

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА И ОСНОВНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЕКОРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ПЕРВЫХ СОСЕДЕЙ И АНТИФЕРРОМАГНИТНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ВТОРЫХ

*В. А. Мутайламов**, *А. К. Муртазаев*

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

Поступила в редакцию 18 апреля 2022 г.,
после переработки 8 августа 2022 г.
Принята к публикации 8 августа 2022 г.

С помощью методов вычислительной физики исследовано статическое критическое поведение двумерной декорированной ферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке. Для узловых спинов учитывалось ферромагнитное обменное взаимодействие первых ближайших соседей и антиферромагнитное обменное взаимодействие следующих за ближайшими соседями. Обменное взаимодействие J_d между узловыми спинами и декорированными изменялось в пределах $[-3.0; 3.0]$. Для различных значений J_d определено основное состояние модели, вычислены критические температуры, построена фазовая диаграмма. Показано, что величина обменного взаимодействия с декорированными спинами влияет на род фазового перехода в парамагнитное состояние.

DOI: 10.31857/S0044451022120100
EDN: LDTWSG

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в современной физике конденсированного состояния возрос интерес к исследованию декорированных структур благодаря разнообразию наблюдаемых в них новых явлений и особенностей по сравнению с исходными недекорированными решетками. Внедрение декорированных спинов в магнитную решетку приводит к появлению конкурирующих взаимодействий, что, в свою очередь, может служить причиной появления большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними. В частности, декорирование порождает множество фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, существующих в недекорированных решетках, так и к возникновению новых фазовых переходов. Кроме того, появляются новые

типы частичного упорядочения, а также дополнительные экстремумы теплоемкости.

Понятие декорированная решетка, относящееся к магнитной модели Изинга, впервые предложено в 1951 году в работе Сиози [1]. Суть его заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки. Это понятие можно обобщить и на другие типы кристаллических решеток. Фактически, подавляющее большинство реальных структур являются декорированными.

Большого прогресса достигло исследование планарных декорированных структур методами теоретической физики. Так, например, найдены точные решения для декорированных моделей со смешанными спинами на двумерной квадратной решетке [2, 3], точное решение для двукратно декорированной модели на квадратной решетке [4]. Исследованы магнитные и магнитокалорические свойства с построением фазовых диаграмм основного состояния модели Изинга со смешанными спинами на треугольной решетке [5]. Изучены декорированные структуры на квадратной решетке с многоспиновым взаимодействием [6, 7].

* E-mail: vadim.mut@mail.ru

При изучении критических свойств моделей магнитных материалов, для которых нет точного аналитического решения, успешно применяются методы вычислительной физики. Это, как правило, модели со сложным гамильтонианом, учитывающим влияние дополнительных факторов. Методы вычислительной физики строго математически обоснованы и позволяют исследовать критические свойства широкого спектра магнитных моделей. Данные методы применялись нами ранее для изучения критических свойств декорированной модели Изинга на квадратной [8, 9] и кубической [10] решетках.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Методами численного эксперимента мы исследовали статическое критическое поведение двумерной декорированной модели Изинга на треугольной решетке. В обменном взаимодействии между узловыми спинами учитываются как ближайшие соседи (первые соседи), так и следующие за ближайшими (вторые соседи). Также узловые спины взаимодействуют с ближайшими декорированными спинами, расположенными между узлами решетки. Декорированные спины между собой не взаимодействуют.

Схематически структура решетки приведена на рис. 1. Как видно на рисунке, каждый узловой спин имеет восемнадцать соседей: шесть первых узловых, шесть вторых узловых и шесть декорированных. Каждый декорированный спин имеет лишь два ближайших узловых соседа. На каждую кристаллографическую ячейку приходится один узловой спин и три декорированных.

Гамильтониан исследованной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{i,j} S_i S_j - \frac{1}{2}J_2 \sum_{k,l} S_k S_l - \frac{1}{2}J_d \sum_{m,n} S_m S_n, \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки i , первая сумма учитывает обменное взаимодействие между ближайшими узловыми спинами, вторая — обменное взаимодействие между следующими за ближайшими узловыми спинами, третья — обменное взаимодействие между узловыми и декорированными спинами. В данной работе мы ограничились частным случаем, когда взаимодействие между первыми соседями является ферромагнитным с величиной $J_1 = 1$, а взаимодействие между вторыми соседями

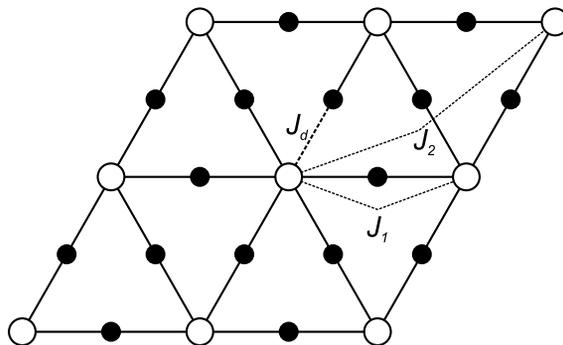


Рис. 1. Декорированная модель Изинга на треугольной решетке (о — узловые спины, • — декорированные)

антиферромагнитным с величиной $J_2 = -1$. Значения J_1 и J_2 не изменялись в ходе моделирования. Обменное взаимодействие между узловыми спинами и декорированными изменялось в широких пределах от антиферромагнитного с величиной $J_d = -3$ до ферромагнитного $J_d = 3$.

