Критические свойства трехмерной фрустрированной модели Изинга на кубической решетке

© А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук,
367003 Махачкала, Россия

E-mail: m_akai@iwt.ru

(Поступила в Редакцию 8 июня 2004 г.
В окончательной редакции 7 сентября 2004 г.)

Методом Монте-Карло (МК) выполнены исследования критических свойств $3d$ полностью фрустрированной модели Изинга на кубической решетке. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β, радиуса корреляции ν, а также индекс Фишера η. Показано, что $3d$ фрустрированная модель Изинга на кубической решетке образует новый класс универсальности критического поведения.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 04-02-16487), грантом ведущей научной школы (НШ-2253.2003.2), ФЦП „Интеграция" (№ И0228) и грантом Фонда содействия отечественной науке (А.К.М.).

1. Введение

Современная теория фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) в основном базируется на идеях, заложенных в гипотезе скейлинга, универсальности и в теории ренормализационной группы [1].

До недавнего времени казалось, что теория статических фазовых переходов и критических явлений в основном построена и практически прекратила свое развитие. Однако результаты, полученные, например, при исследовании фрустрированных систем, а также спиновых систем с вмороженным немагнитным беспорядком, показывают, что многие из этих результатов выходят далеко за рамки современной теории ФП и КЯ [2].

Большинство традиционных теоретических и экспериментальных методов исследования таких систем сталкивается с серьезными трудностями при попытке вычислить критические параметры, определить особенности, характер и механизмы критического поведения таких систем [2,3]. Это привело к тому, что ФП и КЯ в таких системах интенсивно изучаются методами Монте-Карло (МК) [3–7].

Нами методом МК исследованы критические свойства полностью фрустрированной модели Изинга на $3d$ кубической решетке. Интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, при изучении фрустрированных систем (ФС) до сих пор основное внимание уделялось ФС на треугольной и гексагональной решетках [4,5–7]. Критические свойства ФС на кубической решетке практически не исследованы.

Во-вторых, многие важные физические свойства ФС сильно зависят от геометрии решетки (от степени фрустрации). Такая зависимость может привести к сужению классов универсальности критического поведения, этот вопрос все еще недостаточно полно изучен.

В-третьих, первые попытки исследования этой модели предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

Кроме того, результаты исследований, полученные в работах [8–12], неоднозначны и не дают полной картины особенностей фазовых переходов и критического поведения рассматриваемой модели, так как носят весьма противоречивый характер. Например, в работах [8–10] фазовый переход, обнаруженный вблизи $T_C = 1.34$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_{\mathrm{B}}$), интерпретирован как фазовый переход первого рода, тогда как авторы работ [11,12] пришли к выводу, что при этой температуре в системе наблюдается фазовый переход второго рода. Обратим внимание, что в большинстве этих работ главное внимание уделялось изучению термодинамических и магнитных свойств, а критические параметры рассчитывались попутно.

2. Полностью фрустрированная $3d$ модель Изинга

Трехмерная полностью фрустрированная модель Изинга на кубической решетке впервые была предложена Вильяном [13] как одна из моделей, которая может быть использована для описания спиновых стекол. Эта модель показана на рис. 1, *a*. Отметим, что вся система может быть разбита на *8* подрешеток, но подрешетки *1–5*, *2–4*, *3–6* и *7*, *8* эквивалентны.

На рис. 1, *b* представлено восемь элементарных кубиков, описывающих спиновую конфигурацию данной модели в основном состоянии. Как видно из рисунка, на каждый элементарный куб приходятся три фрустрированные связи.

