Письма в ЖЭТФ, том 106, вып. 2, с. 72 – 77

Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке

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

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

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

Поступила в редакцию 11 апреля 2017 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой 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 коллинеарной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход второго рода. Используя теорию 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 Гейзенберга на слоистой кубической решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей принадлежит к тому же классу универсальности критического поведения, что и антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

DOI: 10.7868/S0370274X17140041

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. Такое отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением основного состояния [4].

Одними из наиболее интенсивно исследуемыми в последние годы моделями с конкурирующими обменными взаимодействиями являются двумерная модель Изинга на квадратной решетке [5–10] и трехмерная модель Изинга на слоистой кубической решетке [11, 12]. Учет взаимодействий вторых ближайших соседей в этих моделях приводит к возникновению фрустраций, что усложняет их решение. Тем не менее, указанные модели достаточно хорошо изучены и многие их свойства известны.

При исследовании модели Гейзенберга основное внимание уделяется антиферромагнитным моделям на различных типах решеток, где фрустрации обусловлены геометрией решетки [1, 2, 4, 5, 13–15]. Модель Гейзенберга, где фрустрации обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий, до сих пор остается малоизученной. Фазовые переходы и критические свойства этой модели на слоистой кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий следующих ближайших соседей практически не исследованы. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классических трехмерных моделях 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 [16].

Численное моделирование методом Монте-Карло (МК) для модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей были проведены в работе [17]. В этой работе авторами построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей в интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$, где $r = J_2/J_1$ (J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия ближайших и вторых ближайших соседей соответственно). На диаграмме было видно, что вблизи точки $r = 0.25$ пересекаются три различные фазы: ферромагнитная, парамагнитная и коллинеарная. Согласно этой диаграмме, для $r < 0.25$ реализуется ФП второго рода, когда как для $r > 0.25$ имеет место ФП первого рода. Для определения типа ФП авторами был использован гистограммный анализ данных метода МК. Как следует

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

из работы, расчеты проводили лишь для систем с малыми линейными размерами ($L \leq 18$), что вызывает сомнение в правильности полученных результатов. Как было показано ранее в работах [11, 12, 18], для определения типа ФП в системах с фрустрациями необходимо исследовать системы с большими линейными размерами ($L \geq 90$).

В данной работе нами предпринята попытка исследовать ФП и критическое поведение антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев. Такая модель является частным случаем модели, исследуемой в работе [17], когда взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями равно нулю. При больших значениях величины взаимодействия вторых ближайших соседей между слоями эти модели отличаются друг от друга. В данном исследовании взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями не учитывается.

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 Гейзенберга на слоистой кубической решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическим поведением, характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

Модель и метод исследования. Антиферромагнитная модель Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

$$\mathrm{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l), \qquad (1)$$

где $\mathbf{S}_i$ – трехкомпонентный единичный вектор, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$.

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 рассмотрен случай, когда $r = J_2/J_1 = 1$, где r – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Этот случай соответствует коллинеарной фазе. Упорядочение спинов в основном состоянии схематически представлено на рис. 1.

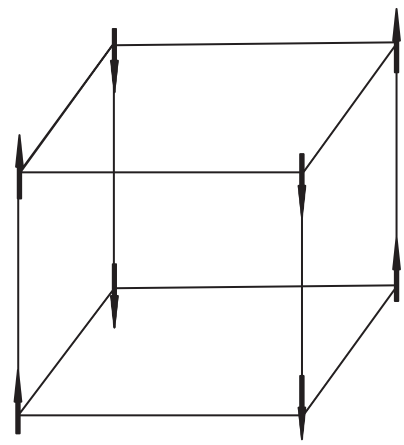

Рис. 1. Магнитная структура основного состояния

Исследования ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с серьезными и труднопреодолимыми проблемами. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы на сегодняшний день могут быть изучены методами Монте-Карло [18–25], которые позволяют исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе, на данный момент, изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. В представленном исследовании был использован репличный обменный алгоритм метода МК [26], являющийся наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [6].

