

УДК 239.2

DOI: 10.21779/2542-0321- 2016-31-4-64-70

А.К. Муртазаев^{1,2}, М.К. Рамазанов¹, Я.К. Абуев¹, М.К. Бадиев¹, Д.Р. Курбанова¹

Модель Изинга на треугольной решетке с взаимодействиями следующих ближайших соседей

¹Институт физики Дагестанского научного центра РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

²Дагестанский государственный университет; Россия, 367001, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; m_zagir@mail.ru

Репличным методом Монте-Карло выполнены исследования критических свойств трехмерной фрустрированной модели Изинга на треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей. Используя теорию конечно-размерного скейлинга, рассчитаны статические критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ , намагниченности β , радиуса корреляции ν и индекс Фишера.

Ключевые слова: Монте-Карло, модель Изинга, фазовый переход, антиферромагнетик, фрустрация.

Исследование фазовых переходов (ФП) и критических свойств (КС) соединений, имеющих треугольную решетку, является актуальной задачей в физике конденсированного состояния. Такие соединения привлекают большое внимание исследователей из-за интересных для науки свойств. Спиновые системы, имеющие треугольную решетку, вследствие особой геометрии сильно фрустрированы. С понижением температуры процесс упорядочения в таких системах происходит гораздо медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Данное обстоятельство обусловлено тем, что в системах с меньшим координационным числом возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и локально вырожденные состояния.

Антиферромагнитная модель Изинга на треугольной решетке является относительно простой геометрически фрустрированной моделью, которая интенсивно исследуется несколько десятков лет [1, 2]. В этой модели, где взаимодействие ограничено ближайшими соседями, спиновое упорядочение сильно подавлено из-за эффектов фрустраций. В результате в данной системе ФП отсутствует при любой конечной температуре. Однако учет взаимодействий следующих ближайших соседей стабилизирует спиновое состояние, и система проявляет ФП подобно ферромагнитной XY-модели [3].

Вместе с тем ФП и КС в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев практически не исследованы. Учет взаимодействия следующих ближайших соседей в классической трехмерной модели Изинга сопровождается вырождением основного состояния и появлением различных фаз и ФП, а также может влиять на критическое поведение модели, в частности, появляются различные аномалии критических свойств [4, 5].

На сегодняшний день остаются спорными множество вопросов, связанных с ФП и КС этой модели. В связи с этим в данной работе нами предпринята попытка исследовать ФП и КС антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей внутри слоев.

Интерес к исследуемой модели обусловлен тем, что при учете антиферромагнитных взаимодействий ближайших соседей внутри слоев данная модель становится

фрустрированной. Многие физические свойства фрустрированных систем сильно зависят от величины взаимодействия вторых ближайших соседей. Поэтому исследование этой модели на основе современных методов и идей позволит получить ответ на ряд вопросов, связанных с критическим поведением, с характером и природой ФП слоистых фрустрированных спиновых систем.

Антиферромагнитная модель Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий вторых ближайших соседей описывается гамильтонианом [6]:

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

где $S_i = \pm 1$ – изинговский спин, $J_1 < 0$ и $J_2 > 0$ – константы обменного взаимодействия. Решетка состоит из двумерных треугольных слоев, сложенных по ортогональной оси. Первый член в формуле (1) характеризует антиферромагнитное взаимодействие всех ближайших соседей, которое берется одинаковой как внутри слоёв, так и между слоями. Второй член характеризует ферромагнитное взаимодействие следующих за ближайшими соседей, находящихся в том же слое. $K = J_2/J_1$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. В данной работе рассматриваются два случая, когда $k=0,0$ и $k=1,0$.

