

ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С КОНКУРИРУЮЩИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ В ОБЛАСТИ ПЕРЕХОДА ИЗ ФЕРРОМАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ В ПАРАМАГНИТНОЕ

*А. К. Муртазаев, Ж. Г. Ибаев**

*Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук
367003, Махачкала, Россия*

*Дагестанский государственный университет
367025, Махачкала, Россия*

Поступила в редакцию 22 марта 2019 г.,
после переработки 3 июня 2019 г.
Принята к публикации 12 июня 2019 г.

Методами Монте-Карло на основе алгоритма Ванга–Ландау проведены исследования двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями в области фазового перехода из ферромагнитного состояния в парамагнитную фазу. Получены графики плотности распределения состояний и вычислены значения параметра порядка, соответствующие различным значениям энергии. Рассчитаны температурные зависимости термодинамических параметров: внутренней энергии, намагниченности, свободной энергии, энтропии, теплоемкости намагниченности и кумулянтов Биндера. Используя метод кумулянтов Биндера и гистограммный анализ, мы показали, что при $|J_1/J| = 0.1$, $|J_1/J| = 0.2$ в двумерной ANNNI-модели происходит один фазовый переход второго рода из ферромагнитного состояния в парамагнитную фазу. Вычислены температуры фазовых переходов. С помощью теории конечно-размерного скейлинга получены значения основных критических индексов.

DOI: 10.31857/S0044451020010125

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитные свойства кристаллических твердых тел, имеющих одномерные или двумерные магнитные подрешетки (KCuF_3 , $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$, NH_4CuCl_3 и др.), в значительной мере определяются электронной корреляцией [1–3]. Во многих случаях подобные объекты не удается рассматривать как частный случай обычных трехмерных систем. Это существенно затрудняет теоретическое описание свойств низкоразмерных магнетиков традиционными методами статистической физики твердого тела [1–3].

При изучении квазиодномерных и квазидвумерных магнетиков в основном применяются упрощенные многоэлектронные подходы с использованием моделей Гейзенберга и Изинга [1,2]. Полученные для этих моделей результаты позволили доказать ряд теорем о характере точного энергетического спектра

и спиновой структуре основного состояния, которые имеют большое значение для тестирования результатов численного моделирования [4–6]. Но, как показывает практика, основные заключения о магнитной структуре, полученные в рамках этих упрощенных моделей, как правило, не сохраняются при переходе к более сложным моделям, например, учитывающим отталкивание электронов, расположенных на несоседних узлах кристаллической решетки [1,4].

Такое отталкивание порождает конкуренцию обменных взаимодействий, которая приводит к появлению различных типов магнитного упорядочения (ферромагнитное, модулированное, парамагнитное и т.д.). И соответственно в системах возможно несколько фазовых переходов различных типов. К примеру, в системах с модулированным упорядочением (т.е. с периодическим изменением намагниченности вдоль одного из кристаллографических направлений) возможны переходы из ферромагнитного состояния в модулированную фазу, переходы между структурами с различными значениями вол-

* E-mail: ibaev77@mail.ru

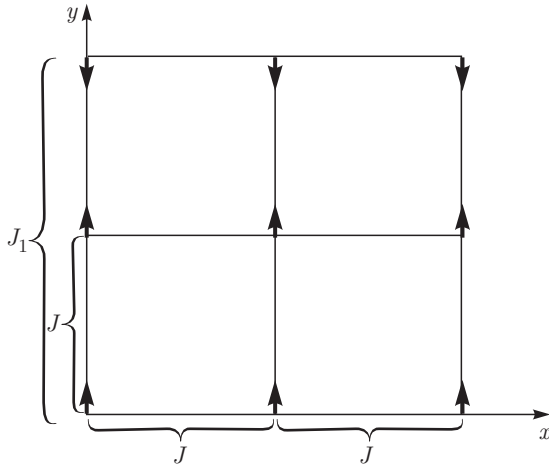


Рис. 1. Двумерная анизотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями

нового числа в модулированной фазе и переход из модулированной фазы в парамагнитную. Число реальных материалов с подобными свойствами давно уже перевалило за сотню [7].

На практике для описания систем с модулированным упорядочением используются различные модели. Наиболее простой и эффективной среди них является анизотропная модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями вторых ближайших соседей (рис. 1). Указанная модель, хотя и не позволяет точно описать какую либо реальную систему, тем не менее, дает хорошее качественное объяснение свойств систем с модулированным упорядочением.