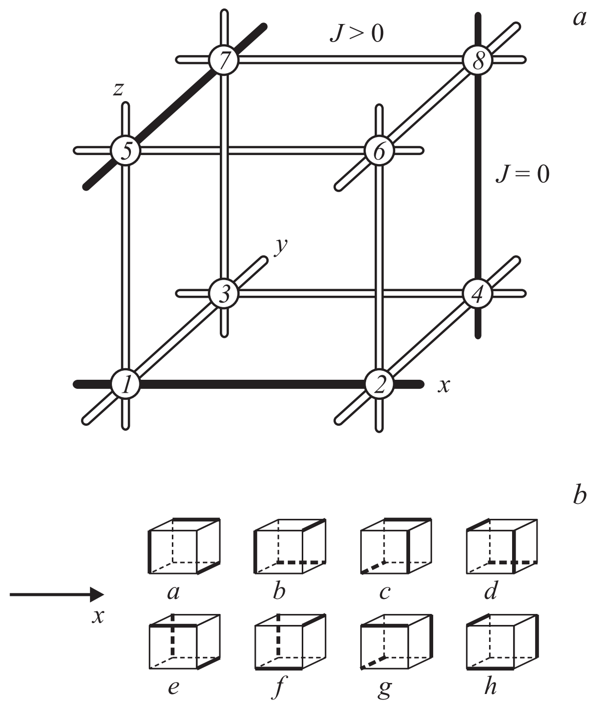

Рис. 1. Полностью фрустрированная трехмерная модель Изинга на простой кубической решетке (a): восемь элементарных кубиков (b).

Гамильтониан этой системы может быть представлен в следующем виде:

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j, \tag{1}$$

где σ — изинговский спин, J_{ij} — обменное взаимодействие, $J > 0$ и $J < 0$ для ферромагнитных и антиферромагнитных связей соответственно. Фрустрации в этой модели обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий [11,13].

Исследования методом МК магнитных и общетермодинамических свойств этой модели выполнены в работах [11,12]. Показано, что в этой системе наблюдаются два фазовых перехода при $T_{C1} = 1.355$ и $T_{C2} \approx 0.7$ [11], а по данным работы [12], $T_{C1} = 1.347$ и $T_{C2} \approx 0.7$. В работе [12] достаточно убедительно показано, что фазовый переход при T_{C1} является переходом второго рода, а при $T = T_{C2}$ наблюдается ФП первого рода. По-видимому, работа [11] является первой работой, где были рассчитаны некоторые статические критические индексы. Значения наиболее важных индексов ν и α, представленные в этой работе, получены путем разбиения парафазного интервала температур на две области $T_C \leq T \leq 1.45$ и $T > 1.45$. Такая процедура представляется весьма сомнительной, да и значение температуры $T = 1.45$, при котором, как полагают авторы, происходит кроссовер, вызывает сомнение. Остается неясным еще и вопрос о причинах кроссовера в парафазной области.

Кроме того, прямой анализ данных МК эксперимента и определения индексов через углы наклона зависимостей термодинамических параметров на графиках, построенных в логарифмическом масштабе, является малоубедительным. Особенно при той небольшой МК статистике, представленной в этой работе.

Отметим работу [12], в которой представлены значения критических индексов α, β, ν и η, однако целью авторов являлось исследование магнитных и термодинамических свойств этой модели, а не расчет критических индексов. Кроме того, выбранный авторами способ использования конечно-размерного скейлинга для расчета, на наш взгляд, не отличается высокой точностью.

Тем не менее данные этих работ свидетельствуют об отличии критических параметров полностью фрустрированной $3d$ модели Изинга от значений, характеризующих класс универсальности чистой модели Изинга.

Согласно представлениям современной теории ФП и КЯ, класс универсальности критического поведения в основном зависит от [1,14]

1) размерности пространства d,
2) числа степеней свободы параметра порядка n,
3) симметрии гамильтониана,
4) радиуса характерного взаимодействия.

В то же время ряд имеющихся результатов говорит о том, что класс универсальности ФС может зависеть не только от этих параметров. Об этом свидетельствуют и результаты, полученные методом МК на решетках разной геометрии [4,5–7]. Отметим также, что неизвестны с достаточной точностью асимптотические значения критических параметров таких систем.

С учетом всего этого в настоящей работе предпринята попытка по возможности с максимальной точностью, с соблюдением единой методики, с использованием надежной и проверенной схемы определить значения критических параметров $3d$ полностью фрустрированной модели Изинга.