Отметим, что соотношение $J_1 = J_2 = 1$ не представляет значительного интереса, так как в этом случае отсутствует конкуренция обменных взаимодействий. И тип упорядочения в основном состоянии будет зависеть от знака обменного взаимодействия между узловыми и декорированными спинами: ферромагнитное при $J_d > 0$ и антиферромагнитное при $J_d < 0$ (все узловые спины направлены в одну сторону, все декорированные в другую).

В процессе исследований мы моделировали решетку с периодическими граничными условиями, содержащую $L \times L$ элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Решетка ориентировалась в пространстве таким образом, чтобы спины лежали в плоскости xy декартовой системы координат, сами спины при этом направлены перпендикулярно этой плоскости.

Для получения температурных зависимостей термодинамических величин, построения фазовой диаграммы и определения равновесных конфигураций спиновой системы при различных значениях температуры T мы применяли репличный вариант алгоритма Метрополиса [11, 12]. Моделировались решетки с линейными размерами $L = 24$, содержащие $N = 2304$ спинов.

В ходе вычислений для приведения спиновой системы в состояние термодинамического равновесия отбрасывался начальный неравновесный участок марковской цепи в $7 \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло на спин, заведомо больший, чем время релаксации исследуемой модели. В равновесном состоянии вы-

числялись средние по ансамблю значения термодинамических величин. Длина равновесного участка составляла $3 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин. Результаты получены в температурном интервале от $T = 10^{-3}$ до $T = 5$ с шагом от $\Delta T = 10^{-3}$ (температура приведена в единицах обменного интеграла $k_B T / |J_1|$, где k_B — постоянная Больцмана). В отдельных случаях минимальное значение температуры составило $T = 10^{-4}$ с шагом $\Delta T = 10^{-5}$, а линейный размер достигал значения $L = 96$ ($N = 36\,864$ спинов).

Для определения основного состояния спиновой системы при различных значениях J_d мы использовали метод Ванга–Ландау [13], которым моделировались решетки с линейным размером $L = 12$, содержащие $N = 576$ спинов. Также метод Ванга–Ландау использовался для получения температурных зависимостей энтропии. Для построения гистограмм энергии в точке фазового перехода мы применяли стандартный алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло [14, 15]. Данным алгоритмом моделировались решетки с линейным размером до $L = 96$ включительно, содержащие до $N = 36\,864$ спинов. Длина равновесного участка в этом случае составляла до $9 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Основное состояние

Для определения основного состояния анализировались спиновые конфигурации, получаемые в ходе моделирования методом Ванга–Ландау, соответствующие минимуму энергии. Исходная недекорированная модель Изинга на треугольной решетке при $J_1 = 1$ и $J_2 = -1$ имеет так называемое страйповое упорядочение спиновой системы, при котором формируются полосовые (страйповые) структуры шириной в два спина. Внутри каждой полосы спины направлены в одну сторону, направление спинов в соседних полосах противоположно друг другу. Полосы направлены случайным образом вдоль одной из кристаллографических осей. Пример страйпового упорядочения недекорированной решетки приведен на рис. 2. Здесь и далее цветом выделены два противоположных направления спинов. Очевидно, что данная структура спиновой системы является антиферромагнитной. Суммарный магнитный момент решетки равен нулю.

Основное состояние декорированной решетки зависит от величины и знака обменного взаимодействия J_d . При значениях $J_d \leq 1$ модель имеет анти-

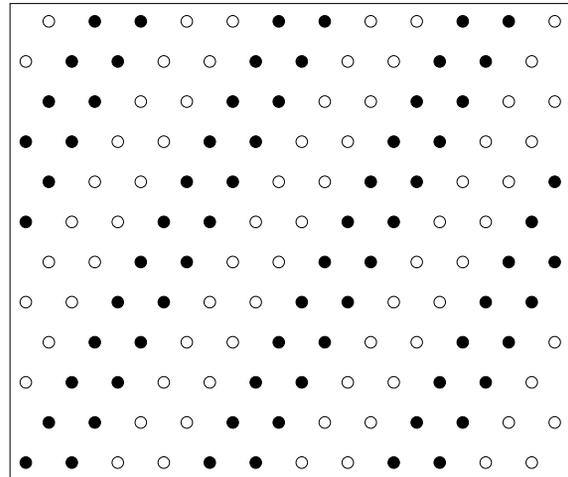


Рис. 2. Страйповое упорядочение в основном состоянии исходной недекорированной решетки. Цветом выделены два противоположных направления спинов

ферромагнитное упорядочение, а при $J_d > 1$ ферромагнитное. В свою очередь, тип антиферромагнитного упорядочения различается в областях значений $J_d < -1$, $-1 \leq J_d < 0$ и $0 < J_d \leq 1$.

При $J_d < -1$ все узловые спины решетки направлены в одну сторону, а все декорированные в другую. Число узловых спинов составляет $1/4$ от общего числа спинов, число декорированных $3/4$. В результате суммарный магнитный момент оказывается нескомпенсированным на величину $1/2$, т.е. модель фактически является ферромагнитной.

При $-1 \leq J_d < 0$ подрешетка узловых спинов и подрешетка декорированных спинов имеют страйповое антиферромагнитное упорядочение. При этом направления узловых и декорированных спинов внутри одной полосы взаимно противоположны. Упорядочение подрешетки узловых спинов такое же, как и в случае недекорированной решетки. Сказанное демонстрирует рис. 3, на котором изображено основное состояние модели при $J_d = -0.5$. Для наглядности приведено основное состояние как всех спинов (a), так и по отдельности узловых (n) и декорированных (d). Как видно на рисунке, спиновые полосы декорированной подрешетки не имеют четкой границы. Разделительные линии состоят из спинов, направленных случайным образом в разные стороны. Это говорит о том, что в модели присутствует частичное вырождение в основном состоянии. При этом вырождена не вся спиновая система, а только спины, расположенные на границах полос декорированной подрешетки.