Экспериментальное и теоретическое изучение свойств реальных магнетиков является довольно сложной задачей даже для таких простых случаев упорядочения, как ферромагнетики, антиферромагнетики и т. д. Поэтому в настоящее время наиболее приемлемое и точное описание свойств систем со сложным магнитным упорядочением можно получить моделированием на основе методов Монте-Карло и молекулярной динамики [8].

В данной работе приведены результаты, полученные при исследовании двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями, методами Монте-Карло на основе алгоритма Ванга – Ландау, для значений отношения констант обменных взаимодействий $|J_1/J| = 0.1$ и $|J_1/J| = 0.2$.

2. МОДЕЛЬ

Модель Изинга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными взаимодействиями

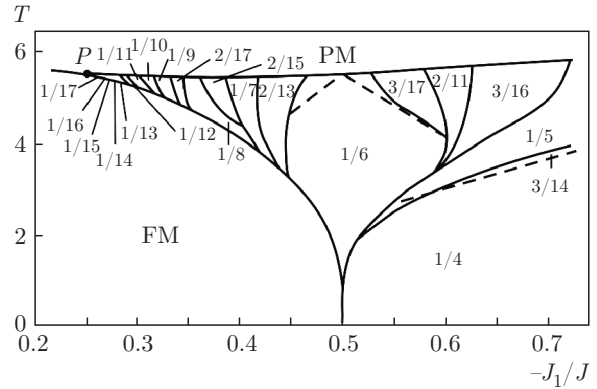


Рис. 2. Фазовая диаграмма анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями [6] (FM — ферромагнитная фаза, PM — парамагнитная фаза, P — точка Лифшица, дробные числа — значения волнового числа модулированной структуры)

ми (рис. 1) успешно используется для описания термодинамики пленок масляных микроэмульсий на поверхности твердых тел и носит название модели Видома [9]. Предполагается, что подобные модели могут быть использованы для оптимизации процессов экстракции, например, при нефтедобыче. Для описания магнитных систем используется двумерный аналог такой модели, которая впервые была введена для описания упорядоченных магнитных фаз в кристаллах CeSb [6].

Гамильтониан модели имеет вид

$$H_{ANNI} = -J \sum_{i,j} s_i s_j - J_1 \sum_i s_i s_{i+2}, \quad (1)$$

где $s_i = \pm 1$, $J > 0$ — параметр обменного взаимодействия соседних пар спинов, $J_1 < 0$ — параметр конкурирующего взаимодействия спинов, следующими за ближайшими по оси y .

Для описания фазового поведения и свойств рассматриваемой модели были использованы приближенные теоретические методы, включая высоко- и низкотемпературные разложения, теорию среднего поля, методы Монте-Карло и другие теоретические аппроксимации (см. ссылки в работе [10]).

Согласно имеющимся в литературе данным, ANNI-модель точно решена только в одномерном случае [7]. Получена фазовая диаграмма в координатах $T - |J_1/J|$ [6]. На этой диаграмме (рис. 2) выделены три области, пересекающиеся в мультикритической точке Лифшица P. При высоких температурах T система парамагнитна, с понижением T для $|J_1/J| < 0.3$ — ферромагнитна, а в остальном интервале изменения $|J_1/J|$ образуются модулированные фазы.

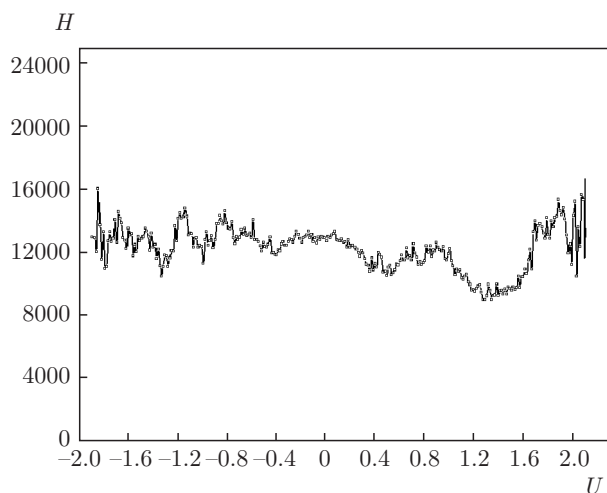


Рис. 3. Гистограмма посещения состояний для системы с $L = 40$ ($|J_1/J| = 0.1$)

Таким образом, в ANNNI-модели до точки Лифшица P происходит один фазовый переход из парамагнитного состояния в ферромагнитную фазу. После точки Лифшица возможны несколько переходов: 1) из парамагнитного состояния в модулированную фазу; 2) переходы в модулированной фазе между структурами с разными значениями волнового числа и 3) переход из модулированной фазы в ферромагнитную при $|J_1/J| < 0.5$ или антиферромагнитную фазу с волновым числом $q = 1/4$ при $|J_1/J| > 0.5$. Точка с $|J_1/J| = 0.5$ является мультифазной точкой с большой степенью вырождения основного состояния.

3. МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ И ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Как известно, основной проблемой при решении задач статистической физики является неизвестность аналитической функции плотности распределения состояний системы. Для решения указанной проблемы Вангом и Ландау [11] был предложен алгоритм, позволяющий достаточно просто вычислить числовую функцию плотности распределения.

При исследовании двумерной ANNNI-модели с помощью указанного алгоритма на ЭВМ моделировались квадратные решетки с периодическими граничными условиями и размерами $L \times L$; $L = 16, 20, 24, 28, 32, 36, 40$. Число спинов в моделируемой системе $N_{eff} = L \times L = 256-1600$. Основной цикл алгоритма состоял из $10^4 \cdot N_{eff}$ шагов Монте-Карло. Нормировка результатов проводилась до тех

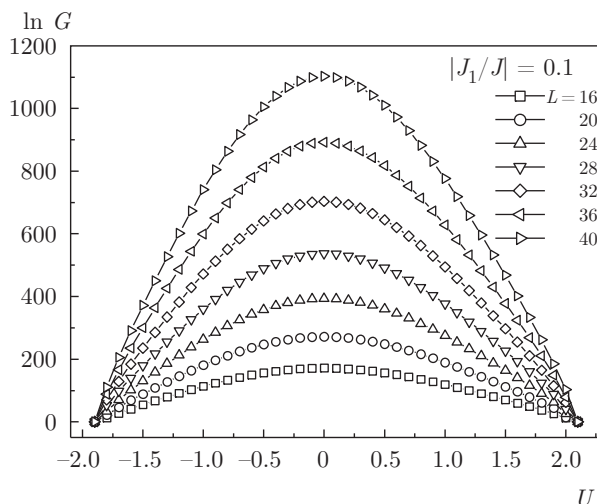


Рис. 4. Natural logarithm зависимости плотности распределения от энергии

пор, пока элементы вспомогательной матрицы $H(U)$ отличались не более чем на 10% (рис. 3). Процесс моделирования завершился при значениях параметра алгоритма f близких к единице, т. е. $\ln f = 10^{-9}$.

Полученные при этом типичные графики зависимости натурального логарифма плотности состояний от энергии системы при $|J_1/J| = 0.1$ представлены на рис. 4.

Помимо этого можно определить спиновые конфигурации, реализуемые в исследуемой системе для любых значений энергии, в частности, по нашим исследованиям удалось установить, что основным состоянием двумерной ANNNI-модели при рассматриваемых значениях $|J_1/J|$ является двукратно вырожденное ферромагнитное состояние.

Для изучения термодинамических свойств, зависящих от параметра порядка, рассчитывалась величина

$$M(U_i) = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^N s_{i,j}, \tag{2}$$

представляющая собой усредненную намагниченность системы для различных значений энергий U_i .

График зависимости $M(U_i)$ (рис. 5) представляет собой кривую, монотонно убывающую с увеличением энергии системы. Причиной такого поведения является разрушение коллинеарно упорядоченного состояния с ростом энергии.

Отметим, что подобные зависимости наблюдаются и при $|J_1/J| = 0.2$. Единственное отличие этих зависимостей в том, что максимальное значение плот-

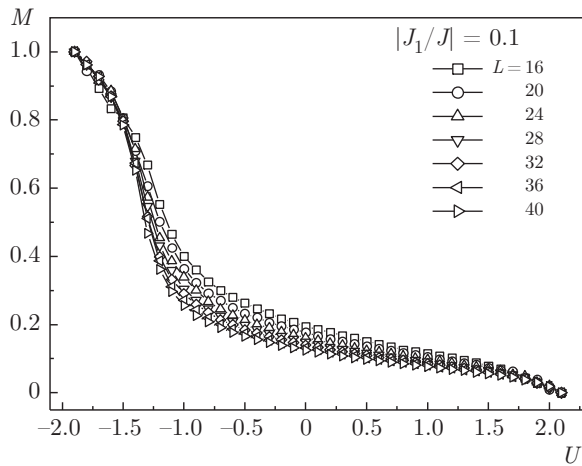


Рис. 5. График зависимости параметра порядка от энергии системы при $|J_1/J| = 0.1$

