

# Фазовые переходы в антиферромагнитной слоистой модели Изинга на кубической решетке

М. К. Рамазанов<sup>+1)</sup>, А. К. Муртазаев<sup>+\*</sup>

<sup>+</sup> Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

<sup>\*</sup> Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 21 января 2016 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов антиферромагнитной слоистой модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей в диапазоне значений  $0.0 \leq r < 1.0$ . 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 интервале  $0.0 \leq r \leq 0.5$ , а также для значения  $r = 0.9$  наблюдается фазовый переход второго рода, а в интервале  $0.6 \leq r \leq 0.8$  – фазовый переход первого рода.

DOI: 10.7868/S0370274X16070079

**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 свойств соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП [4].

Одной из наиболее интенсивно исследуемых в последние годы фрустрированных моделей является двумерная модель Изинга на квадратной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей [5–20]. Эта модель изучена достаточно хорошо. Почти все ее свойства известны [15–20]. 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, он может также влиять на критическое поведение модели. В частности, появляются различные аномалии критических свойств [21].

В работе [22] нами методом Монте-Карло (МК) были проведены исследования ФП и критических свойств антиферромагнитной модели Изинга на ку-

бической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев. Эта модель является частным случаем модели исследуемой в работах [23, 24], в которой взаимодействие вторых ближайших соседей между слоями равно нулю. В работе [22] был рассмотрен случай, когда  $r = J_2/J_1 = 1.0$  ( $J_1$  и  $J_2$  – константы обменного взаимодействия ближайших и вторых ближайших соседей соответственно,  $r$  – величина взаимодействия вторых ближайших соседей). Было показано, что для случая  $r = 1.0$  в исследуемой модели переход из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход второго рода.

В данной работе нами предпринята попытка на основе метода МК определить род ФП антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев в интервале значений  $0.0 \leq r < 1.0$ . Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев она 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 характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

<sup>1)</sup>e-mail: sheikh77@mail.ru

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

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

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 описывает антиферромагнитное взаимодействие следующих ближайших соседей, находящихся в том же слое ( $J_2 < 0$ ). Учет антиферромагнитного взаимодействия следующих ближайших соседей в этой модели приводит к возникновению фрустрации.

Исследования ФП фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с серьезными и труднопреодолимыми проблемами. На настоящий момент строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами МК [25–31]. Методы МК позволяют исследовать термодинамические 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 данной работе был использован репличный обменный алгоритм метода МК [32], который является наиболее мощным и эффективным для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [33].

**3. Результаты моделирования.** Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями с линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 30-90$ . Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной  $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$  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 с помощью выражения

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

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

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

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

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 [34]:

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

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 температурные зависимости кумулянтов Биндера  $U_L$  имеют четко выраженную точку пересечения [34].

На рис. 1 и 2 представлены характерные зависимости  $U_L$  от температуры для  $r = 0.3$  и  $0.9$  при

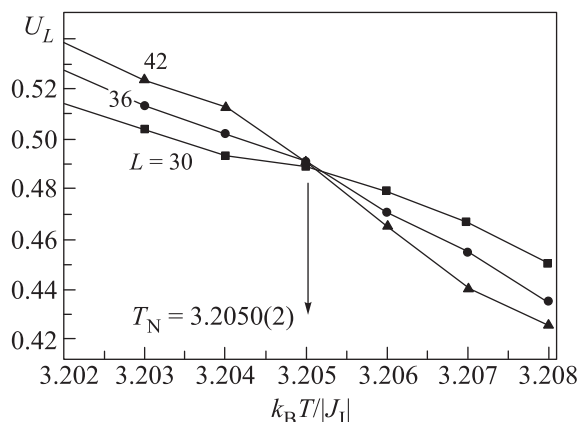


Рис. 1. Зависимости кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $r = 0.3$  при различных  $L$

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. Видно, что в критической области наблюдаются четко выраженные точки пересечения ( $T_N = 3.2050(2)$  для  $r = 0.3$  и  $T_N = 3.8250(2)$  для  $r = 0.9$ ; здесь и далее температура дана в единицах  $|J|/k_B$ ), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений  $r$ .

