

05,11,10

## Влияние магнитного поля на термодинамические и магнитные свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке

© А.К. Муртазаев<sup>1</sup>, М.К. Рамазанов<sup>1</sup>, К.Ш. Муртазаев<sup>1,2</sup>, М.А. Магомедов<sup>1,2</sup>, М.К. Бадиев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт физики ДагНЦ РАН,  
Махачкала, Россия

<sup>2</sup> Дагестанский государственный университет,  
Махачкала, Россия

E-mail: 5kurban@mail.ru

Поступила в Редакцию 9 июля 2019 г.

В окончательной редакции 1 октября 2019 г.

Принята к публикации 2 октября 2019 г.

Репличным алгоритмом метода Монте-Карло изучено влияние внешнего магнитного поля на фазовые переходы, термодинамические и магнитные свойства трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины внешнего магнитного поля. Показано, что в рассмотренном интервале значений магнитного поля наблюдается фазовый переход второго рода.

**Ключевые слова:** модель Изинга, метод Монте-Карло, фазовые переходы, магнитное поле, спиновая система.

DOI: 10.21883/FIT.2020.02.48872.553

### 1. Введение

В настоящее время в физике конденсированного состояния повышенный интерес представляют исследования магнитных и термодинамических свойств фрустрированных спиновых систем. Фрустрированные спиновые системы обладают необычными магнитными свойствами, имеют богатое разнообразие фаз и фазовых переходов (ФП), обусловленные сильным вырождением и высокой чувствительностью фрустрированных систем к различным внешним факторам, в том числе и магнитным полям. Влияние внешнего магнитного поля и учет взаимодействий первых и вторых ближайших соседей может играть важную роль в поведении таких систем [1–6].

В данной работе нами изучается влияние магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Теоретические и численные исследования модели Изинга на разных типах решеток и с конкуренцией обменных взаимодействий были проведены в работах [6–11].

В работе [6] нами методом Монте-Карло (МК) для модели Изинга на ОЦК решетке были получены все магнитные структуры основного состояния и построена фазовая диаграмма. В этой же работе были обнаружены области на фазовой диаграмме, где наблюдались ФП первого и второго рода. Это подтверждает влияние

дополнительных факторов, таких как взаимодействие вторых ближайших соседей, на природу ФП данной модели. Теоретические исследования, проведенные в работе [7] согласуются с данными, полученными в работе [6] и показывают, что для модели Изинга на ОЦК-решетке имеет место ФП второго рода. В работе [10] для данной модели рассчитаны значения всех основных статических критических индексов и установлены особенности критического поведения в зависимости от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Авторы работы [12] исследовали квантовую антиферромагнитную модель Изинга с произвольным значением спина и с учетом внешнего магнитного поля. В этой работе получены общие аналитические выражения для фрустрационного поля и показано, что внешнее магнитное поле влияет на физические свойства данной модели.

Интерес к антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК-решетке обусловлен еще и тем, что влияние внешнего магнитного поля на ФП, магнитные и термодинамические свойства этой модели на основе современных методов до сих пор никем не проводилось. При изучении таких систем до сих пор основное внимание уделялось моделям на квадратной, треугольной и гексагональной решетке [13–21].

Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП, магнитными и термодинамическими свойствами спиновых систем, а также влияния на них внешнего магнитного поля.

## 2. Модель и метод исследования

Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга на ОЦК-решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

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

где  $J_1$  и  $J_2$  — константы обменного антиферромагнитного взаимодействия первых ( $J_1 < 0$ ) и вторых ( $J_2 < 0$ ) ближайших соседей,  $S_{i,j,l} = \pm 1$  — изинговский спин,  $H$  — величина магнитного поля (величина магнитного поля приводится в единицах  $H/|J_1|$ ). В данной работе рассматривается случай, когда  $r = |J_2|/|J_1| = 1.0$ .

