

КРИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ В ОБЛАСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ИЗ МОДУЛИРОВАННОЙ ФАЗЫ В ПАРАМАГНИТНУЮ

*А. К. Муртазаев**, *Ж. Г. Ибаев***

*Институт физики им. Х. А. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Республика Дагестан*

*Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Республика Дагестан*

Поступила в редакцию 28 мая 2018 г.

Методами Монте-Карло проведены исследования анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями в области фазового перехода из модулированной фазы в парамагнитную. С помощью гистограммного анализа данных и теории конечно-размерного скейлинга показано, что переход из модулированного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода. Рассчитаны критические параметры и температуры фазовых переходов в этой области. Показано, что фазовый переход «модулированная фаза–парамагнетик» невозможно описать в рамках известных классов универсальности критического поведения.

DOI: 10.1134/S0044451018120088

1. ВВЕДЕНИЕ

В природе помимо простых магнитных упорядочений (ферромагнитного, антиферромагнитного или ферримагнитного) существует еще и новый тип магнитного упорядочения — модулированное. Такое упорядочение, во-первых, может возникать в системах с конкуренцией обменного взаимодействия независимо от физической природы этого взаимодействия. Во-вторых, модулированные фазы — спирали могут возникать также и в магнетиках, в которых есть инварианты, линейные по градиентам намагниченности [1]. Такое взаимодействие называют «взаимодействием Дзялошинского–Мория», и такие магнетики, называемые киральными, широко обсуждают в связи с проблемой магнитных солитонов, см. работу [2] и ссылки в ней. Количество реальных материалов, в которых возможно модулированное упорядочение, давно уже перевалило за сотню [3–5].

* E-mail: akai2005@mail.ru

** E-mail: ibaev77@mail.ru

Отметим, что в зависимости от соотношения параметров конкурирующих взаимодействий и температуры в таких системах возможны разные типы магнитного упорядочения (ферромагнитное, модулированное, парамагнитное и т. д.). И соответственно в системах возможно несколько фазовых переходов различных типов. К примеру, в системах с модулированным магнитным упорядочением возможны переходы из однородного состояния в модулированное состояние, переходы в модулированной фазе между различными модулированными структурами и переход из модулированной фазы в парамагнитную. Экспериментальное и теоретическое изучение фазовых переходов и критических явлений является довольно сложной задачей даже для таких простых случаев, как переходы из ферромагнитной фазы в парамагнитную. Поэтому в настоящее время наиболее приемлемое и точное описание фазовых переходов и критических явлений дают только машинные расчеты методами Монте-Карло и молекулярной динамики.

На практике для описания систем, в которых возможно модулированное магнитное упорядочение, используются различные модели. Наиболее простой и эффективной среди них является ани-

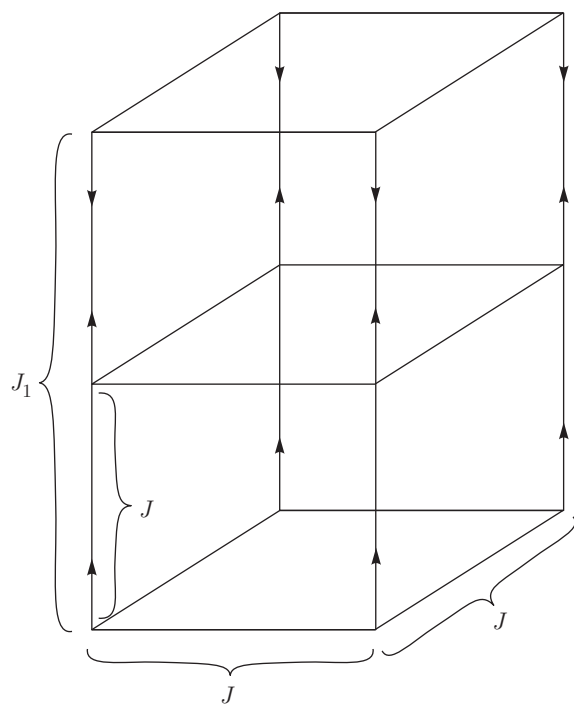


Рис. 1. Анизотропная модель с конкурирующими взаимодействиями

зотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями со вторыми ближайшими соседями (ANNNI-модель, рис. 1).

