

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

УДК 537.622.5

### ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ГЕЙЗЕНБЕРГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

© 2020 г. А. К. Муртазаев<sup>а, \*</sup>, Ф. А. Кассан-Оглы<sup>б</sup>, М. К. Рамазанов<sup>а</sup>, К. Ш. Муртазаев<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт физики ДНЦ РАН, ул. М. Ярагского, 94, Махачкала, 367003 Россия

<sup>б</sup>Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в редакцию 13.09.2019 г.

После доработки 24.10.2019 г.

Принята к публикации 15.11.2019 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями. Исследования проведены для отношения величины обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями в интервале значений  $0.0 \leq r \leq 1.0$ . Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Впервые на диаграмме обнаружена область, где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода.

*Ключевые слова:* модель Гейзенберга, метод Монте-Карло, фрустрации, фазовые переходы

DOI: 10.31857/S0015323020040105

#### ВВЕДЕНИЕ

Магнитные системы с конкурирующими антиферромагнитными обменными взаимодействиями между первыми и вторыми ближайшими соседями находятся в центре интенсивных исследований физики конденсированных сред уже более двух десятилетий [1–5]. Наличие конкурирующих обменных взаимодействий в магнитных материалах может привести к фрустрациям и большому разнообразию магнитных упорядоченных состояний и фазовых переходов (ФП) между ними. Кроме того, особенности ФП при разных значениях отношения обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями известны лишь в общих чертах [4–6].

В настоящее время классическая двумерная модель Гейзенберга изучена достаточно хорошо и известны практически все ее свойства [7, 8]. Эта модель может быть использована для описания магнитных структур целого ряда реальных материалов.

В отличие от двумерного случая, трехмерная антиферромагнитная модель Гейзенберга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решет-

ке с конкурирующими взаимодействиями до сих пор мало изучена.

Кроме того, учет взаимодействий вторых ближайших соседей может приводить к возникновению фрустраций, что усложняет решение этой модели.

Интерес к этой модели обусловлен еще и тем, что многие физические свойства фрустрированных систем сильно отличаются от соответствующих нефрустрированных систем.

При изучении спиновых систем с фрустрациями до сих пор основное внимание уделяли фрустрированным системам на квадратной, треугольной и гексагональной решетке [3, 9–11].

В настоящей работе на основе метода Монте-Карло (МК) проведены исследования ФП в классической антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК-решетке для различного отношения обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения термодинамического поведения данной модели, и эти вопросы до сих

пор остаются открытыми. Исследование антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с конкурирующими взаимодействиями между первыми и вторыми ближайшими соседями на основе современных методов и идей позволяет получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП, магнитными и термодинамическими свойствами фрустрированных спиновых систем.

### МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Антиферромагнитная классическая модель Гейзенберга на ОЦК-решетке с учетом взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями описывается следующим гамильтонианом:

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

где  $\mathbf{S}_i$  – трехкомпонентный единичный вектор  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ . Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие между первыми ближайшими соседями ( $J_1 < 0$ ), а второй – между вторыми ( $J_2 < 0$ ). Известно, что для данной модели при  $J_2 = 0$  основным состоянием является обычное антиферромагнитное упорядочение. Ненулевое обменное взаимодействие  $J_2$  может нарушить данный порядок и привести к возникновению фрустраций. Достаточное большое значение  $J_2$  приводит к появлению страйповых структур.

В настоящее время ФП фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [12–18]. Методы МК позволяют исследовать физические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе, на сегодняшний день, изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. В данном исследовании мы использовали репличный обменный алгоритм метода МК [15, 17], который является наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан в работе [5].

Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами  $2(L \times L \times L) = N$ , где  $L$  измеряется в размерах элементарной ячейки и изменяется в интервале 24–90. Отношение величины обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями  $r = |J_2/J_1|$  меняется в интервале  $0.0 \leq r \leq 1.0$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекали неравновесный участок длиной  $\tau_0 = 4 \times 10^5$  шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины не-

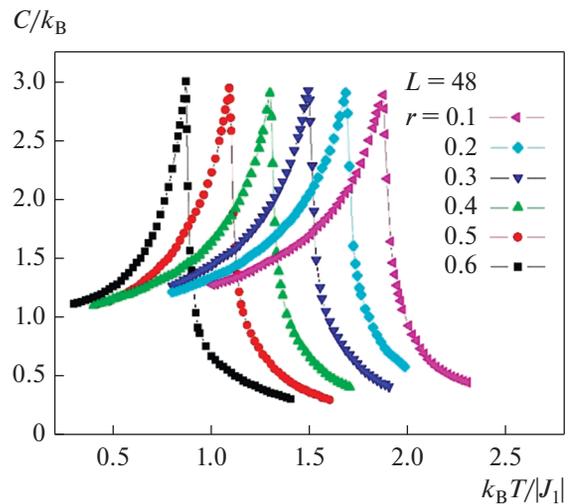


Рис. 1. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J_1|$  для  $L = 48$  и разных  $r$ .

равновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводили вдоль марковской цепи длиной до  $\tau = 500\tau_0$  шагов МК на спин.

### РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для исследования температурной эволюции теплоемкости и восприимчивости использовали выражения [19]:

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

$$\chi = \begin{cases} (NK) (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), & T < T_N \\ (NK) \langle M^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (3)$$

где  $K = |J_1|/k_B T$ ,  $N$  – число частиц,  $T_N$  – критическая температура (здесь и далее температура и остальные термодинамические и магнитные величины измеряются, как это принято в теории низкоразмерных систем, в единицах  $|J_1|/k_B$ ),  $U$  – внутренняя энергия,  $M$  – подрешеточная намагниченность.

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$ , полученные для  $L = 48$  и различных значений  $r$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей).

Из рисунков видно, что в зависимостях теплоемкости и восприимчивости от температуры для всех значений  $r$  вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые с ростом  $r$  смещаются в сторону низких температур. Причем увеличение значения  $r$  приводит к росту абсолютных значений максимумов

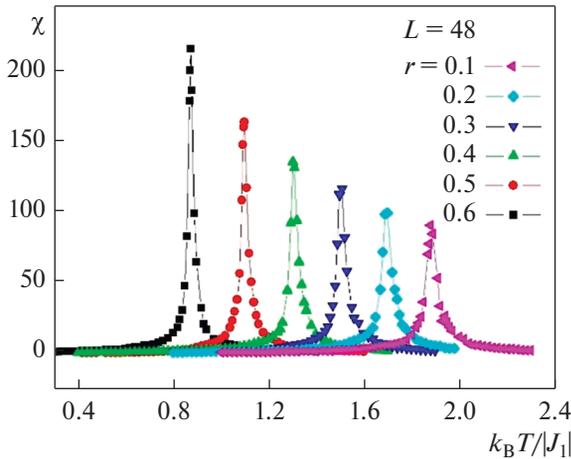


Рис. 2. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T / |J_1|$  для  $L = 48$  и разных  $r$ .

восприимчивости, что обусловлено усилением флуктуаций, вследствие увеличения конкуренции между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Для определения критической температуры  $T_N$  был использован метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка [20]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \tag{4}$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}, \tag{5}$$

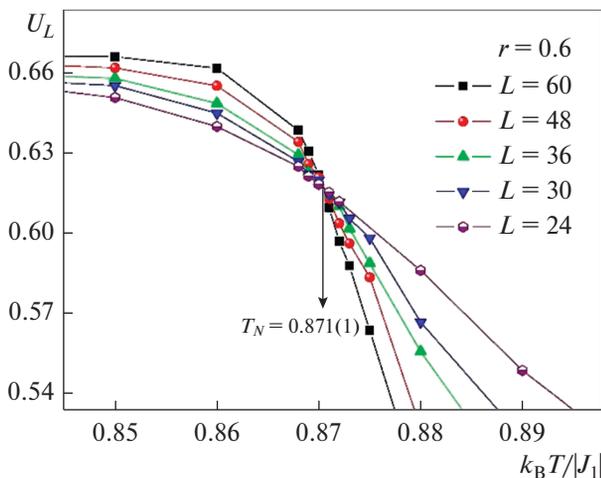


Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J_1|$  для  $r = 0.6$  и разных  $L$ .

