Письма в ЖЭТФ, том 109, вып. 9, с. 610 – 614 © 2019 г. 10 мая

Фазовая диаграмма антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке

М. К. Рамазанов[1], *А. К. Муртазаев*

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 18 марта 2019 г.
После переработки 25 марта 2019 г.
Принята к публикации 25 марта 2019 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей. Рассмотрен диапазон значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей $0.0 \leq r \leq 1.0$. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что в рассмотренном интервале значений r наблюдается фазовый переход второго рода. Обнаружено, что в данной модели учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев не приводит к смене фазового перехода.

DOI: 10.1134/S0370274X1909008X

1. Введение. Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств в спиновых системах с конкурирующим обменным взаимодействием является актуальной задачей в современной физике конденсированного состояния [1–3]. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к фрустрации. Исследование спиновых систем с фрустрациями имеет особый интерес. Это связано с тем, что такие системы во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. В частности, такое отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП [4].

В последние годы большое внимание уделяют исследованию двумерной и трехмерной модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями [5–12]. Эти модели изучены достаточно хорошо и многие их свойства известны. Модель Гейзенберга, где фрустрации обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий, до сих пор остается малоизученной. ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей практически не исследованы. Учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классических трехмерных моделях сопровождается вырождением основного состояния, появлением фрустраций, различных фаз и ФП [13].

Исследование методом Монте-Карло (МК) модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей было проведено в работе [14]. 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 первых и вторых ближайших соседей, соответственно). Было показано, что на диаграмме вблизи точки $r = 0.25$ пересекаются три различные фазы: ферромагнитная, парамагнитная и суперантиферромагнитная. Магнитная структура основного состояния суперантиферромагнитной фазы была нами подробно рассмотрена в работе [11], а что касается ферромагнитной и парамагнитной фаз, то их магнитные структуры хорошо известны. Согласно результатам работы [14], 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 видно из работы, расчеты проводились 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, 15] для определения типа ФП в спиновых системах с фрустрациями необходимо исследовать системы с большими линейными размерами ($L \geq 90$).

В работе [16] нами методом МК были проведены исследования ФП и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближай-

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

ших соседей внутри слоев. Было обнаружено, что в исследуемой модели переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как ФП второго рода для случая $r = 1.0$. Эта модель является частным случаем модели, исследуемой в работе [14], когда взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями равно нулю.

В данной работе, нами на основе метода МК исследуется природа ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев в интервале значений $0.0 \leq r \leq 1.0$. Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев данная модель становится фрустрированной. В спиновых системах с фрустрациями многие физические свойства сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования. Антиферромагнитная модель Гейзенберга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

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

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 вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое ($J_2 < 0$).

В настоящее время ФП фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [17–21]. Методы МК позволяют исследовать физические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе, на сегодняшний день, изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. В данном исследовании был использован репличный обменный алгоритм метода МК [22], который является наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [6].

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

Параметр порядка системы m вычислялся, используя выражения:

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

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

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

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

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

Для определения критической температуры T_N был использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [23]:

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

Согласно теории конечно-размерного скейлинга, точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой. 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 [23].

На рисунках 1 и 2 представлены характерные зависимости U_L от температуры для $r = 0.2$ и $r = 0.8$ при различных значениях L (здесь и на всех последующих рисунках статистическая погрешность не превышает размеров символов использованных для построения зависимостей). Эти рисунки демонстрируют точность определения критической температуры. Из графиков видно, что в критической области наблюдаются четко выраженные точки пересечения ($T_N = 1.1600(2)$ для $r = 0.2$ и $T_N = 1.0960(2)$ для $r = 0.8$ (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_\mathrm{B}$)), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r.

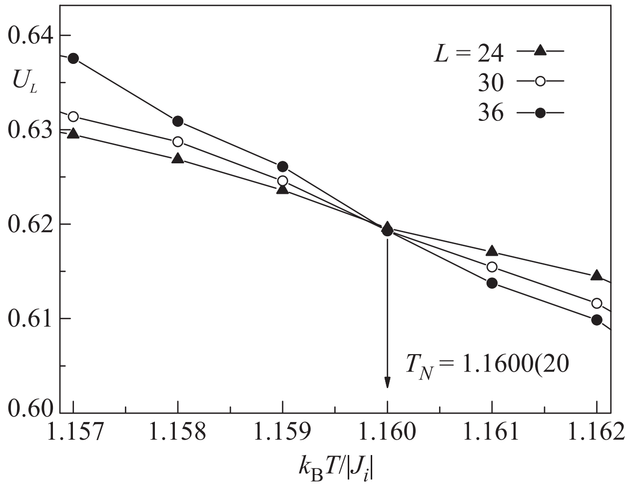

Рис. 1. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_{\rm B}T/|J_1|$ для $r = 0.2$