2. МОДЕЛЬ

ANNNI-модель появилась в статистической физике во второй половине XX века для объяснения спирального магнитного порядка в тяжелых редкоземельных металлах [6–9]. Его гамильтониан на правильной кубической решетке имеет вид

$$H_{ANNNI} = -\frac{1}{2} J \sum_{[i,j]} s_i s_j - \frac{1}{2} J_1 \sum_{\{i,j\}} s_i s_j, \quad (1)$$

где $s_i = \pm 1$, $J > 0$ — параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов, $J_1 < 0$ — параметр антиферромагнитного взаимодействия соседей, следующих за ближайшими вдоль оси z . Суммирование $[i, j]$ и $\{i, j\}$ соответствует парам ближайших соседей и соседей, следующих за ближайшими вдоль оси z .

ANNNI-модель точно решена только в одномерном случае [10]. Тем не менее некоторые ее особенности хорошо установлены и для высоких размерностей. Для трехмерного случая (3D) топология фазовой диаграммы $T-|J_1/J|$ включает три области, пересекающиеся в мультикритической точке Лиф-

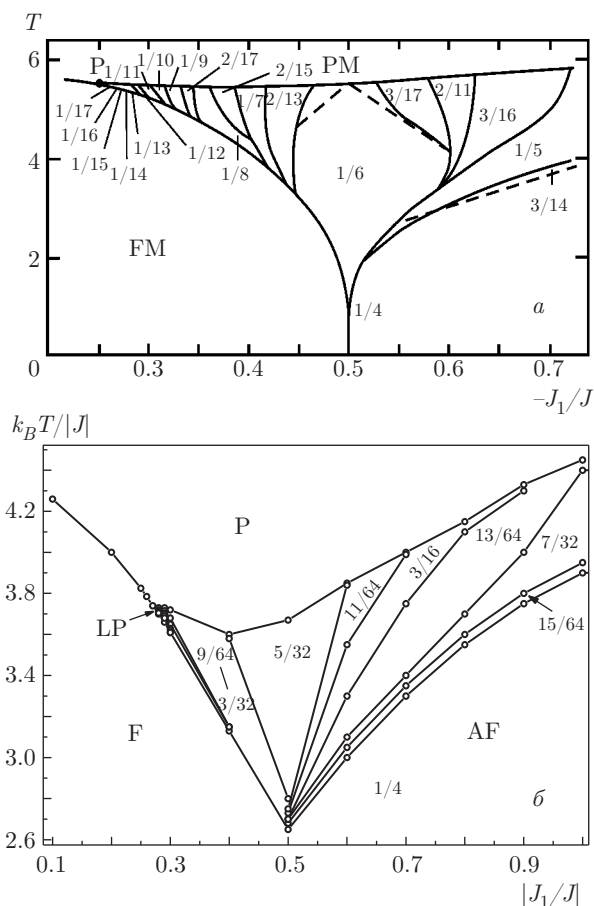


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями: а) по данным [17], б) по данным [12]

шица [11, 12]. При высоких температурах система парамагнитна, при низких T и малых $|J_1/J|$ — ферромагнитна, а при достаточно больших значениях $|J_1/J|$ образуются модулированные фазы (рис. 2).

Для описания фазового поведения рассматриваемой модели были использованы приближенные теоретические методы, включая высоко- и низкотемпературные разложения [13–15], теорию среднего поля [16] и другие теоретические аппроксимации [17–19].

Согласно литературным данным, с понижением температуры ANNNI-модель испытывает фазовый переход второго рода из парамагнитного в ближайшее упорядоченное состояние, а переход «ферромагнетик–модулированная фаза» является переходом первого рода [13].

