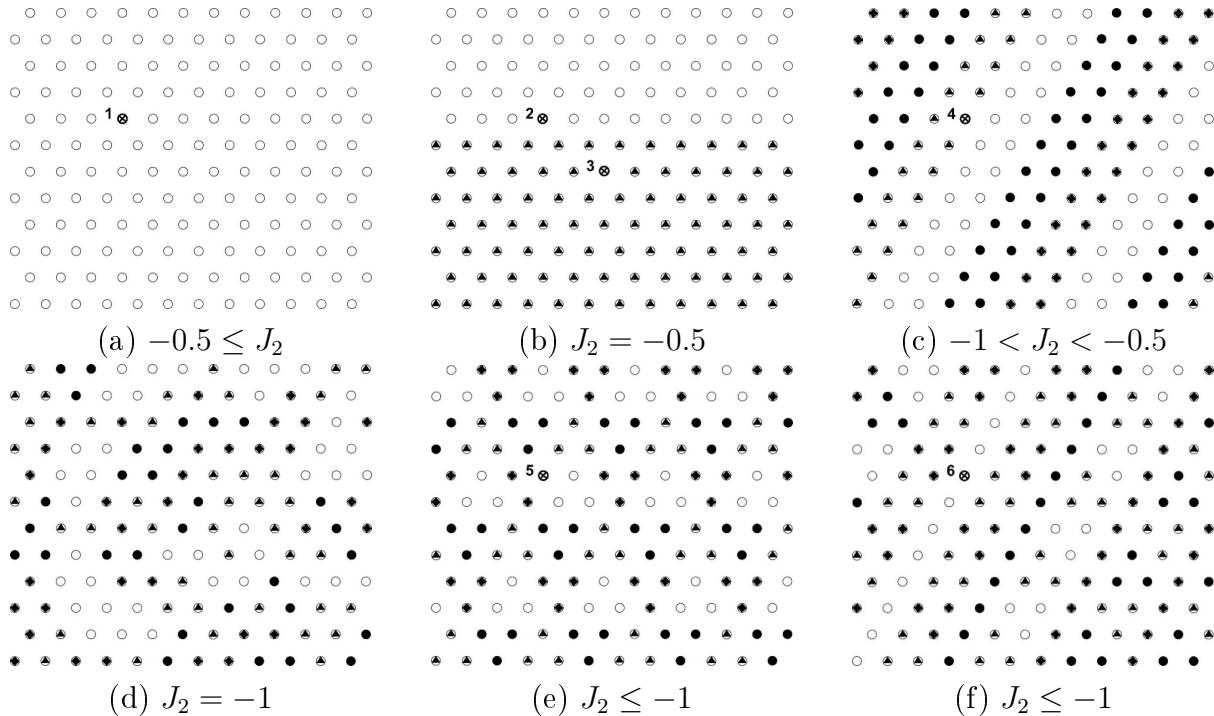


Рис. 2: Конфигурация спинов в одном из основных состояний, реализуемых в системе при $J_1 = 1$ и различных J_2 .

- (a) все 144 спина типа 1;
- (b) 96 спина типа 1, 24 спина типа 2, 24 спина типа 3. При наличии в системе нескольких полос данное соотношение спинов может меняться, при этом всегда выполняется условие равенства числа узлов типа 2 и типа 3;
- (c) все 144 спина типа 4;
- (d) все 144 спина типа 7. Фruстрированное неупорядоченное состояние;
- (e) все 144 спина типа 5;
- (f) все 144 спина типа 5 или 6.

Энергетический анализ различных конфигураций спинов основных состояний при $J_1 = 1$ и различных J_2 изображен на рисунке 4. Таким образом, в зависимости от величины J_2 энергетически выгодными являются:

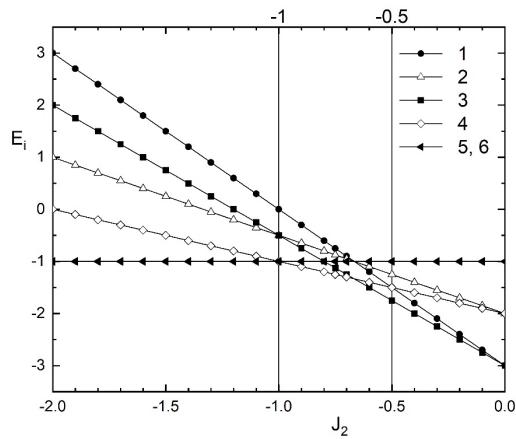


Рис. 3: Схематическое представление модели Поттса.

