

Фазовые переходы в модели Изинга на треугольной решетке с различными значениями межслойного обменного взаимодействия

А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, М.К. Бадиев

Институт физики ДНЦ РАН, ул. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия

E-mail: m_zagir@mail.ru

Статья поступила в редакцию 27 июня 2019 г., опубликована онлайн 25 октября 2019 г.

Методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке при различных значениях межслойного обменного взаимодействия. Исследования проведены для соотношений величин внутрислоевого J_1 и межслоевого J_2 обменных взаимодействий в диапазоне значений $r = J_2/J_1 = 0,01-1,0$. Используя метод кумулянтов Биндера четвертого порядка и гистограммный анализ данных, проведен анализ характера фазовых переходов. Показано, что в рассмотренном интервале r переход из неупорядоченной фазы в упорядоченную является фазовым переходом второго рода.

Ключевые слова: фрустрации, метод Монте-Карло, модель Изинга, фазовый переход.

1. Введение

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических явлений в спиновых системах с конкурирующим взаимодействием традиционно привлекает активное внимание исследователей [1–6].

Для изучения закономерностей ФП в таких системах весьма удобными оказались модели теории магнетизма. Для описания магнитных систем существует множество моделей. Одна из них — модель Изинга, которая была использована для исследования свойств ферромагнетиков. Изинг доказал, что в одномерной линейной цепочке спинов, связанных взаимодействием с ближайшими соседями, ФП не существует [7]. Двумерная антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке — относительно простая геометрическая фрустрированная модель. В данной модели, где взаимодействие ограничено только ближайшими соседями, спиновое упорядочение сильно подавлено из-за эффектов фрустрации. В результате в данной системе ФП отсутствует при любой конечной температуре [8–10]. Учет взаимодействий вторых ближайших соседей в этой модели играет существенную роль, вызывая различные виды дальнего порядка в зависимости от знака взаимодействия вторых ближайших соседей [11].

Теоретические и численные исследования трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке в значительной степени согласо-

ются с критическими свойствами, характеризующими высокотемпературные ФП. Однако результаты теоретических исследований, полученные ранее, оказались спорными. В теории Ландау–Гинзбурга–Вильсона предложено 3D XY-поведение наблюдаемого магнитного ФП [5,12]. Позже результаты моделирования методом Монте-Карло (МК) дали результаты, характерные для трикритического поведения [13]. Более поздние исследования с использованием гистограммного метода МК и теории конечно-размерного скейлинга получили набор критических индексов, которые отличаются от трикритического поведения и опять-таки довольно близкие к 3D XY-модели [14,15].

В работе [16] изучены упорядоченные фазы и ФП в модели Изинга на слоистой треугольной решетке с сильным межслоевым взаимодействием. Эта модель может быть использована для описания соединений CsCoCl₃ и CsCoBr₃. Низкотемпературная фаза этих соединений представляет собой так называемую двух-подрешеточную ферримагнитную фазу. Вычисления, проведенные для них в рамках приближения среднего поля [17], а также кластерным вариационным методом [18], показывают, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток неупорядочена.

Вместе с тем, результаты метода МК показывают, что такие частично неупорядоченные состояния описываются модой со случайно изменяющейся в пространстве и во времени фазой [19,20]. Данными ре-

зультатами можно объяснить наблюдаемые заметные флуктуации магнитной структуры во времени [21].

Результаты МК моделирования изинговского антиферромагнетика с учетом антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей указывают на существование ФП первого рода между низкотемпературной двухподрешеточной антиферромагнитной фазой и высокотемпературной парамагнитной фазой. Этот сценарий отличается от того, который наблюдается, когда взаимодействия первых ближайших соседей являются ферромагнитным. Для такого случая в изолированных слоях фаза Березинского–Костерлица–Таулесса возникает при промежуточной температуре между трехподрешеточной ферромагнитной фазой при низкой температуре и парамагнитной фазой при высокой температуре [22].

