

Исследование фазовых переходов фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке методами Монте-Карло

© А.К. Муртазаев^{1,2}, М.К. Рамазанов^{1,3}, М.К. Бадиев¹

¹ Институт физики ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия

³ Дагестанский государственный педагогический университет,
Махачкала, Россия

E-mail: sheikh77@mail.ru

(Поступила в Редакцию 19 октября 2009 г.)

Методом Монте-Карло с помощью репличного алгоритма выполнены исследования критических свойств и фазовых переходов трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке. С помощью метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определена критическая температура и проведен анализ характера фазовых переходов. Обнаружено наличие фазового перехода второго рода в трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке. На основе теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические магнитные и киральные критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , γ_k , намагниченности β , β_k , радиуса корреляции ν , ν_k , а также индекс Фишера η , η_k . Показано, что трехмерная фрустрированная антиферромагнитная модель Гейзенберга на треугольной решетке образует новый класс универсальности критического поведения.

Работа поддержана грантом РФФИ (проект № 07-02-00194), грантом РФФИ — „Юг России“ (проект № 06-02-96602), грантом ведущей научной школы (НШ-5547.2006.2).

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений (КЯ) фрустрированных решеточных спиновых систем является одной из актуальных задач физики конденсированного состояния [1,2]. В последние 20 лет интенсивные исследования таких систем ведутся теоретическими, экспериментальными и численными методами [3–20]. Полученные результаты оказались весьма противоречивыми и вызвали бурную дискуссию [3–6]. В связи с этим для получения ответа на ряд дискуссионных вопросов существует необходимость проведения более тщательных исследований фрустрированных систем (ФС) с использованием дополнительных современных идей и методов.

Фрустрированные системы во многом проявляют свойства, отличные от свойств соответствующих нефрустрированных систем. Это различие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью ФС к различного рода возмущающим взаимодействиям [21]. Огромный интерес вызывают вопросы, связанные с существованием нового кирального класса универсальности критического поведения фрустрированных антиферромагнитных решеточных систем на слоистой треугольной решетке [7–11,19,20], а также изучение природы ФП в антиферромагнетиках на треугольной решетке. Это связано с тем, что в антиферромагнетиках на треугольной решетке возможна геометрическая фрустрация обменного взаимодействия, т.е. такое пространственное

расположение магнитных ионов в кристалле, при котором невозможно одновременное антипараллельное упорядочение всех взаимодействующих спинов. Такой эффект может привести к формированию неколлинеарной спиновой структуры, приведенная энергия основного состояния которой выше, чем у коллинеарного магнетика, а в некоторых случаях полностью препятствует образованию дальнего порядка [22]. Неколлинеарная структура основного состояния фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке задается киральным параметром порядка [5]. Считается, что наличие такого порядка может привести к фазовым переходам второго рода с новым киральным классом универсальности. Имеющиеся результаты теоретических исследований не проясняют ситуацию, часть результатов свидетельствует о наличии в таких системах фазовых переходов второго рода при определенных значениях числа компонентов параметра порядка N , а часть указывает на наличие слабо выраженного фазового перехода первого рода.

В то же время подавляющее большинство численных данных подтверждает наличие в этих системах фазового перехода второго рода с образованием нового кирального класса универсальности [5,7–12,18–20], хотя имеются отдельные работы, в которых авторы обнаруживают фазовые переходы первого рода [23]. При этом критические параметры, полученные разными авторами, сильно отличаются друг от друга в зависимости от экспериментального метода и методики расчета. Часть исследований обнаруживает явно выраженный фазовый

переход первого рода, а часть — либо слабовыраженный фазовый переход первого рода, либо переход второго рода.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить род фазовых переходов и закономерности изменения критического поведения ФС на треугольной слоистой решетке, и эти вопросы до сих пор остаются открытыми [7,12,13].

В настоящей работе нами предпринята попытка исследовать критические свойства и изучить природу, характер и особенности фазовых переходов в трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке.