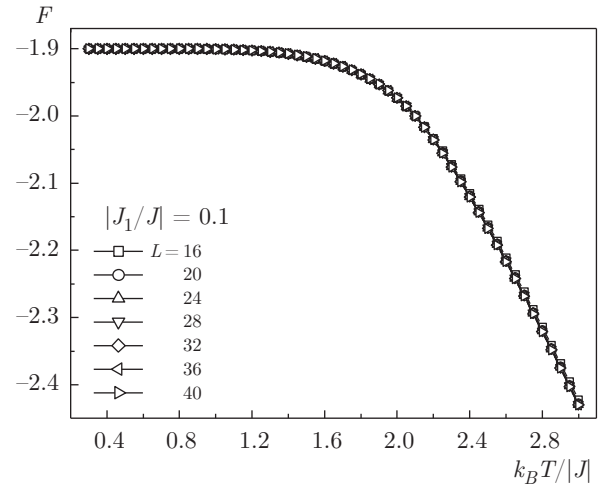


Рис. 6. Зависимость свободной энергии от температуры

ности распределения смещается от нуля в сторону отрицательных значений энергии.

По значениям плотности распределения состояний можно рассчитать один из важнейших параметров термодинамической системы — статическую сумму Z :

$$Z = \sum_{i=1}^Q G(U_i) e^{-U_i/k_B T}, \quad (3)$$

Q — общее число состояний с различной энергией ($Q = 2469-15909$), $G(U_i)$ — плотность распределения энергии U_i , T — температура, k_B — постоянная Больцмана.

По значениям Z можно легко рассчитать свободную энергию системы:

$$F = -T \ln(Z). \quad (4)$$

Рисунок 6 демонстрирует, что зависимость свободной энергии от температуры имеет вид непрерывно убывающей кривой.

Остальные термодинамические параметры вычисляются путем усреднения по всем состояниям с помощью формулы

$$A(T) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^Q \frac{A_i}{k_B T} G(U_i) e^{-U_i/k_B T}, \quad (5)$$

где A_i — термодинамический параметр (внутренняя энергия — E или параметр порядка — M).

Для получения температурной зависимости внутренней энергии в качестве параметра A_i в (5) используем значения U_i . Полученные таким

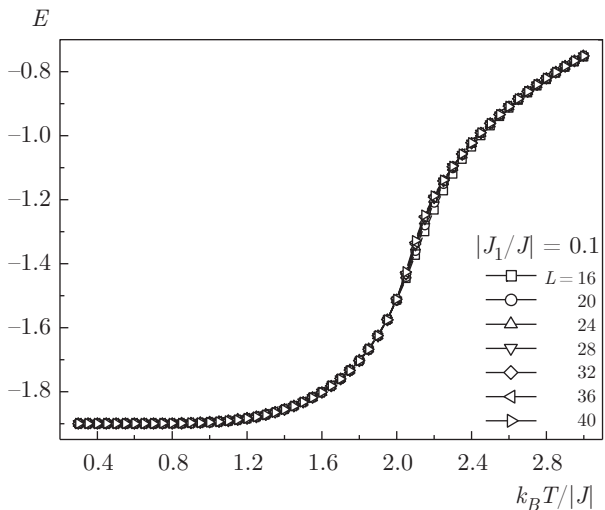


Рис. 7. Зависимость внутренней энергии от температуры ($|J_1/J| = 0.1$)

образом зависимости представлены на рис. 7. Эти зависимости имеют вид непрерывно возрастающих до нуля кривых без скачков и разрывов.

По значениям E и F получаем энтропию S (рис. 8):

$$S = \frac{1}{T}(E - F). \quad (6)$$

Как видно на рис. 8, с повышением температуры энтропия растет, стремясь к значению $\ln 2$ характерному для модели Изинга.

Заметим, что точки на графиках температурных зависимостей внутренней энергии, свободной энергии и энтропии, полученные для систем с различными линейными размерами, не зависят от величины L

