

УДК 538.9

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ОБМЕННЫМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2022 г. К. Ш. Муртазаев^{1, *}, А. К. Муртазаев², М. К. Рамазанов^{1, 2}, М. А. Магомедов^{1, 2}

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

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Дагестанский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, Махачкала, Россия

*E-mail: Skurban@mail.ru

Поступила в редакцию 20.09.2021 г.

После доработки 11.10.2021 г.

Принята к публикации 22.10.2021 г.

Высокоэффективным репличным алгоритмом метода Монте-Карло исследована трехмерная антиферромагнитная Изинговская модель на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными спиновыми взаимодействиями во внешнем магнитном поле. Проведен анализ фазовых переходов. Показано, что сильное магнитное поле приводит к подавлению фазового перехода.

DOI: 10.31857/S0367676522020211

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время работы по изучению фазовых переходов (ФП), магнитных и термодинамических свойств модельных спиновых систем с конкурирующими обменными взаимодействиями представляют большой интерес в физике конденсированного состояния. Конкуренция обменных взаимодействий в магнитных спиновых системах может привести к возникновению фрустраций. Свойства и параметры фрустрированных спиновых систем сильно отличаются от свойств аналогичных систем без фрустраций. Спиновые системы с фрустрациями имеют большое разнообразие фаз и фазовых переходов. Такое разнообразие ФП обусловлено сильным вырождением таких систем и их высокой чувствительностью к различным внешним факторам. Внешнее магнитное поле, как внешний фактор, может привести к новым физическим явлениям в поведении фрустрированных и спиновых систем с конкурирующими обменными взаимодействиями [1–6].

В данном исследовании нами рассматривается трехмерная (3D) антиферромагнитная Изинговская объемно-центрированная кубическая (ОЦК) решетка с конкурирующими обменными спиновыми взаимодействиями. Будет изучено влияние магнитного поля на магнитные и термодинамические свойства рассматриваемой модели и характер ФП.

Изинговская модель с конкуренцией обменных спиновых взаимодействий на разных типах решеток исследована достаточно хорошо. Результаты численных расчетов и теоретических исследований в рассматриваемой модели приведены в работах [6–9]. В исследованиях, представленных в работе [6] авторы получили структуры подрешеток в основном состоянии для 3D антиферромагнитной Изинговской модели на ОЦК решетке с помощью алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло (МК). Авторами работы на фазовой диаграмме были обнаружены области, где реализуются фазовые переходы первого рода и второго рода. Результаты теоретических исследований, представленные в работе [7] показывают, что для Изинговской ОЦК решетки реализуется ФП II рода. Этот результат имеет хорошее согласие с данными, полученными в работе [6]. Влияние магнитного поля на род фазового перехода и термодинамические свойства для рассматриваемой Изинговской модели со значениями магнитного поля $0.0 \leq H \leq 6.0$ исследовано в работе [8]. Обнаружено, что в рассмотренном интервале H наблюдается ФП второго рода. В работе [9] для антиферромагнитной Изинговской модели на слоистой треугольной решетке показано, что при значениях магнитных полей $0.0 \leq H \leq 6.0$ наблюдается ФП второго рода. Обнаружено, что силь-

ные магнитные поля снимают вырождение основного состояния и приводят размыванию ФП.

Анализ литературных данных показывает, что многие физические свойства спиновых систем с конкуренцией обменных спиновых взаимодействий зависят от наличия или отсутствия внешнего магнитного поля [10–12]. Поэтому, нами проводится численный расчет по исследованию ФП и термодинамических свойств 3D антиферромагнитной Изинговской модели на ОЦК решетке в сильных магнитных полях. Интерес к данным исследованиям объясняется еще тем, что большинство подобных работ посвящены моделям на гексагональных треугольных и квадратных решетках [13–23]. Исследование данной спиновой системы на основе эффективных и современных алгоритмов позволит ответить на ряд существующих вопросов, связанных с влиянием магнитного поля на термодинамические свойства и фазовые переходы спиновых решеточных систем с конкурирующими обменными взаимодействиями. Актуальность исследования влияния магнитного поля на ФП обусловлена еще и тем, что в современной микроэлектронике (и спинтронике) невозможно пренебречь влиянием внешних факторов на поведение приборов и элементов электроники. Уровень миниатюризации современной микроэлектроники таков, что те факторы, которые раньше рассматривались как несущественные, сегодня не могут быть игнорированы.

МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан описывающую данную спиновую систему имеет следующий вид:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,l \rangle\rangle} S_i S_l - H \sum_i S_i, \quad (1)$$

где J_1 и J_2 – постоянные величины (константы) обменного спинового взаимодействия первых ближайших ($J_1 = -1$) и вторых ($J_2 = -1$) ближайших соседей (спинов), $S_i = \pm 1$ – значение Изинговского спина, H – величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). Магнитное поля менялась в интервале $7.0 \leq H \leq 14.0$.

Спиновые системы с конкуренцией спиновых обменных взаимодействий с помощью микроскопических гамильтонианов успешно исследуются на основе метода Монте-Карло (МК) [9, 11, 24–33]. В настоящее время расчеты проводятся на основе многих вариантов алгоритмов Монте-Карло метода. Одним из наиболее эффективных и точных для исследования и расчета подобных спиновых систем является репличный обменный алгоритм МК метода [34]. Поэтому для выполнения данного исследования нами используется репличный алгоритм Монте-Карло метода.

Репличный обменный алгоритм метода МК, который мы использовали можно описать в следующем виде:

1. Одновременно моделируются несколько Q копий (реplik) системы X_1, X_2, \dots, X_Q с температурами T_1, T_2, \dots, T_Q .

2. Для избавления от проблемы критического замедления системы после выполнения одного МК-шага/спин для всех копий реплик производится обмен конфигурациями (данными) между парой соседних реплик X_i и X_{i+1} с вероятностью:

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

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

Расчеты проводились с использованием периодических граничных условий. Линейные размеры системы составляли $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 12-60$, где N – количество спинов в системе, L – размер решетки. Для изучения типа ФП и определения критической температуры использовались гистограммный метод анализа данных и метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [35, 36]. Для того, чтобы вывести систему в термодинамическое равновесие выделялся участок равный $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз превосходит размер неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ЭВМ

Расчет зависимости теплоемкости C от температуры производился с помощью следующего выражения:

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

где $K = |J_1|/k_B T$ – обратная температуре величина, N – число частиц, H – оператор Гамильтониана.

Параметр порядка данной системы рассчитывался по следующей формуле [37]:

$$m = 3m_1 - m_2 - m_3 - m_4, \quad (3)$$

где m_1, m_2, m_3, m_4 – параметры порядка по подрешеткам.

В данной системе сосуществуют 4 подрешетки. Более подробно про структуры подрешеток можно посмотреть в работе [6].

Для вычисления намагниченности использовалась формула:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i. \quad (4)$$

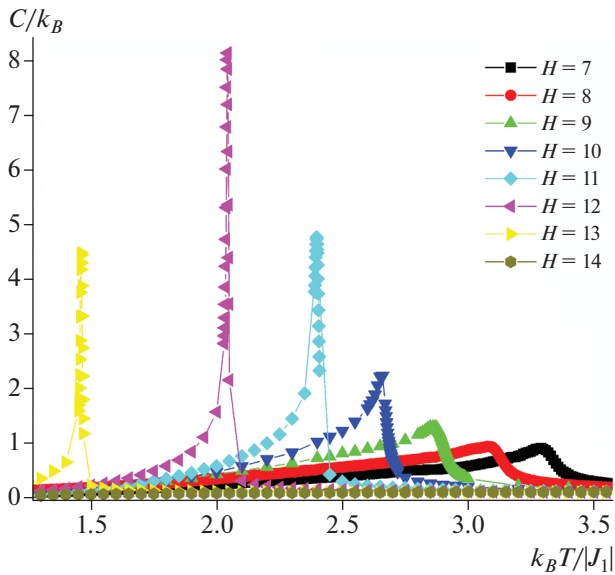


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_1|$.

