

Фазовая диаграмма и структура основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке

А. К. Муртазаев⁺*, М. А. Магомедов⁺*, М. К. Рамазанов⁺¹⁾

⁺Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003 Махачкала, Россия

* Дагестанский государственный университет, 367025 Махачкала, Россия

Поступила в редакцию 21 декабря 2017 г.

После переработки 29 декабря 2017 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и структуры основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих ближайших соседей. Впервые получены все возможные магнитные структуры основного состояния в зависимости от соотношений обменных взаимодействий r . Показано, что в зависимости от величины r в системе возможно 6 различных упорядочений в основном состоянии. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. Впервые на диаграмме обнаружена узкая область ($2/3 < r \leq 0.75$), где переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является переходом первого рода. Показано, что при значении $r = 2/3$ конкуренция обменных взаимодействий не приводит к возникновению фрустрации и вырождению основного состояния.

DOI: 10.7868/S0370274X18040112

1. Введение. Исследование фазовых переходов (ФП), магнитных, термодинамических и критических свойств, а также структуры основного состояния в спиновых системах с конкурирующим обменным взаимодействием является одной из центральных задач в современной физике конденсированного состояния [1–4]. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к фрустрации. Известно, что наличие фрустраций в системе приводит к существенному изменению ряда свойств фундаментального характера [5–9], связанных с характером ФП, формированием классов универсальности магнитного и кирального критического поведения, структуры основного состояния и др. Кроме того, учет антиферромагнитных взаимодействий следующих ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга приводит к вырождению основного состояния, появлению различных фаз, ФП и аномалий критических свойств [10].

В данной работе нами предпринята попытка на основе метода Монте-Карло (МК) провести исследование ФП и структуры основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаи-

модействий ближайших и следующих за ближайшими соседями.

Исследование этой модели проведено теоретическими и численными методами в работах [11–18]. Результаты теоретических исследований, полученные в [12, 13] свидетельствуют, что для модели Изинга на простой кубической и в объемно-центрированной кубической решетках имеет место ФП второго рода. Аналогичные результаты получены и в [14–16]. Согласно результатам работ [15, 16] переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную является ФП второго рода, а переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную является ФП первого рода. Из этих данных следует, что учет взаимодействий следующих ближайших соседей в системе может привести к смене ФП.

В более поздних работах [17, 18] методом МК были выполнены исследования ФП и критического поведения данной модели. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. На диаграмме была обнаружена точка пересечения трех различных фаз. В [18] было показано, что данная модель имеет некоторые особенности критического поведения вблизи этой точки. Согласно результатам перечисленных работ, целесообразно более

¹⁾e-mail: sheikh77@mail.ru

подробно исследовать особенности, наблюдающиеся для этой модели вблизи точки пересечения трех различных фаз. Такие особенности могут быть связаны со структурой основного состояния, которая до сих пор является малоизученной.

Поэтому в данной работе нами предпринята попытка исследовать ФП вблизи точки пересечения трех различных фаз и магнитных структур основного состояния для всего интервала значений величины взаимодействия следующих ближайших соседей этой модели. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных со структурой основного состояния, с характером и природой ФП спиновых систем с конкурирующими обменными взаимодействиями.

2. Модель и метод исследования. Антиферромагнитная модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий ближайших и следующих за ближайшими соседями описывается гамильтонианом:

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

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин. Первый член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей величиной $J_1 < 0$, а второй – следующих за ближайшими соседями $J_2 < 0$; $r = J_2/J_1$ – величина взаимодействия следующих за ближайшими соседями. Схематически эта модель представлена на рис. 1, на котором цифрами 1–4 указаны все подрешетки системы.

Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы на сегодняшний день могут быть изучены методами Монте-Карло [19–23]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одними из наиболее эффективных для исследования подобных систем являются репличный обменный алгоритм метода МК [20, 24, 25] и алгоритм Ванга–Ландау [26, 27], особенно в низкотемпературной области. Поэтому нами в данном исследовании были использованы оба алгоритма.

