УДК 537.9

М. А. Магомедов, А. К. Муртазаев,
Л. К. Магомедова, М. М. Исаева

Исследование модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке алгоритмом Ванга-Ландау

Алгоритмом Ванга-Ландау метода Монте-Карло исследована модель Поттса с числом состояний $q = 3$ на треугольной решетке с учетом обменного взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей. Вычислена плотность состояний системы и рассчитаны температурные зависимости энтропии S . Показано, что в зависимости от соотношений обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями, основное состояние системы может быть сильно вырожденным. Показано, что фазовый переход из антиферромагнитной и коллинеарной фаз в парамагнитную является фазовым переходом первого рода, в то время как переход из фрустрированной области в парамагнитную является переходом второго рода. Определены температуры фазовых переходов и построена фазовая диаграмма системы.

Библиография: 19 названий.

The $q = 3$ Potts model on the triangular lattice with first and second nearest neighbors interaction investigated by the Wang-Landau algorithm of Monte Carlo method. The Density of States of the system and temperature dependence of entropy S are calculated. It is shown that, depending on the ratio of the interactions between the first and second nearest neighbors, the ground state can be both highly degenerate, indicating a frustration in the system, and weakly degenerate. The presence of phase transitions in the system of the first and second order. The phase transition from antiferromagnetic and collinear phases to paramagnetic phase are a phase transition of the first order, whereas the transition from frustrated phase to paramagnetic is a phase transition of the second order. The critical temperature of the phase transitions calculated and phase diagram of the system are determined.

Bibliography: 19 items.

Ключевые слова: Модель Поттса, плотность состояний, треугольная решетка, энтропия, фрустрация, фазовые переходы, метод Монте-Карло, алгоритм Ванга-Ландау

Keywords: Potts model, density of states, triangular lattice, entropy, frustration, phase transition, Monte Carlo method, Wang-Landau algorithm

Введение

В данной статье алгоритмом Ванга-Ландау энтропийного метода компьютерного моделирования исследована двумерная модель Поттса на треугольной

решетке с учетом обменного взаимодействия как между первыми ближайшими, так и следующими за ближайшими соседями. Исследование различных низкоразмерных, квази-одномерных или двумерных систем, в том числе наноструктур, является одной из важных и активно развивающихся направлений физики.

Низкоразмерные системы обладают рядом интересных свойств, перспективных в плане практического применения в различных электронных устройствах. Изучение различных свойств этих объектов открывает широкие перспективы для экспериментальных приложений. В ближайшие годы нанотехнологии позволят совершить поистине гигантский технологический скачок в самых различных областях науки и техники [1–3].

Одними из таких материалов являются делафосситы, названные в честь французского кристаллографа XIX века Ж. Делафосса (Delafosse) [4–11]. Огромный интерес к данным системам обусловлен перспективой их широкого применения в электронике в качестве элементов хранения информации. В настоящее время синтезировано более сотни различных соединений делафосситов. Одним из ярких представителей семейства делафосситов, является $CuFeO_2$, структура которого приведена на рисунке 1 слева.

Таким образом, $CuFeO_2$ имеет явно выраженную плоскостную структуру, взаимодействием между слоями в виду их весьма малой величины, можно пренебречь. Данная система хорошо описывается моделью Поттса с числом состояний $q = 3$. Модель Поттса представлена на рисунке 1 справа. Также на рисунке приведено схематическое и цветовое изображение трех возможных направлений ориентации спинов Fe в материале $CuFeO_2$. Также на рисунке приведено обменное взаимодействие между ближайшими соседями J_1 , а также между следующими за ближайшими соседями J_2 .

Рис. 1. Структура делафоссита $CuFeO_2$ и соответствующая ей модель Поттса с числом состояний $q = 3$ на треугольной решетке. (вставка: схематическое и цветовое изображение трех возможных направлений ориентации спинов).

1. Модель и метод исследований

Гамильтониан модели Поттса на треугольной решетке с числом состояний $q = 3$ может быть представлен в следующем виде [12–14]:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k} \quad (1.1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменного взаимодействия для ближайших и вторых ближайших соседей. $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$ соответственно.

