

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В АНТИФЕРРОМАГНИТНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА НА ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ С ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ ВТОРЫХ БЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ

А. К. Муртазаев^{a,b}, М. К. Рамазанов^{a}, Ф. А. Кассан-Оглы^c, Д. Р. Курбанова^a*

*^a Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия*

*^b Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Россия*

*^c Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 9 июня 2014 г.

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло и гистограммного анализа данных изучены фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Установлено, что для данной модели в рассмотренном интервале значений величины взаимодействия вторых ближайших соседей реализуется фазовый переход второго рода.

DOI: 10.7868/S0044451015010101

1. ВВЕДЕНИЕ

При количественном описании фазовых переходов (ФП) и критических явлений в современной физике конденсированного состояния используются различные решеточные модели. С помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удалось точно решить лишь очень ограниченное количество задач. Одной из таких моделей является двумерная модель Изинга [1]. При учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга наблюдаются вырождение основного состояния и появление различных фаз и фазовых переходов. Кроме того, учет взаимодействия следующих ближайших соседей может также влиять на критическое поведение модели, в частности, появляются различные аномалии критических свойств [2].

Теоретические расчеты и численное моделирование методом Монте-Карло (МК) для модели Изинга

на объемно-центрированной кубической решетке были проведены в работах [3–8]. Авторы работы [3] методом МК провели исследование критического поведения модели Изинга на различных типах решеток. Авторы вычислили температуру фазового перехода и рассчитали значения термодинамических параметров в критической области. Теоретические исследования, проведенные в работах [4, 5], также свидетельствуют о том, что для модели Изинга на простой кубической решетке и в объемно-центрированной кубической решетке имеет место ФП второго рода. Аналогичные результаты получены и в работах [6–8]. Авторы этих работ рассчитали критические индексы для некоторых термодинамических параметров. Согласно результатам работ [7, 8], переход из ферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом второго рода, а переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную фазу является переходом первого рода. Отсюда следует, что при росте величины взаимодействия вторых ближайших соседей в системе происходит смена рода фазового перехода со второго на первый.

*E-mail: sheikh77@mail.ru

В настоящей работе мы предприняли попытку по возможности с максимальной точностью с соблюдением единой методики и использованием надежной и проверенной схемы на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло определить род ФП антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей.

Интерес к этой модели обусловлен следующими основными причинами.

Во-первых, учет взаимодействия вторых ближайших соседей может приводить к возникновению фрустраций, что усложняет решение. Известно, что фрустрированные системы (ФС) во многом проявляют свойства, отличные от соответствующих нефрустрированных систем. Это отличие выражается в богатом разнообразии фаз и ФП, что обусловлено сильным вырождением и высокой чувствительностью ФС к различного рода возмущающим взаимодействиям [9].

Во-вторых, при изучении ФС до сих пор основное внимание уделялось ФС на треугольной и гексагональной решетках [10–16]. Критические свойства ФС на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей практически не исследованы.

В-третьих, первые попытки исследования этой модели предпринимались в то время, когда мощности вычислительных машин и используемые алгоритмы метода МК не позволяли рассчитывать критические параметры с необходимой степенью точности.

Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с характером и природой ФП фрустрированных спиновых систем.

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ

Антиферромагнитная модель Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

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

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 — вторых ближайших соседей $J_2 > 0$; $k = J_2/J_1$ — величина взаимодействия следующих за ближайшими соседями.

Исследования фазовых переходов фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом трудно преодолимых проблем. Это связано с тем, что для таких моделей характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами МК [10–14, 16, 17], но обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. Поэтому в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, которые позволяют преодолеть эти проблемы. Одними из наиболее мощных и эффективных в исследовании ФП и критических явлений в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК [18, 19].

Для анализа характера фазовых переходов и особенностей тепловых характеристик вблизи критической точки весьма эффективным и информативным является гистограммный метод анализа данных [20]. Гистограммный анализ данных позволяет не только оценить надежность и достоверность результатов, полученных методом МК на основе расчета кумулянтов Биндера, но и определить ряд других важных параметров [21].

