

УДК 537.9

М.А. Магомедов^{1,2}, А.К. Муртазаев^{1,2}, Л.К. Магомедова^{1,2}, Я.К. Абуев¹

Плотность состояния и энтропия модели Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей

¹ Институт физики Дагестанского научного центра РАН; Россия, 367025, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

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

Высокоэффективным алгоритмом Ванга–Ландау метода Монте-Карло проведены исследования модели Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей. Рассчитаны плотности состояний системы, а также температурные зависимости энтропии. Показано, что энтропия для всех систем при высоких температурах равна значению $\ln 2$, а с понижением температуры стремится к нулю, кроме случая возникновения фрустраций, при котором энтропия основного состояния $S_0 = 1/3$. Определены магнитные структуры, возникающие в системе при низких температурах. Установлено, что на структуру основного состояния существенное влияние оказывают величина и знак обменного взаимодействия между вторыми ближайшими соседями. Показано, что в зависимости от значений обменных взаимодействий J_1 и J_2 в системе могут возникнуть: ферромагнитное упорядочение ($J_1 = 1, J_2 = 0$), антиферромагнитное упорядочение ($J_1 = -1, J_2 = 0$), сильно фрустрированное неупорядоченное состояние ($J_1 = 0, J_2 = -1$), страйповая структура ($J_1 = 1, J_2 = -1$), а также димерная структура ($J_1 = -1, J_2 = -1$).

Ключевые слова: плотность состояний, энтропия, Монте-Карло, Алгоритм Ванга–Ландау, Модель Изинга.

В последние годы исследованию численными методами низкоразмерных ($1d$ и $2d$) спиновых систем уделяется значительное внимание. Интерес к таким системам также стимулируется и большим количеством экспериментальных работ на квазиодномерных и квазидвумерных магнитных системах [1–8].

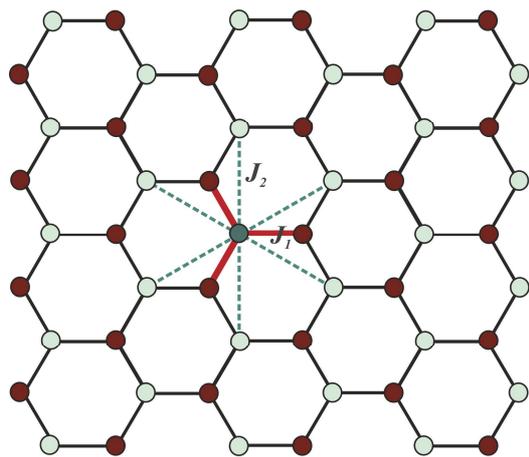


Рис. 1. Модель Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями

В данной работе нами проведены высокоточные исследования двумерной модели Изинга на гексагональной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей. Такая модель может быть применена для описания ряда двумерных материалов, в том числе такого интересного и активно изучаемого в последние годы материала, как графен [8; 9].

Схематически модель представлена на рисунке 1. Как видно из рисунка, атомы наногрфена можно разделить на две подрешетки. Атомы, входящие в одну подрешетку А, обозначены на рисунке одним цветом, а

атомы, входящие во вторую подрешетку \mathbf{B} , – другим. Каждый атом имеет трех ближайших соседей и шестерых вторых ближайших соседей [9].

При построении модели нами учитывались как первые, так и вторые ближайшие соседи. С учетом всех этих особенностей гамильтониан модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_k, \mathbf{S}_i = \pm 1, \quad (1)$$

где первый член учитывает обменное взаимодействие между первыми ближайшими соседями, второй – взаимодействие между вторыми ближайшими соседями.

При положительном обменном взаимодействии J_1 (без учета вторых ближайших соседей) все атомы в основном состоянии упорядочиваются одинаково, а при отрицательном значении J_1 атомы образуют две подрешетки, спины в которых направлены в основном состоянии антипараллельно. В данной модели нет вырождения и отсутствует фрустрация. Энтропия такой системы в основном состоянии должна быть равна нулю.

Учет обменного взаимодействия между вторыми ближайшими соседями, которых у каждого атома по шесть, сильно усложняет картину. В зависимости от знака и величины второго обменного взаимодействия J_2 система может быть как ферромагнитно упорядоченной, так и разупорядоченной. При отрицательном значении J_2 в системе могут возникнуть фрустрация и сильное вырождение основного состояния. Данная работа посвящена исследованию влияния обменного взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями на плотность состояний и энтропию системы, а также структуру основного состояния, что позволит определить степень вырождения энергетических состояний и оценить фрустрации, возникающие в системе.

