Исследование модели Изинга на гексагональной решетке методом Ванга–Ландау

¹ Институт физики Дагестанского научного центра РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

² Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева 43а; magomedov_ma@mail.ru

Антиферромагнитная модель Изинга на гексагональной решетке исследована высокоэффективным алгоритмом Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Вычислена плотность состояний системы и рассчитаны температурные зависимости внутренней энергии U , свободной энергии F , энтропии S , теплоемкости C и кумулянтов Биндера U_{km} . Показано отсутствие вырождения основного состояния и наличие фазового перехода второго рода. Определена температура фазового перехода $T_N = 1.5$.

Ключевые слова: модель Изинга, плотность состояний, энтропия, фазовые переходы, метод Монте-Карло, алгоритм Ванга–Ландау.

В последние десятилетия значительное внимание уделяется экспериментальному и теоретическому исследованию различных низкоразмерных систем, в том числе наноструктур. Изучение различных свойств этих объектов открывает широкие перспективы для экспериментальных приложений. В ближайшие годы нанотехнологии позволят совершить поистине гигантский технологический скачок в самых различных областях науки и техники [1–6].

Одними из интересных низкоразмерных систем являются графен и графеноподобные наноструктуры, обладающие целым рядом уникальных свойств. Данные наносистемы обладают структурой, изображенной на рисунке 1. Нами проведены высокоточные исследования двумерной модели Изинга на гексагональной решетке. Данная модель достаточно хорошо описывает графен и подобные ему наносистемы [6, 7].

Схематически модель представлена на рисунке 1. Как видно из рисунка, спины в узлах решетки располагаются в двух подрешетках. Атомы, входящие в одну подрешетку **A**, обозначены на рисунке одним цветом, а атомы, входящие во вторую подрешетку **B**, – другим цветом. Каждый узел имеет трех ближайших соседей [7].

Гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \\ S_i = \pm 1. \quad (1)$$

При положительном обменном взаимодействии J все атомы в основном состоянии упорядочиваются одинаково, а при отрицательном значении J атомы образуют две подрешетки, спины в ко-

Рис. 1. Модель Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями.

торых направлены в основном состоянии антипараллельно. В данной модели нет вырождения и отсутствует фрустрация. Энтропия такой системы в основном состоянии должна быть равна нулю. Мы исследовали в данной работе антиферромагнитную модель Изинга ($J < 0$).

В последние годы низкоразмерные структуры интенсивно исследуются с помощью энтропийных методов Монте-Карло, одним из вариантов которого является алгоритм Ванга-Ландау [7–10]. Данный алгоритм позволяет найти функцию плотности состояний системы, зная которую можно легко рассчитать все остальные характеристики системы. Особенно эффективным алгоритм Ванга-Ландау оказался при моделировании различных наноструктур.

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. Подобрать такие вероятности перехода, при которых 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 $\ln g(E)$.

Важным обстоятельством является то, что плотность состояний $g(E)$ не зависит от температуры, следовательно, рассчитав ее однократно, мы можем вычислить значения любых термодинамических параметров системы при любой температуре.

В данной работе алгоритм Ванга-Ландау был использован нами в следующем виде [7].

- 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). В качестве критерия "плоскости" гистограммы нами принималось условие отклонения числа посещений всех возможных (с ненулевой плотностью $g(E) \neq 1$) энергетических состояний не более чем на 10 % от среднего значения по системе.

- При этом 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 для энергии E_2 проводится модификация плотности состояний $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$, и гистограммы $H(E_2) \rightarrow H(E_2)+1$ иначе меняем параметры для энергии E_1 : $g(E_1) \rightarrow f \times g(E_1)$, $H(E_1) \rightarrow H(E_1)+1$.

- Если гистограмма стала "плоской", то обнуляем гистограмму $H(E) \rightarrow 0$, уменьшаем модификационный фактор $f \rightarrow \sqrt{f}$ и продолжаем снова и снова пока модификационный фактор $f \geq f_{\min}$. В качестве минимального значения модификационного фактора нами принималось $f_{\min} = 1.0000000001$.

- После расчета плотности состояний системы для любой интересующей нас температуры рассчитываются различные термодинамические параметры, такие, как энтропия, внутренняя энергия, свободная энергия, теплоемкость, намагниченность, вос-

приемчивость и т. д. Некоторые формулы (2–6) для расчета термодинамических параметров приведены ниже.

Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [8–10].

Рис. 2. Плотность состояний $g(E)$ для модели Изинга на гексагональной решетке при различных линейных размерах системы

Расчитанная таким образом плотность состояний для антиферромагнитной модели Изинга на гексагональной решетке приведена на рисунке 2. Как видно из рисунка, основное состояние системы не вырождено, так как плотность состояний для основного состояния близка к нулю.

