10,11,05

Компьютерное моделирование фазовых переходов и критических свойств фрустрированной модели Гейзенберга на кубической решетке

© М.К. Рамазанов [1,2], А.К. Муртазаев [1,2]

[1] Институт физики ДФИЦ РАН,
Махачкала, Россия
[2] Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН,
Махачкала, Россия
E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в Редакцию 30 декабря 2019 г.
В окончательной редакции 30 декабря 2019 г.
Принята к публикации 10 января 2020 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Рассмотрен диапазон значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей $0.0 \le r \ge 1.0$. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что в рассмотренном интервале значений r наблюдается фазовый переход второго рода. Используя теорию конечно-размерного скейлинга, рассчитаны значения всех основных статических критических индексов. Показано, что класс универсальности критического поведения этой модели сохраняется в диапазоне значений $0.0 \ge r \ge 0.4$.

Ключевые слова: фрустрации, фазовые переходы, метод Монте-Карло, модель Гейзенберга.

DOI: 10.21883/FTT.2020.06.49340.30M

1. Введение

В настоящее время продолжается активное исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств в спиновых системах с конкурирующим обменным взаимодействием. Конкуренция обменного взаимодействия может привести к возникновению в системе эффектов фрустрации. Наличие фрустраций в системе приводит к целому ряду изменений свойств фундаментального характера [1–4]. Спиновые системы с фрустрациями во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, сильным вырождением основного состояния и высокой чувствительности фрустрированных систем к различного рода возмущающим взаимодействиям [4,5].

В настоящее время получено достаточно большое количество интересных результатов для двумерной и трехмерной модели Изинга с конкурирующими обменными взаимодействиями на различных типах решеток [6–11]. ФП и критические свойства классической модели Гейзенберга с конкурирующими обменными взаимодействиями для трехмерного случая практически не исследованы.

В данной работе, нами на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло (МК) проведено исследование ФП и критических свойств антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей в диапазоне $0.0 \ge r \ge 1.0$, где $r = J_2/J_1$ — величина взаимодействия вторых ближайших соседей (J_1 и J_2 — константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, соответственно).

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. Кроме того, антиферромагнитная модель Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей до сих пор является малоизученной. Таким образом, исследование этой модели на основе современных методов позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП и критическими свойствами фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная модель Гейзенберга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

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

где $\mathbf{S}_i$ — трехкомпонентный единичный вектор $\mathbf{S_i} = (\mathbf{S}_i^x, \mathbf{S}_i^y, \mathbf{S}_i^z)$. 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 ($J_l < 0$). Второй член характеризует антиферромагнитное взаимодействие вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое ($J_2 < 0$).

В настоящее время ФП и критические свойства фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [12–18]. 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 [19], который является наиболее мощным и эффективным инструментом для исследования фрустрированных спиновых систем.

3. Результаты моделирования

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 24{-}60$. 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 $\tau == 500\tau_0$ МК шагов/спин.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости C и восприимчивости chi использовались выражения [20]:

$$C = (NK^2)\left(\langle U^2\rangle - \langle\rangle^2\right), \qquad (2)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK)\left(\langle m^2\rangle - \langle|m|\rangle^2\right), & T < T_N \\ (NK)\langle m^2\rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \qquad (3)$$

где $K = |J_1|/k_BT$, N — число частиц, T_N — критическая температура, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка (U и m являются нормированными величинами).

Расчет параметра порядка системы m был выполнен на основе выражения вида:

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

$$m^a = [m_1 + m_2 - (M_3 + m_4)]/4, \qquad (5)$$

$$m^b = [m_1 + m_4 - (m_2 + m_3)]/4, \qquad (6)$$

$$m = \sqrt{(m^a)^2 + (m^b)^2}. \qquad (7)$$

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

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости параметра порядка при $L = 30$ для различных значений r (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символ, использованных для

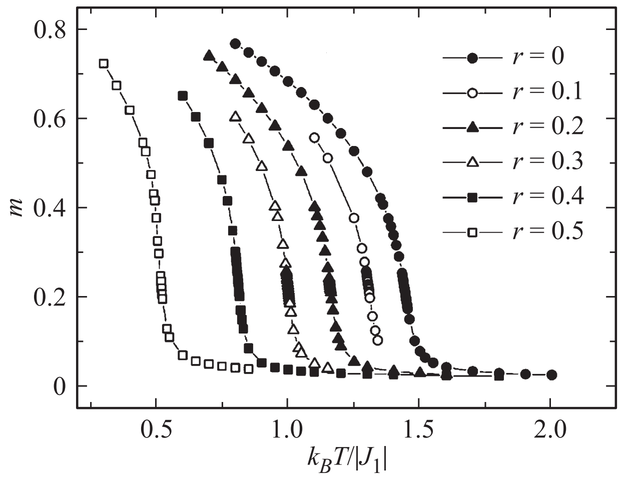

Рис. 1. Зависимость параметра порядка m от температуры $k_BT/|J_1|$ для значений r в интервале $0 \leq r \leq 0.5$.

