ЖЭТФ, 2011, том 140, вып. 4 (10), стр. 771–776

ПЕРЕХОДЫ В ТРЕХМЕРНЫХ XY-МАГНЕТИКАХ С ДВУМЯ КИРАЛЬНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКА

А. О. Сорокин[*], *А. В. Сыромятников*[**]

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Российской академии наук 188300, Гатчина, Россия

Поступила в редакцию 13 марта 2011 г.

С помощью метода Монте-Карло исследуются две модели классических XY-антиферромагнетиков в трех измерениях: модель на кубической решетке с двумя дополнительными обменными взаимодействиями между спинами второго и третьего порядков дальности в слое и модель на слоисто-треугольной решетке с дополнительным фрустрирующим взаимодействием между слоями второго порядка дальности. В предлагаемых моделях параметрами порядка являются намагниченность и два киральных параметра. Переход соответствует нарушению симметрии $\mathbb{Z}_2\otimes\mathbb{Z}_2\otimes SO(2)$. В обеих моделях найден ярко выраженный переход первого рода.

1. ВВЕДЕНИЕ

В теории фазовых переходов пространство параметра порядка играет решающую роль, определяя универсальные свойства систем вблизи от критической точки. В общем случае, если в разупорядоченной фазе группой симметрии системы является G, а в упорядоченной — ее подгруппа H, то пространством параметра порядка будет многообразие G/H. Так, например, ферромагнетики и нефрустрированные антиферромагнетики выше критической температуры T_c симметричны относительно полной группы поворотов спинов $O(N)$, где под спинами подразумеваются классические N-компонентные векторы. Ниже T_c становится выделенным направление вектора спонтанной намагниченности и симметрия системы нарушается до $O(N-1)$. Пространством параметра порядка в этом случае является $(N-1)$-мерная сфера $S_{N-1}=O(N)/O(N-1)$, описывающая множество возможных направлений намагниченности (см., например, работу [1]). В частности, в нефрустрированных XY-магнетиках ($N=2$), которыми мы будем интересоваться в данной работе, происходит нарушение симметрии $SO(2)$.

Во фрустрированных антиферромагнитных системах параметром порядка является не только вектор намагниченности. Например, когда основное состояние планарно, помимо собственно группы вращений $SO(2)$ нарушается симметрия $\mathbb{Z}_2$, связанная с отражениями. Такая схема реализуется, например, в спиральных магнетиках и в антиферромагнетике на слоисто-треугольной решетке. Дополнительным параметром порядка здесь выступает киральность, характеризующая направление закручивания спирали. Этот параметр является скалярной величиной, принимающей при нулевой температуре значения ±1 (различающие «левую» спираль от «правой») и похожей тем самым на параметр порядка модели Изинга.

Другой пример, когда основное состояние планарно, но вырождено, а вырождение снимается за счет температурных флуктуаций, — явление, известное под названием «порядок из беспорядка» [2]. В результате упорядоченная фаза становится коллинеарной, но одновременно с этим спонтанно выделяются некоторые из направлений решетки. Так, в моделях на простой кубической решетке с дополнительным взаимодействием с соседями, следующими за ближайшими (J_1–J_2-модель), нарушается группа симметрии $\mathbb{Z}_3\otimes SO(2)$ [3], а в слоистой (stacked) J_1–J_2-модели на простой кубической решетке — $\mathbb{Z}_2\otimes SO(2)$ [4].

