

10,11,05

Исследование фазовых переходов и критических свойств модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке

© А.К. Муртазаев^{1,2}, М.К. Рамазанов^{1,3}, Д.Р. Курбанова¹, М.А. Магомедов^{1,3},
М.К. Бадиев¹, М.К. Мазагаева¹

¹ Институт физики ДНЦ РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия

³ Дагестанский научный центр РАН,
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 5 февраля 2019 г.

В окончательной редакции 5 февраля 2019 г.

Принята к публикации 5 февраля 2019 г.

Репличным методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов, термодинамических и критических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Исследования проведены для соотношений величины обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей в диапазоне значений k [0.0,0.6]. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. В рамках теории конечно-размерного скейлинга рассчитан весь набор основных статических критических индексов. Показано, что класс универсальности критического поведения этой модели сохраняется в рассмотренном интервале значений k .

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 19-02-00153-а, 18-32-20098-мол-а-вед и № 18-32-00391-мол-а.

DOI: 10.21883/FTT.2019.06.47695.373

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП), термодинамических и критических свойств в спиновых системах с фрустрациями является одной из центральных задач физики конденсированных сред. Это связано с тем, что фрустрированные спиновые системы имеют поведение, отличное от поведения соответствующих нефрустрированных систем. Причина такого поведения заключается в сильном вырождении в спиновой подсистеме [1–4].

Для изучения эффектов фрустрации часто используют модели с конкурирующими обменными взаимодействиями первых и вторых ближайших соседей. Наличие конкурирующих обменных взаимодействий в магнитных материалах может привести к большому разнообразию магнитных упорядоченных состояний и ФП между ними. Кроме того, особенности ФП при разных значениях соотношения обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями известны лишь в общих чертах.

Известно, что наличие фрустраций может привести к изменению характера ФП и повлиять на формирование классов универсальности критического поведения спиновых систем. Кроме того, учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей приводит

появлению различных фаз и аномалий термодинамических и критических свойств [4–9].

В данной работе, нами предпринята попытка на основе метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП, термодинамических и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Интерес к антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке обусловлен тем, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что усложняет решение задачи. При изучении фрустрированных систем до сих пор основное внимание уделялось спиновым системам на квадратной, треугольной и гексагональной решетке [10–15]. ФП и критические свойства фрустрированной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке практически не исследованы. В работе [16] нами были исследованы ФП данной модели с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Результаты исследований показывают, что в этой модели для соотношения обменных взаимодействий вторых ближайших соседей $k = 1$ наблюдается ФП первого рода.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности

изменения критического поведения фрустрированной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке при различных значениях k , и эти вопросы до сих пор остаются открытыми.

Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП, термодинамическими и критическими свойствами фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная модель Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается гамильтонианом

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

где $|\mathbf{S}_i|$ — трехкомпонентный единичный вектор $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие первых ближайших соседей ($J_1 < 0$), а второй — вторых ближайших соседей ($J_2 < 0$). При расчете, мы принимаем $J_1 = 1$ и меняем значение J_2 ; $k = J_2/J_1$ — величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Все параметры приводятся в безразмерных величинах.

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями и линейными размерами $2(L \times L \times L) = N$, $L = 24-90$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Величина взаимодействия вторых ближайших соседей менялась в интервале $k [0,0,0,6]$ с шагом $\Delta k = 0.1$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ МК шагов на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ МК шагов на спин.

Исследование ФП, термодинамических и критических свойств фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими и экспериментальными методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых проблем. Это связано с тем, что для таких моделей характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами МК [10,12,14,16–24], но обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. В связи с этим, в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, которые позволяют преодолеть эти проблемы. Одними из наиболее мощных и эффективных в исследовании ФП и критических явлений в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК [23,24]. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК.

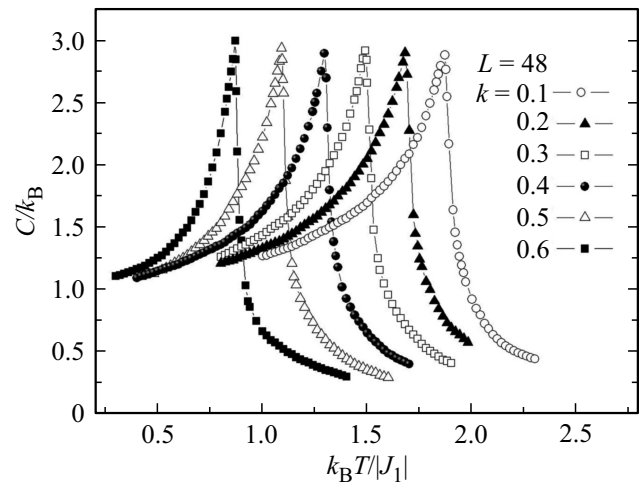


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_1|$ для $L = 48$ при различных k .