Исследование критических свойств фрустрированных спиновых систем традиционными теоретическими, экспериментальными и численными методами сталкивается с рядом труднопреодолимых проблем. Это связано с тем, что для таких систем характерна проблема многочисленных долин локальных минимумов энергии. Строго и последовательно на основе микроскопических гамильтонианов такие системы могут быть изучены методами МК [7–10]. Методы МК позволяют исследовать термодинамические свойства спиновых систем практически любой сложности. Наиболее мощными и эффективными в исследовании ФП и КС в фрустрированных системах оказались репличные алгоритмы метода МК. Поэтому в данном исследовании был использован высокоэффективный репличный обменный алгоритм метода МК. Расчеты проводились для систем с периодическими граничными условиями и с линейными размерами $L_x L_x L = N$, $L = 30 \div 90$. Для вывода системы в состояние термодинамического равновесия отсекался участок длиной $\tau_0 = 4 \times 10^5$ МКшагов/спин, что в несколько раз больше длины неравновесного участка. Усреднение термодинамических величин проводилось вдоль марковской цепи длиной $\tau = 500 \tau_0$ МКшагов/спин.

Для наблюдения за температурным ходом теплоемкости и восприимчивости использованы выражения [8]:

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

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

где $K = |J_1|/k_B T$, N – число частиц, U – внутренняя энергия, m – параметр порядка.

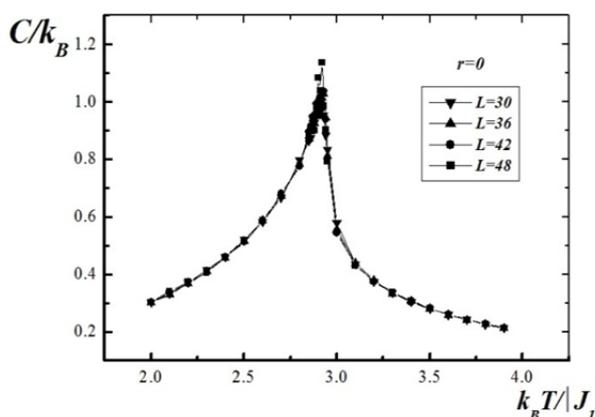


Рис. 1. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r=0.0$

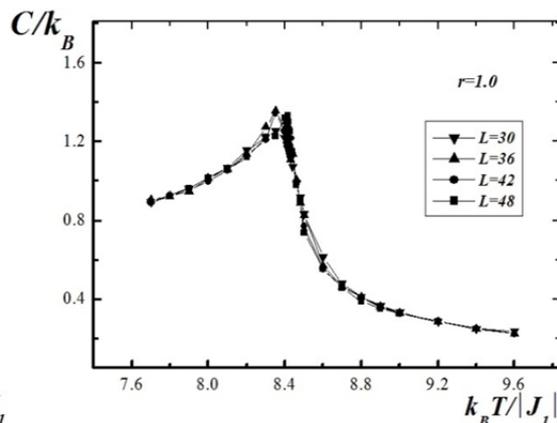


Рис. 2. Зависимость теплоемкости C/k_B от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r=1.0$.

Параметр порядка системы m вычислялся с использованием выражения

$$m = \frac{3}{N} \sqrt{\langle M_A^2 + M_B^2 + M_C^2 \rangle} / 3, \quad (4)$$

где M_A , M_B и M_C – намагниченности трех подрешеток.

Намагниченность подрешетки определялась по формуле:

$$\langle \vec{M}_r \rangle = \left\langle \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \right\rangle, \quad r = A, B, C. \quad (5)$$