Возможны случаи, когда после снятия вырождения основное состояние остается неколлинеарным. Подобная схема реализуется в модели на слоисто-треугольной решетке со взаимодействием соседей, следующих за ближайшими в слое, при

[*] E-mail: aosorokin@gmail.com
[**] E-mail: syromyat@thd.pnpi.spb.ru

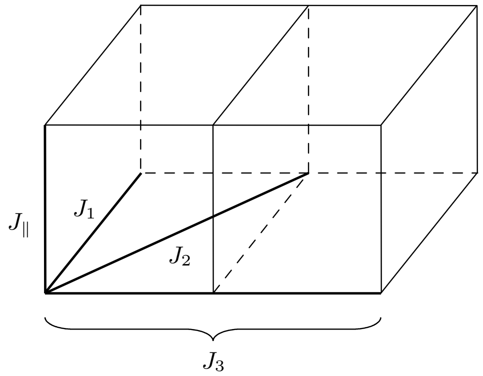

Рис. 1. Обмены в слоистой J_1–J_2–J_3-модели

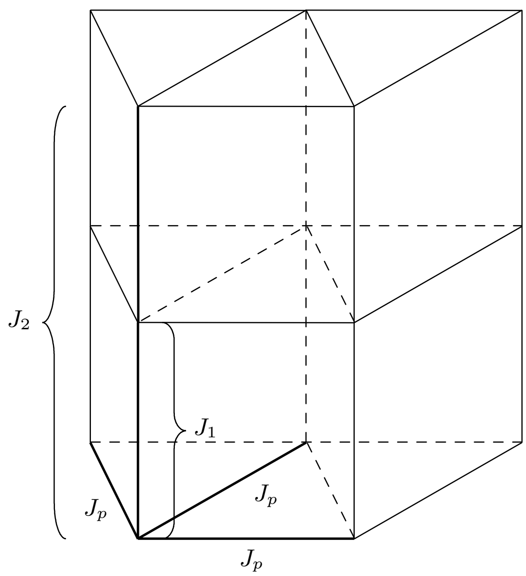

Рис. 2. Обмены в модели со слоисто-треугольной решеткой

соотношении констант взаимодействия $J_2/J_1 > 1$. В этом случае нарушается группа симметрии $\mathbb{Z}_3 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$ [5].

Во всех трех названных классах XY-систем найдены переходы первого рода. Для систем из класса $\mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$ возможен переход «почти второго рода» с псевдоуниверсальным поведением [6, 7]. Например, описываемые моделью на слоисто-треугольной решетке [8] магнитные соединения $CsMnBr_3$, $CsNiCl_3$, $CsMnI_3$, спиральный магнетик Tb и некоторые другие материалы имеют схожие критические индексы $\nu = 0.54$, $\beta = 0.24$, $\gamma = 1.1$, $\alpha = 0.38$. В этой модели переход первого рода становится заметным лишь для решеток очень большого размера $L = 128$ [9]. Однако в других моделях и соединениях из этого класса может обнаруживаться четкий переход первого рода или сильное отклонение от указанных значений для показателей. Так, в моделях на объемно-центрированной и полностью фрустрированной кубических решетках [10, 11], а также в $V_{2,2}$-модели Штифеля [12, 13] найден переход первого рода (уже для решеток размера $L \approx 20$).

В моделях для классов симметрии $\mathbb{Z}_3 \otimes SO(2)$ и $\mathbb{Z}_3 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$ также происходит переход первого рода [5, 14].

В данной работе мы рассмотрим две классические магнитные системы, для которых реализуется схема с нарушением симметрии $\mathbb{Z}_2 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$, возможной для реальных магнитных материалов. Первая модель обобщает слоистую J_1–J_2-модель введением обмена J_3 третьего порядка дальности в слое (слоистая J_1–J_2–J_3-модель), рис. 1. Вторая — это модель на слоисто-треугольной решетке, где мы тоже вводим дополнительный обмен J_2, но уже не внутри слоя, а со слоем, следующим за ближайшим, рис. 2. В обеих моделях сосуществуют две спиральные структуры, поэтому можно ввести два киральных параметра порядка.

Данные системы исследовались для случая гейзенберговских магнетиков ($N = 3$) в работе [15], для них был найден переход первого рода, заметный лишь для решеток с $L \approx 36$. Для решеток меньшего размера наблюдалось псевдоуниверсальное поведение. В данной работе для случая $N = 2$ методом Монте-Карло найден ярко выраженный переход первого рода.

