Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 11, с. 762 – 767

Фазовые переходы и магнитные свойства модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке в слабых магнитных полях

М. К. Рамазанов[1], *А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева*

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 20 октября 2021 г.
После переработки 25 октября 2021 г.
Принята к публикации 25 октября 2021 г.

Репличным обменным алгоритмом метода Монте-Карло проведено исследование фазовых переходов и магнитных свойств двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке в слабых магнитных полях. Исследования проведены для интервала величины магнитного поля $0.0 \leq H \leq 3.5$ с шагом 0.5. Получены магнитные структуры основного состояния для данного интервала H. Установлено, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдается фазовый переход первого рода, кроме значения $H = 1.5$, где обнаружен фазовый переход второго рода. Обнаружено, что в данной модели внешнее магнитное поле может привести к смене рода фазового перехода.

DOI: 10.31857/S1234567821230075

1. Введение. В настоящее время в физике конденсированного состояния активно проводятся исследования фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств спиновых систем с учетом различных возмущающих факторов. На сегодняшний день вопрос о влиянии возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле, взаимодействие вторых ближайших соседей, немагнитные примеси, тепловые и квантовые флуктуации и другие имеет принципиальное значение. Включение этих возмущающих факторов может привести к большому разнообразию фаз и ФП в магнитных спиновых системах [1–7]. Исследование влияния внешних факторов на спиновые системы с фрустрациями имеет особый интерес. Это связано с тем, что фрустрированные спиновые системы обладают свойствами, отличными от соответствующих нефрустрированных систем. Внесение внешних возмущений в такие системы может привести к совершенно новому физическому поведению. Причина такого поведения заключается в высокой чувствительности фрустрированных систем к внешним возмущающим факторам. В связи с этим, в данном исследовании нами изучается влияние слабых магнитных полей на характер ФП и магнитные свойства спиновых систем с фрустрациями. При решении такого рода задач успешно используют различные решеточные модели, такие как модель Изинга, Поттса, Гейзенберга и другие.

К настоящему моменту времени влияние внешних возмущающих факторов, в том числе и магнитного поля в модели Изинга и Гейзенберга, достаточно хорошо изучено как для квантовых, так и для классических систем [8–13]. Совсем иначе обстоит дело с моделью Поттса. Модель Поттса является малоизученной и представляет значительный интерес. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и явлений в физике конденсированных сред. К их числу относятся сложные анизотропные ферромагнетики кубической структуры, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси. На основе модели Поттса с различным числом состояний спина могут быть описаны структурные ФП во многих материалах [13]. Работ, посвященных изучению влияния внешнего магнитного поля, как возмущающего фактора, на ФП и магнитные свойства модели Поттса практически нет, и этот вопрос все еще остается открытым и малоизученным.

В связи с этим, в данной работе нами предпринята попытка на основе метода Монте-Карло (МК) изучить влияние слабых магнитных полей на ФП и магнитные свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Данная модель интересна

[1] e-mail: sheikh77@mail.ru

еще и тем, что значение $q = 4$ является граничным значением интервала $2 \leq q \leq 4$, где наблюдается ФП второго рода и области значений $q > 4$, в котором наблюдается ФП первого рода [14]. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования. Гамильтониан модели Поттса с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j\rangle, i\neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k\rangle, i\neq k} S_i S_j - H \sum_{\langle i\rangle} S_i =$$
$$= -J_1 \sum_{\langle i,j\rangle, i\neq j} \cos\theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k\rangle, i\neq k} \cos\theta_{i,k} - H \sum_{\langle i\rangle} S_i, \tag{1}$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для первых и вторых ближайших соседей, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, H – величина магнитного поля (H приводится в единицах J_1). В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1| = |J_2| = 1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq H \leq 3.5$ с шагом 0.5. Магнитное поле направлено вдоль одного из направлений спина.