Для определения типа ФП использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{\langle 3m^2 \rangle_L^2}. \quad (5)$$

Используя формулу (5) с высокой точностью можно найти критическую температуру T_N , если в системе происходит фазовый переход II рода [10].

На рис. 1 показаны зависимости теплоемкости от температуры при $L = 24$ для разных значений величины магнитного поля. На рисунке отчетливо видно, что при значениях магнитного поля $7.0 \leq H \leq 10.0$ с ростом значения H происходит

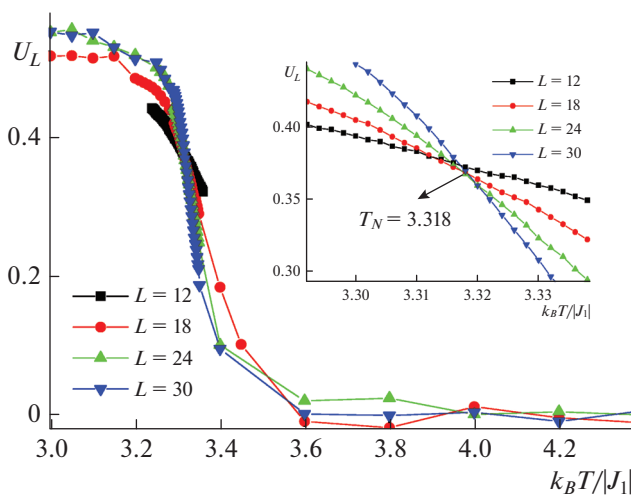


Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J_1|$ для разных L при $H = 7.0$.

смещение максимумов теплоемкости в область низких температур. Также на рисунке можно заметить рост значений максимумов теплоемкости. При значениях магнитного поля $11.0 \leq H \leq 13.0$ в критической области наблюдаются более резкие пики. Можно предположить, что в этом интервале реализуется ФП первого рода. Мы предполагаем, что магнитное поле благоприятствует усилению конкурирующего спинового взаимодействия между первыми ближайшими и вторыми ближайшими соседями и в связи с этим наблюдается смещение максимумов теплоемкости в область низких температур. На рис. 1 видно, что для теплоемкости при значении магнитного поля $H = 14$ пик не наблюдается. Это говорит о том, что дальнейшее увеличение магнитного поля подавляет ФП.

На рис. 2. представлены зависимости кумулянта Биндера четвертого порядка U_L при значении магнитного поля $H = 7.0$ для разных размеров системы L . На графике видна отчетливая точка пересечения ($T_N = 3.318$). Это говорит о том, что в системе реализуется фазовый переход II рода, а сама точка соответствует критической температуре. Аналогичные зависимости кумулянтов Биндера были построены и для значения магнитных полей $7.0 \leq H \leq 13.0$. Анализ результатов показывает, что в интервале $7.0 \leq H \leq 10.0$ наблюдается ФП второго рода. В интервале $11.0 \leq H \leq 14.0$ на зависимостях кумулянтов Биндера не наблюдаются точки пересечения.

Анализ природы ФП был проведен используя гистограммный метод анализа данных. Гистограмма распределения энергии для спиновой системы с линейным размером $L = 60$ для поля $H = 12.0$ приведена на рис. 3. Как видно на графике, для поля $H = 12.0$ на гистограмме наблюдаются двой-