$$-0.5 \leq J_2 - a$$

$$J_2 = -0.5 - a, b, c$$

$$-1 \leq J_1 \leq -0.5 - c$$

$$J_2 = -1 - c, d, e, f$$

$$J_2 \leq -1 - e, f.$$

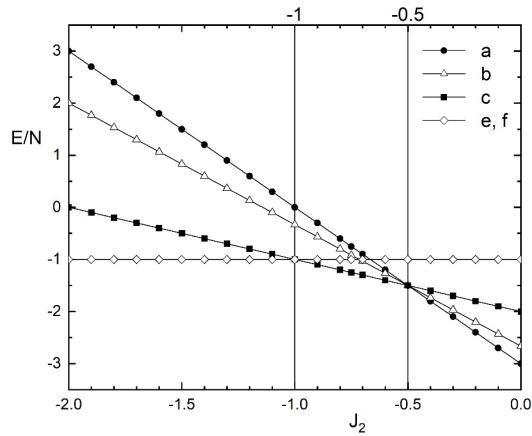


Рис. 4: Энергетический анализ различных конфигураций спинов основного состояния.

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 метода Монте-Карло. Определены магнитные структуры основного состояния при различных значениях величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Обнаружено, что изменение величины взаимодействия вторых ближайших соседей в данной модели приводит к изменению магнитного упорядочения. Проведен энергетический анализ магнитных структур основного состояния.

Список литературы

- [1] Diep H. T. Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
- [2] Wu F. Y. The Potts model // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. P. 235–268.
- [3] Korshunov S. E. Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // Phys. Usp. 2006. V. 49. N. 3. P. 225-262.
- [4] Nauenberg M., Scalapino D. J. Singularities and Scaling Functions at the Potts-Model Multicritical Point // Phys. Rev. Lett. V. 44. P. 837–840.
- [5] Cardy J. L., Nauenberg M., Scalapino D. J. Scaling theory of the Potts-model multicritical point // Phys. Rev. B. 1980. V. 22. P. 2560–2568.
- [6] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K., Magomedov M. A. Phase diagrams and ground-state structures of the Potts model on a triangular lattice // Physica A. 2019. V. 521. P. 543–550.
- [7] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K. Phase transitions in the antiferromagnetic layered Ising model on a cubic lattice // JETP Lett. 2016. V. 103. N. 7. P. 460-464.
- [8] Рамазанов М. К., Муртазаев А. К. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной слоистой модели Изинга с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей // Письма в ЖЭТФ. 2015. Т. 101. вып. 9-10. С. 793 - 798.

- [9] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K. Phase transitions and critical properties in the antiferromagnetic Heisenberg model on a layered cubic lattice // JETP Lett. 2017. V. 106. N. 2. P. 86-91.
- [10] Муртазаев А. К., Рамазанов М. К., Бадиев М. К. Исследование критических свойств трехмерной фruстрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами Монте-Карло // ФНТ. 2009. Т. 35. вып. 7. С. 663 - 669.
- [11] Рамазанов М. К., Муртазаев А. К. Компьютерное моделирование критических свойств фрустрированной модели Изинга // Дагестанские электронные математические известия. 2018. Вып.9. С. 26-32.
- [12] Рамазанов М. К., Муртазаев А. К. Компьютерное моделирование модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на треугольной решетке // Дагестанские электронные математические известия. 2020. Вып.13. С.57 - 64.
- [13] Рамазанов М. К., Муртазаев А. К. Компьютерное моделирование двумерной модели Поттса с конкурирующими обменными взаимодействиями // Дагестанские электронные математические известия. 2021. Вып.16. С. 16-23.

Рамазанов М. К. (Ramazanov M. K.)

Отдел математики и информатики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в редакцию

21.03.2022

Муртазаев А. К. (Murtazaev A. K.)

Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН

E-mail: akai2005@mail.ru

Магомедов М. А. (Magomedov M. A.)

Отдел математики и информатики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН

Курбанова Д. Р. (Kurbanova D. R.)

Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН

Рамазанов К. М. (Ramazanov K. M.)

Дагестанский государственный университет

Хизриев М. С. (Hizriev M. S.)

Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН