

# СТРУКТУРЫ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА СЛОИСТОЙ ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

*М. К. Бадиев\**, *А. К. Муртазаев*, *М. К. Рамазанов*, *М. А. Магомедов*

*Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра Российской академии наук  
367003, Магачкала, Россия*

Поступила в редакцию 17 января 2022 г.,  
после переработки 17 января 2022 г.  
Принята к публикации 19 января 2022 г.

На основе репличного алгоритма метода Монте-Карло выполнены исследования магнитных структур основного состояния, магнитных и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом обменных взаимодействий следующих за ближайшими соседями. Получены магнитные структуры основного состояния во внешнем магнитном поле в интервале  $0 \leq h \leq 16$ . Обнаружено, что в рассмотренном интервале значений поля наблюдаются неупорядоченная, частично упорядоченная и полностью упорядоченная фазы. Показано, что магнитные структуры основного состояния зависят от знака (ферромагнитного ( $J_2 > 0$ ) и антиферромагнитного ( $J_2 < 0$ )) обменного взаимодействия вторых соседей. На зависимости намагниченности от магнитного поля обнаружено плато, равное  $1/3$  намагниченности насыщения для  $J_2 > 0$ , а для  $J_2 < 0$  плато равно  $1/2$  намагниченности насыщения.

DOI: 10.31857/S0044451022050133  
EDN: DTDJPC

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы исследование моделей магнитных материалов с различной кристаллической решеткой вызвали значительный интерес. Это связано с уникальностью их магнитных и критических свойств, а также с возможностью широкого применения подобных материалов в области микроэлектроники и спинтроники [1–4]. По причине малого энергопотребления и компактности создание устройств с использованием таких материалов является крайне востребованной задачей. Кроме того, в области технологий они позволяют создавать сверхсильные постоянные магниты, такие как молекулярные датчики, устройства магнитной записи сверхвысокой плотности, устройства визуализации [5] и другие. В данной работе нами проводятся исследования антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых соседей во внешнем магнитном поле. Данная модель представляет собой геометрически фрустрированную спиновую модель, которая иссле-

дуется уже давно [6–13]. Эта модель представляет, как теоретический, так и экспериментальный интерес. Модель Изинга на слоистой треугольной решетке можно применить к описанию реальных материалов, таких как  $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ ,  $\text{CsCoCl}_3$ ,  $\text{CsCoBr}_3$  и  $\text{FeI}_2$ . Эти материалы демонстрируют многоступенчатое поведение намагничивания [14, 16]. В подобных материалах отклонение физических величин встречаются в двух температурных точках. Исследования, проведенные разными методами, показывают, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток не упорядочена и такое неупорядоченное состояние описывается изменяющейся в пространстве и во времени фазой [17–19]. В работе [20] исследованы ориентированные фазы и фазовые переходы (ФП) в модели Изинга на слоистой треугольной решетке с сильным межплоскостным взаимодействием. Авторы обнаружили, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток частично не упорядочена. Было показано, что низкотемпературная фаза исследуемых соединений представляет собой так называемую двухподрешеточную ферримагнитную фазу. Результаты по исследованию изинговских антиферромагнетиков на многослойных треугольных решетках с фрустрированными (abc и abab) спинами, а также сравнение

\* E-mail: m\_zagir@mail.ru

с нефрустрированной (aaa) конфигурацией спинов представлены в работе [21]. Авторами показано, что если межслоевые взаимодействия намного слабее, чем взаимодействия внутри плоскости, то парамагнитная фаза моделей с фрустрированными спинами имеет классический режим спиновой жидкости при низкой температуре, в котором корреляции сильны как внутри, так и между плоскостями, но отсутствует дальний порядок. Несмотря на множество работ и полученные результаты, при исследовании ФП и критического поведения антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке до сих пор остается множество спорных вопросов. Одним из них является вопрос о влиянии возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле, взаимодействие вторых соседей, немагнитные примеси, тепловые и квантовые флуктуации на природу ФП, магнитные и термодинамические свойства этой модели. Включение этих возмущающих факторов может привести к совершенно новому физическому поведению в магнитных спиновых системах с фрустрациями. Причина такого поведения заключается в высокой чувствительности фрустрированных систем к внешним возмущающим факторам. В связи с этим, в данном исследовании мы изучаем влияние магнитных полей типа обменного взаимодействия вторых соседей на магнитные и термодинамические свойства фрустрированной модели Изинга. Исследования проводятся на основе современных методов и идей, что позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с физикой фрустрированных спиновых систем.

## 2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1)$$

где  $S_{i,j,l} = \pm 1$  — изинговский спин,  $J_1$  и  $J_2$  — константы обменного взаимодействия соответственно первых и вторых соседей. Первый член в этой формуле характеризует антиферромагнитное ( $J_1 < 0$ ) взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым внутри слоя и между слоями. Второй член характеризует взаимодействие вторых соседей внутри слоев, которое может быть как ферромагнитным ( $J_2 > 0$ ), так и антиферромагнитным

( $J_2 < 0$ ). Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Все параметры приводятся в безразмерных величинах. Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-90$ , где  $L$  приводится в размерах элементарной ячейки. Магнитная структура основного состояния рассматриваемой модели сильно вырождена. Из-за геометрии решетки обменные связи препятствуют формированию обычного двухподрешеточного антиферромагнитного порядка. Это наглядно проявляется в классическом пределе: если мы направим спины в двух вершинах треугольника антипараллельно, то третий спин не может одновременно быть антипараллелен обоим — но при этом его взаимодействие с обоими спинами одинаково. Это вырождение может быть нарушено введением в систему обменной анизотропии, учета взаимодействий вторых соседей или же внешним магнитным полем, что приводит к стабилизации коллинеарного антиферромагнитного состояния. В настоящее время спиновые системы с фрустрациями на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на основе метода Монте-Карло (МК) [22–28]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем является репличный обменный алгоритм [29]. Репличный обменный алгоритм был использован нами в следующем виде:

1. Одновременно моделируются  $N$  реплик  $X_1, X_2, \dots, X_N$  с температурами  $T_1, T_2, \dots, T_N$ .

2. После выполнения одного МК-шага/спин для всех реплик проводится обмен данными между парой соседних реплик  $X_i$  и  $X_{i+1}$  в соответствии со схемой Метрополиса с вероятностью

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

где

$$\Delta = -(U_i - U_{i+1})(1/T_i - 1/T_{i+1}),$$

$U_i$  и  $U_{i+1}$  — внутренние энергии реплик. Преимущество этого метода в том, что вероятность обмена априори известна, тогда как для других алгоритмов определение вероятности очень утомительно и отнимает много времени.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

На рис. 1 и 2 приведены магнитные структуры основного состояния, полученные нами для фер-