3. Метод исследования

Фрустрированные спиновые системы являются довольно сложными объектами для исследования даже методом МК. Как известно, вблизи критической точки метод МК сталкивается с проблемой „критического замедления“, а в ФС эта проблема становится еще более актуальной. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Из них наиболее мощными и эффективными в исследовании КФ в различных спиновых системах и моделях оказались кластерные алгоритмы метода МК [15–18]. Эти алгоритмы позволили рассчитать критические параметры многих модельных систем с высокой степенью точности [3]. Но, к сожалению, применение этих алгоритмов к исследованию КЯ в фрустрированных системах оказалось малоэффективным. Это обусловлено тем, что ФС испытывают фазовый переход при низких температурах и/или формируемый кластер охватывает слишком большую область системы. Иногда эти алгоритмы используют с некоторым подбираемым параметром, который позволяет регулировать размер формируемого кластера. Поэтому для изучения ФС стали применять специальные варианты кластерных алгоритмов, которые оказались эффективными только для исследования низкоразмерных моделей ФС [19,20]. При исследовании трехмерных моделей эти алгоритмы оказались даже менее эффективными, чем стандартный алгоритм Метрополиса (см. ссылки в [21]).

Поэтому нами для исследования $3d$ фрустрированной модели Изинга использовался классический алгоритм Метрополиса [22]. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) с линейным размером $L \times L \times L = N$, $L = 8{-}30$. Число спинов N в моделируемых системах при этом составляло 512, 1000, 1728, 2744, 4096, 5832, 8000, 10 648, 13 824, 17 576, 21 952 и 27 000. Начальные конфигурации задавались таким образом, чтобы все спины были упорядочены вдоль оси z. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длины $5.0 \cdot 10^5$ МК шагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной до $3.0 \cdot 10^6$ МК шагов/спин.

4. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости использовались выражения [23–25]

$$C = (NK^2)\big(\langle U^2\rangle - \langle U\rangle^2\big), \tag{2}$$

$$\chi = \begin{cases} NK\big(\langle m^2\rangle - \langle |m|^2\rangle\big), & T < T_C, \\ NK\langle m^2\rangle, & T \geq T_C, \end{cases} \tag{3}$$

где $K = |J|/k_{\mathrm{B}}T$, N — число частиц, U — внутренняя энергия, m — подрешеточная намагниченность.

На рис. 2 представлены характерные зависимости теплоемкости C от температуры для систем с линейными резмерами $L = 8$, 12, 16 и 20 (здесь и далее погрешность не превышает размеров использованных точек).

Отметим, что в зависимости теплоемкости C от температуры для всех систем вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые увеличиваются с ростом числа спинов в системе, причем эти максимумы в пределах погрешности приходятся на одну и ту же температуру даже для систем с наименьшим значением L. Это свидетельствует, во-первых, о высокой эффективности использованного способа добавления ПГУ, а во-вторых, о достижении насыщения по N для многих исследуемых нами параметров.

Для более точного определения критической температуры T_C нами использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка. Кумулянт Биндера четвертого порядка имеет вид [26]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4\rangle_L}{3\langle m^2\rangle_L^2}. \tag{4}$$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых U_L в их температурной зависимости является критической точкой [25].

Вместо параметра порядка m в формуле (4) нами исползовалась величина, равная $m = \frac{1}{4}\left(\sum_{\alpha=1}^{4} q_\alpha^2\right)^{1/2}$, где параметр порядка Эдвардса–Андерсона q_α определяется следующим образом [11]:

$$q_\alpha = \frac{8}{N}\sum_{i\in\alpha}\big|\langle\sigma_i^\alpha\rangle\big|, \tag{5}$$

здесь α указывает номер подрешетки.

