

10,11,05

Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей

© А.К. Муртазаев^{1,2}, М.К. Рамазанов¹, Д.Р. Курбанова^{1,¶}, М.К. Бадиев¹

¹ Институт физики ДагНЦ РАН,
Махачкала, Россия

² Дагестанский государственный университет,
Махачкала, Россия

¶ E-mail: d_kurbanova1990@mail.ru

На основе репличного алгоритма метода Монте-Карло и гистограммного анализа данных изучен фазовые переходы в трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей. Исследование проведено для соотношения величин обменного взаимодействия следующих и ближайших соседей $r = 1$. Установлено, что для данной модели переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является фазовым переходом первого рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 16-02-00214-а и № 18-32-00391 мол_а.

DOI: 10.21883/FTT.2018.06.45993.15M

1. Введение

В настоящее время фрустрации в магнитных системах являются предметом повышенного внимания, так как могут вызывать разнообразные неустойчивые состояния, подавляя более стандартные упорядоченные состояния. Примерами таких систем являются спиновые жидкости [1,2] и спиновый лед [3,4], в которых магнитные моменты не полностью упорядочиваются даже при низких температурах или неколлинеарных магнитных структурах. Последнее состояние может возникнуть в результате взаимодействия спин-орбитальной связи и магнетизма, например, в случае скирмионов [5], вихрей кристаллов [6,7] или посредством конкуренции [8–10] антиферромагнитного обменного взаимодействия и кинетической энергии электронов, которым, как правило свойственен ферромагнитный порядок.

Причины возникновения фрустрации различны, от геометрии решетки по орбитальным симметриям до более общих конкурирующих состояний в Гамильтониане. Мы здесь фокусируем внимание на фрустрации, обусловленной геометрией решетки, в сочетании с конкуренцией обменного взаимодействия.

В данной работе нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло (МК) определить род фазового перехода (ФП) трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих ближайших соседей.

Теоретические расчеты и численное моделирование методом МК для этой модели были проведены в работах [11–16]. Авторы работ методом МК провели исследование критического поведения модели Гейзенберга на различных типах решеток, вычислили температуру ФП и рассчитали значения термодинамических параметров

в критической области. Теоретические исследования, проведенные в работах [11,12], свидетельствуют о том, что для модели Гейзенберга на решетке пирохлора имеет место слабовыраженный ФП первого рода в двух различных типах коллинеарных магнитоупорядоченных состояний. Состояние, реализуемое при более сильной спин-решеточной связи, является кубической симметрией, характеризуемой магнитными Брегговскими пиками, а при более слабой — тетрагональной симметрией, характеризуемой соответственными локальными искажениями.

Интерес к антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке обусловлен тем, что учет взаимодействия следующих ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций, что усложняет решение задачи. При изучении фрустрированных систем (ФС) до сих пор основное внимание уделялось спиновым системам на квадратной, треугольной и гексагональной решетке [16–29]. Критические свойства ФС на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей практически не исследованы.

Из данных, полученных на сегодняшний день, нельзя однозначно определить характер ФП и закономерности изменения критического поведения ФС на объемно-центрированной кубической решетке, и эти вопросы до сих пор остаются открытыми.

Кроме того, 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.

Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопро-

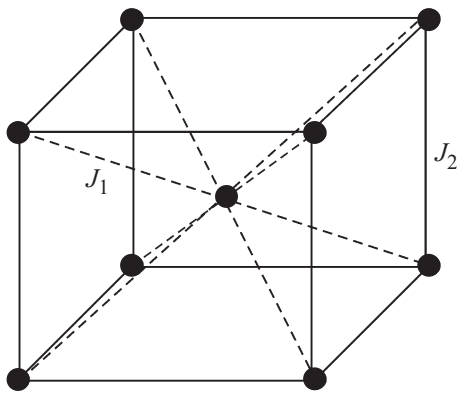


Рис. 1. Схематическое изображение объемно-центрированной кубической решетки.

