Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 10, с. 793 – 798 © 2015 г. 25 мая

Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной слоистой модели Изинга с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей

М. К. Рамазанов[+1)], *А. К. Муртазаев*[+*1)]

[+]*Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия*

[*]*Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 10 апреля 2015 г.
После переработки 17 апреля 2015 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитной слоистой модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход второго рода. С помощью теории конечно-размерного скейлинга рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α, восприимчивости γ, параметра порядка β, радиуса корреляции ν, а также индекс Фишера η. Показано, что трехмерная модель Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей принадлежит к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная полностью фрустрированная модель Изинга.

DOI: 10.7868/S0370274X15100124

1. Введение. Проблема исследования фазовых переходов (ФП) и критических свойств в спиновых системах с конкурирующим взаимодействием является одной из центральных в современной физике конденсированного состояния [1–3]. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к фрустрации. Спиновые системы с фрустрациями во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением основного состояния [4].

Одной из наиболее интенсивно исследуемых в последние годы фрустрированных моделей является двумерная модель Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей [5–19].

Модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями ближайших соседей является точно решаемой [20]. Учет взаимодействий вторых ближайших соседей приводит к возникновению фрустраций, что усложняет решение этой модели. Тем не менее двумерная модель Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей изучена достаточно хорошо и почти все ее свойства известны [15–19].

Вместе с тем ФП и критические свойства этой модели для трехмерного случая практически не исследованы. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз и ФП. Кроме того, учет взаимодействия следующих ближайших соседей может также влиять на критическое поведение модели. В частности, появляются различные аномалии критических свойств [21].

Теоретические расчеты и численное моделирование методом Монте-Карло (МК) для модели Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей были проведены в работах [22, 23]. В работе [22] авторами построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $0 \leq r \leq 0.8$, где $r = J_2/J_1$, J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия ближайших и вторых ближайших соседей соответственно. На построенной диаграмме вблизи точки $r = 1/4$ пересекаются три различные фазы: ферромагнитная, парамагнитная и суперантиферромагнитная. Согласно этой диаграмме для $r < 0.25$ реализуется фазовый

[1)]e-mail: sheikh77@mail.ru

переход второго рода, тогда как для $r > 0.25$ имеет место фазовый переход первого рода. Переход из суперантиферромагнитной фазы в ферромагнитную также является переходом первого рода. Аналогичный результат получен в работе [23], где авторами был использован численный подход на основе метода МК. Там же рассчитаны критические индексы в интервале $0 < r < 0.25$ и показано, что в этом интервале данная модель принадлежит к тому же классу универсальности, что и трехмерная классическая модель Изинга.

В данной работе нами предпринята попытка исследовать ФП и критическое поведение антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев. Эта модель является частным случаем модели, рассматриваемой в работах [22, 23], когда взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями равно нулю. Отметим, что при больших величинах взаимодействия вторых ближайших соседей между слоями эти модели отличаются друг от друга.

Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев данная модель становится фрустрированной. Многие физические свойства фрустрированных систем сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Ее исследование на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическим поведением, с характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования. Антиферромагнитная модель Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей описывается гамильтонианом

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

где $S_i = \pm 1$ – изинговский спин. Решетка состоит из двумерных квадратных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями ($J_1 < 0$). Второй член характеризует антиферромагнитное взаимодействие следующих ближайших соседей, находящихся в том же слое ($J_2 < 0$). В данной работе рассматривается случай $r = J_2/J_1 = 1$, где r – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Учет антиферромагнитного взаимодействия следующих ближайших соседей приводит к возникновению фрустрации в этой модели.

Исследования ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с серьезными, труднопреодолимыми проблемами. На сегодняшний день строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами Монте-Карло [24–28]. Методы МК позволяют исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе уже изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. В данной работе был использован репличный обменный алгоритм метода МК [29], который является наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [30].

3. Результаты моделирования. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 16-90$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ МК-шагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$ МК-шагов/спин.

На рис. 1 приведена магнитная структура основного состояния, полученная для соседних слоев. Синими и зелеными точками показано направление спинов. Как видно из рисунка, основное состояние имеет суперантиферромагнитное упорядочение. Структура упорядоченной фазы в системе образуется чередованием конфигураций, показанных на рис. 1.