В стандартный алгоритм Ванга–Ландау нами было внесено дополнение, которое позволяет выяснить магнитную структуру основного состояния системы. Каждый раз при достижении энергетического минимума мы проводили анализ магнитной структуры основного состояния и его запись в графический файл. При этом происходит сравнение полученной конфигурации с ранее полученными и только при обнаружении новой уникальной конфигурации ее сохра-

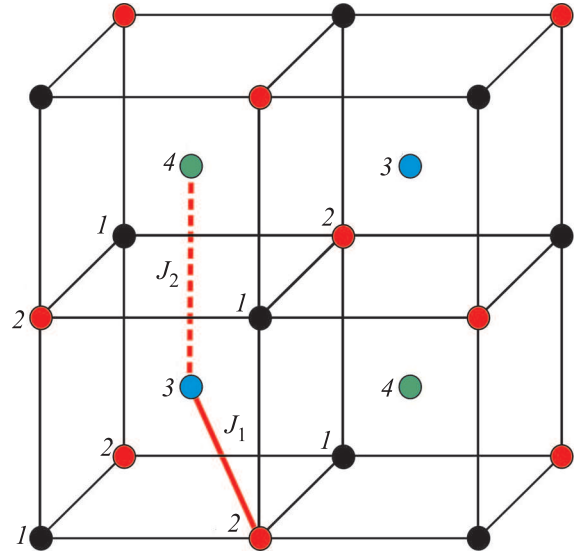


Рис. 1. (Цветной онлайн) ОЦК-решетка. Цифрами обозначены четыре подрешетки

няют в графический файл. Затем данная структура заносится в специальную базу данных для этой модели для дальнейшего сравнения. Указанная процедура позволяет избежать дублирования в графических файлах многократно встречающихся состояний с одинаковой магнитной структурой. Таким образом, если основное состояние не вырождено, то в базе данных в конце процесса моделирования окажутся две магнитные конфигурации (с учетом симметрии модели Изинга относительно одновременного отражения всех спинов на решетке). Для систем, имеющих сильно вырожденное основное состояние (особенно для фрустрированных систем), количество таких конфигураций может быть достаточно большим, поэтому для экономии дискового пространства в графических файлах будут сохранены не более 1000 конфигураций. Более подробно эти алгоритмы описаны нами в работах [20, 26].

Расчеты проводились для систем с периодически граничными условиями (ПГУ) и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 10 \div 80$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ шагов МК на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ шагов МК на спин.

3. Результаты моделирования. На рис. 2 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. На диаграмме видно, что

вблизи точки $r = 2/3$ пересекаются три различные фазы: AF1 – антиферромагнитная, PM – парамагнитная и AF2 – антиферромагнитная 2-го типа [15, 16].

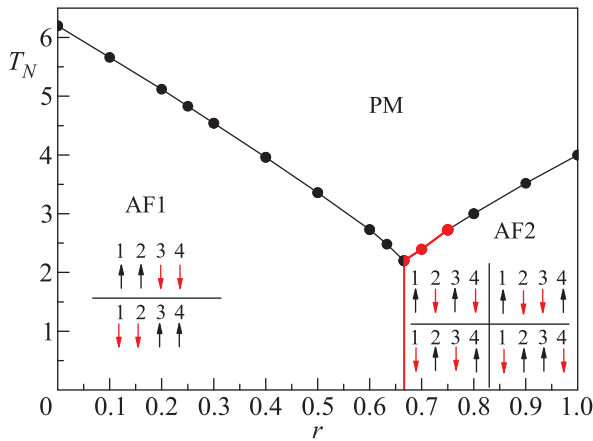


Рис. 2. (Цветной онлайн) Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей

На фазовой диаграмме черными и красными стрелками изображены направления спинов во всех подрешетках. На рис. 3 приведены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели, полученные с помощью алгоритма Ванга–Ландау. Преимущество этого алгоритма в том, что он позволяет на основе анализа плотности состояний и энергетических состояний в области основного состояния определить и графически отобразить структуру основного состояния. Цифрами 1–6 (см. рис. 3) показаны все возможные магнитные структуры основного состояния, наблюдаемые в данной модели. Как видно на диаграмме, в антиферромагнитной фазе (AF1) могут реализоваться только две структуры основного состояния (1 и 2). В антиферромагнитной фазе (AF2) реализуются четыре структуры основного состояния (3–6). Вдоль вертикальной красной линии, соответствующей значению $r = 2/3$ сосуществуют все шесть структур одновременно (1–6).

Для исследования рода ФП нами использовался гистограммный анализ данных метода МК, полученных как на основе репличного алгоритма, так и алгоритма Ванга–Ландау [28, 29]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП [30].

