10,11,05

Исследование термодинамических свойств модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями

© А.К. Муртазаев[1,2], М.К. Рамазанов[1,3], М.А. Магомедов[1,2], Д.Р. Курбанова[1]

[1] Институт физики ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия
[2] Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия
[3] Отдел математики и информатики ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия
E-mail: sheikh77@mail.ru

(Поступила в Редакцию 6 марта 2018 г.)

Методом Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния и термодинамических свойств антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями. Исследования проведены для соотношения величины обменного взаимодействия следующих и ближайших соседей $r = J_2/J_1 = 2/3$. Получены все возможные магнитные структуры основного состояния для данного соотношения обменных взаимодействий. Показано, что при значении $r = 2/3$ конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению фрустрации и вырождению основного состояния. На основе гистограммного метода анализа данных показано, что в исследуемой модели при $r = 2/3$ наблюдается фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-02-00214-а.

DOI: 10.21883/FTT.2018.09.46401.059

1. Введение

В настоящее время продолжается активное исследование магнитных состояний, фазовых переходов (ФП), критических и термодинамических свойств в спиновых системах с конкурирующими обменными взаимодействиями. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к возникновению в системе эффектов фрустрации. Наличие фрустраций в системе может привести к целому ряду изменений свойств фундаментального характера [1–4]. Учет антиферромагнитных взаимодействий следующих ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга приводит к вырождению основного состояния, появлению различных фаз, ФП и аномалий критических и термодинамических свойств [5].

В данной работе авторами на основе метода Монте-Карло (МК) проведено исследование ФП, магнитной структуры основного состояния и термодинамических свойств антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке для соотношения величины обменного взаимодействия следующих и ближайших соседей $r = J_2/J_1 = 2/3$ (J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия ближайших и следующих за ближайшими соседей соответственно).

Исследование этой модели различными методами проведено в работах [6–13]. Результаты исследований, полученные в работах [6–9], свидетельствуют, что для модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке имеет место ФП второго рода. Согласно результатам работ [10,11] переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является ФП второго рода, а переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является ФП первого рода. Данные этих работ показывают, что учет взаимодействий следующих ближайших соседей в системе может привести к смене ФП. В работах [12,13] методом МК были выполнены исследования ФП и критического поведения данной модели. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. Результаты, полученные в работе [13], свидетельствуют, что данная модель имеет некоторые особенности критического и термодинамического поведения вблизи точки пересечения трех различных фаз на фазовой диаграмме. Исследование этих особенностей в самой точке пересечения этих фаз на сегодняшний день не проведено. Исходя из этого, целесообразно более подробно исследовать особенности, наблюдающиеся для этой модели в точке пересечения трех различных фаз. Эти особенности могут быть связаны со структурой основного состояния, которая до сих пор является малоизученной.

В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка исследовать ФП, термодинамическое поведение системы и магнитную структуру основного состояния в точке пересечения трех различных фаз этой модели. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных со структурой основного состояния, с характером и природой ФП спиновых систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих за ближайшими соседей описывается гамильтонианом

$$H = -J_1 \sum_{i,j} S_i S_j - J_2 \sum_{i,l} S_i S_l, \qquad (1)$$

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ — изинговский спин. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей величиной $J_1 < 0$, а второй — следующих за ближайшими соседей $J_2 < 0$; $r = J_2/J_1$ — величина взаимодействия следующих за ближайшими соседей.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода Монте-Карло [14–17]. В последние годы разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем являются репличный обменный алгоритм метода МК [18–20] и алгоритм Ванга–Ландау [17,21]. Особенно эти алгоритмы эффективны при изучении низкотемпературной области. Нами в данном исследовании были использованы эти оба алгоритма.

В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами были внесены дополнения, которые позволяют выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Данный алгоритм является реализацией метода энтропийного 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, 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 $\ln g(E)$.

Алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде.

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). Приэтом 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 $g(E_2) \to f \times g(E_2)$, $H(E_2) \to H(E_2) + 1$, иначе $g(E_1) \to f \times g(E_1)$, $H(E_1) \to H(E_1) + 1$. Если гистограмма стала „плоской“, то обнуляем гистограмму $H(E) \to 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \to \sqrt{f}$, и продолжаем снова, пока $f \geq f_{\min}$. В нашем случае $f_{\min} = 1.000\,000\,000\,0$. Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [21–22]. Таким образом, определив плотность состояний системы, можно рассчитать значения термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U, свободную энергию F, теплоемкость C и энтропию S можно вычислить, используя следующие выражения:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \qquad (2)$$

$$F(T) = -k_B T \ln\Big(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}\Big), \qquad (3)$$

$$C = (NK^2)\big(\langle U^2 \rangle - \langle U^2 \rangle\big), \qquad (4)$$

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \qquad (5)$$

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, T — температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U — внутренняя энергия (U является нормированной величиной).

