

УДК 239.2

Рамазанов М.К., Муртазаев А.К.

Компьютерное моделирование фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнено компьютерное моделирование трехмерной антиферромагнитной модели Гейзенберга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Изучены фазовые переходы этой модели. Исследования проведены для соотношений величин обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей $r = J_2/J_1$ в диапазоне значений $0.0 \leq r \leq 1.0$. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей.

Библиография: 13 названий.

Based on the replica algorithm by the Monte Carlo method, a computer simulation of the three-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model is performed, taking into account the interactions of the first and second nearest neighbors. The phase transitions of this model are studied. The investigations were carried out for the ratios of the exchange interactions of the first and second nearest neighbors $r = J_2/J_1$ in the range $0.0 \leq r \leq 1.0$. The phase diagram of the critical temperature dependence on a value of the next-nearest neighbor interaction is plotted.

Bibliography: 13 items.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, репличный алгоритм, фазовые переходы

Keywords: Monte Carlo method, replica algorithm, phase transitions

Введение

В настоящее время значительное внимание уделяется исследованию магнитных состояний и фазовых переходов (ФП) в спиновых системах с фruстрациями. Это связано с тем, что эти системы проявляют поведение, отличное от поведения соответствующих нефрустрированных систем [1, 2]. Наличие фruстраций в магнитных материалах может привести к большому разнообразию магнитных упорядоченных состояний и ФП между ними.

Интерес к антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке обусловлен тем, что учет антиферромагнитных взаимодействия вторых ближайших соседей может привести к возникновению фruстраций. ФП фрустрированных систем на ОЦК решетках с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей практически не исследованы.

В связи с этим, в настоящей работе нами на основе метода Монте-Карло (МК) проводятся исследования ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке для различных соотношений величины обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с ФП фрустрированных спиновых систем.

1. Постановка задачи и результаты

В данной работе, нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма метода МК провести компьютерное моделирование ФП антиферромагнитной модели Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Антиферромагнитная модель Гейзенберга на ОЦК решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается следующим гамильтонианом:

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

где $|\vec{S}_i|$ трехкомпонентный единичный вектор $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Первый

член в формуле (1) учитывает обменное взаимодействие первых ближайших соседей ($J_1 < 0$), а второй - вторых ближайших соседей ($J_2 < 0$). Известно, что для данной модели при $J_2 = 0$ основное состояние имеет обычное антиферромагнитное упорядочение. Ненулевое обменное взаимодействие J_2 может нарушить данный порядок и привести к возникновению фruстриаций.

В последние годы ФП фрустрированных спиновых систем на основе микроскопических гамильтонианов довольно успешно изучаются методами МК [3–9]. Методы МК позволяют исследовать физические свойства спиновых систем практически любой сложности. На их основе, на сегодняшний день, изучены целые классы спиновых систем и рассчитаны критические индексы широкого спектра моделей. В данном исследовании нами был использован репличный обменный алгоритм метода МК [10], который является наиболее мощными и эффективными для исследования фрустрированных спиновых систем. Более подробно этот алгоритм описан нами в работе [11].

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $2 \times L \times L \times L = N$, $L = 24/90$, где L измеряется в размерах элементарной ячейки. Соотношение величины обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей $r = |J_2/J_1|$ меняется в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался неравновесный участок длиной $\tau_0 = 4 \times 10^5$ МК шагов на спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических параметров проводилось вдоль марковской цепи длиной до $\tau = 500\tau_0$ МК шагов на спин.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости C и восприимчивости χ использовались выражения [12]:

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

$$\chi = (NK) (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad T < T_N \quad (3)$$

где $K = |J|/k_B T$, N – число частиц, T_N – критическая температура (здесь и далее температура дана в единицах $|J_1|/k_B$), U – внутренняя энергия, M – параметр порядка (U и M являются нормированными величинами).

Для определения критической температуры T_N , был использован метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка:

$$V_L = 1 - \frac{\langle U^4 \rangle}{3\langle U^2 \rangle_L^2}, \quad (4)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle_L^2}, \quad (5)$$

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.

На рис. 1 представлена характерная зависимость U_L от температуры для $r = 0.6$ при разных значениях L . Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. На рисунке видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения ($T_N = 0.871(1)$), что свидетельствует о ФП второго рода. Аналогичным образом были определены критические температуры и для остальных значений r .