Результаты данной работы показывают, что в интервалах $0 \leq r \leq 0.6$ и $0.8 \leq r \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода, что полностью согласуется с данными работы [17]. Более подробное исследование интервала $2/3 \leq r \leq 0.75$ показало, что для случая $r = 2/3$ наблюдается ФП второго рода. Данный

факт продемонстрирован на рис. 4, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$. Графики построены вблизи критической температуры. Из представленных гистограмм следует, что в зависимости вероятности $W(E/N)$ от энергии E/N для всех значений температур наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

На рис. 5 показана временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами $L = 80$ для случая $r = 2/3$. По оси X отложено количество Монте-Карло шагов на спин (NMCS). Результаты приведены для трех температур: в точке ФП, а также выше и ниже критической температуры. Данные на графике подтверждают результаты рис. 4: энергия для всех температур совершает случайные флуктуации вблизи равновесного значения, соответствующего максимуму вероятности $W(E/N)$.

На рис. 6 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$ для случая $r = 0.7$. Здесь для всех значений температур наблюдаются два хорошо выраженных максимума, которые свидетельствуют в пользу ФП первого рода. Такое же поведение наблюдается и для значения $r = 0.75$.

Данный вывод подтверждается данными, показанными на рис. 7, где приведена временная динамика изменения внутренней энергии в ходе компьютерного моделирования для системы с линейными размерами $L = 80$ для случая $r = 0.7$. Результаты также представлены для трех температур: в точке фазового перехода ($T = 2.3865$), а также выше и ниже критической температуры ($T = 2.3$ и $T = 2.6$ соответственно). Как следует из графика, в точке ФП имеются два метастабильных энергетических уровня $E_1 = -1.23565$ и $E_2 = -0.99860$. Система совершает случайные флуктуации около этих двух энергетических состояний. Энергия E_1 соответствует первому максимуму вероятности $W(E/N)$, а E_2 – второму максимуму на рис. 6. Такое поведение характерно для ФП первого рода.

Аналогичный результат для случая $r = 0.7$ был получен нами ранее в работе [18] для систем с линейными размерами $L \leq 72$. При $L = 90$ наблюдался один максимум. Видимо это связано с тем, что при исследовании систем с большими линейными размерами два пика наблюдаются только в очень узкой температурной области.

Таким образом, результаты данного исследования показывают, что на фазовой диаграмме (см.