Для малых систем, подобных описываемой в данной работе, наиболее эффективным численным методом исследования является алгоритм Ванга–Ландау [10–15], который позволяет также получить много дополнительной информации о системе. Данный алгоритм является реализацией метода энтропического моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы.

Алгоритм Ванга–Ландау основан на том, что в результате случайного блуждания в пространстве энергий с вероятностями, обратно пропорциональными плотности состояний $g(E)$, мы получаем равномерное распределение по энергиям. Подбрав 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 $\ln g(E)$. Отметим также, 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 [13, 15]:

- 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 одина-

ковое 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 $f_{\min} = 1.0000000001$.

Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [11–15].

Таким образом, выполнив последовательность изложенных выше команд, можно рассчитать плотность состояний системы $g(E)$, зная которую достаточно легко рассчитать значения любых термодинамических параметров при любой температуре. В частности, внутреннюю энергию U , свободную энергию F , энтропию S и теплоемкость C можно вычислить, используя следующие выражения:

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

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

$$S(T) = \frac{U(T) - F(T)}{T}, \quad (4)$$

$$C(T) = \frac{\partial U(T)}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (5)$$

Вероятность состояния с энергией E при температуре T можно определить следующим образом:

$$P(E, T) = g(E) e^{-E/k_B T}. \quad (6)$$

Далее мы приводим результаты компьютерного моделирования для модели нанографа при различных значениях обменных взаимодействий J_1 и J_2 . Линейные размеры исследованных систем составляли $L = 6, 12, 18$ и 24 , таким образом, число атомов составляло $N = L \times L = 36, 144, 324$ и 576 .

Нами проведено исследование различных наборов обменных параметров:

Модель 1	$J_1 = 1$	$J_2 = 0$
Модель 2	$J_1 = 0$	$J_2 = 1$
Модель 3	$J_1 = 0$	$J_2 = -1$
Модель 4	$J_1 = 1$	$J_2 = -1$

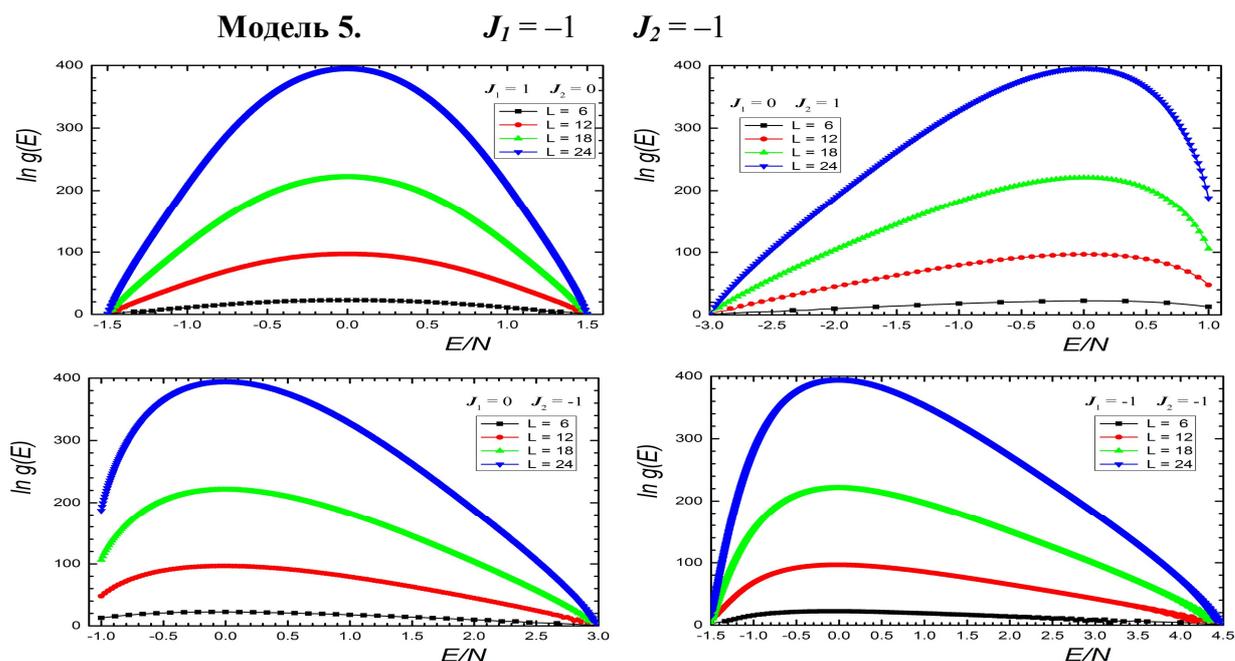


Рис. 2. Плотность состояний системы $g(E)$ при различных значениях обменных параметров J_1 и J_2

