11,12

Термодинамические и магнитные свойства трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей

© *А.Б. Бабаев*[1,2], *Т.Р. Ризванова*[1], *А.К. Муртазаев*[1,3]

[1] Институт физики им. Х.И. Амирханова ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия
[2] Дагестанский государственный педагогический университет,
Махачкала, Россия
[3] Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия
E-mail: b_albert78@mail.ru

(Поступила в Редакцию 21 марта 2017 г.)

На основе метода Монте-Карло изучены термодинамические и магнитные свойства в двумерных структурах описываемых трехвершинной моделью Поттса на треугольной решетке с учетом первых и вторых ближайших соседей с величинами взаимодействия J_1 и J_2 соответственно. На основе анализа термодинамических параметров теплоемкости, параметра порядка, восприимчивости и кумулянтов Биндера четвертого порядка, показано, что в трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в диапазоне значений $0 \le |r| \le 1/3$, $r = J_2/J_1$ наблюдается фазовый переход второго рода.

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-02-00214.

DOI: 10.21883/FTT.2017.12.45242.084

В последнее двадцатилетие интенсивно обсуждаются фазовые переходы (ФП) и критические явления (КЯ) в магнетиках, описываемых двумерными (2D) решеточными моделями Изинга и Поттса [1–4]. Это связано с тем, что низко-размерные решеточные модели описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [5,6]. Антиферромагнетик на треугольной решетке является примером фрустрированной спиновой системы. В качестве примера геометрической фрустрации можно привести антиферромагнитную модель Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействия только ближайших соседей. В ней невозможно, расположить все спины так, чтобы каждая пара взаимодействующих соседей была антипараллельна (рис. 1, *a*). Из рис. 1, *a* может показаться, что фрустрация возможна только на треугольных решетках, однако это не так. На рис. 1, *b* приведена трехвершинная антиферромагнитная (АФ) модель Поттса с учетом взаимодействия только первых ближайших соседей на той же треугольной решетке. Как видно из рисунка, при учете только ближайших соседей магнитная система будет упорядоченной при конечной температуре и фрустрации отсутствуют. При учете вторых ближайших соседей 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 (см. рис. 1, *b*). Эффекты фрустраций играют важную роль в различных магнитных системах. Экспериментальные [7] и теоретические исследования [8] позволили установить, что фрустрированные системы проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем.

Двумерная трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке для случая $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ нами исследовалась в работе [9,10]. В этих работах на основе анализа энтропии, теплоемкости, и кумулянтов Биндера четвертого порядка было показано, что при $0 < r < 0.2$ и $1.0 < r < 2.0$ наблюдаются фазовые переходы первого рода. В то время как в интервале $0.2 \le r \le 1.0$ фазовый переход отсутствует, и наблюдаются фрустрации. Случай $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ был рассмотрен в работах [10,11] и было показано, что фрустрации в этом случае возникают в интервале изменений величины $0.5 < |r| < 1.0$. Поведение термодинамических и магнитных параметров при ФП в

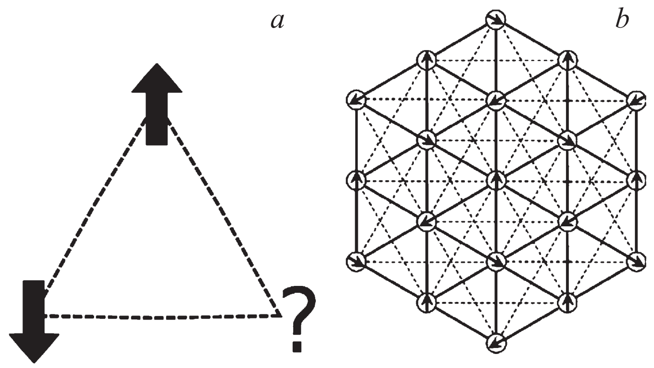

Рис. 1. Фрустрации в модели Изинга (*a*), трехвершинная модель Поттса на треугольной решетке (*b*).

этих работах не были изучены. Исследование особенностей термодинамических и магнитных параметров при ФП второго рода в 2D трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке является главной задачей этой работы.