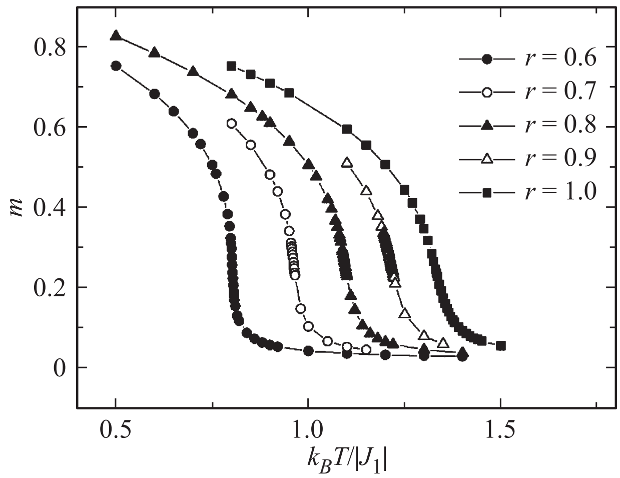

Рис. 2. Зависимость параметра порядка m от температуры $k_BT/|J_1|$ для значений r в интервале $0.6 \leq r \leq 1.0$.

построения зависимостей). Отметим, что с увеличением значения r в интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$ спад параметра порядка сдвигается в сторону более низких температур. В интервале $0.6 \leq r \leq 1.0$, мы наблюдаем противоположную картину. С увеличением r от 0.6 до 1.0 спад параметра порядка смещается в сторону более высоких температур.

На рис. 3 и 4 представлены температурные зависимости восприимчивости, полученные при $L = 30$ для различных значений r. Отметим, что увеличение значения r в интервале $0.0 \leq r \leq 0.5$ сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов восприимчивости. Рост абсолютных значений максимумов происходит за счет конкуренции первых и вторых ближайших соседей. В случае, когда $0.6 \leq r \leq 1.0$, наблюдаем противоположную картину. С увеличением r от 0.6 до 1.0 наблюдается спад

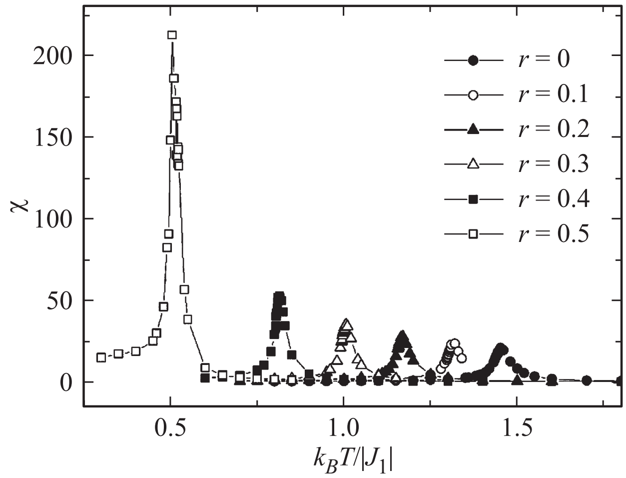

Рис. 3. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_BT/|J_1|$ для значений r в интервале $0 \le r \le 0.5$.

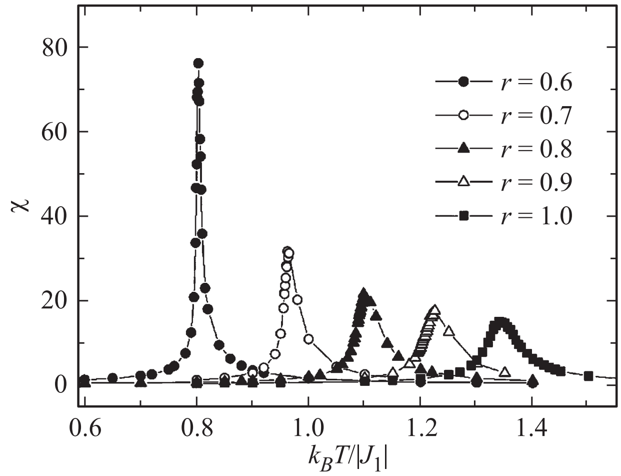

Рис. 4. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_BT/|J_1|$ для значений r в интервале $0.6 \le r \le 1.0$.