Моделирование методом Монте-Карло [10, 20–24] проведено для значений $|J_1/J| = 0.1-1.0$, включая и мультикритическую область точки Лифшица [25]. Рассчитаны критические параметры фазовых переходов второго рода из ферромагнитного состояния

в парамагнитное, описано мультикритическое поведение системы в окрестности точки Лифшица.

Последние, наиболее точные критические показатели в окрестности точки Лифшица, получены с помощью анизотропного скейлинга [24] и методов Монте-Карло [25].

Согласно данным [23–28], критическое поведение систем с модулированными структурами при малых значениях $|J_1/J|$ описывается изинговским классом универсальности критического поведения. С повышением $|J_1/J|$ происходит кроссовер к критическому поведению, характерному для мультикритической точки Лифшица, и от него к XY-классу критического поведения [26–28].

В недавней работе [29] методами Монте-Карло были проведены исследования ANNNI-модели в модулированной области с использованием в качестве параметра порядка усредненного значения амплитуды модулированной структуры. Полученные результаты показали, что фазовый переход из модулированного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода. В данной работе мы представили результаты гистограммного анализа данных и получили значения критических параметров анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями при фазовом переходе из модулированной фазы в парамагнитную.

3. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ И ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для исследования мультикритических явлений в области фазового перехода из модулированного состояния в парамагнитную фазу использовались системы кубической формы с периодическими граничными условиями и размерами $L \times L \times L$; $L = 12–64$. Число спинов в моделируемых системах при этом составляло $N_{eff} = 1728–262144$. На ЭВМ генерировались марковские цепи длиной $\tau = 1000\tau_0$ ($\tau_0 = 10^4$ МК-шагов/спин — длина неравновесного участка). Усреднением вдоль этой цепи вычислялись термодинамические параметры системы. Кроме того, выполнялось усреднение по тысяче различных начальных конфигураций. При этом погрешность полученных результатов не превышает размеры используемых на рисунках символов.

Отметим, что в современной вычислительной физике не разработан алгоритм для более точного исследования ANNNI-модели во всей области изменения параметров $|J_1/J|$ и T . Использование высокоточных кластерных алгоритмов, в частности, од-

нокластерного алгоритма Вульфа [30], хотя и позволяет исследовать рассматриваемую систему в области фазового перехода второго рода, практически не дает никаких результатов в области модулированных фаз и ближайшей окрестности точки Лифшица. Предлагаемые в литературе [29, 31] модификации известных алгоритмов, в основном, призваны решать небольшие частные проблемы модели. Единственный алгоритм метода Монте-Карло, который не потерял своей эффективности для данной модели в любом интервале изменения параметров $|J_1/J|$ и T , — классический алгоритм Метрополиса. Хотя точность алгоритма невысокая, полученные результаты позволяют представить картину термодинамического и критического поведения ANNNI-модели.

Для исследования магнитных свойств модулированной области мы использовали величину

$$M_z = \frac{1}{L^2} \sum_{x,y} S_{x,y,z}, \quad (2)$$

представляющую собой усредненную намагниченность слоя, перпендикулярного оси z .

Значения волнового числа и характер амплитудной и фазовой модуляции определялись с помощью математического аппарата спектрального анализа, основанного на преобразованиях Фурье [32]:

$$M(z) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^N \left[a_k \cos \frac{2\pi kz}{L} + b_k \sin \frac{2\pi kz}{L} \right], \quad (3)$$

где

$$a_0 = \frac{1}{L} \sum_{z=1}^L M_z, \quad (4)$$

$$a_k = \frac{2}{L} \sum_{z=1}^L M_z \cos \frac{2\pi kz}{L}, \quad (5)$$

$$b_k = \frac{2}{L} \sum_{z=1}^L M_z \sin \frac{2\pi kz}{L}, \quad (6)$$

$$q = k/L, \quad (7)$$

k — номер гармоники.

Поскольку модулированные структуры являются гармоническими, волновое число q определяется значением k , при котором амплитудная функция $(a_k^2 + b_k^2)$ имеет максимум. На рис. 3 представлена характерная модулированная структура, возникающая в системе с $|J_1/J| = 0.7$ при $T = 3.4$, и график ее фурье-преобразования.

