

10,11

# Исследование критических свойств фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке

© А.К. Муртазаев<sup>1,2</sup>, М.К. Рамазанов<sup>1,3</sup><sup>1</sup> Институт физики ДагНЦ РАН,  
Махачкала, Россия<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет,  
Махачкала, Россия<sup>3</sup> Дагестанский государственный педагогический университет,  
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

(Поступила в Редакцию 30 июня 2010 г.

В окончательной редакции 5 октября 2010 г.)

Репличным методом Монте-Карло выполнены исследования критических свойств трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. В рамках теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны магнитные и киральные критические индексы для этой модели. Впервые для этой модели анализ данных проводился с учетом коррекции к скейлингу. Показано, что критическое поведение фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке отличается от критического поведения чистой модели Гейзенберга и не зависит от типа межслойного обменного взаимодействия.

Работа поддержана грантами РФФИ (проекты № 10-02-00130, 09-02-96506) и грантом ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ на 2009–2013 гг.

## 1. Введение

В последние годы большое внимание уделяется исследованию магнитных, тепловых, критических свойств и фазовых переходов (ФП) антиферромагнитных систем на треугольной решетке [1–6]. Интерес к таким системам обусловлен тем, что в отличие от ферромагнетиков в антиферромагнитных системах возможно проявление геометрической фрустрации обменного взаимодействия вследствие особенностей кристаллической структуры. Статические и динамические свойства таких систем существенно зависят от соотношения обменных взаимодействий магнитных ионов друг с другом внутри гексагональных плоскостей и между ними, но в обоих случаях значительно отличаются от свойств обычных двухподрешеточных антиферромагнетиков [1].

Несмотря на интенсивные исследования таких систем, проводимые теоретическими [7–10], экспериментальными [4] и численными [11–17] методами, до сих пор не удалось получить ответ на ряд вопросов фундаментального характера. Среди них можно отметить проблемы, связанные с характером ФП, с особенностями и факторами, влияющими на формирование классов универсальности магнитного и кирального критического поведения фрустрированных спиновых систем. Решение этих вопросов требует тщательного исследования ФП и критических свойств фрустрированных систем (ФС) с вычислением их критических индексов.

Большинство традиционных теоретических и экспериментальных подходов исследования критического поведения ФС сталкивается с серьезными трудностями. Подходы, основанные на теории ренормализационной

группы и  $\epsilon$ -разложения, дают весьма противоречивые и не согласующиеся с экспериментальными данными результаты. Кроме того, очень часто уравнения ренормализационной группы для таких систем не приводят к фиксированной точке в фазовом пространстве (т.е. ФП второго рода срываются на ФП первого рода). Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы в настоящее время могут быть изучены только методом Монте-Карло (МК) [15–18]. Это привело к тому, что ФП и критические явления (КЯ) в ФС в настоящее время интенсивно изучаются методами МК на основе специально разработанных алгоритмов. Методы МК позволяют строго и последовательно с контролируемой погрешностью исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей.

В настоящей работе нами предпринята попытка по возможности с максимальной точностью, с соблюдением единой методики, с использованием надежной и проверенной схемы определить на основе специального репличного алгоритма метода МК значения критических параметров трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке.

Неколлинеарная структура основного состояния фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке задается киральным параметром порядка. Считается, что наличие такого порядка может привести к ФП второго рода с новым киральным классом универсальности. Об этом свидетельствует подавляющее большинство численных и экспериментальных дан-

ных [1,4,11–17]. Имеющиеся результаты теоретических исследований носят противоречивый характер. Часть результатов свидетельствует о наличии в таких системах ФП второго рода при определенных значениях числа компонент параметра порядка  $N$ , а часть — в пользу наличия слабо выраженного фазового перехода первого рода [12].