На рис. 3 представлена характерная зависимость U_L от температуры для подрешеток *3–6*. Точка пересечения U_L

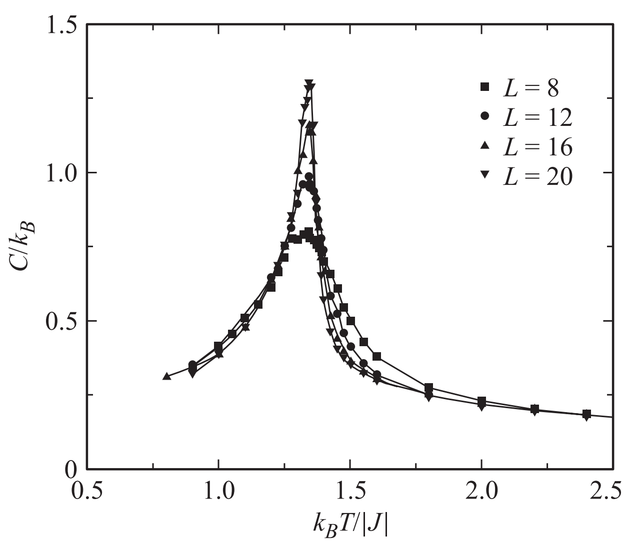

Рис. 2. Зависимость теплоемкости C/k_{B} от температуры $k_{\mathrm{B}}T/|J|$.

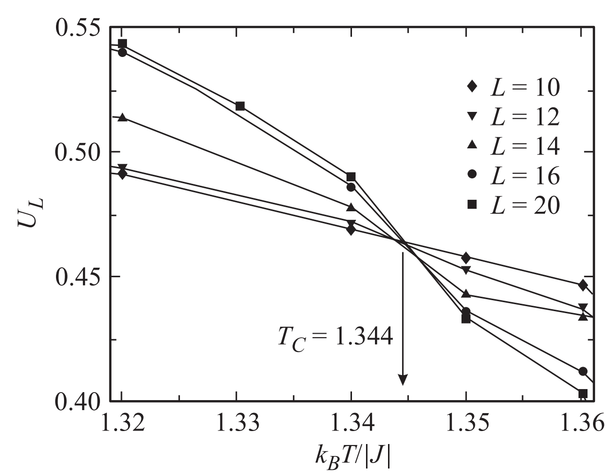

Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_{\mathrm{B}}T/|J|$.

Значения критических индексов α, β, γ, ν и η

Критический параметр	Данные настоящей работы	[11]	[12]	Нефрустрированная модель Изинга (см. ссылки в [3])
α	0.46(2)	0.33(5)	0.32(2)	0.108
β	0.21(2)	–	0.25(2)	0.326
γ	1.18(3)	–	–	1.239
ν	0.55(2)	0.55(2)	0.56(2)	0.631
η	−0.15(5)	−0.28(6)	−0.10(2)	0.038
T_C	1.344(2)	1.355(2)	1.347(1)	4.5108

соответствует критической температуре $T_C = 1.344(2)$. Аналогичным образом определялись значения критических температур и для остальных подрешеток.

Из рис. 2 и 3 видно, что пик теплоемкости для систем с разным числом спинов N соответствует критической температуре T_C, определенной методом кумулянтов Биндера, что говорит о высокой надежности определения критической температуры.

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β и радиуса корреляции ν использовались соотношения теории КРС.

Согласно этой теории, свободная энергия для достаточно большой системы с ПГУ при температуре T, близкой к критической температуре T_C бесконечной системы, может быть представлена в виде [27,28]

$$F(T, L) \propto L^{-d} F_0(tL^{1/\nu}), \tag{6}$$

где $t = |T - T_C|/T_C$, $T_C = T_C(L = \infty)$ и ν — статический критический индекс радиуса корреляции бесконечной системы ($L = \infty$).

Уравнение (6) ведет к аналогичным уравнениям для теплоемкости, восприимчивости и спонтанной намагниченности, приходящихся на один спин [24,27,28]

$$C(T, L) \propto L^{\alpha/\nu} C_0(tL^{1/\nu}), \tag{7}$$

$$\chi(T, L) \propto L^{\gamma/\nu} \chi_0(tL^{1/\nu}), \tag{8}$$

$$m(T, L) \propto L^{-\beta/\nu} m_0(tL^{1/\nu}), \tag{9}$$

где α, γ, β — статические критические индексы для системы с $L = \infty$. Они связаны соотношением гиперскейлинга $2-\alpha = d\nu = 2\beta + \gamma$ [1].

