

Influence of the interaction on the heat capacity critical exponent for 1D Ising ferromagnet with periodical boundary conditions

Zh. V. Dzyuba[†], V. N. Udodov, D. V. Spirin

[†]dudareva82@gmail.com

Katanov Khakas State University, 90 Lenin st., 665017, Abakan, Russia

In the framework of the spin flip dynamics algorithm with an original expression for the energy, an influence of the interaction of second, third neighbors, four-particle interaction, temperature and size of a 1D Ising ferromagnet on the heat capacity critical exponent is studied. Periodic border conditions are used. The critical index α is calculated by the finite size scaling method. It is established that the growth of energy parameters of the multi-spin interaction significantly affects the heat capacity exponent. Interaction energy of third neighbors decreases the value of α to a greater extent than the second-neighbor interaction J_2 and four-particle one J_{1-4} . Different characters of the influence of pair and four-particle interactions on α are revealed. Energy parameters are established for which this critical exponent attains negative values. For instance, taking into account the interaction energy of third neighbors, with an approach to the critical region, the heat capacity critical exponent has a minimum near negative value of $\alpha = -0.0043 \pm 0.0005$. With increasing number of nodes in the 1D Ising chain, heat capacity critical exponent increases. Extrapolation according to the inverse size of the system in the thermodynamic limit gives the values $\alpha = 0.19 \pm 0.02$, $\alpha = 0.17 \pm 0.02$, $\alpha = 0.20 \pm 0.02$, when one takes into account the interaction energy of second neighbors $J_2 = 0.1$, third neighbors $J_3 = 0.1$ and four-particle interaction $J_{1-4} = 0.1$, respectively. Note that the second neighbor and four-particle interaction energies do not change the sign of the critical exponent for $N > 6$, and when approaching the critical region the critical exponent α tends to zero. The results obtained are compared with the values for Ising model with "broken ends" boundary conditions, as well as with other known results for two-dimensional and three-dimensional cases.

Keywords: ferromagnet, heat capacity, heat capacity critical exponent, one-dimensional magnet, Ising model, periodical boundary conditions.

Влияние взаимодействия на критический индекс теплоемкости 1D изинговского ферромагнетика, замкнутого в кольцо

Дзюба Ж. В.[†], Удодов В. Н., Спирин Д. В.

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, ул. Ленина 90, 665017, Абакан, Россия

В рамках разработанной компьютерной реализации известного алгоритма Метрополиса (с оригинальным выражением для энергии) с динамикой «опрокидывания спина» исследовано влияние взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия, температуры и размера 1D изинговского ферромагнетика на критический индекс теплоемкости. Использовались периодические граничные условия. Методом конечномерного масштабирования рассчитан критический индекс теплоемкости α . Установлено, что рост энергетических параметров многоспинового взаимодействия существенно влияет на этот индекс. Энергия взаимодействия третьих соседей J_3 сильнее уменьшает значения индекса теплоемкости α , чем взаимодействие вторых соседей J_2 и четырехчастичное взаимодействие J_{1-4} . Показано различие в характере влияния парного взаимодействия и четырехчастичного взаимодействия на индекс α . Установлены энергетические параметры, при которых этот индекс принимает отрицательные значения. Так, при учете энергии взаимодействия третьих соседей, с приближением к критической области индекс теплоемкости α имеет минимум при отрицательных значениях $\alpha = -0.0043 \pm 0.0005$. С ростом числа узлов N в одномерной цепочке Изинга индекс теплоемкости увеличивается. Экстраполяция по обратному размеру системы в термодинамическом пределе дает значение $\alpha = 0.19 \pm 0.02$, $\alpha = 0.17 \pm 0.02$, $\alpha = 0.20 \pm 0.02$ при учете энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0.1$, третьих соседей $J_3 = 0.1$ и четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0.1$, соответственно. Заметим, что энергия взаимодействия вторых соседей и энергия четырехчастичного взаимодействия не меняют знака критического индекса для $N > 6$ и при приближении к критической области индекс α стремится к нулю. Полученные результаты сопоставлены со значениями для модели Изинга с граничными условиями «оборванные концы», а также другими известными результатами для двумерного и трехмерного случаев.