На рис. 3 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины вза-

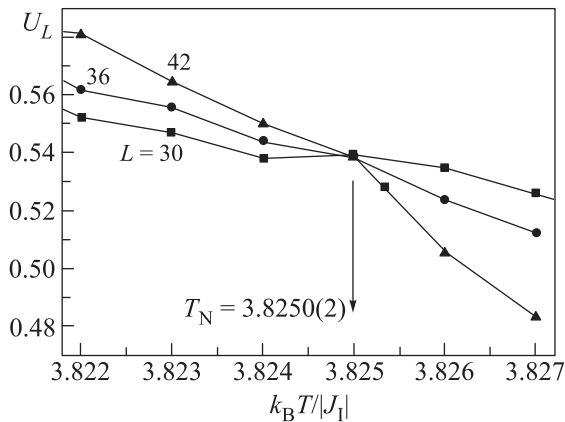


Рис. 2. Зависимости кумулянта Биндера  $U_L$  от температуры  $k_B T / |J|$  для  $r = 0.9$  при различных  $L$

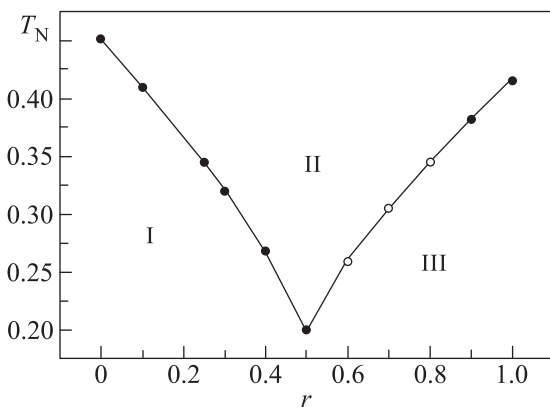


Рис. 3. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей: I – антиферромагнитная фаза, II – парамагнитная фаза, III – суперантиферромагнитная фаза

имдействия следующих ближайших соседей. Видно, что вблизи точки  $r = 0.5$  пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная (I), парамагнитная (II) и суперантиферромагнитная (III). Магнитная структура основного состояния суперантиферромагнитной фазы была нами подробно рассмотрена в работе [22]. Что же касается антиферромагнитной и парамагнитной фаз, то их магнитные структуры хорошо известны.

В данной работе нами рассматривались переходы из антиферромагнитной фазы в парамагнитную и из суперантиферромагнитной фазы в парамагнитную. Переход из антиферромагнитной фазы в суперантиферромагнитную нами не рассматривался. Мы предполагаем, что на границе этих фаз имеется область их сосуществования.

Из диаграммы мы видим, что в интервале значений  $0.0 \leq r \leq 0.5$  переход из фазы I в фазу II является ФП второго рода (темные кружки на графике). Аналогичная картина наблюдается и для значений  $r = 0.9$  и  $1.0$ , при которых в системе происходит переход из фазы III в фазу II. В интервале  $0.6 \leq r \leq 0.8$ , где имеет место переход из фазы III в фазу II, наблюдается ФП первого рода (светлые кружки на графике).

Для более подробного анализа рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК [35, 36]. Указанный метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП этим методом подробно описана нами в работе [37].

Результаты нашей работы показывают, что переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является ФП второго рода. Это продемонстрировано на рис. 4. На этом рисунке представлены гистограм-

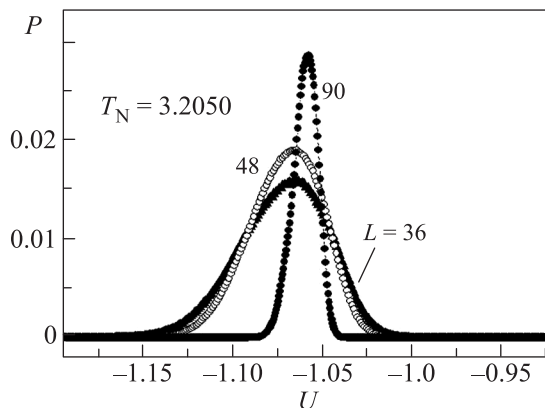


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.3$  при различных  $L$

мы распределения энергии для систем с линейными размерами  $L = 36, 48$  и  $90$  для случая  $r = 0.3$ . Графики построены вблизи критической температуры. Из рис. 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, то мы обнаружили, что в интервале значений  $0.6 \leq r \leq 0.8$  наблюдается ФП первого рода. Это показано на рис. 5, 6 и 7. На этих рисунках представлены гистограммы распределения энергии для случаев  $r = 0.6, 0.7$  и  $0.8$  при различных линейных размерах  $L$ . Видно, что на зависимостях вероятности  $P(U)$  от энергии  $U$  для всех линей-