абсолютных значений максимумов восприимчивости и максимумы смещаются в сторону более высоких температур.

Увеличение взаимодействия вторых ближайших соседей в этом интервале, приводит к увеличению энергии взаимодействия по модулю, что укрепляет жесткость системы и соответственно повышается температура фазового перехода.

Для определения критической температуры T_N, нами использовался метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка [21]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle_L^2}, \tag{8}$$

Согласно теории конечноразмерного скейлинга точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой [21]. Выражение (8) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью.

На рис. 5 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $r = 0.7$ для разных значений L. Рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 0.963$; здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$). Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r.

На рис. 6 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. Как было показано в работе [22], для всех рассматриваемых значений r наблюдаются ФП второго рода.

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α, параметра порядка β, восприимчивости γ и радиуса корреляции ν применялись соотношения теории конечно-размерного скейлинга. Из теории конечно-

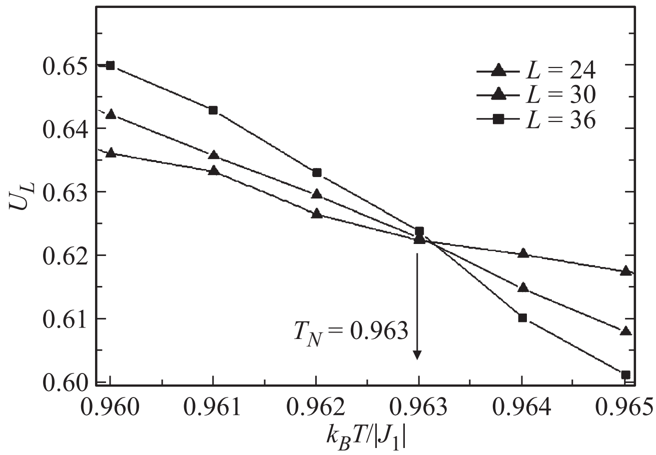

Рис. 5. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_BT/|J_1|$ для $r = 0.7$ при различных L.

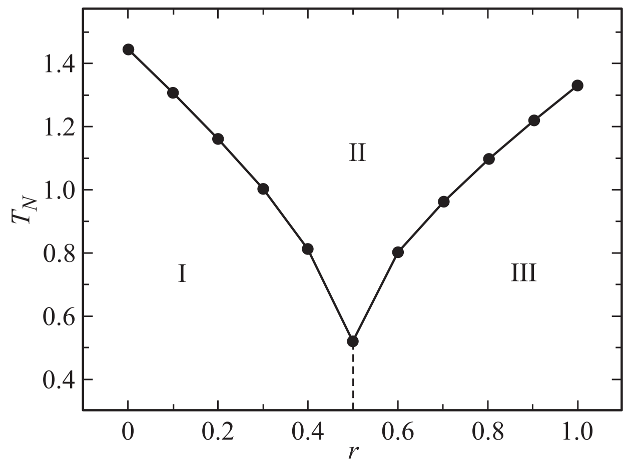

Рис. 6. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

Значения коиьических параметров для антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке

r	k_BT_N $\|J_1\|$	ν	α	β	γ	η	$\alpha+2\beta+\gamma=2$
Нефрустрированная модель Гейзенберга [22]	1.443(1)	0.7112(5)	−0.01336(15)	0.3689(3)	1.3960(9)	0.0375(5)	2
0.0	1.443(1)	0.712(5)	−0.134(5)	0.366(5)	1.393(5)	0.036(5)	2
0.1	0.307(1)	0.710(5)	−0.132(5)	0.364(5)	1.390(5)	0.032(5)	1.98
0.2	1.160(1)	0.711(5)	−0.133(5)	0.362(5)	0.392(5)	1.034(5)	1.98
0.3	1.000(1)	0.713(5)	−0.136(5)	0.365(5)	1.391(5)	0.033(5)	1.99
0.4	0.811(1)	0.712(5)	−0.133(5)	0.363(5)	1.393(5)	0.035(5)	1.99
0.6	0.802(1)	0.650(5)	0.161(5)	0.295()5	1.259(5)	0.06(2)	2.01
0.7	0.963(1)	0.648(5)	0.163(5)	0.293(5)	1.256(5)	0.05(2)	2
0.8	1.096(1)	1.647(5)	0.162(5)	0.291(5)	1.258(5)	0.05(2)	2
0.9	1.219(1)	0.651(5)	0.164(5)	0.292(5)	1.257(5)	0.07(2)	2.01
1.0	1.332(1)	0.649(5)	0.165(5)	0.295(5)	1.259(5)	0.06(2)	2.01