Ключевые слова: ферромагнетик, теплоемкость, критический индекс теплоемкости, одномерный магнетик, модель Изинга, периодические граничные условия.

В последнее время магнитные свойства одноцепочечных магнитов привлекли большое внимание, так как они обладают медленной релаксацией намагниченности [1–5]. Такое уникальное магнитное поведение было объяснено в рамках теории Глаубера, обобщенной для ферромагнитных цепочек, связанных анизотропных спинов соединения типа $[\text{Mn}_2(\text{saltmen})_2\text{Ni}(\text{pao})_2(\text{L}^1)_2](\text{A})_2$. Это открывает новые перспективы для разработки одноцепочечных магнитов [2]. За последнее время приобретен большой опыт в настройке, управлении и манипулировании свойствами молекул (спин, анизотропии, окислительно-восстановительный потенциал, электрическое поле и т.д.), что позволяет создавать материалы с новыми функциональными возможностями [3]. Не смотря на эти достижения, критические индексы в таких системах измерить экспериментально пока не удастся. В теории для анализа низкоразмерных анизотропных магнитных систем используют разные методы компьютерного моделирования, среди них: метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, а также стохастические уравнения. В данной работе исследовать процесс перехода антиферромагнетик — ферромагнетик позволяет алгоритм Метрополиса [6]. Теплоемкость рассчитывалась после установления в системе равновесия, которое, как считалось, наступает на шаге $\tau + 3\sigma$, где τ число шагов Монте-Карло на спин (в нашем эксперименте $\text{NMCS} = 10000$), за которое система достигнет равновесия (время релаксации), σ среднеквадратичное отклонение времени релаксации в серии параллельных опытов. В данном эксперименте использовалось $L = 1000$ параллельных опытов (на каждом последовательном опыте число реализаций $Q = 100$), что является оптимальным с точки зрения уменьшения погрешности, устранения зависимости времени релаксации от числа реализаций алгоритма и продолжительности работы программы.

Статья посвящена исследованию влияния взаимодействия вторых, третьих соседей, четырехчастичного взаимодействия, температуры и размера системы на критический индекс теплоемкости 1D изинговского ферромагнетика. Известно, что в области фазового перехода свойства тела могут быть описаны набором критических индексов, определяющих законы изменения различных величин, при приближении к точке перехода [6].

В данной работе рассматривается анизотропная одномерная модель магнетика Изинга с периодическими граничными условиями. Так как для конечных систем фазовый переход размывается, границы критической области были определены путем расчета корреляционной длины ξ [7] (для бесконечной одномерной модели Изинга $T_c = 0$ [6]). Внутри критической области корреляционная длина равна размеру системы N [6].

Энергия одномерного ферромагнетика в безразмерных единицах равна [7]:

$$E = \frac{\varepsilon}{|j_1|} = - \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + S_N S_1 \right) - J_2 \left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} + \sum_{i=1}^2 S_{N-2+i} S_i \right) - J_3 \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} + \sum_{i=1}^3 S_{N-3+i} S_i \right) - J_{1-4} \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+1} S_{i+2} S_{i+3} + S_{N-2} S_{N-1} S_N S_1 + S_{N-2} S_N S_1 S_2 + S_N S_1 S_2 S_3 \right), \quad (1)$$

где E и ε — энергия магнетика в безразмерных и энергетических единицах соответственно, j_1 — энергия взаимодействия между ближайшими соседями (константа обменного взаимодействия $j_1 > 0$, энергия минимальна для спинов направленных в одну сторону), J_2 и J_3 — безразмерные энергии взаимодействия вторых и третьих соседей соответственно, J_{1-4} — безразмерная энергия четырехчастичного взаимодействия, N — количество атомов (узлов), i — номер узла, а S_i — спиновая переменная, принимающая значение $+1$ или -1 .