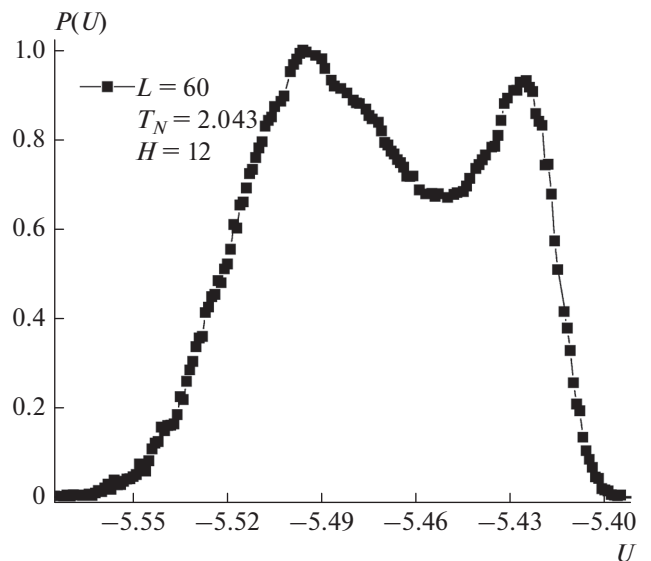


Рис. 3. Гистограмма распределения энергии для $H = 12.0$.

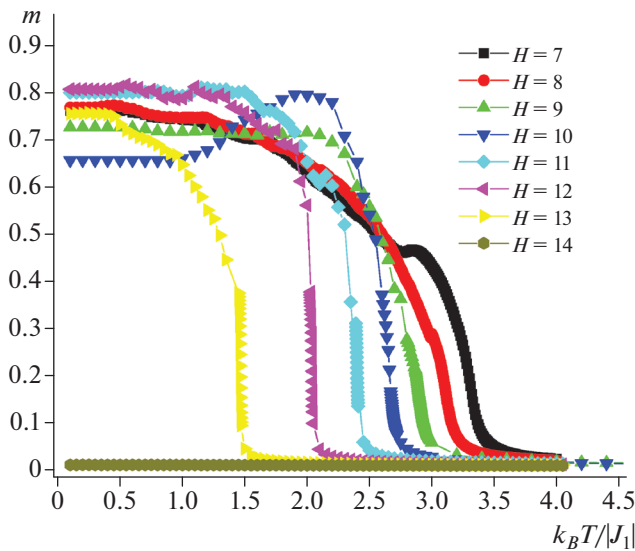


Рис. 4. Зависимость параметра порядка m от температуры $k_B T / |J_1|$.

ной максимум (два пика), который свидетельствует в пользу ФП I рода. Обнаружение двойного пика (бимодальность) на гистограммах распределение энергии говорит о том, что реализуется ФП I рода и является достаточным условием. Аналогичное поведение наблюдается в интервале значений поля $11.0 \leq H \leq 13.0$.

Температурные кривые магнитного параметра порядка m для различных значений H приведены на рис. 4. На рисунке видно, что с ростом H область спада магнитного параметра порядка сдвигается в сторону низких температур. Это объясняется тем, что магнитное поле усиливает конкурирующее спиновое взаимодействие между первыми соседями и вторыми ближайшими соседями. Для значений магнитных полей $11.0 \leq H \leq 13.0$ наблюдаются более резкие спады параметра порядка. Такое поведение для температурных зависимостей магнитного параметра порядка является характерным для ФП первого рода.

Полученные результаты свидетельствуют, что в интервале значений поля $7.0 \leq H \leq 10.0$ переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную происходит как ФП второго рода, а в интервале $11.0 \leq H \leq 13.0$ наблюдается ФП первого рода. При дальнейшем росте значения магнитного поля подавляется фазовый переход.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучена антиферромагнитная Изинговская модель на объемно-центрированной кубической решетке с конкуренцией обменных спиновых взаимодействий в сильных магнитных полях на основе репличного алгоритма МК метода. Рассмотрен ин-

тервал значений магнитного поля $7.0 \leq H \leq 14.0$. Показано, что в диапазоне магнитного поля $7.0 \leq H \leq 10.0$ происходит фазовый переход второго рода, а в диапазоне $11.0 \leq H \leq 13.0$ фазовый переход первого рода

