

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЧАСОВОЙ МОДЕЛИ С ЧИСЛОМ СОСТОЯНИЙ СПИНА $q = 5$ НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев*, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра
Российской академии наук
367003, Матячкала, Россия*

Поступила в редакцию 12 мая 2023 г.,
после переработки 26 июня 2023 г.
Принята к публикации 29 июня 2023 г.

С помощью алгоритма Ванга – Ландау метода Монте-Карло проведены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств часовой модели с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. С использованием гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ фазовых переходов. Показано, что в ферромагнитной часовой модели наблюдаются два фазовых перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса, а в антиферромагнитной часовой модели обнаружен фазовый переход второго рода.

DOI: 10.31857/S0044451023110093

EDN: PJUZJA

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП), магнитных, термодинамических и критических свойств в магнитных спиновых системах представляет большой теоретический и экспериментальный интерес. Это связано с тем, что для большинства реальных магнитных спиновых систем характерны возмущения различной природы, такие как анизотропия, взаимодействия следующих за ближайшими соседями, внешнее магнитное поле, тепловые и квантовые флуктуации, немагнитные примеси, дефекты, деформации и др. Присутствие этих факторов может повлиять на природу ФП и термодинамические характеристики таких систем [1–7]. Для изучения особенностей термодинамического поведения и природы ФП успешно используются различные решеточные модели. На их основе получено большое количество интересных результатов. Решеточные спиновые модели позволяют описать целый ряд реальных магнитных материалов.

Одной из моделей, применяемых для описания физических систем, является часовая модель с чис-

лом состояний спина q . Нами в данном исследовании рассматривается часовая модель с числом состояний спина $q = 5$ на треугольной решетке. Магнитные материалы на треугольной решетке представляют особый интерес для исследователей. Антиферромагнетики на треугольной решетке представляют собой геометрически фрустрированные спиновые системы, которые исследуются уже давно. Для фрустрированных систем существует совсем немного надежно установленных фактов. Большинство имеющихся результатов получены для модели Изинга, Гейзенберга и Поттса с числом состояний спина $q = 2, 3$ и 4 [8–14].

Многие физические свойства часовой модели зависят от значения q . В случае, когда $q = 2, 3, 4$, эта модель имеет точное решение. Часовая модель сводится к модели Изинга и Z3-модели Поттса при $q = 2, 3$ соответственно. При $q = 4$ данная модель эквивалентна двум копиям модели Изинга. Установлено, что для этих трех случаев в системе наблюдается ФП второго рода из высокотемпературной парамагнитной фазы в низкотемпературную ферромагнитную упорядоченную фазу.

Когда $q \rightarrow \infty$ данная модель сводится к стандартной XY-модели. В этом случае спонтанного нарушения симметрии не наблюдается, но происходит ФП из низкотемпературной фазы Березинского – Костерлица – Таулеса (БКТ) в высокотемпературную парамагнитную фазу. Для часовой модели

* E-mail: m_zagir@mail.ru

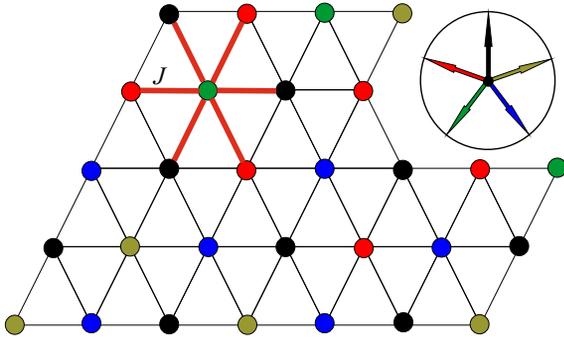


Рис. 1. Схематическое представление часовой модели с $q = 5$

с числом состояний спина $q = 5$ имеется очень мало точно установленных фактов. К настоящему моменту остается открытым вопрос о роде ФП при значении $q = 5$.

Для получения ответа на этот вопрос в данной работе нами проводится исследование двумерной часовой модели на треугольной решетке с $q = 5$. Исследование этой модели с антиферромагнитными обменными взаимодействиями на треугольной решетке в литературе практически не встречается. Антиферромагнитное обменное взаимодействие в данной модели может привести к фрустрации, вырождению основного состояния, появлению различных фаз и ФП, а также влиять на его термодинамические, магнитные и критические свойства. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка провести исследование ФП и термодинамических свойств этой модели на треугольной решетке.

Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с природой ФП и термодинамическим поведением фрустрированных спиновых систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЙ

Гамильтониан для часовой модели с q -состояниями, которая представляет собой дискретизированную спиновую xy -модель, можно записать в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (1)$$

где спиновые состояния q в узле i обозначены плоским углом $\theta_i = 2\pi k_i/q$, $k_i = 1, \dots, q$. В данном исследовании нами рассматриваются два случая. В первом случае $J > 0$ — параметр ферромагнитного обменного взаимодействия, а во втором случае $J < 0$

— параметр антиферромагнитного обменного взаимодействия.

В последние десятилетия часовая модель с q -состоянием широко исследовалась как аналитически [15–20], так и численно [21–25]. Тем не менее, до сих пор неясна природа ФП для малых q , таких как $q = 5, 6$. При значении $q = 2$ эта модель сводится к классической модели Изинга со спиновой симметрией вверх-вниз, а в предельном случае, при $q \rightarrow \infty$ — xy -модели, где ориентации спинов непрерывны внутри плоскости. В случае двумерной xy -модели ($q \rightarrow \infty$) не существует дальнеупорядоченной фазы при конечных температурах, как утверждает теорема Мермина–Вагнера [26]. Вместо этого система претерпевает БКТ-переход бесконечного порядка из парамагнитной фазы в БКТ-фазу.

В данном исследовании нами рассматривается часовая модель при $q = 5$. Схематическое описание этой модели представлено на рис. 1. На вставке приведены направления для каждого из пяти состояний спина и соответствующее цветовое представление. Как видно на рисунке, у каждого спина есть шесть (линии красного цвета) соседей. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление.

Решеточные магнитные модели на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе методов Монте-Карло (МК) [27–32]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов для исследования подобных систем. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является алгоритм Ванга–Ландау [33], особенно в низкотемпературной области.

Алгоритм Ванга–Ландау является реализацией метода энтропийного моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы. Данный алгоритм основан на том, что, совершая случайное блуждание в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав 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. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , удельную теплоемкость C и энтропию S . Поскольку плотность состояний $g(E)$ очень быстро растет с увеличением размеров исследуемых систем, для удобства хранения и обработки больших чисел пользуются величиной $\ln g(E)$.

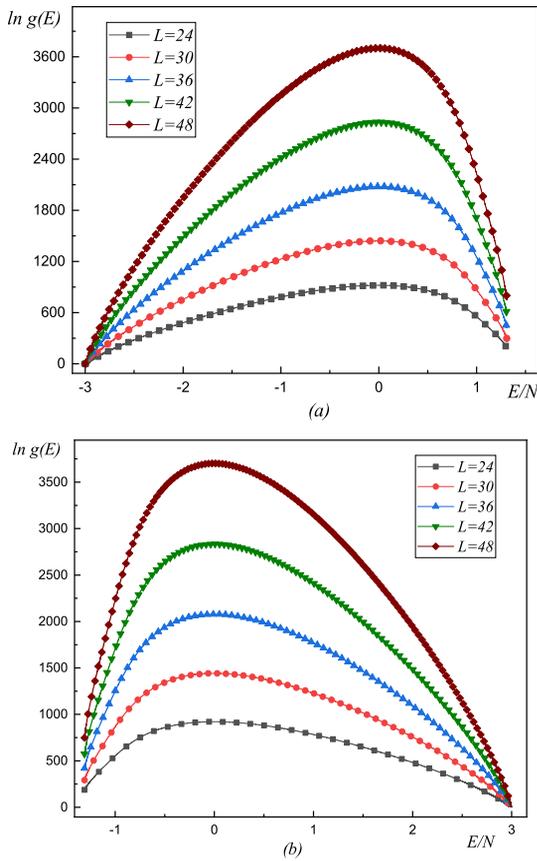


Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ при различных линейных размерах L : для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

Для анализа природы и характера ФП использовался гистограммный метод анализа данных и метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L = N$, $L = 24 - 120$, где L — линейный размер решетки, N — количество спинов в системе.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Алгоритм Ванга–Ландау является эффективным методом для расчета плотности состояния энергии. Преимущество алгоритма заключается в том, что плотность состояний $g(E)$ в системе не зависит от температуры. Зная плотность состояний системы, можно рассчитать температурную зависимость любого интересующего нас термодинамического параметра. На рис. 2 приведены плотности состояний $g(E)$ для разных линейных размеров системы для ферромагнитной и антиферромагнитной