Наибольшее распространение для спиновых систем Изинга получила динамика «опрокидывания спина» [6]. В этой динамике спин выбирается случайным образом и пробное изменение (одно испытание Монте-Карло) соответствует опрокидыванию спина из состояния $+1$ в -1 или наоборот. Алгоритм Метрополиса с динамикой «опрокидывания спина» является вполне разумным приближением к реальной динамике анизотропного магнетика, спины которого связаны с колебаниями решетки. Эта связь приводит к беспорядочному опрокидыванию спинов. Такой стохастический процесс, по сути, соответствует процессу генерируемому методом Монте-Карло в рамках алгоритма. Поскольку S_i может принимать 2 значения, у системы из N спинов есть 2^N различных конфигураций. В нашем случае моделируется переход антиферромагнетик — ферромагнетик и начальное состояние должно быть антиферромагнитным, следовательно, элементами массива будут чередующиеся $+1$ или -1 . Далее следует изменение значения случайно выбранного спина, т.е. меняется значение случайно выбранного элемента массива (спин переворачивается). Для получения нового состояния вычисляется изменение энергии δE . Новое состояние принимается в том случае, если ее энергия понизилась по сравнению с энергией предыдущего состояния или с вероятностью, равной отношению гиббсовских весов новой и старой конфигураций [8]

$$\omega(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } \delta E \leq 0, \\ e^{-\delta E / k_B T}, & \text{если } \delta E > 0. \end{cases} \quad (2)$$

На следующем шаге с помощью генератора случайных чисел выбираем число r в интервале от 0 до 1 включительно и сравниваем с вероятностью перехода ω . Если $\omega > r$, то новую конфигурацию принимаем за начальную конфигурацию и заменяем значение спина в следующем, случайно выбранном узле. Если же $\omega \leq r$, то новая конфигурация отбрасывается и старая используется в усреднении еще один раз. В асимптотическом пределе частота прохождения через данное состояние оказывается пропорциональной его вероятностному (гиббсовскому) весу. Средние (математические ожидания) вычисляются с использованием полученных конфигураций. Рассмотренный цикл — это один шаг Монте-Карло [8].

Метод вычисления теплоемкости основан на связи ее со статистическими флуктуациями полной энергии в каноническом ансамбле [6]. Известно, что макроскопические свойства системы определяются свойствами ее достижимых микросостояний. Вероятность реализации конкретного микросостояния с энергией E , зависит только от значения энергии и задается распределением Гиббса. Равновесная удельная теплоемкость имеет вид [6]:

$$C_V = C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}, \quad (3)$$

где T — относительная температура (единицы измерения j_1/k_B , постоянная Больцмана принята за единицу). На основании рассчитанной теплоемкости, методом конечномерного масштабирования [6] определен критический индекс теплоемкости:

$$\alpha = \frac{\ln(C_1/C_2)}{\ln(N_1/N_2)} \cdot \nu, \quad (4)$$

где ν — критический индекс корреляционной длины, C_1 — теплоемкость, рассчитанная для N_1 узлов, C_2 — теплоемкость при числе узлов N_2 .

Учет взаимодействий вторых, третьих соседей и четырехчастичного взаимодействия уменьшает критический индекс теплоемкости, причем при малых размерах цепочки N взаимодействие третьих соседей и четырехчастичное взаимодействие меняют знак критического индекса теплоемкости. Так, для $N=6$, (рис. 1а) зна-

чения критического индекса теплоемкости меняются от $\alpha = 0.036 \pm 0.0004$ до $\alpha = -0.008 \pm 0.0009$, с ростом энергии третьих соседей от $J_3 = 0.1$ до $J_3 = 0.6$, соответственно. Также можно сделать вывод, что энергия взаимодействия третьих соседей J_3 сильнее уменьшает индекс теплоемкости α , чем взаимодействие вторых соседей J_2 и четырехчастичное взаимодействие J_{1-4} . Рост N увеличивает значения индекса α (рис. 1б) при $J_{1-4} = 0.1$, для магнетика из шести узлов $N=6$ индекс теплоемкости принимает значение $\alpha = 0.030 \pm 0.003$, для $N=10$ этот индекс принимает максимальное значение $\alpha = 0.101 \pm 0.012$.