2. МОДЕЛИ И МЕТОДЫ

Слоистая J_1–J_2–J_3-модель описывается гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}\sum_i \left(J_1 \sum_j \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_k \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k + \right. \left. + J_3 \sum_l \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l - J_{||} \sum_m \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k \right), \quad (1)$$

где $\mathbf{S}_i = (S_i^a, S_i^b)$ — двухкомпонентный единичный вектор в i-м узле, суммирование ведется по всем узлам i простой кубической решетки, по всем ближайшим соседним узлам j, k и l первых трех порядков дальности внутри слоя. Суммирование по m ведется по ближайшим узлам из соседних слоев (см. рис. 1). Мы положили для простоты $J_1 = J_{||} = 1$, $J_2 = 0$ и

$J_3 = 0.5$. При таком выборе значений обмена в системе реализуется сценарий нарушения симметрии $Z_2 \otimes Z_2 \otimes SO(2)$ [15]. При этом в модели сосуществуют две спирали, закручивающиеся соответственно вдоль осей x и y слоя xy с шагом равным трем постоянным решетки (120-градусная структура).

Модель на слоисто-треугольной решетке с дополнительным обменом между слоями описывается гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2}\sum_i \left(J_p \sum_j \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_1 \sum_k \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k + \right. \\ \left. + J_2 \sum_l \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l \right), \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем ближайшим соседям j и k узла i, а также по соседям l, следующим за ближайшими между слоями (см. рис. 2). Мы положили для простоты $J_p = J_1 = 1$ и $J_2 = 0.5$. При таком выборе констант связи в этой модели также присутствуют две спиральные структуры. Одна из них связана с треугольной решеткой слоев xy, а вторая — со спиралью, закручивающейся вдоль оси z с шагом равным трем постоянным решетки.

Мы рассматриваем решетки размера L^3 с $L = 12$, 15, 18, 21, 24, 27, 30, 36 — кратные величине шага спиральных структур, с периодическими граничными условиями.

В обеих рассматриваемых моделях присутствует спиральная структура, связанная с наличием антиферромагнитных обменов между ближайшими (с величиной обмена J_1) и следующими за ближайшими спинами вдоль одной оси (с величиной обмена J_2). Шаг этой спирали при ненулевых температурах становится несоизмеримым с постоянной решетки, и потому использование периодических граничных условий приведет к дополнительным погрешностям. Чтобы проверить, насколько этот эффект существен, мы исследовали эту модель и при максимальном размере решетки $L = 24$ и $J_2/J_1 = 0.5$ получили следующие результаты:

$$T_c/J_1 = 1.800(5), \quad \nu = 0.55(2), \quad \beta = 0.24(2),$$

$$\gamma = 1.16(3), \quad \beta_k = 0.49(6), \quad \gamma_k = 0.78(8)$$

(индекс «k» указывает на то, что критические показатели относятся к киральному параметру порядка). Полученные критические индексы хорошо согласуются с индексами модели на слоисто-треугольной решетке [8], принадлежащей тому же (псевдо)классу универсальности. Поэтому даже если этот эффект и присутствует в наших моделях, то не мешает получить надежный результат.

Использовался стандартный алгоритм Метрополиса. Для каждого измерения термализация проводилась в течение $1 \cdot 10^5$ шагов алгоритма на спин, а набор статистики — в течение $1 \cdot 10^6$ шагов. Использовалась также техника анализа гистограмм. Диапазон рассматриваемых величин разбивался на $6.4 \cdot 10^5$ интервалов.

