

Фазовые переходы в модели Поттса на треугольной решетке

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; tagomedov_ma@mail.ru

Модель Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседей исследована алгоритмом Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Вычислена плотность состояний системы и рассчитаны температурные зависимости энтропии S . Показано, что в зависимости от соотношений обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями основное состояние может быть как сильно вырожденным, что свидетельствует о наличии фрустрации в системе, так и слабо вырожденным. Показано, что при низких температурах в области фрустрации энтропия системы принимает универсальное значение $S_0 = 0.304$. Установлено наличие в системе фазовых переходов первого и второго рода. Определены температуры фазовых переходов, построена фазовая диаграмма системы. Установлено, что в модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями в системе имеются три области с различными структурами основного состояния: антиферромагнитная область $0 < J_1/J_2 < 0.190$, сильно вырожденная фрустрированная область $0.190 < J_1/J_2 < 1.300$ и область с коллинеарным упорядочением $J_1/J_2 > 1.300$. Показано, что переход из антиферромагнитной и коллинеарной фаз в парамагнитную является фазовым переходом первого рода, в то время как переход из фрустрированной области в парамагнитную – фазовым переходом второго рода.

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

В последние годы значительное внимание уделяется экспериментальному и теоретическому исследованию различных низкоразмерных, квази-одномерных или двумерных систем, в т. ч. наноструктур. Такие системы обладают рядом интересных свойств, перспективных в плане практического применения в различных электронных устройствах. Изучение различных свойства 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 [1–3].

Одними из таких материалов являются делафосситы, названные в честь французского кристаллографа XIX века Ж. Делафосса (Delafosse) [4–9]. Делафосситы имеют общую химическую формулу $A^+B^{3+}X_2$, где А и В – катионы, Х – кислород.

В настоящее время синтезировано более сотни различных соединений делафосситов. Огромный интерес к данным системам обусловлен перспективой их широкого применения в электронике в качестве элементов хранения информации. В делафосси-тах привлекает в первую очередь простота составов. Но в этих простых составах насчитывается более 120 структурных типов и более 530 соединений среди оксидов, сульфидов, селенидов, теллуридов, интерметаллов. В меньшем количестве представлены гало-

гениды и фосфиды. Одним из ярких представителей семейства делафосситов является CuFeO_2 , структура которого приведена на рис. 1.

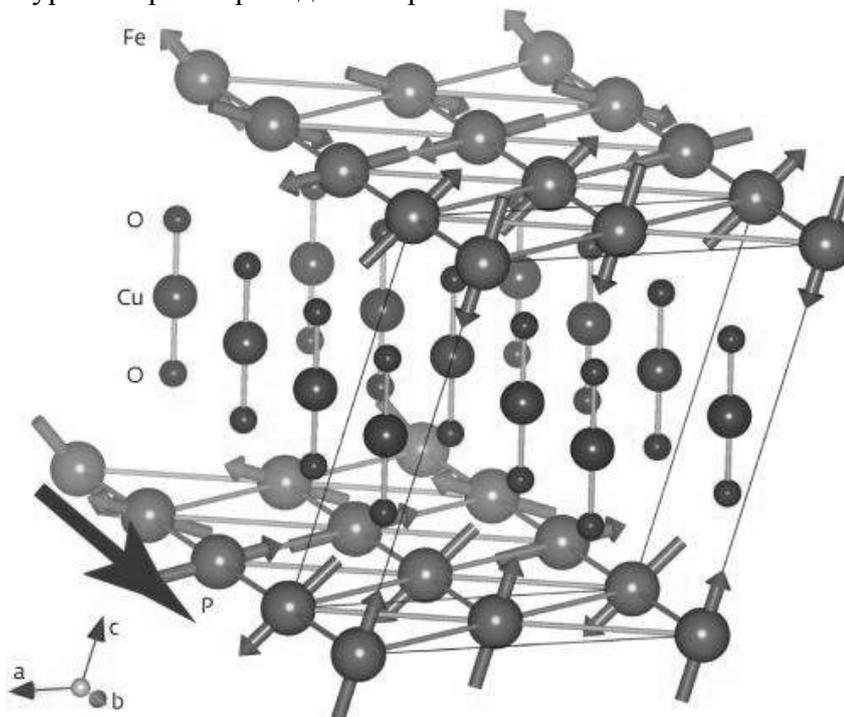


Рис. 1. Структура делафоссита CuFeO_2

Таким образом, CuFeO_2 имеет явно выраженную плоскостную структуру. Взаимодействием между слоями можно пренебречь.