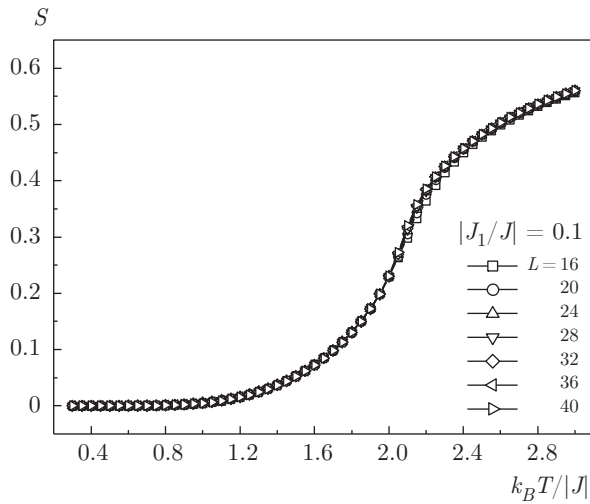


Рис. 8. Зависимость энтропии от температуры

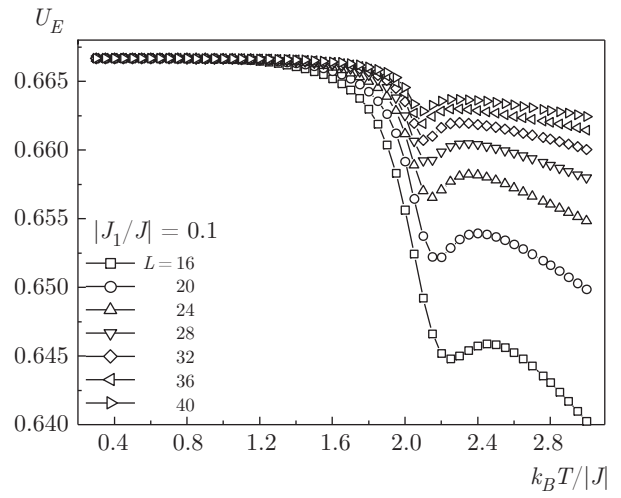


Рис. 10. Температурная зависимость кумулянтов Биндера U_E

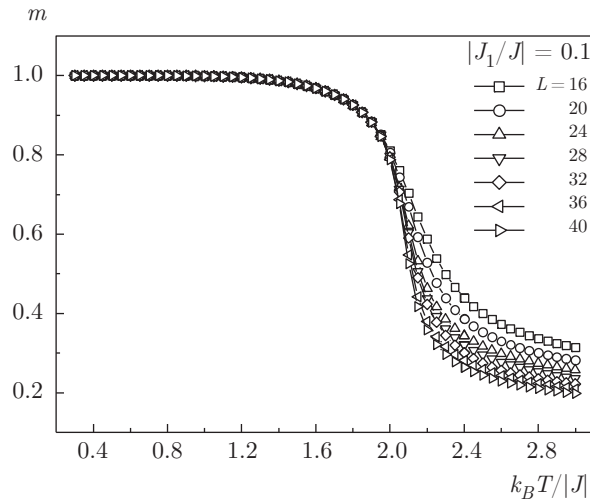


Рис. 9. Температурные зависимости намагниченности

и практически ложатся на одну кривую. Это обстоятельство может служить хорошим доказательством того, что полученные нами результаты рассчитаны с достаточно большой точностью. Средняя ошибка наших результатов не превышает 1%.

Заменяя A_i в (5) на значения $M(U_i)$, рассчитанные по формуле (2), получаем кривые температурной зависимости намагниченности m (рис. 9).

Эта зависимость имеет характерный для фазового перехода второго рода монотонный спад вблизи критической температуры. Также можно отметить «высокотемпературные хвосты», характерные для вычислений Монте-Карло и связанные с ограниченностью системы. Указанные хвосты исчезают с увеличением линейных размеров системы.

Для определения типа фазового перехода и точного определения критической температуры применялся метод кумулянтов Биндера четвертого порядка [8]. Известно, что величины, определяемые по формулам

$$U_m = 1 - \langle E^4 \rangle / 3 \langle E^2 \rangle^2, \quad (7)$$

$$U_E = 1 - \langle m^4 \rangle / 3 \langle m^2 \rangle^2, \quad (8)$$

для переходов первого рода стремятся к некоторому нетривиальному значению, а для переходов второго рода имеют общую точку пересечения и температура, при которой эти зависимости пересекаются, является температурой фазового перехода второго рода [8].

Представленные на рис. 10 и 11 температурные зависимости кумулянтов Биндера демонстрируют характерное для фазового перехода второго рода поведение в точке $k_B T_c / |J| = 2.07$.

Для подтверждения рода фазового перехода также можно использовать метод гистограммного анализа.

В этом методе рассчитываются вероятности состояний системы при температуре фазового перехода с помощью формулы [11]

$$p(E, m) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M G(U_i) \exp(U_i / k_B T). \quad (9)$$

На рис. 12 показаны гистограммы, рассчитанные при $T = 2.07$ и $|J_1/J| = 0.1$ для систем с линейными размерами $L = 32, 36, 40$. Как видно на этом рисунке, гистограммы распределения вероятности состояний имеют один максимум. Такая зависимость