На сегодняшний день остаются спорными некоторые вопросы, связанные с влиянием величины межслойного обменного взаимодействия на ФП изинговских антиферромагнетиков. В связи с этим в данной работе предпринята попытка исследовать природу ФП антиферромагнетика в модели Изинга на слоистой треугольной решетке с различными значениями межслойного обменного взаимодействия.

Многие физические свойства фрустрированных систем могут зависеть от величины межслойного обменного взаимодействия. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

2. Модель и метод исследования

Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке описывается гамильтонианом

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i S_j) - J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i S_l) - J_3 \sum_{\langle i,k \rangle} (S_i S_k), \quad (1)$$

где $S_{i,l,k} = \pm 1$ — изинговский спин, $J_1 < 0$, $J_2 < 0$ и $J_3 > 0$ — константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие между ближайшими соседями, которое берется одинаковым внутри слоя, второй член — межслойное антиферромагнитное взаимодействие и третий член — ферромагнитное взаимодействие вторых ближайших соседей внутри слоев. При расчете принимаем, что $|J_1| = |J_3| = 1$ и меняем значение J_2 . $r = J_2/J_1$ — соотношение межслоевого и внутрислоевого обменов. Все параметры приводятся в безразмерных величинах. В данной работе рассматривается интервал $0,01 < r \leq 1,0$.

В настоящее время такие системы на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются на

основе метода МК [23–30]. В последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одним из наиболее эффективных для исследования подобных систем — алгоритм Ванга–Ландау и репличный обменный алгоритм метода МК [26,27,30]. В данном исследовании были использованы эти алгоритмы.

3. Результаты моделирования

Расчеты проведены для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L \times L$ ($L = 18–90$), где L — количество элементарных ячеек. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекается участок длиной $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$ МК шагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин выполняли вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500\tau_0$ МК шагов/спин.

На рис. 1 показана магнитная структура основного состояния исследуемой модели, полученная для соседних слоев с помощью алгоритма Ванга–Ландау метода МК. Преимущество этого алгоритма в том, что он позволяет на основе анализа плотности и энергии состояний определить и графически отобразить структуру основного состояния. Более подробно эта процедура описана нами в работе [30]. Структура упорядоченной фазы образована чередованием структур, представленных на рис. 1(а) и (б).

Параметр порядка системы m вычислялся из выражения [23]

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle / 3}, \quad (2)$$

где M_A , M_B и M_C — намагниченности трех подрешеток.

Температурные зависимости теплоемкости C и восприимчивости χ имеют вид [23]

$$C = (NK^2) \left(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2 \right), \quad (3)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK) \left(\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 \right), & T < T_N \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (4)$$

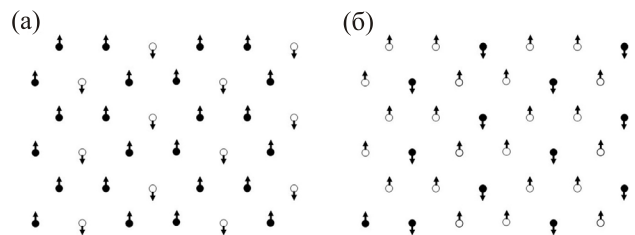


Рис. 1. Магнитная структура основного состояния.

