

УДК 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2023-38-1-16-25

М.А. Магомедов¹, А.А. Муртазаева^{1, 2}, А.К. Муртазаев^{1, 2}, Л.К. Магомедова²,
Л.Р. Хибиева²

**Исследование температурных и полевых характеристик одномерной модели
Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями**

¹ Институт физики ДФИЦ РАН; Россия, 367000, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94; tagomedov_ma@mail.ru

² Дагестанский государственный университет; Россия, 367000 г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; gb-r@mail.ru

Высокоэффективными алгоритмами метода Монте-Карло (алгоритм Ванга–Ландау и репличный-обменный алгоритм) исследована одномерная модель Изинга с учетом конкурирующего обменного взаимодействия между первыми, вторыми и третьими соседями. Используя алгоритм Ванга–Ландау, вычислена плотность состояний системы, определены структуры основного состояния и рассчитаны температурные зависимости различных термодинамических параметров. Репличным-обменным алгоритмом рассчитаны температурные и полевые зависимости различных термодинамических параметров, таких, как внутренняя энергия E , теплоемкость C , энтропия S , намагниченность m , восприимчивость χ и т. д. Показано, как меняется основное состояние системы при наложении внешнего магнитного поля. Построена фазовая диаграмма и показано, что в зависимости от значения внешнего магнитного поля система может находиться в фазе I (имеет структуру +++---+++---...), в фазе II (имеет структуру +++---+++---...), в фазе III (все спины упорядочены вдоль поля: ++++++++...). Показано хорошее согласие результатов, полученных совершенно разными численными методами.

Ключевые слова: модель Изинга, плотность состояний, структура основного состояния, энтропия, фрустрация, алгоритм Ванга–Ландау, репличный-обменный алгоритм, метод Монте-Карло.

Исследование выполнено в рамках научной программы НЦФМ (проект «Исследования в сильных и сверхсильных магнитных полях»).

Низкоразмерные магнитные системы привлекают к себе внимание ученых достаточно давно [1–16]. Модель Изинга имеет точное решение в одномерном и двумерном случае. Однако добавление дополнительных обменных взаимодействий конкурирующего характера достаточно сильно усложняет задачу. В данной работе нами исследована одномерная модель Изинга с учетом конкурирующих обменных взаимодействий между ближайшими, следующими за ближайшими и третьими соседями, а также учитывается внешнее магнитное поле. Для исследований применены современные высокоэффективные алгоритмы метода Монте-Карло: репличный-обменный алгоритм, позволяющий исследовать полевые зависимости различных термодинамических параметров модели [17–19], и алгоритм Ванга–Ландау [20–23], позволяющий вычислить плотность состояний системы, определить структуру основного состояния, степень ее вырождения, а также рассчитать температурные зависимости любых термодинамических параметров системы.

Модель и метод исследований

Гамильтониан одномерной модели Изинга может быть представлен в виде:

$$H = -\frac{1}{2}J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \frac{1}{2}J_2 \sum_{\langle k,l \rangle} S_k S_l - \frac{1}{2}J_3 \sum_{\langle m,n \rangle} S_m S_n - h \sum_i S_i, \quad (1)$$

где первая сумма учитывает взаимодействие между первыми ближайшими соседями, вторая сумма – взаимодействие между следующими за ближайшими, третья сумма – взаимодействие между третьими соседями, четвертая сумма учитывает вклад в гамильтониан взаимодействия спинов с внешним магнитным полем h , спин S_i изинговский, и может принимать два значения $S_i = \pm 1$.

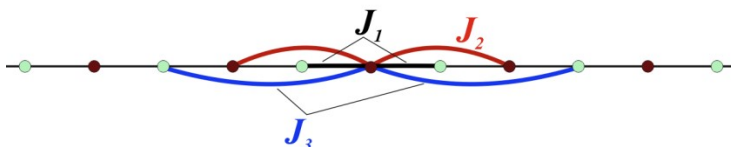


Рис. 1. Одномерная модель Изинга с учетом обменного взаимодействия между ближайшими, вторыми и третьими ближайшими соседями

Схематически модель изображена на рисунке 1, где темными кружками условно обозначены спины, направленные вверх, со значением $S_i = +1$, а светлыми – спины, направленные вниз, $S_i = -1$. В качестве обменных параметров в данной работе нами принимались следующие значения: $J_1 = 1$, $J_2 = -1$, $J_3 = -1$.

