

К численному расчету фрустраций в модели Изинга

А. Г. Макаров^{+*1)}, К. В. Макарова⁺, Ю. А. Шевченко⁺, П. Д. Андрищенко⁺, В. Ю. Капитан⁺,
К. С. Солдатов⁺, А. В. Пержу⁺, А. Е. Рыбин⁺, Д. Ю. Капитан⁺, Е. В. Васильев⁺, Р. А. Волоотовский⁺,
Ю. В. Чубов⁺, К. В. Нефедев⁺

⁺Школа естественных наук, Дальневосточный федеральный университет, 690091 Владивосток, Россия

^{*}Институт прикладной математики, Дальневосточное отделение РАН, 690041 Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 22 сентября 2019 г.

После переработки 16 октября 2019 г.

Принята к публикации 16 октября 2019 г.

Количественная мера магнитных фрустраций определяется как термодинамически усредненное относительное число возбужденных парных взаимодействий в гамильтониане системы. Нами был модернизирован алгоритм Метрополиса до гибридного мультиспинового Монте-Карло метода, использующего квазимарковскую цепь случайных событий. Объединение канонического и мультиканонического семплирования распределения Гиббса в одной вычислительной схеме позволило определить температурные зависимости приращения числа возбуждений и приращения энтропии гексагональной решетки искусственного спинового льда, вычислить конфигурацию основного состояния. С помощью разработанного метода численно получено температурное поведение параметра фрустраций геометрически-фрустрированной гексагональной решетки точечных диполей. Предложенная нами методика расчета количественной меры фрустраций может использоваться для обработки экспериментальных данных.

DOI: 10.1134/S0370274X19220120

В работе [1] введена простая эмпирическая мера фрустрации, которая впоследствии стала широко применяться [2–6]. Необходимо отметить два существенных момента, которые нужно учитывать при определении температуры Кюри–Вейса θ_{CW} . Первый состоит в том, что экспериментатор может работать только в ограниченном интервале конечных температур, тогда как для существования наклонной линейной асимптоты $y = aT + b$ функции $1/\chi(T)$ необходимо одновременное существование двух конечных пределов $\lim_{T \rightarrow +\infty} (\chi(T)T)^{-1} = a$ и $\lim_{T \rightarrow +\infty} (\chi^{-1}(T) - aT) = b$. Если хотя бы один из пределов бесконечен, то наклонная асимптота отсутствует. Второй момент состоит в том, что экспериментатор для определения значения восприимчивости всегда пользуется, пусть и очень малым, но отличным от нуля конечным значением модуля вектора напряженности магнитного поля. Магнитное поле бесконечно малой величины может не иметь никакого влияния на фрустрированные пары, суммарный магнитный момент которых равен нулю.

Для некоторых простейших случаев были получены точные решения модели антиферромагнетика Изинга на треугольной [7, 8], кагоме [9] решетках

и показано, что считающиеся основными признаками фрустраций магнитный порядок и макроскопическое вырождение нижней энергии отсутствовали. Ванье показал [7], что антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке имеет очень большое вырождение основных состояний. Иногда такое вырождение рассматривают как ключ, или даже определение, характеристики фрустраций [10].

Фрустрации порой определяются как конкуренция между взаимодействиями, которая приводит к невозможности удовлетворения всех взаимодействий [11, 10]. Впервые термин “фрустрация” был применен к магнетикам Джерардом Тулузом в 1977 г. в работах [12, 13]. Энергия взаимодействия пары магнитных моментов в общем случае зависит от расстояния между ними. Суммарная энергия всех парных взаимодействий в системе характеризует микросостояние или конфигурацию системы. Для $\hat{H}(2, 2)$ векторных моделей, см. классификацию в работе [14], значение энергии каждой пары взаимодействующих моментов фиксировано, может измениться лишь знак в зависимости от их взаимной ориентации. В модели Изинга пара магнитных моментов является фрустрированной, имеет неудовлетворенную связь, если энергия их взаимодействия имеет положительный знак, таким образом, фрустрация в этой векторной модели есть элементарное возбуждение.