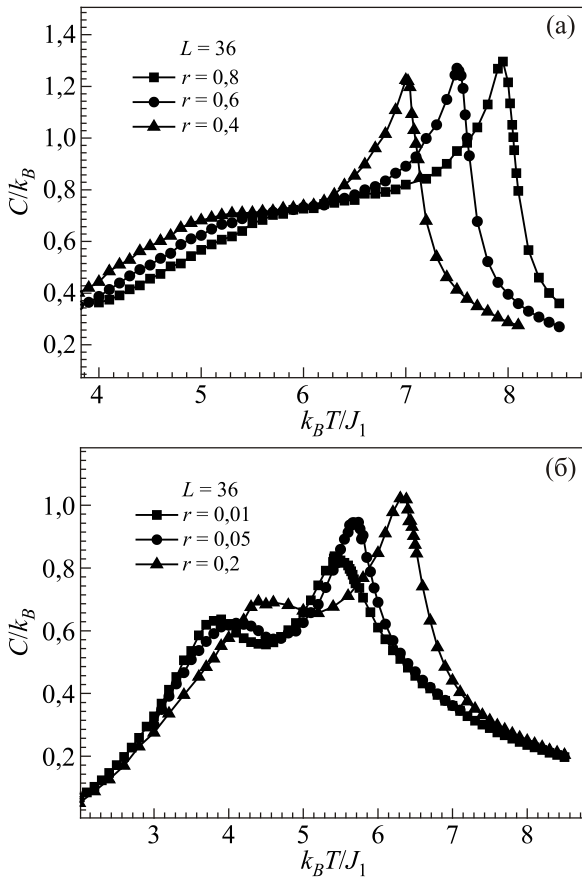


Рис. 2. Зависимости теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J_1|$ для $r = 0,4; 0,6; 0,8$ (а) и $r = 0,01; 0,05; 0,2$ (б).

где $K = |J_1|/k_B T$, N — число частиц, T_N — критическая температура, U — внутренняя энергия (U и m — нормированные величины).

На рис. 2 представлены температурные зависимости теплоемкости, полученные для $L = 36$ при различных значениях r (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). На зависимостях теплоемкости от температуры для всех значений r вблизи критической температуры наблюдается хорошо выраженный максимум. В низкотемпературной области наблюдаем наличие второго максимума. На рис. 2(б) видно, что при уменьшении величины межслойного обменного взаимодействия низкотемпературные максимумы становятся более ярко выраженными. Это обусловлено тем, что в низкотемпературной фазе одна подрешетка полностью упорядочена, а две подрешетки частично упорядочены. В промежуточной фазе две подрешетки упорядочены полностью, а одна не упорядочена. Таким образом, увеличение значения r приводит к сдвигу

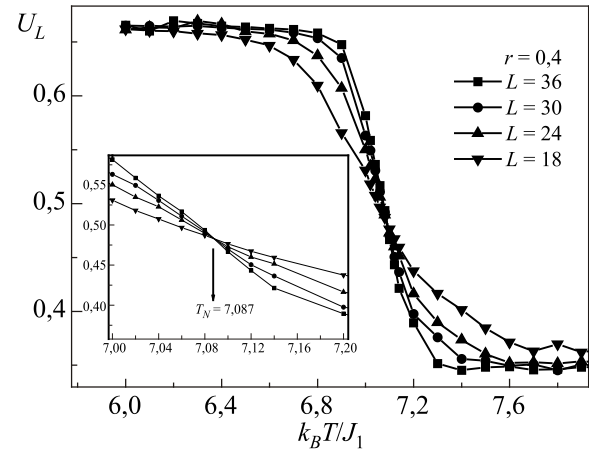


Рис. 3. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J_1|$ для $r = 0,4$ при различных L .

обоих максимумов в область более высоких температур. Одновременно с этим наблюдается рост абсолютного значения высокотемпературного максимума теплоемкости. Физическая картина происходящего объясняется тем, что уменьшение межслойного взаимодействия приводит к уменьшению вклада энергии взаимодействия по модулю, что ослабляет жесткость системы и соответственно уменьшается температура ФП.

Для определения критической температуры T_N использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка, который имеет вид [31]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (5)$$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга, точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой. Выражение (5) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [31]. Следует отметить, что применение метода кумулянтов Биндера позволяет хорошо тестировать тип ФП в системе.