Кроме того, остается открытым важный вопрос, связанный с зависимостью класса универсальности критического поведения ФС от типа межслойного обменного взаимодействия, анизотропии, учета взаимодействий вторых ближайших соседей, внешнего магнитного поля, величины внутри- и межслойного обменного взаимодействия и др. [5,6,19–22].

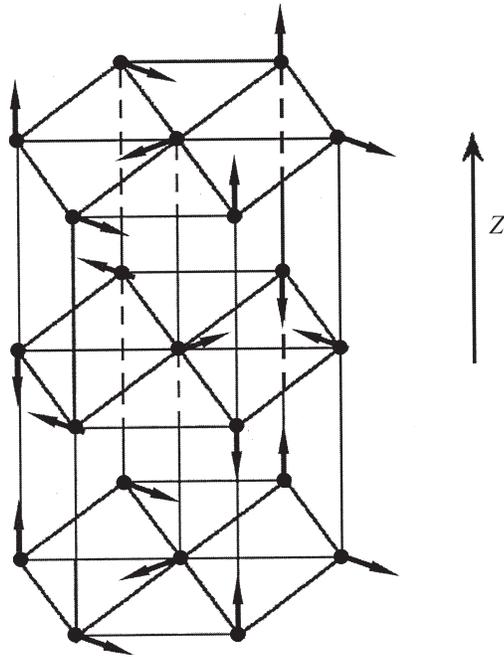
Изучение фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическим поведением фрустрированных спиновых систем.

## 2. Модель и метод исследования

Гамильтониан фрустрированной трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке может быть представлен в следующем виде [14]:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

где  $\mathbf{S}_i$  — трехкомпонентный единичный вектор  $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ ,  $J$  — константа обменного взаимодействия. Суммирование производится по ближайшим соседям. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев,



**Рис. 1.** Схематическое изображение антиферромагнетика на слоистой треугольной решетке. Темные кружки изображают атомы в узлах решетки, стрелками обозначены направления спинов.

сложенных по ортогональной оси. Магнитные моменты, находящиеся в вершинах правильных треугольников, не могут образовать обычную коллинеарную структуру. Минимум классической обменной энергии достигается при условии, что соседние спины ориентированы под углом  $120^\circ$  друг к другу. Такое состояние является вырожденным. Антиферромагнитное взаимодействие между плоскостями в реальных гексагональных кристаллах не нарушает эту структуру, упорядочивая спины в соседних плоскостях антипараллельно [1]. Схематически эта модель представлена на рис. 1.

Исследования фазовых переходов этой модели нами были проведены в работе [23], где было продемонстрировано наличие фазового перехода второго рода.

Исследования критических свойств фрустрированных спиновых систем обычными методами МК сталкиваются с серьезными и труднопреодолимыми проблемами. Это связано с тем, что для ФС характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Поэтому нами в данном исследовании использовался специально разработанный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло [24], который является наиболее мощным и эффективным в исследовании КЯ в ФС. Более подробно репличный обменный алгоритм описан нами в работах [25,26].

К настоящему моменту репличные алгоритмы метода МК и теория конечно-размерного скейлинга (КРС) стали основными инструментами исследования критических свойств столь сложных систем.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-42$ . При каждом конкретном значении  $L$  для усреднения термодинамических параметров использовались десять марковских цепей, стартующих из различных случайных начальных конфигураций. В каждой цепи длина равновесного участка в 100 раз превышала длину неравновесного. Полученные таким образом значения термодинамических параметров усреднялись по всем десяти конфигурациям. Эти данные затем использовались для построения графиков.

## 3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости  $C$  и восприимчивости  $\chi$  нами использовались выражения [17,27–29]

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

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

$$\chi_k = \begin{cases} (NK)(\langle m_k^2 \rangle - \langle |m_k| \rangle^2), & T < T_k, \\ (NK)\langle m_k^2 \rangle, & T \geq T_k, \end{cases} \quad (4)$$

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N$  — число частиц,  $U$  — внутренняя энергия,  $m$  — магнитный параметр порядка,  $m_k$  — киральный параметр порядка,  $\chi_k$  — киральная восприимчивость.