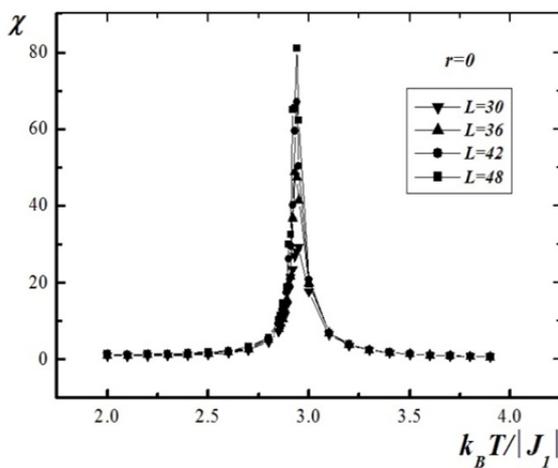


Рис.3. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r = 0.0$

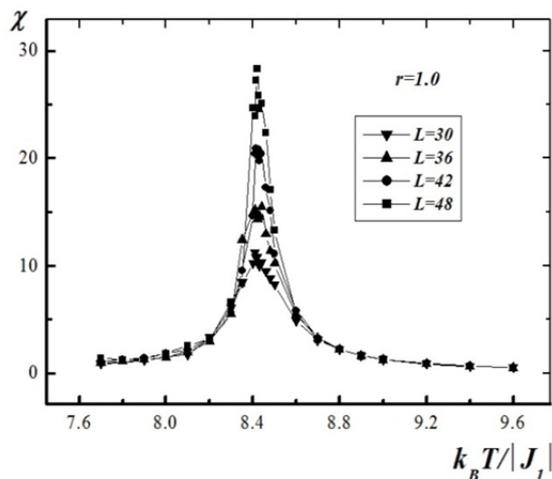


Рис. 4. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r=1.0$

На рисунках 3 и 4 приведены графики зависимости восприимчивости χ от температуры для $r = 0.0$ и $r = 1.0$. На этих графиках мы наблюдаем аналогичную картину. В области критической температуры наблюдаем ярко выраженный максимум и смещение этого максимума в область высоких температур с увеличением значения величины r .

Для определения критической температуры T_N , мы использовали метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка, который имеет вид [11]

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (6)$$

Согласно теории конечно-размерного скейлинга (КРС), точка пересечения всех кривых $U_L(T)$ является критической точкой. Выражение (6) позволяет определить критическую температуру T_N с большой точностью. Следует отметить, что применение метода кумулянтов Биндера позволяет также хорошо тестировать тип ФП в системе. В случае ФП второго рода кривые температурной зависимости кумулянтов Биндера U_L имеют четко выраженную точку пересечения. На рис. 5 представлены характерные зависимости U_L от температуры для разных значений L для $r = 0.0$

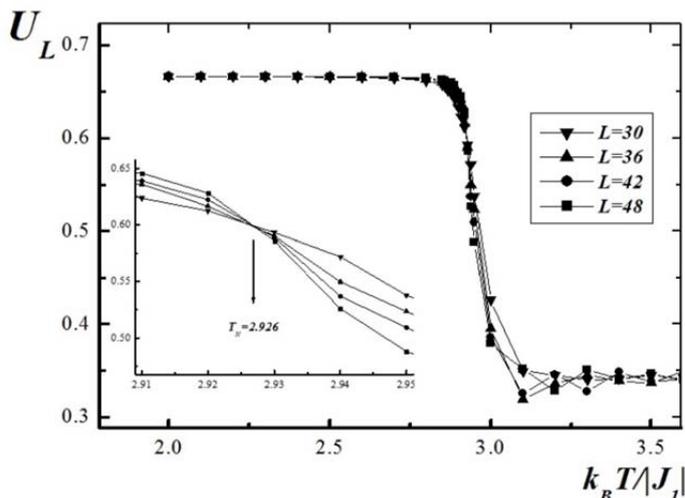


Рис. 5. Зависимость кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J_1|$ для $r = 0.0$.

Эта зависимость свидетельствует о ФП второго рода.

Для расчета статических критических индексов теплоемкости α , восприимчивости χ , параметра порядка β , радиуса корреляции ν и индекса Фишера η применялись соотношения теории КРС [12].

Из теории КРС следует, что в системе с размерами $L \times L \times L$ при $T = T_N$ и достаточно больших L выполняются следующие выражения:

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, \quad (7)$$

$$\chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad (8)$$

$$V_n \sim L^{\nu} g_{V_n}, \quad (9)$$

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

$$V_n = \frac{\langle m^n E \rangle}{\langle m^n \rangle} - \langle E \rangle, \quad (n = 1, 2, 3, 4). \quad (10)$$

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

Определения критического индекса теплоемкости α и индекса Фишера η более подробно приведены в работе [7].

Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Из графика видно, что в критической области наблюдается четко выраженная точка пересечения $T_N = 2.926$ (здесь и далее температура дана в

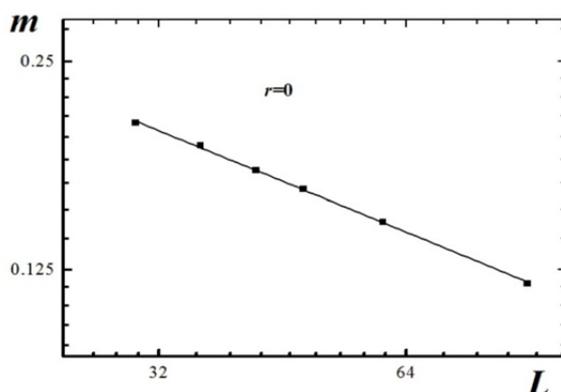


Рис.6. Зависимость параметра порядка m от линейных размеров решетки L при $T=T_N$ для $r=0.0$

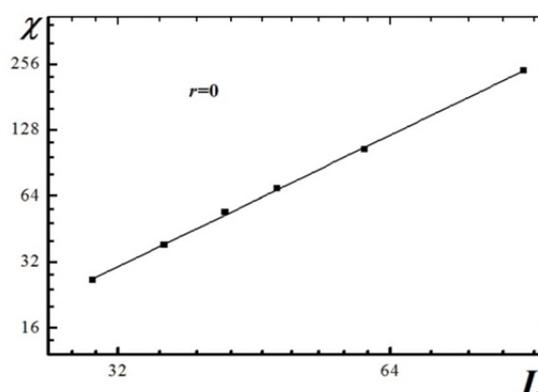


Рис.7. Зависимость параметра порядка χ от линейных размеров решетки L при $T=T_N$ для $r=0.8$

На рис. 6, 7 в двойном логарифмическом масштабе представлена характерная зависимость магнитного параметра порядка m и восприимчивости χ от линейных размеров решетки L при $r=0.0$. Отметим, что наблюдается линейная зависимость, все точки в пределах погрешности ложатся на прямую. Зависимости построены в соответствии с методом наименьших квадратов. Угол наклона этой прямой определяет значения β/ν и γ/ν . Используя вычисленные аналогичным образом значения ν , определяем критические индексы теплоемкости α , восприимчивости γ и параметра порядка β .

Все значения статических критических индексов, полученные нами, представлены в таблице.

Как видно из таблицы? все значения критических индексов, рассчитанные нами

Критический параметр	Данные этой работы		[13]	[14]	[15]	[16]
	$k = 0.0$	$k = 1.0$				
α	-0.040(3)	0.142(10)	-0.01(2)	-0.05(3)	0.012(30)	-0.012
β	0.346(4)	0.371(4)	0.345(12)	0.311(4)	0.341(4)	0.348
γ	1.313(5)	1.166(5)	1.316(9)	1.43(3)	1.31(3)	1.315
ν	0.668(5)	0.651(5)	0.669(7)	0.685(3)	0.662(9)	0.671

для значения $k = 0.0$, в пределах погрешности совпадают со значениями критических индексов трехмерной XY модели [13], что свидетельствует о принадлежности данной модели к XY классу универсальности критического поведения. Аналогичный результат был получен для данной модели в работах [14–16]. Значения критических индексов, рассчитанные нами при $k = 0.0$, хорошо согласуются с данными других авторов [14–16]. Что касается результатов, полученных нами для $k = 1.0$, то они сильно отличаются от данных, полученных для этой модели при соотношении $k = 0.0$. Можно предположить, что учет взаимодействий вторых ближайших соседей для трехмерной модели Изинга на слоистой треугольной решетке приводит к смене класса универсальности критического поведения.

