

## Критические свойства модели Изинга в магнитном поле

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

*Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук, ул. М. Ярагского, 94, Махачкала, 367003, Россия  
E-mail: m\_zagir@mail.ru*

Статья поступила в редакцию 16 января 2020 г., опубликована онлайн 26 мая 2020 г.

Репличным методом Монте-Карло исследованы фазовые переходы и критические свойства трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в интервале полей  $0 \leq h \leq 6$  реализуется фазовый переход второго рода. При увеличении магнитного поля вырождение основного состояния снимается и фазовый переход размывается. В зависимости от величины магнитного поля наблюдаются неупорядоченная, частично упорядоченная и полностью упорядоченная фазы.

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

### Введение

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств соединений, имеющих треугольную решетку, — актуальная задача физики конденсированного состояния [1–7].

С понижением температуры процесс упорядочения в таких системах происходит гораздо медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Данное обстоятельство обусловлено тем, что в системах с меньшим координационным числом возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и локально вырожденные состояния [8,9].

Такие соединения представляют большой интерес из-за отсутствия порядка при нулевой температуре. Они обладают сильно вырожденным основным состоянием, и энтропия системы не обращается в нуль при приближении температуры к нулю. Таким образом, число основных состояний изменяется как  $e^{\alpha N}$ , где  $N$  — число спинов,  $\alpha$  — постоянная [10–12].

Двумерная антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке является относительно простой геометрически фрустрированной моделью, которая интенсивно исследуется несколько десятков лет. В этой модели, где взаимодействие ограничено ближайшими соседями, спиновое упорядочение сильно подавлено фрустрацией. В результате в данной системе ФП отсутствует при любой конечной температуре [13–17]. Однако приложение внешнего магнитного поля или учет взаимо-

действий следующих ближайших соседей стабилизирует спиновое состояние, и в системе происходит ФП [18].

В отличие от двумерного случая, трехмерная антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке до сих пор мало изучена. Данная модель позволяет описать результаты эксперимента на различных системах, включая искусственные дипольные магниты [19], соединения, в которых электрически заряженные гантели действуют как изинговские степени свободы (например,  $\text{Ba}_3\text{CuSb}_2\text{O}_9$ ) [20], фрустрированные кулоновские жидкости [21] и др.

В трехмерных изинговских антиферромагнетиках  $\text{CsCoCl}_3$  и  $\text{CsCoBr}_3$  аномалии физических параметров наблюдаются в двух температурных точках [22,23]. Вычисления, проведенные в рамках приближения среднего поля [24], а также кластерным вариационным методом [25], показывают, что в промежуточном состоянии одна из трех магнитных подрешеток не упорядочена. В рамках метода Монте-Карло (МК) такие частично неупорядоченные состояния описываются модой со случайно изменяющейся в пространстве и во времени фазой [26,27].

Данная модель с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей внутри слоев исследована в работе [28]. Показано, что величина внутрислойного взаимодействия вторых ближайших соседей не влияет на критическое поведение этой модели и класс универсальности сохраняется во всем интервале обменных взаимодействий.

Изучение ФП и критических явлений в фрустрированных спиновых системах, несмотря на накопленный экспериментальный материал и прочный теоретический фундамент, до сих пор остается интенсивно развивающейся областью физики конденсированного состояния. Исследование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с влиянием магнитного поля на природу ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

**Модель и метод исследования**

Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке описывается гамильтонианом

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - h \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

где  $S_{ij} = \pm 1$  — изинговский спин,  $J < 0$  — константа антиферромагнитного обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси  $z$ ,  $h$  — внешнее магнитное поле. Все параметры приводятся в безразмерных величинах.

На рис. 1 показана магнитная структура основного состояния исследуемой модели, полученная для соседних слоев с помощью алгоритма Ванга–Ландау метода МК. Этот алгоритм позволяет на основе анализа плотности и энергии состояний определить и графически отобразить структуру основного состояния. Для рассматриваемой модели основное состояние может иметь шестикратное вырождение. Структура упорядоченной фазы образована чередованием структур, показанных на рис. 1.