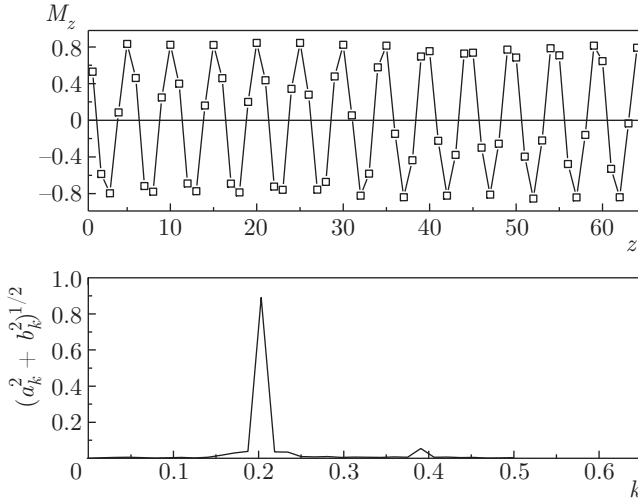


Рис. 3. Характерная модулированная магнитная структура и амплитуда ее фурье-преобразования ($T = 3.4$ и $|J_1/J| = 0.7$)

Температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости мы получили, используя выражения [16]

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (8)$$

$$\chi = (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (9)$$

где $K = |J|/k_B T$, U — внутренняя энергия, m — параметр порядка.

Отметим, что в качестве параметра порядка использована величина, представленная нами в предыдущей работе [29].

Для изучения свойств фазового перехода из модулированного состояния в парамагнитное использованы гистограммный анализ данных и теория конечно-размерного скейлинга (КРС). Использование этих методов позволяет определить тип фазового перехода.

В гистограммном анализе данных [33] вероятность обнаружения системы со значением энергии U и параметром порядка m определяется выражением

$$p(U, m) = \frac{1}{Z(K)} W(U, m) \exp(KU), \quad (10)$$

где $W(U, m)$ — число конфигураций с энергией U и параметром порядка m , $Z(K)$ — функция распределения энергии всей системы. На рис. 4 показаны результаты гистограммного анализа данных ANNNI-модели при фазовом переходе из модулированного состояния в парамагнитное для значения $|J_1/J| = 0.7$. Как видно на этом рисунке, на вероятности распределения энергии для двух значений

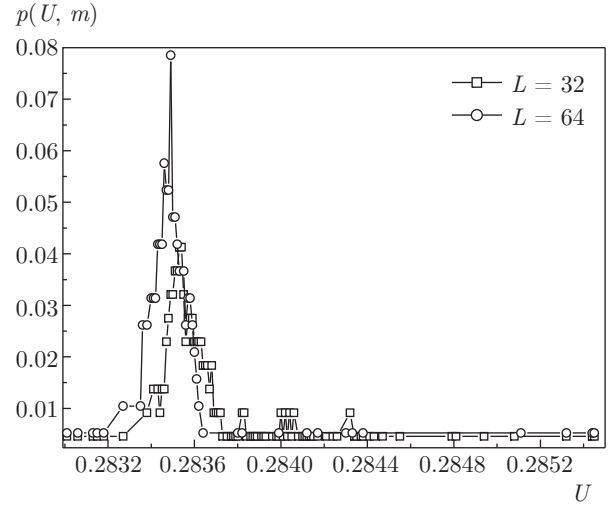


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии ANNNI-модели для $|J_1/J| = 0.7$ при фазовом переходе из модулированного состояния в парамагнитное

линейных размеров, $L = 32$, $L = 64$, наблюдается один хорошо выраженный максимум. Такое поведение зависимости $p(U, m)$ свидетельствует о том, что переход из модулированного состояния в парамагнитное является фазовым переходом второго рода.