Кроме того, в настящее время на основе теории КРС предложен ряд способов определения критического индекса радиуса корреляции ν [4,29,30].

В соответствии с этой теорией в точке фазового перехода

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{10}$$

где g_{V_n} — некоторая постаянная, а в качестве V_n могут фигурировать величины

$$V_i = \frac{\langle m'E \rangle}{\langle m' \rangle} - \langle E \rangle, \quad (i = 1, 2, 3, 4). \tag{11}$$

Из соотношений (8), (9) следует, что в системе с размером $L \times L \times L$ при $T = T_C$ и достаточно больших L для намагниченности и восприимчивости выполняются следующие соотношения [3,24]:

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \tag{12}$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}. \tag{13}$$

Эти соотношения испльзованы для определения β и γ.

Аналогичное соотношение для теплоемкости, как уже было показано в [31], не реализуется, и для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используется выражение (см. ссылки в [31])

$$C_{\max}(L) = C_{\max}(L = \infty) - AL^{\alpha/\nu}, \tag{14}$$

где A — некоторый коэффициент.

На рис. 4 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимось восприимчивости χ_3 для подрешетки *3* от линейных размеров решетки L. Как видно из рисунка, все данные ложатся на прямую, угол наклона кривой определяет значение γ/ν. По этой схеме определены значения α/ν, β/ν и $1/\nu$. Затем полученные значения ν испольовались для расчета α, β и γ. Все значения индексов, полученные таким образом, представлены в таблице. Здесь же для сравнения приведены данные, полученные в работах [11,12].

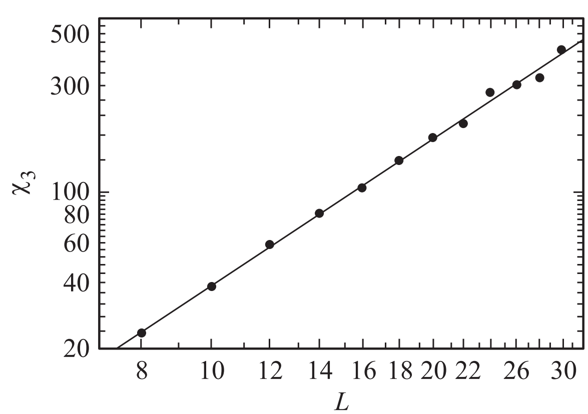

Рис. 4. Зависимость восприимчивости χ_3 от линейных размеров системы L при $T = T_{C1}$.

Особо следует отметить процедуру, использованную для определения индекса Фишера η. Воспользовавшись соотношением между восприимчивостью χ и радиусом корреляции ξ [32]

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu}, \quad (15)$$

а также соотношением $\eta = 2 - \gamma/\nu$, связывающим индекс η и ν, получим

$$\ln(\chi/\xi^2) = c - \eta \ln \xi, \quad (16)$$

где c — некоторая константа. Для систем с конечным размером $\xi = L$. Тогда при $T = T_C$ имеем

$$\ln(\chi/L^2) = c - \eta \ln L. \quad (17)$$

На основе выражения (17) для всех восьми подрешеток были определены значения индекса η. Эти данные также представлены в таблице.

Отметим, что значения индексов ν, найденные нами, в пределах погрешности совпадают с полученными в работе [12]. Индексы α и β несколько отличаются от данных других авторов [11,12]. Критический индекс γ для этой модели, по-видимому, определен впервые нами (во всяком случае, мы не нашли работ, где это было сделано). Индекс Фишера η в пределах погрешности совпадает с результатом авторов работы [12]. Что касается критической температуры $T_C = 1.344(2)$, определенной в данном исследовании и в работе [12] как $T_C = 1.355$, то они практически совпадают.