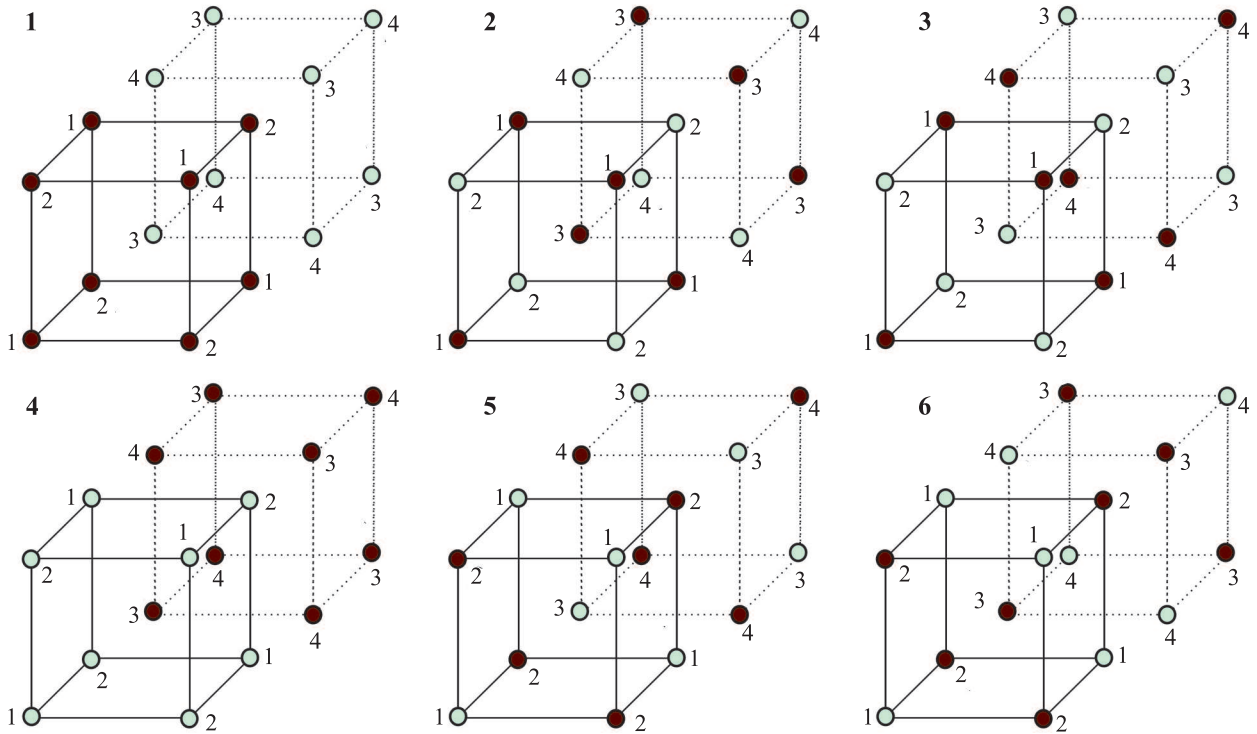


Рис. 3. (Цветной онлайн) Магнитные структуры основного состояния

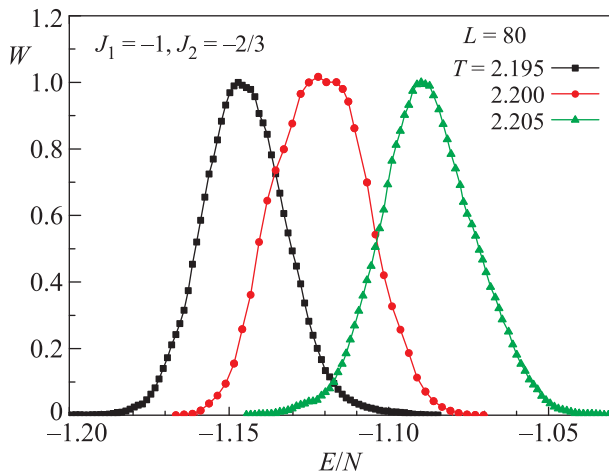


Рис. 4. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения энергии для $r = 2/3$ и $L = 80$

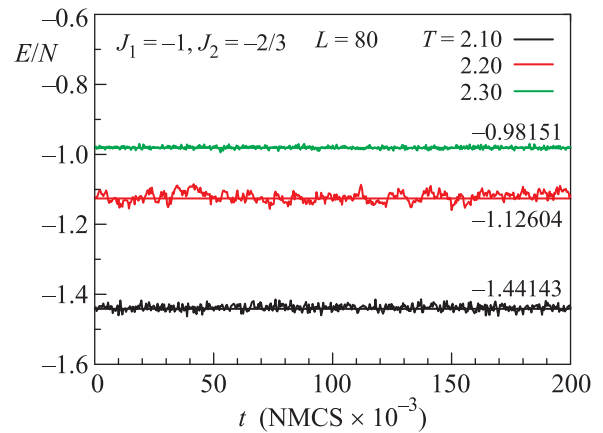


Рис. 5. (Цветной онлайн) Временная динамика внутренней энергии при различных температурах для $r = 2/3$ и $L = 80$

рис. 2) наблюдается узкая область ($2/3 < r \leq 0.75$), в которой переход реализуется как ФП первого рода.

Полученные в работе данные могут быть использованы для описания конкретных антиферромагнитных материалов, имеющих ОЦК-решетку, таких как FeCr [31], FeAl, FeCo [32] и ряда других, приведенных в работе [33].

