

Критические свойства антиферромагнитной декорированной модели Изинга на квадратной решетке

В. А. Мутайламов, А. К. Муртазаев

*Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра РАН
Махачкала, 367003, Россия
E-mail: vadim.mut@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 23 марта 2020 г., после переработки 19 июня 2020 г.,
опубликована онлайн 22 июля 2020 г.

Исследовано статическое критическое поведение двумерной декорированной модели Изинга на квадратной решетке во внешнем магнитном поле с использованием методов вычислительной физики. Рассмотрен частный случай, когда обменное антиферромагнитное взаимодействие наблюдается только между декорированными спинами и спинами, расположенными в узлах решетки. Показано, что при значении внешнего магнитного поля $H_0 = 4$ в модели наступает частичное вырождение в основном состоянии. При значениях поля близкого к $H_0 = 4$ наблюдается эффект расщепления теплоемкости.

Ключевые слова: модель Изинга, фрустрации, декорированная решетка, численное моделирование.

Введение

В современной физике конденсированного состояния интенсивно изучаются модели магнитных материалов, в которых помимо обменных взаимодействий учитываются различные усложняющие факторы, не учитываемые моделями первого приближения. Эти факторы могут оказывать значительное влияние на характер критического поведения магнетиков и приводить к появлению большого разнообразия магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов между ними.

Так, например, к изменению классов универсальности статического и динамического критического поведения приводит учет одноосной анизотропии в модели антиферромагнетика Cr_2O_3 [1, 2] и учет диполь-дипольного взаимодействия в модели ферромагнитного Gd [3–5]. На примере ферромагнитной модели Изинга можно показать, что учет антиферромагнитного взаимодействия частиц второй координационной сферы приводит к появлению конкурирующих взаимодействий, в результате чего в зависимости от соотношения обменных взаимодействий модель может иметь как ферромагнитное низкотемпературное упорядочение, так и коллинеарное [6, 7]. При этом граница между ферромагнитной фазой и парамагнитной представляет собой линию фазовых переходов второго рода, тогда как граница между коллинеарной и парамагнитной фазами является линией фазовых переходов первого рода.

За последние годы значительно возрос интерес к исследованию декорированных структур благодаря разнообразию наблюдаемых в них новых явлений и особенностей по сравнению с исходными недекорированными решетками. В частности, декорирование порождает множество фрустрационных эффектов, может приводить как к подавлению фазовых переходов, существующих в недекорированных решетках, так и к возникновению новых фазовых переходов. Кроме того, появляются новые типы частичного упорядочения, а также разнообразные формы расщепления теплоемкости. Богатство критического поведения декорированных решеток обусловлено возможностью многократного декорирования.

Понятие «декорированная решетка», относящееся к магнитной модели Изинга, впервые предложено в 1951 г. в работе Сиози [8]. Суть его заключается во введении дополнительных спинов в промежутки между узлами исходной решетки. Это понятие можно обобщить и на другие типы кристаллических решеток. Фактически подавляющее большинство реальных структур являются декорированными.

Большого прогресса достигло исследование планарных декорированных структур методами теоретической физики. Так, например, найдены точные решения для декорированных моделей со смешанными спинами на двумерной квадратной решетке [9, 10], точное решение для двукратно декорированной модели на квадратной

решетке [11]. Исследованы магнитные и магнитокалорические свойства с построением фазовых диаграмм основного состояния модели Изинга со смешанными спинами на треугольной решетке [12]. Изучены декорированные структуры на квадратной решетке с многоспиновым взаимодействием [13, 14].

При изучении критических свойств моделей магнитных материалов успешно применяются и методы вычислительной физики. Методы численного эксперимента применимы к структурам, для которых нет точного аналитического решения. Это, как правило, трехмерные модели, модели со сложным гамильтонианом, учитывающим влияние дополнительных факторов (внешнее поле, анизотропия и т.п.). Методы вычислительной физики строго математически обоснованы и позволяют исследовать критические свойства широкого спектра моделей магнитных материалов.

Модель и метод

Методами численного эксперимента исследовано статическое критическое поведение двумерной декорированной по двум направлениям модели Изинга на квадратной решетке. В данной модели декорированные спины располагаются между узлами исходной квадратной решетки в x - и y -направлениях. Рассмотрен частный случай, когда обменное антиферромагнитное взаимодействие присутствует только между декорированными спинами и спинами, расположенными в узлах решетки. Схематически структура решетки приведена на рис. 1.