Классический алгоритм метода МК сталкивается с рядом проблем, связанных с выводом системы в термодинамическое равновесие в области критических температур. Это обстоятельство еще сильнее усугубляется, когда речь идет о системах с конкурирующими обменными взаимодействиями и фрустрациями. Использование специально разработанных репличных алгоритмов метода МК позволяет с большой точностью исследовать такие системы [5,7,8,10]. Поэтому, в данной работе нами использовался высокоэффективный репличный алгоритм метода МК.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами  $2 \times L \times L \times L = N$ ,  $L = 18-90$ , где  $L$  измеряется в размерах элементарной ячейки. Для анализа природы и характера ФП использовались гистограммный метод и метод кумулянтов Биндера. Величина значений внешнего магнитного поля менялось в интервале  $0.0 \leq H \leq 6.0$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался 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 построения температурных зависимостей восприимчивости  $\chi$  и теплоемкости  $C$  использовались выражения

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

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

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

Параметр порядка системы определялся по формуле

$$m = 3m_1 - m_2 - m_3 - m_4, \quad (4)$$

где  $m_1, m_2, m_3, m_4$  — параметры порядка по под-решеткам.

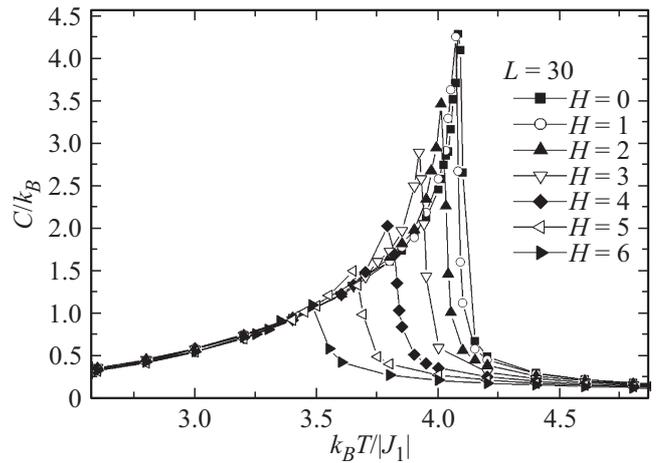


Рис. 1. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J_1|$  для разных значений  $H$ .

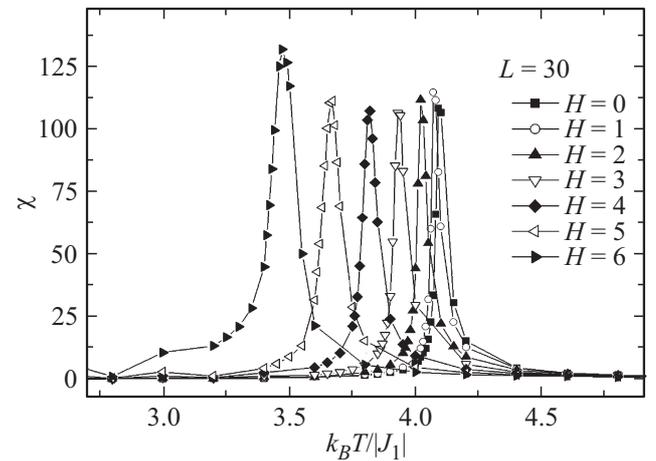


Рис. 2. Зависимость восприимчивости  $\chi$  от температуры  $k_B T/|J_1|$  для разных значений  $H$ .

Намагниченность вычислялась по формуле

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i. \quad (5)$$

Для определения рода ФП и нахождения критической температуры  $T_N$  был использован метод кумулянтов Биндера  $U_L$  четвертого порядка

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (6)$$

С помощью выражения (6) с большой точностью можно определить критическую температуру  $T_N$  для ФП второго рода [10].

На рис. 1 и 2 приведены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости при  $L = 30$  для различных значений магнитного поля.

На этих рисунках видно, что с увеличением значений  $H$  наблюдается сдвиг максимумов теплоемкости и

восприимчивости в сторону более низких температур. Одновременно наблюдается спад абсолютных значений максимумов теплоемкости. Сдвиг максимумов теплоемкости и восприимчивости в сторону более низких температур обусловлен тем, что магнитное поле усиливает конкурирующее взаимодействие вторых ближайших соседей. Спад абсолютных значений максимумов теплоемкости происходит за счет уменьшения флуктуаций.