где  $V_L$  – кумулянт по энергии,  $U_L$  – кумулянт по намагниченности.

Выражения (4) и (5) позволяют определить критическую температуру  $T_N$  с большой точностью. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера дает также возможность хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  имеют четко выраженную точку пересечения [20].

На рис. 3 представлена характерная зависимость  $U_L$  от температуры для  $r = 0.6$  при разных значениях  $L$ . Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения  $T_N = 0.871(1)$ , что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений  $r$ .

Для более подробного анализа характера ФП был также использован гистограммный анализ данных метода МК [18, 21]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в [11, 22].

На рис. 4 представлены гистограммы распределения энергии для случая  $r = 2/3$  с линейными размерами  $L = 90$ . Графики построены вблизи критической температуры  $T_N = 0.670(1)$ . Из рисунка видно, что в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E/N$  для всех значений температур наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует о ФП второго рода.

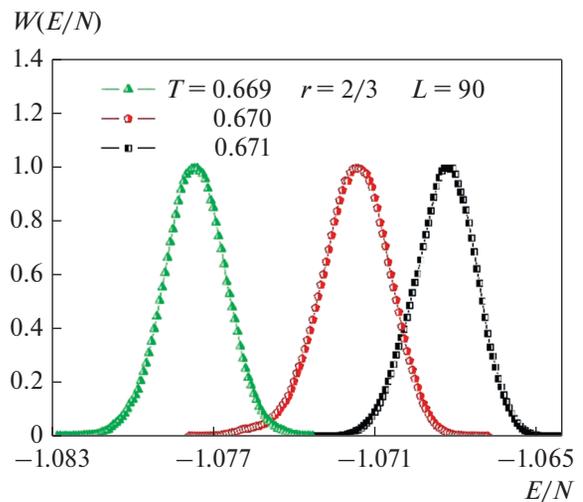


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для  $r = 2/3$  и  $L = 90$ .

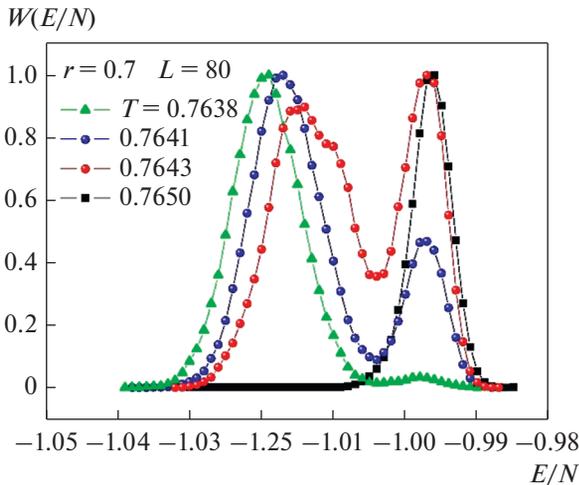


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.7$  и  $L = 80$ .

На рис. 5 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами  $L = 80$  и  $r = 0.7$ . Как видно из рисунка, вблизи температуры ФП  $T_N = 0.7643$  в системе наблюдается бимодальное распределение энергии. Наличие двойного максимума в зависимости вероятности  $W$  от энергии  $E/N$  является характерным признаком ФП первого рода. Аналогичная картина наблюдается для всех значений взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале  $2/3 < r \leq 0.75$ .

На рис. 6 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $r$ . Как видно из рисунка, по мере приближения к точке  $r = 2/3$ , где сосуществуют три фазы, температура ФП смещается в сторону низких температур. Для рассматриваемой модели при  $r = 2/3$  система имеет минимальную температуру ФП  $T = 0.670(1)$ . Из диаграммы видно, что в точке  $r = 2/3$  пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная AF1, парамагнитная PM и антиферромагнитная AF2 [22]. Наличие трех фаз было обнаружено на аналогичной фазовой диаграмме, полученной в [23] в модели Гейзенберга на гранецентрированной кубической решетке. Отличие фазовой диаграммы, представленной в [23], от полученной в данном исследовании, связано с тем, что в [23] рассматриваются взаимодействия первых, вторых и третьих ближайших соседей.