¹⁾e-mail: makarov.ag@dvvfu.ru

Особыми микросостояниями или конфигурациями являются основные состояния. Они соответствуют значению энергии E_{gs} относительного минимума (минимум по отношению ко всем существующим разрешенным значениям энергии). В конфигурации основного состояния число возбуждений или фрустраций является минимальным. Значение суммарной энергии взаимодействия E_{\min} системы магнитных моментов будет абсолютным минимумом, если все вклады будут отрицательными. Абсолютный минимум энергии для фрустрированных систем лежит в запрещенной зоне, т.е. не существует конфигурации моментов с таким значением энергии взаимодействия, а основное состояние в этом случае является возбужденным. Для вычисления количественной меры фрустраций необходимо знать значения энергии абсолютного минимума и основного состояния.

Решение задачи поиска основных состояний и исследование термодинамических свойств даже в самой простой модели – в модели Изинга связано с серьезными трудностями теоретического анализа и численных расчетов. Эта задача может оказаться значительно более сложной, чем кажется на первый взгляд [15]. Нахождение алгоритма поиска основного состояния является определяющей проблемой в теории фрустрированного магнетизма. Основное состояние антиферромагнитных моделей с взаимодействием ближайших соседей на решетках специфических геометрий бросает вызов всем теоретическим и численным методам, используемым до настоящего времени.

Существующие сегодня МК- (Монте-Карло) методы [16–20] имеют свои тонкие места. Односпиновые методы семплирования подвержены критическому замедлению, а использование мультиканонических методов испытывает трудности при расчете термодинамики систем относительно большого размера. Использование односпиновых МК-методов (например, алгоритм Метрополиса) для расчета основного состояния систем с грубым ландшафтом энергии сопряжено с трудноразрешимыми проблемами. Для преодоления больших энергетических барьеров, разделяющих квазизрожденные конфигурации фрустрированного магнетика Изинга, которые мешают найти свои энергетически предпочтительные состояния с низкой энергией, необходимо использовать квазимарковские процессы в термодинамике мультиспиновых кластеров.

Для решения задачи о термодинамике фрустрированных векторных моделей сложных систем многих взаимодействующих тел, поиска конфигураций основного состояния мы предлагаем новый гибридный

мультиспиновый метод, который является логическим продолжением алгоритма Метрополиса. Рассмотрим случай ферромагнитной $J > 0$ системы, состоящей из N спинов Изинга $S_i = \pm 1$, расположенных на квадратной решетке, и гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (1)$$

где суммирование $\langle i,j \rangle$ проводится по уникальным парам ближайших четырех соседей $z = 4$.

Вероятность принятия или отмены новой конфигурации на шаге t в односпиновом алгоритме Метрополиса–Гастингса [16] определяется как

$$p(E_{\{t\}} \rightarrow E_{\{t+1\}}) = \min \left(1, \frac{p(E_{\{t\}})}{p(E_{\{t+1\}})} \right) = \min \left(1, \exp \left[\frac{E_{\{t\}} - E_{\{t+1\}}}{k_B T} \right] \right). \quad (2)$$

Необходимо отметить, что формула (2) верна для любых двух конфигураций, отличающихся одним перевернутым спином. Если мы зафиксируем значения граничных спинов, и для заданной температуры проведем Монте-Карло семплирование пространства состояний только внутри ядра, то можно убедиться в том, что каноническое распределение Гиббса и вычисленное с помощью формулы (2) идентичны при бесконечном числе МК-шагов для любой температуры.

Выделим область (ядро) размером $n = 2 \times 2$ относительно большой решетки с периодическими граничными условиями, красные стрелочки на рис. 1. Взаимодействие *kernel*-спинов (или *k*-спинов) с системой происходит через граничные *border*-спины (или *b*-спины), синие стрелочки на рис. 1. В границу включены $b = 8$ спинов, с которыми могут напрямую взаимодействовать спины ядра. Для каждой из 2^b конфигураций граничных спинов рассчитываются все возможные конфигурации ядра (2^n). Для указанной на рис. 1 подсистемы внутреннюю энергию конфигурации в отсутствии внешнего магнитного поля можно записать в явном виде как

$$E_{\text{tot}} = E^0 + E^*, \quad (3)$$

$$E^* = -J \begin{bmatrix} (S_4 S_5 + S_4 S_8 + S_5 S_9 + S_8 S_9) + \\ (S_1 S_4 + S_2 S_5 + S_3 S_4 + S_7 S_8 + \\ S_6 S_5 + S_{10} S_9 + S_{11} S_8 + S_{12} S_9) \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где в E^* включены только те парные взаимодействия, в которых есть хотя бы один *k*-спин. Остальные пары выделены в константную часть E^0 и пока не рассматриваются. Первые 4 парных произведения