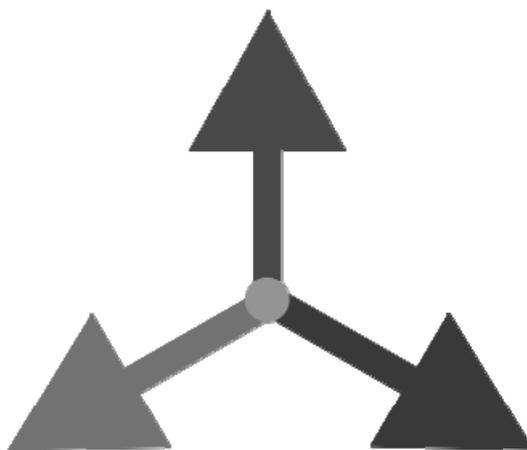


Рис. 2. Схематическое и цветное изображение трех возможных направлений ориентации спинов в модели Поттса с числом состояний $q = 3$

Схематическое и цветное изображение трех возможных направлений ориентации спинов Fe в материале CuFeO_2 приведено на рис. 2. Таким образом, имеется 3 возможных направления спинов железа. Данная система хорошо описывается моделью Поттса с числом состояний $q = 3$.

Гамильтониан модели Поттса с числом состояний $q = 3$ может быть представлен в следующем виде [10–13]:

$$H = -J_1 \sum_{i,j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{i,k} \cos \theta_{i,k}, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – параметры обменного взаимодействия для ближайших и вторых ближайших соседей. $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$ соответственно.

Численные расчеты [10–13] показали, что при учете только первых ближайших соседей с величиной $J_1 < 0$ эта модель демонстрирует поведение, характерное для ФП первого рода. При учете первых и вторых ближайших соседей с величинами $J_1 < 0$ и $J_2 < 0$ соответственно в рассматриваемой модели возможны фрустрации [11].

Для выяснения наличия фрустраций в модели исследования проводились на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) [11–18]. Данный алгоритм является реализацией метода энтропического моделирования и позволяет вычислить функцию плотности состояний системы.

Для исследования классических систем без конкуренции в последние годы широко применяются кластерные алгоритмы метода Монте-Карло. Кластерные алгоритмы метода МК, разработанные в последние годы, оказались весьма эффективными при исследовании критических явлений в различных классических моделях, таких, как модель Изинга, Гейзенберга, XY-модель и т. д. [2]. Критические параметры системы, рассчитанные на основе кластерных алгоритмов, отличаются высокой точностью и надежностью. Тем не менее, эффективность и работоспособность кластерных алгоритмов при исследовании сложных реалистичных моделей реальных магнитных материалов, в которых наряду с обменным взаимодействием учитываются другие возмущающие факторы (анизотропия, диполь-дипольное взаимодействие, многоспиновый обмен, различного рода примеси, учет колебаний решетки и т. д.), недостаточно изучены [2]. Среди всех кластерных алгоритмов метода МК простотой в реализации и высокой эффективностью выделяется однокластерный алгоритм Вульфа [2].

Для систем с конкурирующими взаимодействиями кластерные алгоритмы неэффективны и не применяются. Более эффективным для таких систем оказались различные репличные алгоритмы и алгоритм Ванга–Ландау, который позволяет также получить много дополнительной информации об исследуемой системе. Алгоритм Ванга–Ландау является разновидностью энтропийного моделирования, он весьма эффективен при исследовании различных спиновых систем.

В 2014 г. предложен репличный обменный алгоритм Ванга–Ландау, значительно увеличивший эффективность данного метода. 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 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 $\ln g(E)$.