Таким образом, можно говорить о существенной зависимости критического индекса теплоемкости от энергетических параметров взаимодействия вторых, третьих соседей и четырехчастичного взаимодействия спинов.

Экстраполяция по обратному размеру системы ($1/N$, где число узлов принимает значение от 4 до 11) в термодинамическом пределе при учете энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0.1$ дает значение $\alpha = 0.19 \pm 0.02$ (см. рис. 2а). С ростом энергии взаимодействия третьих

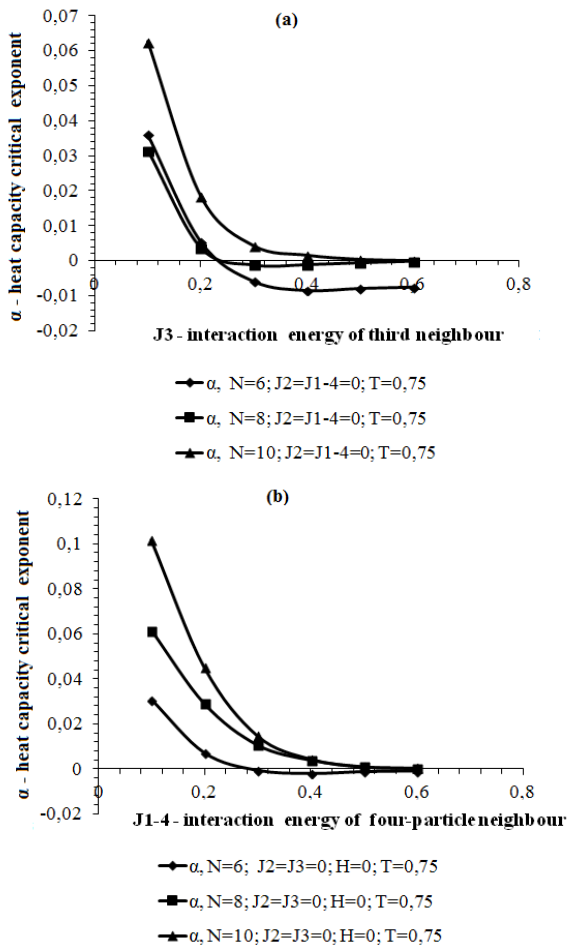


Рис. 1. Зависимость критического индекса теплоемкости α от энергии взаимодействия третьих соседей J_3 при разных значениях числа узлов N (а); Зависимость индекса теплоемкости α от энергии четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} при разных значениях числа узлов N (б). Относительная погрешность не превышает 12%.

Fig. 1. Dependence of the heat capacity critical exponent on the interaction energy of third neighbors J_3 (a); Dependence of the heat capacity critical exponent on the interaction energy of four — particle neighbors J_{1-4} (b); the relative error does not exceed 12%.