Трехвершинная ($q = 3$) модель Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей (см. рис. 1, b) описывается следующим микроскопическим гамильтонианом [5]:

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

где J_1 и J_2 — параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия для ближайших и вторых ближайших соседей соответственно. $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ — углы между взаимодействующими спинами $S_i{-}S_j$ и $S_i{-}S_k$ соответственно. Модель Поттса с гамильтонианом вида (1) также хорошо описывает физические свойства многих неупорядоченных сруктур (см. [12,13]).

Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L \times L = N$, $L = 18 \div 54$. При этом отношение обменного взаимодействия вторых и ближайших соседей менялось в интервале $0 \le |r| \le 1.0$, где $|r| \le J_2/J_1$. Кроме того, нами проведен анализ поведения термодинамических и магнитных параметров, определены температуры ФП и вычислены критические температуры. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины находились в разных состояниях. Для вывода системы в равновесное состояние вычислялось время релаксации τ_0 для всех систем с линейными размерами L. Затем усреднение проводилось по участку марковской цепи длиной $\tau = 200\tau_0$. Кроме того, для повышения точности расчетов проводилось усреднение по 10 различным начальным конфигурациям. Затем эти данные использовались для расчета средних значений термодинамических параметров.

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались флуктуационные соотношения [14]

$$C = (NK^2)(\langle U^2\rangle - \langle U\rangle^2), \tag{2}$$

$$\chi = (NK)(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2), \tag{3}$$

где $K = |J|/k_\mathrm{B}T$, $N = L^2$ — число узлов, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка. В качестве параметра порядка m для ферро- (m_F)и антиферромагнитной (m_AF) модели Поттса использовались следующие выражения [15]:

$$m_\mathrm{F} = \left\langle \frac{3}{2} \sum_{\alpha=1}^{3} \left(\frac{N_\alpha}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \tag{4}$$

$$m_\mathrm{AF} = \frac{3}{2} \left\langle \sum_{\alpha\ne\beta\ne\gamma} \left(\frac{N_\alpha + N_\beta + N_\gamma}{N} - \frac{1}{3} \right)^2 \right\rangle^{1/2}, \tag{5}$$

где $N_\alpha = \{N_1, N_2, N_3\}$, N_1 — число спинов в состоянии с $q = 1$, N_2 — число спинов в состоянии с $q = 2$,

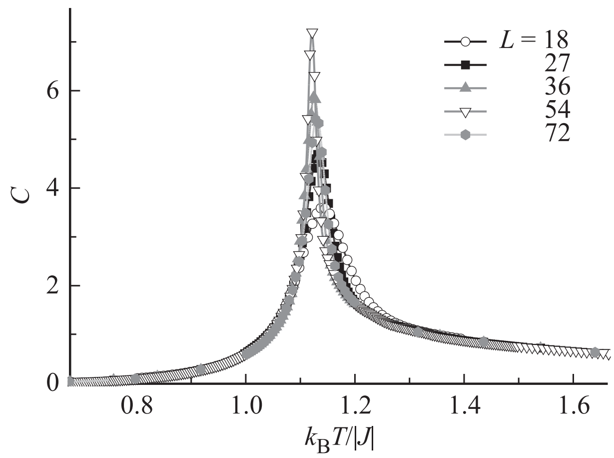

Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости C трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ при $|r| = 0.333$.

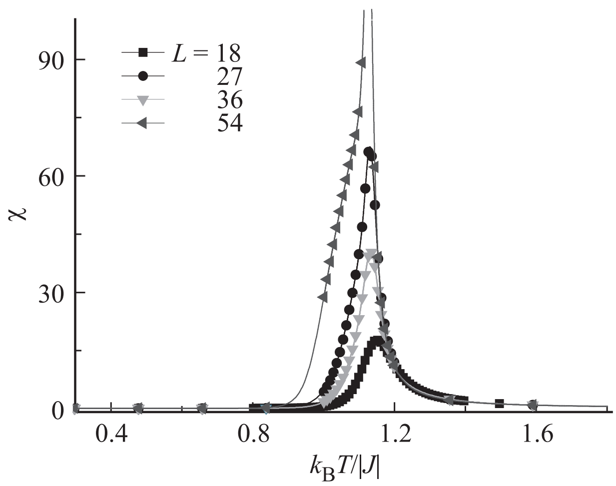

Рис. 3. Температурная зависимость восприимчивости χ трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ при $|r| = 0.333$.