Гамильтониан исследованной модели может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2}J \sum_{ij} S_i S_j - H_0 \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1, \quad (1)$$

где S_i — изинговский спин в узле решетки i , первая сумма учитывает антиферромагнитное обменное взаи-

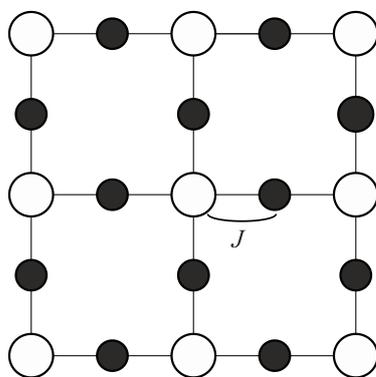


Рис. 1. Декорированная по двум направлениям модель Изинга на квадратной решетке (o — узловые спины, • — декорированные).

модействие с величиной $J = -1$ между узловыми и декорированными спинами, вторая сумма учитывает влияние внешнего магнитного поля H_0 , направленного вдоль оси z .

В настоящей работе моделировалась частица квадратной формы с периодическими граничными условиями, содержащая $L \times L$ элементарных ячеек в каждом кристаллографическом направлении. Рассматривалась система с линейным размером $L = 32$, содержащая $N = 3072$ спина. Как видно на рис. 1, на каждую кристаллографическую ячейку приходится один узловой спин и два декорированных. Частица ориентировалась в пространстве в плоскости XY таким образом, чтобы оси координат совпадали с кристаллографическими осями.

Вычисления проводились стандартным алгоритмом Метрополиса метода Монте-Карло [15, 16]. В ходе моделирования для приведения спиновой системы в состояние термодинамического равновесия отбрасывался начальный неравновесный участок марковской цепи в $5 \cdot 10^4$ шагов Монте-Карло на спин, заведомо больший, чем время релаксации исследуемой частицы. В равновесном состоянии вычислялись средние по ансамблю значения термодинамических величин. Длина равновесного участка составляла $1,5 \cdot 10^5$ шагов Монте-Карло на спин. Кроме того, для улучшения статистики при каждой температуре для всех линейных размеров проводились три процесса моделирования при различных начальных спиновых конфигурациях. Полученные результаты усреднялись между собой, этого достаточно для получения достоверной качественной картины — результаты с высокой точностью накладывались друг на друга. Статистическая погрешность меньше, чем размер точек на представленных ниже графиках. Дальнейшее увеличение статистики приводит к изменениям в результатах, которые визуальны на графиках не видны.

Исследования выполнены в диапазоне температур от $T = 0,01$ до $T = 5$ с шагом $\Delta T = 0,05$ и в интервале внешних магнитных полей от $H_0 = 0$ до $H_0 = 5$ (здесь и далее все величины приведены в относительных единицах). Для случая $H_0 = 0$ вблизи области фазового перехода шаг по температуре составил $\Delta T = 0,0125$. Для определения основного состояния при всех значениях H_0 нами были получены равновесные спиновые конфигурации при температурах $T = 10^{-3}$ и $T = 10^{-4}$.

При исследовании фазовых переходов важен правильный выбор параметра порядка η . Для антиферромагнитной модели Изинга в отсутствие внешнего магнитного поля удобным параметром порядка является модуль разности намагниченности подрешеток. Во внешнем магнитном поле ситуация изменяется, так как сильное поле может вызвать переориентацию подрешеток, и модель в основном состоянии будет иметь не антиферромагнитное упорядочение, а ферромагнитное. При наличии декорированных спинов картина услож-

няется еще больше. Поэтому для простоты в качестве параметра порядка в работе выбрана величина

$$\eta = 1 - S / \ln 2, \quad (2)$$

где S — энтропия.

Такой выбор обусловлен тем, что при $t \rightarrow 0$ спиновая система упорядочена, энтропия обращается в нуль, и параметр порядка становится равным единице. При высоких температурах энтропия стремится к логарифму числа состояний, а параметр порядка, соответственно, стремится к нулю.