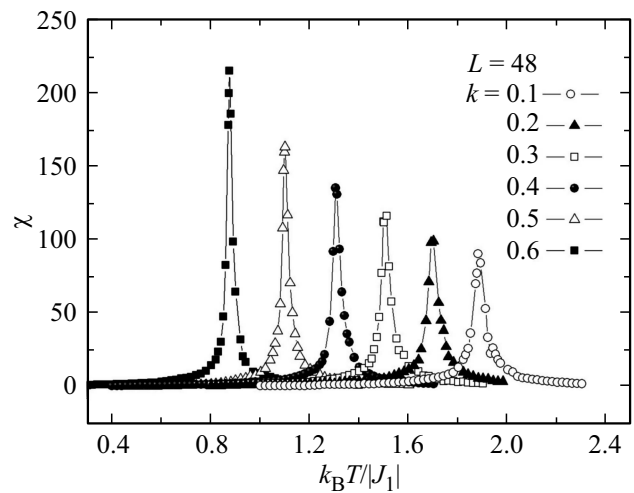


Рис. 2. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J_1|$ для $L = 48$ при различных k .

3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости C и восприимчивости χ использовались выражения [25,26]:

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

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

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, T_N — критическая температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U — внутренняя энергия, m — параметр порядка (U и m являются нормированными величинами).

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости теплоемкости и восприимчивости от температуры для систем с линейными размерами $L = 48$ при различных k

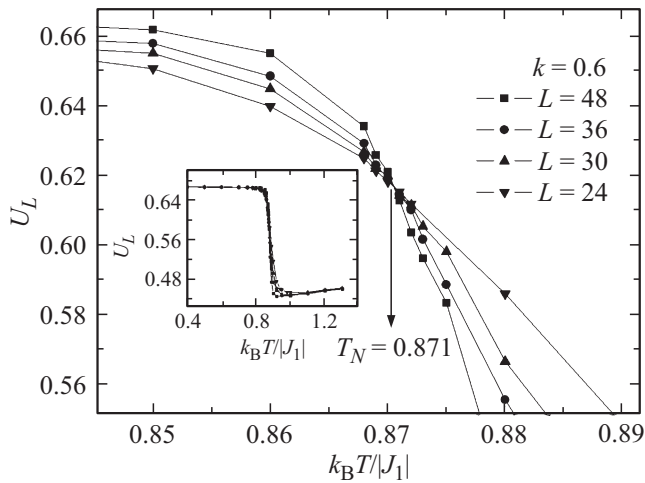


Рис. 3. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $k = 0.6$ при различных L .

(здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов использованных для построения зависимостей).

Из рисунков видно, что в зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для всех значений k вблизи критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы, которые с ростом k смещаются в сторону более низких температур. Причем увеличение значения k приводит к росту абсолютных значений максимумов восприимчивости, что обусловлено усилением флуктуаций, вследствие увеличения конкуренции первых и вторых ближайших соседей.

Для определения критической температуры T_N наиболее эффективным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [27]:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \quad (4)$$

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

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (5) позволяет с большой точностью определить критическую температуру T_N и хорошо тестировать тип ФП в системе.

На рис. 3 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $k = 0.6$ для разных значений L . Видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 0.871(1)$). Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений k .

Для анализа рода ФП нами также использовался гистограммный анализ данных метода МК [28,29]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [30,31].

Результаты нашей работы показывают, что ФП для всех рассмотренных нами значений k являются переходами второго рода. Это продемонстрировано на рис. 4 и 5. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 60$ и $L = 90$, при $k = 0.2$ и $k = 0.6$. Графики построены вблизи критической температуры. Из рис. 4 и 5 видно, что в зависимости вероятности P от энергии U для $k = 0.2$ и $k = 0.6$ наблюдается один хорошо выраженный максимум. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии является достаточным условием для ФП второго рода. Аналогичный результат получен и для всех остальных значений k .

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , параметра порядка β , радиуса корреляции ν и индекса Фишера η применялись соотношения теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [32].