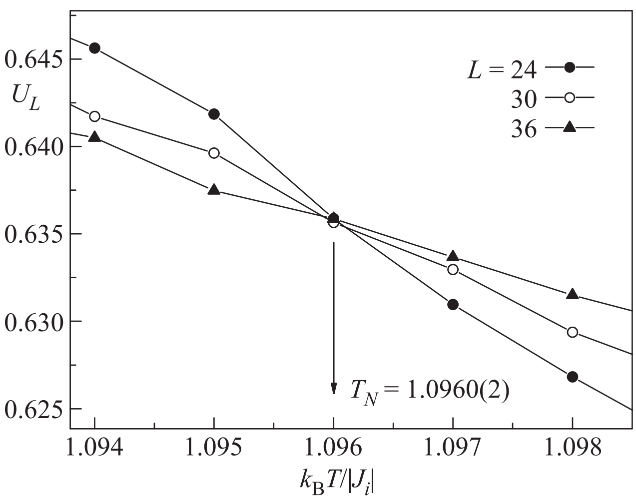

Рис. 2. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_{\rm B}T/|J_1|$ для $r = 0.8$

На рисунке 3 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме видно, что вблизи значения $r = 0.5$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная – I, парамагнитная – II и суперантиферромагнитная – III.

В данной работе нами изучались переходы из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную. Переход из антиферромагнитной фазы в суперантиферромагнитную нами не рассматривался (пунктирная линия вблизи значения $r = 0.5$ на рис. 3). Достоверных сведений о данном переходе до сих пор не существует. Мы предполагаем, что на границе этих фаз имеется область сосуществования обеих фаз.

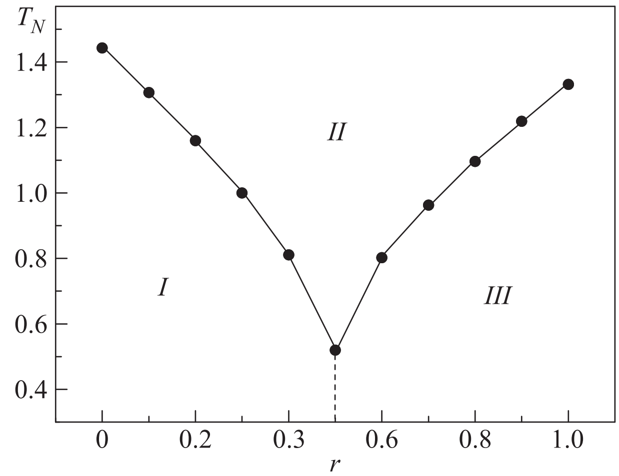

Рис. 3. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. I – антиферромагнитная фаза, II – парамагнитная фаза, III – суперантиферромагнитная фаза

Для подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [24, 25]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана нами в работе [26].

Результаты нашей работы показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 4. На этом рисунке представлены гистограммы распределения энергии для систем с линейными размерами $L = 30$, $L = 60$ и $L = 90$ для случая $r = 0.2$. Графики построены вблизи критической

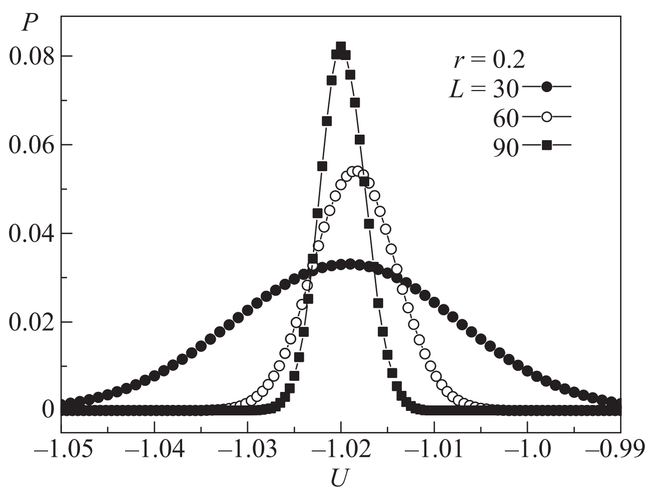

Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.2$

температуры. Из рисунка 4 видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдается один хорошо выраженный максимум, который растет с увеличением линейных размеров системы. Такое поведение свидетельствует в пользу ФП второго рода. Аналогичная картина наблюдается во всем интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$.