Для более подробного анализа характера ФП был также использован гистограммный анализ данных метода МК [4, 13]. Этот метод позволяет надежно определить род ФП.

На рис. 2 представлены гистограммы распределения энергии для случая $r = 2/3$ с линейными размерами $L = 90$. Графики построены при критической температуре ($T_N = 0.670(1)$) и вблизи нее. Из рисунка видно, что в зависимости вероятности W от энергии E/N для всех значений температур наблюдаются один хорошо выраженный максимум, который свидетельствует в пользу ФП второго рода.

На рис. 3 представлены гистограммы распределения энергии для системы с линейными размерами $L = 80$ для случая $r = 0.7$. Как видно из рисунка, вблизи температуры ФП ($T_N = 0.7643$) в системе наблюдается бимодальное распределение энергии. Наличие двойного максимума в зависимости вероятности W от энергии E/N является характерным признаком ФП первого рода.

На рис. 4 приведена фазовая диаграмма зависимости критической температуры T_N от величины взаимодействия вторых ближайших соседей r . Как видно из рисунка, по мере приближения к точке $r = 2/3$, где существуют три фазы, температура ФП смещается в сторону более низких температур. На диаграмме видно, что в точке $r = 2/3$ пересекаются три различные фазы: антиферромагнитная - AF1, парамагнитная - РМ и антиферромагнитная - AF2.

Наши результаты показывают, что в интервалах $0.0 \leq r \leq 0.6$ и $0.8 \leq r \leq 1.0$ наблюдается ФП второго рода. Установлено, что в интервале $2/3 < r \leq 0.75$ переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как ФП первого рода. Обнаружено, что для случая $r = 2/3$ наблюдается ФП второго рода.

Заключение

Компьютерное моделирование фазовых переходов антиферромагнитной модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоеффективного репликного алгоритма метода Монте-Карло. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Установлено, что в интервале значений $2/3 < r \leq 0.75$ в исследуемой модели переход из антиферромагнитной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход первого рода.

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

Список литературы

- [1] Dotsenko V. S. Critical phenomena and quenched disorder // Phys. Usp. 1995. V. 38. N. 5. P. 457-496.
- [2] Korshunov S. E. Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // Phys. Usp. 2006. V. 49. N. 3. P. 225-262.
- [3] Ramazanov M. K., Murtazaev A. K. Phase transitions and critical characteristics in the layered antiferromagnetic Ising model with next-

- nearest-neighbor intralayer interactions // JETP Lett. 2015. V. 101. N. 10. P. 714-718.
- [4] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной модели Гейзенберга на слоистой кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. вып. 2. С. 72 - 77.
- [5] Ramazanov M.K., Murtazaev A.K. Investigation of critical phenomena of the frustrated Ising model on a cubic lattice with next-nearest-neighbor intralayer interactions by the Monte Carlo method // Phase Transitions. 2018. V. 91. No. 1. P. 83-91.
- [6] Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К. Фазовая диаграмма и структура основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 107. вып. 4. С. 265 - 269.
- [7] Murtazaev A. K., Ramazanov M. K., Badiev M. K. Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions // Phys. B: Cond. Matt. 2015. V. 476. P. 1-5.
- [8] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Phase transitions and critical phenomena in the antiferromagnetic Ising model on a layered triangular lattice // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2018. V. 507. P. 210-218.
- [9] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Компьютерное моделирование критических свойств фruстрированной модели Изинга // Дагестанские электронные математические известия. 2018. Вып.9. С.26-32.
- [10] Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Generalized-Ensemble Algorithms for Mo-lecular Simulations of Biopolymers. Biopolymers (Peptide Science). 2001. V. 60. N. 2. P. 96-123.
- [11] Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Курбанова Д.Р., Магомедов М.А., Бадиев М.К., Мазагаева М.К. Исследование фазовых переходов и критических свойств модели Гейзенберга на объемно-центрированной кубической решетке // Физика твердого тела. 2019. Т.61. вып.6. С.1170 - 1174.
- [12] Peczak P., Ferrenberg A. M., Landau D. P. High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. N/ 7. P. 6087-6093.

- [13] Рамазанов М.К., Муртазаев А.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной слоистой модели Изинга на кубической решетке // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 103. вып. 7. с. 522 - 526.

Рамазанов М.К. (Ramazanov M.K.)

Отдел математики и информатики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в редакцию

30.01.2019

Муртазаев А.К. (Murtazaev A.K.)

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН

E-mail: akai2005@mail.ru