N_3 — число спинов в состоянии с $q = 3$, $N_\alpha, N_\beta, N_\gamma$ — число спинов в подрешетке A, B и C соответственно, $N = L^2$. Угловые скобки означают термодинамическое усреднение.

На рис. 2 и 3 представлены характерные зависимости теплоемкости и восприимчивости для двумерной трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с величинами взаимодействия $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ при $|r| = 1/3$. Здесь и далее на всех рисунках погрешность данных не превосходит размеры символов, используемых для построения графиков. Отметим, что в зависимостях теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для всех исследуемых нами систем проявляются четко выраженные максимумы, и эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру. Такое же поведение для теплоемкости и восприимчивости наблюдалось для систем в интервале

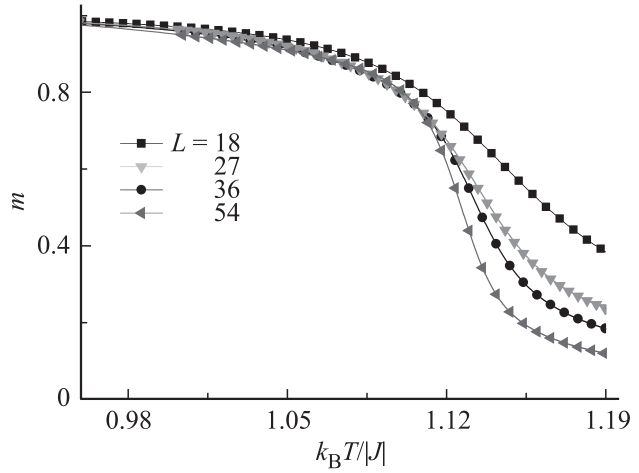

Рис. 4. Температурная зависимость параметра порядка m трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$, при $|r| = 1/3$.

изменения $0 \le |r| \le 1/3$. Вне этого диапазона изменений r, как нами было отмечено в работах [10,11] проявляются эффекты, связанные с фрустрациями и ФП отсутствует. Аналогичное поведение в трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ наблюдалось в интервале изменений величины $0.2 \le |r| \le 1.0$ [9].

На рис. 4 представлены температурные зависимости параметра порядка m для трехвершинной модели Поттса при $J_1 > 0$, $J_2 < 0$ и $|r| = 1/3$ для систем с линейными размерами $L = 18, 27, 36, 54$. Как видно из рисунка, для всех рассмотренных систем с линейными размерами L наблюдается монотонное уменьшение величины m с увеличением температуры, что является характерным признаком ФП второго рода.

Для определения критических температур и анализа характера фазового перехода использовался метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [16]

$$V_L(T) = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3\langle E^2 \rangle_L^2}, \tag{6}$$

$$U_L(T) = 1 - \frac{\langle m^4(T, L) \rangle_L}{3\langle m^2(T, L) \rangle_L^2}, \tag{7}$$

где E — энергия и m — параметр порядка системы с линейными размерами L. Выражения (6) и (7) позволяют с хорошей точностью определить T_c при фазовых переходах первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать род фазового перехода в системе. Методика определения критической температуры нами подробно описана в работах [17,18]. Известно, что фазовые переходы второго рода характеризуются, в частности, следующими отличительными особенностями [7]: усредненная величина $V_L(T)$ стремится к тривиальному значению V^* согласно выражению

$$V(T) = V^* + bL^{-d} \tag{8}$$

при $L \to \infty$ и $T = T_c(L)$, где $V^* = 2/3$, что и продемонстрировано на рис. 5. Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T)$ по параметру порядка m имеют четко выраженную точку пересечения. Характерные зависимости кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для 2D модели Поттса от температуры для систем с разными линейными размерами L приведены на рис. 6. Как видно из рис. 6 в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения, что и свидетельствует о ФП второго рода. Кроме того, этот рисунок демонстрирует, насколько точно можно определить критическую температуру T_c.