Численные расчеты, проведенные в работах [12, 13], показали, что при учете только первых ближайших соседей с величиной $J_1 < 0$, эта модель демонстрирует поведение характерное для ФП первого рода. При учете первых и вторых ближайших соседей с величинами $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ соответственно в рассматриваемой модели возможны фрустрации [12]. Для выяснения наличия фрустраций в модели, исследования проводились на основе алгоритма Ванга-Ландау метода Монте-Карло (МК) [12–19]. Данный алгоритм является реализацией метода энтропического моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы.

Алгоритм Ванга-Ландау является разновидностью энтропийного моделирования и является весьма эффективным для исследования различных спиновых систем.

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. Так как плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$.

Важным обстоятельством является то, что плотность состояний $g(E)$ не зависит от температуры, следовательно, рассчитав ее однократно, мы можем вычислить значения любых термодинамических параметров системы при любой температуре.

В данной работе Алгоритм Ванга-Ландау был использован нами в следующем виде [13]:

- 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). В качестве критерия "плоскости" гистограммы нами

принималось условие отклонения числа посещений всех возможных (с ненулевой плотностью $g(E) \neq 1$) энергетических состояний не более чем на 10% от среднего значения по системе.

- 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 для энергии E_2 проводится модификация плотности состояния $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$, и гистограмма $H(E_2) \rightarrow H(E_2) + 1$ иначе меняем параметры для энергии E_1 $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$, $H(E_1) \rightarrow H(E_1) + 1$.
- Если гистограмма стала "плоской" то: обнуляем гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$, и продолжаем снова и снова, пока модификационный фактор $f \geq f_{\min}$. В качестве минимального значения модификационного фактора нами принималось $f_{\min} = 1.0000000001$.
- Каждый раз при достижении энергетического минимума нами проводился анализ магнитной структуры основного состояния и его запись в графический файл. При этом проводилось сравнение полученной конфигурации с ранее полученными и только при обнаружении новой уникальной конфигурации производится ее сохранение в графический файл. Далее данная структура заносится в специальную базу данных для данной модели для дальнейшего сравнения. Данная процедура позволяет избежать дублирования в графических файлах многократно встречающихся состояний с одинаковой магнитной структурой.
- После расчета плотности состояний системы для любой интересующей нас температуры рассчитываются различные термодинамические параметры, такие как, энтропия, внутренняя энергия, свободная энергия, теплоемкость, намагниченность, восприимчивость и т.д. Некоторые формулы для расчета термодинамических параметров приведены ниже.

Более подробно алгоритм Ванга-Ландау изложен в работах [12–19].

2. Результаты исследований

Рассчитанная таким образом плотность состояний для модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке при различных отношениях обменных взаимодействий J_1 и J_2 приведены на рисунке 2. Как видно из рисунка, основное состояние системы при некоторых соотношениях J_1 и J_2 сильно вырождено, что обусловлено наличием в данном случае фрустрации в системе.

Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ для модели Поттса с $q = 3$ на треугольной решетке при различных отношениях обменных взаимодействий J_1 и J_2 .

Рис. 3. Энергия основного состояния системы.

На рисунке 3 приведены значения энергии основного состояния системы при различных отношениях взаимодействий J_1 и J_2 . Как видно из рисунка, для данной системы имеется всего шесть различных вариантов упорядочения (3 для отрицательного J_1 и 3 для положительного J_1).

Магнитные структуры основного состояния, возникающие в модели Поттса $q = 3$ на треугольной решетке при различных отношениях обменных взаимодействий J_1 и J_2 приведены на рисунке 4. В основном состоянии минимизация энергии системы реализуется при упорядочении в одном из 8 конфигураций, приведенных на этом рисунке:

- Полосовая (страйповая) структура;
- Триплетная структура;
- Смешанная страйповая и триплетная структура;
- Неупорядоченная полностью фрустрированная структура;
- Неупорядоченная частично фрустрированная структура;
- Неупорядоченная частично фрустрированная структура;
- Ферромагнитная структура;
- Антиферромагнитная структура.

Рис. 4. Магнитные структуры основного состояния при различных J_1 и J_2 .