Схематическое описание данной модели представлено на рис. 1. Как видно на рисунке, у каждого спина есть три ближайших (сплошные жирные линии красного цвета) и шесть следующих ближайших (пунктирные линии синего цвета) соседа. Спины, обозначенные кружками одного и того же цвета, имеют одинаковое направление. На вставке к рисунку для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление.

Направления спинов заданы таким образом, что выполняется равенство:

$$\theta_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{если } S_i = S_j \\ 109.47^\circ, & \text{если } S_i \neq S_j \end{cases} \Rightarrow \cos\theta_{i,j} =$$
$$= \begin{cases} 1, & \text{если } S_i = S_j \\ -1/3, & \text{если } S_i \neq S_j. \end{cases} \tag{2}$$

Согласно уравнению (2) для двух спинов S_i и S_j энергия парного обменного взаимодействия $E_{i,j} = -J_1$, если $S_i = S_j$. В случае, когда $S_i \neq S_j$, энергия $E_{i,j} = J_{1/3}$. Таким образом, энергия парного взаимодействия спинов равна одной величине при их одинаковом направлении, и принимает другое значение при не совпадении направлений спинов. Для модели Поттса с $q = 4$ в трехмерном пространстве такое возможно только при ориентации спинов, как показано на рис. 1.

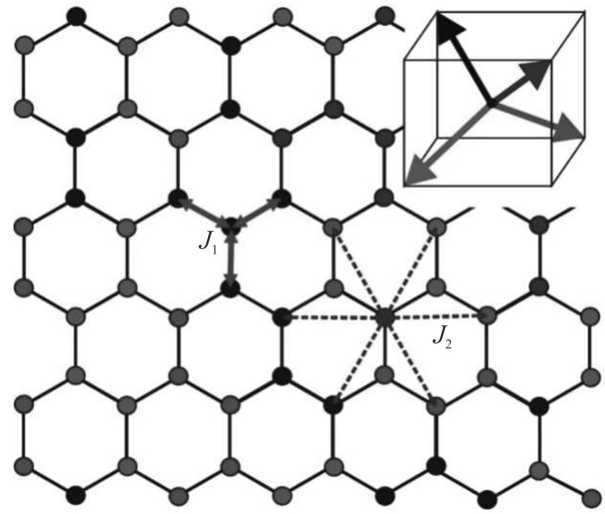

Рис. 1. (Цветной онлайн) Модель Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке. Кружками одного и того же цвета обозначены спины, имеющие одинаковое направление. На вставке для каждого из четырех возможных направлений спина приведено соответствующее цветовое представление

Спиновые системы с фрустрациями на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода МК [15–24]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [25].

Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются N реплик $X_1, X_2, \ldots X_N$ с температурами $T_1, T_2, \ldots T_N$.

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик производится обмен данными между парой соседних реплик X_i и X_{i+1} в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

$$w(X_i \to X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{для} \quad \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{для} \quad \Delta > 0, \end{cases}$$

где $\Delta = (U_i - U_{i+1}) \cdot (1/T_i - 1/T_{i+1})$, U_i и U_{i+1} – внутренние энергии реплик.

Главное преимущество этого алгоритма перед другими репличными алгоритмами в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности – процедура достаточно длительная и отнимает много времени. В репличном обменном алгоритме для каждой реплики реализуется случайное блуждание по “температурному интервалу”, которая в свою очередь стимулирует случайное блуждание в поле потенциальной энергии. Это облегчает решение проблемы “застревания” системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями. Для повышения эффективности этого метода необходимо увеличение числа реплик, что требует серьезного роста компьютерных мощностей. Современные компьютеры обладают достаточной мощностью, что позволяет моделировать необходимое количество реплик и получать результаты с высокой точностью.

Для анализа природы и характера ФП использовался гистограммный метод анализа данных. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ 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. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 12 \div 60$, где L – линейный размер решетки, N – количество спинов в системе.