Результаты моделирования. Расчеты проводили для систем с периодическими граничными условиями и линейным размером $L \times L \times L = N$, $L = 24 \div 120$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекается участок длиной $\tau_0 = 4 \times 10^5$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин выполняли вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$ МКшагов/спин.

Параметр порядка системы m вычисляется с помощью выражения

$$M_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} (-1)^z \mathbf{S}_i, \text{ где } \lambda = 1,\ 2,\ 3,\ 4, \qquad (2)$$

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

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

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

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 [27]:

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

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 [27].

На рис. 2 представлена характерная зависимость U_L от температуры для разных значений L (здесь

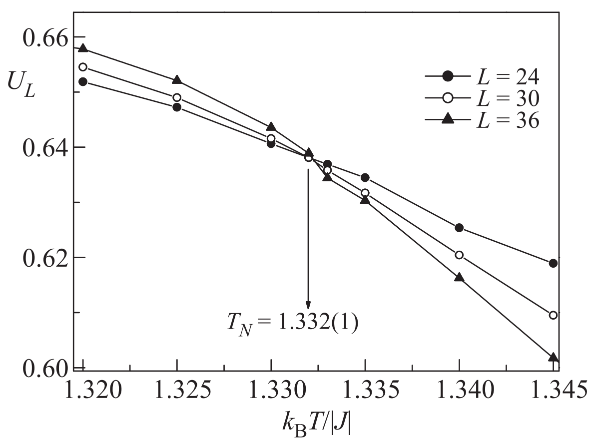

Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_BT/|J|$

и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Рис. 2 демонстрирует точность определения критической температуры. Из графика следует, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 1.332(1)$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$)), что свидетельствует о ФП второго рода.

Для более подробного анализа рода ФП нами использован гистограммный анализ данных метода МК [28, 29]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП по методике, подробно описанной в [30].

Результаты нашей работы показывают, что переход из коллинеарной фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, что продемонстрировано на рис. 3 и 4. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 24$, 30, 60 и 90. Графики построены вблизи критической температуры. Из рисунков следует, что в зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех систем наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

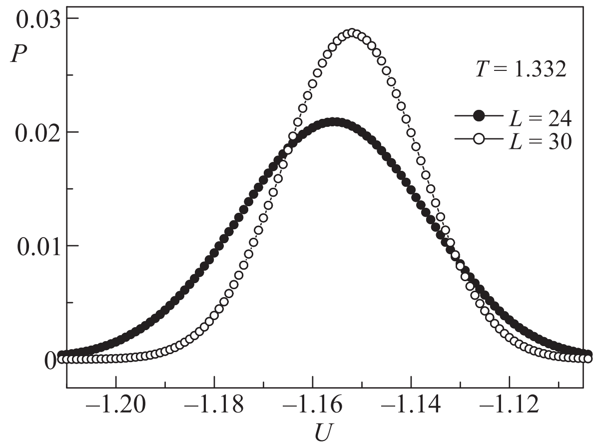

Рис. 3. Гистограмма распределения энергии для $L = 24$ и 30 усл. ед.

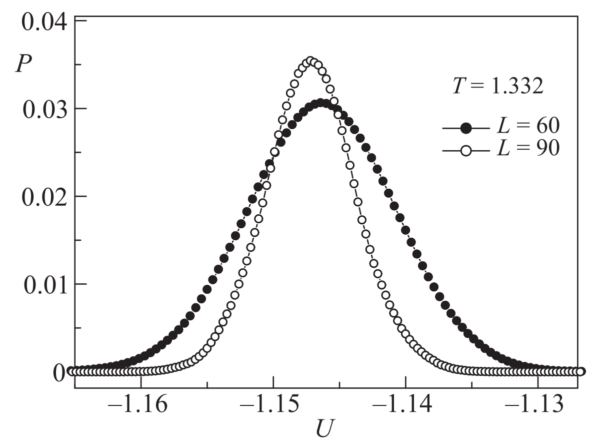

Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $L = 60$ и 90 усл. ед.