В каждой из рассматриваемых моделей мы вводили три параметра порядка. Намагниченность в обеих моделях определяется согласно формулам

$$\mathbf{m}_i = \frac{9}{L^3}\sum_j \mathbf{S}_j, \quad \bar{m} = \frac{1}{L^3}\sqrt{9\sum_{i=1}^{9}\langle \mathbf{m}_i^2 \rangle}, \quad (3)$$

где суммирование по j ведется по всем узлам подрешетки, индекс «i» перечисляет девять подрешеток, связанных с двумя 120-градусными структурами, а $\langle \ldots \rangle$ означает термальное усреднение. Киральные параметры порядка в слоистой J_1–J_2–J_3-модели определены как

$$k = \frac{2}{\sqrt{3}L^3}\sum_i \left(S_i^a S_{i+1}^b - S_i^b S_{i+1}^a\right), \quad \bar{k} = \sqrt{\langle k^2 \rangle}, \quad (4)$$

$$h = \frac{2}{\sqrt{3}L^3}\sum_j \left(S_j^a S_{j+1}^b - S_j^b S_{j+1}^a\right), \quad \bar{h} = \sqrt{\langle h^2 \rangle}, \quad (5)$$

где суммирование по i и j ведется по всем узлам решетки, индекс «$i+1$» обозначает следующий спин вдоль оси x слоя xy, а «$j+1$» — следующий спин вдоль оси y. В модели на слоисто-треугольной решетке

$$k = \frac{2}{3\sqrt{3}L^3}\sum_{p,i}\left(S_{p,i}^a S_{p,i+1}^b - S_{p,i}^b S_{p,i+1}^a\right), \\ \bar{k} = \sqrt{\langle k^2 \rangle}, \quad (6)$$

где i нумерует три стороны ячейки p слоя xy, а суммирование по p ведется по каждой второй ячейке (по ячейкам одной киральности), и

$$h = \frac{2}{\sqrt{3}L^3}\sum_i \left(S_i^a S_{i+1}^b - S_i^b S_{i+1}^a\right), \quad \bar{h} = \sqrt{\langle h^2 \rangle}, \quad (7)$$

где $i+1$ — это следующий спин вдоль оси z.

Мы также следили за величиной $\sigma = \sqrt{\langle |kh| \rangle}$ для обеих моделей. Для всех параметров порядка мы рассматривали моменты первого, второго и четвертого порядков.

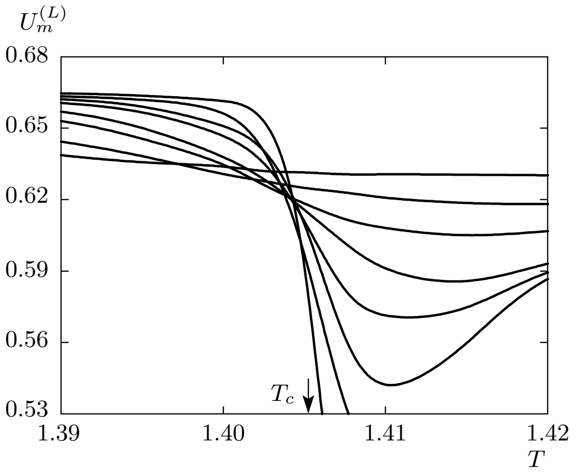

Рис. 3. Зависимость кумулянта $U_m^{(L)}$ от температуры в модели с тремя обменами для различных значений L

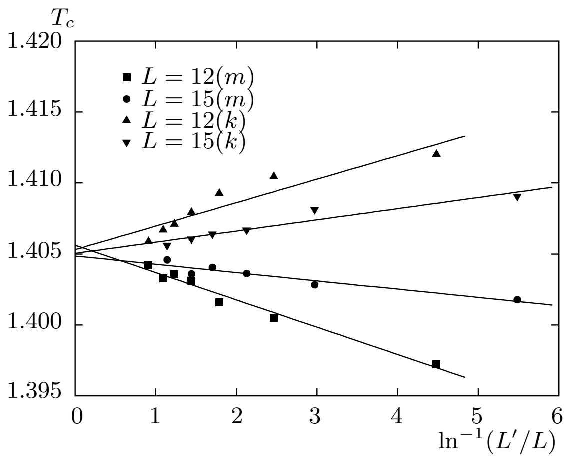

Рис. 4. Вычисление температуры перехода методом пересечения кумулянтов для модели с тремя обменами