Из теории КРС следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполня-

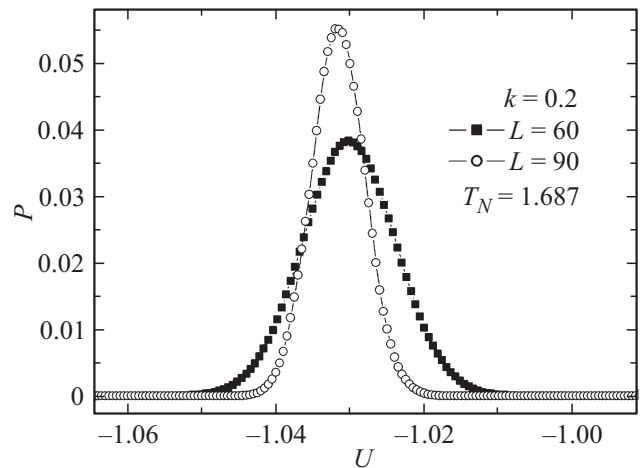


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $k = 0.2$ при $L = 60$ и $L = 90$.

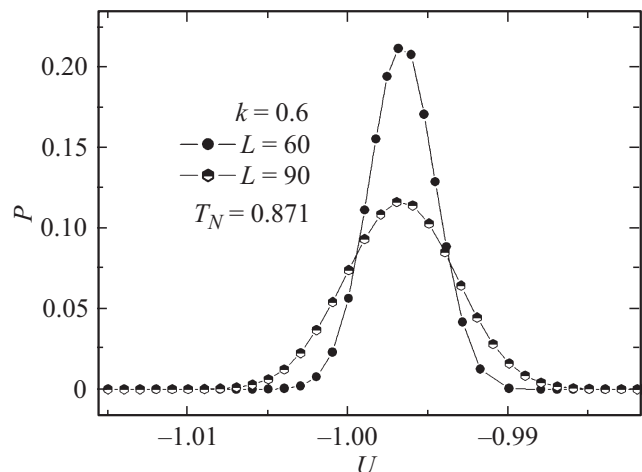


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для $k = 0.6$ при $L = 60$ и $L = 90$.

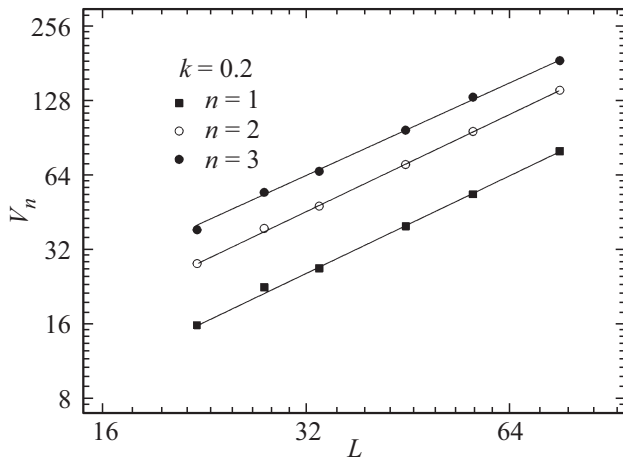


Рис. 6. Зависимость параметра V_n от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 0.2$.

ются следующие выражения [32]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \tag{6}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{7}$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{8}$$

где g_{V_n} — некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать:

$$V_n = \frac{\langle m^n U \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle U \rangle, \quad (n = 1, 2, 3). \tag{9}$$

Эти выражения были нами использованы для определения β , γ и ν .

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используется выражение

$$C_{\max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \tag{10}$$

где A_1 и A_2 — некоторые коэффициенты.

На рис. 6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_n при $n = 1, 2, 3$ от линейных размеров решетки L для $k = 0.2$. Как видно из рисунка все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямые. Зависимости на рисунках, проведенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Углы наклона прямых определяют значения $1/\nu$. Вычисленные таким образом значения ν использовались для определения критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ и параметра порядка β .

На рис. 7 и 8 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для $k = 0.2$. Все точки в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения β/ν и γ/ν . По этой схеме

были определены значения и для теплоемкости α/ν . Используя данные ν , вычислялись статические критические индексы α , β и γ .

Эта процедура использовалась для расчета критических индексов для всех рассмотренных значений k . Процедура определения индекса Фишера η нами подробно описана в работе [33].

Все значения статических критических индексов, полученные в данной работе, представлены в таблице. Как видно из таблицы почти все значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале $k [0.0, 0.6]$, в пределах погрешности совпадают между собой. Это свидетельствует о том, что в этом интервале система проявляет универсальное критическое поведение.

