

УДК 239.2

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-2-45-50

А.К. Муртазаев^{1, 2, 3}, М.К. Рамазанов^{1, 2}, М.К. Бадиев¹, К.Ш. Муртазаев²

Исследование фазовых переходов в трехмерной модели Изинга на треугольной решетке

¹ Институт физики ДНЦ РАН; Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94;

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

³ Отдел математики и информатики ДНЦ РАН; Россия, 367025, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 45; m_zagir@mail.ru

На основе репличного алгоритма методом Монте-Карло выполнены исследования фазовых переходов и критических свойств антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом внутрислойных взаимодействий следующих ближайших соседей. Исследования проведены для отношений обменных взаимодействий ближайших J_1 и следующих ближайших J_2 соседей в интервале $r = 0.0 \div 1.0$, $r = |J_2/J_1|$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. Рассмотрены системы с линейными размерами $L \times L \times L = N$, $L = 30 \div 90$. Построены графики зависимости теплоемкости, восприимчивости и параметра порядка в широком интервале температур. С использованием метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определены критические температуры для всех значений r . На основе гистограммного метода и метода кумулянтов Биндера проведен анализ характера фазовых переходов. Установлено, что в данной модели переход из неупорядоченной фазы в парамагнитную реализуется как фазовый переход второго рода.

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

Фазовые переходы и критические явления в магнитных спиновых системах в течение многих лет были основными объектами исследования в статистической физике. Благодаря обширным теоретическим и экспериментальным исследованиям мы теперь довольно хорошо понимаем природу фазовых переходов стандартных ферромагнетиков и антиферромагнетиков.

Однако поведение фазовых переходов и критических явлений в фрустрированных спиновых системах оказалось совершенно отличным от критического поведения систем без фрустраций. Это связано с тем, что наличие фрустраций в системе очень часто сопровождается сильным вырождением основного состояния системы. Это приводит к возникновению в фрустрированных магнетиках совершенно различных фаз и фазовых переходов [1].

Модель Изинга представляет собой одну из простейших, но вместе с тем наиболее часто изучаемых моделей в статистической физике. Данная модель обеспечивает множество возможных вариантов поведения и служит примером для различных приближенных или численных методов [2, 3].

Чистая модель Изинга является точно решаемой, и многие ее термодинамические и критические свойства известны и не представляют интереса для дальнейших иссле-

дований. Фрустрированная модель Изинга сильно отличается от соответствующей нефрустрированной модели. Поэтому в последние годы продолжаются интенсивные исследования тепловых, магнитных и критических свойств фрустрированной модели Изинга на разных типах решеток [3–4].

Магнитные системы, состоящие из треугольной кристаллической решетки, вследствие особой геометрии структуры сильно фрустрированы. При низких температурах упорядочение в системе происходит медленнее по сравнению даже с обычными фрустрированными системами. Следовательно, в таких магнитных системах возможны не только состояния с нетривиальным глобальным вырождением, но и частично вырожденные состояния [6].

Модель Изинга на треугольной решетке является одной из наиболее интенсивно исследуемых в последние годы [7–10].

Поскольку модель Изинга играет фундаментальную роль в статистической механике, необходимо провести комплексные исследования этой модели с учетом конкурирующих обменных взаимодействий.

В данной работе мы исследуем термодинамические и критические свойства антиферромагнитной модели Изинга на треугольной решетке с учетом конкурирующих взаимодействий вторых ближайших соседей. Эти системы интересны как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения, поскольку некоторые спорные вопросы, связанные с природой фазовых переходов и принадлежности к тому или иному классу универсальности, пока не решены. Для получения ответов на ряд нерешенных вопросов в нашей работе мы предпримем попытку исследовать фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей.

Гамильтониан трехмерной модели Изинга на треугольной решетке может быть приведен в виде [11]:

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

где J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей. $r = J_2/J_1$ – величина взаимодействия вторых ближайших соседей. В нашей работе проводятся исследования для интервала значений $r = 0.0 \div 1.0$.

Исследование термодинамических, магнитных и критических свойств спиновых систем при наличии фрустраций на разных типах кристаллической решетки проведены различными теоретическими и экспериментальными методами. Все же такого рода методы исследования не всегда проявляют полную картину природы фазовых переходов фрустрированных спиновых систем. Это обстоятельство вынудило ученых прибегнуть к методам численного эксперимента. Практика показала, что методы численного эксперимента достаточно хорошо справляются и дают весьма точные и оригинальные результаты при исследовании фрустрированных систем.

