УДК 239.2

М. К. Рамазанов, А. К. Муртазаев

Компьютерное моделирование критических свойств фрустрированной модели Изинга

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнено компьютерное моделирование трехмерной антиферромагнитной модели Изинга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей. Изучены критические свойства этой модели. Исследования проведены для соотношений величин обменных взаимодействий первых и вторых ближайших соседей $r = J_2/J_1$ в диапазоне значений $0.0 \leq r \leq 1.0$. В рамках теории конечномерного скейлинга рассчитаны все основные статические критические индексы.

Библиография: 15 названий.

Based on the replica algorithm by the Monte Carlo method, a computer simulation of the three-dimensional antiferromagnetic Ising model is performed, taking into account the interactions of the first and second nearest neighbors. The critical properties 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 $0.0 \leq r \leq 1.0$. In the framework of the theory of finite-dimensional scaling, all the main static critical exponents are calculated.

Bibliography: 15 items.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, репличный алгоритм, критические индексы

Keywords: Monte Carlo method, replica algorithm, critical exponents

Введение

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию магнитных состояний, фазовых переходов (ФП) и критических явлений в спиновых системах с фрустрациями. Это связано с тем, что эти системы проявляют поведение, отличное от поведения соответствующих нефрустрированных систем [1, 2]. Наличие фрустраций приводит к существенному изменению ряда свойств фундаментального характера. Среди них можно отметить проблемы, связанные с определением характера ФП, с особенностями и факторами влияющими на формирование классов универсальности магнитного и кирального критического поведения фрустрированных спиновых систем и др. Кроме того, учет

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-02-00214-а и № 16-32-00105-мол-а.

антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга приводит к вырождению основного состояния, появлению различных фаз, ФП и аномалий критических свойств [2].

Интерес к антиферромагнитной модели Изинга на кубической и объемно-центрированной кубической (ОЦК) решетке обусловлен тем, что учет антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей может привести к возникновению фрустраций. Критические свойства фрустрированных систем на кубической и ОЦК решетках с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей практически не исследованы. Кроме того, 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 критическими свойствами фрустрированных спиновых систем.

1. Постановка задачи и результаты

В данной работе, нами предпринята попытка на основе репличного алгоритма метода Монте-Карло (МК) провести компьютерное моделирование критических свойств антиферромагнитной модели Изинга на кубической и ОЦК решетках с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей.

Антиферромагнитная модель Изинга с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей описывается гамильтонианом:

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i \cdot S_j) + J_2 \sum_{\langle i,l \rangle} (S_i \cdot S_l) \quad (1.1)$$

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин. Для модели Изинга на ОЦК решетке первый член в формуле (1.1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей величиной $J_1 > 0$, а второй – вторых ближайших соседей $J_2 > 0$; $r = J_2/J_1$ – величина взаимодействия вторых следующих соседей. Схематически эта модель представлена на рис. 1. Для модели Изинга на кубической решетке первый член в формуле (1.1) учитывает обменное взаимодействие ближайших соседей, которое берется одинаковым как внутри слоев решетки, так и между слоями ($J_1 > 0$), второй – вторых ближайших соседей, находящихся в том же слое решетки ($J_2 > 0$). Решетка состоит из двумерных квадратных слоев, сложенных по ортогональной оси.

Антиферромагнитная модель Изинга на ОКЦ и кубической решетке при учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей становится фрустрированной. Фрустрации в этой модели обусловлены конкуренцией обменных взаимодействий между первыми и вторыми ближайшими соседями.

Исследование критических свойств фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкиваются с рядом труднопреодолимых 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 [3–8], но обычные методы МК плохо справляются с решением этих проблем. В связи с этим, в последнее время разработано много новых вариантов алгоритмов метода МК, которые позволяют преодолеть эти проблемы. Одними из наиболее мощных и эффективных в исследовании критических явлений в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК [9, 10]. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК.

Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и линейными размерами $LxLxL = N$, где $L = 12 \div 90$ и измеряется в размерах элементарной ячейки. Соотношение обменного взаимодействия следующих и ближайших соседей менялось в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался 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.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости C и восприимчивости χ использовались выражения [11, 12]:

$$C = (NK^2)(\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2) \quad (1.2)$$

$$\chi = \{(NK)(\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)\}, \quad T < T_N \quad (1.3)$$

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 расчета статических критических индексов теплоемкости α , восприимчивости γ , параметра порядка β , радиуса корреляции ν и индекса Фишера η применялись соотношения теории конечно-размерного скейлинга (КРС) [7, 12].

Из теории КРС следует, что в системе с размерами $LxLxL$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения [12]:

$$M \sim L^{-\beta/\nu} \quad (1.4)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu} \quad (1.5)$$

$$V_n \sim L^{1/\nu} g_{V_n} \quad (1.6)$$

где g_{V_n} – некоторая постоянная, а в качестве V_n могут выступать:

$$V_n = \frac{\langle M^n U \rangle}{\langle M^n \rangle} - \langle U \rangle, \quad (n = 1, 2, 3). \quad (1.7)$$

Эти выражения были нами использованы для определения β , γ и ν .