Структуры а), б) и с) обладают одинаковой энергией основного состояния $E_{\min} = 0J_1 + \frac{3}{2}J_2$ и реализуются при $J_2 < -1$. Структура d) с энергией $E_{\min} = \frac{3}{4}J_1 + \frac{3}{2}J_2$ реализуется в полностью фрустрированном регионе $[J_1 = -1, -1 \leq J_2 \leq -0.2]$ а также в точке $[J_1 = 1, J_2 = -1]$. Структура е) с энергией $E_{\min} = \frac{3}{4}J_1 + \frac{3}{2}J_2$ реализуется в частично фрустрированной области $[J_1 = 1, -1 < J_2 < -0.5]$. Структура f) с энергией $E_{\min} = \frac{3}{4}J_1 + \frac{3}{2}J_2$ возникает в частично фрустрированной точке $[J_1 = 1, J_2 = -0.5]$. Структура g) соответствует ферромагнитной фазе с энергией основного состояния $E_{\min} = -3J_1 + 3J_2$ и встречается в области $[J_1 = 1, J_2 > -0.5]$. Структура h) соответствует антиферромагнитной фазе с энергией $E_{\min} = \frac{3}{2}J_1 - 3J_2$ и возникает в области $[J_1 = 1, J_2 > -0.5]$.

Рассчитав плотность состояний $\ln g(E)$ алгоритмом Ванга-Ландау мы можем вычислить также и разность плотности состояний $\Delta \ln g(E)$ как:

$$\Delta \ln g(E)/\Delta E = [\ln g(E + \Delta E) - \ln g(E)]/\Delta E. \quad (2.1)$$

Разность плотности состояний $\Delta \ln g(E)/\Delta E$ позволяет определить температуру и тип фазового перехода. Нами разность плотности состояний рассчитана при $\Delta E = 10$, $\Delta E = 1$ и $\Delta E = 0.1$. Результаты приведены на рисунке 5.

Отметим, что при больших ΔE разность плотности состояний имеет более плавное поведение, с уменьшением ΔE она стремится к производной. Если в системе происходит фазовый переход первого рода, разность плотности состояний имеет S-образную форму. Температура фазового перехода $T_C = 1/\beta_C$, может быть определена по правилу Максвелла. Линия в β_C делит разность плотности состояний на две зоны с одинаковой площадью. Если в системе происходит фазовый переход второго рода, то в точке перехода разность плотности состояний имеет перегиб.

Рис. 5. Разность плотности состояний $\Delta \ln g(E)/\Delta E$ при различных J_1 и J_2 .

Также для определения типа фазового перехода нами применялся гистограммный метод анализа данных. Если в системе происходит фазовый переход первого рода, то на гистограмме мы наблюдаем два пика.

Гистограмма по энергии рассчитывалась как

$$W = g(E)e^{-E/k_B T} \quad (2.2)$$

На рисунке 6 приведены гистограммы энергий в области фазового перехода при $J_1 = -1$ и различных J_2 . Как видно из рисунка при $J_2 = -0.5$ в системе происходит фазовый переход второго рода, в остальных случаях фазовый переход первого рода.

Рис. 6. Гистограммы распределения энергий при $J_1 = -1$ и различных J_2 .

Зная плотность состояний системы можно рассчитать любой интересующий нас термодинамический параметр $A(T)$ для любой температуры. Например, внутренняя энергия U , свободная энергия F , и энтропия S системы могут быть рассчитаны следующим образом:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (2.3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (2.4)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}. \quad (2.5)$$

Рассчитанные из плотности состояний температурные зависимости энтропии при различных отношениях обменных взаимодействий J_1 и J_2 приведены на рисунке 7. Отметим важную особенность алгоритма Ванга-Ландау: значения любых термодинамических параметров можно определить для любой температуры, с любым шагом, при этом объем необходимых вычислений, в отличие от других классических алгоритмов метода Монте-Карло, вырастает незначительно.

Рис. 7. Температурные зависимости энтропии S , рассчитанные из плотности состояний $g(E)$ при различных J_1 и J_2 .

Анализ приведенных выше результатов позволило построить фазовую диаграмму. Фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями приведена на рисунке 8.

Рис. 8. Фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями.