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 12-90$. Соотношение обменного взаимодействия вторых и ближайших соседей менялось в интервале $0 \leq k \leq 1.0$. 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

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использовались выражения [22, 23]

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

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

где $K = |J|/k_B T$, N — число частиц, U — внутренняя энергия, M — параметр порядка (U и M являются нормированными величинами).

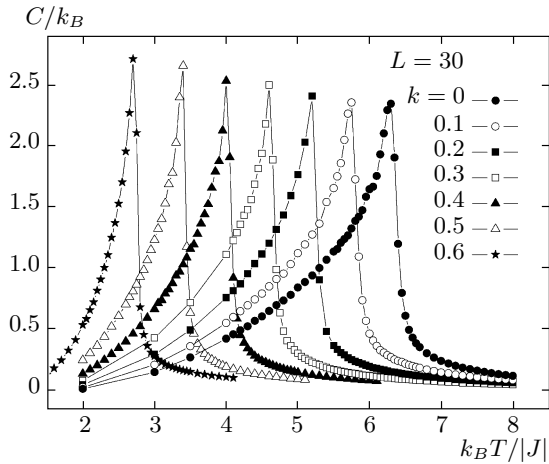


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T/|J|$ для разных k

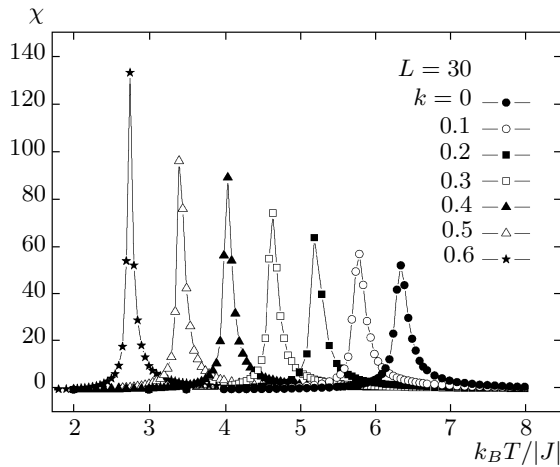


Рис. 2. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J|$ для разных k

На рис. 1 и 2 представлены температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости, полученные при $L = 30$ для различных значений k (здесь и далее статистическая погрешность не превышает размеров символов, использованных для построения зависимостей). Отметим, что увеличение значения k в интервале $0 \leq k \leq 0.6$ сопровождается сдвигом максимумов в сторону более низких температур, одновременно с этим наблюдается рост абсолютных значений максимумов как теплоемкости, так и восприимчивости. Рост абсолютных значений максимумов происходит за счет конкуренции первых и вторых ближайших соседей.

Для определения критических температур T_N нами использовался метод кумулянтов Биндера U_L

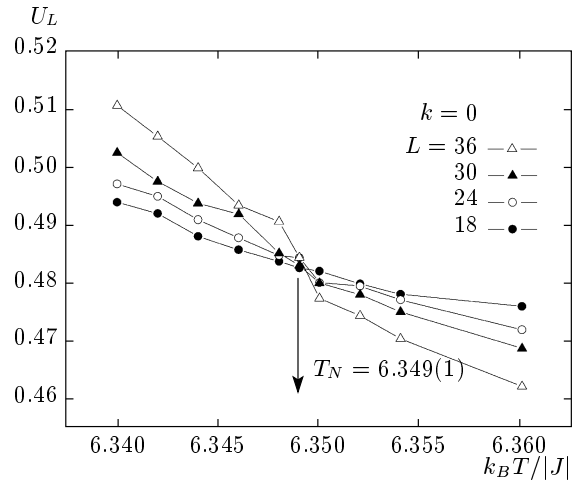


Рис. 3. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T/|J|$ для $k = 0$

четвертого порядка. Кумулянты Биндера по энергии и по намагниченности имеют вид [24]

$$V_L = 1 - \langle U^4 \rangle_L / 3 \langle U^2 \rangle_L^2, \quad (4)$$

$$U_L = 1 - \langle M^4 \rangle_L / 3 \langle M^2 \rangle_L^2, \quad (5)$$

где V_L — кумулянт по энергии, U_L — кумулянт по намагниченности.