Для расчета критической температуры использовался метод кумулянтов Биндера. Согласно [35] кумулянты

$$U_L = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2 \quad (11)$$

для систем с разными размерами L пересекаются в критической точке T_c . Построив температурные зависимости U_L для систем с разными размерами L , можно вычислить критические температуры систем. Значения критических температур, рассчитанные этим методом, для разных значений $|J_1/J|$ представлены в таблице.

Для расчета критических параметров намагниченности, восприимчивости и радиуса корреляции использовались соотношения теории КРС [35–38]. Из этих соотношений следует, что при $T = T_c$ и достаточно больших L

$$m \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (12)$$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu}, \quad (13)$$

$$V_n = L^{1/\nu} g_{V_n}, \quad (14)$$

где g_{V_n} — некоторая постоянная, а в качестве V_n может выступать

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

Таблица. Значения критических параметров ANNNI-модели

$ J_1/J $	T_c	α/ν	β/ν	γ/ν	$1/\nu$	α	β	γ	ν
0.271	3.736(1)	0.352	0.431	2.499	1.799	0.196(4)	0.240(4)	1.389(6)	0.556(6)
0.272	3.732	0.379	0.429	2.719	1.903	0.199	0.225	1.427	0.525
0.273	3.728	0.420	0.422	2.880	2.055	0.203	0.206	1.403	0.487
0.274	3.724	0.460	0.421	3.053	2.183	0.211	0.193	1.398	0.458
0.275	3.726	0.449	0.422	3.002	2.125	0.211	0.199	1.414	0.471
0.276	3.727	0.461	0.422	3.117	2.225	0.207	0.189	1.400	0.449
0.30	3.723(3)	0.142	0.447	2.109	1.609	0.088(4)	0.278(4)	1.312(6)	0.622(6)
0.40	3.602	0.113	0.472	1.919	1.613	0.059	0.293	1.190	0.620
0.50	3.672	0.101	0.492	1.980	1.550	0.065	0.317	1.277	0.645
0.60	3.854	0.060	0.501	1.953	1.493	0.040	0.336	1.309	0.670
0.70	3.976	0.011	0.516	1.967	1.492	0.007	0.346	1.318	0.670
0.80	4.152	0.012	0.522	1.971	1.489	0.008	0.350	1.323	0.671
0.90	4.334	0.011	0.509	1.965	1.490	0.007	0.342	1.319	0.671
1.00	4.455	0.014	0.514	1.970	1.502	0.009	0.342	1.312	0.666
XУ						-0.012	0.3485	1.315	0.671

Для аппроксимации теплоемкости использовалось выражение

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (16)$$

где a — некоторый коэффициент.

Для определения критических индексов мы в двойном логарифмическом масштабе построили графики зависимости термодинамических параметров от линейных размеров системы при $T = T_c$. На рис. 5–8 представлены характерные зависимости намагниченности, восприимчивости, теплоемкости и параметров V_i при $i = 1, 2, 3$ от линейных размеров решетки при $|J_1/J| = 0.7$. Как видно на рисунках, все точки на графиках в пределах погрешности хорошо ложатся на прямую. Угол наклона прямой на рис. 4–7 определяет значения $\beta/\nu, \gamma/\nu, \alpha/\nu, 1/\nu$.

Полученные значения критических индексов представлены в таблице.

Согласно данным этой таблицы, можно утверждать, что на значения критических индексов для $|J_1/J| \leq 0.4$ оказывает влияние близость мультикритической области [25], значения критических индек-