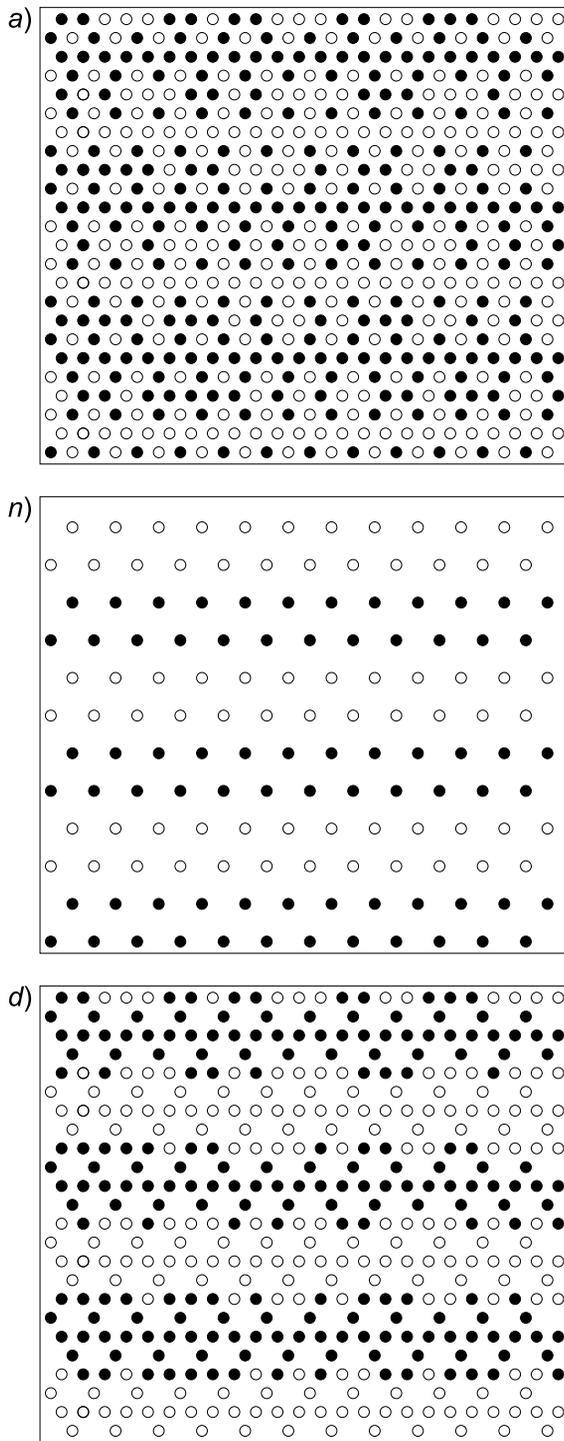


Рис. 3. Конфигурация основного состояния всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов при $J_d = -0.5$

При $0 < J_d \leq 1$ мы также имеем страйповое антиферромагнитное упорядочение, когда спиновые полосы декорированной подрешетки не имеют четких границ, а в модели присутствует частичное вырождение. Отличие от $-1 \leq J_d < 0$ в том, что в

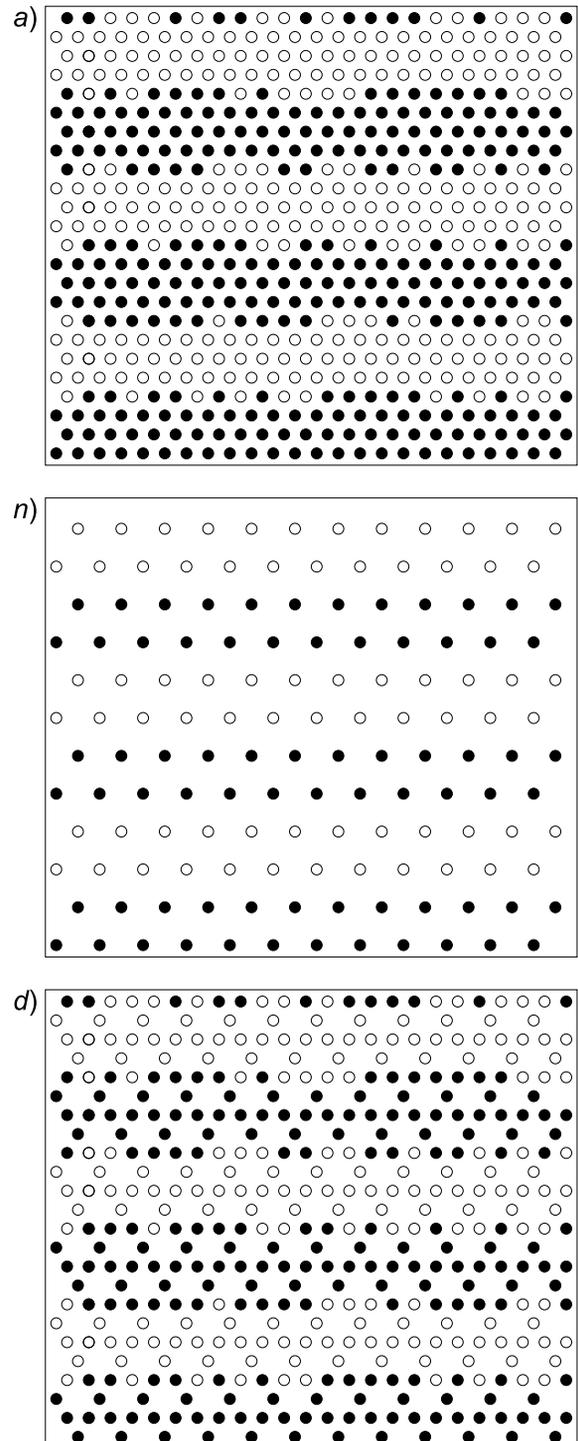


Рис. 4. Конфигурация основного состояния всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов при $J_d = 0.5$

данном случае направления узловых спинов и декорированных спинов внутри одной полосы совпадают друг с другом (рис. 4).