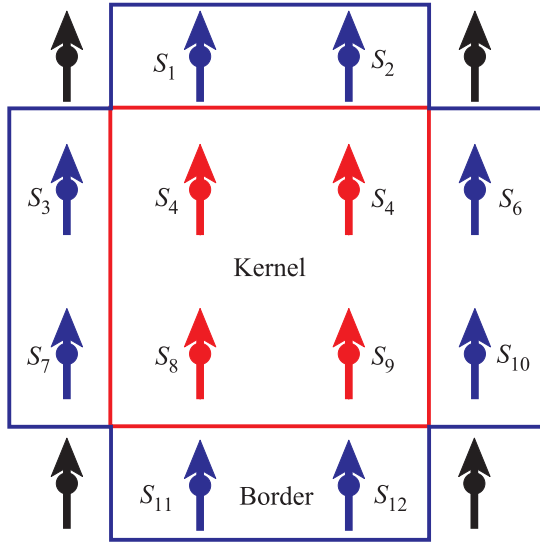


Рис. 1. (Цветной онлайн) Блок для прохода по системе двумерной модели Изинга. Красным выделены спины, входящие в ядро (k -спины), синим – спины, граничащие с ядром (b -спины)

в E^* представляют парные энергии взаимодействия внутри выделенной области, и оставшиеся 8 – взаимодействие подсистемы с границей.

Вероятность появления энергии E_i^* в ядре задана распределением Гиббса и определяется как:

$$p(E_i^*) = \frac{1}{Z_k} \exp \left[-\frac{E_i^*}{k_B T} \right], \quad (5)$$

где

$$Z_k = \sum_{j=1}^{2^n} \exp \left[-\frac{E_j^*}{k_B T} \right] \quad (6)$$

представляет статистическую сумму ядра.

Подставив уравнения (3) и (6) в (5), получим:

$$p(E_i) = \exp \left[-\frac{E_i^*}{k_B T} \right] / \sum_{j=1}^{2^n} \exp \left[-\frac{E_j^*}{k_B T} \right]. \quad (7)$$

Из уравнения (7) видно, что вероятность появления энергии в ядре зависит только от парных взаимодействий, в которых участвуют спины ядра E^* и не зависит от остальных E^0 . При известном распределении $p(E_i)$ мы можем определить конфигурацию, к которой перейдет подсистема при заданной температуре и определенном состоянии граничных спинов. Мы однократно вычисляем локальные статистические суммы для каждой границы и используем их в ходе МК-семплирования. Так как E^* зависит и от $border$ -спинов, мы должны вычислить распределение $p(E_i)$ для каждой из 2^b граничных конфигураций. В

общем получаем 2^{n+b} всевозможных конфигураций ядра и граничных спинов.

Перед началом численного расчета для каждой конфигурации граничных спинов вычисляется и сохраняется локальная плотность состояний ядра фиксированного размера. Для каждого t цикла алгоритма Метрополиса:

1. Выбирается случайная область системы – ядро.
2. Извлекается информация о плотности состояний для заданной конфигурации граничных спинов с ядром, выбранным на шаге 1. Вычисляется Z_k и $p(E_i^*)$ для всех i .
3. Вычисляются средние термодинамические характеристики для текущего МК-шага, определяя их по формуле полной вероятности. Например, средняя энергия системы:

$$\langle E \rangle_t = E^0 + \sum_i^{2^n} p(E_i^*) E_i^*. \quad (8)$$

4. Итоговая конфигурация ядра выбирается с вероятностью $p(E_i^*)$.