В настоящее время ФП, критические, магнитные и термодинамические свойства таких систем на основе микроскопических гамильтонианов успешно изучаются

на основе метода МК [28–34]. Разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК. Одни из наиболее эффективных для исследования подобных систем — алгоритм Ванга–Ландау и репличный обменный алгоритм [28,34]. В данном исследовании использованы оба алгоритма метода МК.

**Результаты моделирования**

Расчеты проводили для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами  $L \times L \times L = N$ ,  $L = 12-90$ , где  $L$  приведено в размерах элементарной ячейки. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекается участок длиной  $\tau_0 = 4 \cdot 10^5$  МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин выполняли вдоль марковской цепи длиной  $\tau = 500\tau_0$  МКшагов/спин.

Намагниченность системы  $m$  вычисляли, используя выражение [35]

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

где  $M_A, M_B$  и  $M_C$  — намагниченности трех подрешеток.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости использовалось следующее выражение [35]:

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

где  $K = |J|/k_B T$ ,  $N$  — число частиц,  $U$  — внутренняя энергия.

На рис. 2 представлены температурные зависимости теплоемкости, полученные для системы с линейными размерами  $L = 36$  при различных значениях магнитного поля  $h$  (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для

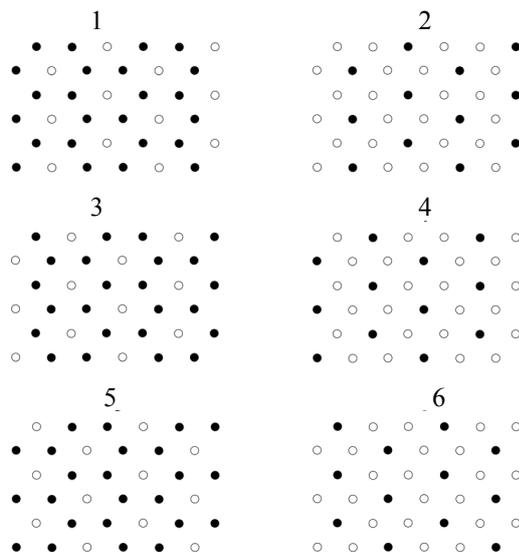


Рис. 1. Магнитная структура основного состояния.

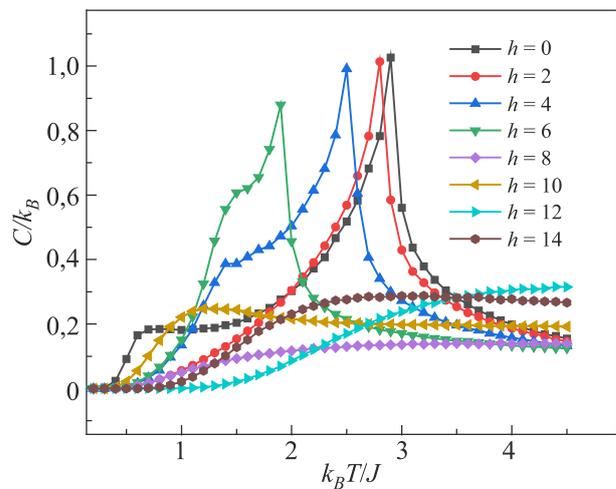


Рис. 2. Зависимость теплоемкости  $C/k_B$  от температуры  $k_B T/|J|$  при различных значениях магнитного поля  $h$ .

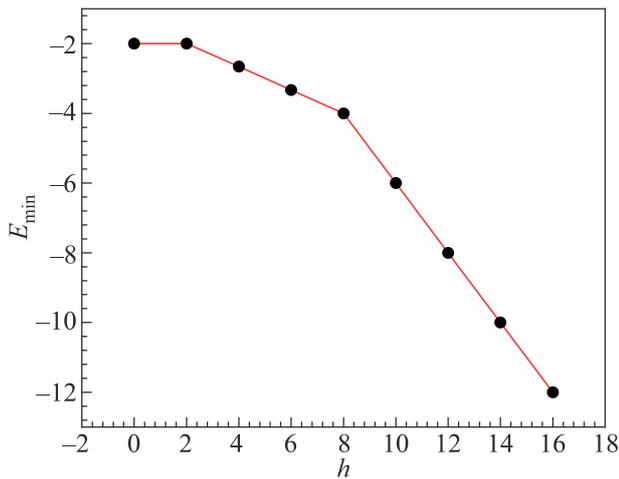


Рис. 3. Зависимость энергии от величины магнитного поля.

