

Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке

М. К. Рамазанов¹⁾, А. К. Муртазаев

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 18 марта 2019 г.

После переработки 25 марта 2019 г.

Принята к публикации 25 марта 2019 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей. Рассмотрен диапазон значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей $0.0 \leq r \leq 1.0$. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что в рассмотренном интервале значений r наблюдается фазовый переход второго рода. Обнаружено, что в данной модели учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев не приводит к смене фазового перехода.

DOI: 10.1134/S0370274X1909008X

1. Введение. Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств в спиновых системах с конкурирующим обменным взаимодействием является актуальной задачей в современной физике конденсированного состояния [1–3]. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к фрустрации. Исследование спиновых систем с фрустрациями имеет особый интерес. Это связано с тем, что такие системы во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. В частности, такое отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП [4].

В последние годы большое внимание уделяют исследованию двумерной и трехмерной модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями [5–12]. Эти модели изучены достаточно хорошо и многие их свойства известны. Модель Гейзенберга, где фрустрации обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий, до сих пор остается малоизученной. ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей практически не исследованы. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классических трехмерных моделях сопровождается вырождением основного состояния, появлением фрустраций, различных фаз и ФП [13].

Исследование методом Монте-Карло (МК) модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом вза-

имодействий вторых ближайших соседей было проведено в работе [14]. В этой работе авторами построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$, где $r = J_2/J_1$ (J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, соответственно). Было показано, что на диаграмме вблизи точки $r = 0.25$ пересекаются три различные фазы: ферромагнитная, парамагнитная и суперантиферромагнитная. Магнитная структура основного состояния суперантиферромагнитной фазы была нами подробно рассмотрена в работе [11], а что касается ферромагнитной и парамагнитной фаз, то их магнитные структуры хорошо известны. Согласно результатам работы [14], для $r < 0.25$ реализуется ФП второго рода, когда как для $r > 0.25$ имеет место ФП первого рода. Для определения типа ФП авторами был использован гистограммный анализ данных метода МК. Как видно из работы, расчеты проводились лишь для систем с малыми линейными размерами ($L \leq 18$), что вызывает сомнение в правильности полученных результатов. Как было показано ранее в работах [11, 12, 15] для определения типа ФП в спиновых системах с фрустрациями необходимо исследовать системы с большими линейными размерами ($L \geq 90$).

В работе [16] нами методом МК были проведены исследования ФП и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближай-

¹⁾e-mail: sheikh77@mail.ru

ших соседей внутри слоев. Было обнаружено, что в исследуемой модели переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как ФП второго рода для случая $r = 1.0$. Эта модель является частным случаем модели, исследуемой в работе [14], когда взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями равно нулю.

В данной работе, нами на основе метода МК исследуется природа ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев в интервале значений $0.0 \leq r \leq 1.0$. Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев данная модель становится фрустрированной. В спиновых системах с фрустрациями многие физические свойства сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования. Антиферромагнитная модель Гейзенберга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

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

где \mathbf{S}_i – трехкомпонентный единичный вектор, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Решетка состоит из двумерных квадратных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями ($J_1 < 0$). Второй член характеризует антиферромагнитное взаимодействие вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое ($J_2 < 0$).

В настоящее время ФП фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [17–21]. 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 был использован репличный обменный алгоритм метода МК [22], который является наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [6].

3. Результаты моделирования. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 24 \div 120$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \times 10^5$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$ МКшагов/спин.

Параметр порядка системы m вычислялся, используя выражения:

$$m_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} (-1)^z S_i, \quad \text{где } \lambda = 1, 2, 3, 4, \quad (2)$$

$$m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)]/4, \quad (3)$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)]/4, \quad (4)$$

$$m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2}, \quad (5)$$

где m_1, m_2, m_3, m_4 – параметр порядка по подрешеткам, z – номер слоя решетки.

Для определения критической температуры T_N был использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [23]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (6)$$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга, точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой. Выражение (6) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение метода кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [23].

На рисунках 1 и 2 представлены характерные зависимости U_L от температуры для $r = 0.2$ и $r = 0.8$ при различных значениях L (здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов использованных для построения зависимостей). Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. Из графиков видно, что в критической области наблюдаются четко выраженные точки пересечения ($T_N = 1.1600(2)$ для $r = 0.2$ и $T_N = 1.0960(2)$ для $r = 0.8$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$)), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r .