2. Модель и метод исследования

Гамильтониан антиферромагнитной трехмерной модели Гейзенберга на треугольной решетке может быть представлен в следующем виде [8]:

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

где \mathbf{S}_i — трехкомпонентный единичный вектор $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$, J — константа обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси Z . Схематически эта модель представлена на рис. 1. Суммирование производится по ближайшим соседям. Минимум классической обменной энергии достигается при условии, что соседние спины ориентированы под углом 120° друг к другу. Такое состояние является вырожденным. Антиферромагнитное взаимодействие между плоскостями в реальных гексагональных кристаллах не нарушает эту

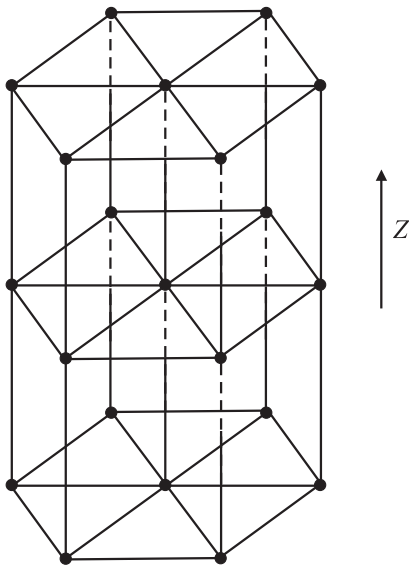


Рис. 1. Схематическое изображение антиферромагнетика на слоистой треугольной решетке.

структуру, упорядочивая спины в соседних плоскостях антипараллельно [22].

Традиционные теоретические методы исследования критических свойств фрустрированных спиновых систем сталкиваются с многочисленными и разнообразными проблемами. Использование при исследовании таких систем новых специально разработанных репличных алгоритмов метода Монте-Карло (МК) позволяет преодолеть эти трудности. Методы МК позволяют строго и последовательно с контролируемой погрешностью исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности [4,9–11,19].

В последние годы методом Монте-Карло стали эффективным инструментом изучения и критической области. На их основе изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. Расчет критических параметров выполнен с точностью, превосходящей точность всех других известных методов. Для ФС характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, специально ориентированных на исследования ФС. Из них наиболее мощными и эффективными в исследовании КЯ в ФС оказались репличные алгоритмы метода МК [24]. К настоящему моменту репличные алгоритмы метода Монте-Карло и теория конечно-размерного скейлинга стали основными инструментами исследования критических свойств столь сложных систем.

В данном исследовании нами использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода Монте-Карло [24]. Более подробно он описан нами в работах [10,19].

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и 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 10 конфигурациям. Эти данные затем использовались для построения графиков.

3. Результаты моделирования

Для наблюдения за температурным ходом поведения теплоемкости и восприимчивости нами использовались выражения [9,25–27]

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

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

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

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, m — магнитный параметр порядка, m_k — киральный параметр порядка, χ_k — киральная восприимчивость.

Параметр порядка системы m вычислялся по формуле [8]

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

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

Намагниченность подрешеток определялась следующим образом [8]:

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

Для вычисления кирального параметра порядка системы m_k использовались следующие выражения [8,9]:

$$m_{k_p} = \frac{2}{3\sqrt{3}} \sum_{\langle ij \rangle} [S_i \times S_j]_p, \quad (7)$$

$$m_k = \frac{1}{N} \sum_p m_{k_p}, \quad (8)$$

где $p = (x, y, z)$ нумеруют треугольные плакетки.

Для анализа характера ФП, особенностей поведения тепловых характеристик вблизи критической точки и определения критической температуры T_N наиболее эффективным является метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [4,28]

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle_L}{3 \langle U^2 \rangle_L^2}, \quad (9)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}, \quad (10)$$

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (9) и (10) позволяют определить критическую температуру T_N с большой точностью для ФП первого и второго рода соответственно. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что ФП первого рода характеризуются следующими отличительными особенностями [29]: величина V_L стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d}, \quad (11)$$

при $L \rightarrow \infty$ и $T = T_N(L)$, где величина V^* отлична от $2/3$, а минимальная величина $U^{L_{\min}}$ ($T = T_{\min}$) расходится $U_{L_{\min}} (T = T_{\min}) \rightarrow -\infty$ при $L \rightarrow \infty$; максимумы