Наиболее часто применяемым при моделировании спиновых систем методом Монте-Карло является стандартный алгоритм Метрополиса, который отличается простотой реализации и может быть использован для моделирования практически любых спиновых систем. Однако в области фазовых переходов, а также при низких температурах данный алгоритм становится неэффективным. Для исследования систем в области фазовых переходов разработаны более эффективные кластерные алгоритмы (однокластерный алгоритм Вульфа, многокластерный алгоритм Свендсена–Янга, Алгоритм Нидермаера и т. д.). В области низких температур, особенно при наличии конкуренций между обменными взаимодействиями и проявлениями фрустрационных эффектов желательно применять другие алгоритмы. Одним из таких наиболее эффективных алгоритмов для исследования низкоразмерных систем, в которых возможны эффекты фрустрации, являются репличные алгоритмы. Они представляют собой целый класс различных алгоритмов, общая суть которых станет ясна из приведенного ниже описания репличного-обменного алгоритма.

Репличный-обменный алгоритм может быть описан в следующем виде [17–19]:

1. Одновременно классическим алгоритмом Метрополиса моделируются N независимых копий системы – реплик с различными температурами T_1, T_2, \dots, T_N .

2. После выполнения каждого Монте-Карло шага на спин для всех пар соседних реплик X_i и X_{i+1} производится обмен данными с вероятностью

$$w(X_i \rightarrow X_{i+1}) = \begin{cases} 1, & \text{for } \Delta \leq 0, \\ \exp(-\Delta), & \text{for } \Delta > 0, \end{cases} \quad (2)$$

где $\Delta = -(U_i - U_{i+1}) \cdot (1/T_i - 1/T_{i+1})$, U_i и U_{i+1} – энергии двух соседних реплик.

В репличном-обменном алгоритме каждая реплика совершает случайное блуждание в энергетическом пространстве. Обмен репликами позволяет решить проблему «застревания» системы в многочисленных состояниях с локальной минимальной энергией, которая характерна для спиновых систем с фрустрациями. Отметим также, что для эффективной работы алгоритма необходимо, чтобы разница температур между ближайшими репликами была мала, но в то же время общая ширина всего температурного интервала должна быть как можно больше, и для быстрой сходимости крайне желательно захватывать области выше температуры фазового перехода. Достигается это увеличением общего количества одновременно моделируемых реплик. Таким образом, число одновременно моделируемых нами реплик составляло 300, что является достаточно большой величиной и позволяет охватить весь интересующий нас температурный интервал.

Значения различных термодинамических параметров (намагниченности m , восприимчивости χ , теплоемкости C , энтропии S) для каждой реплики, имеющей свою температуру, рассчитывают, используя следующие флуктуационные соотношения:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3)$$

$$\chi = (NK) \left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 \right), \quad (4)$$

$$C = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (5)$$

$$S = \int_0^T \frac{C}{T} dT, \quad (6)$$

где $K = |J_1| / k_B T$, U – внутренняя энергия.

Исследования также проводились на основе алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК) [20–23]. Использование двух алгоритмов было необходимо для контроля правильности и точности проводимых расчетов. Алгоритм Ванга–Ландау является реализацией метода энтропийного моделирования. Он позволяет с высокой точностью вычислить плотность состояний системы, зная которую, можно легко вычислить любые интересующие нас термодинамические параметры системы. Алгоритм Ванга–Ландау оказался весьма эффективным для исследования различных спиновых систем, особенно дискретных [9]. Однако многочисленные исследования последних лет показывают, что данный алгоритм сохраняет высокую вычислительную эффективность для систем с относительно малым числом частиц и дискретным распределением энергии. Оба условия выполняются для объекта наших исследований, вследствие чего нами и был выбран именно этот алгоритм.