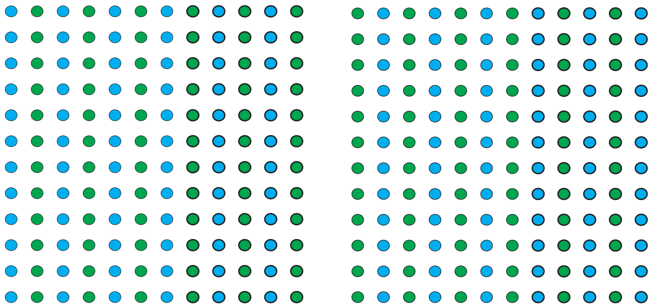

Рис. 1. (Цветной онлайн) Магнитная структура основного состояния, полученная для соседних слоев

Параметр порядка системы m вычислялся с помощью выражений

$$m_\lambda = \frac{4}{N}\sum_{i\in\lambda}(-1)^z S_i, \text{ где } \lambda = 1,2,3,4, \tag{2}$$

$$m^a = [m_1 + m_2 - (m_3 + m_4)]/4, \tag{3}$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)]/4, \tag{4}$$

$$m = \sqrt{(m^a) + (m^b)^2}, \tag{5}$$

где m_1, m_2, m_3, m_4 – параметры порядка по подрешеткам, z – номер слоя решетки.

Для определения критической температуры T_N мы использовали метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [31]:

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

Согласно теории конечно-размерного скейлинга точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической . Выражение (6) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение метода кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [31].

На рис. 2 представлены характерные зависимости U_L от температуры для разных значений L (здесь и

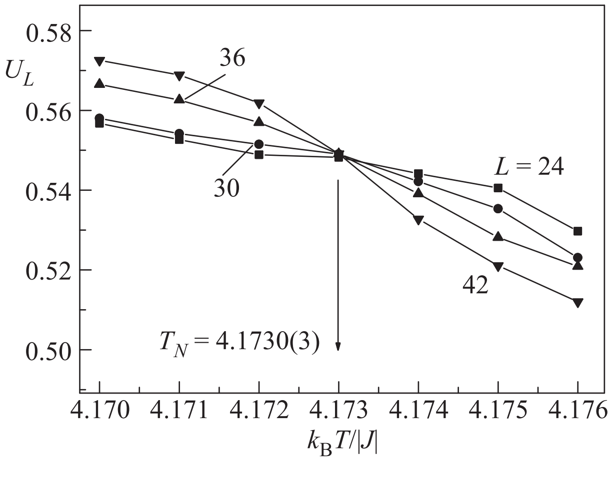

Рис. 2. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_\mathrm{B}T/|J|$

на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. В критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения $T_N = 4.1730(3)$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_\mathrm{B}$), что свидетельствует о ФП второго рода.

Для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [32, 33]. Он позволяет надежно определить род ФП. Соответствующая методика подробно описана в работе [34].

Результаты нашей работы показывают, что переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом второго рода. Это продемонстрировано на рис. 3 и 4. На этих рисунках