Выражения (4) и (5) позволяют определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение кумулянтов Биндера дает возможность также хорошо тестировать тип ФП в системе. Известно, что в случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения [24, 25].

На рис. 3 представлена характерная зависимость U_L от температуры при $k = 0$ для разных значений L . Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. На рисунке видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 6.349(1)$, здесь и далее температура дана в единицах $|J|/k_B$), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений $k = 0-1.0$. Значение критической температуры, полученное нами для случая $k = 0$, очень близко к значению $T_N = 6.354$, полученному в работах [3, 4].

В таблице представлены значения кумулянтов Биндера в критической точке для разных k . Как видно в таблице, значения кумулянтов Биндера не

Таблица. Значения кумулянтов Биндера в критической точке для разных k

k	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	0 [17]
U_L	0.482(2)	0.480	0.478	0.480	0.481	0.479	0.478	0.481	0.482	0.480	0.480	0.47(1)

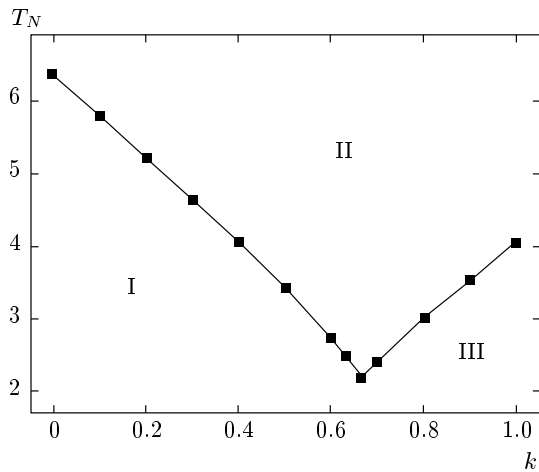


Рис. 4. Фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей

зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Здесь же для сравнения приведено значение кумулянтов Биндера для фрустрированной трехмерной модели Изинга на простой кубической решетке [17], которое в пределах погрешности совпадает с нашими данными.

На рис. 4 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. На диаграмме мы видим, что вблизи точки $k = 2/3$ пересекаются три различные фазы: I — антиферромагнитная, II — парамагнитная и III — антиферромагнитная второго типа [7, 8]. На этом рисунке видно, что по мере приближения к значению $k = 2/3$ критическая температура T_N уменьшается. Можно предположить, что для рассмотренной нами модели при $k = 2/3$ система будет иметь минимальную температуру фазового перехода.

На рис. 5 и 6 приведены гистограммы распределения энергии для случаев $k = 0$ и $k = 0.8$. Графики построены вблизи критической точки для решеток с размерами $L = 90$. На рисунках мы наблюдаем один пик, что характерно для фазовых переходов второго рода [20, 21]. Более подробно эта процедура описана нами в работе [21]. Аналогичные гистограммы были