сов, связанных с природой фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная модель Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих за ближайшими соседями описывается гамильтонианом:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l), \quad (1)$$

где S_i — трехкомпонентный единичный вектор $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей величиной $J_1 < 0$, а второй — следующих за ближайшими соседями $J_2 < 0$. В данной работе рассматривается случай, когда $r = J_2/J_1 = 1$, где r — величина взаимодействия следующих ближайших соседей. Схематически эта модель представлена на рис. 1.

Исследование ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными 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 [16–20, 22–24, 27–30], 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 ФС оказались репличные алгоритмы метода МК [31, 32]. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 24–60$, где L измеряется в размерах

элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин.

3. Результаты моделирования

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 [21]

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

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

где V_L — энергетический кумулянт, U_L — магнитный кумулянт.

Выражения (2) и (3) 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 тем, что величина V_L стремится к некоторому нетривиальному значению V^* согласно выражению

$$V_L = V^* + bL^{-d}, \quad (4)$$

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 $L \rightarrow \infty$.

В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [21].

На рис. 2 представлена характерная зависимость U_L от температуры для разных значений L . Из графика видно,

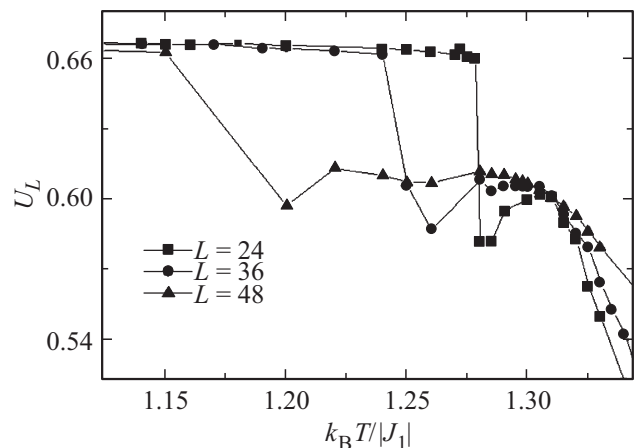


Рис. 2. Зависимость магнитного кумулянта U_L от температуры $k_B T/|J_1|$.

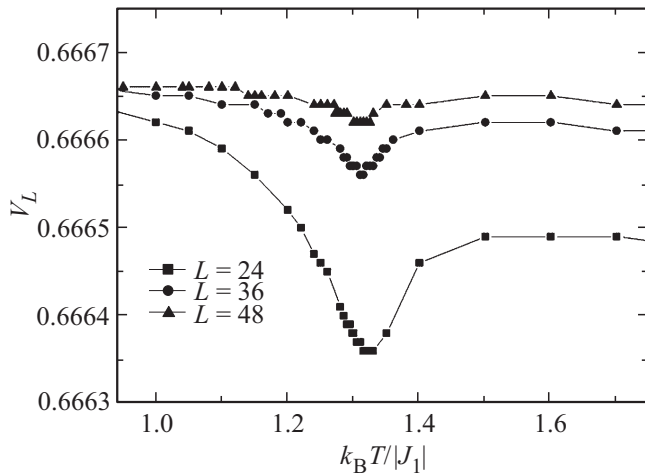


Рис. 3. Зависимость энергетического кумулянта V_L от температуры $k_B T / |J_1|$.

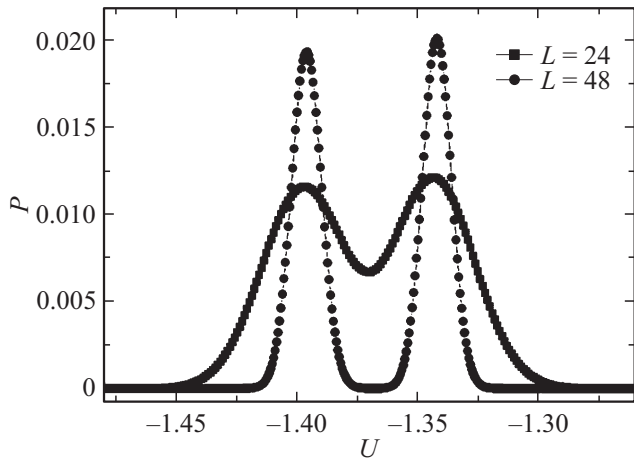


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии при $L = 24$ и $L = 48$.