построения зависимостей, температура указывается в единицах  $|J/k_B|$ . На зависимостях теплоемкости от температуры в интервале полей  $0 \leq h \leq 6$  вблизи критической температуры наблюдается хорошо выраженный максимум. В низкотемпературной области появляется небольшой второй максимум. Заметим, что двойные пики связаны с так называемой промежуточной, частично разупорядоченной антиферромагнитной фазой. В интервале  $6 < h \leq 14$  максимумы теплоемкости становятся более плавными или вовсе исчезают. Это обусловлено тем, что магнитное поле полностью гасит флуктуации системы и ФП размывается.

На зависимости минимальной энергии системы от величины магнитного поля (рис. 3) наблюдаются три области. В первой области, где поле меняется в интервале  $0 \leq h \leq 2$ , энергия системы не зависит от величины поля и наблюдается неупорядоченное состояние. Во второй области, в интервале  $2 \leq h \leq 8$ , происходит частичное упорядочение системы: медленный спад энергии при увеличении внешнего магнитного поля. В третьей области, в интервале  $8 \leq h \leq 14$ , — полностью упорядоченная фаза и более резкий спад энергии от поля.

На зависимости намагниченности от магнитного поля для разных значений температур (см. рис. 4) наблюдается плато намагниченности, равной одной трети намагниченности насыщения. При включении внешнего магнитного поля можно представить основное состояние, обладающее дальним порядком. В этом состоянии спины двух подрешеток выровнены по полю, а спины третьей подрешетки направлены против направления магнитного поля. Это и приводит к возникновению плато намагниченности, равной  $1/3$  намагниченности насыщения. С увеличением температуры плато постепенно исчезает и наблюдается плавный рост намагниченности до насыщения. Это объясняется температурными флуктуациями спинов.

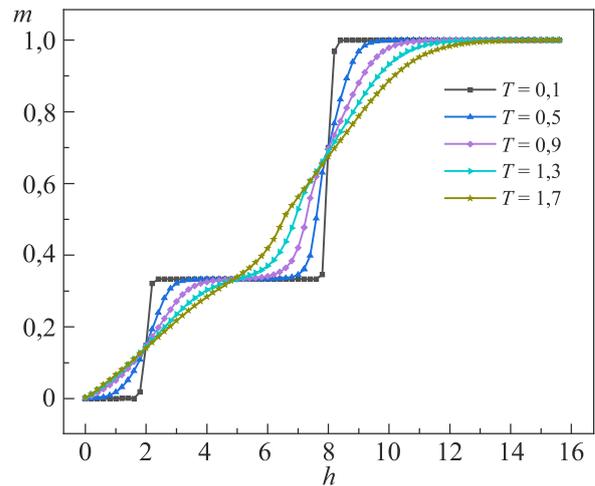


Рис. 4. Зависимость намагниченности от магнитного поля при разных температурах.

На рис. 5 представлены зависимости намагниченности от температуры для разных значений магнитного поля. В отсутствие внешнего магнитного поля из-за фрустрации состояние системы сильно вырождено и значение намагниченности близко к нулю. При включении поля снимается вырождение системы и намагниченность имеет отличные от нуля значения. В рассматриваемой модели магнитные подрешетки, связанные с симметрией кристаллической решетки, обладают разной жесткостью по отношению к внешнему магнитному полю. Поэтому при росте температуры при некотором значении поля слабая магнитная подрешетка разрушается, о чем свидетельствует провал на графике намагниченности при  $h = 6$ . При более высоких полях ( $h = 10, 12, 14$ ) система упорядочивается уже при нулевой температуре.

