УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-1-57-66

М.А. Магомедов^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,3}, Л.К. Магомедова^{1,3}, М.М. Исаева¹

Фазовая диаграмма и структура основного состояния модели Изинга на решетке Кагоме

¹ Институт физики ДНЦ РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

² Дагестанский научный центр РАН; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45;

³ Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; tagomedov_ma@mail.ru

Модель Изинга на решетке Кагоме исследована алгоритмом Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Исследована зависимость энергии основного состояния системы от соотношений обменных взаимодействий между ближайшими соседями J_1 и между следующими за ближайшими J_2 . Определены магнитные структуры основного состояния. Вычислена плотность состояний системы и рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров. Показано, что основное состояние системы может быть ферромагнитным, ферримагнитным или сильно вырожденным фрустрированным в зависимости от соотношений J_1 и J_2 . Показано, что в случае фрустраций фазовый переход отсутствует, система не переходит в упорядоченное состояние ни при каких температурах. Фазовый переход из ферромагнитного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода. В системе с ферримагнитным упорядочением наблюдаются два фазовых перехода, при T_{C1} происходит фазовый переход из ферримагнитного состояния в частично разупорядоченное состояние, при достижении T_{C2} происходит переход в парамагнитное состояние. Определены температуры фазовых переходов и построена фазовая диаграмма.

Ключевые слова: Модель Изинга, решетка Кагоме, плотность состояний, энтропия, структура основного состояния, вырождение, фрустрация, фазовые переходы, фазовая диаграмма, метод Монте-Карло, алгоритм Ванга–Ландау.

В последние годы значительное внимание уделяется экспериментальному и теоретическому исследованиям различных низкоразмерных, квазиодномерных и двумерных структур. Ряд уникальных свойств этих материалов открывает широкие перспективы для их экспериментальных приложений. В ближайшие годы использование данных материалов в индустрии наносистем позволит совершить поистине технологический скачок в самых различных областях науки и техники [1–3].

Одними из таких перспективных материалов являются различные соединения, имеющие квазидвумерную структуру, магнитные атомы в которых образуют так называемую решетку Кагоме–Капелласиты (Kapellasite, $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$), Гербертсмититы $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$, Ярославиты и т. д.

Для описания данных материалов используется модель Изинга с учетом взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей. Спины на решетке располагаются в трех подрешетках A , B и C , обозначенных на рисунке 1. Взаимодействие между ближайшими спинами, располагающимися в разных подрешетках, характеризуется обменным взаимодействием J_1 , а между следующими за ближайшими спинами – обменным взаимодействием J_2 . В зависимости от химического состава соединения обменные взаимодействия могут принимать различные значения как по величине, так и по знаку.

Величина и знак обменных взаимодействий J_1 и J_2 играют основополагающую роль в характере поведения модели. Для выяснения степени влияния J_1 и J_2 на термодинамические свойства системы нами проведены исследования при различных соотношениях J_1 и J_2 .

Гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, S_i = \pm 1. \quad (1)$$

Для исследования модели нами использован алгоритм Ванга–Ландау метода Монте-Карло [5–15]. 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 вероятности перехода так, 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 $\ln g(E)$.

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

В данной работе алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде [7–12].

Рис. 1. Модель Изинга на решетке КагOME с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей

- 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 состояния $g(E_2) \rightarrow f \times g(E_2)$ 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 $f_{\min} = 1.0000000001$.

- Каждый раз при достижении энергетического минимума нами проводились анализ магнитной структуры основного состояния и его запись в графический файл. При этом проводилось сравнение полученной конфигурации с ранее приобретенными, и только при обнаружении новой уникальной конфигурации осуществлялось ее сохранение в графический файл. Далее данная структура заносится в специальную базу данных для этой модели с целью дальнейшего сравнения. Эта процедура позволяет избежать дублирования в графических файлах многократно встречающихся состояний с одинаковой магнитной структурой. Таким образом, если основное состояние не вырождено, то в базе данных в конце процесса моделирования окажутся 2 магнитные конфигурации (с учетом симметрии модели Изинга относительно одновременного отражения всех спинов на решетке), в то время как для фрустрированных систем количество таких конфигураций будет бесконечным, при этом для экономии дискового пространства в графических файлах будет сохранено не более 100 конфигураций.