Классический метод Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса сталкивается с трудностями при больших размерах решетки из-за критического замедления и быстрого увеличения времени корреляции. По этим причинам трудно получить значимые результаты при больших размерах решетки. Использование специально разработанных репличных алгоритмов метода Монте-Карло устраняет все эти недостатки и позволяет с большой степенью точности получить хорошие результаты [12–15].

Параметр порядка системы m вычислялся с использованием формулы [10]:

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

где M_A , M_B и M_C – намагниченности трех подрешеток.

Теплоемкости и восприимчивости вычислены с использованием выражений [16]:

$$C = (NK^2) (\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2), \quad (3)$$

$$\chi = \begin{cases} (NK) (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2), & T < T_N \\ (NK) \langle m^2 \rangle, & T \geq T_N \end{cases}, \quad (4)$$

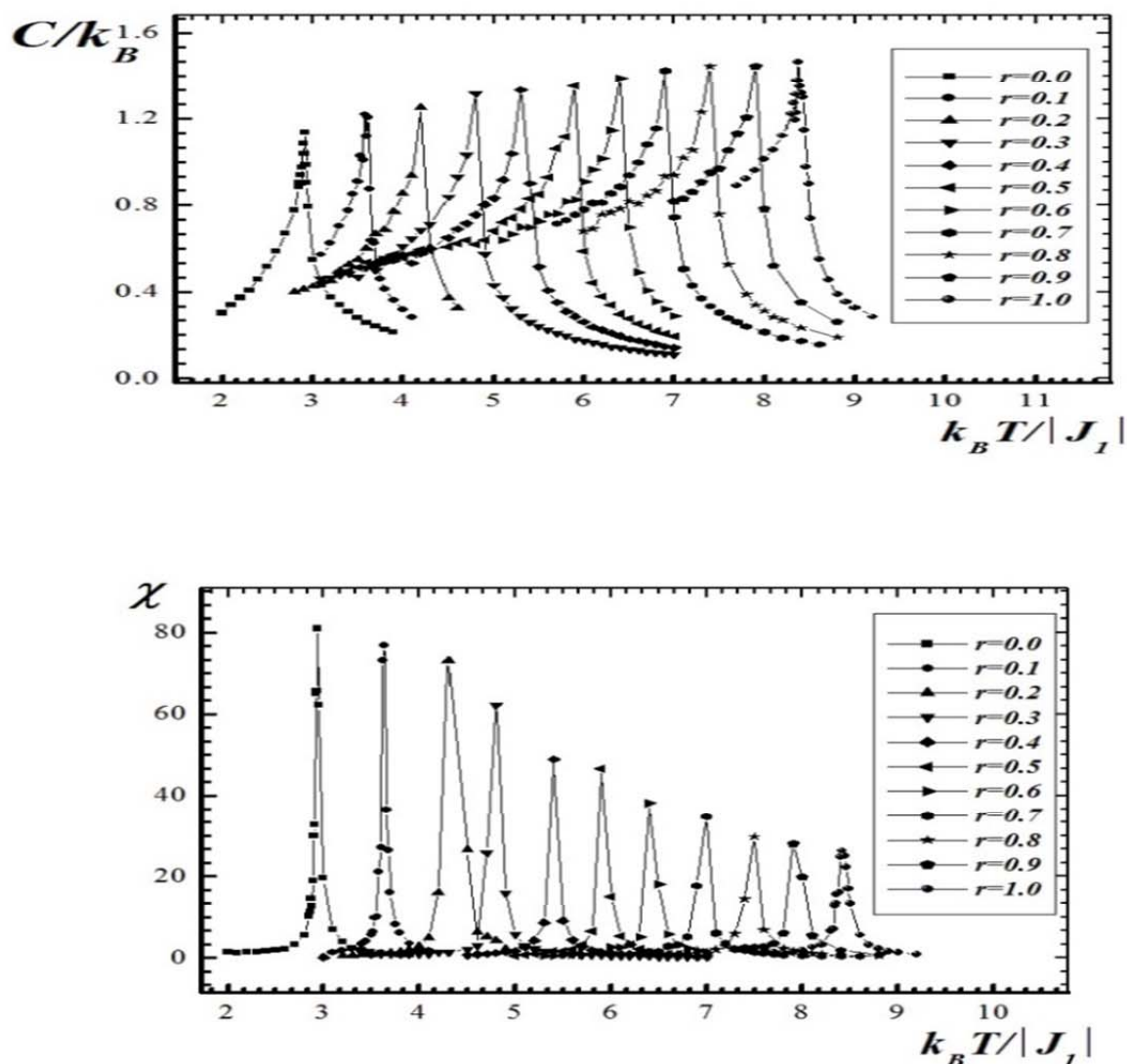


Рис. 2. Зависимость восприимчивости χ от температуры $k_B T/|J_I|$ для различных r

На рис. 1 и 2 представлены зависимости теплоемкости и восприимчивости от температуры в интервале $r = 0.0 \div 1.0$. Отметим, что на графиках теплоемкости и вос-

приемчивости для всех r области критической температуры наблюдаются хорошо выраженные максимумы. Графики демонстрируют, что увеличение значения r в интервале $r = 0.0 \div 1.0$ приводит к смещению графиков в сторону высоких температур.