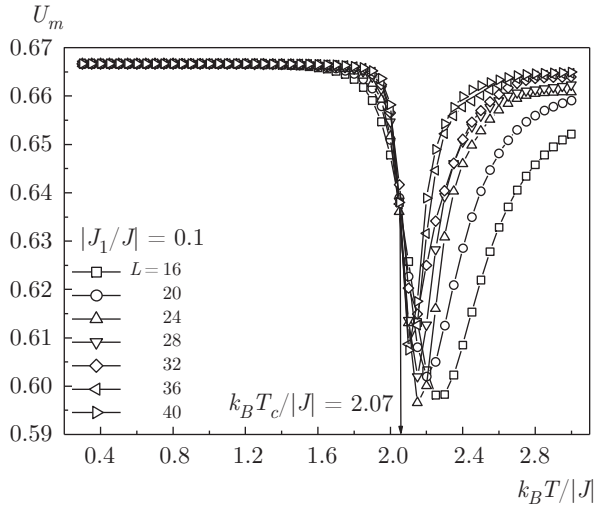


Рис. 11. Температурная зависимость кумулянтов Биндера U_m

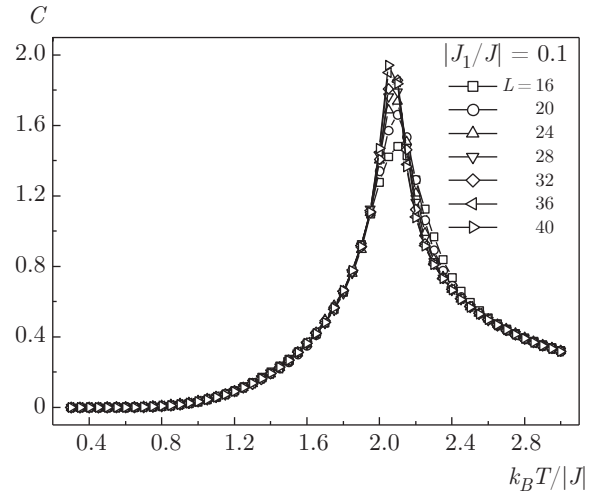


Рис. 13. Зависимость теплоемкости от температуры

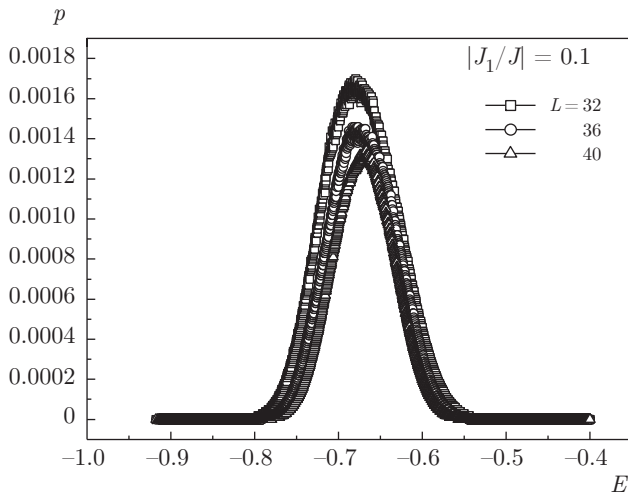


Рис. 12. Гистограмма распределения энергии

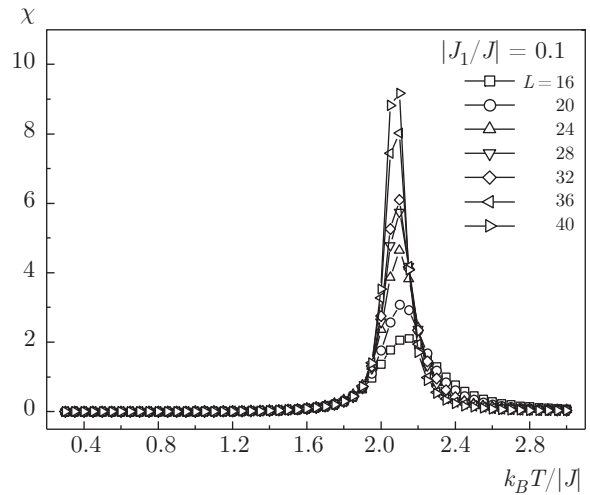


Рис. 14. Температурная зависимость восприимчивости

$p(E, m)$ свидетельствует о том, что переход, наблюдаемый в системе при рассматриваемых значениях $|J_1/J|$, является фазовым переходом второго рода.

Значения внутренней энергии и намагниченности позволяют рассчитать теплоемкость

$$C = (NK^2) (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (10)$$

и восприимчивость

$$\chi = (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2), \quad (11)$$

где $K = |J|/k_B T$.