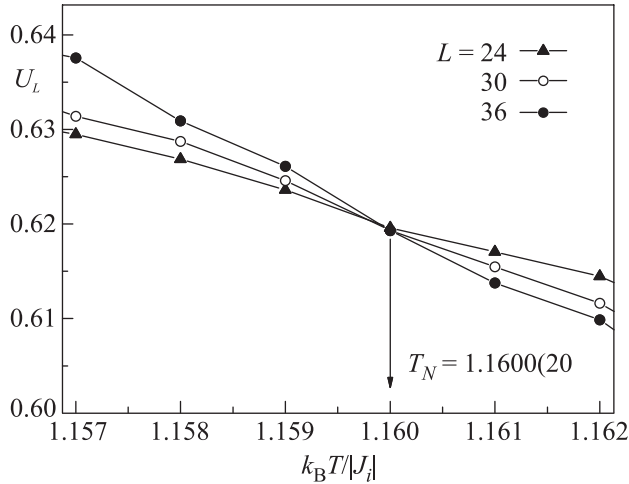


Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r = 0.2$

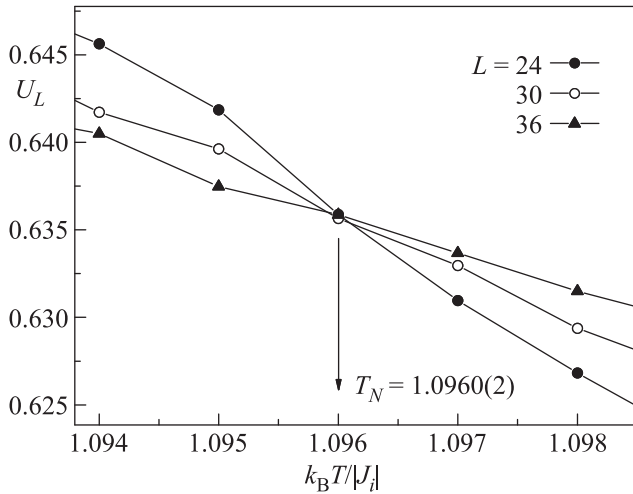


Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r = 0.8$

На рисунке 3 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме видно, что вблизи значения $r = 0.5$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная – *I*, парамагнитная – *II* и суперантиферромагнитная – *III*.

В данной работе нами изучались переходы из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную. Переход из антиферромагнитной фазы в суперантиферромагнитную нами не рассматривался (пунктирная линия вблизи значения $r = 0.5$ на рис. 3). Достоверных сведений о данном переходе до сих пор не существует. Мы предполагаем, что на грани-

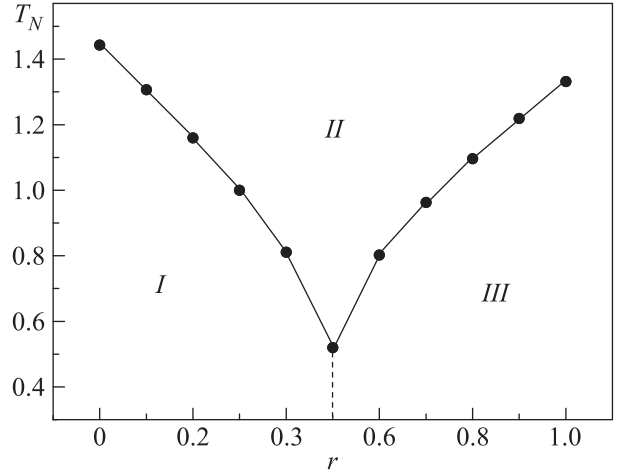


Рис. 3. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. *I* – антиферромагнитная фаза, *II* – парамагнитная фаза, *III* – суперантиферромагнитная фаза

це этих фаз имеется область сосуществования обеих фаз.

Для подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [24, 25]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана нами в работе [26].

Результаты нашей работы показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 4. На этом рисунке представлены ги-

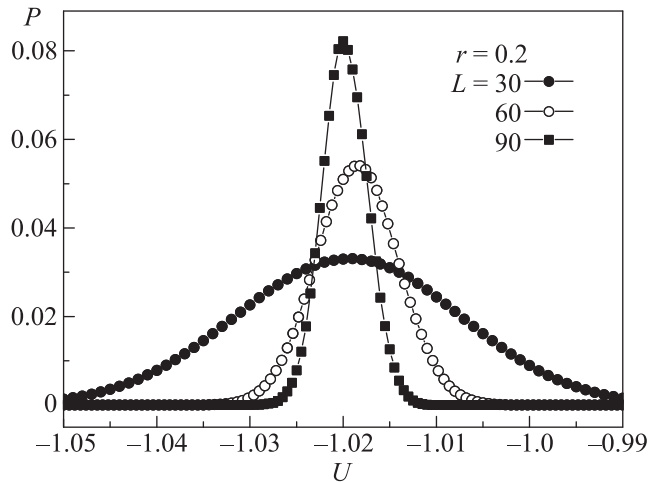


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.2$

стограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 30$, $L = 60$ и $L = 90$ для случая $r = 0.2$. Графики построены вблизи критической

температуры. Из рисунка 4 видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдается один хорошо выраженный максимум, который растет с увеличением линейных размеров системы. Такое поведение свидетельствует в пользу ФП второго рода. Аналогичная картина наблюдается во всем интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$.

