

УДК 538.951

РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ ДВУМЕРНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО

© 2019 г. А. К. Муртазаев^{1,2}, Ж. Г. Ибаев^{1,2,*}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики имени Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук, Махачкала, Россия

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Дагестанский государственный университет”, Махачкала, Россия

*E-mail: ibaev77@mail.ru

Поступила в редакцию 07.09.2018 г.

После доработки 31.01.2019 г.

Принята к публикации 27.03.2019 г.

Методом Монте-Карло на основе алгоритма Ванга–Ландау проведены исследования двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями на квадратной решетке. Получены графики распределения плотности состояний и параметра порядка. Показано что распределение плотности состояний имеет резкий скачок при $|J_1/J| = 0.6$ обусловленный сильным вырождением модулированного состояния. На распределениях параметра порядка при $|J_1/J| > 0.2$ наблюдаются резкие скачки, свидетельствующие о переходе системы из однородно упорядоченного состояния в модулированную фазу.

DOI: 10.1134/S0367676519070287

ВВЕДЕНИЕ

Успехи в изучении квазиодномерных и квазидвумерных магнетиков на основе соединений переходных металлов во многом обусловлены применением упрощенных многоэлектронных подходов с использованием моделей Гейзенберга и Изинга [1, 2]. Гамильтонианы этих моделей имеют довольно простую алгебраическую структуру. Это позволило доказать ряд теорем о характере точного энергетического спектра моделей и спиновой структуре основного состояния, которые имеют большое значение для тестирования результатов численного моделирования [3–5]. С другой стороны, как показывает практика, основные заключения о магнитной структуре, полученные в рамках этих упрощенных моделей, как правило, сохраняются и при переходе к более строгим методам, например, учитывающим отталкивание электронов, расположенных на соседних узлах кристаллической решетки [1, 3].

Такое отталкивание порождает конкурирующее взаимодействие, которое является причиной появления различных типов магнитного упорядочения (ферромагнитное, модулированное, парамагнитное и т.д.). И соответственно в системах возможно несколько фазовых переходов различ-

ных типов. К примеру, в системах с модулированным магнитным упорядочением (т.е. с периодическим изменением намагниченности вдоль одного из кристаллографических направлений) возможны переходы из однородного состояния в модулированное состояние, переходы в модулированной фазе между различными модулированными структурами и переход из модулированной фазы в парамагнитную. Число реальных материалов, в которых возможно модулированное упорядочение, давно уже перевало за сотню [6].

Экспериментальное и теоретическое изучение фазовых переходов и критических явлений является довольно сложной задачей даже для таких простых случаев как переходы из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Поэтому в настоящее время наиболее приемлемое и точное описание фазовых переходов и критических явлений дают только машинные расчеты методами Монте-Карло и молекулярной динамики.

На практике для описания систем, в которых возможно модулированное магнитное упорядочение используются различные модели. Наиболее простой и эффективной среди них является анизотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями со вторыми ближайшими со-

сеядями (ANNNI-модель, рис. 1). Указанная модель, хотя и не позволяет описать какую либо реальную систему, тем не менее дает хорошее качественное описание свойств систем, в которых возможно моделированное упорядочение.

В данной работе нами представлены результаты, полученные при исследовании двумерной ANNNI-модели методами Монте-Карло на основе алгоритма Ванга–Ландау.

МОДЕЛЬ

Модель Изинга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными взаимодействиями на кубической решетке (так называемая ANNNI-модель) была введена для описания упорядоченных магнитных фаз в кристаллах CeSb [5].

Аналогичная модель успешно используется для описания термодинамики масляных микроэмульсий и носит название модели Видома [7].

В данной работе мы рассмотрим двумерный аналог такой модели (рис. 1), представляющий интерес для описания соразмерных и несоизмерных структур возникающих в твердых телах.

Гамильтониан модели:

$$H_{ANNNI} = -J \sum_{i,j} s_i s_j - J_1 \sum_i s_i s_{i+2}, \quad (1)$$

где $s_i = \pm 1$ – спиновая переменная, $J > 0$ – параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов, $J_1 < 0$ – параметр антиферромагнитного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими вдоль оси Y .