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный метод анализа данных метода МК [21,22].

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 10{-}80$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \times 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин.

3. Результаты моделирования

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости энергии и теплоемкости, полученные на основе репличного обменного алгоритма (REMC) и алгоритма Ванга–Ландау (WLA) (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Эти рисунки демонстрируют, что данные, полученные разными

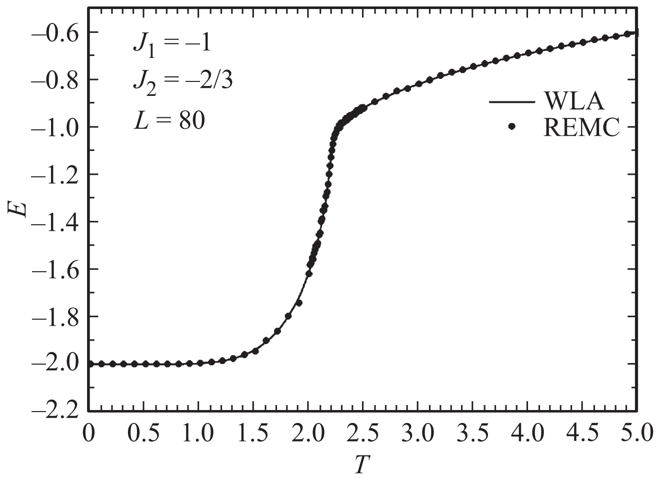

Рис. 1. Температурные зависимости энергии U для систем с линейными размерами $L = 80$.

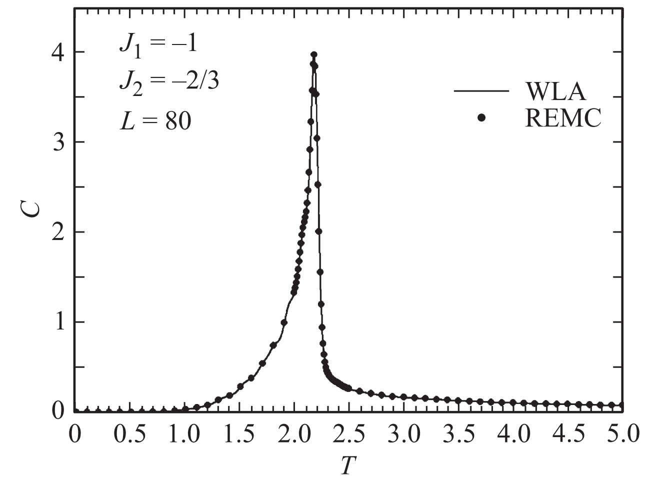

Рис. 2. Температурные зависимости теплоемкости C для систем с линейными размерами $L = 80$.

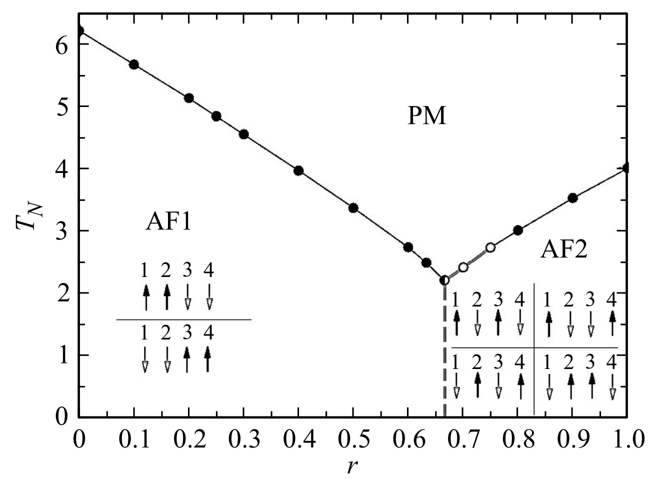

Рис. 3. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

алгоритмами, достаточно хорошо соответствуют друг другу. Это позволяет говорить о надежности и точности полученных в работе результатов.

На рис. 3 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. На диаграмме видно, что в точке $r = 2/3$ пересекаются три различные фазы: AF1 — антиферромагнитная, PM — парамагнитная и AF2 — антиферромагнитная 2-го типа [9,10].

