

Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей

М. К. Рамазанов¹⁾

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 27 апреля 2011 г.

После переработки 28 июня 2011 г.

Гистограммным методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов в трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Изучены фазовые переходы в этой модели в диапазоне значений взаимодействия вторых ближайших соседей от 0.0 до 1.0. Обнаружено, что в рассмотренном интервале в исследуемой модели наблюдается фазовый переход первого рода.

1. Введение. В последние годы особый интерес вызывают антиферромагнетики на треугольной решетке [1–5]. Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений в таких системах – одна из актуальных задач статистической физики. В антиферромагнитных системах на треугольной решетке, в отличие от ферромагнетиков, возможно проявление геометрической фрустрации обменного взаимодействия вследствие особенностей кристаллической структуры. Магнитные моменты, находящиеся в вершинах правильных треугольников, не могут образовать обычную коллинеарную структуру. Минимум классической обменной энергии достигается при условии, что соседние спины ориентированы под углом 120° друг к другу. Антиферромагнитное взаимодействие между плоскостями в реальных гексагональных кристаллах не нарушает этой структуры, упорядочивая спины в соседних плоскостях антипараллельно [1].

Одной из наиболее интенсивно исследуемых в последние годы фрустрированных моделей является антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной (гексагональной) решетке с взаимодействиями ближайших соседей [6–14].

Первые теоретические и численные результаты, полученные в работах [6, 7], свидетельствуют о наличии здесь ФП второго рода и принадлежности этой модели к новому киральному классу универсальности критического поведения. Позднее аналогичные результаты были получены – в ряде экспериментальных, теоретических и расчетных работ [4, 5, 10–12, 15–17]. Вместе с тем имеются данные теоретических и численных исследований, которые показывают

наличие в этой модели ФП первого рода, а также слабо выраженного ФП первого рода, близкого к ФП второго рода с эффективными критическими индексами [8, 18–20].

Несмотря на значительные успехи, достигнутые при исследовании антиферромагнитной модели Гейзенберга, все еще остается открытым важный вопрос, связанный с природой ФП и зависимостью характера ФП от различных факторов, таких, как анизотропия, взаимодействия вторых ближайших соседей, внешнее магнитное поле и т.д. [1–5, 21].

В данной работе нами предпринята попытка исследования фазовых переходов в трехмерной фрустрированной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

Интерес к этой модели обусловлен тем, что многие физические свойства ФС сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Антиферромагнитная модель Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Имеющиеся в литературе результаты были получены в то время, когда вычислительные мощности компьютеров не позволяли исследовать системы с достаточно большими линейными размерами. 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. Гамильтониан трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке может быть представлен в следующем виде [21]:

¹⁾ e-mail: sheikh77@mail.ru

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - J' \sum_{\langle ij \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j), \quad (1)$$

где \mathbf{S}_i – трехкомпонентный единичный вектор, $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$, $J < 0$ и $J' < 0$ – константы антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев, так и между слоями. Второй член характеризует взаимодействие вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое. При этом $R = J'/J$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей.

Исследования ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с серьезными и трудно преодолимыми проблемами. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы на сегодняшний день могут быть изучены методами Монте-Карло (МК) [6, 7, 10, 12, 13, 22, 23]. 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 данном исследовании использовался специально разработанный репличный обменный алгоритм метода МК [24]. Он является наиболее мощным и эффективным для исследования ФС. Более подробно этот алгоритм описан нами в работах [25, 26].

Для анализа характера ФП нами был использован гистограммный метод МК [27, 28]. Этот метод является наиболее эффективным для определения рода ФП. Гистограммный метод использует случайное блуждание в энергетическом пространстве и позволяет получить точные оценки для плотности состояний энергии $g(U)$. Вероятность перехода из одного состояния в другое определяется следующей формулой:

$$P(U \rightarrow U') = \min[g(U)/g(U'), 1], \quad (2)$$

где U и U' – энергии до и после переворота спина.

Для эффективного использования этого метода мы разделили весь диапазон энергии (U_{\min}, U_{\max}) на r подынтервалов, где U_{\min}^i – минимальная энергия подынтервала i ($i = 1, 2, \dots, r$), $U_{\max}^i = U_{\min}^{i+1} + 2\Delta U$ – максимальная энергия подынтервала i . Шаг ΔU мы брали достаточно большим, что обеспечило сглаживание границ между двумя подынтервалами. Далее нами были вычислены плотности состояний для каждого подынтервала (U_{\min}^i, U_{\max}^i). Плотность со-

стояний всей области была получена путем соединения плотностей состояний каждого подынтервала ($U_{\min}^i + \Delta U, U_{\max}^i - \Delta U$).