Значения критических параметров для трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом поправки к скейлингу

	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\nu$	$\beta_k$	$\gamma_k$	$\nu_k$	$\alpha + 2\beta + \gamma$	$\alpha + 2\beta_k + \gamma_k$
ФММОВ $\omega = 0.78$	0.22(1)	0.26(1)	1.26(1)	0.57(1)	0.44(1)	0.87(1)	0.57(1)	2	1.97
АФММОВ $\omega = 0.78$	0.21(1)	0.24(1)	1.28(1)	0.59(1)	0.46(1)	0.85(1)	0.59(1)	1.97	1.98
ФММОВ [30]	0.26(2)	0.26(1)	1.23(2)	0.59(1)	0.43(2)	0.87(3)	0.59(2)	2.01	1.99
АФММОВ [30]	0.05(2)	0.30(1)	1.36(2)	0.64(1)	0.52(2)	0.93(3)	0.64(2)	2.01	2.02
Эксперимент [4]	0.39(9)	0.25(1)	1.10(5)	—	0.44(2)	0.84(7)	—	1.99	2.11
Метод МК [14]	0.24(8)	0.30(2)	1.17(7)	0.59(2)	0.55(2)	0.72(2)	0.60(2)	2.01	2.06
Теория [9]	0.11	0.31	1.26	0.63	—	—	—	1.99	—

Примечание. ФММОВ — ферромагнитное межслойное обменное взаимодействие. АФММОВ — антиферромагнитное межслойное обменное взаимодействие.

Параметр порядка системы  $m$  вычислялся по формуле [13]

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle} / 3, \quad (5)$$

где  $M_A, M_B$  и  $M_C$  — намагниченности трех подрешеток соответственно.

Намагниченность подрешетки определялась следующим образом [13]:

$$\langle |M_r| \rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, \quad r = A, B, C. \quad (6)$$

Для вычисления кирального параметра порядка системы  $m_k$  использовались следующие выражения [14,17]:

$$m_k = \frac{1}{N} \sum_p m_{k_p}, \quad (7)$$

$$m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle ij \rangle} (S_i \times S_j)_p, \quad (8)$$

где  $p$  нумерует треугольные плакетки.

Результаты исследования магнитных и общетермодинамических свойств данной модели представлены нами в [30]. В этой работе также рассчитаны значения критических индексов обычным способом, без учета коррекции к скейлингу.

В настоящей работе нами предпринята попытка исследовать критические свойства фрустрированной трехмерной модели Гейзенберга на треугольной решетке с ферро- и антиферромагнитным межслойным обменным взаимодействием. Для расчета статических киральных и магнитных критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma, \gamma_k$  намагниченности  $\beta, \beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu, \nu_k$  используются соотношения теории конечно-размерного скейлинга. Анализ данных проводился с учетом коррекции к скейлингу. В фрустрированных системах выход в асимптотический режим достигается при очень большой статистике и при больших размерах частиц системы, учитываемых в методе конечно-размерного скейлинга. Но в реальности нам приходится ограничиваться в размерах частиц, что приводит к необходимости учета поправок к скейлингу. Только учет поправок к скейлингу позволяет получить

адекватную картину критического поведения фрустрированных спиновых систем. Более подробно методика расчета критических индексов с учетом поправки к скейлингу нами приведена в работе [31].