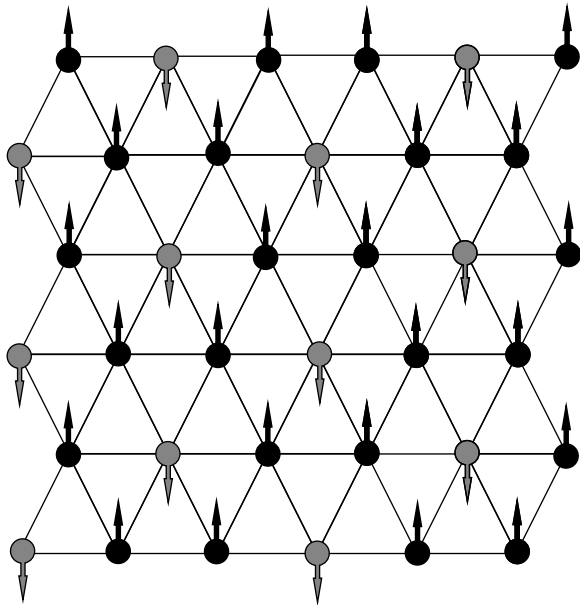


Рис. 1. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 > 0$

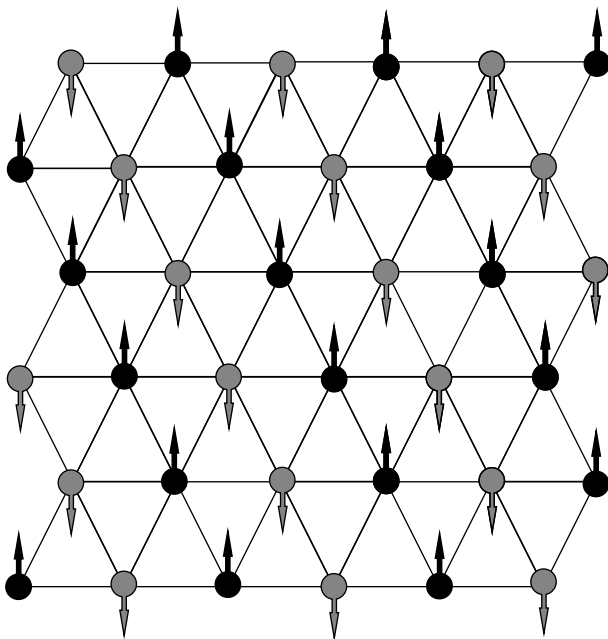


Рис. 2. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 < 0$

ромагнитного и антиферромагнитного взаимодействий вторых соседей при слабых магнитных полях. На рисунках мы видим, что для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$  система принимает разные спиновые конфигурации. В случае, когда  $J_2 > 0$ , появляются структуры  $\uparrow\uparrow\downarrow$  (спин вверх, спин вверх и спин вниз) в треуголь-

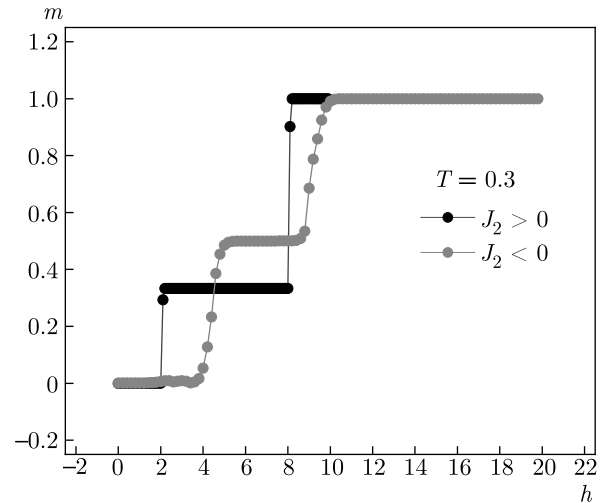


Рис. 3. Зависимости намагниченности от магнитного поля  $h$

ной подрешетке и  $\downarrow\downarrow\uparrow$  (спин вниз, спин вниз и спин вверх) с одинаковой вероятностью. В этом состоянии система может быть шестикратно вырождена. Магнитная структура модели образована чередованием слоев, приведенных на рис. 1 и 2. Когда взаимодействие вторых соседей антиферромагнитное ( $J_2 < 0$ ), в системе наблюдается полосовая структура. Это видно на рис. 2. Анализ рис. 1 и 2 показывает, что изменение типа обменного взаимодействия вторых соседей приводит к изменению динамики конкуренции. Энергия, необходимая для переворота спинов в разных слоях, зависит от знака взаимодействия. Этим обусловлено изменением магнитной структуры основного состояния.