Алгоритм Метрополиса не позволяет напрямую получить значение энтропии. Поэтому для ее вычисления использовался метод Ванга–Ландау [17]. Энтропия вычислялась в диапазоне $T = 0,01-30$ с шагом $\Delta T = 0,01$ для всех значений внешнего поля H_0 . Кроме того, метод Ванга–Ландау использовался для определения основного состояния, так как в отличие от алгоритма Метрополиса спиновые конфигурации получались не моделированием при как можно более низких температурах, а непосредственно из состояния с минимальной энергией. Отметим, что основные состояния, полученные двумя методами, совпали между собой.

Результаты

На рис. 2 приведены зависимости модуля вектора намагниченности M от температуры при различных значениях внешнего поля (здесь и далее для наглядности на графике отражены не все полученные точки). Модуль вектора намагниченности вычислялся как

$$M = \frac{1}{N} \left| \sum_i S_i \right|. \quad (3)$$

Как видно на рисунке, в отсутствие внешнего поля модуль вектора намагниченности $M \rightarrow 1/3$ при $T \rightarrow 0$. Это связано с тем, что при $H_0 = 0$ модель в основном

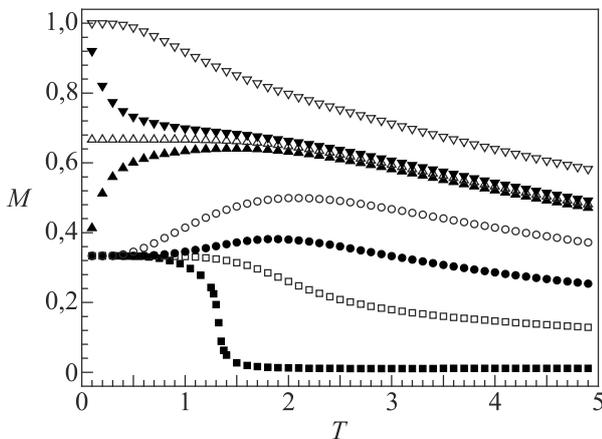


Рис. 2. Зависимости модуля вектора намагниченности M от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (■); 1 (□); 2 (●); 3 (○); 3,9 (▲); 4 (△); 4,1 (▼); 5 (◇).

состоянии имеет антиферромагнитное упорядочение: все узловые спины направлены в одну сторону, все декорированные — в другую. Число узловых спинов составляет $1/3$ от общего числа спинов, число декорированных — $2/3$. В результате суммарный магнитный момент оказывается нескомпенсированным на величину $1/3$.

Такая картина с основным состоянием сохраняется вплоть до значения внешнего поля $H_0 = 4$. При данном значении внешнего поля в системе наступает частичное разупорядочение: подрешетка декорированных спинов сохраняет свое упорядоченное состояние, а подрешетка узловых спинов становится полностью разупорядоченной, соответственно, суммарный магнитный момент становится равным $2/3$. При этом в спиновой системе наблюдается вырождение в основном состоянии и появляются фрустрации.

Отметим, что сама рассматриваемая модель не является фрустрированной. В отсутствие внешнего поля фрустрации могут возникать из-за геометрии решетки или из-за конкуренции обменных взаимодействий. В данном случае нет ни того, ни другого. Решетка упорядочена в основном состоянии, вырождения нет. Но при наличии внешнего магнитного поля $H_0 = 4$ возникает конкуренция между обменным взаимодействием и внешним полем. Именно эта конкуренция приводит к появлению вырождения в основном состоянии и появлению фрустраций, но в противоположность фрустрированным моделям наблюдается вырождение не всей спиновой системы, а лишь ее части при определенном значении внешнего поля. Такое поле часто называют фрустрирующим, а состояние спиновой системы частично разупорядоченным.

Дальнейшее увеличение внешнего поля приводит к ферромагнитному упорядочению в основном состоянии, при этом и узловые, и декорированные спины ориентированы в одну сторону вдоль поля. Отметим, что сколь угодно малое отклонение от значения фрустрирующего поля выводит систему из частично разупорядоченного состояния.

Вышесказанное наглядно иллюстрируют температурные зависимости модуля вектора намагниченности подрешетки декорированных спинов M_d и подрешетки узловых спинов M_n :

$$M_d = \frac{1}{N_d} \left| \sum_i S_{di} \right|, \quad M_n = \frac{1}{N_n} \left| \sum_i S_{ni} \right|, \quad (4)$$

где N_d и N_n — число декорированных и узловых спинов соответственно, S_{di} и S_{ni} — декорированные и узловые спины. Данные зависимости представлены на рис. 3 и 4.