Графики, представленные на рис. 13 и 14, показывают, что температурные зависимости теплоемкости и восприимчивости имеют хорошо выраженные

максимумы, которые в пределах погрешности приходятся на одно и то же значение температуры. Это также подтверждает то, что в анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями при $|J_1/J| = 0.1$ происходит фазовый переход второго рода из ферромагнитного состояния в парамагнитное. Заметим, что в качественном плане аналогичная картина имеет место и при $|J_1/J| = 0.2$.

Имея значение критической температуры, можно вычислить критические индексы намагниченности, восприимчивости, радиуса корреляции и теплоемкости. Для этого воспользуемся теорией конечно-размерного скейлинга. Согласно этой теории [12–15], при $T = T_c$ и достаточно больших L

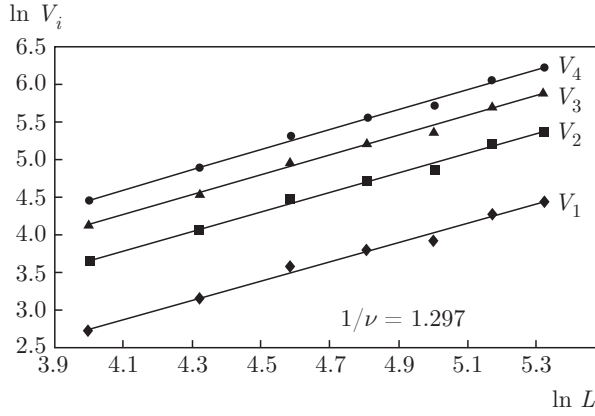


Рис. 15. Логарифмические зависимости параметров V_i от линейных размеров системы при $|J_1/J| = 0.1$

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

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

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

$$C_{max}(L) = C_{max}(L = \infty) - aL^{\alpha/\nu}, \quad (15)$$

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

$$V_i = \frac{\langle m^i E \rangle}{\langle m^i \rangle} - \langle E \rangle, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

Значения критических индексов получаем методом наименьших квадратов, аппроксимируя формулами (12)–(15) значения термодинамических параметров при $T = T_c$. Для этого строились графики зависимости натуральных логарифмов соответствующих величин от $\ln L$ и проводился линейный регрессионный анализ.

Представленные на рис. 15–18 графики показывают, что все точки в пределах погрешности хорошо ложатся на прямые линии. Величина достоверности аппроксимации $R^2 > 0.97$. Тангенсы углов наклона прямых на рис. 14–17 определяют значения β/ν , γ/ν , α/ν и $1/\nu$.

Полученные значения критических параметров представлены в таблице. По данным этой таблицы видно, что температура фазового перехода и критический индекс намагниченности уменьшаются с увеличением интенсивности конкурирующего взаимодействия. А индексы теплоемкости восприимчивости и радиуса корреляции, наоборот, увеличиваются. Такое поведение можно объяснить тем, что добавление небольшой конкуренции к стандартной модели Изинга приводит к потере устойчивости системы и усилению таких ее свойств, как восприим-

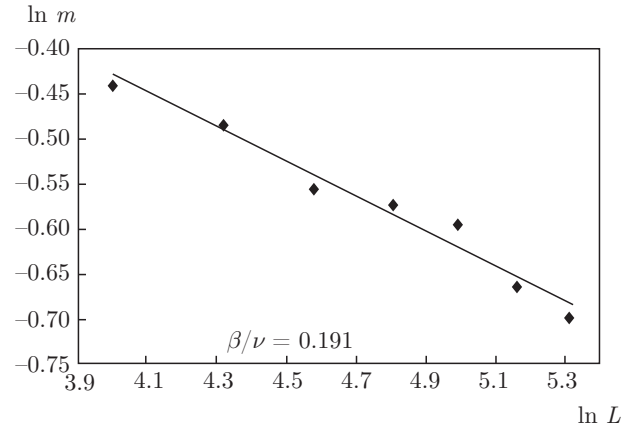


Рис. 16. Логарифмическая зависимость параметра порядка от линейных размеров при $|J_1/J| = 0.1$

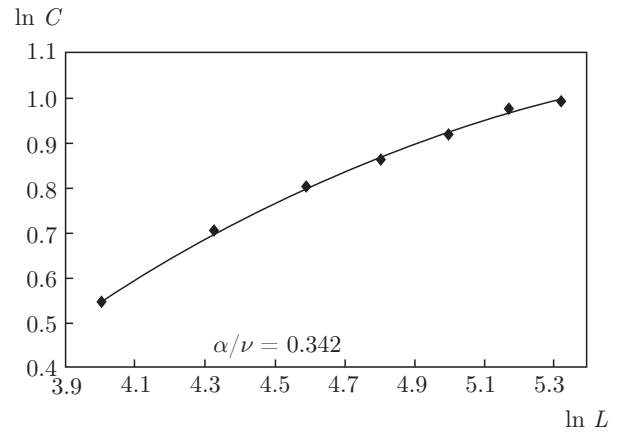


Рис. 17. Логарифмическая зависимость теплоемкости от линейных размеров системы ($|J_1/J| = 0.1$)