На рис. 3 приведены характерные зависимости магнитного параметра порядка от температуры для различных значений  $H$ . На рисунке видно, что с увеличением  $H$  спад магнитного параметра порядка смещается в сторону более низких температур. Вместе с этим уменьшается значение магнитного параметра порядка в области низких температур. Это объясняется усилением конкурирующего взаимодействия вторых ближайших соседей с ростом магнитного поля.

Зависимости намагниченности от температуры для различных значений  $H$  приведены на рис. 4. Для ну-

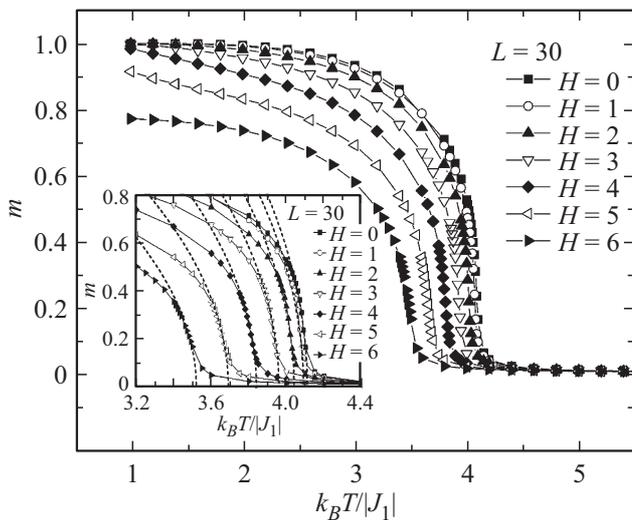


Рис. 3. Зависимость параметра порядка  $m$  от температуры  $k_B T / |J_1|$  для разных значений  $H$ .

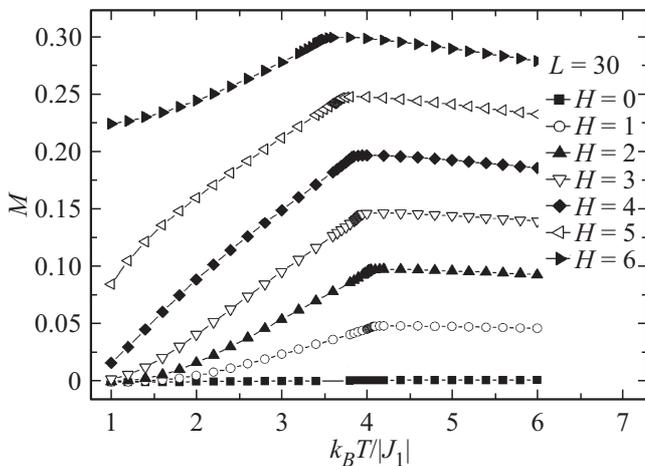


Рис. 4. Зависимость намагниченности  $M$  от температуры  $k_B T / |J_1|$  для разных значений  $H$ .

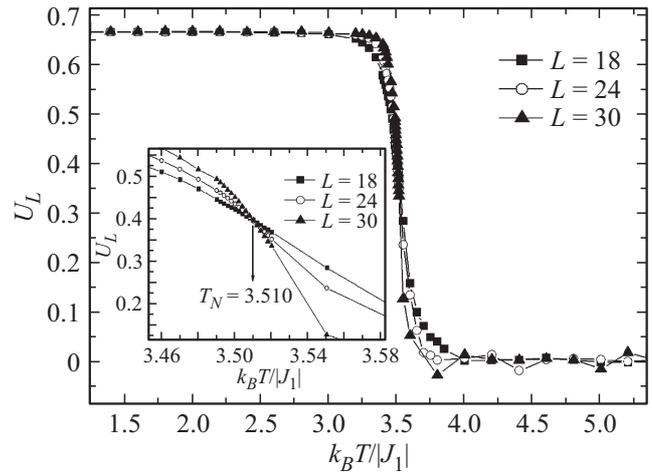


Рис. 5. Зависимость кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J_1|$  для разных  $L$  при  $H = 6$ .