В данной работе алгоритм Ванга–Ландау был использован нами в следующем виде [15; 20–23]:

- Задается произвольная начальная конфигурация спинов. Стартовые значения плотности состояний задавались как $g(E)=1$, гистограммы распределений по энергиям обнулялись $H(E)=0$, начальное значение модификационного фактора принималось равным $f = f_0 = e^1 \approx 2.71828$.

- Многократно совершаем шаги в фазовом пространстве (совершая переворот произвольно выбранных спинов с вероятностью, заданной ниже), 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 на величину 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 проводился анализ магнитной структуры основного состояния и оно записывалось в графический файл. При этом проводилось сравнение текущей конфигурации спинов с ранее полученными, и только при обнаружении новой уникальной конфигурации производилось ее сохранение в графический файл. Далее данная структура заносится в специальную базу данных для этой модели для дальнейшего сравнения. Данная процедура позволяет избежать дублирования в графических файлах многократно встречающихся состояний с одинаковой магнитной структурой.

- 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.

Более подробно алгоритм Ванга–Ландау изложен в работах [20–23].

Ведутся также разработки с целью повышения эффективности алгоритма для кластеров больших размеров и систем с непрерывной симметрией.

Результаты моделирования

На рисунках 2 и 3 приведены результаты компьютерного моделирования, полученные как репличным-обменным алгоритмом, так и алгоритмом Ванга–Ландау. Сравнение численных данных, полученных двумя совершенно разными методами, показывает их высокую точность и согласие друг с другом. На рисунке 2 приведены температурные зависимости теплоемкости C , полученные как алгоритмом Ванга–Ландау, так и репличным-обменным алгоритмом.

На рисунке 3 также приведены температурные зависимости энтропии S для системы с линейными размерами $L = 60$, полученные как алгоритмом Ванга–Ландау, так и репличным-обменным алгоритмом. Алгоритм Ванга–Ландау позволяет вычислить энтропию напрямую, в то время как в случае репличного-обменного алгоритма исполь-

зуется формула (6), дающая значение энтропии с точностью до некоторой константы. Для определения этой константы мы вычислили энтропию системы вплоть до весьма высоких температур $T = 40$, а затем воспользовались условием $S(T = 40)/N = \ln 2$.

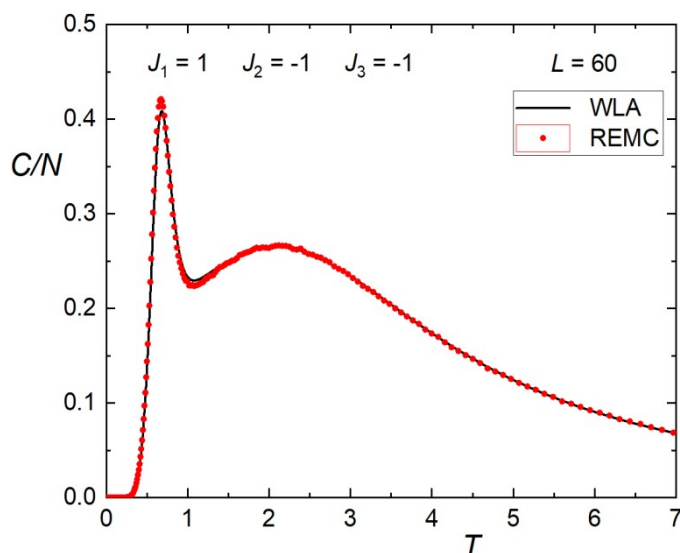


Рис. 2. Зависимость теплоемкости C от температуры

Как видно из рисунков 2 и 3, результаты, полученные двумя разными методами, практически совпадают. Такая же картина наблюдается и для других термодинамических параметров. Таким образом, результаты, полученные двумя разными методами, являются точными.

