

Фрустрации и фазовые переходы в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей

А. К. Муртазаев^{+*1)}, А. Б. Бабаев^{+×}, М. А. Магомедов^{+*}, Ф. А. Кассан-Оглы[°], А. И. Прошкин[°]

⁺Институт физики им. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

^{*}Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия

[×]Дагестанский государственный педагогический университет, 367003 Махачкала, Россия

[°]Институт физики металлов УрО РАН, 620990 Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 9 июля 2014 г.

Методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы в двумерных структурах, описываемых трехвершинной моделью Поттса с взаимодействиями между магнитными моментами, расположенными в узлах треугольной решетки, которые являются ближайшими и вторыми ближайшими соседями. Исследования проведены для отношения обменных взаимодействий вторых и ближайших соседей в диапазоне значений $r = J_2/J_1 = 0 \div 1.0$. На основе анализа низкотемпературных значений энтропии, функции плотности состояний системы и кумулянтов Биндера четвертого порядка показано, что для этой модели в интервале изменений величины $0 \leq r < 0.2$ наблюдается фазовый переход первого рода, в то время как для случая $r \geq 0.2$ в системе возникают фрустрации.

DOI: 10.7868/S0370274X1416005X

1. Введение. Изучение фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в спиновых системах с конкурирующими обменными взаимодействиями является одним из центральных в физике конденсированного состояния [1]. Это обусловлено тем, что конкуренция обменных взаимодействий может привести к фрустрациям, т.е. такому пространственному расположению магнитных моментов атомов в кристалле, при котором невозможно одновременное антиферромагнитное упорядочение всех взаимодействующих спинов. Фрустрации являются релевантной частью беспорядка, которая существенно изменяет поведение системы по сравнению с соответствующей упорядоченной системой. Влияние фрустраций, возникающих при конкурирующих взаимодействиях, а также вследствие внешнего магнитного поля, на фазовые переходы и особенности термодинамических и магнитных свойств низкоразмерных систем исследовано в работах [2–5].

В работе [3] на основе точных решений для двумерной модели Изинга на квадратной решетке [6], на треугольной и гексагональной решетках [7] и на решетке-кагоме [8] исследованы явления возникновения и исчезновения фрустраций в зависимости

от знаков и величины отношения взаимодействий J_2/J_1 . Фазовые переходы для двумерной антиферромагнитной модели Изинга с учетом вторых ближайших соседей на квадратной решетке изучены в работе [2]. В ней показано, что для всех значений взаимодействий из интервала $0.1 \leq r < 1$ наблюдается ФП второго рода, кроме точки $r = 0.5$, в которой, как утверждают авторы, имеют место фрустрации. Вместе с тем в указанных работах не был проведен температурный анализ энтропии для различных соотношений r . В отличие от [2, 3] в данной работе определены значения энтропии S как при низких, так и при высоких температурах, по которым легко установить наличие фрустраций в исследуемой системе.

В отличие от модели Изинга для 2D трехвершинной модели Поттса не получено ни одного точного решения. В результате для исследования термодинамических и магнитных свойств, а также фазовых переходов в 2D трехвершинной модели Поттса используются самые разнообразные приближенные и численные методы: кластерный метод [9], низкотемпературные разложения [10], исследование нулей статсуммы [11], разные ренорм-групповые подходы [12, 13], многочисленные варианты моделирования Монте-Карло [14–17], в которых изучаются такие важные проблемы, как класс универсальности, род

¹⁾e-mail: b_albert78@mail.ru

перехода, расчет критических индексов, определение фазовых диаграмм, нахождение мультикритических точек и даже уточнение точек фазовых переходов до шестого знака [17].

Исследованию спиновых систем, описываемых ферромагнитными (ФМ) и антиферромагнитными (АФ) моделями Поттса на треугольной решетке с взаимодействием между ближайшими соседями, было посвящено значительное число работ. В них получены ответы на многие вопросы. Учет взаимодействия вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что существенно усложняет решение этой модели. При изучении спиновых систем, в которых могут возникать фрустрации, основными являются следующие вопросы. Какие условия необходимы для существования фрустраций? В каких решетках они могут существовать? Каковы самые общие качественные и количественные критерии? Кроме того, следует иметь в виду, что при исследовании спиновых систем, в которых возможны фрустрации, очень важно, что в системе может существовать огромное количество состояний с низкой энергией, близкой к энергии основного состояния. Эти состояния благодаря своей большой энтропии S способны вносить конечный вклад в термодинамику даже в пределе низких температур [1]. Отметим, что в результате многочисленных исследований антиферромагнитных моделей Поттса на разнообразных решетках обнаружилась замечательная особенность. Треугольная решетка оказалась единственной, где наблюдается фазовый переход при антиферромагнитном взаимодействии между ближайшими соседями.