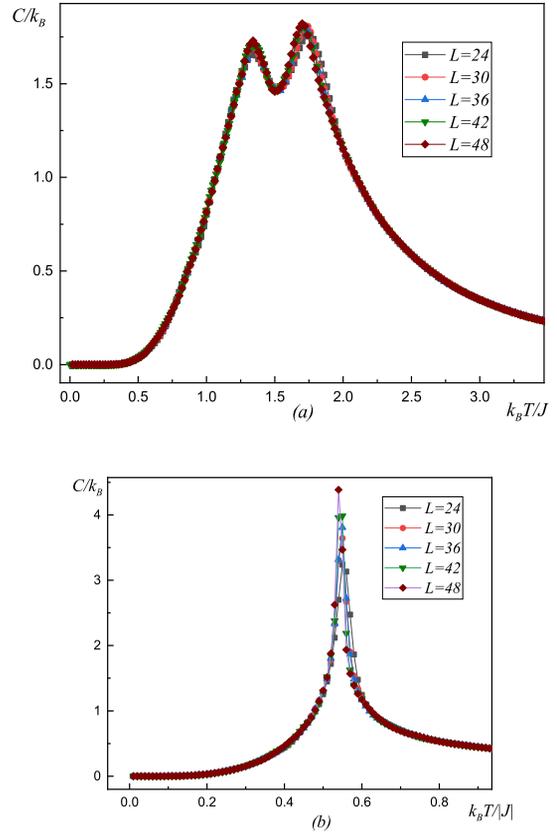


Рис. 3. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для разных L : для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

моделей (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Как видно на рисунке, плотность состояний имеет куполообразную форму. С увеличением линейных размеров системы максимум плотности состояний $g(E)$ значительно возрастает.

На рис.3. представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей с различными линейными размерами системы L . Отметим, что для ферромагнитной модели (рис.3 a) на зависимостях теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие двух максимумов на температурной зависимости теплоемкости позволяет говорить о двух последовательных ФП в данной модели.

Аналогичный результат был получен в работах [15, 19, 34], где была исследована ферромагнитная часовая модель с $q = 5$ на квадратной и тре-