Что касается перехода из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу, мы обнаружили, что в интервале значений $0.5 < r \leq 1.0$ также наблюдается ФП второго рода. Это показано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распре-

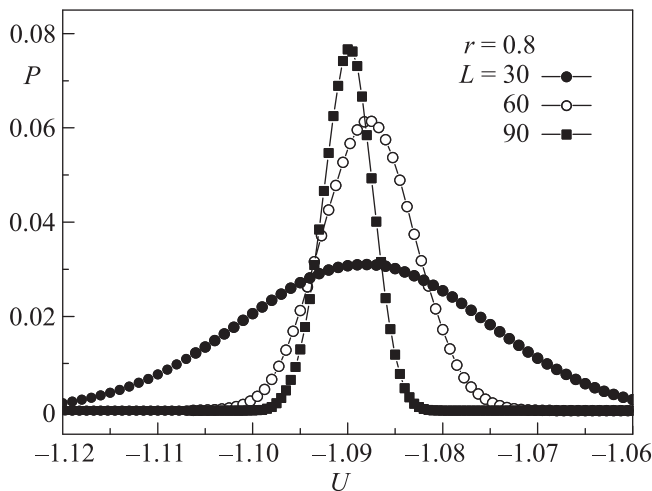


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.8$

деления энергии при $r = 0.8$ для систем с линейными размерами $L = 30$, $L = 60$ и $L = 90$. Из рисунка видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдается один хорошо выраженный максимум, который растет с увеличением линейных размеров системы. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии является достаточным условием для ФП второго рода.

В работе [26] нами ранее было показано, что для систем с большими линейными размерами на гистограмме распределения энергии может появиться второй максимум, который отсутствует для систем с малыми линейными размерами. Поэтому нами на рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 120$ при $r = 0.9$. Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. Как видно на рис. 6, для всех значений T наблюдается один максимум. Это позволяет утверждать о наличии в системе ФП второго рода. Наши данные противоречат с результатами, полученными в работе [14], где

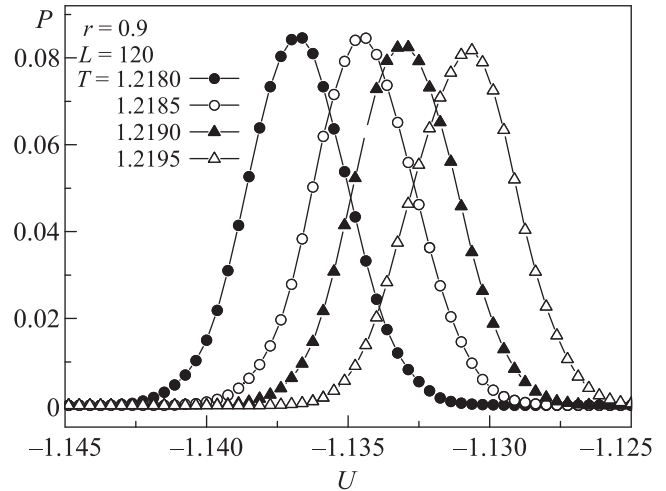


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.9$

переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную происходит как ФП первого рода. Такое несоответствие может быть обусловлено либо тем, что нами в данном исследовании не учитывалось межслойное обменное взаимодействие вторых ближайших соседей, либо тем, что в работе [14] исследовались системы с малыми линейными размерами, что не позволяет надежно определять тип ФП.

Таким образом, на диаграмме, представленной на рис. 3, мы видим, что переход из фазы I в фазу II , а также переход из фазы III в фазу II являются ФП второго рода.

Аналогичные исследования для модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей показали, что на диаграмме зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей существует область ($0.6 \leq r \leq 0.8$), где наблюдается ФП первого рода [12]. В отличие от модели Изинга, в модели Гейзенберга учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев не приводит к смене ФП.

4. Заключение. Исследование фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей в диапазоне значений $0.0 \leq r \leq 1.0$ выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в исследуемой модели во всем рассмотренном интервале значений r наблюдается фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований в рамках научных проектов # 19-02-00153-а и 18-32-20098-мол-а-вед.

1. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
2. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
3. А. Malakis, P. Kalozoumis, and N. Tyraskis, Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).
4. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
5. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **37**, 1258 (2011).
6. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
7. F. A. Kassar-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Mag. Mag. Mater. **324**, 3418 (2012).
8. A. Kalz and A. Honecker, Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
9. S. Jin, A. Sen, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).
10. S. Jin, A. Sen, W. Guo, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 144406 (2013).
11. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
12. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
13. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
14. C. Pinettes and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **83**, 6317 (1998).
15. V. Thanh Ngo and H. T. Diep, Phys. Rev. E **78**, 031119 (2008).
16. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
17. А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
18. A. Maillhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994-II).
19. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Physica B: Condensed Matter **476**, 1 (2015).
20. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
21. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
22. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
23. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, М. (1995).
24. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
25. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
26. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).