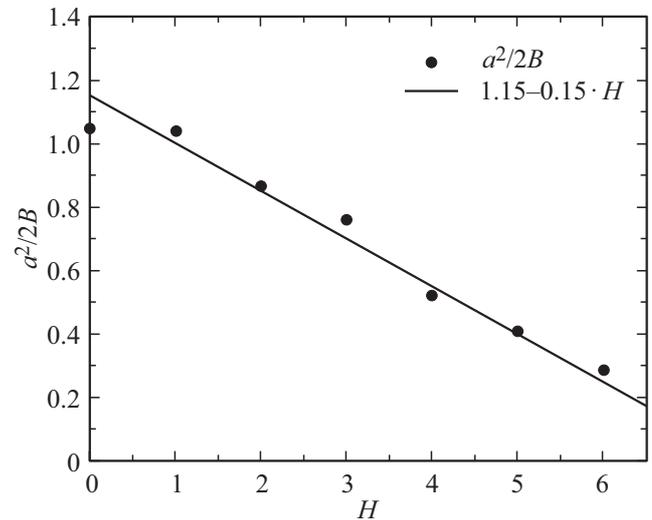


Рис. 6. Зависимость коэффициента  $\frac{a^2}{2B}$  от значения магнитного поля  $H$ .

левого значения магнитного поля, как и ожидалось намагниченность равна нулю. С увеличением  $H$  растет намагниченность системы. На рисунке видно, что намагниченность до температуры ФП растет, после чего наблюдается спад из-за тепловых флуктуаций. Чем больше значение магнитного поля, тем сильнее выражается спад после температуры ФП.

Зависимости кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры при  $H = 6$  для разных значений  $L$  представлены на рис. 5. На рисунке видна четко выраженная точка пересечения ( $T_N = 3.510$ ), которая является критической температурой и свидетельствует о ФП второго рода.

Для анализа результатов, полученных в данной работе в рамках теории Ландау, использовалось следующее выражение [22]

$$C = C_0 + \frac{a^2}{2B} T_N. \quad (7)$$

Значения критических температур, разности теплоемкостей и коэффициента  $\frac{a^2}{2B}$  при различных значениях магнитного поля

$H$	0	1	2	3	4	5	6
$T_N$	4.11	4.09	4.04	3.96	3.84	3.69	3.51
$C - C_0$	4.3	4.25	3.5	3	2.0	1.5	1
$\frac{a^2}{2B}$	1.046	1.039	0.866	0.758	0.521	0.407	0.284

Из этого выражения следует, что

$$\frac{a^2}{2B} = \frac{C - C_0}{T_N}, \tag{8}$$

где  $C$  — теплоемкость несимметричной фазы,  $C_0$  — теплоемкость симметричной фазы.

Значения критических температур, разности теплоемкостей и коэффициента  $\frac{a^2}{2B}$ , рассчитанного с помощью выражения (8), для различных значений магнитного поля приведены в таблице.

На рис. 6 приведена зависимость коэффициента  $\frac{a^2}{2B}$  от значения магнитного поля  $H$ . Как видно из рисунка все точки в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую, что позволяет говорить о линейной зависимости  $\frac{a^2}{2B}$  от  $H$ .

На вставке рис. 3 приведены пунктирные кривые, описывающие параметр порядка, полученные из теории Ландау с помощью выражения

$$m = \sqrt{\frac{a}{2B} (T_N - T)}. \tag{9}$$

На рисунке видно, что вблизи критической области наблюдается хорошее соответствие данных, полученных как численным методом, так и построенных в рамках теории фазового перехода второго рода.

Для более подробного анализа природы ФП нами был использован гистограммный метод анализа данных.

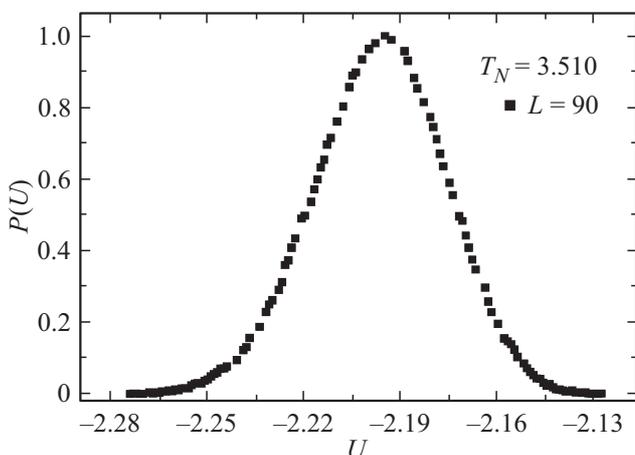


Рис. 7. Гистограмма распределения энергии для  $H = 6.0$ .