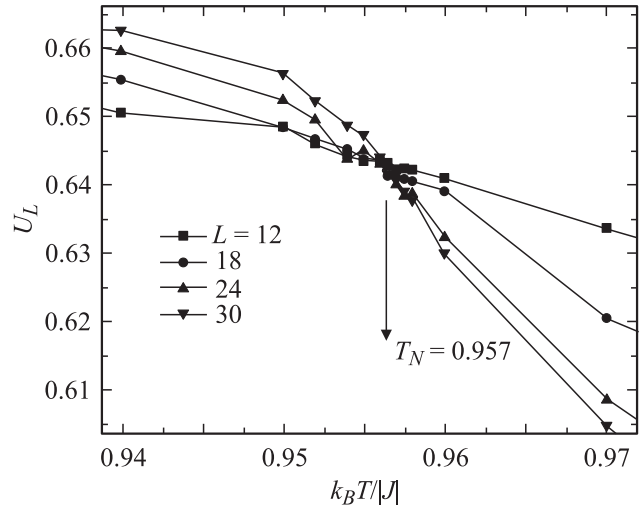


Рис. 2. Зависимость магнитного кумулянта U_L от температуры $k_B T / |J|$.

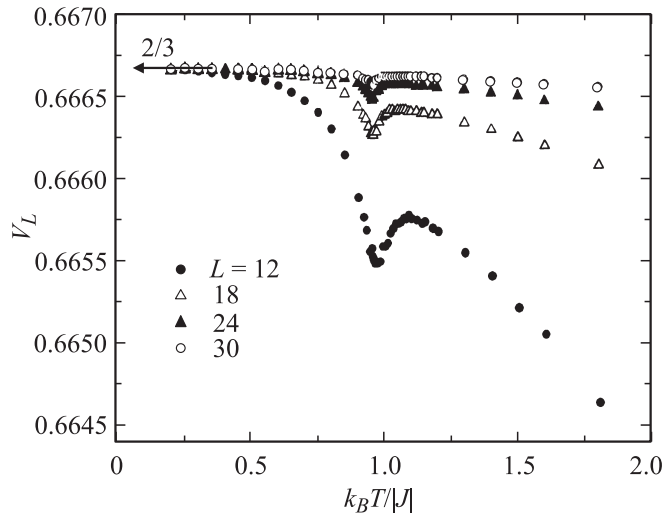


Рис. 3. Зависимость энергетического кумулянта V_L от температуры $k_B T / |J|$.

теплоемкости C и восприимчивости χ пропорциональны объему L^d , где d — размерность системы.

Кроме того, в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [27].

На рис. 2 представлена характерная зависимость U_L от температуры для различных значений L (здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Из графика видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 0.957(1)$, здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), что свидетельствует о ФП второго рода.

На рис. 3 представлена температурная зависимость энергетического кумулянта I_L для разных значений L . Как видно из графика, величина V_L стремится к $2/3$, а величина $V^* = 2/3$, что характерно для ФП второго рода. Эта величина рассчитана с помощью выражения (11). Из рис. 4 видно, что для исследуемой модели $V^* = 0.6666(1)$.

На рис. 5 в двойном логарифмическом масштабе представлена зависимость χ_{\max} от L . Как известно, для ФП первого рода максимум восприимчивости χ_{\max} должен быть масштабирован с размером системы L^d [30]. Из рисунка видно, что угол наклона ~ 2.1 , что не равно d . Этот результат также свидетельствует в пользу наличия в системе фазового перехода второго рода.

На рис. 6 и 7 представлены характерные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ от температуры для систем с линейными размерами $L = 12, 18, 24, 30$.

Отметим, что в зависимостях теплоемкости C и восприимчивости χ 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 значени-

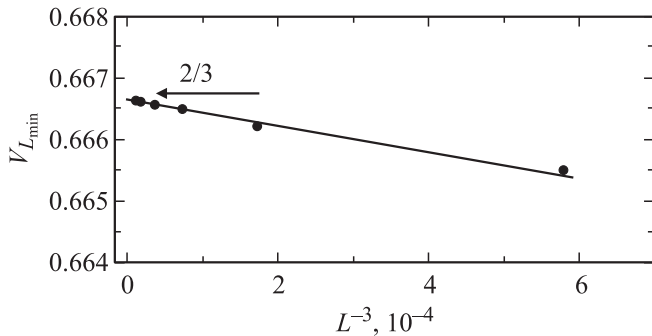


Рис. 4. Зависимость энергетического кумулянта $V_{L,\min}$ от L^{-3} .