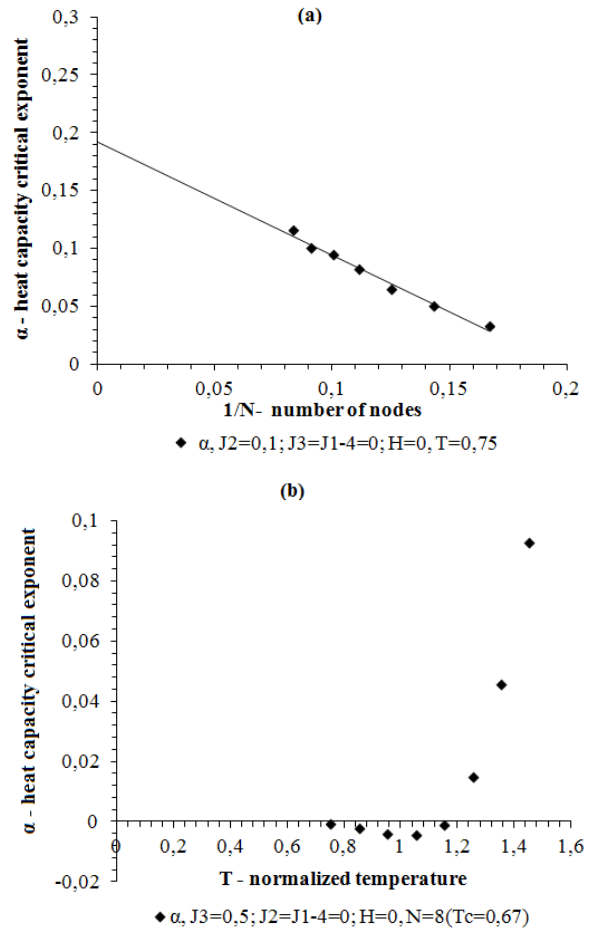


Рис. 2. Зависимость критического индекса теплоемкости α от обратного размера $1/N$ (а); Зависимость индекса теплоемкости α от относительной температуры T , при энергии взаимодействия третьих соседей $J_3 = 0.5$ (б); Относительная погрешность не превышает 12%.

Fig. 2. Dependence of the heat capacity critical exponent α on the inverse number of nodes $1/N$ (a); Temperature dependence (units j_1/k_B) heat capacity critical exponent α , for the interaction energy of third neighbors $J_3 = 0.5$ (b). The relative error does not exceed 12%.

соседей при приближении к критической температуре индекс теплоемкости α имеет минимум в отрицательных значениях $\alpha = -0.0043 \pm 0.0005$ при температуре $T = 1.05$, рис. 2b. Заметим, что энергия взаимодействия вторых соседей и энергия четырехчастичного взаимодействия знак критического индекса для $N > 6$ не меняют, при приближении к критической области индекс α стремится к нулю, что соответствует теоретическим представлениям — в теории среднего поля (теория фазовых переходов Ландау) $\alpha = 0$ [9].

Таким образом, проанализировано поведение критического индекса α в зависимости от взаимодействия вторых соседей, третьих, четырехчастичного взаимодействия, размера системы и температуры для модели конечного одномерного магнетика с периодическими граничными условиями. Энергия взаимодействия третьих соседей J_3 сильнее уменьшает значения критического индекса теплоемкости α , чем взаимодействие вторых соседей J_2 и четырехчастичное взаимодействие J_{1-4} . Экстраполяция по обратному размеру системы в термодинамическом пределе дает значения $\alpha = 0.19 \pm 0.02$, $\alpha = 0.17 \pm 0.02$, $\alpha = 0.20 \pm 0.02$, при учете энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0.1$, третьих соседей $J_3 = 0.1$ и четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0.1$, соответственно. Взаимодействие третьих соседей меняет знак критического индекса теплоемкости при малых N . Так, с ростом энергии взаимодействия третьих соседей от $J_3 = 0.1$ до $J_3 = 0.6$ для размера системы $N = 6$, значения индекса теплоемкости принимают значения в диапазоне от $\alpha = 0.036 \pm 0.004$ до $\alpha = -0.008 \pm 0.0009$, соответственно. При учете взаимодействия вторых соседей и четырехчастичного взаимодействия вблизи критической области индекс теплоемкости α равен нулю, что соответствует теоретическим представлениям (в теории среднего поля $\alpha = 0$ [8]). Сравним полученные значения, например, с двумерной моделью Изинга, в точном решении для которой индекс $\alpha = 0$ [9], а в трехмерной модели Изинга $\alpha = 0.125 \pm 0.015$ [10] (при взаимодействии ближайших соседей). В работе [11] индекс теплоемкости манганита $\text{La}_{0.9}\text{Ag}_{0.1}\text{MnO}_3$ с учетом поправок к скейлингу: $\alpha = -0.127$, что соответствует критическому поведению 3D-модели Гейзенберга. Измерения теплоемкости в работе [11], полученные при обработке данных как с коррекцией к скейлингу, так и без коррекции, в большинстве случаев дают значения $\alpha \approx -0.03$. Заметим, что полученные нами значения для одномерной модели Изинга с периодическими граничными условиями в некоторых случаях довольно близки к трехмерному поведению. Критический индекс теплоемкости для трехмерных моделей Изинга и XY-модели (характеризуются спиновыми компонентами $n = 1$ и $n = 2$), $\alpha = 0.0772$ и $\alpha = -0.02$, соответственно [12]. В сравнении с моделью Изинга «оборванные концы» [13], где критический индекс теплоемкости принимает низкие отрицательные значения вплоть до $\alpha = -19$, в модели с периодическими граничными условиями методом конечномерного масштабирования больших отрицательных значений не обнаружено.