4. Заключение. Исследование фазовых переходов и магнитной структуры основного состояния

антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия следующих ближайших соседей выполнено с использованием репличного алгоритма и алгоритма Ванга–Ландау метода Монте-Карло. Получены магнитные структуры основного состояния для исследуемой модели. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия следующих ближайших соседей. На

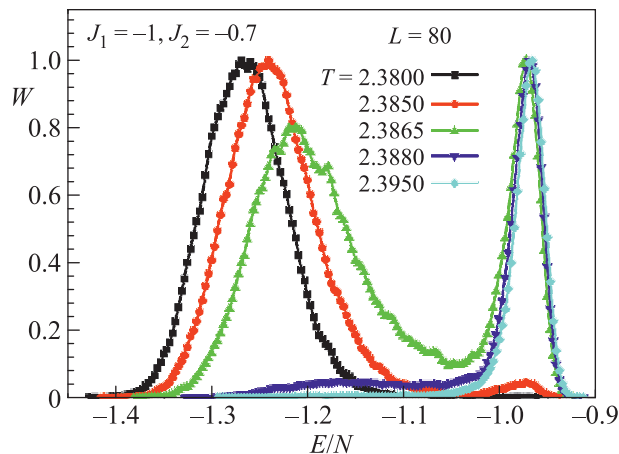


Рис. 6. (Цветной онлайн) Гистограмма распределения энергии для $r = 0.7$ и $L = 80$

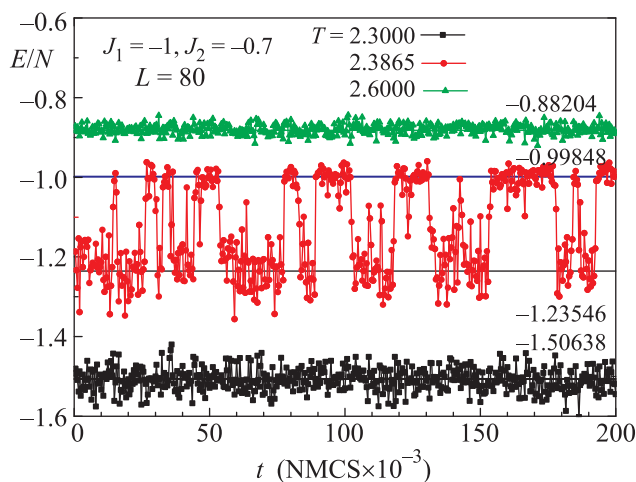


Рис. 7. (Цветной онлайн) Временная динамика внутренней энергии при различных температурах для $r = 0.7$ и $L = 80$

основе гистограммного метода анализа данных проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в интервале $2/3 < r \leq 0.75$ наблюдается фазовый переход 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. С. В. Малеев, УФН **172**, 617 (2002).

6. M. Tisser, B. Delamotte, and D. Mouhanna, Phys. Rev. Lett. **84**, 5208 (2000).
7. P. Calabrese, P. Parruccini, A. Pelissetto, and E. Vicari, Phys. Rev. B **70**, 174439-1 (2004).
8. G. Zumbach, Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
9. A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, Phys. Rev. B **63**, 140414(R) (2001).
10. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2000), p. 384.
11. P. H. Lundow, K. Markstrom, and A. Rosengren, Philosophical Magazine **89**, 2042 (2009).
12. P. Butera and M. Comi, Phys. Rev. B **65**, 144431 (2002).
13. P. Butera and M. Comi, Phys. Rev. B **72**, 014442 (2005).
14. M. Plischke and J. Oitmaa, Phys. Rev. B **19**, 487 (1979).
15. J. R. Banavar, D. Jasnow, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **20**, 3820 (1979).
16. M. J. Velgakis and M. Ferer, Phys. Rev. B **27**, 401 (1983).
17. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, Д. Р. Курбанова, ЖЭТФ **147**, 127 (2015).
18. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Д. Р. Курбанова, М. К. Бадиев, Я. К. Абуев, ФТТ **59**, 1082 (2017).
19. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **106**, 72 (2017).
20. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, Ф. А. Касан-Оглы, М. К. Бадиев, ЖЭТФ **144**, 1239 (2013).
21. A. Kalz and A. Honecker, Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
22. S. Jin, A. Sen, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).
23. S. Jin, A. Sen, W. Guo, and A. W. Sandvik, Phys. Rev. B **87**, 144406 (2013).
24. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
25. М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев, Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
26. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, and M. A. Magomedov, Solid State Comm. **233**, 35 (2016).
27. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
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. M. Yu. Lavrentiev, D. Nguyen-Manh, and S. L. Dudarev, Phys. Rev. B **81**, 184202 (2010).
32. R. Leidl and H. W. Diehl, Phys. Rev. B **57**, 1908 (1998).
33. P. Villars, K. Cenzual, and R. Gladyshevskii, *Handbook of inorganic substances*, Berlin (2017), p. 1955.