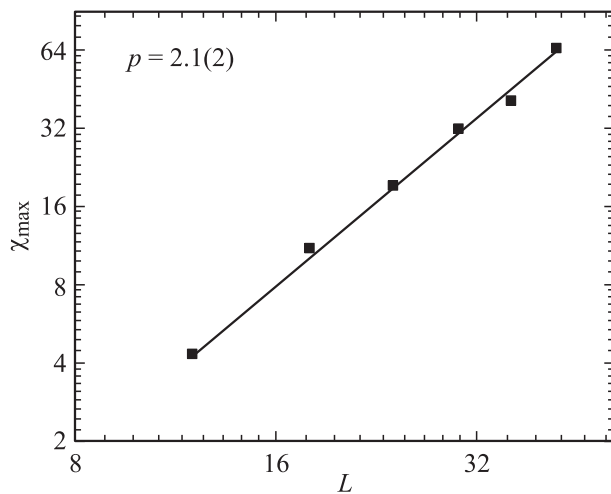


Рис. 5. Зависимость максимума восприимчивости χ_{\max} от L .

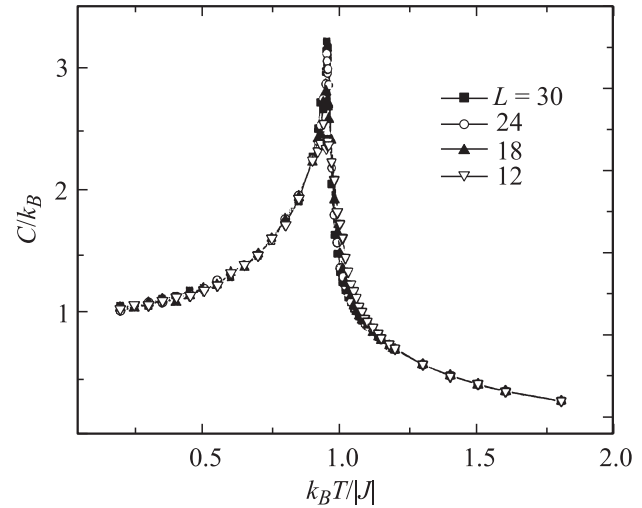


Рис. 6. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J|$ для $L = 12, 18, 24$ и 30 .

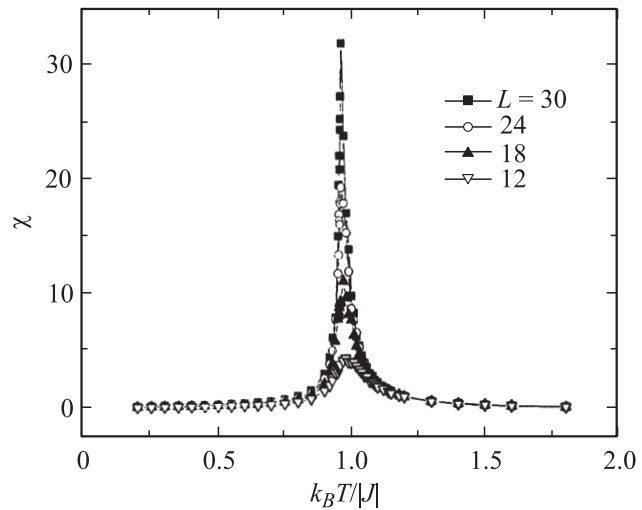


Рис. 7. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J|$ для $L = 12, 18, 24$ и 30 .