На рисунке 2 приведены графики плотности состояний для всех 4 различных моделей при различных линейных размерах системы. Как видно из рисунка, вырождение основного состояния и фрустрация возникают только в модели 3.

Зависимость энтропии S от температуры для различных моделей приведена на рисунке 3. При высоких температурах энтропия для всех моделей стремится к теоретически предсказанному значению $\ln 2 \approx 0.693$. При низких же температурах поведение энтропии для различных моделей сильно различается, однако ненулевую энтропию при нулевой температуре имеет только фрустрированная модель 3.

При $J_1 = 0$ (модели 2 и 3) решетка разбивается на 2 независимые треугольные подрешетки, соответственно их поведение описывается моделью Изинга на треугольной решетке. Предельное значение энтропии основного состояния (для системы с $L \rightarrow \infty$) для модели 3, рассчитанное нами, составило $S_0 = 0,324$, что совпадает со значением энтропии для модели Изинга на треугольной решетке.

Структуры основных состояний, возникающие в системе при различных соотношениях обменных параметров, приведены на рисунках 4–6.

В случае модели 4 (положительного значения обменного взаимодействия между первыми ближайшими соседями и отрицательного – между вторыми) в системе при низких температурах возникают полосовые (страйповые) структуры, приведенные на рисунке 5. В данном случае основное состояние формируется из чередующихся полос направленных вверх (темный кружок) и вниз (светлый кружок) спинов. Направление полос может быть совершенно различным. Так, на рис. 5 нами приведены 4 различных варианта.