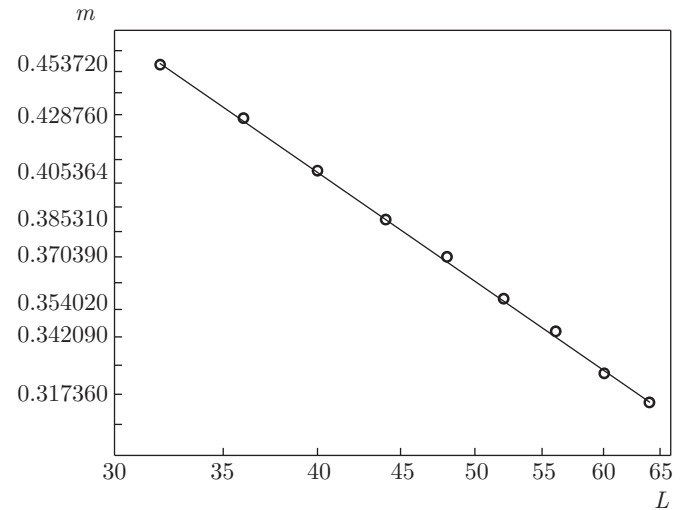


Рис. 5. Двойная логарифмическая зависимость намагниченности

сов намагниченности продолжают расти, а восприимчивости — падать. С ростом абсолютного значения $|J_1/J|$ характер изменения критических индексов намагниченности и восприимчивости приближа-