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 в различных ситуациях [11]:

- 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.

- 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 мы проводили анализ магнитной структуры основного состояния и запись его в графический файл. При этом проводилось сравнение полученной конфигурации с ранее полученными и только при обнаружении новой уникальной конфигурации производилось ее сохранение в графический файл. Далее данная структура заносилась в специальную базу данных для данной модели для дальнейшего сравнения. Данная 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 Поттса), 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 рассчитывались различные термодинамические параметры: 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 [11–18].

Рассчитанная таким образом плотность состояний для модели Поттса на треугольной решетке при различных отношениях обменных взаимодействий $r = J_1/J_2$ приведена на рис. 3. Как видно из рисунка, основное состояние системы при некоторых соотношениях r сильно вырождено, что обусловлено наличием фрустрации в системе.

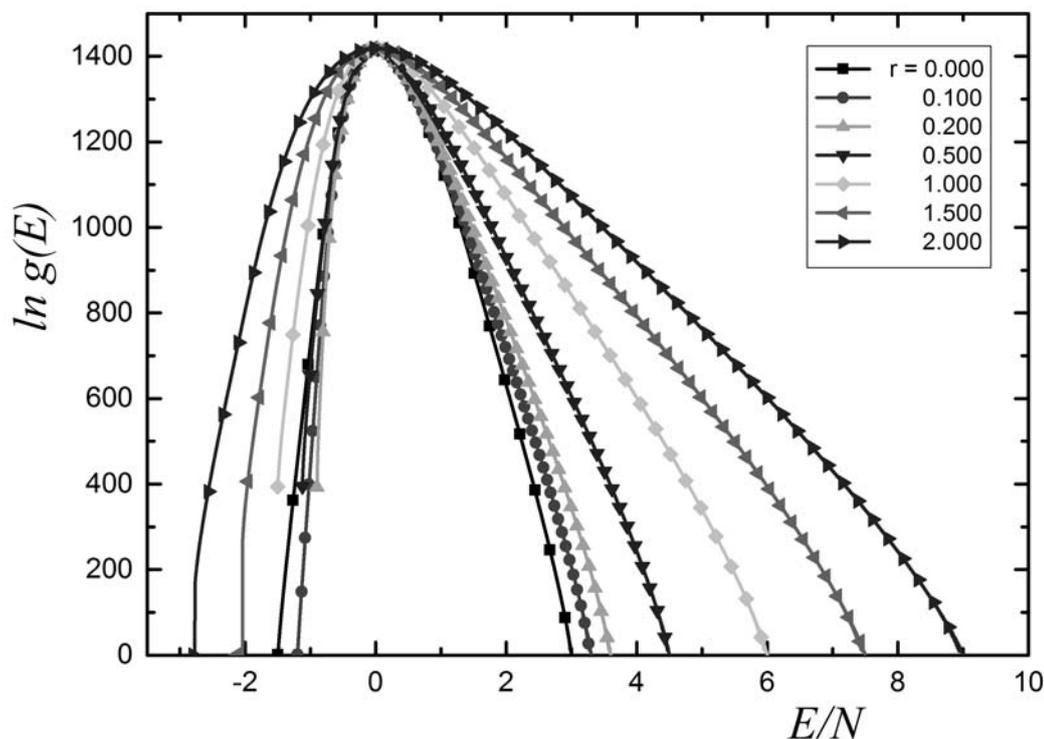


Рис. 3. Плотность состояний $g(E)$ для модели Поттса на треугольной решетке при различных отношениях обменных взаимодействий $r = J_1/J_2$

Зная плотность состояний системы, можно рассчитать любой интересующий нас термодинамический параметр $A(T)$ для любой температуры по следующей формуле [11; 15–17]:

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

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

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

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

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

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

Рассчитанные из плотности состояний температурные зависимости энтропии при различных отношениях обменных взаимодействий $r = J_1/J_2$ приведены на рис. 4. 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.