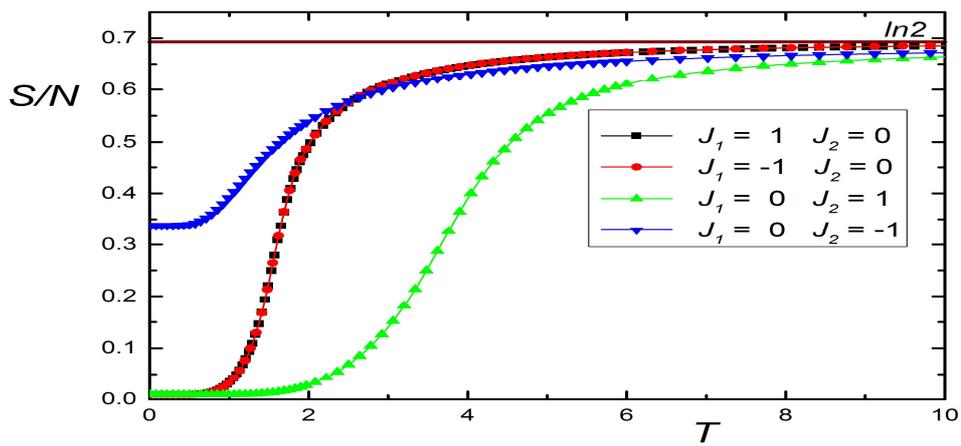


Рис. 3. Температурная зависимость энтропии для различных моделей

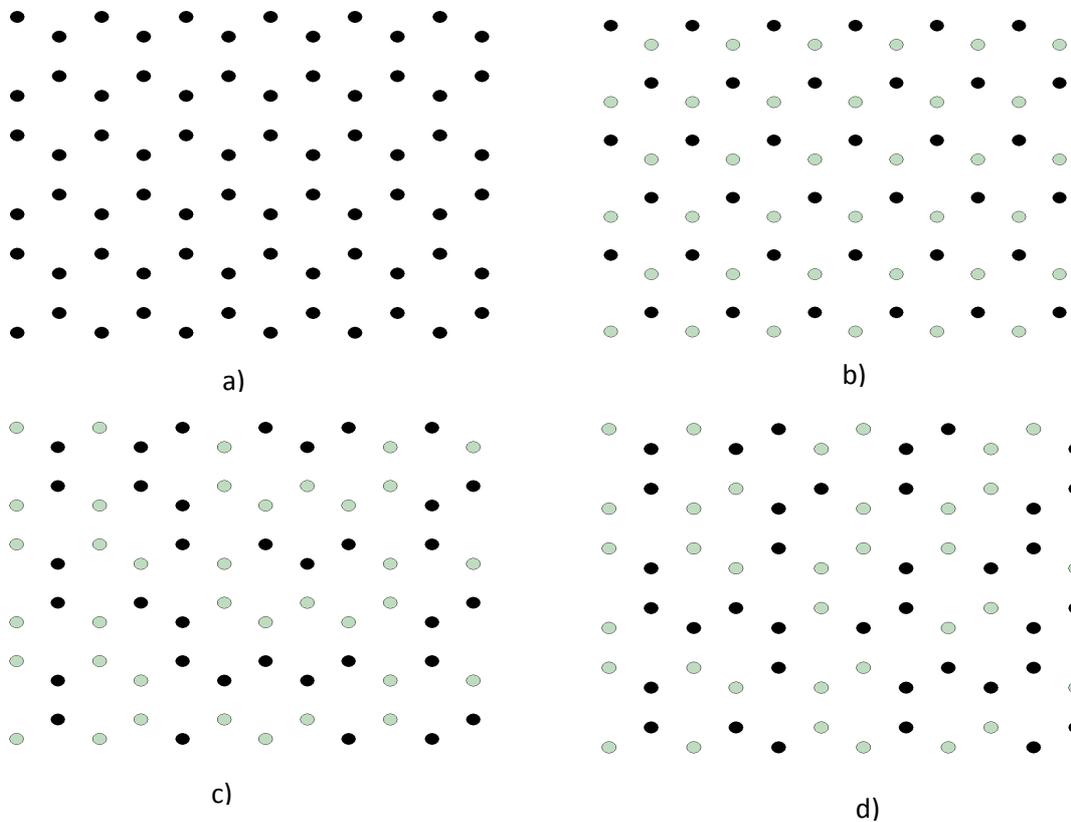


Рис. 4. Структура основного состояния, возникающая в модели при: а) $J_1 = 1, J_2 = 0$, б) $J_1 = -1, J_2 = 0$, в) $J_1 = 0, J_2 = 1$, г) $J_1 = 0, J_2 = -1$