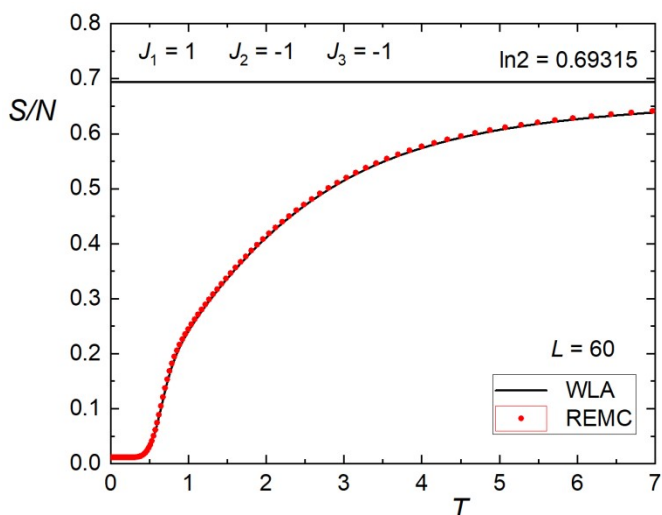


Рис. 3. Зависимость энтропии S от температуры

На рисунке 4 приведена зависимость энергии системы E от внешнего магнитного поля при температуре $T = 0.05$.

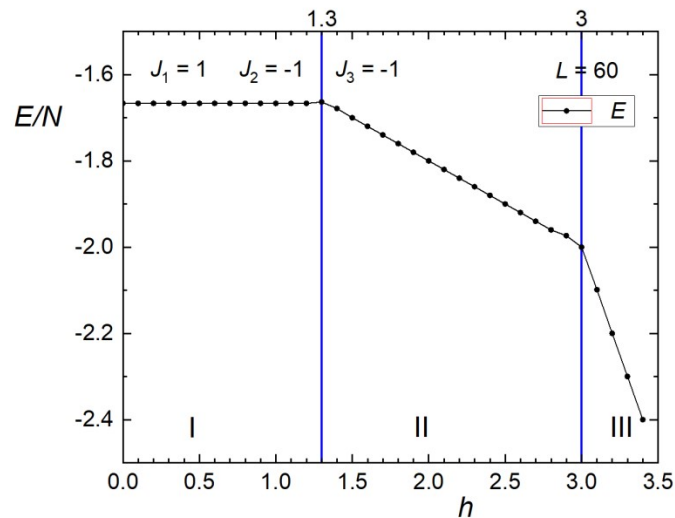





Рис. 4. Полевая зависимость энергии системы E

Как видно из рисунка, для различных областей значений величины внешнего магнитного поля в системе реализуются следующие типы упорядочений:

- I.  (3 вверх, 3 вниз).
- II.  (3 вверх, 2 вниз).
- III.  (все вверх).

Полевые зависимости намагниченности системы при различных температурах приведены на рисунке 5.