3. Результаты моделирования. На рисунке 2 представлены магнитные структуры основного состояния при разных значениях магнитного поля. На этом рисунке спины, имеющие одинаковое направление, обозначены кружками одного и того же цвета. Магнитное поле направлено вдоль спина, обозначенного черным цветом. На рисунке видно, что при отсутствии внешнего магнитного поля ($H = 0.0$) в данной модели в основном состоянии реализуется димерная структура. Наблюдается магнитное состояние, при котором спины попарно упорядочиваются. Более подробно магнитные структуры, полученные для данной модели без поля описаны в работах [26, 27]. При значении поля $H = 1.0$ в данной модели сохраняется димерное упорядочение. Для поля $H = 2.0$ наблюдается увеличение числа кружков черного цвета. Это связано с увеличением числа спинов, ориентированных вдоль внешнего поля. При этом на рисунке появляются области с частичным упорядочением спинов. При значении поля $H = 3.0$ в системе наблюдается страйповое упорядочение. Это свидетельствует о том, что внесение внешнего магнитного поля приводит к изменению типа магнитного упорядочения.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле:

$$m = \frac{1}{N}\left(\frac{4N_{\max} - N_1 - N_2 - N_3 - N_4)}{3}\right), \qquad (3)$$

где N_1, N_2, N_3, N_4 – число спинов, соответствующих одному из 4 направлений спина соответственно.

На рисунке 3 представлены графики зависимости параметра порядка m от температуры для разных значений магнитного поля. При отсутствии внешнего магнитного поля, в системе отсутствует порядок, и значение параметра порядка близко к нулю. При включении поля в системе наблюдается частичное упорядочение и параметр порядка в низкотемпературной области имеет отличные от нуля значения. Это объясняется тем, что магнитное поле выстраивает спины вдоль своего направления и в системе возникает частичный порядок.

На рисунке 4 приведен график зависимости параметра порядка от магнитного поля в низкотемпературной области. На рисунке мы наблюдаем плато параметра порядка. При включении внешнего магнитного поля только одно состояние спина (черный цвет) совпадает с направлением поля, а остальные три состояния спина направлены так, как изображены на рис. 1. При увеличении магнитного поля до значения $H = 1.5$, еще одно состояние спина направляется вдоль внешнего поля. Это приводит к возникновению первого плато на графике. При значении поля $H = 2.5$, вдоль внешнего поля выстраивается следующее состояние спина. С этим связано возникновение второго плато на графике.

Для изучения рода ФП нами использовался гистограммный метод анализа данных метода МК [28, 29]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [30].

Результаты, полученные на основе гистограммного анализа данных, показывают, что в данной модели для значений поля в диапазоне $0.0 \le H \le 3.5$, кроме значения поля $H = 1.5$, наблюдается ФП первого рода. Это продемонстрировано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ для значений $H = 1.0$, 1.5 и 2.0. Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. На рисунке видно, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E для значений поля $H = 1.0$ и 2.0 наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют о ФП первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является доста-