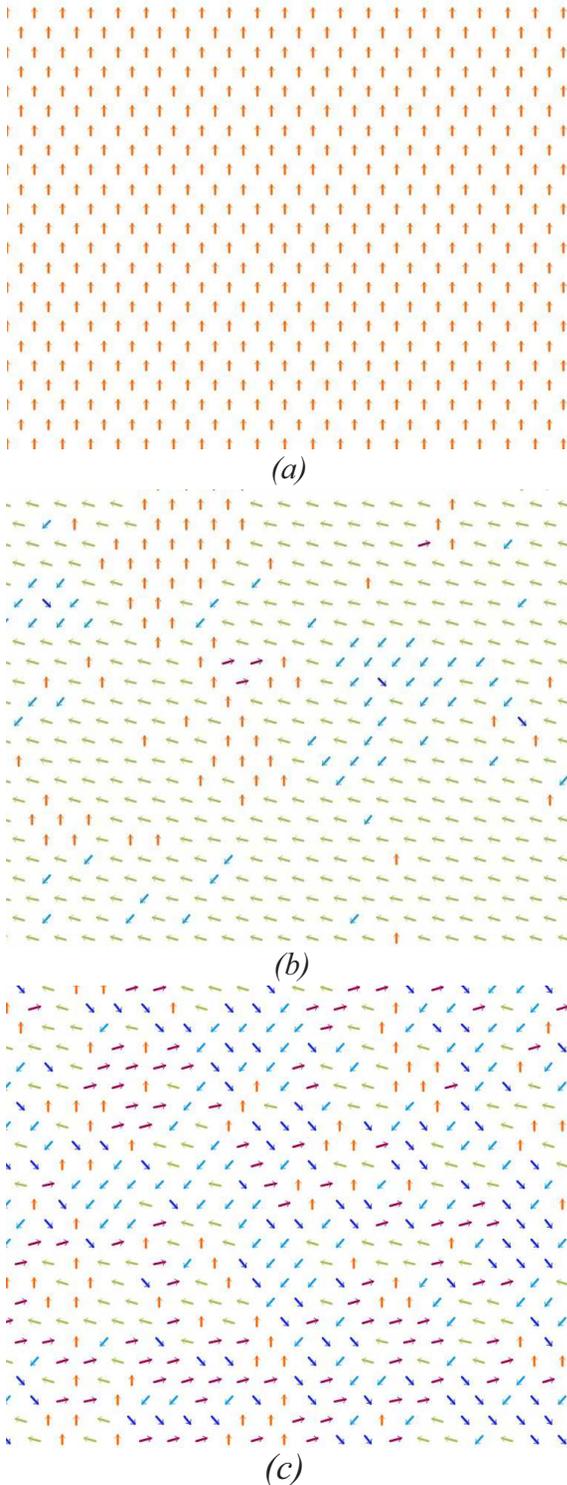


Рис. 4. Магнитные структуры основного состояния для ферромагнитной модели: *a* — в интервале температур $0 \leq T < T_{c1}$; *b* — в интервале температур $T_{c1} < T < T_{c2}$; *c* — $T > T_{c2}$

угольной решетках. Для антиферромагнитной мо-

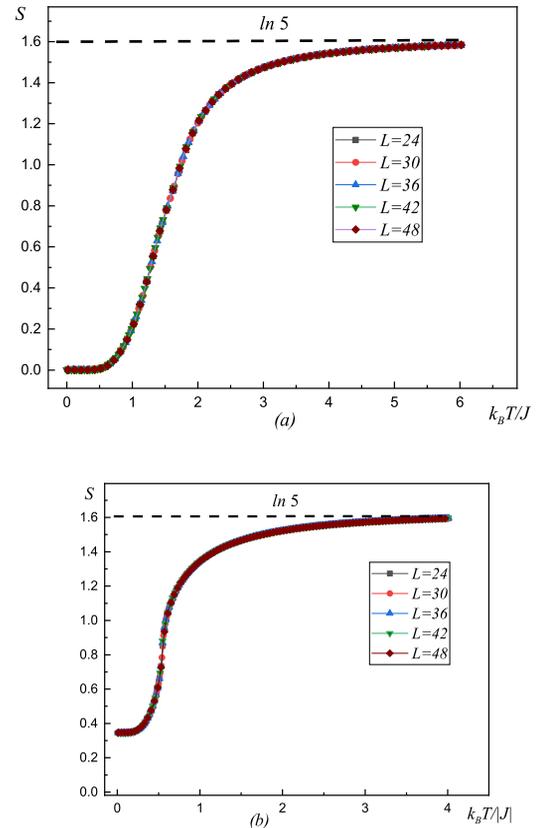


Рис. 5. Температурные зависимости энтропии *S*: для ферромагнитной модели (*a*) и для антиферромагнитной модели (*b*)

дели (рис.3 *b*) наблюдается только один максимум, что позволяет говорить об одном ФП. Все максимумы увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем они в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением *L*. Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления периодических граничных условий, а во-вторых, о достижении насыщения по *N* для многих исследуемых нами параметров.

Для определения типа упорядочения нами проведен анализ магнитных структур основного состояния в широком температурном интервале. На рис. 4 приведены полученные нами структуры. На рисунке видно, что в данной модели наблюдаются три типа магнитного упорядочения: в интервале температур $\theta \leq T < T_{c1}$ (рис. 4 *a*) наблюдается полностью упорядоченная ферромагнитная фаза; в интервале $T_{c1} < T < T_{c2}$ (рис. 4 *b*) — фаза типа Березинского – Костерлица – Таулеса, где наблюдается ближний порядок в системе, в котором превалирует одно из

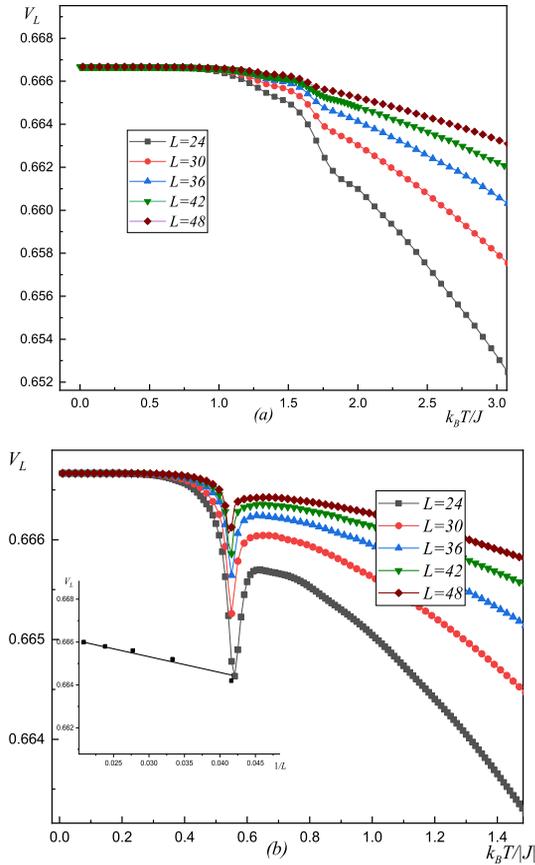


Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$: для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