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 20-32-90079-аспиранты и № 19-02-00153-а) и Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1982.
2. Gexn P.C. // УФН. 1989. Т. 159. С. 261.
3. Katsumata K., Aruga Katori H., Kimura S. et al. // Phys. Rev. 2010. No. 82. Art. No. 104402.
4. Ма Ш. Современная теория критических явлений. М.: Мир, 1980.
5. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Курбанова Д.Р., Бадиев М.К. // ФТТ. 2018. Т. 60. С. 1162.
6. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Kurbanova D.R. et al. // Mater. Lett. 2019. V. 236. P. 669.
7. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А., Курбанова Д.Р. // ЖЭТФ. 2015. Т. 147. С. 127.
8. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Муртазаев К.Ш. и др. // ФТТ. 2020. Т. 62. С. 229.
9. Murtazaev A.K., Badiev M.K., Ramazanov M.K., Magomedov M.A. // Physica A. 2020. V. 555. Art. No. 124530.
10. Mengxing Ye, Chubukov A.V. // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. Art. No. 014425
11. Shun-Qing Shen, Zhang F.C. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. Art. No. 172407.
12. Yamamoto D., Suzuki C., Marmorini G. et al. // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 125. Art. No. 057204.
13. Ramazanov M.K., Murtazaev A.K., Magomedov M.A. // Sol. St. Commun. 2016. V. 233. Art. No. 35.
14. Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 107. С. 265.
15. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 103. С. 522.
16. Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. С. 72.
17. Рамазанов, М. К. Муртазаев А. К. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109. С. 610.
18. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. // Physica A. 2018. V. 507. Art. No. 210.
19. Kassin-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K. et al. // J. Magn. Magn. Mater. 2015. V. 384. P. 247.
20. Proshkin A.I., Kassin-Ogly F.A. // Mater. Sci. Forum. 2016. V. 845. P. 93.
21. Kawamura H.J. // Phys. Soc. Japan. 1992. V. 61. Art. No. 1299.
22. Mailhot A., Plumer M.L., Caille A. // Phys. Rev. 1994. V. 50. Art. No. 6854.
23. Свистов Л.Е., Смирнов А.И., Прозорова Л.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2004. Т. 80. С. 231.
24. Masrour R., Jabar A., Benyoussef A., Hamedoun M. // J. Magn. Magn. Mater. 2016. V. 401. P. 695.

25. Муртазаев А.К., Ризванова Т.Р., Рамазанов М.К., Магомедов М.А. // ФТТ. 2020. Т. 62. С. 1278.
26. Муртазаев А.К., Кассан-Оглы Ф.А., Рамазанов М.К., Муртазаев К. Ш. // Физ. мет. и металловед. 2020. Т. 121. С. 346.
27. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К. // Физ. низк. темп. 2019. Т. 45. С. 1493.
28. Murtazaev A.K., Kurbanova D.R., Ramazanov M.K. // Physica A. 2020. V. 545. Art. No. 123548.
29. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К. // ФТТ. 2020. Т. 62. С. 868.
30. Муртазаев А.К., Мазагаева М.К., Рамазанов М.К. и др. // ФТТ. 2020. Т. 63. С. 622.
31. Murtazaev K.Sh., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K. et al. // Low Temp. Phys. 2021. V. 47. P. 515.
32. Бадиев М.К., Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А. // Физ. низк. темп. 2020. Т. 46. С. 824.
33. Wang F., Landau D.P. // Phys. Rev. E. 2001. V. 64. Art. No. 056101.
34. Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. // Biopolymers. Peptide Sci. 2001. V. 60. P. 96.
35. Binder K. // Z. Phys. 1981. V. 43. P. 119.
36. Wang F., Landau D.P. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. Art. No. 2050.
37. Landau D.P. // Phys. Rev. 1983. V. 27. Art. No. 5604.

Phase transitions in antiferromagnetic Ising model with competitive exchange interactions in a magnetic field

К. Ш. Муртазаев^{a, *}, А. К. Муртазаев^b, М. К. Рамазанов^{a, b}, М. А. Магомедов^{a, b}

^a *Amirkhanov Institute of Physics of the Dagestan Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, 367003 Russia*

^b *Dagestan Federal Research Center, Russian Academy of Sciences, Makhachkala, 367000 Russia*

*e-mail: 5kurban@mail.ru

The highly efficient replica algorithm of the Monte Carlo method is used to study the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions in an external magnetic field. The analysis of phase transitions has been carried out. It is shown that a strong magnetic field leads to the suppression of the phase transition.