По завершении q циклов термодинамически усредненная величина определяется как математическое ожидание:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{q} \sum_t^q E_t. \quad (9)$$

Температурные зависимости теплоемкости $C(T)$ в отсутствие внешнего магнитного поля и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ при $H \rightarrow 0$, см. рис. 2, рассчитывались на один спин Изинга

$$C(T) = \frac{1}{N} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}, \quad (10)$$

$$\chi(T)|_{H \rightarrow 0} = \frac{1}{N} \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T} \quad (11)$$

простой квадратной решеткой размером $N = 10^4$ спинов Изинга с периодическими граничными условиями. Размер ядра был 3×3 . Для сравнения результатов данные были получены с помощью аналитического решения Фердинанда [21], алгоритма параллельного отжига и алгоритма Ванга–Ландау. Кривые сливаются в одну линию, ошибка меньше толщины линии.

Мы применили наш метод для решения актуальной задачи термодинамики геометрически-фрустрированного искусственного спинового льда

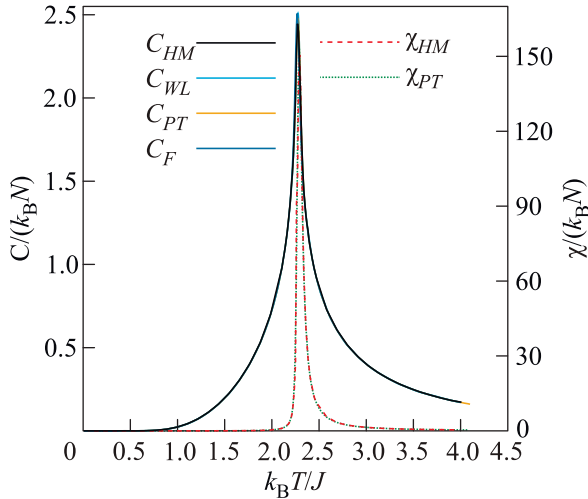


Рис. 2. (Цветной онлайн) Теплоемкость простой квадратной решетки 10^4 спинов Изинга: гибридный – C_{HM} , энтропийный – C_{WL} , реплично-обменный – C_{PT} и аналитический – C_F методы. Магнитная восприимчивость: гибридный χ_{HM} и реплично-обменный χ_{PT} методы

(ИСЛ) в модели диполей. Рассчитывалась гексагональная решетка с периодическими граничными условиями, в которой Изинг-подобные точечные диполи расположены на ребрах гексагона, магнитный вектор i -диполя задается как $\mathbf{m}_i = S_i \mathbf{m}_i^*$, таким образом момент имеет только две ориентации $\pm \mathbf{m}_i$.

Энергия диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами рассчитывалась по следующей формуле

$$E = Da^3 \sum_{i < j} \left[\frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j)}{r^{3/2}} - 3 \frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r^{5/2}} \right], \quad (12)$$

где $D = \mu^2/a^3$ есть константа дипольного взаимодействия, a – постоянная решетки и \mathbf{r}_{ij} – радиус-вектор, соединяющий спины i и j . Радиус диполь-дипольного взаимодействия на решетке гексагонального спинового льда ограничен координационной сферой R_3 (14 ближайших соседей) ввиду несущественного влияния более дальних взаимодействий на термодинамическое поведение системы [22]. Ядро представлено на рис. 3 и включает в себя 6 диполей, в то время как граничных спинов 24.

Разработанный метод численного расчета позволяет решить фундаментальную задачу поиска конфигураций основного состояния для гексагональной решетки магнитных моментов. На рисунке 4 схематично изображена конфигурация основного состояния на примере небольшой части исследуемой решетки. Всего учитывалось $N = 11250$ диполей с периодическими граничными условиями.