Ранее в работе [30] нами было показано, что для систем с большими линейными размерами на гистограмме распределения энергии может появиться второй максимум, который отсутствует для систем с малыми линейными размерами. Поэтому для установления типа ФП необходимо исследовать системы с большими линейными размерами. В связи с этим на рис. 5 представлены гистограммы распределения

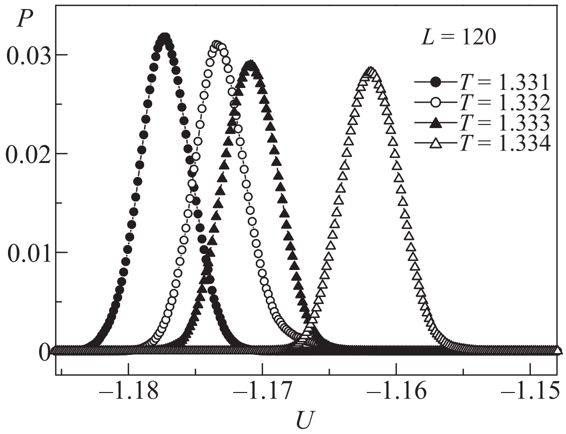

Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для $L = 120$ усл. ед.

энергии для системы с линейным размером $L = 120$. Графики построены при различных температурах, близких к критической. В результате для всех значений T, даже для $L = 120$, наблюдается один максимум, что позволяет говорить о наличии в системе ФП второго рода. А это противоречит результату, полученному в работе [17], где переход из коллинеарной фазы в парамагнитную является ФП первого рода. Такое несоответствие может быть связано либо с тем, что нами в данном исследовании не учитывалось межслойное обменное взаимодействие вторых ближайших соседей, либо с тем, что в [17] исследованы системы с малыми линейными размерами, что не позволяет с уверенностью утверждать о типе ФП.

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α, восприимчивости γ, параметра порядка β, радиуса корреляции ν и индекса Фишера η применяли соотношения теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [19, 31].

Из теории КРС следует, что в системе размером $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения [19, 31]:

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

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

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

где g_{V_i} – некоторая постоянная, а в качестве V_i может выступить:

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

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

Более подробно процедура определения критического индекса теплоемкости α и индекса Фишера η приведена нами в работе [5].

На рис. 6 и 7 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости маг-

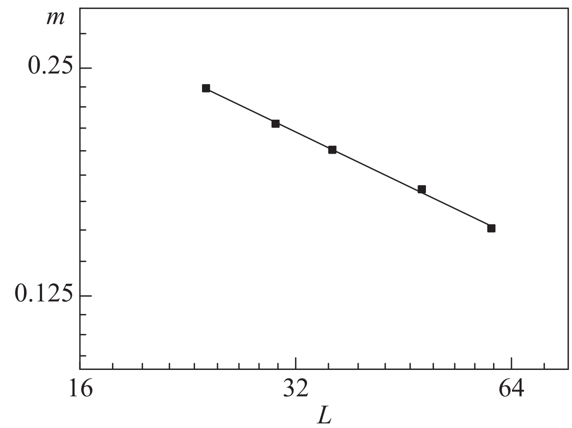

Рис. 6. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$ (в усл. ед.)

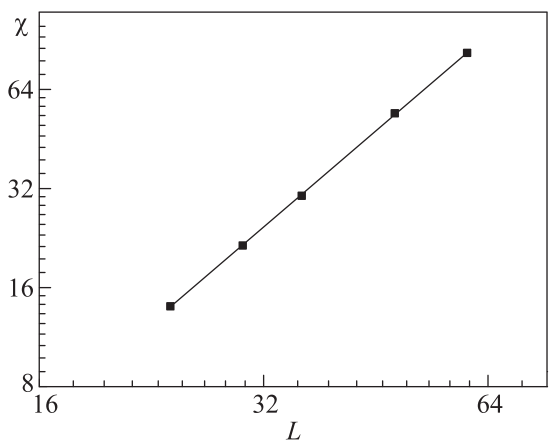

Рис. 7. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T = T_N$ (в усл. ед.)