При значениях $J_d > 1$ система находится в ферромагнитном состоянии: узловые и декорированные

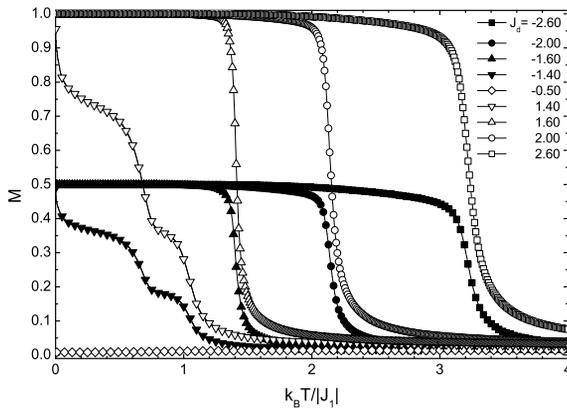


Рис. 5. Зависимость модуля намагниченности от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d

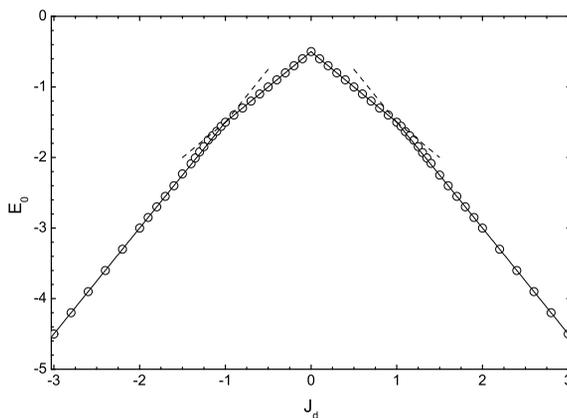


Рис. 6. Зависимость энергии основного состояния от величины обменного взаимодействия J_d . Линии — значения, рассчитанные из гамильтониана (1); точки — результат численного моделирования

спины направлены в одну сторону.

В частном случае $J_d = 0$ подрешетка узловых спинов имеет страйповое упорядочение, а подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Модель вырождена в основном состоянии.

3.2. Термодинамические функции

На рис. 5 представлена зависимость модуля намагниченности M от температуры для различных значений обменного взаимодействия J_d (здесь и далее все величины приведены в относительных единицах). На графике хорошо виден переход из ферромагнитного состояния в парамагнитное при значениях $J_d > 1$ и из антиферромагнитного в парамагнитное при $J_d < -1$. Температуры переходов для

одинаковых по модулю значений J_d совпадают между собой. С увеличением величины $|J_d|$ область перехода смещается в сторону более высоких температур. Для всех значений обменного взаимодействия в интервале $|J_d| \leq 1$ кривые намагниченности лежат вблизи нулевого значения и накладываются друг на друга, поэтому на графике для наглядности приведена только одна кривая для случая $J_d = -0.5$.

Обращает на себя внимание резкий спад намагниченности для $|J_d| = 1.40$. По всей видимости, при таких значениях J_d в спиновой системе возрастают фрустрационные эффекты, вызванные конкуренцией обменных взаимодействий. Даже небольшое повышение температуры приводит к выходу спиновой системы из упорядоченного состояния. С дальнейшим уменьшением $|J_d|$ спад намагниченности становится более резким, и в интервале $1 < |J_d| < 1.3$ происходит при температурах $T < 10^{-4}$. К сожалению, более точно определить его границы в этом интервале нам не удалось.

На рис. 6 представлена зависимость энергии основного состояния E_0 от обменного взаимодействия J_d . Линиями на графике представлено расчетное значение энергии, полученное прямыми вычислениями гамильтониана (1) для спиновых конфигураций, соответствующих минимуму энергии (метод Ванга–Ландау). Точками представлены результаты численного моделирования при $T \rightarrow 0$ (репличный алгоритм Метрополиса). На рисунке наглядно виден кроссовер из антиферромагнитного основного состояния в страйповое антиферромагнитное при $J_d = -1$ и дальнейший кроссовер в ферромагнитное при $J_d = 1$. Результаты численного эксперимента точно совпадают с расчетными значениями за исключением области $1 < |J_d| < 1.3$. В этой области результаты моделирования показывают значение E_0 несколько больше расчетного, что подтверждает предположение о том, что спиновая система выходит из упорядоченного состояния при очень малых значениях температур $T < 10^{-4}$.

Отметим, что в точке $J_d = -1.0$ антиферромагнитная конфигурация спинов и страйповая антиферромагнитная конфигурация имеют одинаковое значение минимальной энергии E_0 . Теоретически это означает, что при такой величине обменного взаимодействия могут наблюдаться оба типа основного состояния. Но на практике мы наблюдали только страйповое упорядочение. Вероятная причина этого в том, что страйповое антиферромагнитное состояние является вырожденным и вероятность появления любой из множества его конфигураций намного выше, чем антиферромагнитного состояния.