На фазовой диаграмме черными и светлыми стрелками изображены направления спинов во всех подрешетках. На рис. 4 приведены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели для значения $r = 2/3$, полученные с помощью алгоритма Ванга–Ландау (черными и светлыми кружками изображены направления спинов). На этом рисунке цифрами *1–6* показаны все возможные магнитные структуры основного состояния, наблюдаемые в данной модели. Вдоль вертикальной пунктирной линии, соответствующей значению $r = 2/3$, на диаграмме сосуществуют все шесть структур одновременно (*1–6* на рис. 4).

Плотность состояний $g(E)$ для систем с различными линейными размерами L представлены на рис. 5 и 6. Из графиков видно, что в данной системе отсутствует вырождение основного состояния. Это говорит о том, что в исследуемой модели конкуренция обменного взаимодействия следующих ближайших соседей не приводит к вырождению основного состояния, в отличие от модели Изигна на квадратной решетке [4].

Температурная зависимость энтропии S приведена на рис. 7. На рис. 7 видно, что с увеличением температуры энтропия системы стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 2$. При низких температурах, близких к абсолютному нулю, энтропия системы стремится к нулю. Такое поведение энтропии также позволяет говорить о том, что в данной модели вырождение основного состояния отсутствует. Можно предположить, что конкуренция обменного взаимодействия в данной модели не приводит к появлению фрустраций.

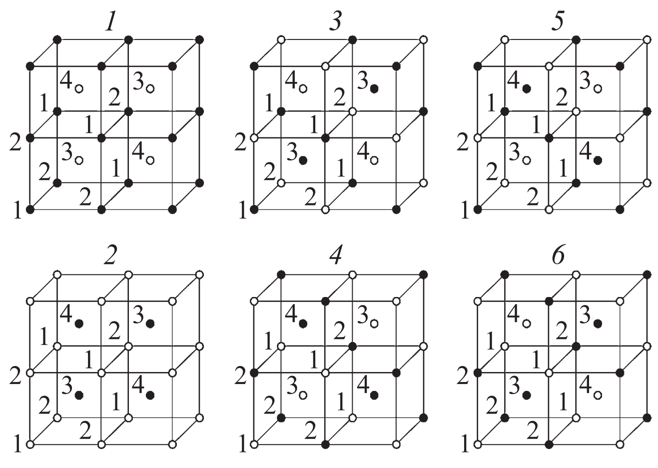

Рис. 4. Магнитные структуры основного состояния.

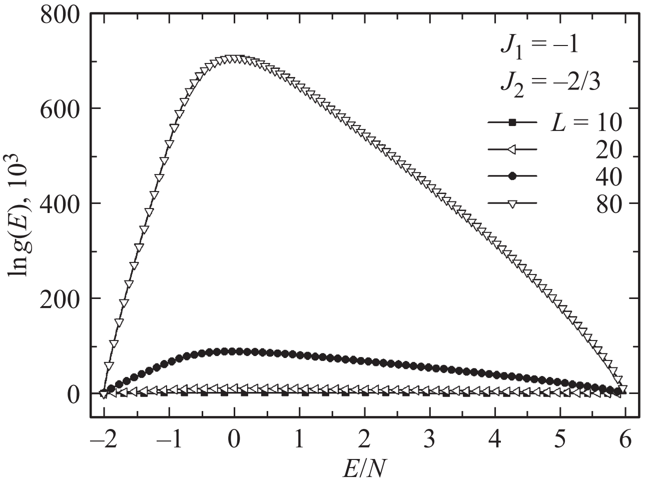

Рис. 5. Плотность состояний $g(E)$ для систем с разными линейными размерами L.

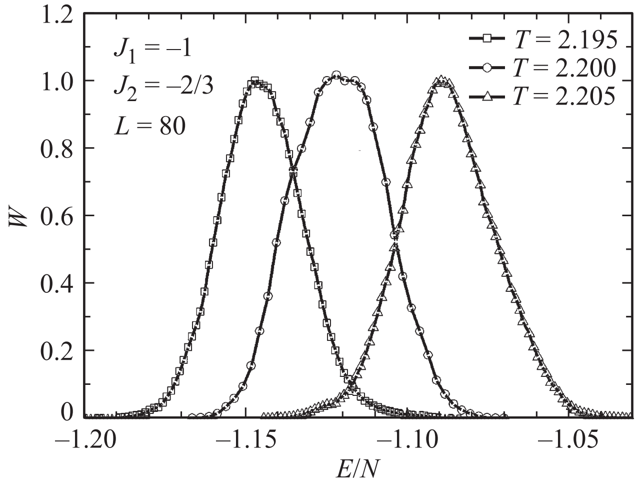

Рис. 8. Гистограмма распределения энергии для $r = 2/3$ и $L = 80$.