Что же касается двумерной трехвершинной модели Поттса с учетом антиферромагнитного взаимодействия между вторыми ближайшими соседями на треугольной решетке, то к настоящему моменту исследования тепловых, магнитных и особенно критических свойств этой модели еще не проведены. Не определены точки фрустрации и не рассчитаны величины энтропии и плотности состояний системы при низких температурах.

Определение значений отношения обменных взаимодействий вторых и первых ближайших соседей $r = J_2/J_1$, при которых в магнитной структуре, описываемой двумерной трехвершинной моделью Поттса на треугольной решетке, возникнут фрустрации, расчет энтропии, а также температуры фазового перехода в зависимости от этого отношения являются главной задачей данной работы.

Огромный интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического

описания широкого круга разнообразных объектов и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. Структурные фазовые переходы в некоторых материалах, таких, как SrTiO_3 , могут описываться моделью Поттса с числом состояний спина $q = 3$ [18].

2. Модель и метод исследования. Антиферромагнитная трехвершинная ($q = 3$) модель Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей (см. рис. 1) описывается

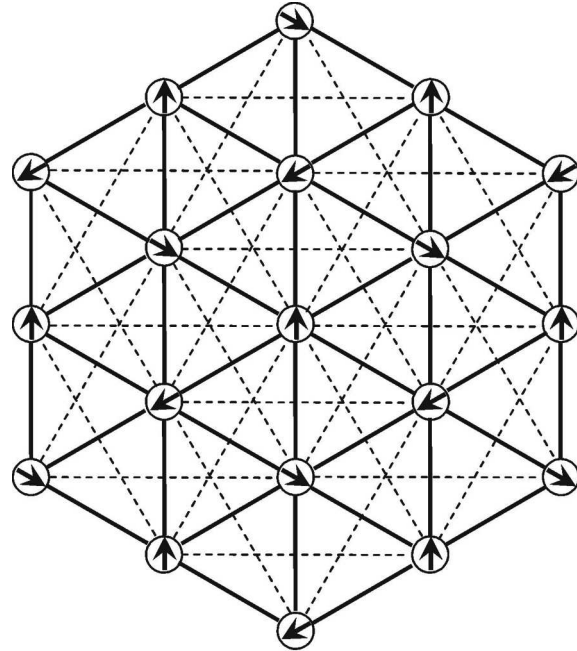


Рис. 1. Двумерная трехвершинная АФ-модель Поттса с учетом вторых ближайших соседей (при $r < 0.2$) на треугольной решетке

следующим микроскопическим гамильтонианом [18]:

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

где первый член учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей с величиной $J_1 < 0$, а второй – вторых ближайших соседей с величиной $J_2 < 0$, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$ соответственно.

Численные расчеты, проведенные в работах [19–21], показали, что при учете только первых ближайших соседей эта модель демонстрирует поведение, характерное для ФП первого рода, в соответствии с предсказаниями теоретических работ [18]. При учете вторых ближайших соседей в рассматриваемой модели возможны фрустрации.

Исследования проводились на основе алгоритма Ванг–Ландау метода Монте-Карло (МК) [22]. Данный алгоритм является реализацией метода энтропического 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, чтобы посещение всех энергетических состояний стало равномерным, можно получить изначально неизвестную плотность состояний $g(E)$. Зная же ее, можно вычислить значения необходимых термодинамических параметров при любой температуре.