ем 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 расчета статистических киральных и магнитных критических индексов теплоемкости α восприимчивости γ , γ_k , намагниченности β , β_k и радиуса корреляции ν , ν_k использовались результаты теории конечного-размерного скейлинга [30–33]. Из выражений, полученных в рамках этой теории, следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие соотношения [26,33–36]:

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (12)$$

$$m_k \propto L^{-\beta_k/\nu_k}, \quad (13)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (14)$$

Значения критических параметров для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке

Критический параметр	Данные настоящей работы	Теория				Метод МК			Эксперимент (см. ссылки в [5])	Чистая модель [37]
		[17]	[12]	[18]	[13]	[20]	[8]	[9]		
T_N	0.957(1)	—	—	—	—	0.954(2)	0.955(2)	0.9577(2)	—	1.443
T_k	0.956(2)	—	—	—	—	—	0.958(2)	0.9577(2)	—	—
ν	0.65(1)	0.63	0.53	0.55	0.63(5)	0.53(3)	0.59(2)	0.586(8)	0.54(3)	0.7112(5)
α	0.18(2)	0.11	—	0.35	—	0.4(1)	0.24(8)	—	0.39(9)	-0.1336(15)
β	0.30(2)	0.31	0.28	0.30	—	0.25(2)	0.30(2)	0.285(11)	0.25(1)	0.3689(3)
γ	1.27(2)	1.26	1.03	1.06	1.20(8)	1.1(1)	1.17(7)	1.185(3)	1.10(5)	1.3960(9)
ν_k	0.65(2)	—	—	—	—	—	0.60(2)	0.60(2)	—	—
β_k	0.53(2)	—	—	—	—	—	0.55(2)	0.50(2)	0.44(2)	—
γ_k	0.84(4)	—	—	—	—	—	0.72(2)	0.82(2)	0.84(7)	—
η	-0.06(3)	0.0	0.072	0.08	0.08(3)	—	—	—	—	0.0375(5)
η_k	0.63(4)	—	—	—	—	—	—	—	—	—

$$\chi_k \propto L^{\gamma_k/\nu_k}, \tag{15}$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{16}$$

$$V_{nk} = L^{1/\nu_k} g_{V_{nk}}, \tag{17}$$

где g_{V_n} — некоторая постоянная, а в качестве V_n и V_{nk} могут выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2, 3, 4), \tag{18}$$

$$V_{ki} = \frac{\langle m_k^i E \rangle}{m_k^i} - \langle E \rangle \quad (i = 1, 2, 3, 4). \tag{19}$$

Эти выражения были использованы нами для определения β , β_k , γ , γ_k , ν и ν_k . Аналогичное выражение для теплоемкости, как было показано в [35], не работает, и для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используется выражение [8,9,20]

$$C_{\max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu}, \tag{20}$$

где A_1 и A_2 — некоторые коэффициенты.

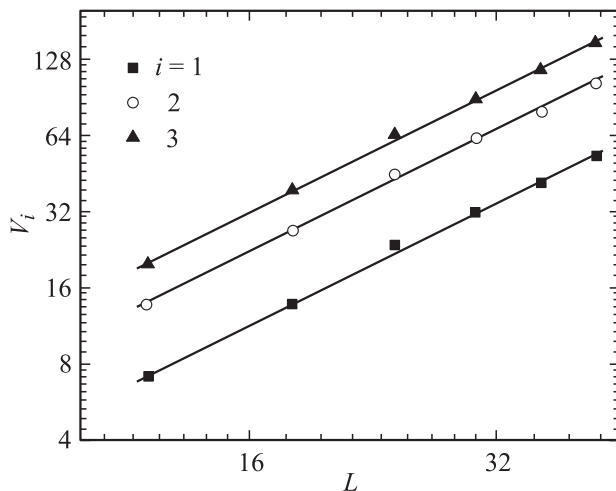


Рис. 8. Зависимость параметра V_i от линейных размеров системы L при $T = T_N$.

На рис. 8 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_i при $i = 1, 2, 3$ от линейных размеров решетки L . Как видно из рисунка, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Зависимости на рисунке, построенные методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Угол наклона прямой определяет значения $1/\nu$. Вычисленное таким образом значение ν использовалось для определения критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ и параметра порядка β . По этой схеме были определены и киральные критические индексы. Процедура, использованная нами для определения индекса Фишера η , подробно описывается в работах [10,19].