5. Заключение

Наши исследования критических свойств $3d$ полностью фрустрировнной модели Изинга на простой кубической решетке с использованием классического алгоритма метода МК (алгоритм Метрополиса) позволили рассчитать все остальные статические критические индексы. Расчет критических индексов теплоемкости α, восприимчивости γ, намагниченности β, радиуса корреляции ν и индекса Фишера η выполнен на основе соотношений теории КРС и с соблюдением единой методики в рамках одного исследования. Полученные данные свидетельствуют о принадлежности $3d$ полностью фрустрированной модели Изинга на кубической решетке к новому классу универсальности. По-видимому, критический индекс восприимчивости для этой модели рассчитан впервые.

Список литературы

[1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
[2] Вик.С. Доценко. УФН **165**, *5*, 481 (1995).
[3] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, *7*, 773 (1999).
[4] Д. Лойсон, А.И. Соколов, Б. Деламотт, С.А. Антоненко, К.Д. Шотт, Х.Т. Дип. Письма в ЖЭТФ **72**, *6*, 447 (2000).
[5] H.J. Kavamura. J. Phys. Soc. Jap. **61**, *4*, 1299 (1992).
[6] H.J. Kavamura. J. Phys. Soc. Jap. **56**, *2*, 474 (1986).
[7] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, *10*, 6854 (1994-II).
[8] S.F. Chui, G. Forgacs, D.M. Hatch. Phys. Rev. B **25**, *11*, 6952 (1982).
[9] D. Blankschtein, M. Ma, A. Nihat Berker. Phys. Rev. B **30**, *3*, 1362 (1984).
[10] G.S. Grest. J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, *33*, 6239 (1985).
[11] H.T. Diep, P. Lallemand, O. Nagai. J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, *5*, 1067 (1985).
[12] L.W. Bernardi, K. Hukushima, H. Takayama. J. Phys. A: Mathematical and General **32**, *10*, 1787 (1999).
[13] J. Villain. J. Phys. C: Solid State Phys. **10**, *10*, 1717 (1977).
[14] И.К. Камилов, Х.К. Алиев. Статические критические явления в магнитоупорядоченных кристаллах. Изд-во ДНЦ РАН, Махачкала (1993).
[15] U. Wolf. Phys. Rev. Lett. **62**, *4*, 361 (1989).
[16] U. Wolf. Nucl. Phys. B **322**, *3*, 759 (1989).
[17] A.M. Ferrenberg, R.N. Swendsen. Phys. Rev. Lett. **61**, *23*, 2635 (1988).
[18] A.M. Ferrenberg, R.N. Swendsen. Phys. Rev. Lett. **63**, *12*, 1195 (1989).
[19] D. Kandel, R. Ben-Av, E. Domany. Phys. Rev. Lett. **65**, *8*, 941 (1990).
[20] D. Kandel, R. Ben-Av, E. Domany. Phys. Rev. B **45**, *8*, 4700 (1992).
[21] P.D. Coddington, L. Hang. Cond-mat/9402030 (1994).
[22] К. Биндер. Методы Монте-Карло в статистической физике. Мир, М. (1982).
[23] K. Binder, J.-Sh. Wang. J. Stat. Phys. V **55**, *1*, 87 (1989).
[24] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, *7*, 6087 (1991).
[25] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995).
[26] K. Binder. Phys. Rev. Lett. **47**, *9*, 693 (1981).
[27] A.E. Ferdinand, M.E. Fisher. Phys. Rev. **185**, *2*, 832 (1969).
[28] M.E. Fisher, M.N. Barber. Phys. Rev. Lett. **28**, *23*, 1516 (1972).
[29] D.P. Landau. Physica A **205**, *1*, 41 (1994).
[30] D.P. Loison. Phys. Lett. A **257**, *1*, 83 (1999).
[31] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **120**, *6*, 1535 (2001).
[32] Ch. Holm, W. Janke. Phys. Rev. B **48**, *2*, 936 (1993-II).