3. Результаты. Для анализа характера ФП и особенностей поведения термодинамических параметров вблизи критической точки в сложных спиновых системах наиболее эффективным зарекомендовал себя алгоритм Ванга–Ландау метода МК [22]. Этот метод позволяет достаточно легко получить функцию распределения плотности состояний системы:

$$P(E, T) = g(E) \exp(-E/k_B T), \quad (2)$$

где $g(E)$ – плотность состояний системы, E – энергия системы, k_B – постоянная Больцмана. Преимущество метода Ванга–Ландау заключается в том, что плотность состояний системы $g(E)$ не зависит от температуры. Таким образом, определив плотность состояний системы, мы можем рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию всей системы можно найти как

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

На рис. 2 представлены плотности состояний системы $g(E)$ для 2D трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса в диапазоне значений $0 \leq r \leq 1$. Здесь и далее на рисунках погрешность данных не превосходит размеров символов, используемых для построения графиков. Как видно из рисунка, для значений $r = 0, 0.1, 0.167$ плотность состояний $g(E)$ для основного состояния (состояния с минимумом энергии) стремится к небольшим значениям. Это свидетельствует об отсутствии сильного вырождения основного состояния, приводящего к фрустрации [1]. В то же время для значений $r \geq 0.2$ наблюдается противоположная картина. В этом случае $g(E)$ стремится к большим значениям, что говорит о

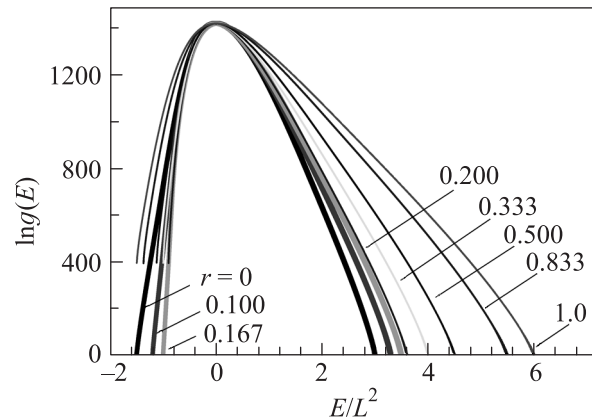


Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ 2D трехвершинной АФ-модели Поттса на треугольной решетке в диапазоне значений $0 \leq r \leq 1$

сильном вырождении основного состояния. Независимо от плотностей состояний системы для проверки существования фрустрации для различных величин r нами анализировались и температурные зависимости энтропии системы.

Энтропия S , приходящаяся на один узел решетки, рассчитывалась в соответствии с определением [23]:

$$S = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T} (k_B T \ln Z), \quad (4)$$

где N – число частиц в системе, Z – статистическая сумма.

Известно, что в системах с фрустрацией энтропия S при низких температурах должна стремиться к отличному от нуля значению, а при высоких – к величине $\ln q$, поскольку при $T \rightarrow \infty$ статистическая сумма равна q^N . Указанные особенности для двумерной АФ трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке продемонстрированы на рис. 3. Заметим, что для систем с $r \geq 0.2$ при $T \rightarrow 0$ энтропия S стремится к отличному от нуля значению. Зависимость энтропии S основного состояния от линейных размеров системы L при $r = 0.333$ приведена на рис. 4. Как видно из рисунка, при $L \rightarrow \infty$ энтропия $S \rightarrow 0.302(2)$. В работе [24] конечная величина энтропии наблюдалась и для трехмерной АФ-модели Поттса с числом состояний спина $q = 3, 4, 5$.

Для анализа характера ФП и особенностей поведения термодинамических характеристик вблизи критической точки в такого рода исследованиях наиболее эффективным методом зарекомендовал себя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [25]:

$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2}, \quad (5)$$

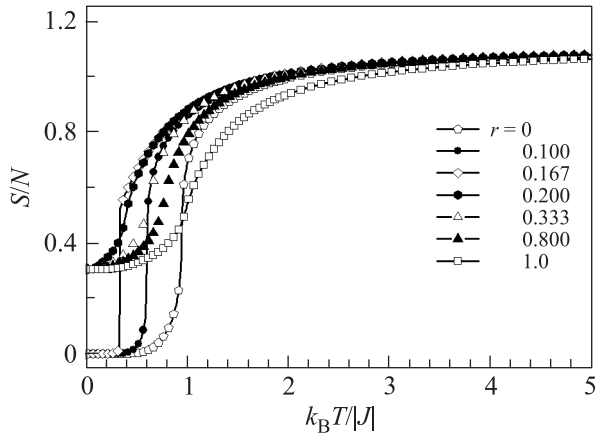


Рис. 3. Температурная зависимость энтропии S для двумерной АФ-модели Поттса с $q = 3$ в интервале изменений величины $0 \leq r \leq 1$