Намагниченность системы вычислялась по формуле

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i. \tag{2}$$

На рис. 3 приведены графики зависимости намагниченности от магнитного поля  $h$  для исследуемой модели при  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$ . На рисунке видно, что с увеличением магнитного поля на графиках намагниченности наблюдается плато. Плато сохраняется вплоть до поля насыщения, что приводит к двухступенчатому поведению намагниченности, экспериментально обнаруженному в нескольких классических и квантовых треугольных спиновых системах [30–32]. На графиках можно заметить, что плато намагниченности для случая, когда  $J_2 > 0$ , наблюдается в интервале полей  $2 \leq h \leq 8$ . Для случая  $J_2 < 0$  плато намагниченности наблю-

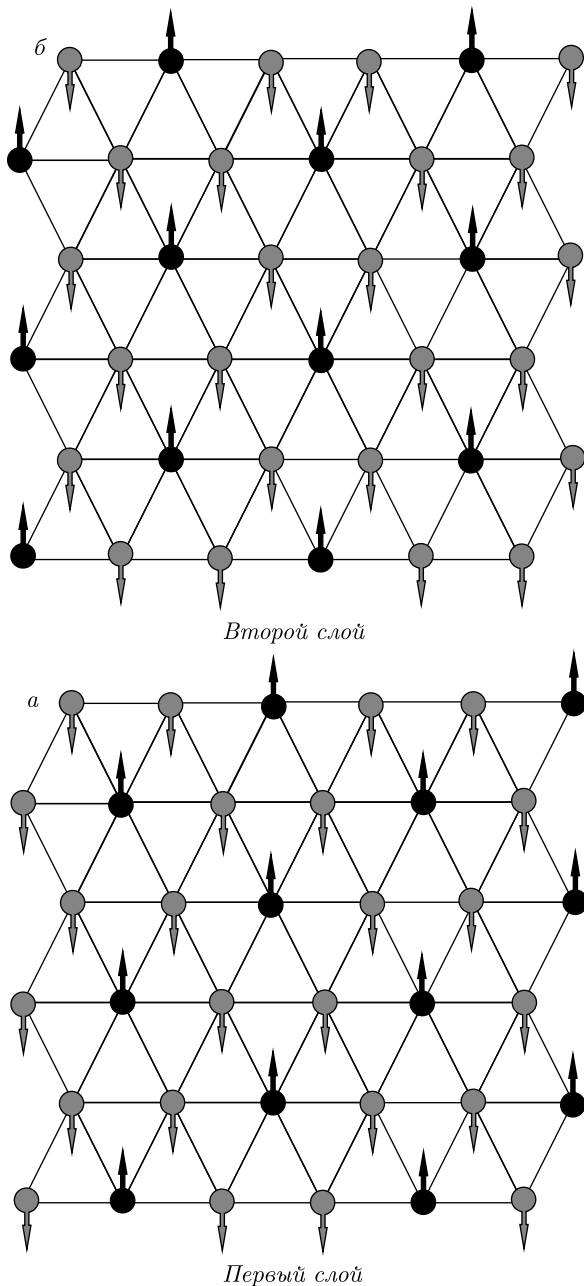


Рис. 4. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 > 0$  в интервале полей  $2 \leq h \leq 8$

дается в интервале  $4 \leq h \leq 10$ . При ферромагнитном взаимодействии вторых соседей плато намагниченности приходится на  $1/3$  намагниченности насыщения, а при антиферромагнитном взаимодействии вторых соседей плато намагниченности приходится на  $1/2$  намагниченности насыщения.

На рис. 4 приведены магнитные структуры двух слоев в интервале магнитного поля  $2 \leq h \leq 8$ , где наблюдается плато намагниченности при  $J_2 > 0$ .