3. Заключение и выводы

Таким образом, по проделанной работе можно сделать следующие выводы:

- Вычислены плотности состояний $g(E)$ для модели Поттса с числом состояний $q = 3$ на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями;
- Определены спиновые конфигурации в основном состоянии при различных соотношениях обменных взаимодействий;
- Установлено, что в модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими в системе имеются три области $0 \leq J_1/J_2 < 0.190$, $0.190 \leq J_1/J_2 < 1.300$, и $J_1/J_2 \geq 1.300$;
- Рассчитаны температурные зависимости энтропии S ;

- Построена фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Список литературы

- [1] Körner M., Troyer M. In Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVI, edited by D. Landau, S. Lewis and H.-B. Schütler (Springer Berlin Heidelberg, 2006), Vol. 103. P. 142.
- [2] Landau D.P., Binder K. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [3] Nakano A., Bachlechner M.E., Kalia R.K. et al. Multiscale Simulation of Nanosystems // Computing in Science and Engg. 2001. Vol. 3(4). Pp. 56–66.
- [4] Муртазаев А.К., Камилов И.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей. // ЖЭТФ. 2001. Т.120, №6. С. 1535–1543.
- [5] Shannon R.D. Revised effective ionic radii systematic if interatomic distances in halides and chalcogenides. // Acta Cryst. 1976. Vol. A32. No. 5. Pp. 751–767.
- [6] Li J., Sleight A.W. Structure of β -AgAlO₂ and structural systematics of tetrahedral MM'X₂ compounds. // J. Solid State Chem. 2004. Vol. 177, №3. Pp. 889–894.
- [7] Prewitt C.T., Shannon R.D., Rogers D.B. Chemistry of noble metal oxides. II. Crystal structures of PtCoO₂, PdCoO₂, CuFeO₂ and AgFeO₂. // Inorg. Chem. 1971. Vol. 10, №4. Pp. 719–723.
- [8] Hirakawa K., Kadowaki H., Ubukoch K. Experimental studies of triangular lattice antiferromagnets with $S = 1/2$: NaTiO₂ and LiNiO₂. // J. Phys. Soc. Japan. 1985. Vol. 54, №9. Pp. 3526–3536.
- [9] Wang X., Loa I., Kunc L. et al. Effect of pressure on the structural properties and Raman modes of LiCoO₂. // Phys. Rev B. 2005. Vol. 72. №22. 224102 (1–8).
- [10] Li J., Sleight A.W. Structure of β -AgAlO₂ and structural systematics of tetrahedral MM'X₂ compounds. // J. Solid State Chem. 2004. Vol. 177, №3. Pp. 889–894.
- [11] Townsend M.G., Longworth G., Roudaut E. Triangular-spin, kagome plane in jarosites // Physical Review B. 1986. Vol. 33. Pp. 4919–4926.
- [12] Murtazaev A.K., Babaev A.B., Magomedov M.A., and t.c. Three-state Potts model on triangular lattice with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor antiferromagnetic interactions // Solid State Communications. 2016. Vol. 246. Pp. 41–46.
- [13] Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Муртазаев А.К., и др. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // ЖЭТФ. 2016. Т. 149, вып. 2. С. 357–366.
- [14] Chiaki Y., Yutaka O. Three-dimensional antiferromagnetic q -state Potts models: application of the Wang-Landau algorithm // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2001. Vol. 34. 8781.
- [15] Landau D.P., Tsai S.-H., Exler M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // Am. J. Phys. 2004. Vol. 72. P. 1294.
- [16] Landau D.P., Wang F., Tsai S.-H. Critical endpoint behavior: A Wang-Landau study // Comp. Phys. Comm. 2008. Vol. 179. P. 8.
- [17] Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A. Thermodynamic, critical properties and phase transitions of the Ising model on a square lattice with competing interactions // Solid State Communications. 2016. Vol. 233. P.35–40.
- [18] Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Магомедова Л.К. Плотность состояния и энтропия модели Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей // Вестник ДГУ. 2016. Т.31, вып.1. С. 43–50.

- [19] Zhou C.Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm // Physical Review E. 2005. Vol. 72(2): p. 025701.

М. А. Магомедов (M. A. Magomedov)

Дагестанский научный центр РАН,

Институт физики ДНЦ РАН

E-mail: magomedov.ma@mail.ru

Поступила в редакцию

30.05.2018

А. К. Муртазаев (A. K. Murtazaev)

Дагестанский научный центр РАН,

Институт физики ДНЦ РАН

E-mail: akai2005@mail.ru

Л. К. Магомедова (L. K. Magomedova)

Институт физики ДНЦ РАН,

Дагестанский государственный университет

E-mail: liya1976@mail.ru

М. М. Исаева (M. M. Isaeva)

Институт физики ДНЦ РАН

E-mail: madina.isaeva.92@mail.ru