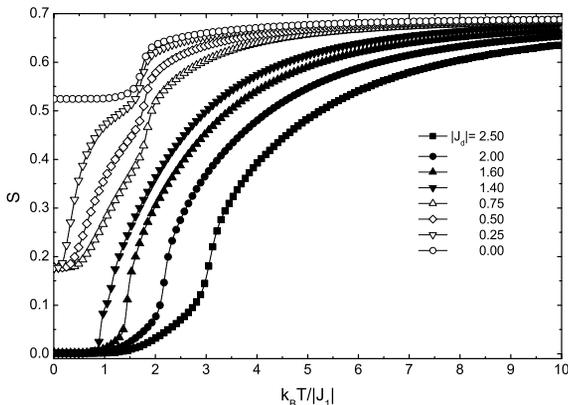


Рис. 7. Зависимость энтропии от температуры при различных значениях обменного взаимодействия J_d

Аналогичная ситуация наблюдалась и при $J_d = 1.0$.

Температурные зависимости энтропии S приведены на рис. 7. Кривые энтропии для равных по модулю значений J_d точно накладываются друг на друга. Как следует из графика, энтропия в основном состоянии $S_0 \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$ для значений обменного интеграла $|J_d| > 1$. При $|J_d| \leq 1$ энтропия в основном состоянии отлична от нуля, что также указывает на наличие вырождения. В интервале $0 < |J_d| \leq 1$ для линейного размера $L = 12$ значение энтропии в основном состоянии составило $S_0 = 0.18(1)$. При $J_d = 0$ степень вырождения больше (вырождено большее количество спинов) и энтропия в основном состоянии увеличивается до $S_0 = 0.52(1)$. С ростом температуры энтропия для всех значений обменного взаимодействия стремится к величине $S = \ln(2)$.

На рис. 8 представлена зависимость теплоемкости C от температуры для различных значений обменного взаимодействия $|J_d| < 1$. Как и в случае с энтропией, графики для равных по модулю значений J_d накладываются друг на друга. Из графика следует, что в этом диапазоне температура перехода в парамагнитное состояние слабо зависит от величины обменного взаимодействия J_d . При $|J_d| = 0.2$ заметен второй максимум теплоемкости при низких температурах. Он имеет более широкую форму и меньше по высоте, чем максимум, приходящийся на температуру перехода в парамагнитное состояние. С ростом $|J_d|$ низкотемпературный максимум смещается в сторону более высоких температур, его высота уменьшается, а форма становится более широкой. После $|J_d| = 0.5$ обнаружить его не удалось. Появление низкотемпературного максимума в этой области связано с особенностями упорядочения магнитных подрешеток исследуемой модели.

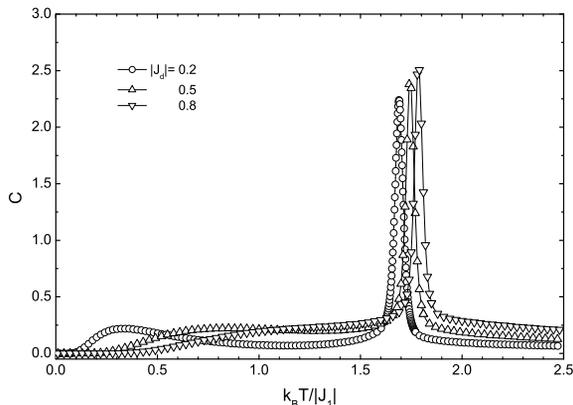


Рис. 8. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $|J_d| < 1$

Исследование равновесных спиновых конфигураций при различных температурах в интервале значений обменных взаимодействий $0 < |J_d| < 1$ показало, что подрешетка узловых спинов и подрешетка декорированных спинов приходят в разупорядоченное состояние при разных температурах. Подрешетка узловых спинов сохраняет свое страйповое упорядочение вплоть до области перехода в парамагнитное состояние. Подрешетка декорированных спинов переходит в разупорядоченное состояние при более низких температурах. Это связано с тем, что обменное взаимодействие с декорированным спином $|J_d|$ меньше, чем с узловыми $|J_1| = |J_2|$. И чем меньше $|J_d|$, тем раньше декорированная подрешетка приходит в разупорядоченное состояние.

Переход в разупорядоченное состояние сопровождается ростом флуктуаций, что и приводит к появлению максимумов теплоемкости. Первый по температуре максимум соответствует разупорядочению подрешетки декорированных спинов, второй соответствует разупорядочению подрешетки узловых спинов. Таким образом, спиновая система сначала переходит из упорядоченной фазы в частично разупорядоченную, а затем только в парамагнитную. На графиках энтропии при $|J_d| = 0.25$ и $|J_d| = 0.50$ можно увидеть два характерных излома, приходящихся на температуру этих переходов (рис. 7).

Частично разупорядоченное состояние представлено на рис. 9, где изображена равновесная спиновая конфигурация для $J_d = 0.5$ при температуре $T = 1.49$. Основное состояние для этой же величины J_d было ранее представлено на рис. 4. На рисунках наглядно видно, что подрешетка узловых спинов сохраняет свое упорядоченное состояние при $T = 1.49$. Лишь два узловых спина из-за тепловых флуктуаций при данной температуре ориентирова-

ны «неправильно». При этом подрешетка декорированных спинов полностью разупорядочена. Отметим, что для $J_d = 0.5$ переход из упорядоченной фазы в частично разупорядоченную в нашем численном эксперименте происходил при температуре $T = 0.85(1)$, а переход в парамагнитную фазу при $T = 1.74(1)$.