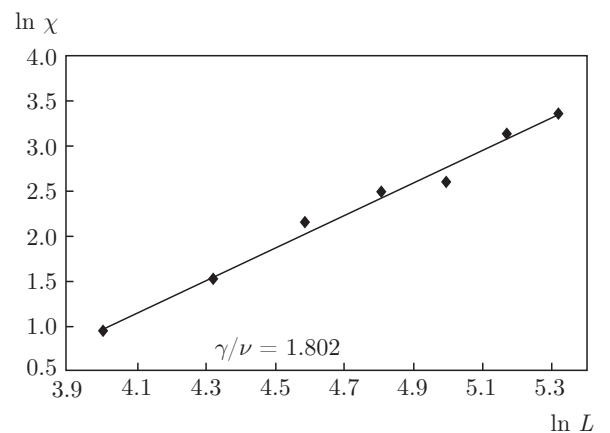


Рис. 18. Логарифмическая зависимость восприимчивости от линейных размеров ($|J_1/J| = 0.1$)

Таблица

$ J_1/J $	T_c	$1/\nu$	β/ν	α/ν	γ/ν	ν	β	α	γ	$\alpha + 2\beta + \gamma$
0.1	2.07	1.297	0.191	0.342	1.802	0.771(3)	0.147(2)	0.264(3)	1.389 (7)	1.947
0.2	1.833	1.286	0.185	0.357	1.827	0.778(3)	0.144(2)	0.278(3)	1.421(7)	1.987
Изинг $d = 2$						1	0.125	0	1.75	2

чивость к внешним воздействиям и появление новых состояний, которые не могли реализоваться в исходной модели Изинга.

Сравнивая полученные значения критических индексов со значениями для классической модели Изинга, можно заметить, что критическое поведение двумерной ANNNI-модели не может быть описано в рамках изинговского класса универсальности критического поведения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье приведены результаты исследования двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями на квадратной решетке методами Монте-Карло на основе алгоритма Ванга–Ландау для значений $|J_1/J| = 0.1$ и $|J_1/J| = 0.2$ при линейных размерах системы $L = 16-40$. Получены графики распределения плотности состояний и вычислены значения параметров порядка, соответствующие различным значениям энергий. Установлено, что для указанных значений $|J_1/J|$ основным состоянием двумерной ANNNI-модели является двукратно вырожденное ферромагнитное состояние. С помощью метода кумулянтов Биндера и гистограммного анализа данных показано, что при значениях $|J_1/J| = 0.1$ и $|J_1/J| = 0.2$ в рассматриваемой модели происходит фазовый переход второго рода из ферромагнитного состояния в парамагнитную фазу. Вычислены значения критических температур. Получены графики температурных зависимостей термодинамических параметров. С использованием теории конечно-размерного скейлинга вычислены значения основных критических индексов. Показано, что критическое поведение двумерной анизотропной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями отличается от двумерного изинговского класса универсальности.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Овчинников, И. И. Украинский, Г. Ф. Квенцель, УФН **108**, 81 (1972).
2. S. R. White, Phys. Rep. **301**, 187 (1998).
3. I. Moreira and R. Dovesi, Int. J. Quant. Chem. **99**, 805 (2004).
4. E. H. Lieb, *The Hubbard Model: Its Physics and Mathematical Physics*, ed. by D. Baeriswyl. Plenum Press, New York (1995), NATO ASI Series B: Physics Vol. 343, p. 1.
5. D. J. Klein, Chem. Phys. **77**, 3098 (1982).
6. R. J. Elliott, Phys. Rev. **124**, 346 (1961).
7. Ю. А. Изюмов, В. Н. Сыромятников, *Фазовые переходы и симметрия кристаллов*, Наука, Москва (1984).
8. И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев, УФН **169**, 773 (1999).
9. B. Widom, J. Chem. Phys. **84**, 6943 (1986).
10. A. K. Murtazaev and J. G. Ibaev, Sol. St. Comm. **152**, 177 (2012).
11. F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
12. A. Mailhot, M. L. Plumer, and A. Caille, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
13. P. Peczak, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landay, Phys. Rev. B **43**, 6087 (1991).
14. D. Loison, Phys. Lett. A **257**, 83 (1999).
15. A. K. Murtazaev, I. K. Kamilov, and K. K. Aliev, J. Magn. Mater. **204**, 151 (1999).