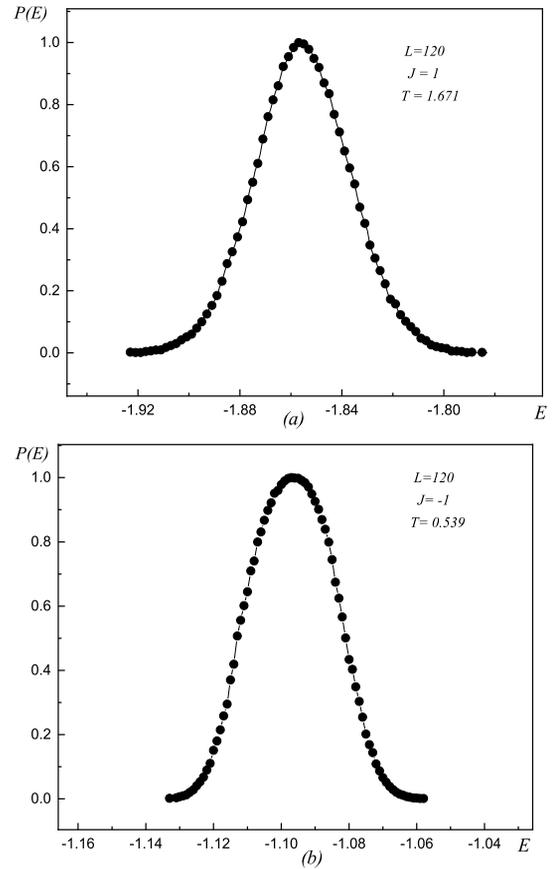


Рис. 7. Гистограмма распределения энергии: для ферромагнитной модели (a) и для антиферромагнитной модели (b)

пяти состояний спина; при дальнейшем повышении температуры $T > T_{c2}$ (рис. 4 c) — полностью разупорядоченная парамагнитная фаза.

На рис. 5 приведены температурные зависимости энтропии S для обеих моделей. На рисунках видно, что с увеличением температуры энтропия для всех систем стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 5$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, для ферромагнитной модели энтропия стремится к нулевому значению для всех значений L . Нулевая остаточная энтропия свидетельствует об отсутствии вырождения основного состояния. Для антиферромагнитной модели энтропия при низких температурах стремится к ненулевому значению для всех значений L . Такое поведение свидетельствует о сильном вырождении данной модели, что характерно для фрустрированных систем.

Для анализа характера ФП использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка по энергии, который имеет следующий вид [35]:

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

Известно, что ФП второго рода характеризуются следующими отличительными особенностями [36]: усредненная величина $V_L(T)$ стремится к тривиальному значению согласно выражению $V_L(T) = V^* + bL^{-d}$ при $L \rightarrow \infty$ и $T = T(L)$, где $V^* = 2/3$.

Характерные зависимости кумулянтов Биндера $V_L(T)$ от температуры для систем с линейными размерами для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей приведены на рис. 6. Как видим на рисунках, энергетические кумулянты для обеих моделей показывают разный характер поведения. Для антиферромагнитного случая на графиках зависимости энергетических кумулянтов наблюдаются минимумы в области температуры фазового перехода, которые уменьшаются с увеличением размеров системы L . Для ферромагнитной модели такие минимумы не наблюдаются. Заметим, что на вставке к рис. 6 b на-

глядно видно, что тривиальная величина $V^* \rightarrow 2/3$ при $L \rightarrow \infty$. Такое поведение, как отмечалось выше, характерно для ФП второго рода.

Для более точного определения рода ФП мы использовали гистограммный анализ данных метода МК. В случае ФП первого рода на гистограмме распределения энергии вблизи температуры перехода наблюдается бимодальное распределение энергии. Таким образом, на графике появляются два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии. В случае ФП второго рода должен наблюдаться один максимум. На рис. 7 *a, b* представлены гистограммы распределения энергии для линейных размеров системы $L = 120$ в области температуры ФП для ферромагнитной и антиферромагнитной моделей.