Зависимость теплоемкости от температуры в области $1 < |J_d| < 1.3$ приведена на рис. 10. Здесь также заметны дополнительные максимумы при низких температурах. Анализ наших результатов показывает, что при отрицательных значениях J_d в этой температурной области происходит переход из антиферромагнитной в страйповую антиферромагнитную фазу, в которой направления узловых и декорированных спинов внутри полосы взаимно противоположны. Соответственно, при положительных значениях J_d происходит переход из ферромагнитной в страйповую антиферромагнитную фазу, в которой направления узловых и декорированных спинов внутри полосы совпадают. Нам не удалось выяснить, почему с ростом тепловых флуктуаций энергетически более выгодной становится страйповая фаза. Максимумы теплоемкости на рис. 10 при более высоких температурах приводят к переходу из страйповой фазы в парамагнитную.

При значениях $|J_d| > 1.4$ дополнительных максимумов теплоемкости не наблюдается (рис. 11). Модель переходит из ферромагнитного и антиферромагнитного состояния сразу в парамагнитное. Наблюдается значительная зависимость температуры перехода от величины обменного взаимодействия J_d .

3.3. Фазовая диаграмма

Температурные зависимости теплоемкости для различных значений обменного взаимодействия J_d использовались нами для построения фазовой диаграммы. Границы фаз определялись по положению максимумов теплоемкости. Итоговая фазовая диаграмма исследуемой модели для линейного размера $L = 24$ приведена на рис. 12. Страйповая антиферромагнитная фаза, в которой узловые и декорированные спины внутри полосы направлены во взаимно противоположных направлениях, условно обозначена на рисунке как ST_1 . Соответственно, страйповая антиферромагнитная фаза, в которой узловые и декорированные спины внутри полосы направлены в одном направлении, условно обозначена как ST_2 . Остальные фазы расшифрованы в подписи к рисунку.

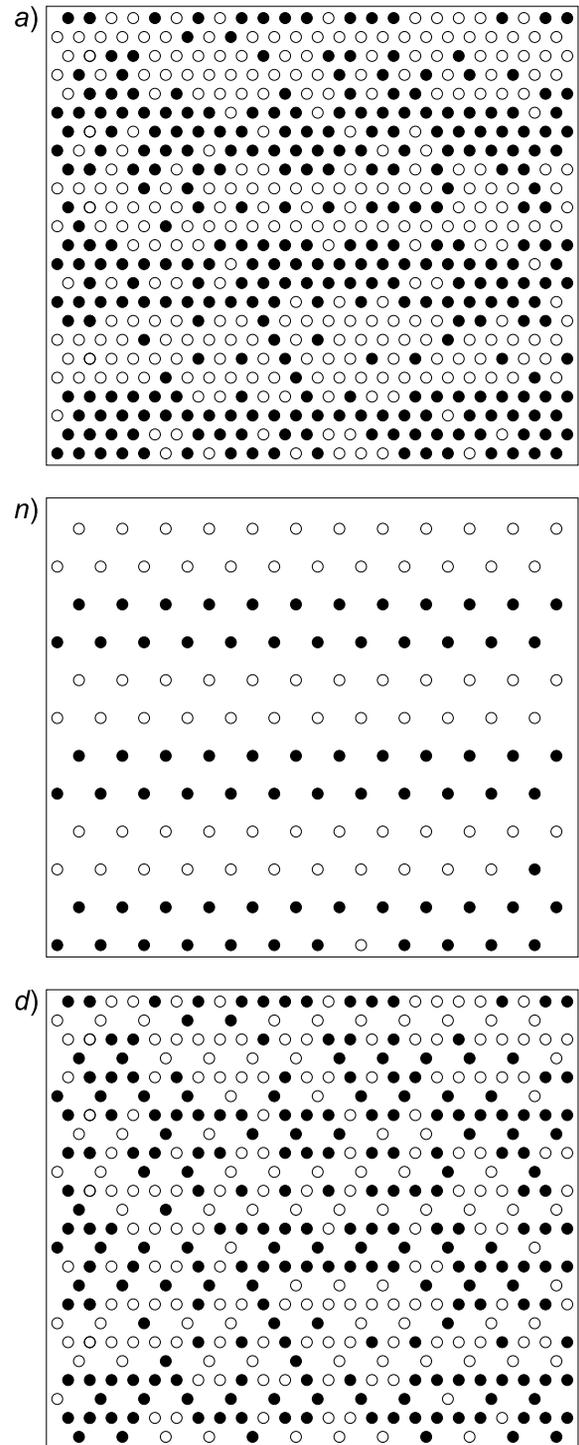


Рис. 9. Равновесная конфигурация всех (a), узловых (n) и декорированных (d) спинов для $J_d = 0.5$ при температуре $T = 1.49$

Исследование равновесных спиновых конфигураций при различных температурах в интервале $0.5 < |J_d| < 1$ показало, что декорированная подрешетка также переходит в разупорядоченное состоя-