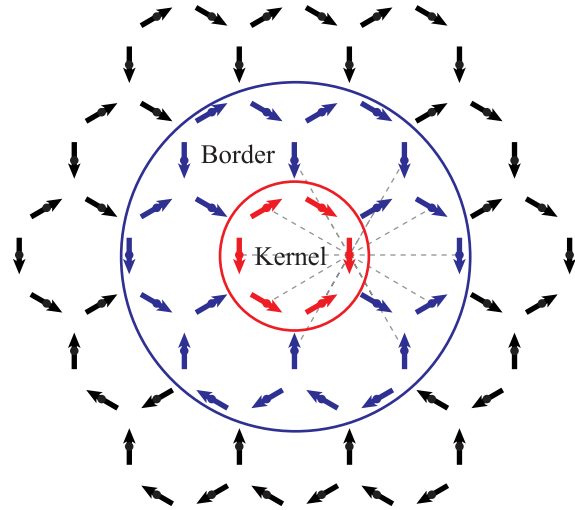


Рис. 3. (Цветной онлайн) Блок для прохода по системе искусственного спинового льда с диполь-дипольным взаимодействием. Красным выделены спины входящие в ядро, синим – граничные спины ядра. Пунктирными линиями обозначен радиус диполь-дипольного взаимодействия.

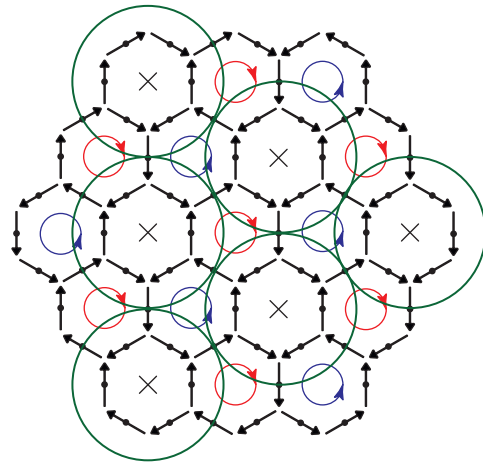


Рис. 4. (Цветной онлайн) Одно из возможных основных состояний гексагональной решетки

Поскольку основное состояние известно, можно ввести количественную меру фрустрации в модели Изинга, как относительное число возбуждений в основном состоянии

$$P_f(T) = \frac{E_{\max} + \langle E \rangle(T)}{2E_{\max}}, \quad (13)$$

где $P_f \in [0, 1]$, $\langle E \rangle(T \rightarrow 0) = E_{gs}$, модуль значения абсолютного минимума $E_{\max} = -E_{\min} = \sum_{\langle i, j \rangle} |E_{ij}|$, суммирование $\langle i, j \rangle$ проводится по всем учитываемым парам диполей. Для 1D, 2D и 3D ферромагнетиков Изинга $P_f(T = 0) = 0$, фрустрации отсутствуют. Расчеты показывают, что для системы диполей

на гексагональной решетке с R_3 радиусом взаимодействия и периодическими граничными условиями, абсолютный минимум энергии $E_{\min} = -6.802 N \cdot D$, тогда как энергия основного состояния $E_{gs} = -2.441 N \cdot D$. Таким образом, в соответствии с (13), основное состояние, реализуемое за счет конфигураций рис. 4, фрустрировано на 32 %.

Температурные зависимости приращения относительного числа возбуждений

$$\Delta P_f(T) = P_f(T_2) - P_f(T_1) \quad (14)$$

и энтропии

$$\Delta S(T) = S(T_2) - S(T_1) = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C(T)}{T} dT \quad (15)$$

модели искусственного спинового льда представлены на рис. 5.

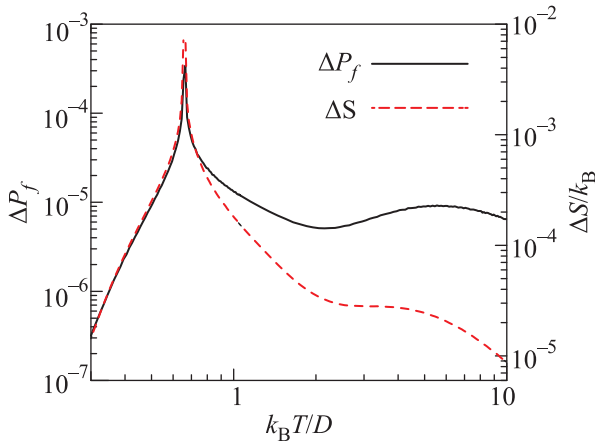


Рис. 5. (Цветной онлайн) Температурное поведение приращения энтропии и параметра фрустраций гексагональной решетки 11250 диполей