Для определения типа фазового перехода нами использовался гистограммный метод анализа данных. Гистограммный метод является одним из самых эффективных и надежных методов определения типа фазового перехода. Анализ распределения энергии позволяет не только определить тип фазового перехода, но и оценить, насколько он ярко выражен. Как видно из рис. 5, при $r = 0.1$ и $r = 2.0$ наблюдается ярко выраженная двухпиковая структура распределения энергии, свидетельствующая о фазовом переходе первого рода. При $r = 1.5$ в системе также происходит фазовый переход первого рода, однако не так ярко выраженный. При $r = 0.5$ в системе происходит фазовый переход второго рода. Подробный гистограммный анализ, проведенный для всех соотношений обменных взаимодействий, позволил построить фазовую диаграмму модели (рис. 6).

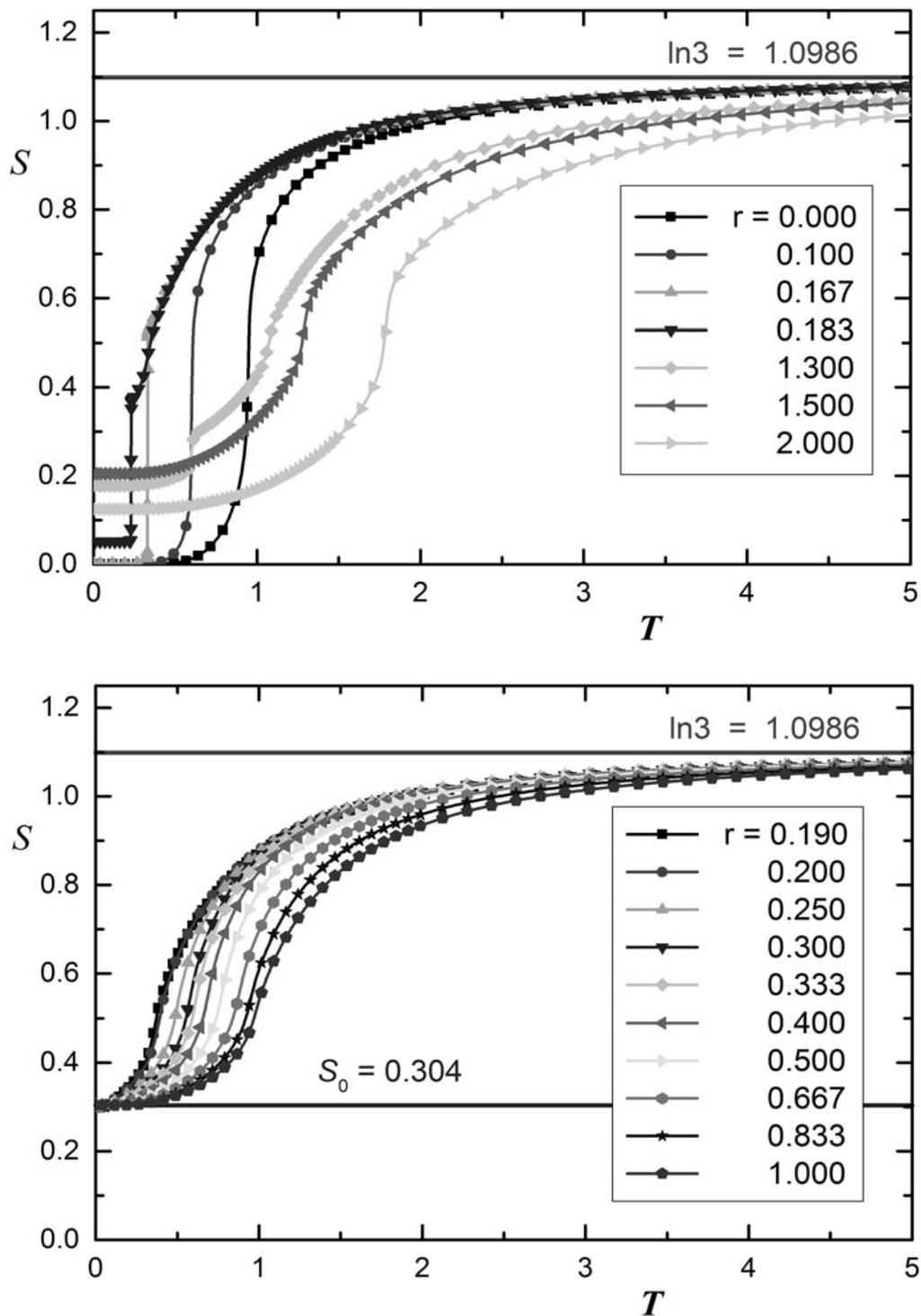


Рис. 4. Температурные зависимости энтропии S , рассчитанные из плотности состояний $g(E)$

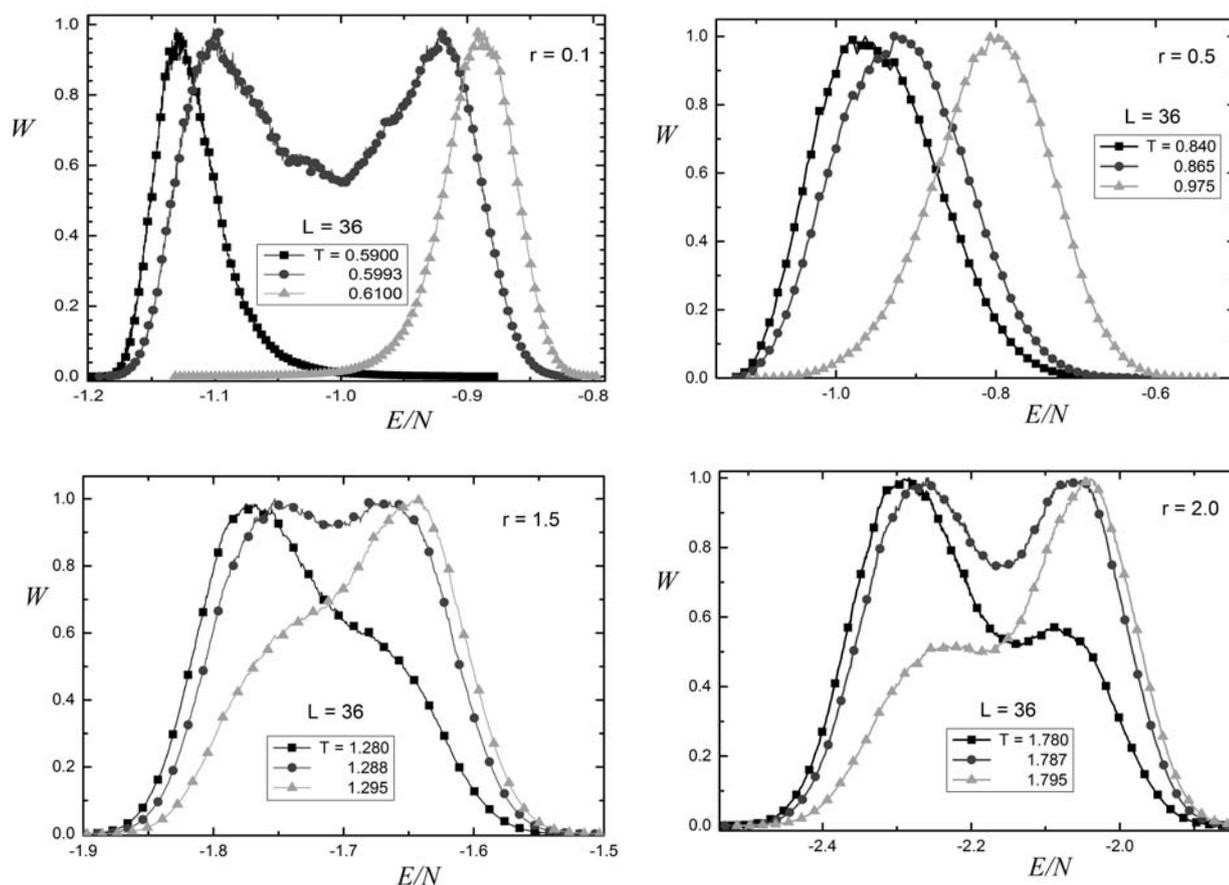


Рис. 5. Гистограммы распределения энергий в области фазового перехода при $r = 0.1; 0.5; 1.5; 2.0$

Анализ рисунков 3–5 указывает на наличие в системе трех различных областей.