- После расчета плотности состояний системы для любой интересующей нас температуры рассчитываются различные термодинамические параметры, такие, как энтропия, внутренняя энергия, свободная энергия, теплоемкость, намагниченность, восприимчивость и т. д. Некоторые формулы (2–6) для расчета термодинамических параметров приведены ниже.

Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [7–10].

В зависимости от соотношений обменных взаимодействий в системе возможны различные сценарии упорядочения при низких температурах. С понижением температуры система будет стремиться в состояние с минимумом в энергии. На рисунке 2 приведены зависимости энергии основного состояния от величины обменного взаимодействия J_2 , рассчитанные в результате компьютерного моделирования. Как видно из рисунка, при $J_1 = 1$ основное состояние в области $J_2 \leq -0.5$ является сильно вырожденным и фрустрированным, при $J_2 > -0.5$ более энергетически выгодным становится

ферромагнитное упорядочение. В случае антиферромагнитного взаимодействия между первыми соседями ($J_1 = -1$) фрустрация возникает при $J_2 \leq 0$, а область $J_2 > 0$ является ферримагнитной.

Рис. 2. Зависимости энергии основного состояния от величины обменного взаимодействия J_2

Соответствующие структуры основного состояния при различных J_1 и J_2 приведены на рисунке 3.

Рис. 3. Магнитная структура основного состояния системы а) при $J_1 = 1$, $J_2 \leq -0.5$, б) при $J_1 = 1$, $J_2 > -0.5$, в) при $J_1 = -1$, $J_2 \leq 0$, д) при $J_1 = -1$, $J_2 > 0$

В алгоритме Ванга–Ландау интересующий нас термодинамический параметр $A(T)$ для любой температуры может быть рассчитан по следующей формуле [7, 13–15]:

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

Например, намагниченность m , параметр порядка mst , внутренняя энергия U , свободная энергия F , энтропия S и теплоемкость C системы могут быть рассчитаны следующим образом:

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

$$m(T) = \frac{\sum_E \langle m \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle m \rangle_T, \quad (4)$$

$$mst(T) = \frac{\sum_E \langle mst \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}} \equiv \langle mst \rangle_T, \quad (5)$$

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

Расчитанные из плотности состояний температурные зависимости различных термодинамических параметров для систем различных линейных размеров приведены на рисунках 4, 5. 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 параметра порядка при $J_1 = -1$, $J_2 > 0$ приведены на рисунке 4, на котором видны два фазовых перехода с температурами T_{C1} и T_{C2} . При достижении температуры T_{C1} система переходит в частично разупорядоченное состояние, выше T_{C2} – в парамагнитное состояние. Отметим, что с повышением температуры выше T_{C1} намагниченность падает до нуля, в то время как параметр порядка уменьшается до значения $mst \approx 0.6$, и только выше температуры T_{C2} происходит обнуление параметра порядка.

Рис. 4. Зависимости параметра порядка от температуры при $J_1 = -1$, $J_2 > 0$

Рис. 5. Зависимости теплоемкости от температуры при $J_1 = -1$, $J_2 > 0$

Температурные зависимости теплоемкости, приведенные на рисунке 5, характеризуются аномалией в виде двух пиков при температурах T_{C1} и T_{C2} . При достижении температуры T_{C1} система переходит из упорядоченного ферримагнитного состояния в частично разупорядоченное, а при температуре T_{C2} происходит фазовый переход в полностью разупорядоченное состояние.

На основе анализа температурных зависимостей различных термодинамических параметров нами были построены соответствующие фазовые диаграммы, которые приведены на рисунке 6.

Рис. 6. Фазовая диаграмма модели Изинга при различных J_1 и J_2

Таким образом, в данной работе исследована модель Изинга на решетке КагOME с учетом обменных взаимодействий как между первыми, так и вторыми ближайшими соседями; вычислена плотность состояний системы и рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров; определены температуры фазовых переходов и их типы. Построена фазовая диаграмма.