Для описания фазового поведения рассматриваемой модели были использованы различные приближенные теоретические методы. Согласно литературным данным, с понижением температуры ANNNI-модель испытывает фазовый переход второго рода из парамагнитного в ближайшее упорядоченное состояние, а переход “ферромагнетик – модулированная фаза” является переходом первого рода [8].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для проведения исследований на ЭВМ формировались спиновые системы квадратной формы $L \times L$ с размерами $L = 32$ ($N_{эф} = L \times L = 1024$). Для исключения граничных эффектов на рассматриваемые системы накладывались периодические граничные условия. Моделирование выполнялось при помощи высокоэффективного алгоритма Ванга–Ландау [9]. Использование данного алгоритма позволяет рассчитать статическую функцию распределения G и основные спиновые конфигурации системы независимо от температуры. Статическая функция распределения играет важную роль при решении задач статистической физи-

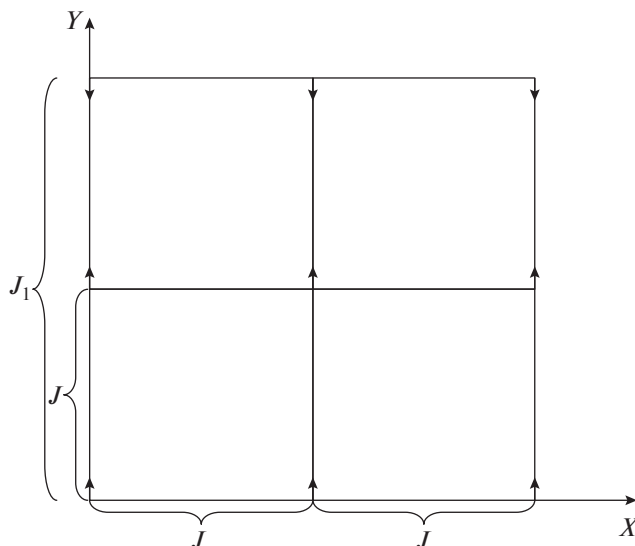


Рис. 1. Двумерная ANNNI-модель.

ки, поскольку она позволяет рассчитывать все остальные термодинамические параметры системы. На рис. 2а приведены графики распределения натурального логарифма плотности состояний $(\ln(G/G_0))$, где G_0 – количество посещений основного состояния) для системы с $L = 32$ при значениях $|J_1/J| = 0.1–1.0$.

Отметим, что характер распределения плотности состояний зависит как от линейных размеров системы, так и от величины конкурирующего обменного взаимодействия. Как видно на рис. 2а, натуральные логарифмы плотности распределения имеют куполообразный вид для всех значений параметра $|J_1/J|$, кроме значения $|J_1/J| = 0.6$. Для последнего значения наблюдается скачкообразное увеличение значения плотности состояний. Такое поведение наблюдается при увеличении линейных размеров системы и для значений $|J_1/J| = 0.7; 0.8; 1.0$ начиная с $L = 32$. Это можно объяснить ростом числа возможных модулированных фаз при увеличении линейных размеров и переходом системы из основного состояния в различные многократно вырожденные модулированные состояния.

В процессе моделирования также получено распределение параметра порядка M по энергетическим состояниям системы. В качестве параметра порядка использовалась величина:

$$M = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{L_y} |m_i|, \quad (2)$$

где $m_i = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L_x} S_{ij}$ – усредненное значение спина в слое перпендикулярном направлению оси OY , $i = 1 \dots L_y$ – номер слоя.