- область $0 \leq J_1/J_2 < 0.190$ отличается отсутствием сильного вырождения. В системе происходит фазовый переход первого рода;
- область $0.190 \leq J_1/J_2 < 1.300$. Это область фрустраций с сильнейшим вырождением основного состояния. В системе происходит фазовый переход второго рода;
- область $J_1/J_2 \geq 1.300$. Вырождение снова подавлено. В системе происходит фазовый переход первого рода.

Фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями приведена на рис. 6.

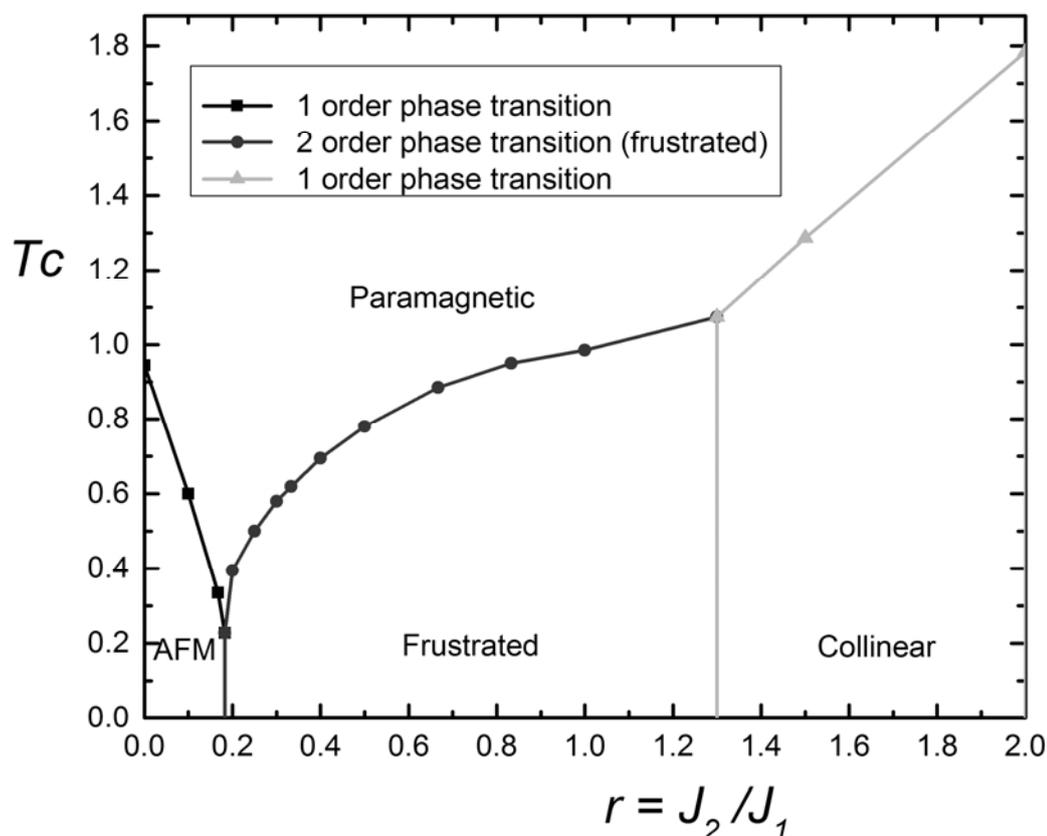


Рис. 6. Фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

- вычислены плотности состояний $g(E)$ для модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями;
- определены спиновые конфигурации в основном состоянии при различных соотношениях обменных взаимодействий;
- установлено, что в модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями в системе имеются три области: $0 \leq J_1/J_2 < 0.190$, $0.190 \leq J_1/J_2 < 1.300$, $J_1/J_2 \geq 1.300$;
- рассчитаны температурные зависимости энтропии S ;
- построена фазовая диаграмма модели Поттса на треугольной решетке с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями.