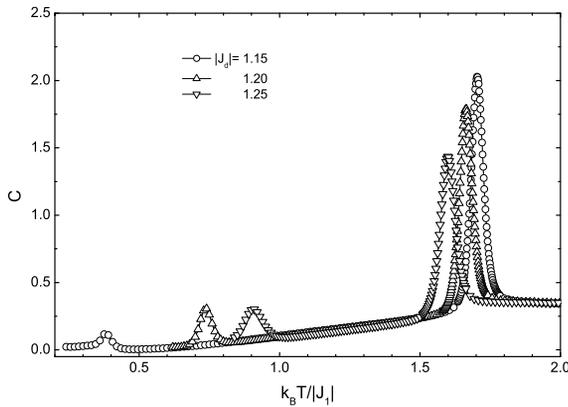


Рис. 10. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $1 < |J_d| < 1.3$

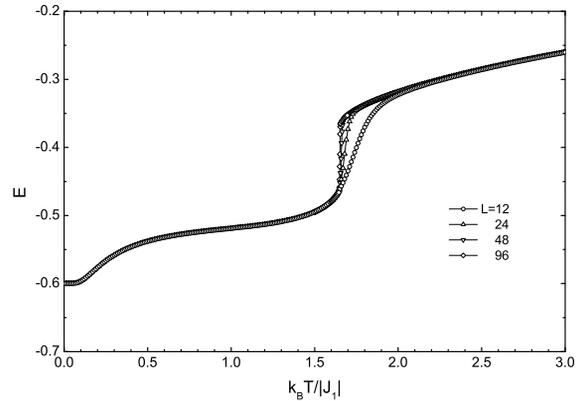


Рис. 13. Зависимость энергии от температуры для различных линейных размеров L при значении обменного взаимодействия $|J_d| = 0.1$

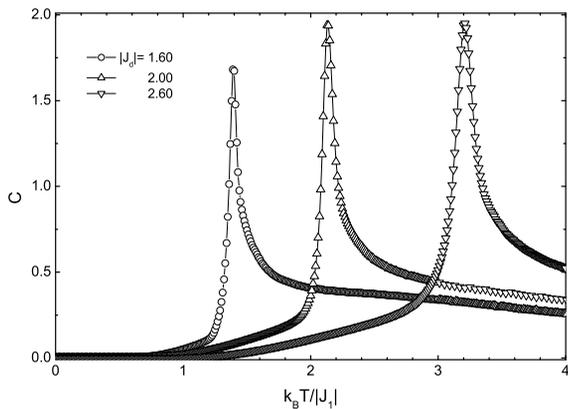


Рис. 11. Зависимость теплоемкости от температуры при различных значениях обменного взаимодействия $|J_d| > 1.4$

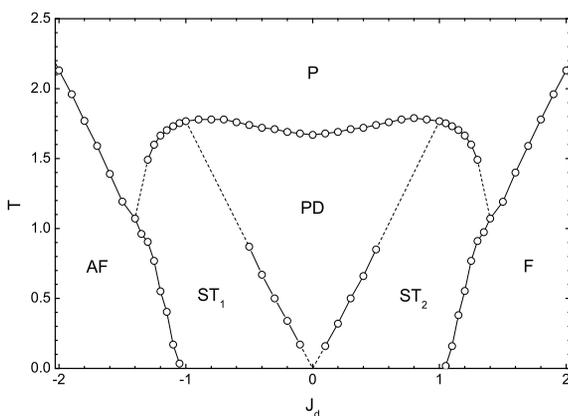


Рис. 12. Фазовая диаграмма, построенная по максимумам теплоемкости для линейного размера $L = 24$. AF — антиферромагнитная фаза, F — ферромагнитная, ST — страйповая антиферромагнитная, PD — частично разупорядоченная, P — парамагнитная

ние раньше узловой подрешетки, как и в интервале $0 < |J_d| \leq 0.5$. Но переход этот происходит более плавно, явно выраженных максимумов теплоемкости не наблюдается, определить точную температуру перехода не удалось. Поэтому границы между страйповыми и частично разупорядоченной фазой в этой области обозначены пунктирной линией. Очевидно, что предел этой границы будет наблюдаться в точке $|J_d| = 1$, где все три обменных взаимодействия равны по модулю друг другу. В этой точке и узловая подрешетка, и декорированная переходят в разупорядоченное состояние при одинаковой температуре.

Также пунктиром проведены границы раздела между страйповыми и парамагнитной фазами в интервале $1.3 < |J_d| < 1.4$. Ярво выраженных вторых максимумов теплоемкости в этом интервале мы не обнаружили. Но на рис. 5 видно, что намагниченность при $|J_d| = 1.4$ имеет два характерных изгиба, соответствующих двум фазовым переходам при разных температурах. Аналогичное поведение намагниченности наблюдалось и при других значениях обменного взаимодействия J_d из этого интервала. Это позволяет предположить, что границы раздела фаз в этой области приходят примерно так, как это изображено на рисунке пунктирной линией.

По всей видимости упомянутые выше погрешности в определении фазовых границ связаны с малыми линейными размерами исследованной модели. С увеличением линейных размеров следует ожидать появления вторых максимумов теплоемкости в интервалах обменного взаимодействия $0.5 < |J_d| < 1$ и $1.3 < |J_d| < 1.4$.

3.4. Род фазового перехода

На рис. 13 приведена температурная зависимость полной энергии спиновой системы E для различных линейных размеров L при значении обменного взаимодействия $|J_d| = 0.1$. Из графика видно, что при температуре перехода модели в парамагнитное состояние энергия изменяется скачком. С увеличением линейных размеров скачок становится более выраженным и происходит во все более узком температурном интервале. Такое поведение теплоемкости характерно для фазовых переходов первого рода. Для уточнения типа перехода мы дополнительно использовали производную логарифма плотности состояний по энергии и гистограммы энергии.

Производная логарифма плотности состояний $g(E)$ по энергии E позволяет получить зависимость обратной температуры от энергии. В случае фазового перехода первого рода эта зависимость имеет характерную S-образную форму, симметричную относительно горизонтальной линии, соответствующей обратной температуре фазового перехода $1/T_c$ [16]. В случае фазового перехода второго рода график производной имеет горизонтальный участок, приходящийся на значение $1/T_c$.