Отметим, что полученные нами значения критических индексов в интервале $k [0.0, 0.6]$, в пределах погрешности совпадают с соответствующими значениями критических индексов для нефрустрированной трехмерной модели Гейзенберга [34]. Это свидетельствует о том, что в рассмотренном интервале значений k , учет

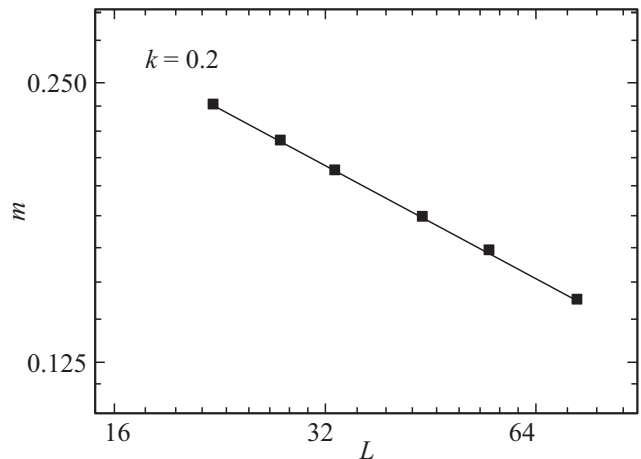


Рис. 7. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 0.2$.

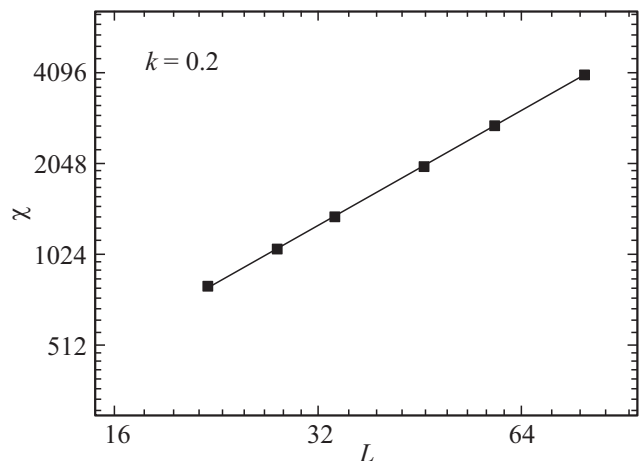


Рис. 8. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $k = 0.2$.

Значения критических индексов для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке

k	T_N	ν	α	β	γ	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
0.0	2.056(1)	0.70(1)	-0.13(1)	0.37(1)	1.39(1)	0.02(2)	2.0
0.1	1.873	0.70	-0.12	0.36	1.38	0.03	1.98
0.2	1.687	0.70	-0.13	0.37	1.39	0.02	2.0
0.3	1.494	0.70	-0.12	0.36	1.39	0.02	1.99
0.4	1.301	0.70	-0.12	0.36	1.38	0.03	1.98
0.5	1.094	0.70	-0.12	0.37	1.39	0.02	2.01
0.6	0.871	0.71	-0.13	0.37	1.38	0.03	1.99
Нефрустрированная модель Гейзенберга [34]	1.443	0.7112(5)	-0.117(2)	0.3689(3)	0.3960(9)	0.0375(5)	2.01

взаимодействий вторых ближайших соседей не приводит к смене класса универсальности критического поведения и данная модель принадлежит к тому же классу универсальности критического поведения, что и нефрустрированная трехмерная модель Гейзенберга.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов, термодинамических и критических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. Показано, что в интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей k [0,0,0.6] в данной модели наблюдается фазовый переход второго рода. Рассчитаны значения всех основных статических критических индексов в данном интервале. Обнаружено, что в рассмотренном интервале k система проявляет универсальное критическое поведение.

Список литературы

- [1] С.С. Сосин, Л.А. Прозорова, А.И. Смирнов. УФН **175**, 92 (2005).
- [2] В.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [3] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
- [4] С.В. Малеев. УФН **172**, 617 (2002).
- [5] M. Tisser, V. Delamotte, D. Mouhanna. Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
- [6] P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, E. Vicari. Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
- [7] G. Zumbach. Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
- [8] A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B **63**, 140414(R) (2001).
- [9] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000). P. 384.
- [10] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
- [11] H. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
- [12] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [13] Л.Е. Свистов, А.И. Смирнов, Л.А. Прозорова, О.А. Петренко, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
- [14] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФНТ **37**, 1258 (2011).
- [15] F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. J. Magn. Magn. Mater. **324**, 3418 (2012).
- [16] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев. ФТТ **60**, 1162 (2018).
- [17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **142**, 338 (2012).
- [18] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica B: Condens. Matter **476**, 1 (2015).
- [19] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).
- [20] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
- [21] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.А. Магомедов, Д.Р. Курбанова. ФТТ **60**, 1798 (2018).
- [22] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **53**, 1004 (2011).
- [23] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- [24] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
- [25] K. Binder, J.-Sh. Wang. J. Status Phys. **55**, 87 (1989).
- [26] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [27] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука. М. (1995). 144 с.
- [28] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [29] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
- [30] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
- [31] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
- [32] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [33] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев. ФТТ **59**, 1082 (2017).
- [34] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).

Редактор Т.Н. Василевская