На рис. 3 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $r = 0,4$ для разных значений L . Видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 7,087(1)$; здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$). Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r , которые приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения критических температур для модели Изинга на треугольной решетке при разных значениях r

| r | 0,01 | 0,05 | 0,1 | 0,2 | 0,4 | 0,6 | 0,8 | 1,0 |
|-------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| T_N | 5,420(1) | 5,751(1) | 6,066(1) | 6,465(1) | 7,087(1) | 7,585(1) | 8,031(1) | 8,427(1) |

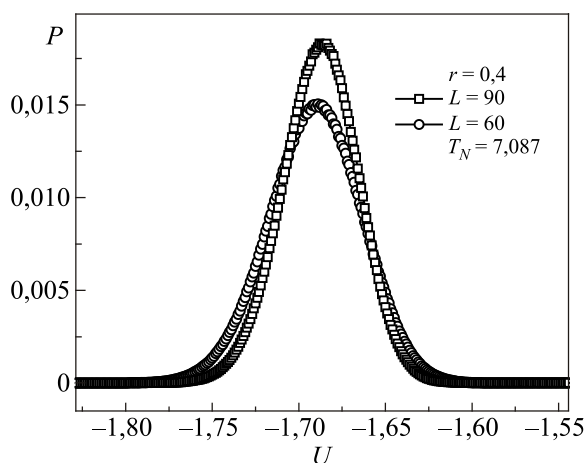


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии для $r = 0,4$ при $L = 60$ и 90 .

Для более подробного анализа рода ФП нами использован гистограммный метод анализа данных метода МК [32,33]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП. Методика определения рода ФП подробно описана в работе [34].

Результаты настоящей работы показывают, что ФП для всех рассмотренных нами значений r — переходы второго рода. Это продемонстрировано на рис. 4, где представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 60$ и 90 для $r = 0,4$. Из представленных гистограмм следует, что в зависимости вероятности P от энергии U наблюдается один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичный результат получен и для остальных значений r .

На рис. 5 приведена фазовая диаграмма, характеризующая зависимость критической температуры от величины межслоевого обменного взаимодействия: уменьшение межслоевого обменного взаимодействия между ближайшими соседями приводит к уменьшению

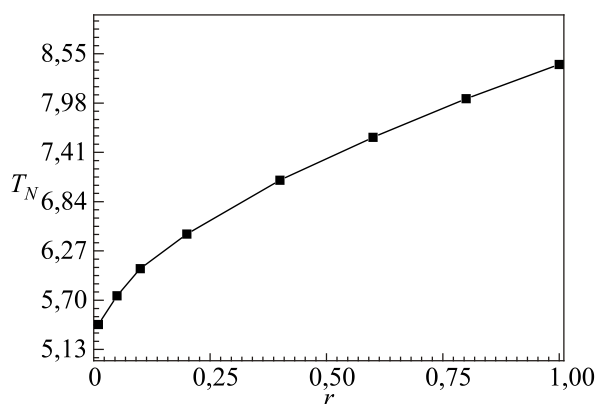


Рис. 5. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от r .

температуры ФП. Анализ данных показывает, что в рассмотренном интервале r переход из неупорядоченной фазы в упорядоченную является ФП второго рода.

Заключение

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с различными значениями межслоевого обменного взаимодействия выполнено с использованием 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 реализуется фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 19-02-00153-а, 18-32-20098-мол-а-вед и № 18-32-00391-мол-а.