что в критической области отсутствует четко выраженная точка пересечения, что свидетельствует в пользу наличия в системе фазового перехода первого рода.

На рис. 3 представлена температурная зависимость энергетического кумулянта V_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 выражение (4). Из рис. 3 видно, что для исследуемой модели $V^* = 0.6666(1)$.

Поэтому для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [33,34]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана в работе [35,36].

Результаты нашей работы, полученные на основе гистограммного анализа, показывают, что фазовый переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом первого рода. Это продемонстрировано на рис. 4. На этом рисунке представлены гисто-

граммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 24$ и $L = 48$. Из рисунков видно, что в зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех систем наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют в пользу фазового перехода первого рода. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для фазовых переходов первого рода.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов в трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов для соотношения величины взаимодействия ближайших и следующих ближайших соседей, равной $r = 1$. Показано, что при данном значении r в системе наблюдается фазовый переход первого рода.

Список литературы

- [1] G.A. Fiete, V. Chua, M. Kargarian, R. Lundgren, A. Rüegg, J. Wen, V. Zyuzin. *Physica E* **44**, 845 (2012).
- [2] L. Balents. *Nature* **464**, 199 (2010).
- [3] S.T. Bramwell. *Science* **294**, 1495 (2001).
- [4] Y.-P. Huang, G. Chen, M. Hermele. *Phys. Rev. Lett.* **112**, 167203 (2014).
- [5] U.K. Röbller, A.N. Bogdanov, C. Pfleiderer. *Nature* **442**, 797 (2006).
- [6] I. Rousochatzakis, U.K. Röbller, J. van den Brink, M. Daghofer. *Phys. Rev. B* **93**, 104417 (2016).
- [7] Y. Kamiya, C.D. Batista. *Phys. Rev. X* **4**, 011023 (2014).
- [8] I. Martin, C.D. Batista. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 156402 (2008).
- [9] B.G. Ueland, C.F. Miclea, Y. Kato, O.A. Valenzuela, R.D. McDonald, R. Okazaki, P.H. Tobash, M.A. Torrez, F. Ronning, R. Movshovich, Z. Fisk, E.D. Bauer, I. Martin, J.D. Thompson. *Nature Commun.* **3**, 1067 (2012).
- [10] R. Ozawa, S. Hayami, K. Barros, G.-W. Chern, Y. Motome, C.D. Batista. *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 103703 (2016).
- [11] K. Aoyama, H. Kawamura. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 257201 (2016).
- [12] A. Sadeghi, M. Alaei, F. Shahbazi, M.J.P. Gingras. *Phys. Rev. B* **91**, 140407(R) (2015).
- [13] H.T. Diep. *J. Science: Adv. Mater. Dev.* **1** (2016).
- [14] S. Reja, P.S. Anisimov, M. Daghofer. *Phys. Rev. B* **96**, 085144 (2017).
- [15] T. Shimokawa, H. Kawamura. *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 113702 (2016).
- [16] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. *ФТТ* **52**, 1557 (2010).
- [17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. *Письма в ЖЭТФ* **106**, 72 (2017).
- [18] H. Kawamura. *J. Phys. Soc. Jap.* **61**, 1299 (1992).

- [19] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [20] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000). P. 384.
- [21] Л.Е. Свистов, А.И. Смирнов, Л.А. Прозорова, О.А. Петренко, А.Я. Шапиро, Л.Н. Демьянц. Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
- [22] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
- [23] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев. ФТТ **59**, 1082 (2017).
- [24] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФНТ **37**, 1258 (2011).
- [25] F.A. Kassar-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. J. Mag. Mater. **324**, 3418 (2012).
- [26] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **142**, 338 (2012).
- [27] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica B: Condens. Matter **476**, 1 (2015).
- [28] F.A. Kassar-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Mag. Mater. **384**, 247 (2015).
- [29] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
- [30] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **53**, 1004 (2011).
- [31] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
- [32] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Касан-Оглы, М.К. Бадиев. ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
- [33] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [34] F. Wang, D.P. Landau. Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
- [35] М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).
- [36] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).