Переход  $AF1 \rightarrow AF2$  в классической модели Гейзенберга на ОЦК-решетке обусловлен изменением структуры основного состояния. В фазе AF1 могут реализоваться только две структуры основного состояния. В фазе AF2 реализуются

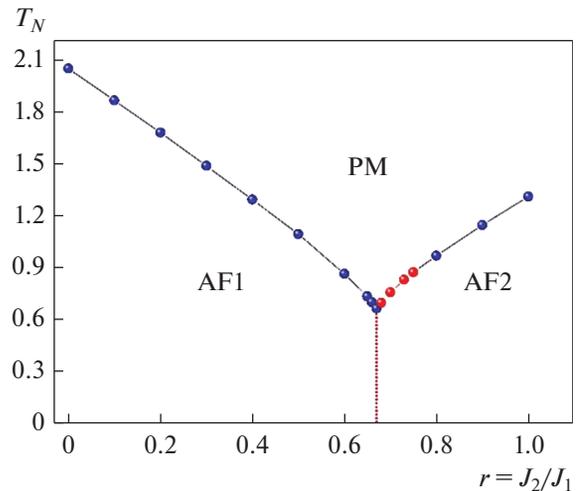


Рис. 6. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

четыре структуры основного состояния. Вдоль вертикальной линии, соответствующей значению  $r = 2/3$ , сосуществуют все шесть структур одновременно. Согласно данным, полученным на основе теории среднего поля, в модели Гейзенберга на ОЦК-решетке с взаимодействиями между первыми и вторыми ближайшими соседями значение  $r = 2/3$  является классической точкой перехода, где происходит ФП  $AF1 \rightarrow AF2$ . Этот переход в данной работе не рассматривается. Нами подробно изучены переходы  $AF1 \rightarrow PM$ , а также  $AF2 \rightarrow PM$ .

Результаты, полученные в рамках данного исследования, показывают, что в интервалах  $0.0 \leq r \leq 0.6$  и  $0.8 \leq r \leq 1.0$  наблюдается ФП второго рода. Установлено, что в интервале  $2/3 \leq r \leq 0.75$  (на рис. 6 выделено красным цветом) переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как ФП первого рода. Таким образом, в исследуемой модели учет взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к смене рода ФП. Наличие ФП первого и второго рода в гейзенберговских антиферромагнетиках ранее обсуждали в [24, 25]. Согласно данным, полученным в [24], можно предположить, что наблюдаемый в настоящей работе ФП первого рода связан с большим числом компонент параметра порядка для исследуемой модели. Численные исследования, проведенные в [26, 27], показывают, что в Гейзенберговских антиферромагнетиках на кубических решетках с учетом взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями реализуются ФП первого рода. Эти данные соответствуют нашим результатам, полученным для интервала  $2/3 \leq r \leq 0.75$ . В [24] показано, что в антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубических ре-

шетках наблюдается ФП второго рода, что подтверждает наши данные, полученные для интервалов  $0.0 \leq r \leq 0.6$  и  $0.8 \leq r \leq 1.0$ .

Диаграмма, полученная в исследуемой классической модели Гейзенберга на ОЦК-решетке, качественно совпадает с диаграммой трехмерной модели Изинга на ОЦК-решетке [3, 12, 22].

Полученные в работе данные могут быть использованы для описания конкретных антиферромагнитных материалов, таких как FeCr, FeAl, FeCo и ряда других, имеющих ОЦК-решетку.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов в антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями между первыми и вторыми ближайшими соседями выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов для различной величины взаимодействия вторых ближайших соседей  $r$ . Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Установлено, что в интервале значений  $2/3 < r \leq 0.75$  в исследуемой модели переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход первого рода.