Как видно на графиках, подрешетка декорированных спинов при $T \rightarrow 0$ упорядочена при любых значениях внешнего поля H_0 , тогда как подрешетка узловых спинов в основном состоянии полностью разупорядо-

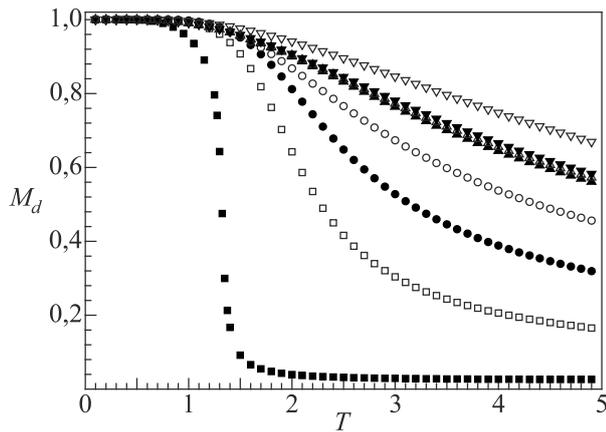


Рис. 3. Зависимости модуля вектора намагниченности M_d подрешетки декорированных спинов от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (■); 1 (□); 2 (●); 3 (○); 3,9 (▲); 4 (Δ); 4,1 (▼); 5 (∇).

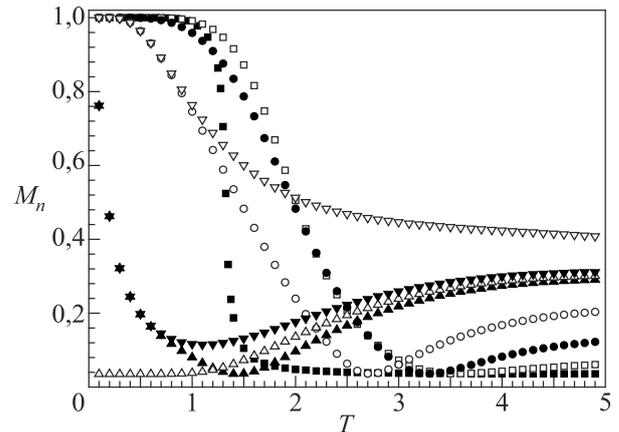


Рис. 4. Зависимости модуля вектора намагниченности подрешетки узловых спинов M_n от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (■); 1 (□); 2 (●); 3 (○); 3,9 (▲); 4 (Δ); 4,1 (▼); 5 (∇).

чена при значении поля $H_0 = 4$. При любом, даже сколь угодно малом, отклонении от фрустрирующего поля подрешетка узловых спинов также становится упорядоченной при $T \rightarrow 0$.

На рис. 5 представлена зависимость логарифма плотности состояний $g(E)$ от полной энергии E для различных значений внешнего поля H_0 , полученная методом Ванга–Ландау. Проведено нормирование на число основных энергетических состояний [17], поскольку в процессе моделирования алгоритм дает лишь относительную величину $g(E)$. Это гарантирует точность вычисления плотности состояний при низких значениях энергии, что важно для вычисления термодинамических величин при низких температурах. Такая нормировка плотности состояний при $T = 0$ позволяет получить точное значение для внутренней энергии, энтропии и свободной энергии [17].

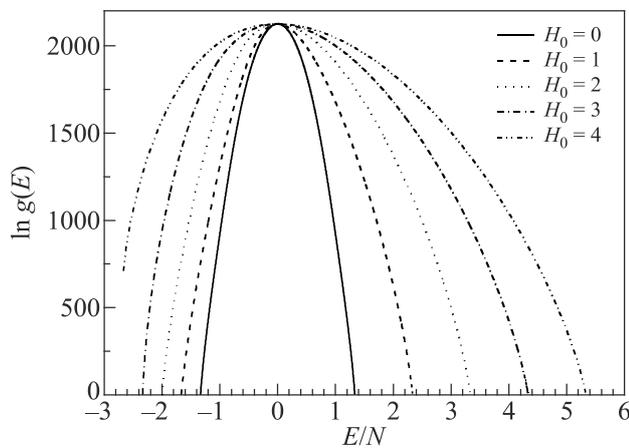


Рис. 5. Зависимости логарифма плотности состояний от энергии при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 .