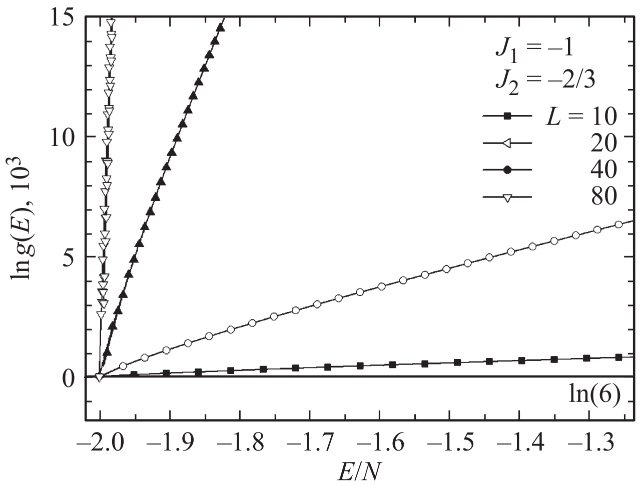

Рис. 6. Плотность состояний $g(E)$ для систем с разными линейными размерами L.

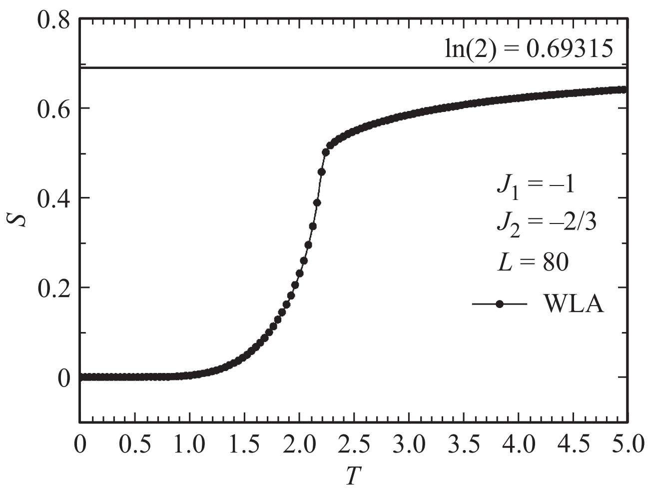

Рис. 7. Температурная зависимость энтропии S для систем с линейными размерами $L = 80$.

Для анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК, полученных как на основе репличного алгоритма, так и алгоритма Ванга–Ландау. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [23].

Результаты данной работы показывают, что для значения $r = 2/3$ наблюдается ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 8. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$. Графики построены вблизи критической температуры. Из рисунков видно, что в зависимости вероятности $W(E/N)$ от энергии E/N для всех значений температур наблюдаются один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

Анализируя наши данные, можно предположить, что учет антиферромагнитных взаимодействий следующих ближайших соседей в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке не приводит к возникновению фрустрации и вырождению основного состояния. В исследуемой модели при $r = 2/3$ наблюдается фазовый переход второго рода.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов, термодинамических свойств и магнитной структуры основного состояния в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями выполнено с использованием репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Получены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели. Показано, что при значении $r = 2/3$ конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению фрустрации и вырождению основного состояния. На основе гистограммного метода анализа данных показано, что для значения $r = 2/3$ в данной модели наблюдается фазовый переход второго рода.

Список литературы

[1] Вик.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
[2] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
[3] С.В. Малеев. УФН **172**, 617 (2002).
[4] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
[5] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000). P. 384.
[6] P.H. Lundow, K. Markstrom, A. Rosengren. Philosoph. Mag. **89**, 2042 (2009).
[7] P. Butera, M. Comi. Phys. Rev. B **65**, 144431 (2002).
[8] P. Butera, M. Comi. Phys. Rev. B **72**, 014442 (2005).
[9] M. Plischke, J. Oitmaa. Phys. Rev. B **19**, 487 (1979).
[10] J.R. Banavar, D. Jasnow, D.P. Landau. Phys. Rev. B **20**, 3820 (1979).
[11] M.J. Velgakis, M. Ferer. Phys. Rev. B **27**, 401 (1983).
[12] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
[13] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев. ФТТ **59**, 1082 (2017).
[14] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФТТ **52**, 1557 (2010).
[15] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **53**, 1004 (2011).
[16] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **142**, 338 (2012).
[17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
[18] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
[19] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
[20] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
[21] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
[22] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
[23] М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).

Редактор Т.Н. Василевская