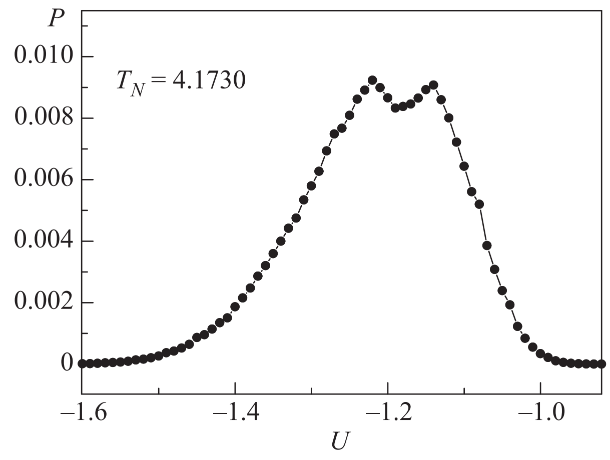

Рис. 3. Гистограмма распределения энергии для $L = 16$

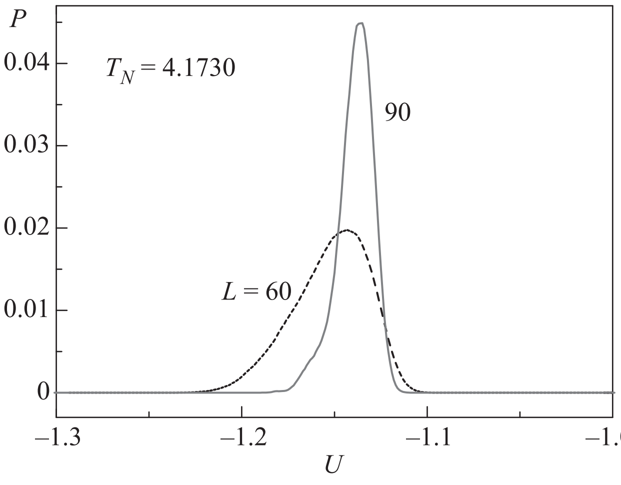

Рис. 4. Гистограммы распределения энергии для $L = 60$ и 90

представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 16$, 60 и 90. Графики построены вблизи критической температуры. Из рис. 3 видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для системы с линейными размерами $L = 16$ наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие двойного максимума на гистограмме распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Однако, как видно из рис. 4, для систем с линейными размерами $L = 60$ и 90 наблюдается один максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода. Аналогичная картина для двумерной модели Изинга была получена в работах [17, 18] в интервале значений $0.67 \leq r \leq 1.0$. Анализируя наши данные и данные работ [22, 23], можно предположить, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей между слоями приведет к смене ФП второго рода на ФП первого рода.

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) [26, 35, 36].

Согласно теории КРС для системы с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L справедливы следующие выражения [35, 36]:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \tag{7}$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \tag{8}$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} g_{V_n}, \tag{9}$$

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

$$V_n = \frac{\langle m^n E\rangle}{\langle m^n\rangle} - \langle E\rangle \quad (n = 1, 2, 3, 4). \tag{10}$$

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

Более подробно процедура определения критического индекса теплоемкости α и индекса Фишера η приведена в наших работах [5, 30].

На рис. 5 и 6 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L. Все точки на графиках в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения β/ν и γ/ν.

На рис. 7 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_i при $i = 1$, 2, 3 от линейных размеров решетки L. Видно, что все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Зависимости, проведенные в соответствии с методом наименьших