Зная плотность состояний системы, можно рассчитать любой интересующий нас термодинамический параметр $A(T)$ для любой температуры по следующей формуле:

$$A(T) = \frac{\sum_E A g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}}. \quad (2)$$

Например, внутренняя энергия U , свободная энергия F , энтропия S и теплоемкость C системы могут быть рассчитаны следующим образом:

$$U(T) = \frac{\sum_E E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle E \rangle_T, \quad (3)$$

$$F(T) = -k_B T \ln \left(\sum_E g(E) e^{-E/k_B T} \right), \quad (4)$$

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

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (6)$$

Рассчитанные из плотности состояний температурные зависимости различных термодинамических параметров приведены на рисунке 3. Отметим важную особенность алгоритма Ванга-Ландау: значения любых термодинамических параметров можно определить для любой температуры, с любым шагом, при этом объем необходимых вычислений, в отличие от других классических алгоритмов метода Монте-Карло, вырастает незначительно.

Температурные зависимости кумулянтов Биндера по параметру порядка и энтропии приведены на рисунке 4. Как видно из рисунка, при $T_N = 1.5$ в системе происходит фазовый переход второго рода. Энтропия при высоких температурах стремится к значению $\ln 2$, при низких температурах – к нулю (отсутствует вырождение), а в точке фазового перехода испытывает перегиб и не зависит от линейных размеров системы.

Рис. 3. Температурные зависимости внутренней энергии E , теплоемкости C , параметра порядка q и восприимчивости χ , рассчитанные из плотности состояний $g(E)$

Рис. 4. Температурные зависимости кумулянтов Биндера U_{km} и энтропии S

Таким образом, в данной работе исследована антиферромагнитная модель Изинга на гексагональной решетке. Вычислена плотность состояний системы и показано, что в данной модели основное состояние не вырождено и фрустрация не возникает. Рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров и определена температура фазового перехода и тип фазового перехода.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектной части госзадания Минобрнауки России в научной деятельности (проект 3.1262.2014К).

Литература

1. Nakano A., Bachlechner M.E., Kalia R.K. et al. Multiscale Simulation of Nanosystems // Computing in Science and Engg. – 2001. – V. 3 (4). – P. 56–66.
2. Cheng C., Bukkapatnam S.T.S., Raff L.M., et al. Monte Carlo simulation of carbon nanotube nucleation and growth using nonlinear dynamic predictions // Chem. Phys. Lett. – 2012. – V. 530 (0). – P. 81–85.
3. De S., Wen X., Bordas S.P.A. et al. Defect engineering of 2d monatomic-layer materials // Modern Physics Letters B. – 2013. – V. 27 (23). – P. 1330017.
4. Liu Z.S., Sechovsky V., Divis M. A new combined quantum simulation approach for nanomagnets // Physica E. – 2013. – V. 47 (0). – P. 128–133.
5. Fabritius T., Laflorencie N., Wessel S. Finite-temperature ordering of dilute graphene antiferromagnets // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 82 (3). – P. 035402.
6. Masrour R., Bahmad L., Benyoussef A. Size effect on magnetic properties of a nanographene bilayer structure: A Monte Carlo study // JMMM. – 2012. – V. 324 (23). – P. 3991–3996.
7. Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Магомедова Л.К. Плотность состояния и энтропия модели Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей // Вестник ДГУ. – 2016. – Т. 31, вып. 1. – С. 43–50.
8. Shell M.S., Debenedetti P.G., Panagiotopoulos A.Z. Generalization of the Wang-Landau method for off-lattice simulations // Phys. Rev. E. – 2002. – V. 66 (5). – P. 56703.
9. Landau D.P., Tsai S.-H., Exler M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // Am. J. Phys. – 2004. – V. 72 (10). – P. 1294–1302.
10. Zhou C., Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm // Physical Review E. – 2005. – V. 72 (2). – P. 025701.

Поступила в редакцию 14 ноября 2016 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2016-31-4-71-76

The study of the Ising model on the hexagonal lattice by Wang-Landau method

M.A. Magomedov^{1,2}, A.K. Murtazayev^{1,2}, L.K. Magomedova^{1,2}

¹*Institute of Physics DSC RAS; Russia, 367003, Makhachkala, Yaragsky st., 94;*

²*Dagestan State University; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiyev st., 43 a;*
magomedov_ma@mail.ru

The Antiferromagnetic Ising model on the hexagonal lattice is investigated by high-performance Wang-Landau algorithm of the Monte Carlo method. The density of states of the system are calculated and the temperature dependences of internal energy U , free energy F , entropy S , the heat capacity C and Binder cumulant U_{km} . The absence of the ground state degeneracy is shown. A second order phase transition On $T_N = 1.5$ is also determined.

Keywords: *Ising model, density of states, entropy, phase transition, Monte Carlo method, Wang-Landau algorithm.*

Received 14 November, 2016