Исследование выполнено в рамках госзадания МИНОБРНАУКИ России (тема Квант № АААА-А18-118020190095-4) при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-32-00391-мол-а, № 19-02-00153-а, 18-32-20098-мол-а-вед) и УрО РАН (проект № 18-2-2-11).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Dotsenko V.S.* Critical phenomena and quenched disorder // *Phys. Usp.* 1995. V. 38. P. 457–496.
2. *Korshunov S.E.* Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // *Phys. Usp.* 2006. V. 49. P. 225–262.
3. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K.* Phase transitions and critical characteristics in the layered antiferromagnetic Ising model with next-nearest-neighbor intralayer interactions // *JETP Lett.* 2015. V. 101. P. 714–718.
4. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K.* Phase transitions in the antiferromagnetic layered Ising model on a cubic lattice // *JETP Lett.* 2016. V. 103. P. 460–464.
5. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Badiev M.K.* Phase transitions and critical phenomena in the antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice // *Physica A.* 2018. V. 507. P. 210–218.
6. *Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Kassan-Ogly F.A., Kurbanova D.R.* Phase transitions in the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with interactions between next-to-nearest neighbors // *JETP.* 2015. V. 120. P. 110–114.
7. *Dagotto E., Moreo A.* Phase diagram of the frustrated spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet in 2 dimensions // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 63. P. 2148–2151.
8. *Manousakis E.* The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides // *Rev. Mod. Phys.* 1991. V. 63. P. 1–62.
9. *Kassan-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., Proshkin A.I.* Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions // *J. Magn. Magn. Mater.* 2015. V. 384. P. 247–254.
10. *Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K.* Influence of field on frustrations in low-dimensional magnets // *J. Magn. Magn. Mater.* 2012. V. 324. P. 3418–3421.
11. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A.* Phase diagrams and ground-state structures of the Potts model on a triangular lattice // *Physica A.* 2019. V. 521. P. 543–550.
12. *Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Kurbanova D.R., Magomedov M.A., Murtazaev K.Sh.* Phase diagrams and ground-state structures of the antiferromagnetic materials on a body-centered cubic lattice // *Mater. Lett.* 2019. V. 236. P. 669–671.
13. *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 Trans.* 2018. V. 91. P. 610–618.
14. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K.* Investigation of critical phenomena of the frustrated Ising model on a cubic lattice with next-nearest-neighbor intralayer interactions by the Monte Carlo method // *Phase Trans.* 2018. V. 91. P. 83–91.
15. *Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Badiev M.K.* Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions // *Phys. B: Cond. Matt.* 2015. V. 476. P. 1–5.
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 Comm.* 2016. V. 233. P. 35–40.
17. *Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y.* Generalized-ensemble algorithms for molecular simulations of biopolymers // *Biopolymers (Peptide Science)*. 2001. V. 60. P. 96–123.
18. *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. V. 64. P. 056101–1–056101–16.
19. *Binder K., Wang J.-Sh.* Finite-size effects at critical points with anisotropic correlations: Phenomenological scaling theory and Monte Carlo simulations // *J. Stat. Phys.* 1989. V. 55. P. 87–126.

20. *Binder K., Heermann H.W.* Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Springer-Verlag, 1988; М.: Nauka, 1995. 128 p.
21. *Wang F., Landau D.P.* Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // *Phys. Rev. Lett.* 2001. V. 86. P. 2050–2053.
22. *Murtazaev A.K., Magomedov M.A., Ramazanov M.K.* Phase diagram and structure of the ground state of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice // *JETP Lett.* 2018. V. 107. P. 259–263.
23. *Ignatenko A.N., Katanin A.A., Irkhin V.Yu.* Strong fluctuations near the frustration point in cubic lattice ferromagnets with localized moments // *JETP Lett.* 2013. V. 97. P. 209–213.
24. *Brazovskii S.A., Dzyaloshinskii I.E., Kukhareno B.G.* First-order magnetic phase transitions and fluctuations // *JETP.* 1976. V. 43. P. 1178–1183.
25. *Ignatenko A.N., Irkhin V.Yu.* Frustrated Heisenberg Antiferromagnets on Cubic Lattices: Magnetic Structures, Exchange Gaps, and Non-Conventional Critical Behaviour // *J. of Siberian Federal University. Mathematics & Physics.* 2016. V. 9. P. 454–458.
26. *Diep H.T., Kawamura H.* First-order phase transition in the fcc Heisenberg antiferromagnet // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. P. 7019–7022.
27. *Alonso J.L., Tarancon A., Ballesteros H.G., Fernandez L.A., Martin-Mayor V., Munoz Sudupe A.* Monte Carlo study of O(3) antiferromagnetic models in three dimensions // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 53. P. 2537–2545.