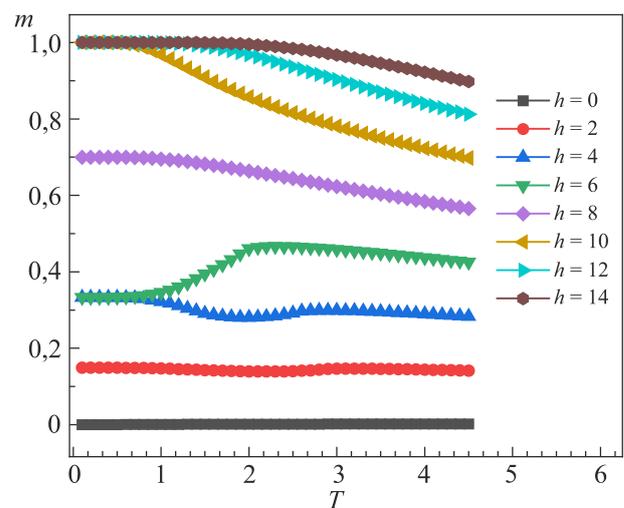


Рис. 5. Зависимость намагниченности от температуры при различных значениях магнитного поля  $h$ .

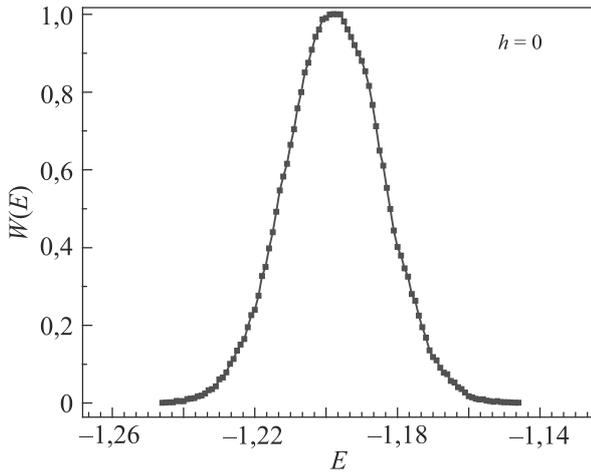


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для  $L = 90$ .

В интервале  $0 \leq h \leq 6$ , где в системе происходит фазовый переход, для определения рода фазового перехода использован гистограммный метод анализа данных [36]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП.

На рис. 6 представлена гистограмма распределения энергии для системы с линейными размерами  $L = 90$  при  $h = 0$ . Видно, что в зависимости вероятности  $W(E)$  от энергии  $E$  наблюдается один хорошо выраженный максимум, что свидетельствует в пользу ФП второго рода. Таким образом, ФП в интервале полей  $0 \leq h \leq 6$  являются переходами второго рода. Значения критических температур в интервале  $0 \leq h \leq 6$  приведены в табл. 1. Видно, что с увеличением магнитного поля температура фазового перехода смещается в сторону низких температур.

Таблица 1. Значения критических температур для модели Изинга на треугольной решетке в магнитном поле

$h$	0	2	4	6
$T_N$	2,916(4)	2,821(4)	2,548(4)	1,933(4)

### Заключение

Исследование фазовых переходов и термодинамических свойств трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке в магнитном поле выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. На основе гистограммного метода проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой модели в интервале полей  $0 \leq h \leq 6$  реализуется фазовый переход второго рода. Показано, что дальнейшее увеличение магнитного поля снимает вырождение основного состояния и размывает фазовый переход в системе. Обнаружено, что в зависимости от величины магнитного поля в системе наблюдаются неупорядоченная, частично упорядоченная и полностью упорядоченная фазы.