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. Муртазаев А.К., Камиллов 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.

3. Körner M., Troyer M. Computer Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XVI / edited by D. Landau, S. Lewis and H.-B. Schütler. – Berlin–Heidelberg, 2006. – Vol. 103. – P. 142.
4. Shannon R.D. Revised effective ionic radii systematic of interatomic distances in halides and chalcogenides // Acta Cryst. – 1976. – V. A32, № 5. – P. 751–767.
5. Li J., Sleight A.W. Structure of β -AgAlO₂ and structural systematics of tetrahedral MM'X₂ compounds // J. Solid State Chem. – 2004. – V. 177, № 3. – P. 889–894.
6. Prewitt C.T., Shannon R.D., Rogers D.B. Chemistry of noble metal oxides. II. Crystal structures of PtCoO₂, PdCoO₂, CuFeO₂ and AgFeO₂ // Inorg. Chem. – 1971. – V. 10, № 4. – P. 719–723.
7. Hirakawa K., Kadowaki H., Ubukoch K. Experimental studies of triangular lattice antiferromagnets with $S = \frac{1}{2}$: NaTiO₂ and LiNiO₂ // J. Phys. Soc. Japan. – 1985. – V. 54, № 9. – P. 3526–3536.
8. Wang X., Loa I., Kunc L. et al. Effect of pressure on the structural properties and Raman modes of LiCoO₂ // Phys. Rev B. – 2005. – V. 72, № 22. – P. 224102 (1-8).
9. Li J., Sleight A.W. Structure of β -AgAlO₂ and structural systematics of tetrahedral MM'X₂ compounds // J. Solid State Chem. – 2004. – V. 177, № 3. – P. 889–894.
10. Townsend M.G., Longworth G. and Roudaut E. Triangular-spin, kagome plane in jarosites // Physical Review B. – 1986. – V. 33. – P. 4919–4926.
11. Murtazaev A.K., Babaev A.B., Magomedov M.A. et al. 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. Chiaki Y., Yutaka O. Three-dimensional antiferromagnetic q-state Potts models: application of the Wang–Landau algorithm // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2001. – V. 34. – P. 8781
13. 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.
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. – P. 1294.
15. Landau D.P., Wang F., Tsai S.-H. Critical endpoint behavior: A Wang-Landau study // Comp. Phys. Comm. – 2008. – V. 179, № 8.
16. 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.
17. 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.
18. Zhou C.Bhatt R.N. Understanding and improving the Wang-Landau algorithm // Physical Review E. – 2005. – V. 72 (2). – P. 025701.

Поступила в редакцию 11 октября 2017 г.

UDC 537.9

DOI:10.21779/2542-0321-2017-32-4-14-24

Phase transitions in the Potts model on triangular lattice

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

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

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

The $q = 3$ Potts model on the triangular lattice with first and second nearest neighbors interaction is investigated by the Wang–Landau algorithm of Monte Carlo method. The Density of States of the system and temperature dependence of entropy S are calculated. It is shown that at low temperatures in the area of frustration entropy of the system have a universal value $S_0 = 0.304$. It is shown that, depending on the ratio of the interactions between the first and second nearest neighbors, the ground state can be both highly degenerate, indicating a frustration in the system, and degenerate weakly. The presence of phase transitions in the system of the first and second order is proved. The critical temperature of the phase transitions calculated and phase diagram of the system are determined. The Potts model on the triangular lattice with the interaction between the first and second nearest neighbor have three areas with different ground state structures: antiferromagnetic area $0 < J_1/J_2 < 0.190$, strongly degenerated frustrated area $0.190 < J_1/J_2 < 1.300$, and the collinear ordered area $J_1/J_2 > 1.300$. The phase transition from antiferromagnetic and collinear phases to paramagnetic phase are a phase transition of the first order, whereas the transition from frustrated phase to paramagnetic is a phase transition of the second order.

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

Received 11 October, 2017