Из соотношений КРС следует, что в системе с размерами  $L \times L \times L$  при  $T = T_N$  и достаточно больших  $L$  выполняются следующие выражения [32–34]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu} [1 + b_1 L^{-\omega}], \quad (9)$$

$$m_k \sim L^{-\beta_k/\nu_k} [1 + b_2 L^{-\omega}], \quad (10)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} [1 + b_3 L^{-\omega}], \quad (11)$$

$$\chi_k \sim L^{\gamma_k/\nu_k} [1 + b_4 L^{-\omega}], \quad (12)$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} g_{Vn} [1 + b_5 L^{-\omega}], \quad (13)$$

$$V_{nk} \sim L^{1/\nu_k} g_{Vnk} [1 + b_6 L^{-\omega}], \quad (14)$$

где  $b_1, b_2, b_3, b_4, b_5, b_6$  — амплитуды коррекции к скейлингу,  $\omega$  — поправка к конечно-размерному скейлингу,  $g_{Vn}$  — некоторая постоянная, а в качестве  $V_n$  и  $V_{nk}$  могут выступить

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2, 3, 4), \quad (15)$$

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{\langle m_k^i \rangle} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2, 3, 4). \quad (16)$$

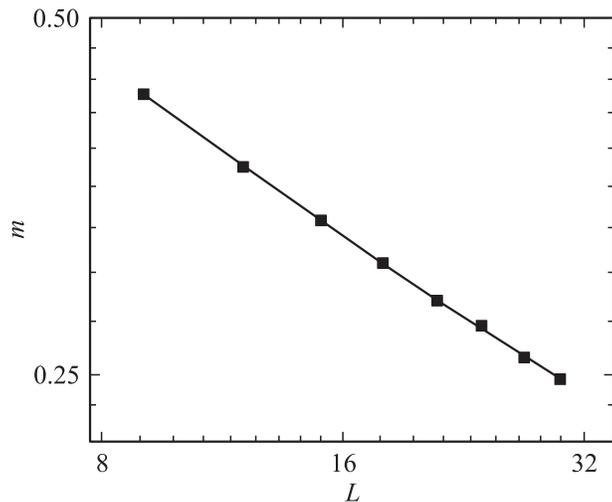
Эти выражения были нами использованы для определения  $\beta, \beta_k, \gamma, \gamma_k, \nu$  и  $\nu_k$ . Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от  $L$  использовалось выражение

$$C_{\max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \quad (17)$$

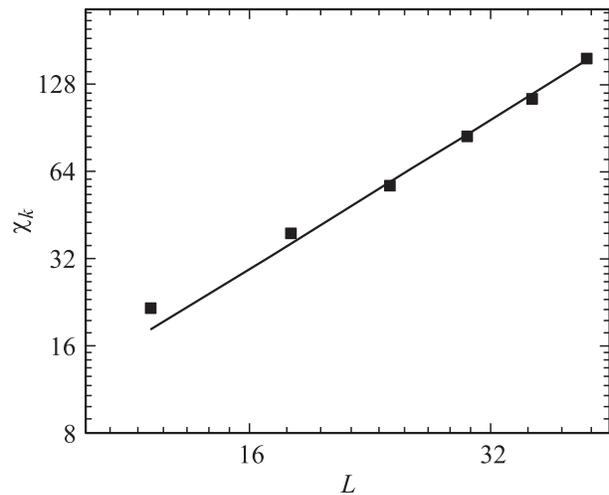
где  $A_1$  и  $A_2$  — некоторые коэффициенты.

В качестве поправки к КРС нами использовалось значение  $\omega = 0.78$ , которое соответствует модели Гейзенберга [35].

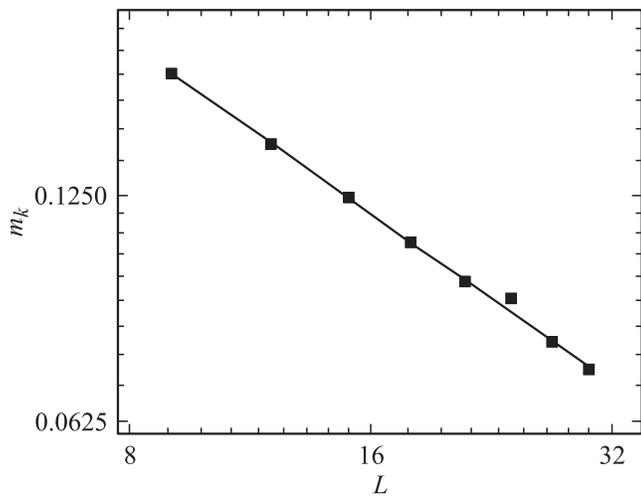
На рис. 2–5 в двойном логарифмическом масштабе представлены безразмерные характерные зависимости магнитного и кирального параметров порядка  $m, m_k$  и восприимчивости  $\chi, \chi_k$  от линейных размеров решетки  $L$ . Как видно из рисунков, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую



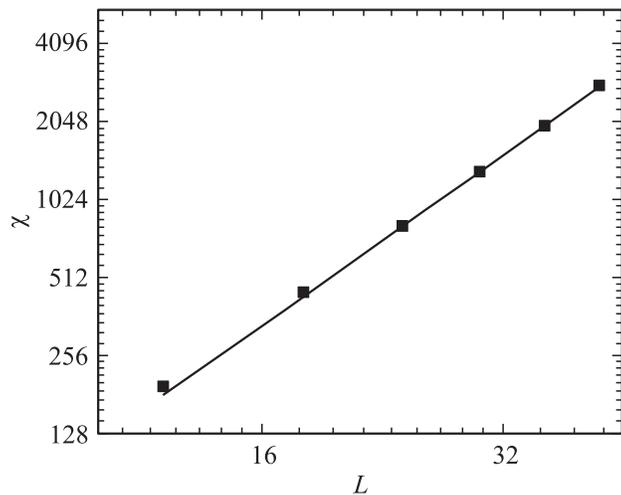
**Рис. 2.** Зависимость магнитного параметра порядка  $m$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$ .



**Рис. 5.** Зависимость киральной восприимчивости  $\chi_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$ .



**Рис. 3.** Зависимость кирального параметра порядка  $m_k$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$ .



**Рис. 4.** Зависимость восприимчивости  $\chi$  от линейных размеров системы  $L$  при  $T = T_N$ .

(на всех рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Угол наклона прямой определяет значения  $\beta/\nu$ ,  $\beta_k/\nu_k$ ,  $\gamma/\nu$ ,  $\gamma_k/\nu_k$ . По этой схеме определены значения  $1/\nu$ ,  $1/\nu_k$  и  $\alpha/\nu$ . Более подробно процедура определения  $\nu$  нами представлена в работе [30]. Полученные в рамках данного исследования значения  $\nu$  и  $\nu_k$  использовались для определения  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\beta_k$ ,  $\gamma$  и  $\gamma_k$ .

Все значения индексов, полученные таким образом, представлены в таблице. Как видно из таблицы, с достаточно высокой точностью выполняются скейлинговые соотношения между критическими индексами. Это свидетельствует о надежности полученных нами результатов. Отметим, что в настоящей работе расчет критических индексов проводился с учетом коррекции к конечно-размерному скейлингу. На наш взгляд, учет поправки к КРС позволит с большей точностью определить значения критических индексов. Здесь же для сравнения приведены данные, рассчитанные без учета поправки к КРС. Как видно из таблицы, учет поправки к конечно-размерному скейлингу значительно улучшает точность значений критических индексов.

В настоящей работе для выявления влияния типа межслойного обменного взаимодействия на критическое поведение ФС нами были рассчитаны значения критических индексов и при ферромагнитном межслойном обменном взаимодействии с учетом коррекции к КРС. Эти данные приведены для сравнения в таблице. Значения критических индексов для исследуемой модели при ферромагнитном и антиферромагнитном межслойном взаимодействии, полученные нами в настоящей работе с учетом поправки в КРС, в пределах погрешности совпадают друг с другом. Это свидетельствует от том, что критическое поведение исследуемой модели не зависит от типа межслойного обменного взаимодействия. Это следует из соображений симметрии гамильтониана, так как изменение знака межслойного обменного взаимодействия сводится к изменению направления спинов в

слоях. Из наших данных видно, что фрустрированная антиферромагнитная модель Гейзенберга на треугольной решетке имеет новый набор критических индексов. Очевидно, что критическое поведение этой модели отличается от критического поведения нефрустрированной модели Гейзенберга. В таблице также приведены данные экспериментальных, численных и теоретических исследований, имеющиеся в литературе. Из таблицы видно, что результаты нашей работы хорошо согласуются с большинством результатов других авторов.