Для аппроксимации температурной зависимости теплоемкости от L на практике, как правило, используется выражение [4]:

$$C_{max}(L) = A_1 - A_2 L^{\alpha/\nu} \quad (1.8)$$

где A_1 и A_2 - некоторые коэффициенты.

Все значения статических критических индексов, полученные таким образом, представлены в таблицах 1 и 2.

Как видно из таблицы 1 почти все значения критических индексов для модели Изинга на ОЦК решетке, рассчитанные нами в интервале $0.0 \leq r \leq 0.6$, в пределах погрешности совпадают между собой. Это свидетельствует о том, что в этом интервале система проявляет универсальное критическое поведение. В интервале $0.8 \leq r \leq 1.0$ значения критических индексов отличаются от соответствующих значений из интервала $0.0 \leq r \leq 0.6$. Можно предположить, что при увеличении величины взаимодействия следующих ближайших соседей в системе происходит смена класса универсальности критического поведения. Кроме того, в интервале $0.8 \leq r \leq 1.0$ индексы меняются с изменением r . Это позволяет нам говорить о том, что в этом интервале наблюдается неуниверсальное критическое поведение.

Отметим, что полученные нами значения критических индексов в интервале $0.0 \leq r \leq 0.6$, в пределах погрешности совпадают с соответствующими значениями критических индексов для нефрустрированной трехмерной модели Изинга [13]. Это свидетельствует о принадлежности исследуемой нами модели к тому же классу универсальности критического поведения, что и нефрустрированная модель Изинга.

В таблице 2 приведены значения критических параметров для модели Изинга на кубической решетке. Все значения критических индексов, рассчитанные нами в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$, в пределах погрешности совпадают со значениями критических индексов трехмерной нефрустрированной модели Изинга [13]. Это свидетельствует о принадлежности данной модели в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$ к тому же классу универсальности критического поведения, что и нефрустрированная модель Изинга. Значения критических индексов, рассчитанные нами для $r = 0.9$ и $r = 1.0$, хорошо согласуются с теми, что получены в работах [14, 15] для полностью фрустрированной трехмерной модели Изинга на кубической решетке, но они сильно отличаются от данных, полученных нами для этой модели в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$. Можно предположить, что учет взаимодействий следующих ближайших соседей внутри слоев решетки для антиферромагнитной слоистой модели Изинга на кубической решетке приводит к тому же классу универсальности критического поведения, что и трехмерная полностью фрустрированная модель Изинга на кубической решетке.

2. Заключение

Компьютерное моделирование критических свойств антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической и кубической решетке с учетом взаимодействий первых и вторых ближайших соседей выполнено с использованием высокоэффективного репличного алгоритма метода Монте-Карло. Рассчитаны значения всех основных статических критических индексов в интервале $0.0 \leq r \leq 1.0$. Установлены закономерности изменения критических параметров в рассмотренном интервале r . Обнаружено, что модель Изинга на

объемно-центрированной кубической решетке проявляет универсальное критическое поведение в интервале $0.0 \leq r \leq 0.6$, а модель Изинга на кубической решетке в интервале $0.0 \leq r \leq 0.4$. В интервале значений $0.8 \leq r \leq 1.0$ для модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке наблюдается неуниверсальное критическое поведение. Показано, что в антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей внутри слоев решетки для значений $r = 0.9$ и $r = 1.0$ наблюдается другое критическое поведение.

3. Приложение

Рис. 1. Схематическое изображение объемно-центрированной кубической решетки.

r	α	β	γ	ν	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
0.0	0.13(2)	0.31(1)	1.23(1)	0.63(1)	0.04(2)	1.98
0.1	0.13(2)	0.30(1)	1.24(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.97
0.2	0.13(2)	0.31(1)	1.23(1)	0.62(1)	0.02(2)	1.98
0.3	0.12(2)	0.31(1)	1.25(1)	0.64(1)	0.04(2)	1.99
0.4	0.13(2)	0.31(1)	1.22(1)	0.63(1)	0.05(2)	1.97
0.5	0.12(2)	0.31(1)	1.24(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.98
0.6	0.13(2)	0.31(1)	1.22(1)	0.62(1)	0.03(2)	1.97
0.8	0.63(2)	0.20(1)	1.0(1)	0.48(1)	-0.07(2)	2.03
0.9	0.47(2)	0.22(1)	1.12(1)	0.54(1)	-0.05(2)	2.03
1.0	0.40(2)	0.25(1)	1.14(1)	0.58(1)	-0.01(2)	2.04
Нефру- стриро- ванная модель Изинга [13]	0.108(9)	0.3265 (25)	1.239(4)	0.6305 (25)	0.037(3)	1.999