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. A.N. Berker, G.S. Grest, C.M. Soukoulis, D. Blankshtein, and M. Ma, *J. Appl. Phys.* **55**, 2416 (1984).
5. D. Blankshtein, M. Ma, A.N. Berker, G.S. Grest, and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
6. S.N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **32**, 1584 (1985).
7. E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1924).
8. G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950); *Phys. Rev. B* **7**, 5017 (1973).
9. G.F. Newell, *Phys. Rev.* **79**, 876 (1950).
10. R.M.F. Houtapel, *Physica* **16**, 425 (1950).
11. J. Hose, K. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D.R. Nelson, *Phys. Rev. B* **16**, 1217 (1977).
12. G.A. Baker, Jr., B.G. Nickel, and D.I. Meiron, *Phys. Rev. B* **17**, 1365 (1978).
13. O. Heinonen and R.G. Petschek, *Phys. Rev. B* **40**, 9052 (1989).
14. M.L. Plumer, A. Mailhot, R. Ducharme, A. Caille, and H.T. Diep, *Phys. Rev. B* **47**, 14312 (1993).
15. A. Bunker, B.D. Gaulin, and C. Kallin, *Phys. Rev. B* **48**, 15861 (1993).
16. N. Todoroki and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 412 (2004).
17. H. Shiba, *Prog. Theor. Phys.* **64**, 466 (1980).
18. M. Kaburagi, T. Tonegawa, and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **51**, 3857 (1982).
19. P. Matsubara and S. Ikeda, *Phys. Rev. B* **28**, 4064 (1983).
20. P. Matsubara and S. Inawashira, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 4373 (1984).
21. H. Yoshizawa and K. Hirakawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 448 (1980).
22. E. Rastelli, S. Regina, and A. Tassi, *Phys. Rev.* **71**, 174406 (2005).

23. A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, and M.K. Badiev, *Physica A* **507**, 210 (2018).
24. A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов, Ф.А. Кассан-Оглы, Д.Р. Курбанова, *ЖЭТФ* **147**, 127 (2015).
25. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, and M.A. Magomedov, *Physica A* **521**, 543 (2019).
26. A.K. Муртазаев, М.К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 793 (2015).
27. М.К. Бадиев, А.К. Муртазаев, М.К. Рамазанов, *ЖЭТФ* **150**, 722 (2016).
28. A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, and M.K. Badiev, *Physica B: Condens. Matter* **476**, 1 (2015).
29. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, M.A. Magomedov, and M.K. Badiev, *Phase Transitions* **91**, 610 (2018).
30. A.K. Муртазаев, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 265 (2018).
31. К. Биндер, Д.В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*, Наука, Москва (1995).
32. F. Wang and D.P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
33. F. Wang and D.P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
34. М.К. Рамазанов, А.К. Муртазаев, *Письма в ЖЭТФ* **106**, 72 (2017).

Фазові переходи в моделі Ізінга на трикутній ґратці з різними значеннями міжшарової обмінної взаємодії

А.К. Муртазаєв, М.К. Рамазанов, М.К. Бадієв

Методом Монте-Карло досліджено фазові переходи та термодинамічні властивості тривимірної антиферомагнітної моделі Ізінга на шаруватій трикутній ґратці при різних зна-

ченнях міжшарової обмінної взаємодії. Дослідження проведено для співвідношень величин внутрішньшарової J_1 та міжшарової J_2 обмінних взаємодій в діапазоні значень $r = J_2/J_1 = 0,01-1,0$. Використовуючи метод кумулянтів Біндера четвертого порядку та гістограмний аналіз даних, проведено аналіз характеру фазових переходів. Показано, що в розглянутому інтервалі r перехід з неупорядкованої фази у впорядковану є фазовим переходом другого роду.

Ключові слова: фрустрації, метод Монте-Карло, модель Ізінга, фазовий перехід.

Phase transitions in the Ising model on a triangular lattice with different values of interlayer exchange interaction

A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, and M.K. Badiev

The Monte Carlo method studies of phase transitions and critical phenomena of the layered triangular antiferromagnetic Ising model with different value of the interlayer exchange interaction. Investigations were carried out for the ratios of the value of the intralayer J_1 and interlayer J_2 exchange interactions in the range of values $r = J_2/J_1 = 0.01-1.0$. The using method of Binder cumulant fourth order and histogram analysis of the data analyzes the nature of phase transitions. It is shown that in the considered interval r the transition from the disordered phase to the ordered phase is a second-order phase transition.

Keywords: frustrations, Monte Carlo method, Ising model, phase transition.