Все значения индексов, полученные таким образом, представлены в таблице. Здесь также приведены результаты теоретических [12,13,17,18], численных [8,9,20] и лабораторных экспериментов [5] других авторов, а также значения критических параметров для нефрустрированной модели [37].

Сравнение значений критических параметров с результатами исследований для аналогичной модели показывает, что наши данные в пределах погрешности совпадают с результатами работ [9,13,17]. Часть наших данных близка к данным работ [5,8,12,18]. Отметим, что значение кирального индекса Фишера η_k рассчитано впервые.

Как видно из таблицы, результаты нашей работы хорошо согласуются как с данными лабораторного эксперимента, так и с большинством результатов теоретических и численных экспериментов других авторов, но отличаются от результатов для нефрустрированной модели Гейзенберга.

4. Заключение

Исследование критических свойств и фазовых переходов трехмерной фрустрированной модели Гейзенберга на треугольной решетке выполнено с использовани-

ем высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. С помощью метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определена критическая температура и проведен анализ характера фазовых переходов. Рассчитаны все основные статистические магнитные и киральные критические индексы. Расчет критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , γ_k , параметров порядка β , β_k , индекса Фишера η , η_k и радиуса корреляции ν , ν_k выполнен на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга и с соблюдением единой методики в рамках одного исследования. Полученные данные свидетельствуют о наличии в трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на треугольной решетке фазового перехода второго рода и принадлежности этой модели к новому классу универсальности критического поведения.

Список литературы

- [1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982). 380 с.
- [2] Ш. Ма. Современная теория критических явлений. Мир. М. (1980). 298 с.
- [3] Вик.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
- [4] И.К. Камилов, А.К. Муртазаев, Х.К. Алиев. УФН **169**, 773 (1999).
- [5] С.В. Малеев. УФН **172**, 617 (2002).
- [6] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
- [7] Д. Лойсон, А.И. Соколов, Б. Деламотт, С.А. Антоненко, К.Д. Шотт, Х.Т. Дип. Письма в ЖЭТФ **72**, 447 (2000).
- [8] Н. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
- [9] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [10] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
- [11] А.К. Муртазаев, И.К. Камилов, М.К. Рамазанов. ФТТ **47**, 1125 (2005).
- [12] M. Tisser, B. Delamotte, D. Mouhanna. Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
- [13] P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, E. Vicari. Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
- [14] L.E. Svistov, A.L. Smirnov, L.A. Prozorova, O.A. Petrenko, I.N. Demianets, A. Ya. Shapiro. Phys. Rev. B **67**, 094434 (2003).
- [15] Л.Е. Свистов, А.И. Смирнов, Л.А. Прозорова, О.А. Петренко, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
- [16] Л.Е. Свистов, Л.А. Прозорова, Н. Бюттген, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **81**, 133 (2005).
- [17] G. Zumbach. Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
- [18] A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B **63**, 140414 (2001).
- [19] А.К. Murtazaev, M.K. Ramazanov. Phys. Rev. B **76**, 174421 (2007).
- [20] Н. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **56**, 474 (1987).
- [21] Р.С. Гехт. ЖЭТФ **102**, 1968 (1992).
- [22] С.С. Сосин, Л.А. Прозоров, А.И. Смирнов. УФН **175**, 92 (2005).
- [23] M. Zelli, B. Boese, B.W. Southern. Phys. Rev. B **76**, 224407 (2007).
- [24] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Sci.) **60**, 96 (2001).
- [25] K. Binder, J. Wang. J. Stat. Phys. **55**, 87 (1989).
- [26] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
- [27] Л. Биндер, Д.В. Хеерман. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. Наука, М. (1995). 144 с.
- [28] K. Binder. Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
- [29] D. Loison, K.D. Schotte. Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
- [30] M.S.S. Challa, D.P. Landau, K. Binder. Phys. Rev. B **34**, 1841 (1986).
- [31] K. Binder. Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
- [32] A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **44**, 5081 (1991).
- [33] A.E. Ferdinand, M.E. Fisher. Phys. Rev. **185**, 832 (1969).
- [34] M.E. Fisher, M.N. Barber. Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
- [35] D.P. Landau. Physica A **205**, 41 (1994).
- [36] D. Loison. Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
- [37] M. Campistrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari. Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).