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для определения температуры перехода использовался метод пересечения кумулянтов Биндера [16]

$$U_p = 1 - \frac{\langle p^4 \rangle}{3\langle p^2 \rangle^2}, \tag{8}$$

где $p = \mathbf{m}$, k, h — параметры порядка. Мы вычисляли температуру $T_{L'}$, при которой происходит пересечение кривых $U_p^{(L)}$ и $U_p^{(L')}$ для разных размеров решетки $L' > L$, как функцию от $\ln^{-1}(L'/L)$. Экстраполяция в термодинамический предел $L' \to \infty$ должна давать температуру перехода $T_{L'} \to T_c$. Для слоистой J_1–J_2–J_3-модели мы получили следующие значения для температуры перехода:

$$T_c^{(m)} = 1.4052(3) \tag{9}$$

по намагниченности и

$$T_c^{(k)} = 1.4052(2), \quad T_c^{(h)} = 1.4051(3) \tag{10}$$

по киральным параметрам порядка (рис. 3, 4). В модели на слоисто-треугольной решетке переходы происходят при температурах

$$T_c^{(m)} = 1.0907(4) \tag{11}$$

по намагниченности и

$$T_c^{(k)} = 1.0906(1), \quad T_c^{(h)} = 1.09058(8) \tag{12}$$

по киральным параметрам порядка (рис. 5, 6). Отметим, что в пределах точности нашего численного эксперимента температуры переходов по всем трем параметрам порядка одинаковы, $T_c^{(m)} = T_c^{(k)} = T_c^{(h)}$. Также отметим, что температура перехода по параметру σ, определенная тем же методом, совпадает с температурами по другим параметрам порядка.

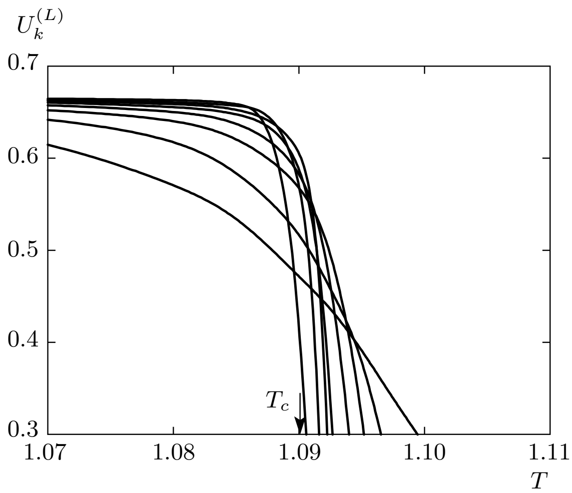

Рис. 5. Зависимость кумулянта $U_k^{(L)}$ от температуры в модели на слоисто-треугольной решетке для различных значений L

В обеих моделях происходит переход первого рода. На гистограммах распределений по энергии вблизи T_c наблюдается двухпиковая структура даже для решеток очень маленького размера (рис. 7, 8), свидетельствующая о скачке внутренней энергии как функции температуры. Отметим, что для системы на слоисто-треугольной решетке переход первого

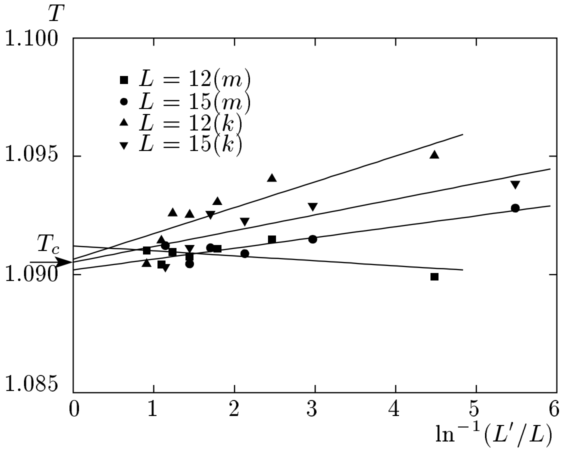

Рис. 6. Вычисление температуры перехода методом пересечения кумулянтов для модели на слоисто-треугольной решетке