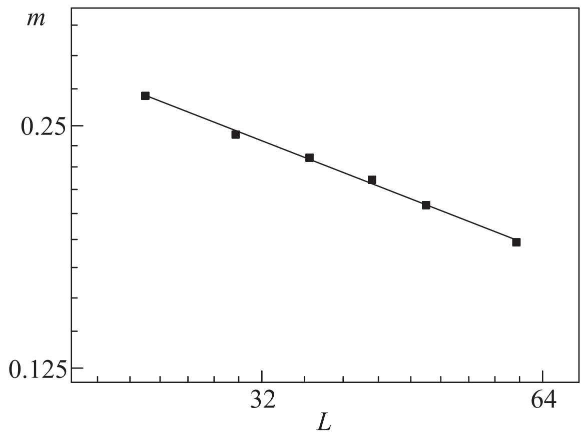

Рис. 5. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$

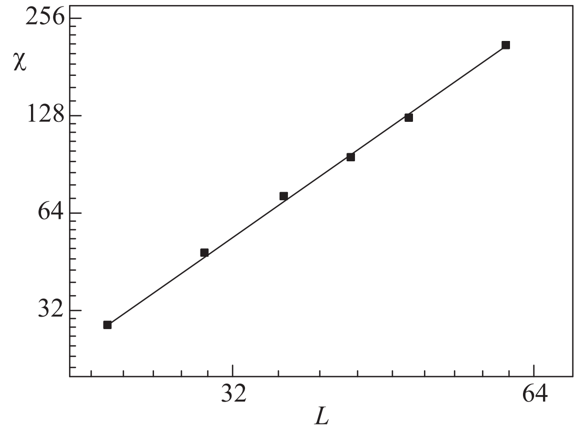

Рис. 6. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T = T_N$

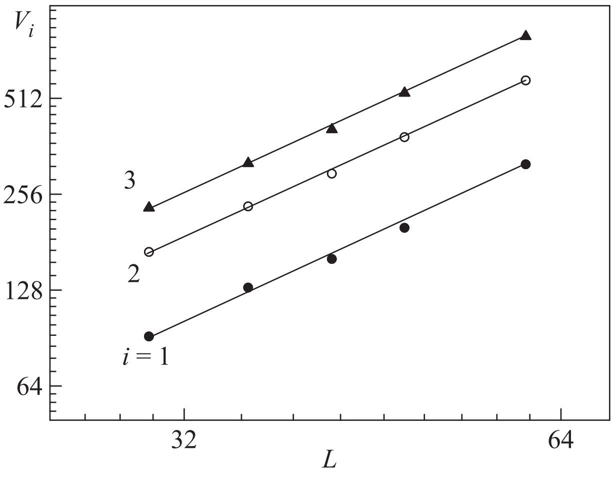

Рис. 7. Зависимости параметра V_i от линейных размеров системы L при $T = T_N$

Значения критических индексов α, β, γ, ν и η

Критический параметр	Данные этой работы	[37]	[38]	Нефрустрированная модель Изинга [39]
α	0.330(5)	0.33(5)	0.32(2)	0.108(9)
β	0.245(5)	–	0.25(2)	0.3265(25)
γ	1.190(5)	–	–	1.239(4)
ν	0.549(5)	0.55(2)	0.56(2)	0.6305(25)
η	−0.16(5)	−0.28(6)	−0.10(2)	0.037(3)
T_N	4.1730(3)	1.355(2)	1.347(1)	4.5111(3)

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.

Все полученные значения статических критических индексов представлены в таблице.

Как видно из таблицы, почти все значения критических индексов, рассчитанные нами, в пределах погрешности совпадают с полученными в работах [37, 38] для полностью фрустрированной трехмерной модели Изинга на кубической решетке. Что касается значений критической температуры, определенных в данном исследовании и в работах [37, 38], то они сильно отличаются. Надо сказать, что полученные нами значения критических индексов отличаются от соответствующих значений для нефрустрированной трехмерной модели Изинга [39]. Это свидетельствует о принадлежности исследуемой нами модели к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная полностью фрустрированная модель Изинга на кубической решетке.

4. Заключение. Исследование критических свойств и фазовых переходов трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в исследуемой модели реализуется фазовый переход второго рода. Рассчитаны все основные статические критические индексы. Расчет критических индексов выполнен на основе соотношений теории конечно-размерного скейлинга. Полученные данные свидетельствуют о принадлежности исследуемой модели к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная полностью фрустрированная модель Изинга.

1. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
2. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
3. A. Malakis, P. Kalozoumis, and N. Tyraskis, Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).
4. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
5. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **37**, 1258 (2011).
6. M. P. Nightingale, Phys. Lett. A **59**, 468 (1977).
7. R. H. Swedensen and S. Krinsky, Phys. Rev. Lett. **43**, 177 (1979).
8. K. Binder and D. P. Landau, Phys. Rev. B **21**, 1941 (1980).
9. D. P. Landau and K. Binder, Phys. Rev. B **31**, 5946 (1985).
10. K. Minami and M. Suzuki, J. Phys. A **27**, 7301 (1994).
11. J. L. Moran-Lopez, F. Aguilera-Granja, and J. M. Sanchez, Phys. Rev. B **48**, 3519 (1993).
12. E. Lopez-Sandoval, J. L. Moran-Lopez, and F. Aguilera-Granja, Sol. State Comm. **112**, 437 (1999).
13. C. Buzano and M. Pretti, Phys. Rev. B **56**, 636 (1997).
14. A. Rosana dos Anjos, J. Roberto Viana, and J. Ricardo de Sousa, Phys. Lett. A **372**, 1180 (2008).
15. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
16. F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Mag. Mag. Mater. **324**, 3418 (2012).
17. A. Kalz and A. Honecker, Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
18. S. Jin, A. Sen, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).
19. S. Jin, A. Sen, W. Guo, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 144406 (2013).
20. Р. Бакстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, М. (1985).
21. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
22. A. R. dos Anjos, J. R. Viana, J. R. de Sousa, and J. A. Plascak, Phys. Rev. E **76**, 022103 (2007).

23. D. R. O. Salmon, N. Crokidakis, A. M. Neto, T. I. Padilha, J. R. Viana, and J. R. de Sousa, Int. J. Mod. Phys. B **27**, 1350162 (2013).
24. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **56**, 474 (1987).
25. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **61**, 1299 (1992).
26. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
27. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФТТ **52**, 1157 (2010).
28. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ФТТ **53**, 1004 (2011).
29. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
30. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
31. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, М. (1995).
32. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
33. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
34. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).
35. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
36. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **35**, 663 (2009).
37. H. T. Diep, P. Lallemand, and O. Nagai, J. Phys. C: Sol. State Phys. **18**, 1067 (1985).
38. L. W. Bernardi, K. Hukushima, and H. Takayama, J. Phys. A: Math. Gen. **32**, 1787 (1999).
39. J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B **21**, 3976 (1980).