На рис. 5 видно, что с ростом поля увеличивается минимально и максимально возможные значения полной энергии спиновой системы. При этом увеличение этих значений несимметрично: $|E_{\max}| > |E_{\min}|$ при $H_0 > 0$. Это объясняется тем, что максимальному значению энергии соответствует конфигурация, когда все спины направлены в одну сторону вдоль поля. В этом случае, согласно гамильтониану (1), максимальное значение энергии увеличится на величину H_0 . Основному состоянию с минимальным значением энергии, как показано ранее, соответствует антиферромагнитное упорядочение спинов, при котором $1/3$ спинов направлены в одну сторону, а $2/3$ в другую. Следовательно, минимальное значение энергии уменьшится на величину $1/3 H_0$.

Отдельно стоит отметить график плотности состояний при значении поля $H_0 = 4$, когда подрешетка узловых спинов полностью разупорядочена. Поскольку

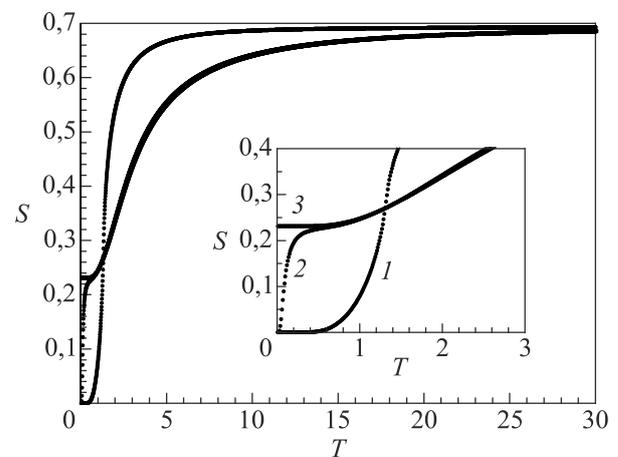


Рис. 6. Зависимости энтропии S от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (кривая 1); 3,9 (кривая 2); 4 (кривая 3).

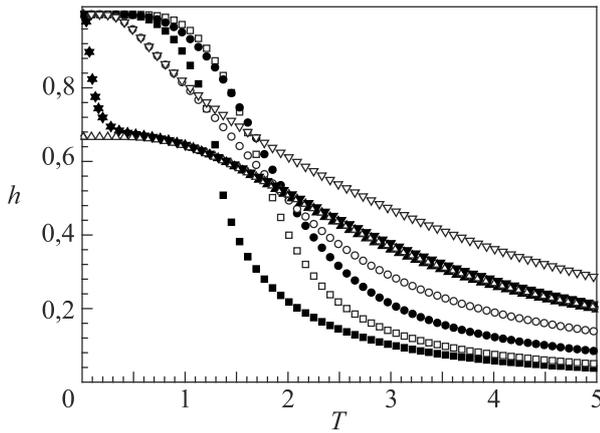


Рис. 7. Зависимости параметра порядка h от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (■); 1 (□); 2 (●); 3 (○); 3,9 (▲); 4 (Δ); 4,1 (▼); 5 (∇).

декорированные спины имеют только одну упорядоченную конфигурацию вдоль поля, а количество узловых спинов равно $\frac{1}{3}N$, то в итоге основному состоянию с минимумом энергии соответствует $2^{N/3}$ спиновых конфигураций. В настоящей работе $\ln(2^{3072/3}) \approx 710$, что и наблюдается на графике.

На рис. 6 представлена зависимость энтропии S от температуры при различных значениях внешнего поля. Для наглядности кривые приведены лишь для трех полей. На вставке показана область вблизи нулевой температуры. Полученные результаты свидетельствуют о том, что энтропия стремится к нулю при $T \rightarrow 0$ для всех значений внешнего поля кроме $H_0 = 4$. Во фрустрирующем поле энтропия S стремится к $0,23(1)$, что также указывает на наличие вырождения в основном состоянии. С ростом температуры энтропия для всех значений внешнего поля стремится к $S = \ln 2$.