нитного 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. 8 в двойном логарифмическом масштабе показаны характерные зависимости параметров V_i при $i = 1, 2, 3$ от линейных размеров решетки L. Как следует из рисунка, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую, зависимости, проведенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Угол наклона прямой определяет значение $1/\nu$. Вычислен-

Таблица 1. Значения критических индексов α, β, γ, ν и η для разных моделей

Критический параметр	Данные этой работы	[14]	[32]	[33]	Нефрустрированная модель Гейзенберга [34]
α	0.165(5)	0.18(2)	–	0.11	−0.1336(15)]
β	0.295(5)	0.30(2)	–	0.31	0.3689(3)
γ	1.259(5)	1.27(2)	1.20(8)	1.26	1.3960(9)
ν	0.649(5)	0.65(1)	0.63(5)	0.63	0.7112(5)
η	0.06(2)	−0.06(3)	0.08(3)	0.0	0.0375(5)
T_N (усл. ед.)	1.332(1)	0.957(1)	–	–	1.443(1)

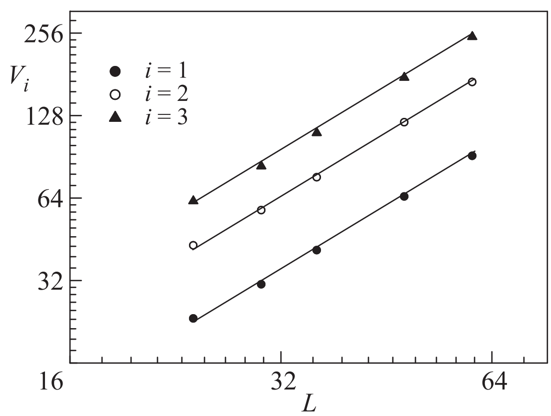

Рис. 8. Зависимость параметра V_i от линейных размеров системы L при $T = T_N$ (в усл. ед.)

ное таким образом значение ν используется для определения критических индексов теплоемкости α, восприимчивости γ и параметра порядка β.

Все значения статических критических индексов, полученные указанным образом, представлены в табл. 1, из которой следует, что почти все значения критических индексов, рассчитанные нами, в пределах погрешности совпадают, как с численными [14], так и с теоретическими [32, 33] данными для трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке. Тот факт, что индекс Фишера $\eta = 0.06$ для данной модели имеет положительное значение, также свидетельствует в пользу ФП второго рода. Что касается критической температуры, определенной в данном исследовании и в работе [14], то они сильно отличаются. Отметим, что полученные нами значения критических индексов отличаются от соответствующих значений для нефрустрированной трехмерной модели Гейзенберга [34]. Это свидетельствует о принадлежности исследуемой нами модели к тому же классу универсальности критического поведения, что и антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Заключение. Исследование фазовых переходов и критических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой 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 антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта # 16-02-00214-а.

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. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
7. F. A. Kassan-Ogly, B. N. Filippov, A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, J. Mag. Mag. Mater. **324**, 3418 (2012).
8. A. Kalz and A. Honecker, Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
9. S. Jin, A. Sen, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).

10. S. Jin, A. Sen, W. Guo, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 144406 (2013).
11. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
12. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
13. С. В. Малеев, УФН **172**, 617 (2002).
14. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФТТ **52**, 1157 (2010).
15. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ФТТ **53**, 1004 (2011).
16. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, U.K. (2000).
17. C. Pinettes and H. T. Diep, J. of Appl. Phys. **83**, 6317 (1998).
18. V. Thanh Ngo and H. T. Diep, Phys. Rev. E **78**, 031119 (2008).
19. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994-II).
20. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФНТ **35**, 663 (2009).
21. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **142**, 338 (2012).
22. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, Д. Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
23. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Physica B: Cond. Matt. **476**, 1 (2015).
24. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Solid State Comm. **233**, 35 (2016).
25. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
26. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
27. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, М. (1995).
28. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
29. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
30. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).
31. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
32. P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
33. G. Zumbac, Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
34. M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).