Таким образом, в трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$ в интервале

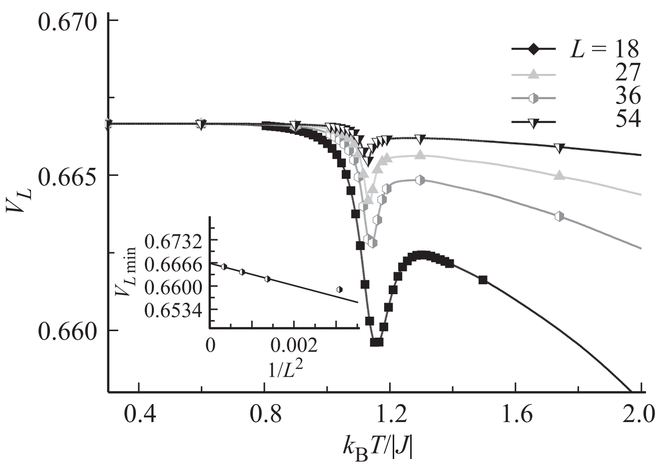

Рис. 5. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $V_L(T)$ для двумерной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$, при $|r| = 1/3$. На вставке приведена аппроксимация зависимостей $V_{L,\min}$ от L.

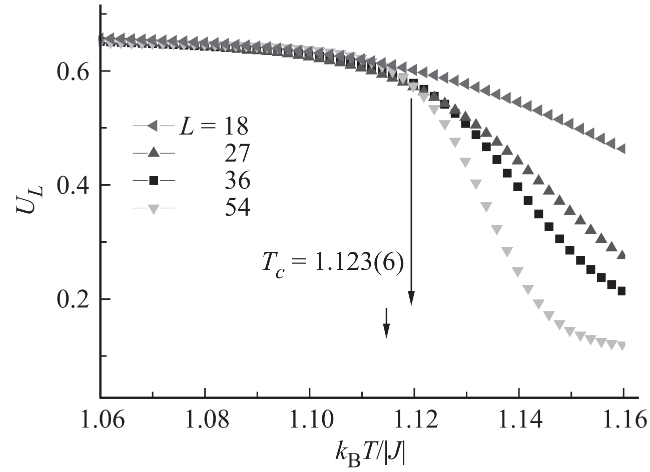

Рис. 6. Температурная зависимость кумулянтов Биндера $U_L(T)$ для трехвершинной модели Поттса с величинами взаимодействий $J_1 > 0$ и $J_2 < 0$, при $|r| = 1/3$.

изменений величины $0 \leq |r| \leq 1/3$ наблюдаются ФП второго рода. Вне этого интервала ФП отсутствует, что связано с вырождением основного состояния системы. Изучение значений r из указанного диапазона имеет большое значение при создании различных синтетических метамагнетиков и выяснения процесса упорядочения для антиферромагнитных материалов с треугольной структурой [2,8].

Список литературы

[1] H.T. Diep. Frustrated spin systems. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
[2] С.В. Малеев. УФН **172**, *6*, 617 (2002).
[3] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Изв. РАН. Сер. физ. **77**, *10*, 1476 (2013).
[4] Л.Н. Щур. УФН **182**, *7*, 787 (2012).
[5] F.Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
[6] W. Zhang, Y. Deng. Phys. Rev. E **78**, 031103 (2008).
[7] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
[8] Р.С. Гехт. УФН **159**, 261 (1989).
[9] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. Письма в ЖЭТФ **100**, 267 (2014). [JETP Lett. **100**, 242 (2014)].
[10] А.Б. Бабаев, М.А. Магомедов, А.К. Муртазаев, Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ЖЭТФ **149**, 357 (2016). [JETP **122**, 310 (2016)].
[11] А.Б. Бабаев, А.К. Муртазаев, Э.М. Сулейманов, Т.Р. Ризванова. ФТТ **58**, *10*, 2001 (2016).
[12] A.K. Murtazaev, A.B. Babaev. JETP **115**, *6*, 1042 (2012).
[13] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев, Г.Я. Атаева. Физика низких температур. **39**, *2*, 194 (2013). [Low Temperature Physics **39**, *2*, 147 (2013)].
[14] P. Peczac, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
[15] Y. Saito. J. Phys. A **15**, 1885 (1982).
[16] K. Eichhorn, K. Binder. J. Phys.: Condens. Matter **8**, 5209 (1996).
[17] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. ЖЭТФ **143**, *1*, 116 (2013). [JETP **116**, *1*, 101 (2013)].
[18] А.К. Муртазаев, А.Б. Бабаев. Письма в ЖЭТФ **99**, *9*, 618 (2014). [JETP Lett. **99**, *9*, 535 (2014)].