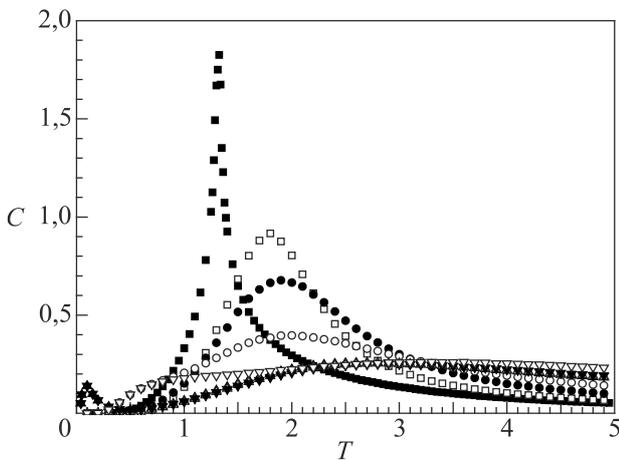


Рис. 8. Зависимости теплоемкости C от температуры при различных значениях внешнего магнитного поля H_0 : 0 (■); 1 (□); 2 (●); 3 (○); 3,9 (▲); 4 (Δ); 4,1 (▼); 5 (∇).

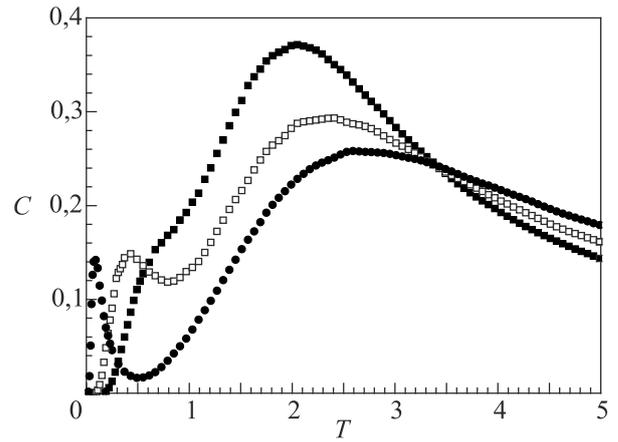


Рис. 9. Расщепление пика теплоемкости C при низких температурах вблизи фрустрирующего поля H_0 : 3,9 (●); 3,5 (□); 3,1 (■).

Параметр порядка представлен на рис. 7. Видно, что при $T \rightarrow 0$ система упорядочена для всех значений внешнего поля, кроме фрустрирующего. Чем ближе значение внешнего поля к фрустрирующему, тем быстрее с ростом температуры система приходит в разупорядоченное состояние.

На рис. 8 приведена зависимость теплоемкости C от температуры при различных значениях внешнего поля. Как видно на рисунке, рост магнитного поля подавляет фазовый переход в исследуемой модели. В отсутствие внешнего поля максимум теплоемкости для исследованного линейного размера приходится на температуру $T = 1,32(1)$. Обращает на себя внимание наличие второго максимума теплоемкости (расщепление теплоемкости) при низких температурах при значениях внешнего поля $H_0 = 3,9$ и $H_0 = 4,1$.

Расщепление пика теплоемкости наблюдается при значениях внешнего поля, близких к фрустрирующему полю. Более подробно такое поведение теплоемкости приведено на рис. 9. Данные графики получены методом Ванга–Ландау. Для каждого значения внешнего поля процесс моделирования проводился 5 раз, полученные результаты усреднялись между собой. Как видно на рисунке, чем ближе значение внешнего поля к величине фрустрирующего поля, тем ярче проявляется эффект расщепления. При значении поля $H_0 = 3,1$ расщепление практически отсутствует. Аналогичная картина наблюдается, когда внешнее поле больше фрустрирующего ($H_0 = 4,1$, $H_0 = 4,5$, $H_0 = 4,9$).

Заключение

Полученные результаты показывают, как наличие декорированных спинов изменяет структуру и свойства исходной недекорированной решетки. Так, в низкотемпературной упорядоченной фазе спиновая система со-

храняет антиферромагнитное упорядочение, но магнитные моменты подрешеток уже не компенсируют друг друга. То есть модель фактически становится ферромагнитной. Во фрустрирующем поле наблюдается вырождение в основном состоянии, как и в случае недекорированной модели Изинга, но при этом фрустрированной становится не вся спиновая система, а лишь ее часть.