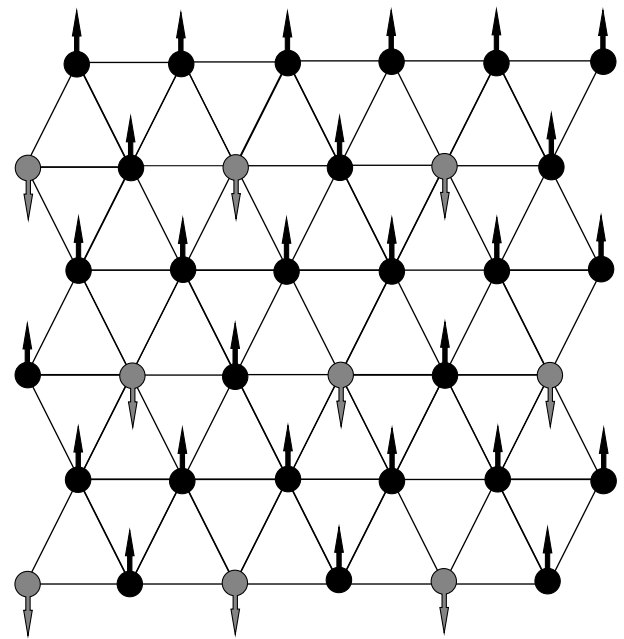


Рис. 5. Магнитная структура основного состояния для  $J_2 < 0$  в интервале  $4 \leq h \leq 10$

Аналогично спиновым структурам при слабых магнитных полях видно, что спины двух подрешеток направлены в одну сторону, а спины третьей подрешетки направлены противоположно. Можно заметить, что спиновая конфигурация второго слоя смещена относительно первой. Это и приводит к возникновению плато намагниченности на графиках, величина которой равна  $1/3$  намагниченности насыщения. Упорядоченная фаза образована чередованием смещенных друг относительно друга таких слоев.

Для случая, когда взаимодействие вторых соседей — антиферромагнитное, мы также получили спиновые структуры в разных слоях. На рис. 5 приведена одна из таких структур, которая представляет собой чередующиеся антиферромагнитные и ферромагнитные полосы. С этим связано то, что плато намагниченности приходится на  $1/2$  намагниченности насыщения. На рис. 6 и 7 представлены графики зависимости минимальной энергии системы от величины магнитного поля. На рисунках мы наблюдаем три разные области зависимости энергии от магнитного поля. В первой области, где наблюдается неупорядоченная область, энергия системы не зависит от величины поля. Во второй области происходит частичное упорядочение системы. В этой области мы наблюдаем медленный спад энергии при увеличении внешнего магнитного поля. В третьей области,

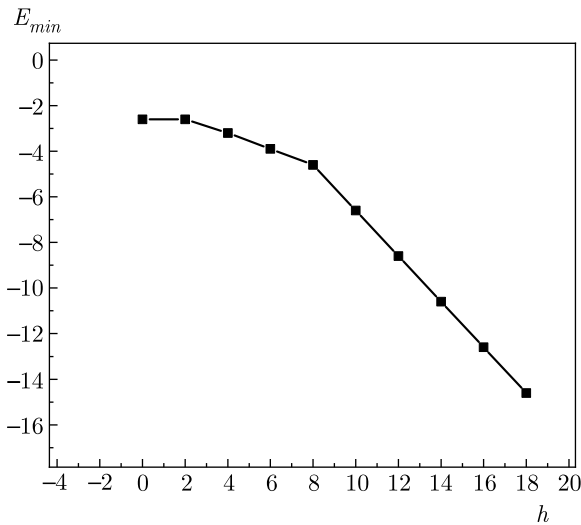


Рис. 6. Зависимость энергии от поля для  $J_2 > 0$ :  $0 \leq h \leq 2$  — неупорядоченная область,  $2 \leq h \leq 8$  — частично упорядоченная область,  $8 \leq h \leq 18$  — полностью упорядоченная область

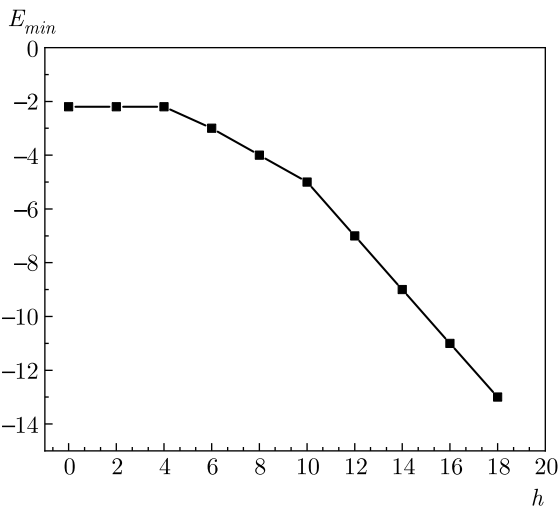


Рис. 7. Зависимость энергии от поля для  $J_2 < 0$ :  $0 \leq h \leq 4$  — неупорядоченная область,  $4 \leq h \leq 10$  — частично упорядоченная область,  $10 \leq h \leq 18$  — полностью упорядоченная область