#### 4. Заключение

Исследования критических свойств трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке, проведенные в настоящей работе, выполнены с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. Рассчитаны все основные статические магнитные и киральные критические индексы. Расчет критических индексов теплоемкости  $\alpha$ , восприимчивости  $\gamma$ ,  $\gamma_k$  параметров порядка  $\beta$ ,  $\beta_k$  и радиуса корреляции  $\nu$ ,  $\nu_k$  выполнен на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга и с соблюдением единой методики в рамках одного исследования. Анализ данных проводился с учетом коррекции к конечно-размерному скейлингу. Результаты настоящей работы свидетельствуют о том, что антиферромагнитная модель Гейзенберга на треугольной решетке образует новый класс универсальности критического поведения.

#### Список литературы

- [1] С.С. Сосин, Л.А. Прозорова, А.И. Смирнов. УФН **175**, 92 (2005).
- [2] Вик.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [3] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
- [4] С.В. Малеев. УФН **172**, 617 (2002).
- [5] Л.Е. Свистов, А.И. Смирнов, Л.А. Прозорова, О.А. Петренко, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
- [6] Л.Е. Свистов, Л.А. Прозорова, Н. Бюттген, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **81**, 133 (2005).
- [7] M. Tisser, V. Delamotte, D. Mouhanna. Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
- [8] P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, E. Vicari. Phys. Rev. B **70**, 174 439-1 (2004).
- [9] G. Zumbach. Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
- [10] A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B. **63**, 140414(R) (2001).
- [11] А.К. Муртазаев. УФН **176**, 1119 (2006).
- [12] Д. Лойсон, А.И. Соколов, Б. Деламотт, С.А. Антоненко, К.Д. Шотт, Х.Т. Дип. Письма в ЖЭТФ **72**, 447 (2000).
- [13] H. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 474 (1987).
- [14] H. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
- [15] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов. ФНТ **32**, 323 (2006).
- [16] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов. ФТТ **47**, 1125 (2005).

- [17] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [18] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
- [19] L.E. Svistov, A.I. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, L.N. Demianets, A.Ya. Shapiro. Phys. Rev. B **67**, 094 434 (2003).
- [20] A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B **65**, 020 403(R) (2001).
- [21] A. Peles, B.W. Southern. Phys. Rev. B **67**, 184 407 (2003).
- [22] P.C. Гехт. УФН **159**, 2 (1989).
- [23] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФТТ **52**, 1157 (2010).
- [24] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Sci.) **60**, 96 (2001).
- [25] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
- [26] А.К. Murtazaev, M.K. Ramazanov. Phys. Rev. B **76**, 174 421 (2007).
- [27] K. Binder, J.-Sh. Wang. J. Stat. Phys. **55**, 87 (1989).
- [28] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [29] К. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995). 144 с.
- [30] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФНТ **35**, 663 (2009).
- [31] А.К. Murtazaev, A.A. Babaev. J. Magn. Magn. Mater. **321**, 2630 (2009).
- [32] D.P. Landau. Physica A **205**, 41 (1994).
- [33] H.G. Ballesteros, L.A. Fernandez, V. Martin-Mayor. Phys. Rev. B **58**, 2740 (1998).
- [34] A. Aharony, A.B. Harris, S. Wiseman. Phys. Rev. Lett. **81**, 252 (1998).
- [35] J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin. Phys. Rev. B **21**, 3976 (1980).