Что касается перехода из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу, мы обнаружили, что в интервале значений $0.5 < r \leq 1.0$ также наблюдается ФП второго рода. Это показано на рис. 5. На этом рисунке представлены гистограммы распре-

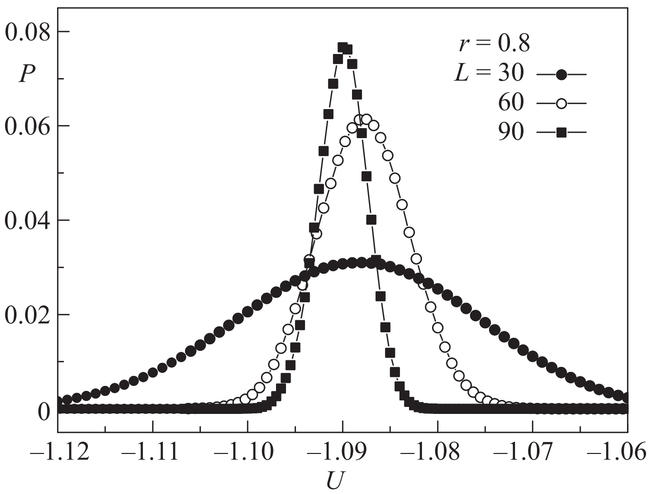

Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.8$

деления энергии при $r = 0.8$ для систем с линейными размерами $L = 30$, $L = 60$ и $L = 90$. Из рисунка видно, что на зависимости вероятности $P(U)$ от энергии U для всех линейных размеров наблюдается один хорошо выраженный максимум, который растет с увеличением линейных размеров системы. Наличие одного максимума на гистограмме распределения энергии является достаточным условием для ФП второго рода.

В работе [26] нами ранее 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 нами на рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 120$ при $r = 0.9$. Графики построены при различных температурах, близких к критической температуре. Как видно на рис. 6, для всех значений T наблюдается один максимум. Это позволяет утверждать о наличии в системе ФП второго рода. Наши данные противоречат с результатами, полученными в работе [14], где

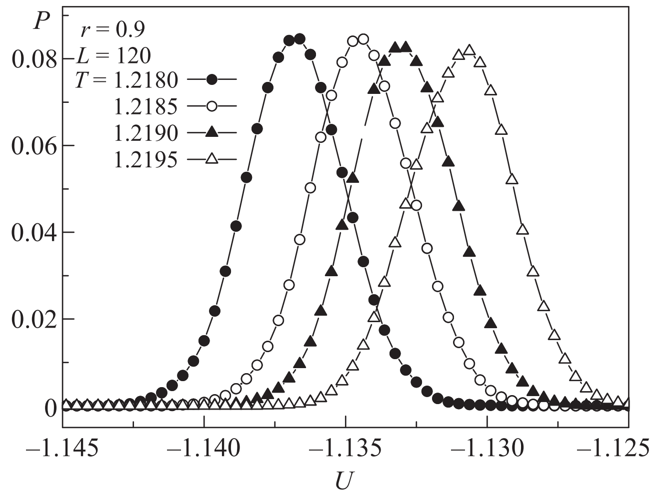

Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для $r = 0.9$

переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную происходит как ФП первого рода. Такое несоответствие может быть обусловлено либо тем, что нами в данном исследовании не учитывалось межслойное обменное взаимодействие вторых ближайших соседей, либо тем, что в работе [14] исследовались системы с малыми линейными размерами, что не позволяет надежно определять тип ФП.

Таким образом, на диаграмме, представленной на рис. 3, мы видим, что переход из фазы I в фазу II, а также переход из фазы III в фазу II являются ФП второго рода.

Аналогичные исследования для модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей показали, что на диаграмме зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей существует область ($0.6 \leq r \leq 0.8$), где наблюдается ФП первого рода [12]. В отличие от модели Изинга, в модели Гейзенберга учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев не приводит к смене ФП.

4. Заключение. Исследование фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей в диапазоне значений $0.0 \leq r \leq 1.0$ 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 во всем рассмотренном интервале значений r наблюдается фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований в рамках научных проектов # 19-02-00153-а и 18-32-20098-мол-а-вед.

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. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
14. C. Pinettes and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **83**, 6317 (1998).
15. V. Thanh Ngo and H. T. Diep, Phys. Rev. E **78**, 031119 (2008).
16. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
17. А. К. Муртазаев, М. А. Магомедов, М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **107**, 265 (2018).
18. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994-II).
19. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Physica B: Condensed Matter **476**, 1 (2015).
20. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Solid State Commun. **233**, 35 (2016).
21. М. К. Бадиев, А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ЖЭТФ **150**, 722 (2016).
22. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
23. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, М. (1995).
24. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
25. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
26. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).