Как видно из рис. 5, существует интервал температур, где скорость роста числа фрустраций увеличивается, но при этом скорость роста энтропии замедляется. Введенная в нашей работе количественная мера фрустраций может использоваться для экспериментального исследования искусственного спинового льда экзотических решеток nanoостровковых магнетиков, таких как, например, см. здесь [23, 24]. При выполнении необходимых условий к экспериментальным образцам, исследователь может вычислить E_{\min} в модели взаимодействующих точечных диполей. По известной температурной зависимости теплоемкости экспериментатор может вычислить изменение внутренней энергии

$$E(T_2) - E(T_1) = \int_{T_1}^{T_2} C(T) dT, \quad (16)$$

т.е. изменение параметра фрустраций $P_f(T)$ и вычислить долю возбуждений при известном значении абсолютного минимума.

В заключение необходимо отметить, что разработанный мультиспиновый метод основан на квази-марковских случайных блужданиях. Он позволяет вычислять сразу множество свойств магнитных наносистем больших, но конечных размеров, кроме того, метод способен приводить некоторые сложные системы спинов Изинга к основному состоянию при $T \rightarrow 0$, и его возможности необходимо исследовать более глубоко. Также метод легко обобщается на спиновые решетки произвольной размерности, с произвольным Гамильтонианом, произвольным разбавлением и внешним полем.

Работы выполнены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования, государственные задания # 075-00400-19-01 и 3.7383.2017/8.9. Реализация мультиспинового гибридного метода выполнена А. Макаровым при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 18-32-00713. Часть исследования, выполняемого П. Андриющенко, была поддержана проектом Российского фонда фундаментальных исследований # 18-32-00557. Для выполнения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП "Центр данных ДВО РАН" [25].

1. A. P. Ramirez, Annual Review of Materials Science **24**, 453 (1994).
2. A. Mizuno, Y. Shuku, M. M. Matsushita, M. Tsuchiizu, Y. Hara, N. Wada, Y. Shimizu, and K. Awaga, Phys. Rev. Lett. **119**, 057201 (2017).
3. J. S. Gardner, M. J. P. Gingras, and J. E. Greedan, Rev. Mod. Phys. **82**, 53 (2010).
4. J. Reuther, R. Thomale, and S. Trebst, Phys. Rev. B **84**, 100406 (2011).
5. I. S. Hagemann, Q. Huang, X. P. A. Gao, A. P. Ramirez, and R. J. Cava, Phys. Rev. Lett. **86**, 894 (2001).
6. L. C. Chapon, P. G. Radaelli, H. Zheng, and J. F. Mitchell, Phys. Rev. B **74**, 172401 (2006).
7. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
8. G. H. Wannier, Phys. Rev. B **7**, 5017 (1973).
9. K. Kanô and S. Naya, Prog. Theor. Phys. **10**, 158 (1953).
10. L. Balents, Nature **464**, 199 (2010).
11. M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, and K. W. Godfrey, Phys. Rev. Lett. **79**, 2554 (1997).
12. G. Toulouse, Commun. Phys. **2**, 115 (1977).

13. J. Vannimenus and G. Toulouse, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 537 (1977).
14. C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, and G. Lauhoff, *Rep. Prog. Phys.* **71**, 056501 (2008).
15. Y. Ge, J. Tura, and J. I. Cirac, *J. Math. Phys.* **60**, 022202 (2019).
16. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, and A. H. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
17. R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2607 (1986).
18. R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
19. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
20. Ю. А. Шевченко, А. Г. Макаров, П. Д. Андриющенко, К. В. Нефедев, *ЖЭТФ* **151**, 1146 (2017).
21. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **185**, 832 (1969).
22. P. D. Andriushchenko, *J. Magn. Magn. Mat.* **476**, 284 (2018).
23. C. Nisoli, R. Moessner, and P. Schiffer, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1473 (2013).
24. C. Nisoli, *Frustrated Materials and Ferroic Glasses* **275**, 57 (2018).
25. A. A. Sorokin, S. V. Makogonov, and S. P. Korolev, *Scientific and Technical Information Processing* **44**, 302 (2017).