Чтобы вычислить критическую температуру T_N , мы использовали метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка по намагненности, которая вычисляется с помощью следующей формулы [16]:

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2}. \quad (5)$$

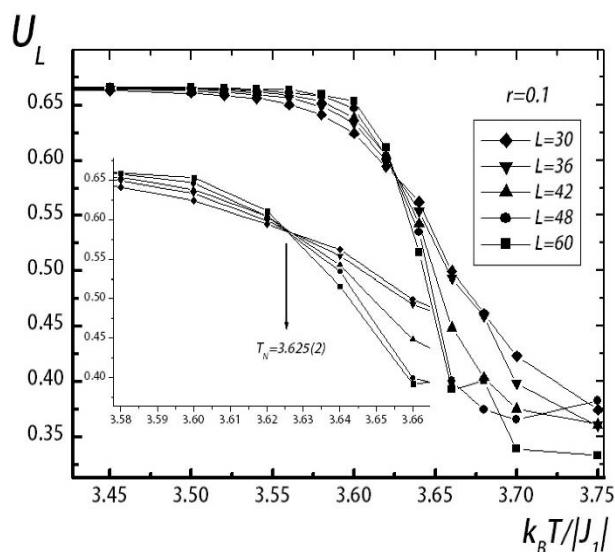


Рис. 3. Зависимости кумулянта Биндера U_L от температуры $k_B T / |J|$ для $r = 0.1$

Данная формула позволяет определить критическую температуру T_N с высокой степенью точности. Как нам известно из теории, если в системе происходит фазовый переход второго рода, кривые зависимости кумулянтов Биндера от температуры имеют явно выраженную точку пересечения.

На рис. 3 представлены характерные зависимости U_L от температуры при $r = 0.1$ для разных линейных размеров. Этот рисунок демонстрирует точность определения критической температуры. Из графика видно, что в критической области все линии пересекаются в одной точке (температура дана в единицах $|J|/k_B$). Точка пересечения всех кривых на графике является

критической точкой.

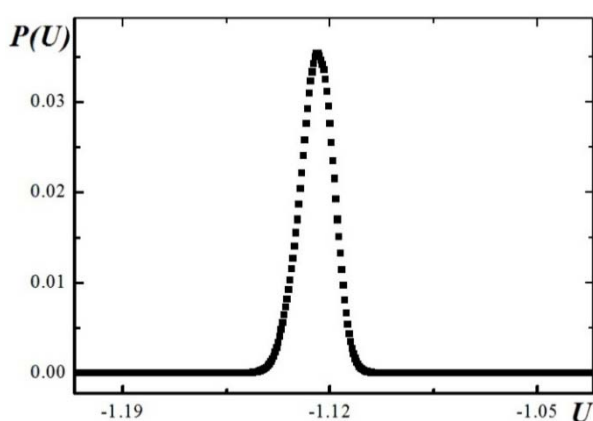


Рис. 4. Гистограмма распределения энергии при $r = 0.4$

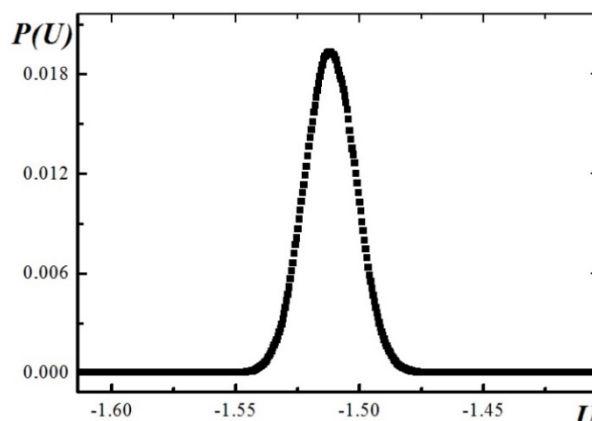


Рис. 5. Гистограмма распределения энергии при $r = 0.9$

На рис. 4 и 5 приведены гистограммы распределения энергии для случаев $r = 0.4$ и $r = 0.9$. Такие же гистограммы были построены во всем интервале значений r . Из по-

лученных результатов и приведенных рисунков следует, что во всем рассмотренном интервале r наблюдаются фазовые переходы второго рода. Этот факт подтверждает и метод кумулянтов Биндера U_L четвертого порядка.