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

Литература

1. *Wannier G.H.* Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net // *Phys. Rev B.* – 1973. – V. 7. – P. 5017.
2. *Newell G.F.* Crystal Statistics of a Two-Dimensional Triangular Ising Lattice // *Phys. Rev.* – 1950. – V. 79. – P. 876.
3. *Hose J., Kadanoff K., Kirkpatrick S. and Nelson D.R.* Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model. // *Phys. Rev B.* – 1977. – V. 16. – P. 1217.
4. *Landau D.P. and Binder K.* Monte Carlo Simulations in Statistical Physics // Cambridge University Press. Cambridge. – 2000.
5. *Diep H.T., Plumer M.L., Mailhot A., Ducharme R. and Caille A.* Histogram Monte Carlo study of the next-nearest-neighbor Ising antiferromagnet on a stacked triangular lattice // *Phys. Rev B.* – 1993. – V. 47. – P. 14312.
6. *Zukovic M., Mizisin L. and Bobak A.* ACTA Phys. Polonica A. – 2014. – V. 40. – P. 126.
7. *Муртазаев А.К., Рамазанов М.К.* Фазовые переходы и критические свойства в антиферромагнитной слоистой модели Изинга с учетом внутрислойных взаимодействий вторых ближайших соседей // Письма в ЖЭТФ. – 2015. – Т. 101, № 10. – С. 793.
8. *Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К.* Фазовые переходы и критические свойства фрустрированной модели Гейзенберга на слоистой треугольной решетке с взаимодействиями следующих за ближайшими соседей // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 142. – С. 338.
9. *Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiev M.K.* Critical properties of the two-dimensional Ising model on a square lattice with competing interactions // *Physica B: Condensed Matter.* – 2015. – V. 476. – P. 1.
10. *Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Бадиев М.К.* Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей. // ЖЭТФ. – 2013. – Т. 144, № 12. – С. 1239.
11. *Биндер К., Хеерман Д.В.* Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике // М.: Наука, – 1995.
12. *Peczak P., Ferrenberg A.M. and Landau D.P.* High-accuracy Monte Carlo study of the three-dimensional classical Heisenberg ferromagnet // *Phys. Rev B.* – 1991. – V. 43. – P. 6087.
13. *Collins M.F.* Magnetic critical scattering // Oxford University Press. Oxford. – 1989.
14. *Bunker A., Gaulin B.D. and Kallin C.* Multiple-histogram Monte Carlo study of the Ising antiferromagnet on a stacked triangular lattice // *Phys. Rev B.* – 1995. – V. 52. – P. 1415.
15. *Plumer M.L. and Mailhot A.* Comment on “Multiple-histogram Monte Carlo study of the Ising antiferromagnet on a stacked triangular lattice” // *Phys. Rev B.* – 1995. – V. 52. – P. 1411.
16. *Le Guillou J.C., Zinn-Justin J.* Accurate critical exponents from the expansion. // *Journal de Physique Lettres.* – 1985. – V. 46. № 4. – P. 137.

Поступила в редакцию 14 ноября 2016 г.

UDC 239.2

DOI: 10.21779/2542-0321-2016-31-4-64-70

Ising model on a triangular lattice with next-nearest-neighbor interaction

A.K. Murtazayev^{1, 2}, M.K. Ramazanov¹, M.K. Badiyev¹, Ya.K. Abuyev¹, D.R. Kurbanova

¹Institute of Physics DSC RAS; Russia, 367003, Makhachkala, Yaragsky st., 94;

*²Dagestan State University; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiyev st., 43a;
m_zagir@mail.ru*

The critical properties of three-dimensional frustrated Ising model on a triangular lattice in view of interactions of the next-nearest neighbours are investigated by the replica Monte Carlo method. The static critical exponents of heat capacity α , susceptibility γ , magnetization β , correlation length ν and the Fischer exponent are calculated by means of the finite-size scaling theory.

Keywords: *Monte Carlo, Ising model, phase transition, antiferromagnetic frustration.*

Received 14 November, 2016