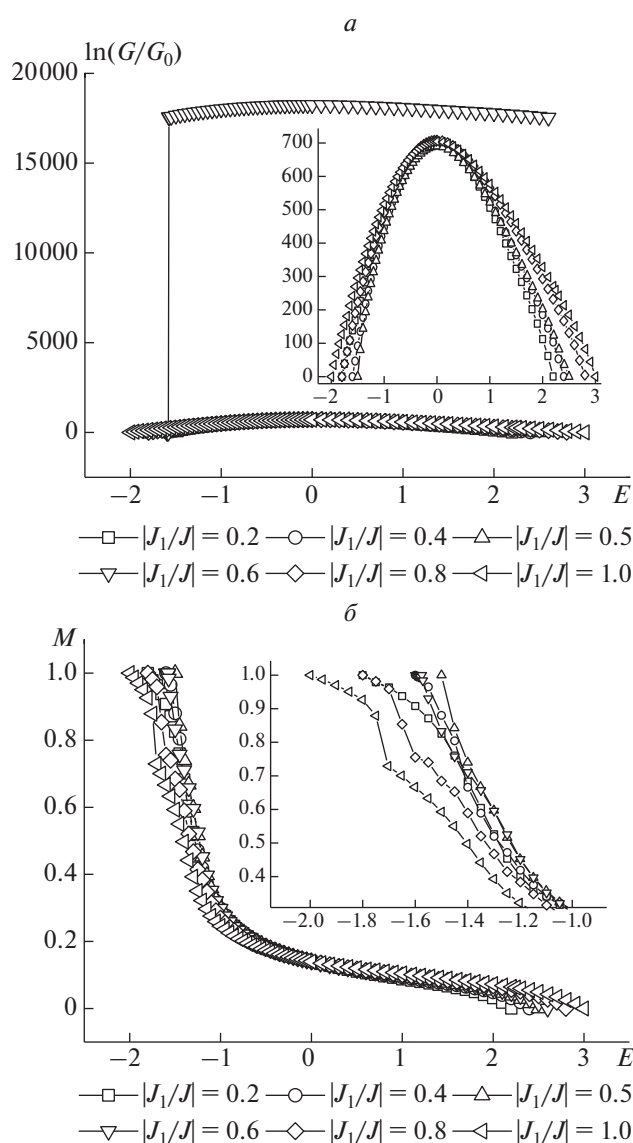


Рис. 2. Распределения плотности состояний (а) и параметра порядка (б).

На рис. 2б показан график такого распределения для системы с $L = 32$ при $|J_1/J| = 0.1-1.0$. На рис. 2б видно, что для фиксированного значения

L характер распределения параметра порядка от энергии зависит от величины конкурирующего взаимодействия. Для значений $|J_1/J| \leq 0.2$ с ростом энергии наблюдается монотонное уменьшение величины M , характерное для непрерывного перехода системы из однородно упорядоченного состояния в разупорядоченное. При значениях $|J_1/J| = 0.3$ и 0.4 наблюдаются небольшие скачки распределения параметра порядка, смещающиеся в сторону высоких энергий с увеличением $|J_1/J|$, что свидетельствует о переходе системы из основного состояния в модулированное. При $|J_1/J| \geq 0.5$ скачки параметра порядка более четко выражены, увеличиваются по величине и смещаются в сторону более низких значений энергии с ростом $|J_1/J|$.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что характер термодинамического поведения анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями является достаточно сложным и зависит как от величины конкурирующего взаимодействия, так и от линейных размеров системы. Расчеты остальных термодинамических параметров системы, которые проводились усреднением по значениям плотности состояний системы, позволяют более детально описать характер поведения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Овчинников А.А., Украинский И.И., Квенцель Г.Ф. // УФН. 1972. Т. 108. С. 81.
2. White S.R. // Phys. Rep. 1998. V. 301. P. 187.
3. Shakirov M.A., Tsibulsky V.S., Antipov A.E. et al. // Sci. Rep. 2015. V. 5. P. 8005.
4. Klein D.J. // Chem. Phys. 1982. V. 77. P. 3098.
5. Elliott R.J. // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 346.
6. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.М. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984. 241 с.
7. Widom B., Chem J. // Phys. 1986. V. 84. P. 6943.
8. Murtazaev A.K., Ibaev J.G. // Sol. St. Commun. 2012. V. 152. P. 177.
9. Wang F., Landau D.P. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 2050.