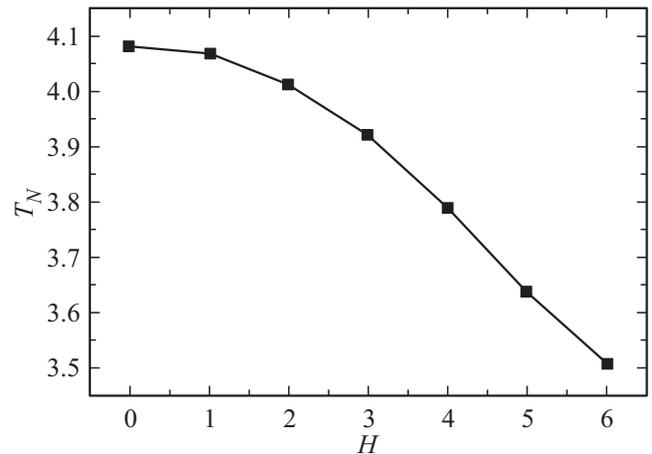


Рис. 8. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины магнитного поля.

На рис. 7 видно, что гистограмма распределения энергии для систем с линейным размером  $L = 90$  при  $H = 6.0$  имеет один пик. Это говорит о том, что в системе реализуется ФП второго рода. График построен при критической температуре  $T_N = 3.510$ . Аналогичные гистограммы были построены для всех значений поля в интервале  $0.0 \leq H \leq 6.0$ . Наши данные свидетельствуют о том, что в рассмотренном интервале значений  $H$  реализуется ФП второго рода.

На рис. 8 представлена фазовая диаграмма зависимости критической температуры  $T_N$  от величины магнитного поля  $H$ . Показано, что с увеличением величины магнитного поля в интервале  $0.0 \leq H \leq 6.0$  температура ФП уменьшается. В рассмотренном интервале значений магнитного поля переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную осуществляется как ФП второго рода.

#### 4. Заключение

Выполнено исследование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, а также внешнего магнитного поля. Рассмотрен интервал значений величины магнитного поля  $0.0 \leq H \leq 6.0$ . Установлено, что для всех значений магнитных полей в рассмотренном интервале наблюдается фазовый переход второго рода.

#### Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 18-32-00391-мол-а, № 19-02-00153-а, № 18-32-20098-мол-а-вед.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] А.З. Паташинский, В.Л. Покровский. Флуктуационная теория фазовых переходов. Наука, М. (1982).
- [2] Ш. Ма. Современная теория критических явлений. Мир, М. (1980).
- [3] Р.С. Гехт. УФН **159**, 261 (1989).
- [4] K. Katsumata, H. Aruga Katori, S. Kimura, Y. Narumi, M. Nagiawara, K. Kindo. Phys. Rev. B **82**, 104402 (2010).
- [5] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев. ФТТ **60**, 1162 (2018).
- [6] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova, M.A. Magomedov, K.Sh. Murtazaev. Mater. Lett. **236**, 669 (2019).
- [7] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова. ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
- [8] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica B **476**, 1 (2015).
- [9] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica A **521**, 543 (2019).
- [10] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев, Я.К. Абуев. ФТТ **59**, 1082 (2017).
- [11] Ф.А. Кассан-Оглы, А.И. Прошкин. ФТТ **60**, 6 (2018).
- [12] A.I. Proshkin, F.A. Kassan-Ogly. Mater. Sci. Forum **845**, 93 (2016).
- [13] H. Kawamura. J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 1299 (1992).
- [14] A. Mailhot, M.L. Plumer, A. Caille. Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [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] А.К. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов. Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
- [17] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
- [18] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
- [19] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica A **507**, 210 (2018).
- [20] F.A. Kassan-Ogly, A.K. Murtazaev, A.K. Zhuravlev, M.K. Ramazanov, A.I. Proshkin. J. Magn. Magn. Mater. **384**, 247 (2015).
- [21] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
- [22] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. V. Ч. 1. Наука, М. (1976).

Редактор Т.Н. Василевская