В настоящей работе рассмотрен частный случай, когда обменное взаимодействие существует только между узловыми спинами и декорированными. В общем же случае узловые спины способны взаимодействовать не только с декорированными узлами, но и друг с другом. При этом свойства модели могут в значительной степени изменяться в зависимости от соотношения величин этих двух взаимодействий. Необходимы дальнейшие исследования в этой области, направленные на построение фазовых диаграмм, определение типов фазовых переходов, вычисление критических индексов и критических температур.

1. А. К. Муртазаев, *ФНТ* **25**, 469 (1999) [*Low Temp. Phys.* **25**, 344 (1999)].
2. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, Х. К. Алиев, В. А. Мутайламов, *ЖЭТФ* **117**, 559 (2000).
3. Х. К. Алиев, И. К. Камилов, О. М. Омаров, *ЖЭТФ* **94**, 153 (1988).
4. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. А. Магомедов, *ЖЭТФ* **120**, 1535 (2001).
5. А. К. Муртазаев, В. А. Мутайламов, *ЖЭТФ* **128**, 344 (2005).
6. R. A. dos Anjos, J. R. Viana, J. R. de Sousa, and J. A. Plascak, *Phys. Rev. E* **76**, 022103 (2007).
7. O. D. R. Salmon, N. Crokidakis, M. A. Neto, I. T. Padilha, J. R. Viana, and J. R. de Sousa, *Int. J. Mod. Phys. B* **27**, 1350162 (2013).
8. I. Syozi, *Prog. Theor. Phys.* **35**, 306 (1951).
9. J. Strečka, M. Rebič, O. Rojas, and S. M. de Souza, *J. Magn. Magn. Mater.* **469**, 655 (2019).
10. J. Strečka, O. Rojas, and S. M. de Souza, *Phys. Lett. A* **383**, 2451 (2019).
11. H. Čenčariková, J. Strečka, and M. L. Lyra, *J. Magn. Magn. Mater.* **401**, 1106 (2016).
12. L. Gáliková and J. Strečka, *Physica E* **99**, 244 (2018).
13. M. Jaščur, V. Štubňa, K. Szalowski, and T. Balcerzak, *J. Magn. Magn. Mater.* **417**, 92 (2016).
14. V. Štubňa and M. Jaščur, *J. Magn. Magn. Mater.* **442**, 364 (2017).
15. D. P. Landau, *Physica A* **205**, 41 (1994).
16. К. Биндер, *Методы Монте-Карло в статистической физике*, Мир, Москва (1982).
17. D. P. Landau, Shan-Ho Tsai, and M. Exler, *Am. J. Phys.* **72**, 1294 (2004).

Критичні властивості антиферромагнітної декорованої моделі Ізінга на квадратній ґратці

В. А. Мутайламов, А. К. Муртазаєв

Досліджено статичну критичну поведінку двовимірної декорованої моделі Ізінга на квадратній ґратці у зовнішньому магнітному полі з використанням методів обчислювальної фізики. Розглянуто окремий випадок, коли обмінна антиферромагнітна взаємодія спостерігається тільки між декорованими спінами та спінами, які розташовані у вузлах ґратки. Показано, що при значенні зовнішнього магнітного поля $H_0 = 4$ у моделі настає часткове виродження в основному стані. При значеннях поля близького до $H_0 = 4$ спостерігається ефект розщеплення теплоємності.

Ключові слова: модель Ізінга, фрустрації, декорована ґратка, критичні явища, чисельне моделювання.

Critical properties of the antiferromagnetic decorated Ising model on a square lattice

V. A. Mutailamov and A. K. Murtazaev

Using the methods of computational physics, the static critical behavior of a two-dimensional decorated Ising model on a square lattice in an external magnetic field is investigated. A special case is considered when the exchange antiferromagnetic interaction is present only between decorated spins and spins located at lattice sites. It is shown that, when the external magnetic field is $H_0 = 4$, the model undergoes partial degeneracy in the ground state. At values of the field close to $H_0 = 4$, the effect of splitting of the specific heat is observed.

Keywords: Ising model, frustrations, decorated lattice, numerical simulation.