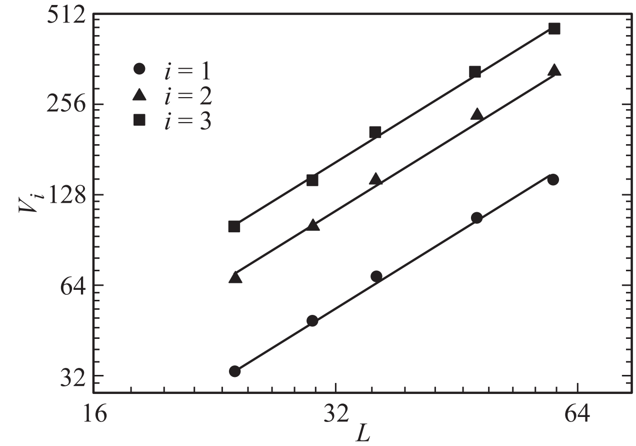

Рис. 7. Зависимость параметра V_i от линейных размеров системы L при $T=T_N$ для $r=0.7$.

размерного скейлинга следует, что в системе с размерами $L\times L\times L$ при $k_BT/|J_1|=k_BT_N/|J_1|$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения [23–25]:

$$m\sim L^{-\beta/\nu}, \tag{9}$$

$$\chi\sim L^{\gamma/\nu}, \tag{10}$$

$$V_i\sim L^{1/\nu}g_{V_i}, \tag{11}$$

где g_{V_i} — постоянная, а в качестве V_i могут выступать

$$V_i=\frac{\langle m^iE\rangle}{\langle m^i\rangle}-\langle E\rangle, \qquad (i=1,\ 2,\ 3). \tag{12}$$

Эти выражения были нами использованы для определения значений критических индексов β, γ и ν.

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используется выражение [6]:

$$C_{\max}(L)=A_1-A_2L^{\alpha/\nu}, \tag{13}$$

где A_1 и A_2 — некоторые коэффициенты.

На рис. 7 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости параметров V_i при $i=1,2,3$ от линейных размеров решетки L для $r=0.7$. Как видно из рисунка все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Зависимости на рисунке, проведенные в соответствии с методом наименьших квадратов, параллельны друг другу. Угол наклона прямой определяет значение $1/\nu$. Вычисленное таким образом значение ν использовалось для определения критических индексов теплоемкости α, параметра порядка β и восприимчивости γ.

На рис. 8 и 9 в двойном логарифмическом масштабе представлены характерные зависимости магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L для $r=0.7$. Все точки в пределах погрешности ложатся на прямые. Углы наклона этих прямых определяют значения β/ν и γ/ν. По этой схеме было определено значение и для теплоемкости α/ν. Имея данные по ν, вычислялись статические критические индексы α, β и γ.

Эта процедура использовалась для расчета критических индексов для всех рассмотренных значений r. Все значения статических критических индексов, полученные таким образом, представлены в таблице. Процедура, использованная нами для определения индекса Фишера η более подробно изложена в работе [26]. Данные, полученные нами для индекса Фишера η также представлены в таблице.

Отметим, что для значения $r=0.5$ рассчитать критические индексы с допустимой погрешностью не удалось. Предполагаем, что это связано с тем, что в этой точке сосуществуют три различные фазы.

Как видно в таблице, критическая температура $k_BT_N/|J_1|$ уменьшается с увеличением величины взаимодействия вторых ближайших соседей вплоть до значения $r=0.6$. При дальнейшем увеличении r критическая температура начинает расти. Все значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале $0.0\le r\le 0.4$, в пределах погрешности совпадают со значениями кри-

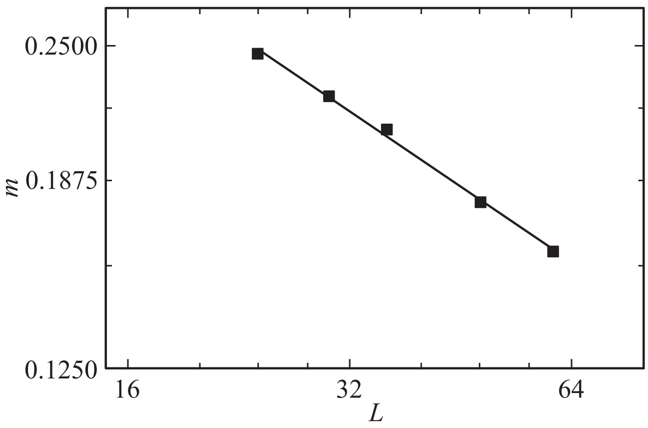

Рис. 8. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $r = 0.7$.