Моделирование алгоритмом Метрополиса генерирует ненормализованное каноническое распределение при заданной температуре. В случае фазового перехода первого рода распределение при температуре фазового перехода будет иметь два максимума, расположенных симметрично относительно равновесного значения энергии [17]. В случае фазового перехода второго рода должен наблюдаться один максимум, приходящийся на равновесное значение энергии. Форму канонического распределения воспроизводит гистограмма энергии, которая показывает, сколько раз в процессе моделирования выпало то или иное энергетическое состояние спиновой системы.

Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии для линейного размера $L = 12$ при величине обменного взаимодействия $J_d = -0.1$ приведена на рис. 14. Нормированная на максимальное значение гистограмма энергии для различных линейных размеров при $J_d = -0.1$ приведена на рис. 15. Оба графика подтверждают предположение о наличии фазового перехода первого рода при $J_d = -0.1$. Аналогичная картина наблюдалась на-

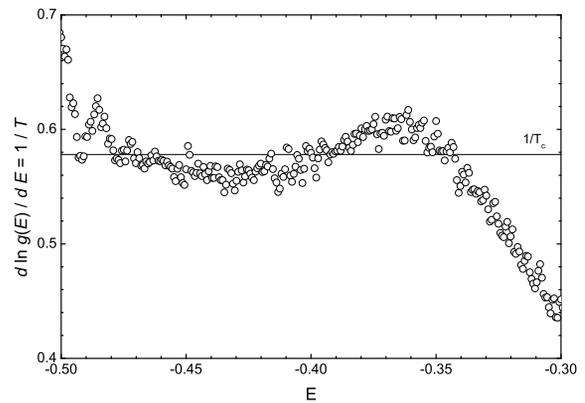


Рис. 14. Зависимость производной логарифма плотности состояний от энергии, $L = 12$, $J_d = -0.1$

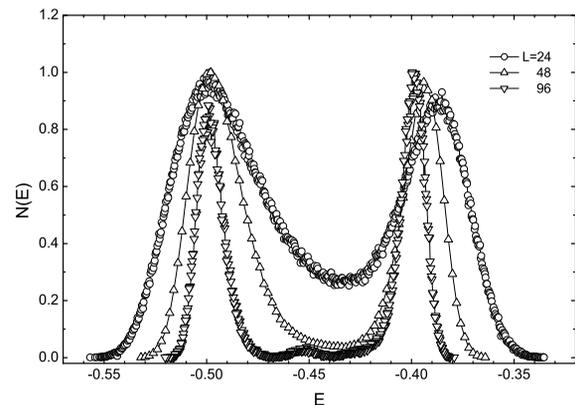


Рис. 15. Гистограмма энергии для различных линейных размеров L , $J_d = -0.1$

ми в интервале значений обменного взаимодействия $0 \leq |J_d| \leq 1$. При $|J_d| > 1.4$ признаков фазового перехода первого рода не обнаружено: отсутствует скачок энергии; не наблюдается S-образная форма производной логарифма плотности состояний; на гистограмме энергии присутствует только один максимум.

Таким образом, наши результаты показывают, что для исследованных линейных размеров переход в парамагнитное состояние в интервале значений обменного взаимодействия $0 \leq |J_d| \leq 1$ является фазовым переходом первого рода, а в области $|J_d| > 1$ фазовым переходом второго рода. Отметим, что в исходной недекорированной модели Изинга при $J_1 = 1$ и $J_2 = -1$ переход в парамагнитное состояние является фазовым переходом первого рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Добавление декорированных спинов в ферромагнитную модель Изинга на треугольной решетке может в значительной степени изменять свойства модели. От величины и знака обменного взаимодействия между узловыми спинами и декорированными зависит тип упорядочения в основном состоянии, появляются фрустрационные эффекты, возникают дополнительные экстремумы теплоемкости, изменяется род фазового перехода в парамагнитную фазу. Добавление декорированных спинов меняет род фазового перехода исходной решетки в том случае, когда модуль величины обменного взаимодействия с декорированными спинами становится больше модуля величины обменного взаимодействия узловых спинов.

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Syozi, Prog. Theor. Phys. **35**, 306 (1951).
2. J. Strečka, M. Rebič, O. Rojas, and S. M. de Souza, J. Mag. Magn. Mater. **469**, 655 (2019).
3. J. Strečka, O. Rojas, and S. M. de Souza, Phys. Lett. A **383**, 2451 (2019).
4. H. Čenčariková, J. Strečka, and M. L. Lyra, J. Mag. Magn. Mater. **401**, 1106 (2016).
5. L. Gálisová and J. Strečka, Physica E **99**, 244 (2018).
6. M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szałowski et al., J. Mag. Magn. Mater. **417**, 92 (2016).
7. V. Štubňa and M. Jaščur, J. Mag. Magn. Mater. **442**, 364 (2017).
8. Ф. А. Кассан-Оглы, А. И. Прошкин, А. К. Муртазаев и др., ФТТ **62**, 683 (2020).
9. V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev, Low Temper. Phys. **46**, 1016 (2020).
10. В. А. Мутайламов, А. К. Муртазаев, ЖЭТФ **160**, 119 (2021).
11. K. Hukushima, H. Takayama, and K. Nemoto, Int. J. Mod. Phys. C **7**, 337 (1996).
12. M. Hagen, B. Kim, P. Liu, et al., J. Phys. Chem. B **111**, 1416 (2007).
13. D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler, Am. J. Phys. **72**, 1294 (2004).
14. D. P. Landau, Physica A **205**, 41 (1994).
15. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
16. Y. Komura and Y. Okabe, Phys. Rev. E **85**, 010102(R) (2012).
17. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).