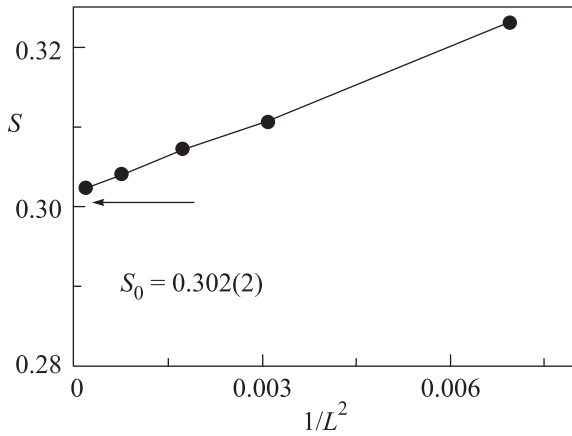


Рис. 4. Зависимость энтропии S основного состояния для двумерной трехвершинной АФ-модели Поттса при $r = 0.333$ от линейных размеров системы L

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (6)$$

где E – энергия, а m – параметр порядка системы с линейными размерами L .

Методика определения критической температуры описана нами в работах [26, 27]. Применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо определить род ФП в системе. Фазовые переходы первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [28]. Усредненная величина $V_L(T)$ стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T) = V^* + bL^{-d} \quad (7)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_c(L)$, где V^* отлично от $2/3$, а минимальная величина $U_{L,\min}(T = T_{\min})$ расходится как $U_{L,\min}(T = T_{\min}) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$. На

рис. 5 это продемонстрировано для АФ-модели Поттса с $q = 3$ при $r = 0.1$. Аналогичное поведение на-

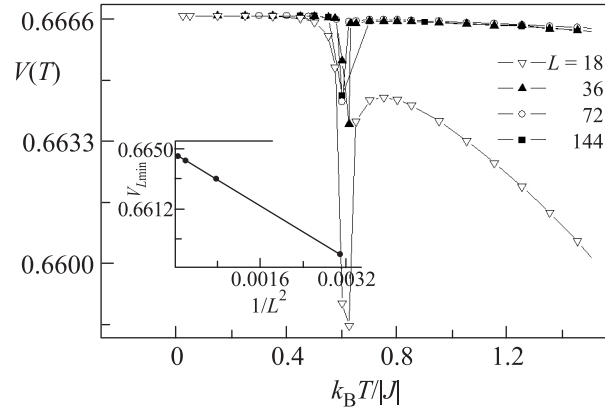


Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V(T)$ двумерной трехвершинной АФ-модели Поттса при $r = 0.1$

блюдалось и для величины взаимодействия вторых ближайших соседей $r = 0.167$.

Независимо от кумулянтов Биндера для анализа рода ФП нами использовался и гистограммный анализ данных метода МК [22]. Этот метод позволяет надежно установить не только род ФП, но и минимальные размеры систем, в которых возможно правильно его определить. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [29]. Гистограммный анализ данных, проведенный для 2D трехвершинной АФ-модели Поттса в интервале изменения величины $0 \leq r < 0.2$, также свидетельствует о ФП первого рода. Для системы с $r = 0.1$ это продемонстрировано на рис. 6. На нем представлена

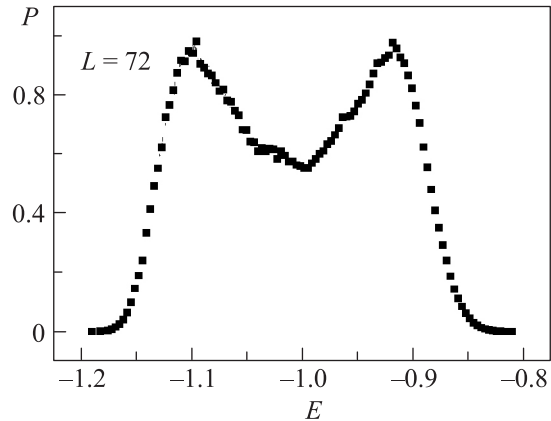


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для двумерной АФ-модели Поттса с $q = 3$ при $r = 0.1$ и $T_c = 0.625$

гистограмма распределения энергии вблизи критической точки T_c для систем с линейными размерами

ми $L = 72$. Видно, что для этой модели в критической точке T_c наблюдается бимодальное распределение энергии, что характерно для ФП первого рода. Бимодальность распределения энергии наблюдалась и для системы с $r = 0.167$.