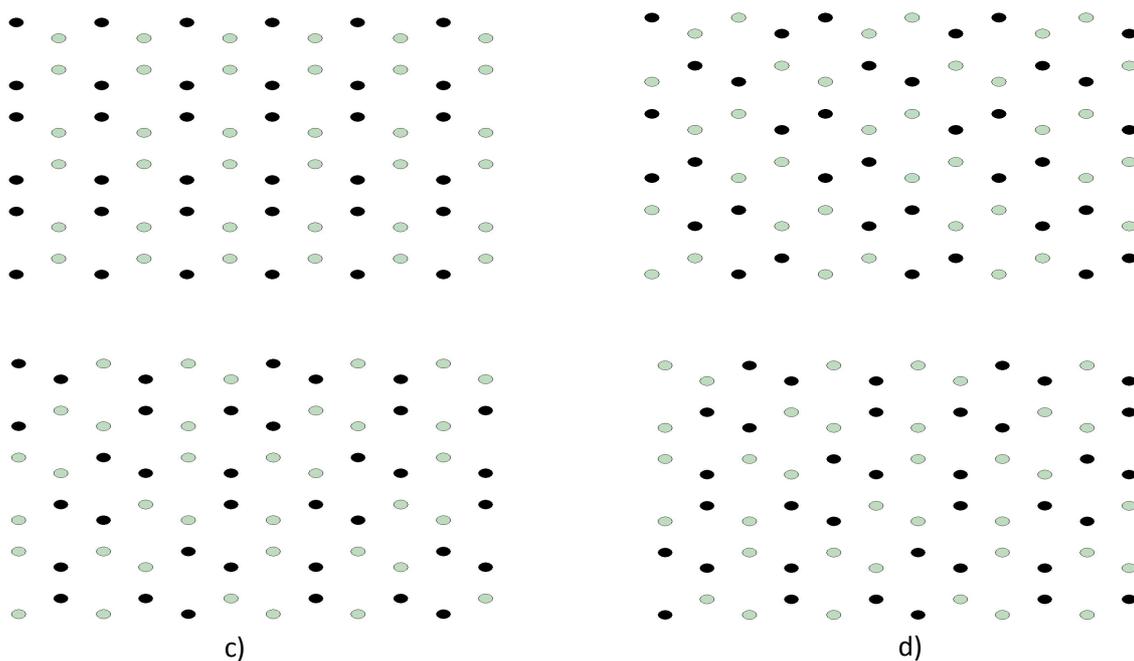


Рис. 5. Слоистая (страйповая) структура основного состояния, возникающая в модели 5 (при $J_1 = 1, J_2 = -1$)

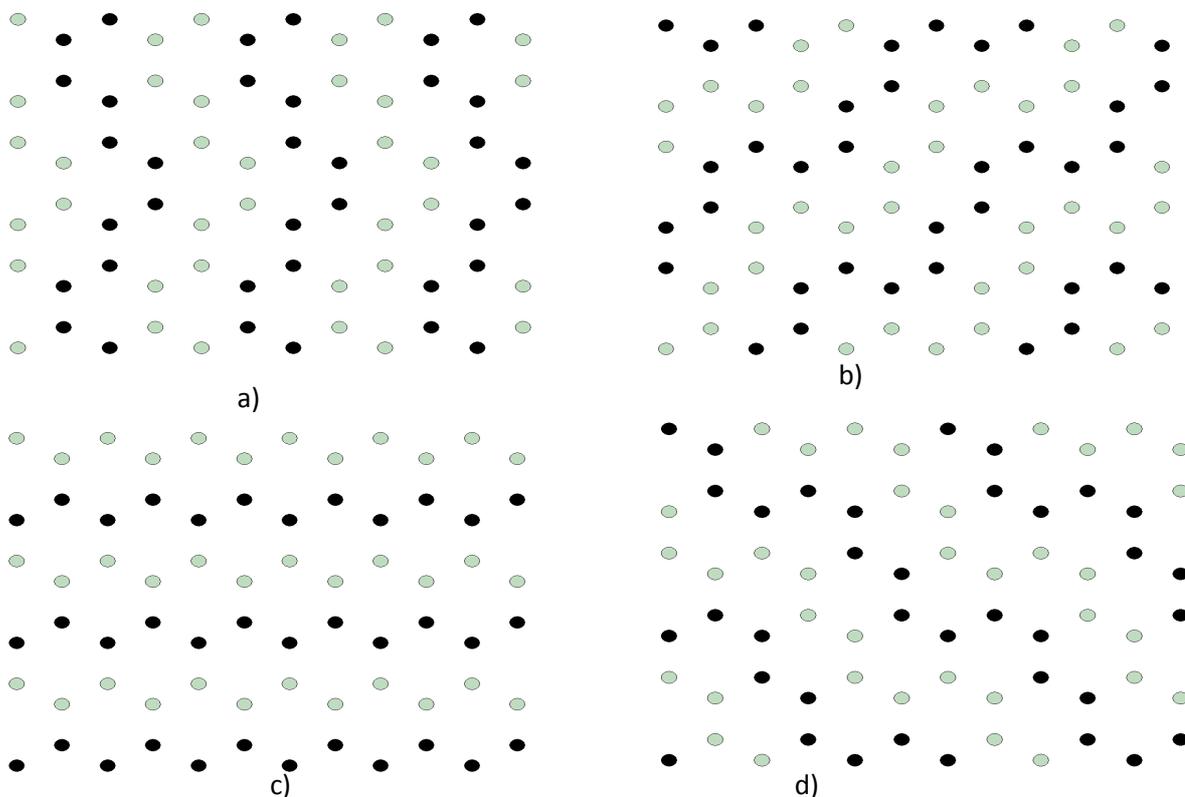


Рис. 6. Димерная структура основного состояния, возникающая в модели 4 (при $J_1 = -1, J_2 = -1$)

Таким образом, в зависимости от соотношений обменных параметров J_1 и J_2 в системе могут возникнуть следующие упорядоченные магнитные структуры:

- ($J_1 = 1, J_2 = 0$) – ферромагнитное упорядочение – рис. 5 а. Энергия основного состояния $E_0/N = -1.5J_1 = -1.5$.
- ($J_1 = -1, J_2 = 0$) – антиферромагнитное упорядочение – рис. 5 б. Энергия основного состояния $E_0/N = 1.5J_1 = -1.5$.
- ($J_1 = 0, J_2 = 1$) – система состоит из двух невзаимодействующих треугольных подрешеток, вследствие чего суммарному основному состоянию соответствует как рисунок 4 а, так и рис. 4 б. Энергия основного состояния $E_0/N = -1.5J_2 = -1.5$.
- ($J_1 = 0, J_2 = -1$) – фрустрированное, сильно вырожденное состояние – рисунок 5.с и 5.d. Энергия основного состояния (так как основное состояние в данном случае сильно вырождено, то имеется в виду минимальная энергия фрустрированных конфигураций) $E_0/N = J_2 = -1$.
- ($J_1 = 1, J_2 = -1$) – слоистая (страйповая) структура – рис. 6. Энергия основного состояния $E_0/N = -0.5J_1 + J_2 = -1.5$.
- ($J_1 = -1, J_2 = -1$) – димерная структура – рис. 7. Энергия основного состояния $E_0/N = 0.5J_1 + J_2 = -1.5$.

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. Koch J., Sabirianov R. Finite size effects in shell nanoparticles // JMMM. – 2009. – V. 321 (9). – P. 1137–1141.
3. Wu J., He J., Odegard G., et al. Effect of chain architecture on the compression behavior of nanoscale polyethylene particles // Nanoscale Research Letters. – 2013. – V. 8 (1). – P. 1–9.
4. 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.
5. 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.
6. Мутайламов В.А., Муртазаев А.К., Магомедов М.А. Критические свойства моделей малых магнитных частиц антиферромагнетика MnF_2 // ЖЭТФ. – 2014. – Т. 145.– Вып. 6. – С. 1025–1030.
7. Liu Z.S., Sechovsky V., Divis M. A new combined quantum simulation approach for nanomagnets // Physica E. – 2013. – V. 47 (0). – P. 128–133.
8. Fabritius T., Laflorencie N., Wessel S. Finite-temperature ordering of dilute graphene antiferromagnets // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 82(3). – P. 035402.
9. 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.
10. 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.

11. 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.
12. Zhou C., Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm // *Physical Review E.* – 2005. – V. 72 (2). – P. 025701.
13. Муртазаев А.К., Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Кассан-Оглы Ф.А., Прошкин А.И. Фрустрации и фазовые переходы в трехвершинной модели Поттса на треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // *Письма в ЖЭТФ.* – 2014. – Т. 100, № 4. – С. 267–271.
14. Korner M., Troyer M. Wang–Landau Sampling with Cluster Updates, in *Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVI*, Landau D., Lewis S., and Schütler H.-B., 2006, Springer Berlin Heidelberg. P. 142–145.
15. Бабаев А.Б., Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Кассан-Оглы Ф.А., Прошкин А.И. 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.

Поступила в редакцию 30 декабря 2015 г.

UDC 537.9

Density of states and entropy of the Ising model on the hexagonal lattice with regard for the second nearest neighbor interaction

М.А. Magomedov^{1,2}, А.К. Murtazaev^{1,2}, Л.К. Magomedova^{1,2}, Ya.К. Abuev¹

¹ *Institute of Physics DSC RAS; Russia, 367025, Makhachkala, Yaragsky st., 29;*

² *Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43 a; magomedov_ma@mail.ru*

The studies of the Ising model on the hexagonal lattice with regard for the interaction both the first and the second nearest neighbors are conducted by the high efficient Wang–Landau algorithm of the Monte Carlo method. The density of states and temperature dependences of the entropy for these models have been calculated. It is shown that the entropy of all systems at high temperatures is $\ln 2$, and tends to zero with decreasing temperature, except the cases of frustration origin, where the entropy of the ground state is $S_0 = 1/3$. The magnetic structures appeared in the system at low temperatures have been defined. It is shown that the size and the sign of exchangeable interaction between the second nearest neighbors influence considerably the ground state structure. It has been found out there can be ferromagnetic ordering ($J_1 = 1, J_2 = 0$), antiferromagnetic ordering ($J_1 = -1, J_2 = 0$), strongly frustrated unordered condition ($J_1 = 0, J_2 = -1$), the striped structure ($J_1 = 1, J_2 = -1$) and the dimer structure ($J_1 = -1, J_2 = -1$) depending on the exchangeable interactions J_1 and J_2 system.

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

Received 30 December, 2015