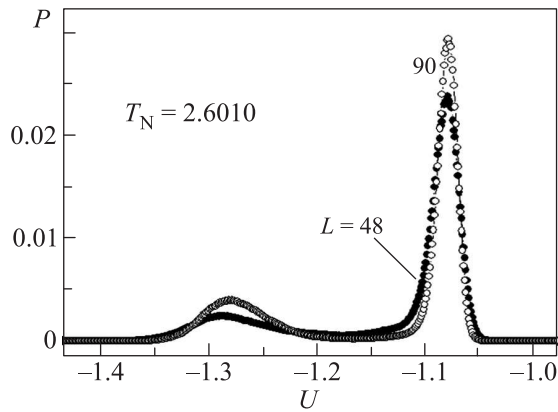


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.6$  при различных  $L$

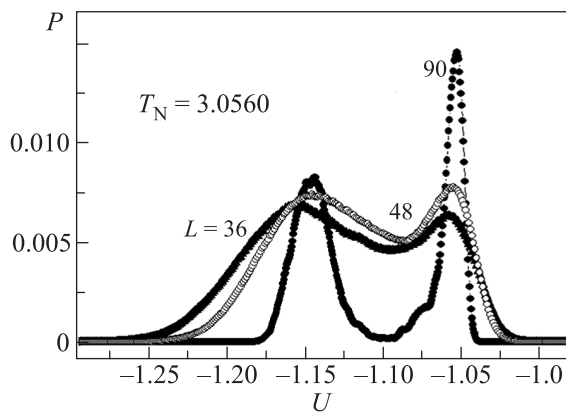


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.7$  при различных  $L$

ных размеров наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые растут с увеличением линейных размеров системы. Наличие двойного максимума на гистограмме распределения энергии является доста-

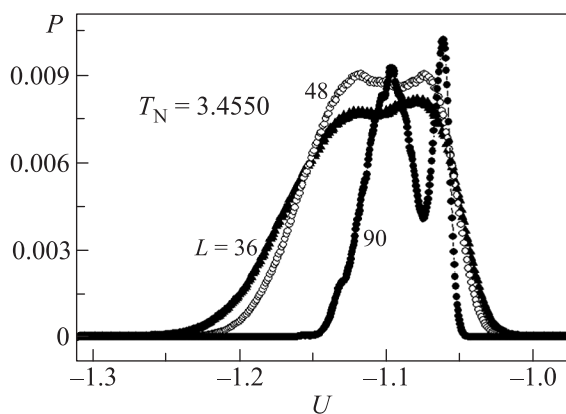


Рис. 7. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.8$  при различных  $L$

точным условием для ФП первого рода. Для значения  $r = 0.9$  имеет место ФП второго рода. Об этом свидетельствует один пик, который наблюдается на зависимости  $P(U)$  на рис. 8.

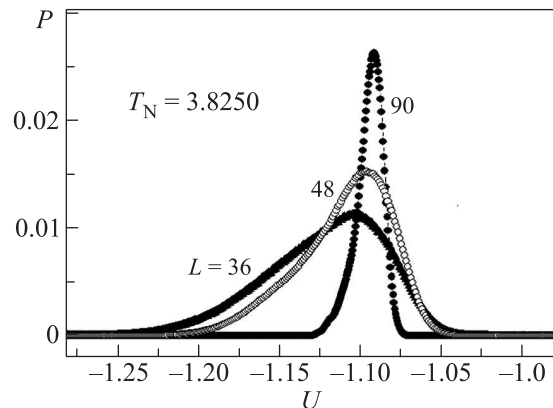


Рис. 8. Гистограмма распределения энергии для  $r = 0.9$  при различных  $L$

Из анализа наших данных следует, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев при определенных величинах взаимодействия приводит к смене ФП.

**4. Заключение.** В настоящей работе исследование фазовых переходов трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей в диапазоне значений  $0.0 \leq r < 1.0$  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 в интервале  $0.0 \leq r \leq 0.5$ , а также при значении  $r = 0.9$  наблюдается фазовый переход второго рода, а в интервале  $0.6 \leq r \leq 0.8$  – первого рода.

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. А. 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. Бадилов, ФНТ **37**, 1258 (2011).
6. М. 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. F. A. Kassan-Ogly, A. K. Murtazaev, A. K. Zhuravlev, M. K. Ramazanov, and A. I. Proshkin, J. Mag. Mag. Mater. **384**, 247 (2015).
21. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
22. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
23. A. R. dos Anjos, J. R. Viana, J. R. de Sousa, and J. A. Plascak, Phys. Rev. E **76**, 022103 (2007).
24. 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).
25. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **56**, 474 (1987).
26. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jap. **61**, 1299 (1992).
27. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
28. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ФТТ **52**, 1157 (2010).
29. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, ФТТ **53**, 1004 (2011).
30. A. K. Murtazaev, M. K. Ramazanov, and M. K. Badiev, Physica B: Cond. Mat. **476**, 1 (2015).
31. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, Д. Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
32. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
33. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **132**, 1152 (2007).
34. К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, М. (1995).
35. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
36. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
37. М. К. Рамазанов, Письма в ЖЭТФ **94**, 335 (2011).