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. Fabritius T., Laflorencie N. Wessel S. Finite-temperature ordering of dilute graphene antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82 (3). – P. 035402.
3. Masrour R., Bahmad L. Benyoussef A. Size effect on magnetic properties of a nano-graphene bilayer structure: A Monte-Carlo study // *JMMM.* – 2012. – V. 324 (23). – P. 3991–3996.
4. Townsend M.G., Longworth G. and Roudaut E. Triangular-spin, kagome plane in jarosites // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 33. – P. 4919–4926.
5. Муртазаев А.К., Магомедов М.А. Исследование термодинамических характеристик реальных магнетиков методами вычислительной физики // *Fizika.* – 2007. – V. 13. – P. 54–56.
6. Муртазаев А.К., Камилов И.К., Магомедов М.А. Кластерные алгоритмы метода Монте-Карло, конечно-размерный скейлинг и критические индексы сложных решеточных моделей. // *ЖЭТФ.* – 2001. – Т. 120, № 6. – С. 1535–1543.
7. Murtazaev A.K., Kamilov I.K., Magomedov M.A. Monte-Carlo investigation of critical phenomena in models of real magnetism with crossovers // *Comp. Phys. Comm.* – 2002. – V. 147/1–2. – P. 447–450.
8. 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.
9. Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A. Thermodynamic, critical properties and phase transitions of the Ising model on a square lattice with competing interactions // *Solid State Communications.* – 2016. – V. 233. – P. 35–40.
10. Kassan-Ogly F., Proshkin A., Murtazaev A.K., и др. Frustrations and Phase Transitions in Low-Dimensional Magnetic Systems // *Materials Science Forum.* – 2016. – V. 845. – P. 111–116.
11. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Magomedov M.A. Three-state Potts model on triangular lattice with nearest-neighbor and next-nearest-neighbor antiferromagnetic interactions // *Solid State Communications.* – 2016. – V. 246. – P. 41–46.
12. Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Муртазаев А.К. и др. Фазовые переходы в двумерной антиферромагнитной модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей // *ЖЭТФ.* – 2016. – Т. 149, вып. 2. – С. 357–366.
13. 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.
14. 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.
15. Zhou C., Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang–Landau algorithm // *Phys. Rev. E.* – 2005. – V. 72 (2). – P. 025701.

Поступила в редакцию 4 марта 2018 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-1-57-66

Phase diagram and ground state structure of the Ising model on the Kagome lattice

M.A. Magomedov^{1,2}, A.K. Murtazaev^{1,3}, L.K. Magomedova^{1,3}, M.M. Isaeva¹

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

² *Dagestan Scientific Center of RAS; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 45;*

³ *Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a; magomedov_ma@mail.ru*

The Ising model on Kagome lattice is studied by Wang-Landau algorithm of Monte Carlo method. The dependence of the energy of the main state of the system on the relations of exchange interactions between the nearest neighbors J_1 , and between the next closest J_2 is studied. The magnetic structures of the ground state are determined. The density of the system states is calculated and temperature dependences of various thermodynamic parameters are calculated. It is shown that the ground state of the system can be ferromagnetic, ferrimagnetic, or highly degenerate non ordered frustrated and depending on the ratios of J_1 and J_2 . It is shown that in the case of frustrations there is no phase transition, the system does not go into an ordered state at any temperature. Phase transition from ferromagnetic to paramagnetic state is a phase transition of the second kind. In a system with ferrimagnetic ordering two phase transitions are observed, at TC1 there is a phase transition from a ferrimagnetic state to a partially disordered state, at achievement of TC2 there is a transition to a paramagnetic state. The phase transition temperatures are determined and the phase diagram is constructed.

Keywords: *Ising model, density of states, Kagome lattice, entropy, phase transition, phase diagram, Monte Carlo method, Wang–Landau algorithm.*

Received 4 January, 2018