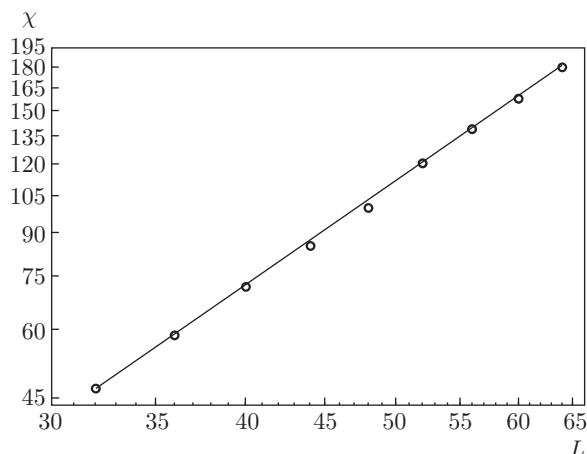


Рис. 6. Двойная логарифмическая зависимость восприимчивости

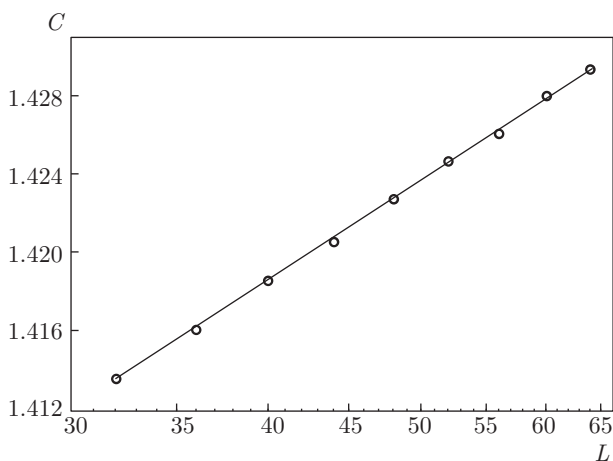


Рис. 7. Двойная логарифмическая зависимость теплоемкости

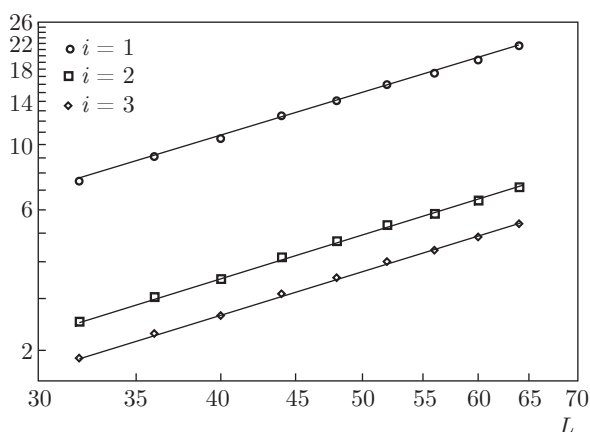


Рис. 8. Двойная логарифмическая зависимость V_i

ет систему к критическому поведению, характерному для XY-класса универсальности критического поведения. Поведение критического индекса радиуса корреляции тоже подтверждает переход системы от мультикритического поведения к поведению, характерному для XY-класса универсальности. А вот значения критического индекса теплоемкости невозможно описать в рамках известных классов универсальности. Эти критические индексы по знаку соответствуют критическому поведению, характерному для изинговского класса универсальности, а по абсолютному значению близки к значениям, характерным для XY-класса универсальности.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты показывают, что критическое поведение большинства систем отличается от предсказываемого для соответствующих классов универсальности. Причиной такого поведения являются различного рода анизотропные и конкурирующие взаимодействия, существующие в реальных системах. Учет всех возможных видов анизотропии и взаимодействий создает в системе различные типы магнитного упорядочения и, как следствие, мультикритические явления, что приводит к усложнению как термодинамического, так и критического поведения системы. Поэтому исследование подобных явлений также является важным условием при рассмотрении критических явлений. Разработка новых методов исследования и алгоритмов моделирования для исследования мультикритических явлений может не только способствовать изучению окрестности точки Лифшица, но и расширить применение методов Монте-Карло для изучения более сложных систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Г. Барьяхтар, Е. П. Стефановский, ФТТ **11**, 1946 (1969).
2. A. Schott, L. Bernard-Mantel, S. Ranno, J. Pizzini, H. Vogel, C. Béa, S. Baraduc, G. G. Auffret, and D. Givord, Nano Lett. **17**, 3006 (2017).
3. P. A. Fleury, Science, 211, 125 (1981).
4. М. А. Анисимов, Е. Е. Городецкий, В. М. Запрудский, УФН **133**, 103 (1981).
5. Ю. А. Изюмов, В. М. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва (1984), с. 241.

6. W. Selke, Phys. Rep. **170**, 213 (1988).
7. R. J. Elliott, Phys. Rev. **124**, 346 (1961).
8. J. Yeomans, E. Henry, and T. David, Sol. St. Phys. **41**, 151 (1988).
9. W. Selke, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lebowitz, Academic Press, London (1992), Vol. 15, p. 254.
10. W. Selke and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **20**, 257 (1979).
11. R. M. Hornreich, M. Luban, and S. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **35**, 1678 (1975).
12. A. K. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, ФНТ **35**, 1011 (2009).
13. T. Garel and P. Pfeuty, J. Phys. C **9**, L245 (1976).
14. S. Redner and H. E. Stanley, J. Phys. C: Sol. St. Phys. **10**, 4765 (1977); Phys. Rev. B **16**, 4901 (1977).
15. M. E. Fisher and W. Selke, Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. **302**, 1 (1981).
16. P. Peszák, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
17. P. Bak and J. Boehm, Phys. Rev. B **21**, 5297 (1980).
18. A. Surda, Phys. Rev. B **69**, 134116 (2004).
19. A. Gendiar and T. Nishino, Phys. Rev. B **71**, 024404 (2005).
20. W. Selke and M. E. Fisher, J. Magn. Magn. Mat. **15-8**, 403 (1980).
21. E. B. Rasmussen and S. J. Knak-Jensen, Phys. Rev. B **24**, 2744 (1981).
22. K. Kaski and W. Selke, Phys. Rev. B **31**, 3128 (1985).
23. M. Pleimling and M. Henkel, Phys. Rev. Lett. **87**, 125702 (2001).
24. A. K. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, ЖЭТФ **140**, 123 (2011).
25. A. K. Murtazaev and J. G. Ibaev, Sol. St. Comm. **152**, 177 (2012).
26. W. Selke, Z. Phys. B **29**, 133 (1978).
27. J. Oitmaa, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 365 (1985).
28. Y. Muraoka, T. Kasama, and T. Idogaki, J. Magn. Magn. Mat. E **995**, 272 (2004).
29. A. K. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев, ЖЭТФ **143**, 306 (2013).
30. U. Wolf, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
31. M. Henkel and M. Pleimling, Comp. Phys. Comm. **147**, 161 (2002).
32. R. J. Elliot, Phys. Rev. **124**, 346 (1961).
33. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).
34. K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
35. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
36. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landay, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
37. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
38. A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, and K. K. Aliev, J. Magn. Magn. Mat. **204**, 151 (1999).