3. Результаты моделирования. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12-90$. 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 $\tau = 25\tau_0$ МК-шагов/спин. Для повышения точности проводилось усреднение и по данным, полученным из двадцати различных начальных конфигураций. Затем эти данные использовались для построения графиков.

Для определения критической температуры T_N мы использовали метод кумулянтов Биндера четвертого порядка. Методика определения T_N описана нами в работах [13, 25, 26]. На рис. 1 приведена фазо-

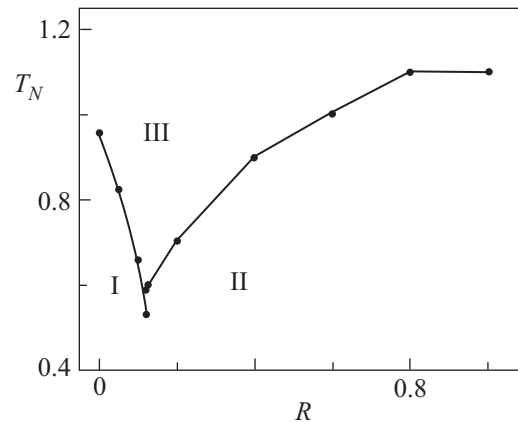


Рис. 1. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей

вая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На этой диаграмме мы видим область сосуществования трех фаз: I – гелимагнитная (120-градусная структура), II – коллинеарная, III – парамагнитная. Переход из гелимагнитного упорядочения в фазе II к коллинеарному в данной модели обусловлен изменением структуры основного состояния [29]. По мере приближения к точке, где сосуществуют три фазы, температура фазового перехода смещается в сторону более низких значений.

Аналогичная фазовая диаграмма была получена в работе [21]. В этой работе показано, что в окрестности точки $R = 0.115$ имеют место два фазовых пере-

хода: низкотемпературный переход из гелимагнитной фазы в коллинеарную и высокотемпературный переход из коллинеарной фазы в парамагнитную. На фазовой диаграмме показано, что переходы из гелимагнитной фазы в коллинеарную и парамагнитную являются переходами второго рода, а переход из коллинеарной фазы в парамагнитную – переходом первого рода.

В нашей работе проведено более подробное исследование интервала $0.0 < R < 1.0$, особенно в окрестности точки $R = 0.115$. Нами изучаются три перехода, которые имеют место в окрестности точки $R = 0.115$: из фазы I в фазу II, из фазы I в фазу III и из фазы II в фазу III. Наши данные, в отличие от данных, полученных в работе [21], показывают наличие фазового перехода первого рода во всем интервале $0.0 < R < 1.0$. Это продемонстрировано на рис. 2–4. На этих рисунках представлены энергетические

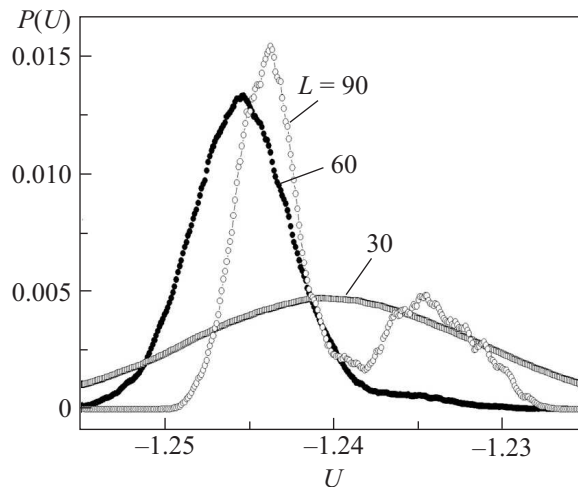


Рис. 3. Энергетическая гистограмма для $R = 0.4$ ($T = 0.901$)

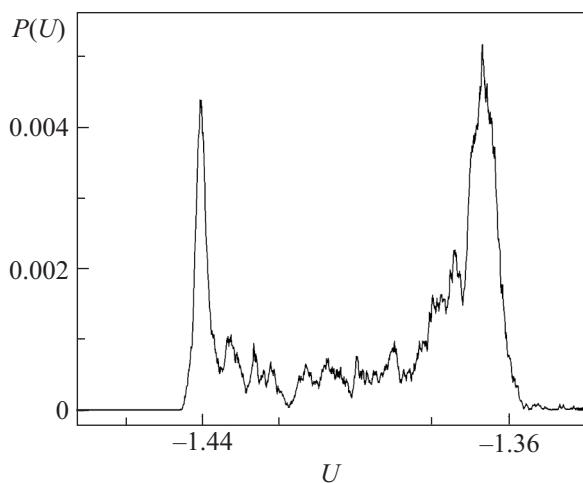


Рис. 2. Энергетическая гистограмма для $R = 0.126$ ($T = 0.59$; $L = 60$)