На графиках зависимости вероятности P от энергии системы E наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует о наличии в антиферромагнитной модели ФП второго рода. Для ферромагнитной часовой модели подобный анализ показывает наличие одного максимума, который позволяет нам утверждать, что в данной модели точно не наблюдается ФП первого рода. Такое поведение характерно для ФП второго рода. Однако анализ магнитных структур основного состояния свидетельствует в пользу перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса (рис.4.).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование фазовых переходов и термодинамических свойств двумерной часовой модели на треугольной решетке с числом состояний спина $q = 5$ с использованием алгоритма Ванга – Ландау метода Монте-Карло. Анализ полученных данных показывает, что для ферромагнитной часовой модели на температурной зависимости теплоемкости наблюдаются два максимума. На основе метода кумулянтов Биндера и гистограммного метода проведен анализ рода ФП данной модели. Обнаружено, что для ферромагнитной часовой модели происходят два фазовых перехода типа Березинского – Костерлица – Таулеса. Данные, полученные для антиферромагнитной часовой модели, свидетельствуют о том, что основное состояние системы сильно вырождено и в системе происходит ФП второго рода. Показано, что антиферромагнитное обменное взаимодействие ближайших соседей может повлиять на физические свойства часовой модели с $q = 5$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Е. Свистов, Л. А. Прозорова, Н. Бюттген и др., Письма в ЖЭТФ **81**, 133 (2005).
2. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
3. M. Tisser, B. Delamotte, D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
4. P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto et al., Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
5. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов и др., ЖЭТФ **161**, 753 (2022).
6. A. I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura et al., Phys. Rev. B **75**, 134412 (2007).
7. J. L. Jacobsen, J. Salas, C. R. Scullard, J. Phys. A: Math. Theor. **50**, 345002 (2017).
8. E. Z. Ising, Phys. **31**, 253 (1924).
9. G. H. Wannier, Phys. Rev. **79**, 357 (1950).
10. M. Tisser, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
11. A. K. Murtazaev, M. K. Badiev, M. K. Ramazanov et al., Phase Transitions **94**, 394 (2021).
12. F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235,(1982); Errata, Rev. Mod. Phys. **55**, 315 (1983).
13. M. Nauenberg, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **44**, 837 (1980).
14. C. Itzykson, H. Saleur, J.-B. Zuber, *Conformal Invariance and Applications to Statistical Mechanics*, World Scientific, Singapore (1988).
15. E. Rastellia, S. Reginaa, and A. Tassi, J. Magn. Mater. **272**, 997 (2004).
16. S. S Murty, Challa, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **33**, 437 (1986).
17. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
18. Li Guanrong, H. P. Kwok, G. Zheng-Cheng, arXiv:2009.10695v1 [cond-mat.stat-mech] 22 Sep 2020.
19. Li Zi-Qian, Li-Ping Yang, Z. Y. Xie et al., Phys. Rev. E **101**, 060105R, (2020).

- 20.** G. Ortiz, E. Cobanera, and Z. Nussinov, Nucl. Phys. B **854**, 780 (2012).
- 21.** Y. Kumano, K. Hukushima, Y. Tomita et al., Phys. Rev. B **88**, 104427 (2013).
- 22.** O.A. Negrete, P. Vargas, F. J. Pena et al., Entropy **20**, 933 (2018).
- 23.** S. Chatterjee, S. Puri, and R. Paul, Phys. Rev. E **98**, 032109 (2018).
- 24.** T. Surungan, S. Masuda, Y. Komura et al., J. Phys. A **52**, 275002 (2019).
- 25.** C. O. Hwang, Phys. Rev. E **80**, 042103 (2009).
- 26.** N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133–6 (1966).
- 27.** А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева и др., ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
- 28.** М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **161**, 816 (2022).
- 29.** М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
- 30.** М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов и др., Письма в ЖЭТФ **114**, 762 (2021).
- 31.** А. К. Murtazaev, М. К. Badiev, М. К. Ramazanov et al., Physica A **555**, 124530 (2020).
- 32.** R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef et al., J. Magn. Mater. **401**, 695 (2016).
- 33.** F. Wang, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
- 34.** Y. Chen, Z. Y. Xie, and J. F. Yu, Chin. Phys. B **27**, 080503 (2018).
- 35.** K. Eichhorn and K. Binder, J. Phys.: Cond. Matt. **8**, 5209 (1996).
- 36.** D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).