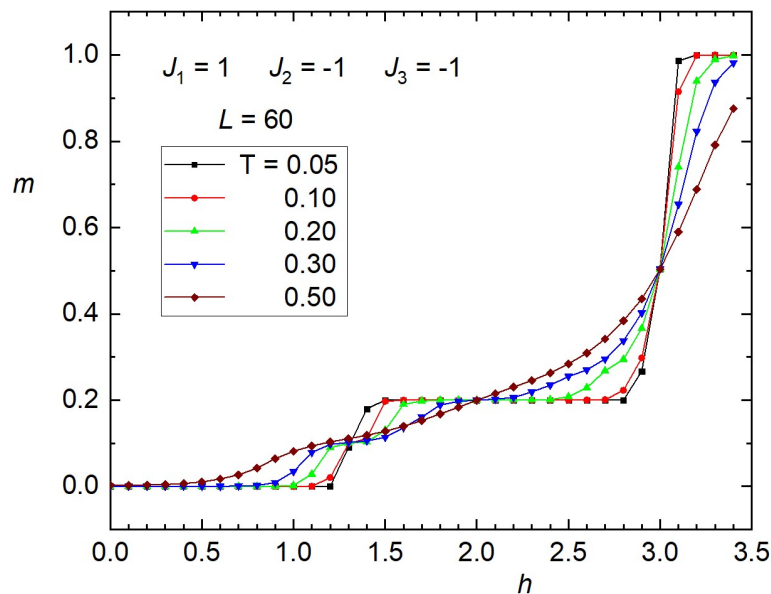


Рис. 5. Зависимость намагниченности m от внешнего магнитного поля h

Как видно из рисунка, на полевой зависимости намагниченности наблюдаются три плато, соответствующие перечисленным выше трем видам упорядочений. На каждом плато намагниченность принимает значения 0, 0.2 и 1 соответственно. При низких

температурах переход между плато происходит достаточно резко, однако с повышением температуры из-за роста тепловых флуктуаций переход становится более плавным.

На рисунке 6 приведены магнитные структуры, реализуемые при температуре $T = 0.05$ и различных значениях магнитного поля. Для каждой структуры слева приведено соответствующее значение магнитного поля h .