В заключение выражаем благодарность за полезные замечания рецензенту и зам. главного редактора журнала.

Литература/References

1. L. Bogani, W. Wernsdorfer. Nat. Mater. 7, 179–186 (2008).
2. H. Miyasaka, T. Nezu, K. Sugimoto, K. Sugiura, M. Yamashita, R. Clérac. Chemistry. 2005 Feb 18;11 (5):1592–602.
3. H. Miyasaka, M. Julve, M. Yamashita, and R. Clérac. Inorganic Chemistry 200948 (8), 3420–3437. doi: 10.1021/ic802050j.
4. M. Yattoo, G. Cosquer, M. Morimoto, M. Irie, B. Breedlove, M. Yamashita. Magnetochemistry, 2016, 2, 2, 21 DOI: 10.1021/ic802050j.
5. C. Li, J. Sun, M. Yang, G. Sun, J. Guo, Y. Ma, and L. Li. Crystal Growth & Design 201616 (12), 7155–7162. DOI: 10.1021/acs.cgd.6b01369.
6. H. Gould, and J. Tobochnik. An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems. Part 2. Reading, MA: Addison-Wesley, (1988)
7. Zh.V. Dzuba, V.N. Udodov, D.V. Spirin. Fundamental problems of modern materials science, 2016, Volume 13, №4, p. 430–436 (in Russian) [Дзюба Ж.В., Удодов В.Н., Спирин Д.В. Фундаментальные проблемы современного материаловедения, 2016, том 13, №4, с. 430–436]
8. K. Binder, D.V. Heerman. Metody Monte-Karlo v statisticheskoy fizike: Vved. — М.: Nauka, 1995. — 141 p. (in Russian) [К. Биндер, Д.В. Хеерман. Методы Монте-Карло в статистической физике: Введ. — М.: Наука, 1995. — 141 с.]
9. L.D. Landau, E.M. Lifshitz. Course of Theoretical physics Course of Theoretical physics, Vol. 5: Statistical physics, Part I (Nauka, Moscow, 1995; Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000)
10. M. Marinelli, F. Mercury, U. Zamit, R. Pizzoferrati, F. Scudieri. Phys. Rev. B49, 14, 9523 (1994).
11. A.G. Gamzatov, Sh.B. Abdulgagidov, A.M. Aliev, K.Sh. Khizriyev, A.B. Batdalov, O.V. Melnikov, O.Yu. Gorbenko, A.R. Kaul. Physics of the Solid State, 2007, Vol. 49, No. 9, p. 1686–1689 (in Russian) [А.Г. Гамзатов, Ш.Б. Абдулгасидов, А.М. Алиев, К.Ш. Хизриев, А.Б. Батдалов, О.В. Мельников, О.Ю. Горбенко, Кауль А.Р. Физика твердого тела, 2007, том 49, №9, с. 1686–1689]
12. I.K. Kamilov, Kh.K. Aliev. Phys. Usp. 40639–669 (1983) (in Russian) [И.К. Камилов, Алиев Х.К. УФН 140639–669 (1983)]
13. E.V. Shabunina, V. N Udodov, D.V. Spirin. Modeling of nonequilibrium systems: Proceedings of the XV All-Russian Seminar/Krasnoyarsk: Institute of Computational Modeling, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 2012. — P. 231–234. (in Russian) [Е.В. Шабунина, В.Н. Удодов, Д.В. Спирин. Моделирование неравновесных систем: Материалы XV Всероссийского семинара/Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2012. — С. 231–234.]