где происходит полное упорядочение системы, мы наблюдаем при увеличении поля более резкий спад энергии. На рисунках можно заметить, что интервалы поля, в которых мы наблюдаем магнитное упорядочение, различаются и зависят от знака вторых соседей.

Зависимости намагниченности от температуры при различных значениях поля для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$

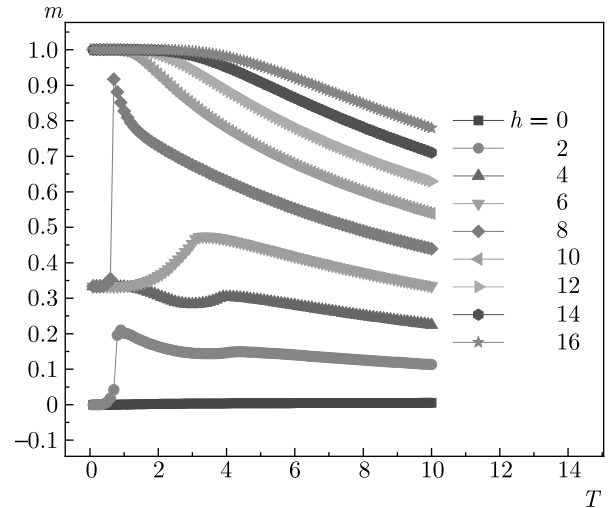


Рис. 8. Зависимость намагниченности  $m$  от температуры при разных значениях  $h$  для  $J_2 > 0$

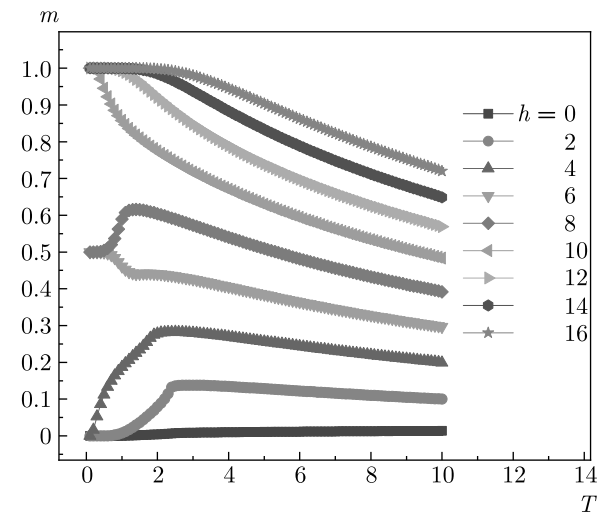


Рис. 9. Зависимость намагниченности  $m$  от температуры при разных значениях  $h$  для  $J_2 < 0$

представлены на рис. 8 и 9. На этих рисунках продемонстрировано поведение намагниченности в полях, величины которых меняются в интервале от  $0 \leq h \leq 16$ . Можно заметить, что между кривыми намагничивания имеется заметное расхождение. На рисунках видно, что намагниченность при  $T \rightarrow 0$  принимает значения 0, 1/3, 1 для  $J_2 > 0$  и 0, 1/2 и 1 для  $J_2 < 0$ . Такое поведение по-видимому связано с тем, что в рассматриваемой модели имеются магнитные подрешетки, связанные с симметрией кристаллической решетки. При увеличении температуры и поля слабая магнитная подрешетка разрушается или же выстраивается вдоль направления маг-