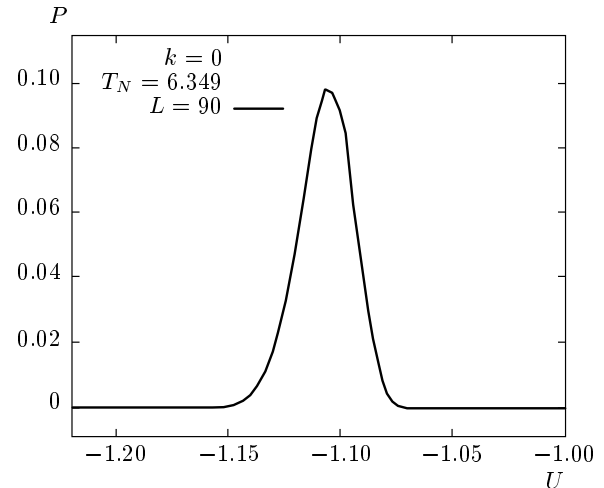


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии для случая $k = 0$

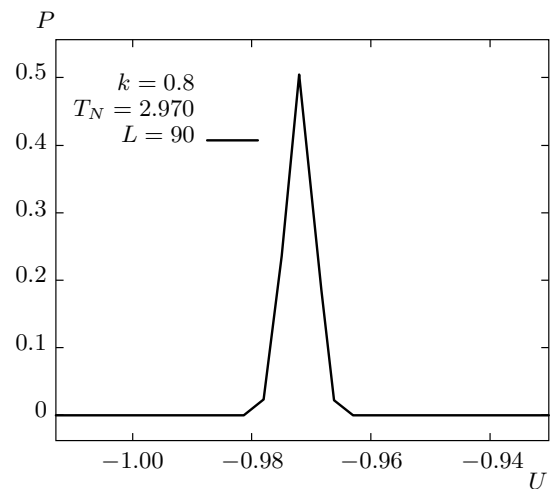


Рис. 6. Гистограмма распределения энергии для случая $k = 0.8$

построены и для остальных значений $k = 0-1.0$, они свидетельствуют о том, что во всем рассмотренном нами интервале значений k наблюдаются фазовые переходы второго рода. Из полученных нами результатов следует, что в отличие от работ [7, 8] оба перехода являются фазовыми переходами второго рода.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование фазовых переходов в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода МК. На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов для различных соотношений величины взаимодействия k первых и вторых ближайших соседей. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Показано, что во всем интервале $0 \leq k \leq 1.0$ наблюдается фазовый переход второго рода.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Бакстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
2. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).
3. P. H. Lundow, K. Markstrom, and A. Rosengren, *Phil. Mag.* **89**, 2042 (2009).
4. P. Butera and M. Comi, *Phys. Rev. B* **65**, 144431 (2002).
5. P. Butera and M. Comi, *Phys. Rev. B* **72**, 014442 (2005).
6. M. Plischke and J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **19**, 487 (1979).
7. J. R. Banavar, D. Jasnow, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **20**, 3820 (1979).
8. M. J. Velgakis and M. Ferer, *Phys. Rev. B* **27**, 401 (1983).
9. Р. С. Гехт, *УФН* **159**, 2 (1989).
10. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. К. Рамазанов, *ФНТ* **32**, 323 (2006).
11. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, *Phys. Rev. B* **50**, 6854 (1994).
12. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ФНТ* **35**, 663 (2009).
13. Н. Kawamura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 1299 (1992).
14. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, *ФТТ* **53**, 1004 (2011).
15. Л. Е. Свистов, А. И. Смирнов, Л. А. Прозорова и др., *Письма в ЖЭТФ* **80**, 231 (2004).
16. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ФТТ* **52**, 1557 (2010).
17. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, М. К. Рамазанов, *ФТТ* **47**, 1125 (2005).
18. A. Mitsutake, Y. Sugita, and Y. Okamoto, *Biopolymers (Peptide Science)* **60**, 96 (2001).
19. А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев, *ЖЭТФ* **132**, 1152 (2007).
20. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
21. М. К. Рамазанов, *Письма в ЖЭТФ* **94**, 335 (2011).
22. K. Binder and J.-Sh. Wang, *J. Stat. Phys.* **55**, 87 (1989).
23. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **43**, 6087 (1991).
24. K. Binder, *Z. Phys. B* **43**, 119 (1981).
25. А. К. Муртазаев, И. К. Камилов, and К. К. Алиев, *J. Magn. Magn. Mater.* **204**, 151 (1999).