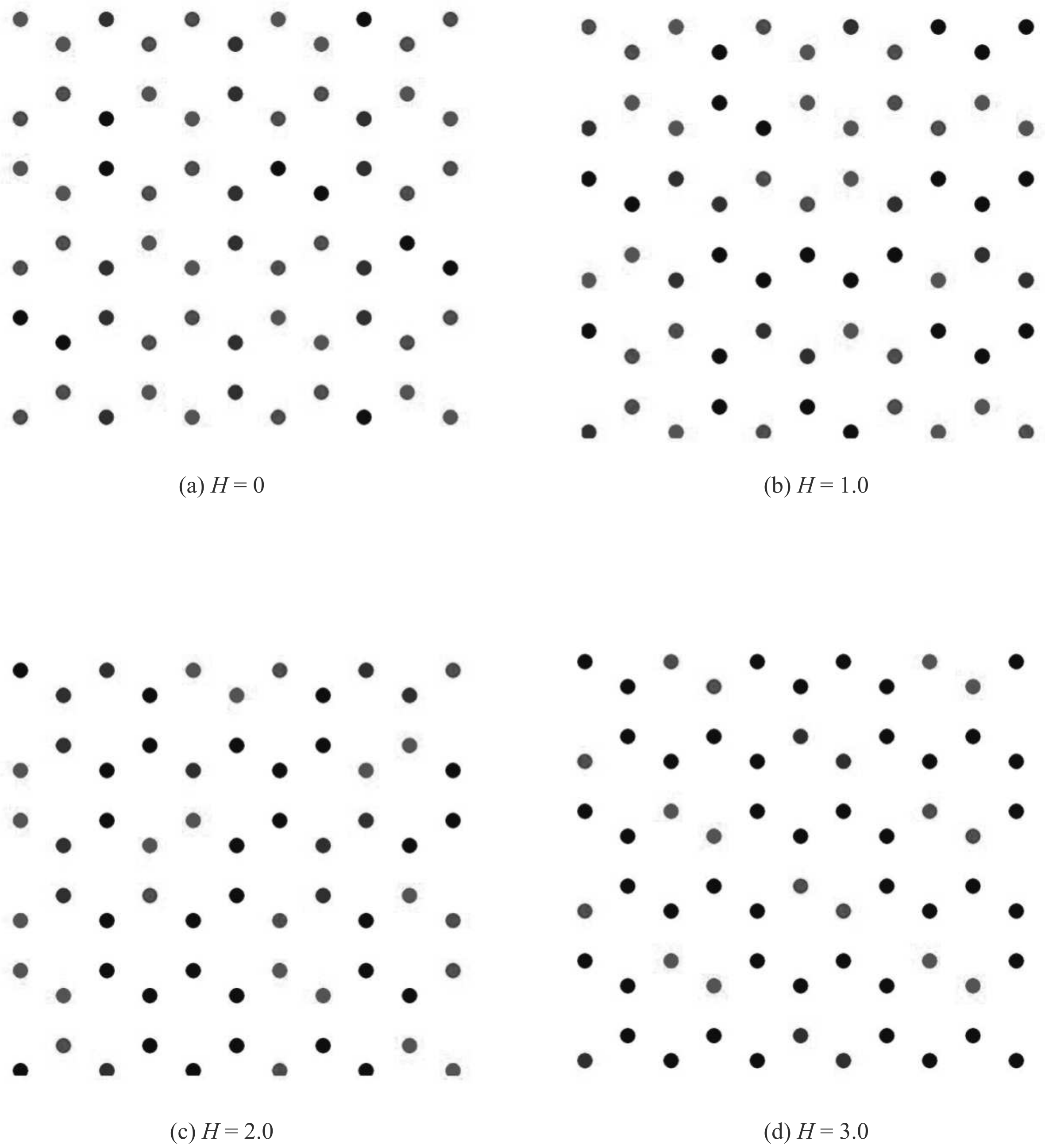

Рис. 2. (Цветной онлайн) Магнитные структуры основного состояния. Кружками одного и того же цвета обозначены спины, имеющие одинаковое направление

точным условием для ФП первого рода. Двойные пики на гистограммах распределения для исследуемой модели наблюдаются для значений поля в интервале $0.0 \le H \le 3.5$, кроме значения поля $H = 1.5$. Это позволяет нам утверждать о том, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдаются ФП первого рода. Для значения поля $H = 1.5$, наблюдается один максимум. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии свидетельствует в пользу ФП второго рода. Можно предположить, что смена типа ФП связана с изменением магнитной структуры основного состояния под влиянием внешнего магнитного поля.