Таблица 1. Значение критических параметров для антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке.

r	$k_B \frac{T_N}{J_1}$	α	β	γ	ν	η	$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
Нефру- стриро- ванная модель Изинга [13]	4.5111 (3)	0.6305 (25)	0.108 (9)	0.3625 (25)	1.239 (4)	0.037 (3)	2
0.0	4.5110 (2)	0.630 (5)	0.110 (5)	0.320 (5)	1.241 (5)	0.03 (1)	1.991
0.1	4.1020 (2)	0.625 (5)	0.115 (5)	0.317 (5)	1.238 (5)	0.02 (1)	1.986
0.2	3.4440 (2)	0.633 (5)	0.119 (5)	0.328 (5)	1.237 (5)	0.04 (1)	2.012
0.3	3.2050 (2)	0.624 (5)	0.118 (5)	0.319 (5)	1.243 (5)	0.02 (1)	1.999
0.4	2.6820 (2)	0.632 (5)	0.110 (5)	0.322 (5)	1.245 (5)	0.02 (1)	1.999
0.9	3.8250 (2)	0.550 (5)	0.339 (5)	0.249 (5)	1.118 (5)	0.14 (1)	2.025
1.0	4.1730 (2)	0.549 (5)	0.330 (5)	0.245 (5)	1.190 (5)	0.16 (5)	2
1.0 [14]	1.355 (2)	0.55 (2)	0.33 (5)	-	-	0.28 (6)	-
1.0 [15]	1.347 (1)	0.56 (2)	0.32 (2)	0.25 (2)	-	0.10 (2)	-

ТАБЛИЦА 2. Значения критических параметров для антиферромагнитной модели Изинга на кубической решетке.

Список литературы

- [1] Dotsenko V.S. Critical phenomena and quenched disorder // Phys. Usp. 1995. Vol. 38. No. 5. Pp. 457–496.
- [2] Korshunov S.E. Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy // Phys. Usp. 2006. Vol. 49. No. 3. Pp. 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. Vol. 101. No. 10. Pp. 714–718.
- [4] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Critical properties of an antiferromagnetic Ising model on a square lattice with interactions of the next-to-nearest neighbors // Low Temp. Phys. 2011. Vol. 37. No. 12. Pp. 1001–1005.
- [5] Kassan-Ogly F.A., Filippov B.N., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Influence of field on frustrations in low-dimensional magnets // J. Magn. Mater. 2012. Vol. 324. No. 21. Pp. 3418–3421.

- [6] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K. Phase transitions and critical properties of the frustrated Heisenberg model on a layer triangular lattice with next-to-nearest-neighbor interactions // J. Exp. Theor. Phys. 2012. Vol. 115. No. 2. Pp. 303–308.
- [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. Vol. 476. Pp. 1–5.
- [8] Kassan-Ogly F.A., Murtazaev A.K., Zhuravlev A.K., Ramazanov M.K., Proshkin A.I. Ising model on a square lattice with second-neighbor and third-neighbor interactions // J. Magn. Magn. Mater. 2015. Vol. 384. Pp. 247–254.
- [9] Mitsutake A., Sugita Y., Okamoto Y. Generalized-Ensemble Algorithms for Molecular Simulations of Biopolymers // Biopolymers (Peptide Science). 2001. Vol. 60. No. 2. Pp. 96–123.
- [10] Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Kassan-Ogly F.A., Badiev M.K. Phase transitions in the antiferromagnetic Ising model on a square lattice with next-nearest-neighbor interactions // J. Exp. Theor. Phys. 2013. Vol. 117. No. 6. Pp. 1091–1096.
- [11] Binder K., Wang J-Sh. Finite-size effects at critical points with anisotropic correlations: Phenomenological scaling theory and Monte Carlo simulations // J. Stat. Phys. 1989. Vol. 55. No. 1-2. Pp. 87–126.
- [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. Vol. 43. No. 7. Pp. 6087–6093.
- [13] Le Guillou J.C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 21. No. 9. Pp. 3976–3998.
- [14] Diep H.T., Lallemand P., Nagai O. Critical properties of a simple cubic fully frustrated Ising lattice by Monte Carlo method // J. Phys. C: Solid State Phys. 1985. Vol. 18. No. 5. Pp. 1067–1078.
- [15] Bernardi L.W., Hukushima K., Takayama H. Fully frustrated Ising system on a 3D simple cubic lattice: revisited // J. Phys. A: Math. Gen. 1999. Vol. 32. No. 10. Pp. 1787–1800.

М. К. Рамазанов (M. K. Ramazanov)

Дагестанский научный центр РАН

E-mail: sheikh77@mail.ru

Поступила в редакцию

19.04.2018

А. К. Муртазаев (A. K. Murtazaev)

Институт физики Дагестанского научного центра РАН

E-mail: akai2005@mail.ru