Выяснение рода фазового перехода в интервале изменения величины $0.2 \leq r \leq 1.0$, где конкуренция обменных параметров первых и ближайших соседей приводит к вырождению основного состояния системы, а также для $r > 1.0$ станет целью отдельной работы.

4. Заключение. Итак, наши данные, полученные для 2D трехвершинной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло в широком интервале изменения отношений обменных взаимодействий вторых и первых ближайших соседей, $0 \leq r \leq 1$, свидетельствуют о том, что:

1) конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей в интервале изменений величины $0 \leq r < 0.2$ не приводит к вырождению основного состояния системы. В рассматриваемом интервале изменений r в системе возникают ФП первого рода (рис. 7).

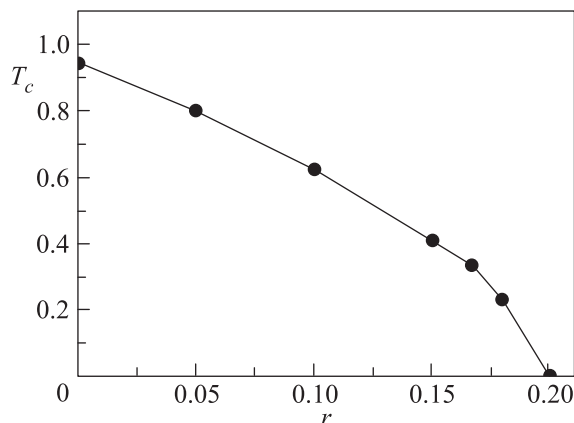


Рис. 7. Температура фазового перехода как функция отношения $r = J_2/J_1$

2) конкуренция обменных параметров первых и вторых ближайших соседей в интервале изменений величины $0.2 \leq r \leq 1.0$ приводит к вырождению основного состояния системы. В этом интервале изменений r в системе возникают фрустрации.

Работа поддержана грантами РФФИ #13-02-00220 и 12-02-96504, а также проектом УрО РАН #12-И-2-2020.

1. В. С. Доценко, УФН **163**, 1 (1993).

2. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and F. A. Kassan-Ogly, J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012026 (2014).
3. F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, V. V. Men'shenin, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Sol. State Phenom. **168–169**, 435 (2011).
4. F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Mag. Mater. **324**, 3418 (2012).
5. Ф. А. Кассан-Оглы, Б. Н. Филиппов, Изв. РАН. Сер. физическая **74**, 1513 (2010).
6. L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
7. R. M. F. Houtappel, Physica **16**, 425 (1950).
8. K. Kanô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
9. J. Adler, A. Brandt, W. Janke, and S. Shmulyian, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 5117 (1995).
10. I. G. Enting and F. Y. Wu, J. Stat. Phys. **28**, 351 (1982).
11. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S. Tsai, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 2287 (1998).
12. M. Schick and R. B. Griffiths, J. Phys. A: Math. Gen. **10**, 2123 (1977).
13. G. S. Grest, J. Phys. A **14**, L217 (1981).
14. Y. Saito, J. Phys. A **15**, 1885 (1982).
15. H. Pack, Phys. Rev. B **49**, 12881 (1994).
16. R. Shrock and S.-H. Tsai, J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 495 (1997).
17. M.-X. Wang, J.-W. Cai, Z.-Y. Xie, Q.-N. Chen, H.-H. Zhao, and Z.-C. Wei, Chin. Phys. Lett. **27**, 076402 (2010).
18. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
19. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **142**, 1189 (2012).
20. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Изв. РАН. Сер. физическая **78**, 110 (2014).
21. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Изв. РАН. Сер. физическая **77**, 1476 (2013).
22. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
23. Р. Бэкстер, Точно решаемые модели в статистической механике, Мир, М. (1985).
24. Ch. Yamaguchi and Y. Okabe, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 8781 (2001).
25. K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
26. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, Письма в ЖЭТФ **99**, 618 (2014).
27. A. K. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **120**, 1535 (2001).
28. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
29. A. K. Муртазаев, А. Б. Бабаев, ЖЭТФ **143**, 116 (2013).