4. Заключение. Исследование влияния слабых магнитных полей на фазовые переходы, магнитные структуры основного состояния и магнитные свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с взаимо-

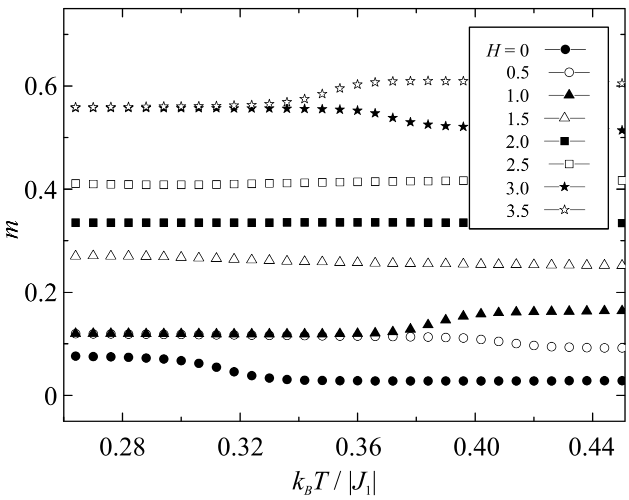

Рис. 3. Температурные зависимости параметра порядка

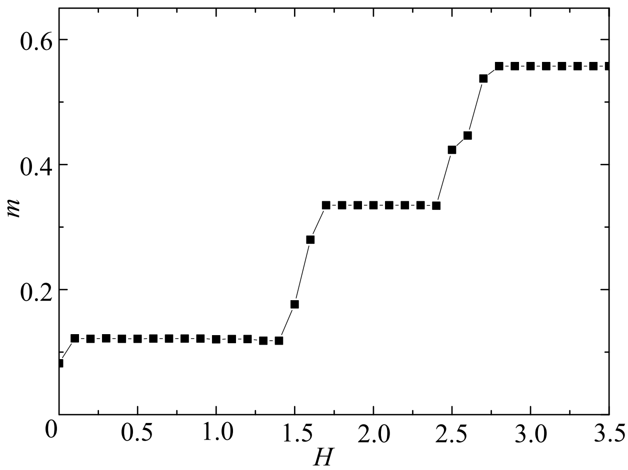

Рис. 4. Фазовая диаграмма зависимости параметра порядка от магнитного поля. Магнитное поле H приводится в единицах J_1

действиями вторых ближайших соседей выполнено с использованием репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений поля. Построена фазовая диаграмма зависимости параметра порядка от величины магнитного поля. Показано, что в интервале значений $0.0 \leq H \leq 3.5$, кроме значения $H = 1.5$ наблюдается фазовый переход первого рода. Для поля $H = 1.5$ наблюдается фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта # 19-02-00153-а.