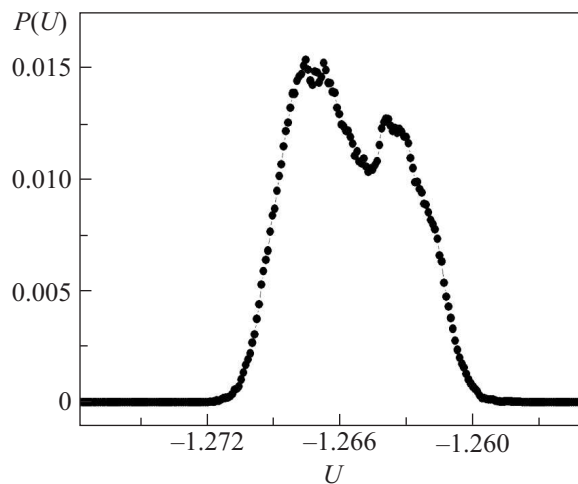


Рис. 4. Энергетическая гистограмма для случая $R = 0.075$ ($T = 0.747$; $L = 90$)

гистограммы для значений $R = 0.075$, $R = 0.126$ и $R = 0.4$. Графики построены вблизи критической температуры для различных значений L . Из рис. 3 видно, что на зависимости вероятности P от энергии U для системы с $L = 90$ наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые отсутствуют для систем с $L = 30$ и $L = 60$. Это говорит о целесообразности изучения систем, линейные размеры которых не меньше $L = 90$. Наличие двойного максимума на энергетической гистограмме является достаточным условием для ФП первого рода.

В работе [30] рассматривалась аналогичная модель без учета взаимодействия вторых ближайших соседей ($J' = 0$) с достаточно большими линейными размерами решетки. В этой работе было показано,

что при $J' = 0$ наблюдается слабый фазовый переход первого рода, что противоречит результатам работы [21]. Результаты нашей работы находятся в согласии с данными работы [30]. Они показывают, что в интервале $0.0 < R < 0.125$ наблюдается фазовый переход первого, а не второго рода, как это предполагалось ранее в работе [21].

На рис. 2, в отличие от рис. 3 и 4 наблюдается немного иная картина. Как видно из графика, для $R = 0.126$ мы имеем два ярко выраженных максимума и множество малых максимумов. Можно предположить, что это связано с сильным вырождением основного состояния при $R = 0.126$.

Аналогичные энергетические гистограммы были построены для всех значений из интервала $0.0 < R < 1.0$.

4. Заключение. Исследование фазовых переходов в трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов для различных соотношений величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что для всех значений из интервала $0.0 < R < 1.0$ в системе наблюдается фазовый переход первого рода.

Работа поддержана грантом РФФИ # 10-02-00130.

1. С. С. Сосин, Л. А. Прозорова, А. И. Смирнов, УФН **175**, 92 (2005).
2. В. С. Доценко, УФН **165**, 481 (1995).
3. С. Е. Коршунов, УФН **176**, 233 (2006).
4. С. В. Малеев, УФН **172**, 617 (2002).
5. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова и др., Письма в ЖЭТФ **80**, 231 (2004).
6. Н. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **56**, 474 (1987).
7. Н. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **61**, 1299 (1992).
8. M. Tisser, B. Delamotte, and D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
9. P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
10. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994-II).
11. A. Peles and B. W. Southern, Phys. Rev. B **67**, 184407 (2003).
12. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФТТ **52**, 1157 (2010).
13. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ФТТ **53**, 1004 (2011).
14. Д. Лойсон, А. И. Соколов, Б. Деламотт и др., Письма в ЖЭТФ **72**, 447 (2000).
15. E. H. Boubcheur, D. Loison, and H. T. Diep, Phys. Rev. B **54**, 4165 (1996).
16. A. Dobry and H. T. Diep, Phys. Rev. B **51**, 6731 (1995).
17. D. Loison and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **76**, 6350 (1994).
18. S. A. Antonenko, A. I. Sokolov, and V. B. Varnashev, Phys. Lett. A **208**, 161 (1995).
19. A. Peles, B. W. Southern, B. Delamotte et al., Phys. Rev. B **69**, 220408 (2004).
20. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jap. **72**, 74 (2003).
21. D. Loison and H. T. Diep, Phys. Rev. B **50**, 16453 (1994).
22. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. К. Рамазанов, ФНТ **32**, 323 (2006).
23. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. К. Рамазанов, ФТТ **47**, 1125 (2005).
24. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
25. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
26. A. K. Murtazaev and M. K. Ramazanov, Phys. Rev. B **76**, 174421 (2007).
27. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
28. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
29. S. Katsura, T. Ide, and T. Morita, J. Stat. Phys. **42**, 381 (1986).
30. V. Thanh Ngo and H. T. Diep, Phys. Rev. E **78**, 031119 (2008).