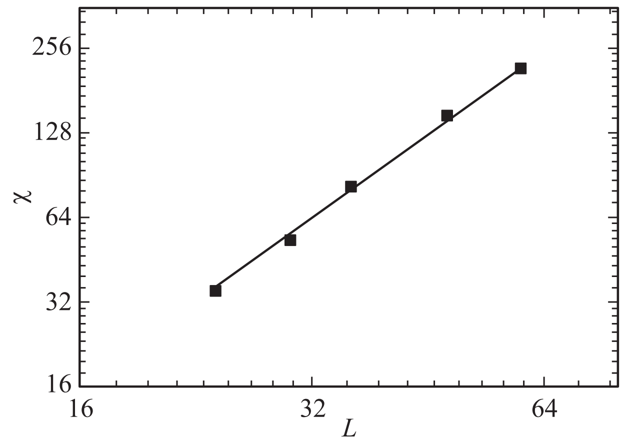

Рис. 9. Зависимость восприимчивости χ от линейных размеров системы L при $T = T_N$ для $r = 0.7$.

тических индексов трехмерной нефрустрированной модели Гейзенберга [27]. Это свидетельствует о принадлежности данной модели в интервале $0.0 \le r \le 0.4$ к тому же классу универсальности критического поведения, что и нефрустрированная модель Гейзенберга. Значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале $0.6 \le r \le 1.0$ сильно отличаются от данных, полученных в интервале $0.0 \le r \le 0.4$. Можно предположить, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев решетки для антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке приводит к смене класса универсальности критического поведения.

4. Заключение

Исследование фазовых переходов и критического поведения антиферромагнитной модели Гейзенберга на кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей внутри слоев решетки выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Определены значения критических температур и рассчитаны значения всех основных статических критических индексов в интервале $0.0 \le r \le 1.0$. Установлены закономерности изменения критических параметров в рассмотренном интервале r. Обнаружено, что в интервале $0.0 \le r \le 0.4$ система проявляет универсальное критическое поведение. Показано, что в рассматриваемой модели в интервале $0.6 \le r \le 1.0$ наблюдается другое критическое поведение.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научных проектов № 19-02-00153-а и 18-32-20098-мол-а-вед.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Вик.С. Доценко. УФН **165**, 481 (1995).
[2] С.Е. Коршунов. УФН **176**, 233 (2006).
[3] С.В. Малеев. УФН **172**, 617 (2002).
[4] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Solid State Comm. **233**, 35 (2016).
[5] D.P. Landau, K. Binder. Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, Cambridge (2000). P. 384.
[6] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФНТ **37**, 1258 (2011).
[7] A. Kalz, A. Honecker. Phys. Rev. B **86**, 134410 (2012).
[8] S. Jin, A. Sen, A.W. Sandvik. Phys. Rev. Lett. **108**, 045702 (2012).
[9] S. Jin, A. Sen, W. Guo, A.W. Sandvik. Phys. Rev. B **87**, 144406 (2013).
[10] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **101**, 793 (2015).
[11] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **103**, 522 (2016).
[12] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, D.R. Kurbanova, M.A. Magomedov, K.Sh. Murtazaev. Mater. Lett. **236**, 669 (2019).
[13] A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, M.K. Badiev. Physica A **507**, 210 (2018).
[14] M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov. Physica A **521**, 543 (2019).
[15] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Мазагаева, М.А. Магомедов. ЖЭТФ **156**, 502 (2019).
[16] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.К. Бадиев. ФТТ **60**, 1162 (2018).
[17] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Д.Р. Курбанова, М.А. Магомедов, М.К. Бадиев, М.К. Мазагаева. ФТТ **61**, 1170 (2019).

[18] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев. ФТТ **61**, 1898 (2019).
[19] A. Mitsutake, Y. Sugita, Y. Okamoto. Biopolymers (Peptide Science) **60**, 96 (2001).
[20] K. Binder, J.-Sh. Wang. J. Status. Phys. **55**, 87 (1989).
[21] K. Binder, D.W. Heermann. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. Springer_Verlag, Berlin (1988); Nauka, M. (1995). P. 214.
[22] М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 610 (2019).
[23] A.E. Ferdinand, M.E. Fisher. Phys. Rev. **185**, 832 (1969).
[24] M.E. Fisher, M.N. Barber. Phys. Rev. Lett. **28**, 1516 (1972).
[25] P. Peczak, A.M. Ferrenberg, D.P. Landau. Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
[26] А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов. ФТТ **59**, 1797 (2017).
[27] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto. Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).

Редактор Т.Н. Василевская