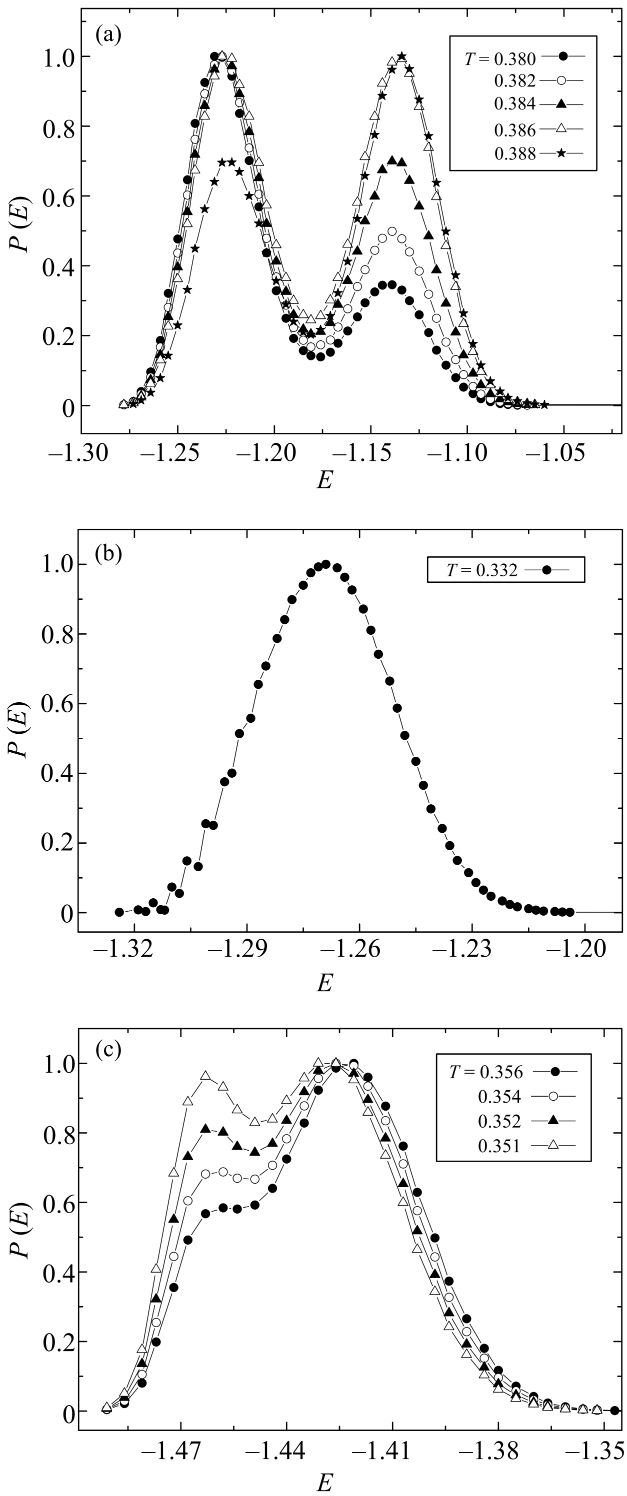

Рис. 5. Гистограммы распределения энергии: (a) – $H = 1.0$, (b) – $H = 1.5$, (c) – $H = 2.0$. Энергия E приведена в единицах J_1

1. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
2. A. Malakis, P. Kalozoumis, and N. Tyraskis, Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).

3. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
4. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова, О. А. Петренко, А. Я. Шапиро, Л. Н. Демьянец, Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
5. M. Kazuaki and O. Yukiyasu, Phys. Rev. B **101**, 184427 (2020).
6. R. Masrour and A. Jabar, Physica A **541**, 123377 (2020).
7. R. Masrour and A. Jabar, Physica A **491**, 926 (2018).
8. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
9. M. Gvozdikova, P. Melchy, and M. Zhitomirsky, J. Phys. Condens. Matter **23**, 164209 (2011).
10. A. Chubokov and D. Golosov, J. Phys. Condens. Matter **3**, 69 (1991).
11. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
12. А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
13. H. Kawamura, A. Yamamoto, and T. Okubo, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 023701 (2010).
14. H. Feldmann, A. J. Guttmann, I. Jensen, R. Shrock, and S.-H. Tsai, J. Phys. A **31**, 2287 (1998).
15. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).
16. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Мазагаева, М. А. Магомедов, ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
17. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Мазагаева, ФТТ **62**, 442 (2020).
18. A. K. Murtazaev, M. K. Badiev, M. K. Ramazanov, and M. A. Magomedov, Physica A **555**, 124530 (2020).
19. A. K. Murtazaev, D. R. Kurbanova, and M. K. Ramazanov, Physica A **545**, 123548 (2020).
20. R. Masrour, A. Jabar, A. Benyoussef, and M. Hamedoun, J. Magn. Magn. Mater. **401**, 695 (2016).
21. A. A. Gangat and Y.-J. Kao, Phys. Rev. B **100**, 094430 (2019).
22. V. T. Ngo, D. T. Hoang, and H. T. Diep, J. Phys. Condens. Matter **23**, 226002 (2011).
23. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **109**, 423 (2019).
24. А. О. Сорокин, Письма в ЖЭТФ **111**, 34 (2020).
25. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
26. А. К. Муртазаев, М. К. Мазагаева, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, А. А. Муртазаева, ФТТ **63**, 622 (2021).
27. А. К. Муртазаев, М. К. Мазагаева, М. К. Рамазанов, М. А. Магомедов, ФММ **122**, 460 (2021).
28. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
29. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
30. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).