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

1. A.N. Berker, G.S. Grest, C.M. Soukoulis, D. Blankschtein, and M. Ma, *J. Appl. Phys.* **55**, 2416 (1984).
2. D. Blankschtein, M. Ma, A.N. Berker, G.S. Grest, and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **29**, 5250 (1984).
3. S.N. Coppersmith, *Phys. Rev. B* **32**, 1584 (1985).
4. O. Heinonen and R.G. Petschek, *Phys. Rev. B* **40**, 9052 (1989).
5. J.-J. Kim, Y. Yamada, and O. Nagai, *Phys. Rev. B* **41**, 4760 (1990).
6. R.R. Netz and A.N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 377 (1991).
7. F.A. Kassan-Ogly, B.N. Filippov, A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, and M.K. Badiev, *J. Magn. Magn. Mater.* **324**, 3418 (2012).
8. P. Chandra, P. Coleman, and I. Ritchey, *J. de Phys.* **33**, 591 (1993).
9. J.T. Chalker, P.C.W. Holdsworth, and E.F. Shender, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 855 (1992).
10. R. Liebmann, *Statistical Mechanics of Periodic Frustrated Ising Systems*, Springer-Verlag, Berlin (1986).
11. B. Simon, *The Statistical Mechanics of Lattice Gases*, Princeton University Press, Princeton, NJ (1993), Vol. 1.
12. R. Moessner and S.L. Sondhi, *Phys. Rev. B* **63**, 224401 (2001).
13. G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **79**, 357 (1950).
14. G.F. Newell, *Phys. Rev.* **79**, 876 (1950).
15. R.M.F. Houtapel, *Physica* **16**, 425 (1950).
16. G.H. Wannier, *Phys. Rev. B* **7**, 5017 (1973).
17. E. Muller-Hartmann and J. Zittartz, *Zs. Phys. B* **27**, 261 (1977).
18. J. Hose, K. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D.R. Nelson, *Z. Phys. B* **16**, 1217 (1977).
19. E. Mengotti, L.J. Heyderman, A. Bisig, A. Fraile Rodríguez, L. Le Guyader, F. Nolting, and H.B. Braun, *J. Appl. Phys.* **105**, 113113 (2009).
20. A. Smerald and F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 147202 (2015).
21. S. Mahmoudian, L. Rademaker, A. Ralko, S. Fratini, and V. Dobrosavljevic, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 025701 (2015).
22. H. Yoshizawa and K. Hirakawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 448 (1980).
23. V.B. Yelon, D.E. Cox, and M. Eibshutz, *Phys. Rev. B* **12**, 5007 (1975).
24. H. Shiba, *Prog. Teor. Phys.* **64**, 466 (1980).
25. M. Kaburagi, T. Tonegawa, and J. Kanamori, *J. Phys. Soc. Jpn.* **51**, 3857 (1982).
26. P. Matsubara and S. Ikeda, *Phys. Rev. B* **28**, 4064 (1983).
27. P. Matsubara and S. Inawashira, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 4373 (1984).
28. A.K. Murtazaev, M.K. Ramazanov, and M.K. Badiev, *Physica A* **507**, 210 (2018).
29. M.K. Ramazanov, A.K. Murtazaev, and M.A. Magomedov, *Physica A* **521**, 543 (2019).

30. А.К. Муртазаєв, М.К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 793 (2015) [*JETP Lett.* **101**, 714 (2015)].
31. М.К. Бадиев, А.К. Муртазаєв, М.К. Рамазанов, *ЖЭТФ* **150**, 722 (2016).
32. А.К. Murtazaev, М.К. Ramazanov, and М.К. Badiev, *Physica B: Condens. Matter* **476**, 1 (2015).
33. М.К. Ramazanov, А.К. Murtazaev, М.А. Magomedov, and М.К. Badiev, *Phase Transitions* **91**, 610 (2018).
34. А.К. Муртазаєв, М.А. Магомедов, М.К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 265 (2018).
35. Н. Yoshizawa and К. Hirakawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **46**, 448 (1980)
36. F. Wang and D.P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).

---

### Критичні властивості моделі Ізінга в магнітному полі

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

Реплічним методом Монте-Карло досліджено фазові переходи та термодинамічні властивості тривимірної антиферомагнітної моделі Ізінга на шаруватій трикутній ґратці в магнітному полі. На основі гістограмного методу проведено аналіз характеру фазових переходів. Встановлено, що в інтервалі полів  $0 \leq h \leq 6$  фазовий перехід реалізується як перехід дру-

гого роду. При збільшенні магнітного поля виродження основного стану знімається й фазовий перехід розмивається. Залежно від величини магнітного поля спостерігаються не-впорядкована, частково впорядкована та повністю впорядкована фази.

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

### Critical properties of the Ising model in a magnetic field

М.К. Badiev, А.К. Murtazaev, М.К. Ramazanov,  
and М.А. Magomedov

The phase transitions and thermodynamic properties of the three-dimensional antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice in magnetic field are studied by the replica Monte Carlo method. The order of phase transitions was analyzed based on the histogram method. It was established that in the fields region  $0 \leq h \leq 6$  the phase transition is realized as a second-order one. In higher fields, the degeneracy of the ground state is lifted and the phase transition is smeared. Depending on the magnetic field value, disordered, partially ordered, and fully ordered phases are realized.

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