Исследовались фазовые переходы в трехмерной антиферромагнитной модели Изинга на слоистой треугольной решетке с учетом взаимодействий следующих ближайших соседей внутри слоев с использованием специально разработанного репличного алгоритма метода Монте-Карло. С помощью гистограммного анализа данных и метода кумулянтов Биндера четвертого порядка определен характер фазовых переходов. Установлено, что в исследуемой нами модели происходит фазовый переход второго рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-02-00214-а, № 18-32-00391 мол-а и фондом Гаджи Махачева по поддержке науки и образования.

Литература

1. Kawamura H.J. Universality of phase transitions of frustrated antiferromagnets // Phys.: Condens. Matter. – 1998. – V. 10. – P. 4707.
2. Lenz W. // Z. Phys. – 1920. – V. 21. – P. 613.
3. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus // Z. Phys. – 1925. – V. 31. – P. 253.
4. Gekht R.S. Magnetic states and phase transitions in frustrated triangular-lattice antiferromagnets // Usp. Fiz. Nauk. – 1989. – V. 32. – P. 871.
5. Boubcheur E.H., Diep H.T. Critical behavior of the two-dimensional fully frustrated XY model // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 58. – P. 5163.
6. Chandra P., Coleman P., Ritchey I. // J. de Phys. – 1993. – V. 33. – P. 591.
7. Blankschtein D.M., Berker A.N. Orderings of a stacked frustrated triangular system in three dimensions // Phys. Rev. B. – 1984. – V. 29. – P. 5250.
8. Stephenson J. Ising-Model Spin Correlations on the Triangular Lattice. III. Isotropic Antiferromagnetic Lattice // J. Math. Phys. – 1970. – V. 11. – P. 413.
9. Yamada Y., Miyashita S., Horiguchi T., Kang M., and Nagai O. Spin-ordering of the antiferromagnetic Ising model with general spin S on a triangular lattice // J. Magn. Magn. Mater. – 1995. – V. 140. – P. 1749.
10. Landau D.P. Critical and multicritical behavior in a triangular-lattice-gas Ising model: Repulsive nearest-neighbor and attractive next-nearest-neighbor coupling // Phys. Rev. B. – 1983. – V. 27. – P. 5604.
11. Zukovic M., Mizisin L., and Bobak A. Low-Temperature Properties of Ising Antiferromagnet on a Stacked Triangular Lattice // Phys. Polonica A. – 2014. – V. 40. – P. 126.
12. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А., Курбанова Д.Р. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // ЖЭТФ. – 2015. – Т. 147. – С. 127.
13. 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.

14. Murtazaev A.K., Ramazanov M.K., Badiyev 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.

15. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Кассан-Оглы Ф.А., Бадиев М.К. Фазовые переходы в антиферромагнитной модели Изинга на квадратной решетке с взаимодействиями вторых ближайших соседей // *ЖЭТФ*. – 2013. – Т. 144. – С. 1239.

16. Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. – М.: Наука, 1996.

Поступила в редакцию 15 февраля 2018 г.

UDC 239.2

DOI: 10.21779/2542-0321-2018-33-2-45-50

Phase transitions in the Ising model on a layered triangular lattice with next-nearest-neighbor interaction

A.K. Murtazayev^{1,2,3}, M.K. Ramazanov^{1,2}, M.K. Badiyev¹, K.Sh. Murtazayev²

¹ *Institute of Physics, Dagestan Scientific Center, Russian Academy of Sciences; Russia, 367003, Makhachkala, M. Yaragskiy st., 94;*

² *Dagestan State University; Russia, 367001, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a; Math and Information technology Department for Dagestan Scientific Center of Russian Academy of Sciences; Russia, 367025, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 45; m_zagir@mail.ru*

The given research studies some phase transitions and critical features of the antiferromagnetic Ising model on the layered triangular lattice with regard of intralayer interaction of the forthcoming next-nearest neighbor on the basis of Monte Carlo replica algorithm. Investigations were carried out for the ratios of exchange interactions of the nearest J_1 and the next nearest J_2 neighbors in the range $r = 0.0 \div 1.0$, $r = |J_2/J_1|$ – is the next-nearest neighbor interaction value. Systems with linear dimensions $L \times L \times L = N$, $L = 30 \div 90$ are considered. The graphs of the dependence of the heat capacity and the susceptibility on temperature are constructed. Using the fourth-order Binder cumulant method, critical temperatures are determined. The character of phase transitions is analyzed using the histogram technique and Binder cumulant method.

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

Received 15 February, 2018