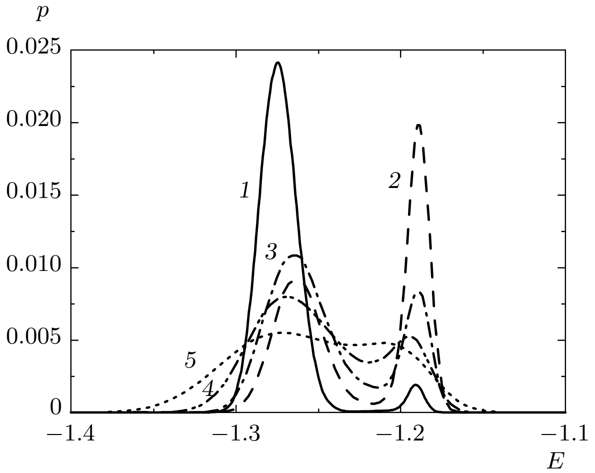

Рис. 7. Гистограммы распределений по энергии при температуре близкой к T_c для решеток разного размера в модели на слоисто-треугольной решетке: кривая *1* — $L = 36$; *2* — $L = 30$; *3* — $L = 27$; *4* — $L = 21$; *5* — $L = 15$. Для решетки $L = 36$ (кривая *1*) показана гистограмма при $T = 1.09$, а для решеток остальных размеров — при $T = 1.0925$

рода проявляется более четко. Мы наблюдаем двухпиковую структуру распределения даже для решеток размера $L = 12$ и $L = 15$, в то время как в модели с тремя обменами такая структура различима лишь для решеток с $L \geq 21$. Аналогичное сравнение возможно и для гейзенберговских магнетиков в этих же моделях [15], где двухпиковая структура распределения для модели на слоисто-треугольной решетке четко видна уже для решетки размера $L = 30$,

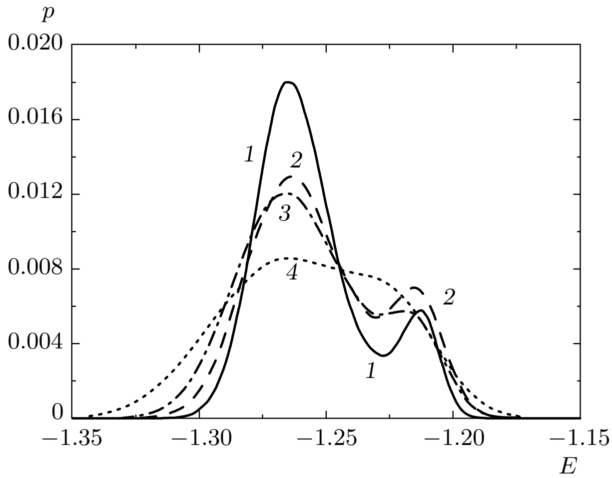

Рис. 8. Гистограммы распределений по энергии при температуре близкой к T_c для решеток разного размера в слоистой J_1–J_2–J_3-модели: кривая *1* — $L = 36$; *2* — $L = 30$; *3* — $L = 27$; *4* — $L = 21$. Для всех решеток гистограмма показывается при $T = 1.405$. Для решеток меньшего размера ($L = 12$, 15, 18) двухпиковая структура не видна

тогда как для трехобменной модели она едва угадывается при $L = 36$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы рассматривали две модели сильно фрустрированных XY-магнетиков с двумя киральными параметрами порядка. Было найдено, что системы испытывают четко выраженный переход первого рода.