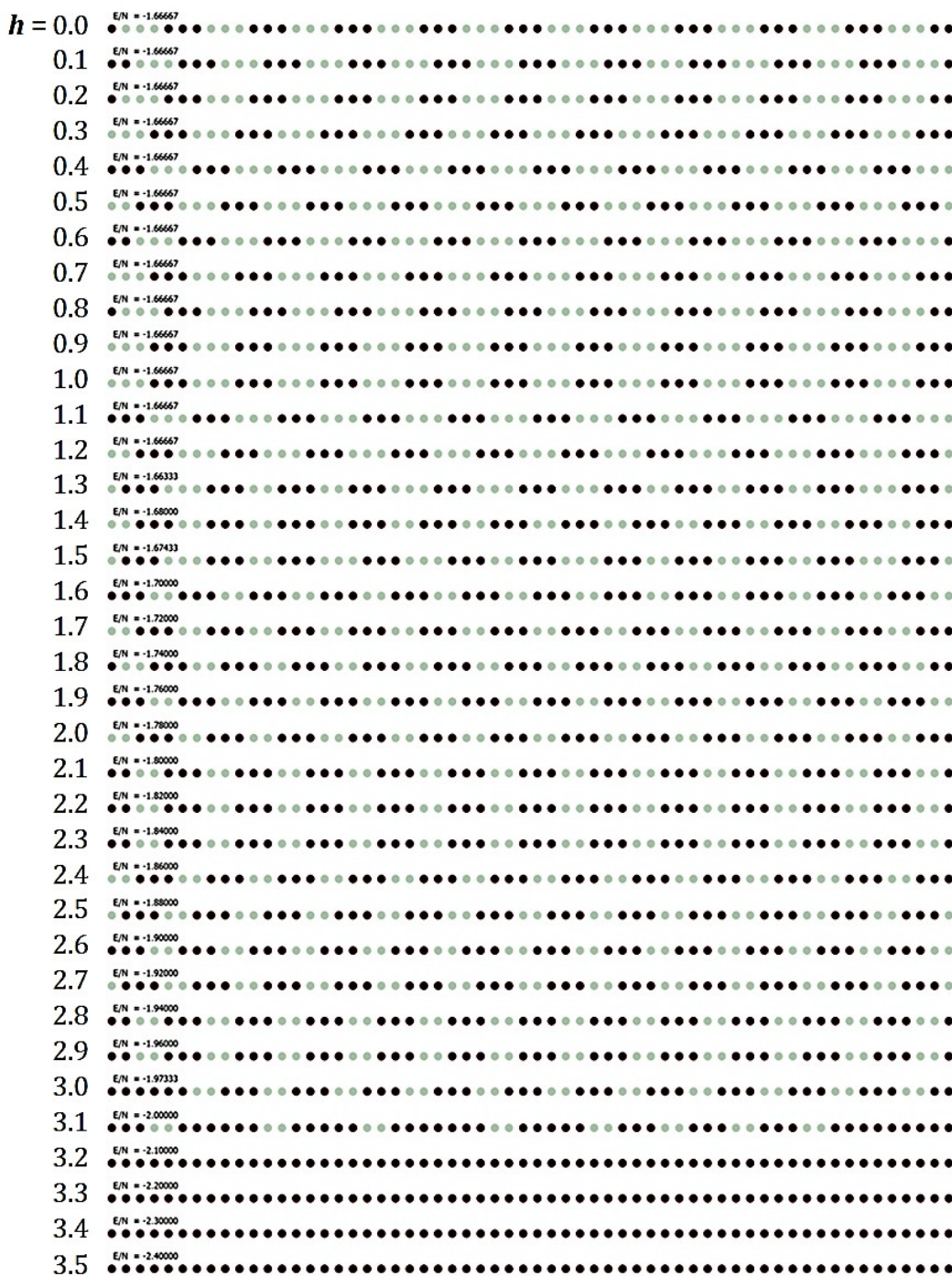


Рис. 6. Структуры основного состояния при $T = 0.05$ и различных значениях магнитного поля h для одномерной модели Изинга.

Заключение и выводы

Таким образом, в результате проделанной работы методом Монте-Карло с использованием различных современных алгоритмов (алгоритма Ванга–Ландау и репличного-обменного алгоритма) для модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями были вычислены плотности состояний $g(E)$, определены магнитные структуры основного состояния, рассчитаны температурные и полевые зависимости различных термодинамических параметров, таких, как внутренняя энергия E , теплоемкость C и энтропия S .

Литература

1. Azaria P., Giacomini H. An exactly solvable two-dimensional Ising model with magnetic field // J. Phys. A: Math. Gen. 1988. Vol. 21. – Pp. 935–940.
2. Shiba H. Quantization of Magnetic Excitation Continuum Due to Interchain Coupling in Nearly One-Dimensional Ising-Like Antiferromagnets // Prog. Theor. Phys. 1980. Vol. 64. – Pp. 466–478.
3. Scholl P., Schuler M., Williams H.J., et al. Quantum simulation of 2D antiferromagnets with hundreds of Rydberg atoms // Nature. 2021. Vol. 595 (7866). – Pp. 233–238.
4. Lajak'o P., and Igl'oi F. Mixed-order transition in the antiferromagnetic quantum Ising chain in a field // Phys. Rev. B. 2021. Vol. 103. – P. 174404.
5. Zarubin A.V., Kassan-Ogly F.A., Proshkin A.I. Frustrations and orderings in Ising chain with multiple interactions // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1389 (1). – P. 012009.
6. 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 Comm. 2016. Vol. 233. – Pp. 35–40.
7. Fumani F.K., Nemati S., and Mahdaviifar S. Quantum critical lines in the ground state phase diagram of spin-1/2 frustrated transverse-field Ising chains // Annalen der Physik. 2021. Vol. 533. – P. 2000384.
8. Nemati S., Khastehdel Fumani F., and Mahdaviifar S. Comment on quantum fidelity approach to the ground-state properties of the one-dimensional axial next-nearest-neighbor Ising model in a transverse field // Phys. Rev. E. 2020. V. 102. – P. 016101.
9. Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Исаева М.М. Термодинамика модели Изинга на решетке КагOME // Вестник ДГУ. Сер. 1: Естественные науки. 2017. Т. 32, вып. 2. – С. 19–28.
10. Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Магомедова Л.К., Исаева М.М. Фазовая диаграмма и структура основного состояния модели Изинга на решетке КагOME // Вестник ДГУ. Сер. 1: Естественные науки. 2018. Т. 33, вып. 3. – С. 57–66.
11. 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. Сер. 1: Естественные науки. 2016. Т. 31, вып. 1. – С. 43–50.
12. Магомедов М.А., Муртазаев А.К., Магомедова Л.К. Исследование модели Изинга на гексагональной решетке методом Ванга–Ландау // Вестник ДГУ. Сер. 1: Естественные науки. – 2016. Т. 31, вып. 4. – С. 71–76.