нитного поля. С этим связано то, что мы наблюдаем провалы или же резкий рост в зависимостях намагниченности на рисунках. Поскольку подрешетки нашей модели для  $J_2 > 0$  и  $J_2 < 0$  обладают разной жесткостью по отношению к внешнему магнитному полю, эти провалы и скачки намагниченности приходятся на разные магнитные поля и разные температуры. При более высоких полях система упорядочивается уже при нулевых температурах. Отметим, что учет взаимодействия вторых соседей  $J_2$  оказался очень эффективным для модуляции поведения намагниченности в фрустрированной спиновой системе.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью репличного алгоритма метода Монте-Карло получены магнитные структуры основного состояния для фрустрированной трехмерной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом ферромагнитного и антиферромагнитного обменного взаимодействия вторых соседей при различных значениях магнитного поля. Полученные данные свидетельствуют о том, что знак взаимодействия вторых соседей приводит к изменению магнитной структуры основного состояния данной модели. Обнаружено плато намагниченности, величина которого равна  $1/3$  намагниченности насыщения для  $J_2 > 0$  и  $1/2$  намагниченности насыщения для  $J_2 < 0$ . Показано, что температурные зависимости намагниченности при одинаковых полях зависят от знака обменного взаимодействия вторых соседей. Можно предположить, что знак и величина обменного взаимодействия вторых и более далеких соседей играют важную роль в формировании ступенчатого поведения намагниченности в магнитном поле.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Q. A. Pankhurst, J. Connolly, S. K. Jones et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36**, 167 (2003).
2. A. Jabar, R. Masrour, G. Kadim et al., *Commun. Theor. Phys.* **73**, 115702 (2021).
3. T. Sahdane, R. Masrour, and A. Jabar, *Physica A* **572**, 125882 (2021).
4. Y. El Krimi, R. Masrour, and A. Jabar, *Materials Today Energy* **20**, 100685 (2021).
5. S. D. Bader, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1 (2006).
6. A. N. Berker, G. S. Grest, C. M. Soukoulis et al., *J. Appl. Phys.* **55**, 2416 (1984).
7. D. Blankschtein, M. Ma, A. N. Berker et al., *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
8. S. N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **32**, 1584 (1985).
9. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **132**, 1152 (2007).
10. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **142**, 338 (2012).
11. O. Heinonen and R. G. Petschek, *Phys. Rev. B* **40**, 9052 (1989).
12. J.-J. Kim, Y. Yamada, and O. Nagai, *Phys. Rev. B* **41**, 4760 (1990).
13. R. R. Netz and A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 377 (1991).
14. H. T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific, Singapore (2004).
15. Y. B. Kudasov, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 027212 (2006).
16. O. A. Starykh, *Rep. Prog. Phys.* **78**, 052502 (2015).
17. H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **64**, 466 (1980).
18. M. Kaburagi, T. Tonegawa, and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn* **51**, 3857 (1982).
19. P. Matsubara and S. Ikeda, *Phys. Rev. B* **28**, 4064 (1983).
20. D. M. Blankschtein and A. N. Berker, *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
21. D. T. Liu, F. J. Burnell, L. D. C. Jaubert et al., *Phys. Rev. B* **94**, 224413 (2016).
22. А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев, М. К. Рамазанов et al., *Physica A* **555**, 124530 (2020).
23. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **144**, 1239 (2013).
24. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, and М. К. Бадиев, *Physica A* **507**, 210 (2018).
25. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, К. С. Муртазаев et al., *Phys. Solid State* **62**, 229 (2020).
26. А. К. Муртазаев, М. К. Бадиев, М. К. Рамазанов et al., *Phase Transitions* **94**, 394 (2021).

- 27.** М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
- 28.** M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Physica A **521**, 543 (2019).
- 29.** A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- 30.** A. I. Smirnov, H. Yashiro, S. Kimura et al., Phys. Rev. B **75**, 134412 (2007).
- 31.** Y. Shirata, Tanaka H, A. Matsuo et al., J. Phys. Soc. Jpn **80**, 093702 (2011).
- 32.** J. Hwang, E. S. Choi, F. Ye et al., Phys. Rev. Lett. **109**, 257205 (2012).