Этот результат согласуется с результатами исследований других реалистичных сценариев нарушения симметрии во фрустрированных XY-магнетиках. Хотя по отдельности и в трехмерной модели Изинга (с симметрией $\mathbb{Z}_2$), и в модели трехмерного XY-магнетика без фрустрации (с симметрией $SO(2)$) наблюдается переход второго рода, в системах, включающих обе эти модели (с симметрией $\mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$), найден переход первого рода, как и в системах, для которых наблюдалось псевдоуниверсальное поведение. Аналогичные результаты получены и для моделей с симметриями $\mathbb{Z}_3 \otimes SO(2)$ и $\mathbb{Z}_3 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes SO(2)$, включающих модель Поттса (с симметрией $\mathbb{Z}_3$). Впрочем, в самой трехпозиционной модели Поттса в трех измерениях также наблюдается переход первого рода [17].

Мы исследовали системы из нового класса, соответствующего нарушенной симметрии $\mathbb{Z}_2 \otimes \mathbb{Z}_2 \otimes \otimes SO(2)$. Эти системы описывают взаимодействие XY-модели с двумя моделями Изинга. Следует отметить, что взаимодействующие две модели Изинга изучались в рамках модели Эшкина – Теллера [18]. Эта модель в трех измерениях имеет сложную фазовую диаграмму по константам связи [19]. Для нас интересна в данном случае лишь та часть фазовой диаграммы, которая соответствует переходу из неупорядоченной фазы в фазу, где одновременно все три величины, $\langle k \rangle$, $\langle h \rangle$ и $\sigma = \langle kh \rangle$, не равны нулю (так называемая фаза Бакстера). Оказывается, что такой переход может быть первого рода [19, 20]. Поэтому, как и в моделях с дополнительной симметрией $\mathbb{Z}_3$, мы могли получить и получили ярко выраженный переход первого рода.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации (МК-329.2010.2), РФФИ (грант № 09-02-00229) и в рамках программ «Квантовая физика конденсированных сред», «Сильнокоррелированные электроны в твердых телах и структурах» и «Нейтронные исследования вещества».

ЛИТЕРАТУРА

1. N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys. **51**, 591 (1979).
2. J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton, and R. Conte, J. de Phys. **41**, 1263 (1980).
3. D. Loison, in *Frustrated Spin Systems*, ed. by H. T. Diep, World Sci., Singapore (2004), ch. 4, p. 177.
4. C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **62**, 2056 (1989).
5. E. H. Boubcheur, D. Loison, and H. T. Diep, Phys. Rev. B **54**, 4165 (1996).
6. G. Zumbach, Phys. Rev. Lett. **71**, 2421 (1993); Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
7. B. Delamotte, D. Mouhanna, and M. Tissier, Phys. Rev. B **67**, 134422 (2003).
8. H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 2095 (1986); **61**, 1299 (1992); M. L. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B **50**, 16113 (1994).
9. M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 74 (2003); K. Kanki, D. Loison, and K. D. Schotte, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 015001 (2006); V. Thanh Ngo and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **103**, 07C712 (2008).
10. H. T. Diep, Phys. Rev. B **39**, 397 (1989).
11. H. T. Diep, A. Ghazali, and P. Lallemand, J. Phys. C **18**, 5881 (1985); V. Thanh Ngo, D. Tien Hoang, and H. T. Diep, Phys. Rev. E **82**, 041123 (2010).
12. H. Kunz and G. Zumbach, J. Phys. A **26**, 3121 (1993).
13. D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B **5**, 735 (1998).
14. H. T. Diep and H. Kawamura, Phys. Rev. B **40**, 7019 (1989).
15. А. О. Сорокин, А. В. Сыромятников, Препринт-2854, ПИЯФ (2010); ЖЭТФ **139**, 1148 (2011).
16. K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
17. J. Lee and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. B **43**, 1268 (1991).
18. C. Fan, Phys. Lett. A **39**, 136 (1972).
19. R. V. Ditzian, J. R. Banavar, G. S. Grest, and L. P. Kadanoff, Phys. Rev. B **22**, 2542 (1980).
20. P. Arnold and Y. Zhang, Nucl. Phys. B **501**, 803 (1997).