13. Murtazaev A.K., Magomedov M.A., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Magnetic and thermodynamic properties of the antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice in a magnetic field // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2022. Vol. 142. – Pp. 115320-1–115320-7.
14. Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A., Badiev M.K. Phase transitions and thermodynamic properties of antiferromagnetic Ising model with next-nearest-neighbor interactions on the Kagomé lattice // *Phase Transitions*. 2018. Vol. 91. – Pp. 610–618.
15. Murtazaev K. Sh., Magomedov M.A., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2023. Vol. 148. – Pp. 115646-1–115626-6.
16. Исаева М.М., Магомедов М.А. Исследование термодинамических параметров в модели магнитного дендримера алгоритмом Ванга–Ландау // *Вестник ДГУ. Сер. 1: Естественные науки*. 2020. Т. 35, вып. 2. – С. 67–75.
17. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena // *Physica A*. 1994. Vol. 205. – Pp. 41–64.
18. Morten Hagen, Byungchan Kim, Pu Liu, et al. Serial Replica Exchange // *J. Phys. Chem. B*. 2007. Vol. 111. – Pp. 1416–1423.
19. Sugita Y., Okamoto Y. Replica-exchange multicanonical algorithm and multicanonical replica-exchange method for simulating systems with rough energy landscape // *Chem. Phys. Lett*. 2000. Vol. 329, iss. 3–4. – Pp. 261–270.
20. Wang F., Landau D.P. Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states // *Phys. Rev. Lett*. 2001. Vol. 86. – Pp. 2050–2053.
21. Wang F., Landau D.P. Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram // *Phys. Rev. E*. 2001. Vol. 64. – P. 056101.
22. Landau D.P., Wang F. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics // *Braz. J. Phys*. 2004. Vol. 34 (2A). – Pp. 354–362.
23. Landau D.P., Tsai Shan-Ho, Exler M. A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling // *Am. J. Phys*. 2004. Vol. 72, no. 10. – Pp. 1294–1302.

Поступила в редакцию 27 января 2023 г.

UDC 537.9

DOI: 10.21779/2542-0321-2023-38-1-16–25

The Investigation of a Temperature and Field Characteristics of the One-dimensional Ising Model with Competing Exchange Interactions

**M.A. Magomedov¹, A.A. Murtazaeva^{1, 2}, A.K. Murtazaev^{1, 2}, L.K. Magomedova²,
L.R. Khibieva²**

¹ *Institute of Physics DFRC RAS; Russia, 367000, Makhachkala, M. Yaragsky st., 94; magomedov_ma@mail.ru*

² *Dagestan State University; Russia, 367000, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a; gb-r@mail.ru*

The high-efficient Wang-Landau and replica exchange algorithm of the Monte-Carlo method is used for the one-dimensional Ising model studying, with regards to the competing exchange interaction between the first, second and third nearest neighbors and external magnetic field. Using the Wang-Landau algorithm, the density of states is calculated, the ground state magnetic structures are determined and the temperature dependences of the various thermodynamic parameters, such as internal energy E , specific heat C , entropy S , magnetization m , susceptibility χ etc. are calculated. It is shown how the ground state (state with minimal energy) of the system changes when applying an external magnetic field. The phase diagram is plotted and it is shown that, depending on the value of the external magnetic field, the system can be in phase I (has a structure +++ --- +++---...), in phase II (has a structure +++--+++--...), in phase III (all the spins are arranged along the magnetic field: ++++++++...). A good agreement of the results obtained by the two completely different numerical methods is shown.

Keywords: *Ising model, density of states, ground state structures, entropy, frustration, Wang-Landau algorithm, replica exchange algorithm, Monte Carlo method.*

The reported study was carried out as part of the Scientific Program of the NCFM (the project "Research in strong and superstrong magnetic fields").

Received 27 January 2023